

ОБНАРУЖЕНИЕ РАССЕЯНИЯ СВЕТА СВЯЗАННЫМИ СОСТОЯНИЯМИ ОПТИЧЕСКИХ ФОНОНОВ, ЛОКАЛИЗОВАННЫХ НА НЕЙТРАЛЬНЫХ ДОНОРНЫХ ЦЕНТРАХ С ВЫРОЖДЕННЫМ ОСНОВНЫМ СОСТОЯНИЕМ

Б.Х.Байрамов, Г.Ирмер, И.Монеке, В.В.Топоров

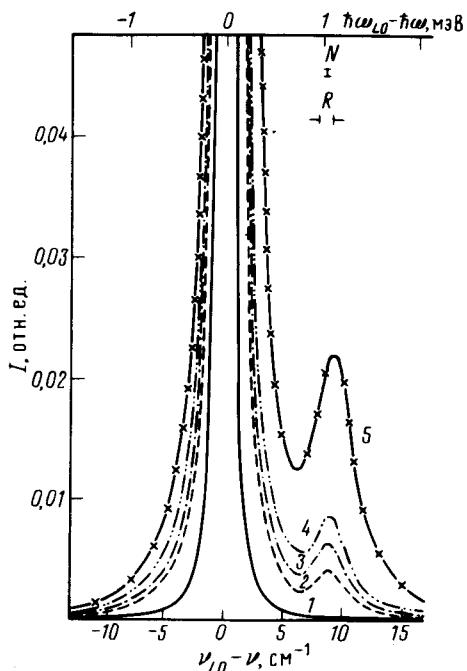
Сообщается о первом экспериментальном наблюдении связанных состояний оптических фононов, локализованных на нейтральных донорных центрах, в кристаллах с вырожденным основным состоянием, предсказанных ранее в рамках общей теории слабо-связанных электрон-фононных состояний для ян-теллеровских центров.

Новый тип пространственно локализованных связанных состояний оптического фонона вблизи примесного центра в полупроводниках, когда энергия перехода электрона из основного состояния в возбужденное близка к энергии продольного оптического фонона, был предсказан Коганом и Сурисом¹. Отвечающие таким связанным состояниям диэлектрические локальные моды активны в комбинационном рассеянии света и были обнаружены в спектрах *n*-GaP с невырожденным основным состоянием примесного центра^{2–4}. В рамках общей теории слабосвязанных электрон-фононных состояний Рашба предсказал возникновение диэлектрических мод для вырожденных электронных уровней ян-теллеровских центров с произвольной структурой электронного спектра⁵. В таких системах взаимодействие электронов с колебаниями, активными в эффекте Яна – Теллера, приводит к возникновению связанных состояний уже в низшем приближении теории, когда все возбужденные электронные состояния исключаются из рассмотрения⁶. Однако до сих пор такие связанные состояния оптических фононов для ян-теллеровских систем экспериментально обнаружить не удалось.

В данной работе сообщается о первом наблюдении связанных состояний продольных оптических фононов, локализованных на нейтральных донорных центрах с вырожденным основным состоянием, на примере кристаллов GaP : Si.

Нами исследовалось рассеяние света на монокристаллических образцах фосфида галлия, специально легированных кремнием, с n -типом проводимости и с разностной концентрацией $N_D - N_A$ от $1,6 \cdot 10^{17}$ до $7,1 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$. Спектры возбуждались различными длинами волн He – Ne- и Ar^+ -лазеров в геометрии рассеяния назад от плоскости (111).

Идентификация и контроль типа примесей в исследованных образцах (помимо химического, эмиссионного спектрального и нейтронно-активационного анализов, а также измерений температурной зависимости проводимости и коэффициента Холла) осуществлялись путем одновременной регистрации люминесценции донорно-акцепторных пар, электронного комбинационного рассеяния света, обусловленного переходами между примесными уровнями кремния в фосфиде галлия¹⁾, и комбинационного рассеяния света связанными фонон-плазмонными состояниями⁷.



Спектры комбинационного рассеяния света с участием $LO(\Gamma)$ -фононов в нелегированном образце GaP с $n < 10^{15} \text{ см}^{-3}$ – спектр 1 и связанными электрон-фононными состояниями в GaP : Si с различными значениями концентрации донорных центров $N_D - N_A \cdot 10^{-17} \text{ с} \cdot \text{м}^{-3}$ – спектры 2–5: 2 – 1,6; 3 – 2,0; 4 – 3,2; 5 – 7,1. Поляризации падающего ($\lambda_i = 5145 \text{ \AA}$) и рассеянного излучения горизонтальны. $T = 6 \text{ К}$. N – средний уровень шумов, обусловленных рассеянным светом

Типичные спектры для ряда образцов GaP : Si приведены на рисунке. С увеличением концентрации донорных центров с низкочастотной стороны линии, соответствующей $LO(\Gamma)$ -фонону, наблюдается "всплытие" и в дальнейшем возрастание интенсивности новой линии, интерпретируемой нами как диэлектрическая локальная мода. Измеренное значение энергии связи составляет 1,12 мэВ или 9 см^{-1} .

Для зоны проводимости фосфида галлия с тремя эквивалентными минимумами, лежащими на краю зоны Бриллюэна в направлении [100], основное состояние примесного электрона трижды вырождено. Характер вырождения может быть определен из неприводимых представлений группы T_d , по которым преобразуются волновые функции локализованных электронных состояний⁸. Для доноров VI группы, замещающих атомы фосфора, волновые функции имеют симметрию X_1 -минимума и вырождение снимается долино-орбитальным взаимодействием с образованием синглета $1s(A_1)$ и дублета $1s(E)$. Доноры IV группы замещают атомы галлия и волновые функции локализованных состояний имеют симметрию X_3 -минимума и основное состояние остается трижды вырожденным – триплет T_2 ⁸. В теории слабо связанных электрон-фононных состояний³ имеется жесткое ограничение;

¹⁾ Обнаружены три новые линии в области частот $570 - 610 \text{ см}^{-1}$. Подробные данные о таком рассеянии будут приведены в другой работе.

а именно предполагается, что основное состояние примесного центра является невырожденным. Однако имеется возможность обобщения на случай вырожденного основного состояния. Не вдаваясь в детали анализа такой задачи²⁾ отметим только, что в пренебрежении взаимодействием между различными основными состояниями через промежуточные состояния, которое ответственно лишь за незначительный эффект Яна – Теллера, получается система независимых уравнений – по одной для каждого основного состояния, в точности совпадающих с формулами Рашба⁵. И для сферически симметричного донорного центра с использованием водородоподобных волновых функций для связанных состояний, отвечающих переходу $1s/T_2 \rightarrow 2p_{\pm}$ с энергией перехода $E_{2p_{\pm}} - E_{1s/T_2} = 93$ мэВ получаем значение энергии связи $W_{2p_{\pm}} = 0,87$ мэВ или $7,0 \text{ см}^{-1}$. Учитывая принятые упрощения, согласие с экспериментальным значением можно считать удовлетворительным.

№ образца	2	3	4	5
$(N_D - N_A) \cdot 10^{-17} \text{ см}^{-3}$	1,6	2,0	3,2	7,1
I_{DLM}/I_{LO} теор.	0,009	0,013	0,018	0,055
I_{DLM}/I_{LO} эксп.	0,010	0,013	0,021	0,046

Выполненные измерения интенсивности диэлектрических мод при различных концентрациях донорных центров, позволили осуществить экспериментальную проверку выводов теории слабо связанных электрон-фононных состояний относительно абсолютной величины интенсивности рассеяния на донорных центрах^{3, 5}.

Согласно⁵ отношение эффективных сечений рассеяния света фононами, локализованными на нейтральных донорах (в расчете на один примесный центр) и решеточными фононами (в расчете на одну элементарную ячейку объемом d^3) при рассеянии в том же направлении и с той же поляризацией

$$\frac{(\sigma_{imp})_t}{\sigma_{intr}} = \left(1 - \frac{d\lambda_t}{d\lambda}\right)^{-1} \frac{4\pi \alpha (\hbar\omega_{LO})^2}{d^3 (2m^* \hbar\omega_{LO})^{1/2}} \sum_{t'} |(\psi_0 | x | \varphi_{t'})|^2. \quad (1)$$

Здесь суммирование по t' охватывает возбужденные состояния. В рассматриваемом случае $\left(1 - \frac{d\lambda_t}{d\lambda}\right)^{-1} \approx 1$, волновые функции $\varphi_t = \psi_t A_{tt}^{-1/2}$, $A_{tt'} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k \gamma_{t0}(k) \gamma_{t0'}(-k)$, где γ_{t0} – матричные элементы электрон-фононного взаимодействия. Используя водородоподобные волновые функции для основного и возбужденного состояний, получаем следующее выражение для отношения интенсивностей рассеяния света фононами, локализованными на $N_D - N_A$ нейтральных донорах и решеточным рассеянием N элементарными ячейками

$$\frac{I_{DLM}}{I_{LO}} = \frac{N_D - N_A}{N} \frac{(\sigma_{imp})_t}{\sigma_{intr}} = \frac{8192}{63} \frac{\pi a_0^3}{d_3} \frac{N_D - N_A}{N}, \quad (2)$$

где a_0 – боровский радиус примесного центра. Результаты расчета, приведенные в таблице, хорошо согласуются с экспериментальными данными.

²⁾ Эти результаты будут опубликованы в другой работе.

Авторы признательны Б.П.Захарчене и Ш.М.Когану за полезные обсуждения и В.Сигель и Т.Кюнель за выполнение электрических измерений.

Литература

1. Коган Ш.М., Сурис Р.А: ЖЭТФ, 1966, 50, 1279.
2. Dean P.J., Mannchon Jr., D.D., Hopfield J.J. Phys. Rev. Lett., 1970, 25, 1027.
3. Клейн М.В. Рассеяние света в твердых телах. Под ред. М.Кардоны, М.: Мир, 1976, с. 207.
4. Байрамов Б.Х., Ирмер Г., Монеке И., Топоров В.В. Письма в ЖЭТФ, 1983, 38, 238.
5. Рашиба Э.И. ЖЭТФ, 1976, 71, 319.
6. Вехтер Б.Г., Полингер В.З., Розенфельд Ю.Б., Цукерлат Б.С. Письма в ЖЭТФ, 1974, 20, 84.
7. Irmer G., Toporov V.V., Bairamov B.H., Monecke J. Phys. stat. sol. (b), 1983, 119, 595.
8. Morgan T.N. Phys. Rev. Lett., 1968, 21, 819.

Физико-технический институт
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
18 февраля 1985 г.