

На правах рукописи



Барышников Кирилл Александрович

**РЕЛАКСАЦИОННЫЕ И РЕЗОНАНСНЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ЯН-
ТЕЛЛЕРОВСКИХ ЦЕНТРАХ В КУБИЧЕСКИХ
ПОЛУПРОВОДНИКАХ**

Специальность 01.04.10 – физика полупроводников

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Санкт-Петербург – 2017

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Физико-техническом институте им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук

- Научный руководитель:** **Аверкиев Никита Сергеевич**
д.ф.-м.н., профессор
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук, сектор теории оптических и электрических явлений в полупроводниках, заведующий сектором
- Официальные оппоненты:** **Перлин Евгений Юрьевич**
д.ф.-м.н., профессор
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики», Центр «Информационные оптические технологии», главный научный сотрудник
Чарная Елена Владимировна
д.ф.-м.н., профессор
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет», Физический факультет, Кафедра физики твердого тела, профессор
- Ведущая организация:** Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Казанский (Приволжский) федеральный университет».

Защита состоится 16.11.2017 в 10:00 часов на заседании диссертационного совета Д 002.205.02 при Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Физико-техническом институте им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук по адресу: 194021, Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук по адресу: 194021, Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26 и на сайте <http://www.ioffe.ru/>

Автореферат разослан « ____ » _____ 2017 года.
Ученый секретарь диссертационного совета Д 002.205.02
доктор физико-математических наук

Сорокин Л.М.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы

Точечные дефекты в полупроводниках, имеющие глубокие уровни энергии в запрещенной зоне [8], увеличивают эффективность рекомбинации носителей заряда, которая не является желательной во многих применениях полупроводников. Связано это с тем, что, в отличие от мелких примесей, дефекты с глубокими уровнями могут захватывать как электроны, так и дырки [11]. Если в полупроводнике присутствуют глубокие центры, то вероятность рекомбинации электрона и дырки пропорциональна их концентрации [1, 11]. Однако избавиться от таких дефектов сложно: если от вакансий может помочь отжиг кристалла, то чтобы избавиться от примесных атомов, образующих глубокие центры, необходимо предпринимать специальные меры при выращивании полупроводниковых структур и проверять, что концентрация дефектов с глубокими уровнями меньше допустимого значения для данного полупроводникового элемента или устройства [2, 5, 10].

В связи с этим актуальной проблемой является разработка различных способов измерения концентрации таких дефектов в полупроводниках. Одним из таких способов является измерение поглощения звуковой волны на дефектах в полупроводниках, подверженных эффекту Яна-Теллера, которые вносят дополнительный вклад в коэффициент поглощения звука, пропорциональный их концентрации [23].

Эффект Яна-Теллера для глубоких центров представляет и фундаментальный интерес. Такое распространенное явление, как стоков сдвиг при внутрицентральной фотолуминесценции, может быть связано с наличием эффекта Яна-Теллера в основном или возбужденном состоянии центра [15], что необходимо учитывать в так называемом принципе Франка-Кондона при анализе спектра фотолуминесценции [12]. В таком случае, вибронное взаимодействие (смешивание электронных и колебательных состояний, приводящее к эффекту Яна-Теллера) играет важную роль в определении спектра и времен релаксации исследуемых центров.

Существуют также причины изучать электронное строение дефектов с глубокими уровнями в полупроводниках. Кристаллы с глубокими примесными центрами часто используются в качестве активных сред лазеров [6, 9]. Поэтому большой интерес представляют собственные состояния этих центров: их энергия и их симметрия. Как следствие, изучение новых способов определения энергетического спектра и симметричных свойств собственных состояний глубоких центров является актуальной задачей.

В настоящий момент разработана самосогласованная ультразвуковая методика определения типа симметрии примесных комплексов, подверженных эффекту Яна-Теллера, а также величин параметров таких систем [21]. Эта методика использует тот факт, что в кубическом кристалле в

направлении $[110]$ распространяются упругие волны трех типов поляризации: продольная мода, медленная поперечная мода (поляризованная вдоль оси $[1\bar{1}0]$) и быстрая поперечная волна (с вектором поляризации $[001]$). Поляризацию упругой волны можно задать направлением смещения возбуждающих звук пьезоэлектрических элементов.

Наблюдая поглощение звуковых волн с разной поляризацией в зависимости от температуры (или других контролируемых параметров) в кристалле с дефектами, подверженными эффекту Яна-Теллера, можно определить тип основных искажений окружения точечного дефекта, а также величины соответствующих параметров. Если на таком анизотропном комплексе поглощается медленная поперечная волна, а для быстрой поперечной моды поглощение не наблюдается, то основной тип искажений данного комплекса будет тетрагонального типа. Наоборот, если вклад от ян-теллеровского комплекса в поглощение виден только для быстрой поперечной моды, а для медленной – нет, то основной тип искажений – тригональный. Таким образом, удалось установить типы ян-теллеровских искажений для многих примесных комплексов в различных кристаллах [14, 17–19, 25]. Однако для проведения оценок параметров таких систем необходима детальная микроскопическая теория поглощения ультразвука на примеси с эффектом Яна-Теллера для каждого случая.

Целью диссертационной работы является теоретическое объяснение релаксационных и резонансных переходов в ян-теллеровских точечных дефектах в кубических полупроводниковых кристаллах в зависимости от различных параметров, а также определение соответствующих параметров самих дефектов.

Для этого были решены следующие задачи:

- 1) Построена микроскопическая теория эффекта Яна-Теллера для примеси Cu^{2+} в GaAs с учетом туннельного расщепления основного состояния примесного комплекса и обменного взаимодействия двух дырок, локализованных на данном центре.
- 2) Проанализированы адиабатические потенциалы и найдены основные вибронные состояния для основных типов задач эффекта Яна-Теллера.
- 3) Развита микроскопическая теория поглощения ультразвука на центре Cu^{2+} в GaAs.
- 4) Объяснена зависимость поглощения ультразвука от постоянного магнитного поля на центре Cr^{2+} в кубическом ZnSe.

Научная новизна и практическая значимость

В диссертации представлена подробная теория поглощения ультразвука на ян-теллеровских центрах основных типов в кубических полупроводниках. Данная теория из сравнения с ультразвуковым экспериментом позволяет произвести оценки некоторых параметров ян-теллеровских систем, необходимые для определения собственных состояний

и собственных энергий таких систем, а также оптических, электронных и магнитных процессов, связанных с данными центрами.

В работе представлены оригинальные результаты теоретического расчета туннельного расщепления основного вибронного состояния ян-теллеровских центров, коэффициентов поглощения ультразвука на данных центрах с учетом вибронной структуры уровней, а также релаксационных процессов ян-теллеровских центров разных типов как в отсутствие, так и при наличии внешнего постоянного магнитного поля. Все это имеет значение в таких применениях, как расчет рекомбинации носителей заряда через дефекты с глубокими уровнями в полупроводниках, расчет оптических переходов в активных средах лазеров, легированных ян-теллеровскими центрами, а также учет вибронных состояний при конструировании электронных, спинтронных и оптических приборов.

Научная *новизна* работы заключается в следующем:

- 1) Получена формула для туннельного расщепления основного вибронного состояния центра Cu^{2+} в GaAs с учетом обменного взаимодействия двух дырок, локализованных на данном центре, в квазиклассическом приближении и приближении одномерного пути туннелирования между минимумами соответствующего адиабатического потенциала.
- 2) Рассчитаны коэффициенты релаксационного и резонансного поглощения ультразвука на центре Cu^{2+} в GaAs с учетом особенностей основного вибронного состояния центра. Приведена оценка туннельного расщепления вибронных состояний данного центра равная 15 мкэВ.
- 3) Рассчитаны интенсивности однофононных релаксационных переходов и теоретически показано отсутствие туннелирования между эквивалентными минимумами адиабатического потенциала центра Cr^{2+} в кубическом ZnSe в нулевом магнитном поле при низких температурах.
- 4) Построена микроскопическая теория, объясняющая эффект резкого и большого увеличения поглощения ультразвука на центре Cr^{2+} в кубическом ZnSe в малых магнитных полях за счет открытия нового эффективного канала релаксации между минимумами соответствующего адиабатического потенциала, связанного с туннелированием, индуцированным орбитальным взаимодействием с внешним магнитным полем. Получена формула для поглощения ультразвука с учетом магнитоиндуцированного туннелирования и вклада времени дефазировки вибронных состояний в релаксацию системы в магнитном поле.
- 5) Предложена феноменологическая теория перехода от релаксационного механизма поглощения звука на почти вырожденных электронных состояниях с учетом их слабого смешивания к резонансному

механизму поглощения, где резонансные переходы происходят между расщепленными по энергии состояниями, образованными сильным смешиванием исходных состояний.

Основные методы исследования

В диссертации используются теоретические методы: метод адиабатических потенциалов [16] и метод Опики и Прайса [22] для расчета вибронных состояний, квазиклассическое приближение для вычисления квантовомеханического туннелирования [7], методы решения кинетических уравнений (метод неравновесных поправок к квазиравновесному распределению, метод возмущений к равновесному распределению для учета резонансных переходов), а также метод матрицы плотности для учета дефазировки вибронных состояний при туннелировании из одного минимума адиабатического потенциала в другой [4]. Кроме того, использовались численные методы расчета собственных состояний ян-теллеровских центров, а также релаксационных и резонансных переходов между ними в пакетах программ COMSOL Multiphysics и MATLAB.

Научные положения, выносимые на защиту:

1) В многочастичном эффекте Яна-Теллера, соответствующем $(\Gamma_8 + \Gamma_8) \otimes e$ -задаче, величина и знак туннельного расщепления основного электронно-колебательного (вибронного) состояния зависят от энергии обменного взаимодействия носителей заряда. Основным состоянием такой задачи при некоторых значениях параметров системы может оказаться невырожденное вибронное состояние, а при определенной величине энергии обменного взаимодействия туннельные состояния оказываются случайно вырожденными. Такой критический параметр существует для центра $\text{Cu}_{\text{Ga}}^{2+}$ в GaAs.

2) В кристаллах арсенида галлия, содержащих ян-теллеровские центры $\text{Cu}_{\text{Ga}}^{2+}$, при низких температурах возможно как релаксационное поглощение, так и резонансное поглощение ультразвуковой волны, распространяющейся в направлении $[110]$ кристалла GaAs с поляризацией $[\bar{1}\bar{1}0]$. Величины соответствующих коэффициентов поглощения зависят от энергии обменного взаимодействия двух дырок на центре $\text{Cu}_{\text{Ga}}^{2+}$, резонансные переходы происходят между туннельно-расщепленными вибронными состояниями центра. Поглощение звуковой волны, распространяющейся вдоль направления $[110]$ с поляризацией $[001]$, отсутствует из-за отсутствия влияния такой волны на основное вибронное состояние центра.

3) Между основными вибронными состояниями центра $\text{Cr}_{\text{Zn}}^{2+}$ в кубическом кристалле ZnSe (отвечающим $T \otimes e$ -задаче) туннельные переходы в нулевом магнитном поле отсутствуют. Установление термодинамического равновесия между данными состояниями при низких температурах происходит за счет однофононных переходов в возбужденное состояние, отщепленное спин-орбитальным взаимодействием.

4) Приложение внешнего постоянного магнитного поля приводит к появлению орбитального смешивания основных вибронных состояний центра $\text{Cr}_{\text{Zn}}^{2+}$ (отвечающих $T \otimes e$ -задаче) в кубическом кристалле ZnSe , и как следствие, к туннелированию между минимумами соответствующего адиабатического потенциала. Данное магнитоиндуцированное туннелирование приводит к возникновению в магнитном поле дополнительного эффективного канала релаксации, что влечет за собой увеличение поглощения ультразвуковой волны, распространяющейся вдоль направления $[110]$ с поляризацией $[1\bar{1}0]$, при приложении магнитного поля вдоль направлений $[110]$ и $[1\bar{1}0]$.

Апробация работы

Результаты работы были представлены автором на следующих конференциях и школах: Международная зимняя школа по физике полупроводников (Санкт-Петербург – Зеленогорск 25–28 февраля 2011 года), Конференция по физике и астрономии для молодых ученых Санкт-Петербурга и Северо-Запада «Физика.СПб» (Санкт-Петербург, 26–27 октября 2011 года), XIX Уральская международная зимняя школа по физике полупроводников (Екатеринбург, 20–25 февраля 2012 года), Российская молодежная конференция по физике и астрономии «Физика.СПб» (Санкт-Петербург, 24–25 октября 2012 года), Летняя школа Фонда Дмитрия Зимина «Династия» «Актуальные проблемы физики конденсированного состояния (теория и эксперимент)» (Санкт-Петербург – Репино, 12–21 июля 2013 года), 15-ая всероссийская молодежная конференция «Физика полупроводников и наноструктур, полупроводниковая опто- и наноэлектроника» (Санкт-Петербург, 25–29 ноября 2013 года), Международная конференция и школа «Single dopants» (Санкт-Петербург, Россия, 1–5 июня 2014 года), Зимняя школа «Son et lumière: from microphotronics to nanophononics» (Лез-Уш, Франция, 16–28 февраля 2015 года) Международная молодежная конференция «Физика.СПб» (Санкт-Петербург, Россия, 26–29 октября 2015 года), XXIII международный симпозиум по эффекту Яна-Теллера «Vibronic Coupling and Electron-Phonon Interactions in Molecules and Crystals» (Тарту, Эстония, 27 августа – 1 сентября 2016 года). Также основные результаты работы докладывались на семинарах сектора теории оптических и электрических явлений в полупроводниках ФТИ им. А.Ф. Иоффе.

Публикации

Основные результаты диссертационной работы отражены в 24 публикациях в российских и зарубежных научных журналах и сборниках тезисов конференций, из них 5 научных статей опубликованы в журналах, рекомендованных ВАК РФ.

Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из общего введения, трех глав с вводной частью и заключающими выводами, общего заключения, списка публикаций автора по

теме диссертации и списка используемой литературы. Объем работы составляет 137 страниц, включая 24 рисунка, 2 таблицы и 2 приложения (дополнительно включающие в себя 1 рисунок и 3 таблицы). Список используемой литературы содержит 62 библиографические ссылки.

Личный вклад автора

Основу диссертации составляют исследования, проведенные автором в период с 2011 по 2017 годы. Личный вклад автора состоит в непосредственном участии в разработке теоретических моделей ян-теллеровских центров Cu^{2+} в GaAs и Cr^{2+} в ZnSe, а также в проведении всех основных численных вычислений и аналитических расчетов. Представленные на защиту теоретические результаты диссертационной работы получены автором лично. Сравнение теории с экспериментом производилось совместно с соавторами публикаций по теме диссертации.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во **введении** обоснована актуальность диссертационной работы, сформулирована цель исследования и аргументирована научная новизна исследований, показана практическая значимость полученных результатов, перечислены основные положения, выносимые на защиту, а также кратко изложено содержание диссертации.

В **первой главе** рассмотрены все основные типы ян-теллеровских задач, возникающих в точечных дефектах кубических полупроводников. Произведен обзор общей теории эффекта Яна-Теллера, следуя изложению в [16], и пояснен метод анализа ян-теллеровских центров – метод адиабатических потенциалов (раздел 1.1). В разделах 1.1 и 1.3 кратко разобраны классические $E \otimes e$ -, $T \otimes e$ -, $T \otimes t_2$ -, $T \otimes (e + t_2)$ -задачи [16]. Отдельно в разделе 1.4 приводится точное решение $T \otimes e$ -задачи и доказывается отсутствие туннелирования в ней (что отличает ее от других ян-теллеровских задач [16]), вследствие ортогональности основных вибронных состояний данной задачи.

В оригинальной части главы в разделе 1.2 разбирается многочастичная $(\Gamma_8 + \Gamma_8) \otimes e$ -задача, описывающая центр Cu^{2+} в GaAs, с учетом обменного взаимодействия двух локализованных на центре дырок. Аналитически получено выражение для туннельного расщепления $\hbar\omega_0$ основного вибронного состояния данного центра в приближении одномерного пути туннелирования ($G\rho_0 \ll F$)

$$\hbar\omega_0 = \frac{3\hbar\omega}{8\pi} (1 - 3\kappa) \exp\left(-\frac{8\rho_0^2}{3\hbar} \sqrt{MG(1 - \kappa^2)^{1/2}}\right). \quad (1)$$

где $\kappa = 3\Delta K/2F^2$, Δ – энергия обменного взаимодействия, F и K – линейная вибронная константа и константа упругости данного центра,

$\rho_0 = (F/K)(1 - \kappa^2)^{1/2}$, G – квадратичная вибронная константа, ответственная за образование трех минимумов, разделенных потенциальными барьерами, в адиабатическом потенциале примесной системы, ω – частота локальных колебаний вокруг каждого минимума ($\hbar\omega \sim \sqrt{G/M}$), M – масса ядерной подсистемы, взятая для примесного комплекса $\text{Cu}_{\text{Ga}}4\text{As}$ равной четырем массам атомов мышьяка.

Из выражения (1) и из результатов численного расчета туннельного расщепления и туннельных состояний центра сделан вывод, что величина и знак туннельного расщепления основного вибронного состояния зависит от энергии обменного взаимодействия носителей заряда. Основным состоянием такой задачи при некоторых значениях параметров системы может оказаться невырожденное вибронное состояние, а при определенной величине энергии обменного взаимодействия туннельные состояния оказываются случайно вырожденными. С помощью численного расчета было показано, что такой критический параметр существует для центра $\text{Cu}_{\text{Ga}}^{2+}$ в GaAs.

В разделе 1.5 приведены выводы к первой главе.

Во **второй главе** в разделе 2.1 приводится теория взаимодействия звука с ян-теллеровскими центрами в полупроводниках. Взаимодействие определяется при помощи формализма деформационного гамильтониана Бира-Пикуса [3]. Приводятся определения резонансного поглощения звука (за счет квантово-механических резонансных переходов между состояниями поглощающей системы) и релаксационного поглощения звука (за счет отставания от мгновенной равновесной заселенности состояний, периодически расщепляемых по энергии звуком). Обсуждается общая методика определения симметрии ян-теллеровского комплекса с помощью релаксационного поглощения звука разной поляризации в кубических кристаллах, легированных данными ян-теллеровскими примесями [21].

В оригинальной части в разделе 2.2 представлен расчет коэффициентов релаксационного α_{rel} и резонансного α_{rez} поглощения для медленной поперечной поляризации ($[1\bar{1}0]$) ультразвука, распространяющегося в $\text{GaAs}:\text{Cu}^{2+}$ в направлении $[110]$ на основе модели центра, предложенной в первой главе

$$\alpha_{rel} = \frac{4n_{\text{Cu}}b_T^2}{\rho v^3 k_B T} \left(\frac{3\sqrt{1-\kappa^2}}{8} + \frac{1+\kappa}{16} \right)^2 \frac{\omega^2 \tau_1}{1 + \omega^2 \tau_1^2}. \quad (2)$$

$$\alpha_{rez} = \frac{32n_{\text{Cu}}b_T^2}{\rho v^3 k_B T} \left(\frac{3\sqrt{1-\kappa^2}}{8} + \frac{1+\kappa}{16} \right)^2 \frac{\omega^2 \tau_2}{1 + (\omega - \omega_0)^2 \tau_2^2}. \quad (3)$$

где ρ – плотность кристалла GaAs, b_T – константа деформационного потенциала, v – скорость распространения медленной поперечной волны в кристалле, n_{Cu} – концентрация центров Cu в кристалле, τ_1 – время

релаксации центра (время прихода к термодинамическому равновесию), τ_2 – время дефазировки туннельно-расщепленных состояний.

Также, в оригинальной части показывается отсутствие поглощения быстрой поперечной моды ($[001]$) ультразвука, распространяющейся в том же направлении, из-за отсутствия воздействия данной моды на основные вибронные состояния центра Cu^{2+} в GaAs. Предложены оценки параметров центра Cu^{2+} $F = 1,32 \cdot 10^7$ эВ/см, $K = 1,0 \cdot 10^{16}$ эВ/см², $U_0 \approx 14,5$ мэВ и верхней оценки величины $|k| = 0,148$, а также величины туннельного расщепления собственных вибронных состояний центра: $\hbar\omega_0 \approx 15$ мкэВ.

Кроме того, в разделе 2.3 обсуждается схема определения времени релаксации ян-теллеровского комплекса с помощью ультразвуковой экспериментальной методики на примере ZnSe:V^- [13]. В разделе 2.4 обсуждены два вклада в температурную зависимость времени релаксации ян-теллеровского комплекса: вклад от активационного механизма релаксации и вклад от туннельных переходов между эквивалентными конфигурациями комплекса.

В разделе 2.5 приведены выводы ко второй главе.

В **третьей главе** в разделе 3.1 представлена модель центра Cr^{2+} в кристалле ZnSe с учетом эффекта Яна-Теллера (приводящему к $T \otimes e$ -задаче) и в разделе 3.2 представлена теория поглощения ультразвука на данном центре.

В оригинальной части главы в разделе 3.3 показано, что в нулевом магнитном поле при низких температурах туннелирование между основными ян-теллеровскими конфигурациями примесного комплекса $\text{Cr}_{\text{Zn}}4\text{Se}$ отсутствует, а релаксация в этом случае осуществляется за счет однофононных переходов в ближайшее возбужденное состояние в другой конфигурации комплекса. Этот факт отличает центр Cr^{2+} в кристалле ZnSe от других ян-теллеровских центров, в которых низкотемпературный механизм релаксации, как правило, связан с туннелированием между ян-теллеровскими конфигурациями [14, 17–19, 25]. На рисунке 1 приведено сравнение теоретического расчета времени релаксации за счет однофононных переходов и экспериментальных данных по времени релаксации. Из наклона низкотемпературной части времени релаксации видно, что однофононные переходы совершаются между состояниями, расщепленными на энергию, которая в точности совпадает с энергетическим расстоянием до ближайшего возбужденного уровня в другой яме $|3D| \approx 0,9$ мэВ, и это находится в хорошем соответствии с независимо полученными результатами ЭПР для данного центра [24].

В разделе 3.4 приводится теория релаксационного поглощения ультразвука в малых магнитных полях. Показано, что наблюдавшееся в эксперименте резкое и сильное увеличение поглощения ультразвука в магнитном поле, приложенном вдоль направлений $[110]$ или $[1\bar{1}0]$, вызвано

магнитоиндуцированным туннелированием между конфигурациями примесного комплекса. Магнитоиндуцированное туннелирование является следствием орбитального смешивания вибронных состояний центра в магнитном поле. Если орбитальные расщепления меньше, чем естественное уширение уровней энергии, то вместо перестройки собственных энергий центра, появляется новый канал релаксации из одной конфигурации ян-теллеровского комплекса $\text{Cr}_{\text{Zn}}4\text{Se}$ в другую. В результате интенсивность релаксации центра возрастает в магнитном поле, и описывается следующим выражением

$$\frac{1}{\tau} = \tau_T^{-1} + \sum_{n,m} |Y_{n \leftarrow m}|^2 \frac{2\Gamma^2 \tau_2}{1 + \Delta U_{nm}^2 \tau_2^2}, \quad (4)$$

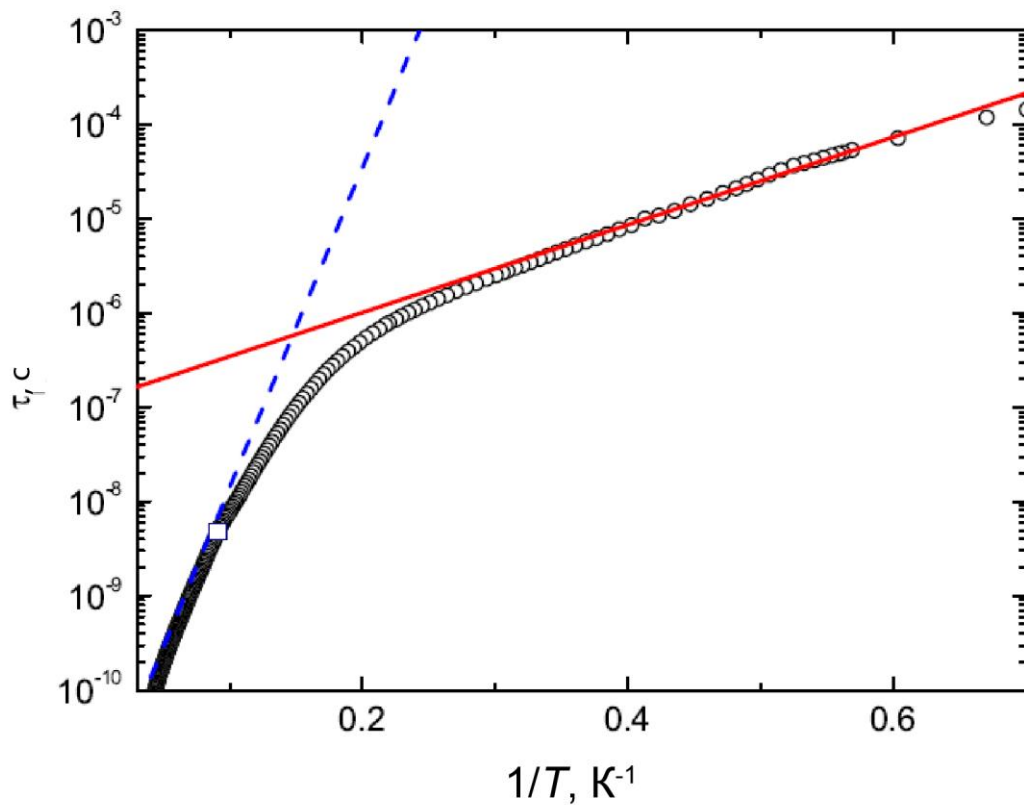


Рисунок 1: Зависимость времени релаксации комплекса $\text{Cr}_{\text{Zn}}4\text{Se}$ от обратной температуры, полученная при частоте ультразвука $\omega/2\pi = 33$ МГц [20] (изображена белыми кружками). Белый квадрат отвечает условию $\omega\tau = 1$, отделяя высокотемпературный режим ($\omega\tau < 1$) от низкотемпературного ($\omega\tau > 1$). Синяя прерывистая линия отвечает однофононному активационному процессу с активационной энергией $V_0' = 6,7$ мэВ. Красная непрерывная кривая также отвечает активационному процессу, но с энергией активации $V_0'' = 0,9$ мэВ, что подтверждает факт отсутствия туннелирования в нулевом магнитном поле внутри комплекса $\text{Cr}_{\text{Zn}}4\text{Se}$.

где Γ – туннельный элемент, пропорциональный величине приложенного магнитного поля B , τ_T^{-1} – интенсивность однофононных переходов в нулевом поле, в малых магнитных полях зависящая только от температуры,

$\gamma_{n \leftarrow m} = \langle n | \mathbf{o} \cdot \hat{\mathbf{L}} | m \rangle$ – матричный элемент перехода из одной ямы в другую под действием магнитного поля на орбитальные состояния центра, $\mathbf{o} = \mathbf{V}/V$, а $\Delta U_{nm} = (E_n - E_m)/\hbar$ отражает расхождение уровней энергий в разных конфигурациях $\text{Cr}_{\text{Zn}}4\text{Se}$ в магнитном поле (n и m пробегает все спиновые состояния в различных конфигурациях). Выражение (4) аналогично выражению для времени релаксации сходной системы, полученного Вихниным [4] для статически деформированной системы из двух потенциальных ям (где роль статической деформации исполняло ΔU_{nm}).

Далее был вычислен коэффициент релаксационного поглощения звука в магнитном поле. Показано, что этот коэффициент определяется обычной дебаевской формой $\alpha \sim \omega\tau/(1 + \omega^2\tau^2)$ [23], где τ определено в выражении (4). Сравнение результатов теоретического расчета и эксперимента приведено на рисунке 2.

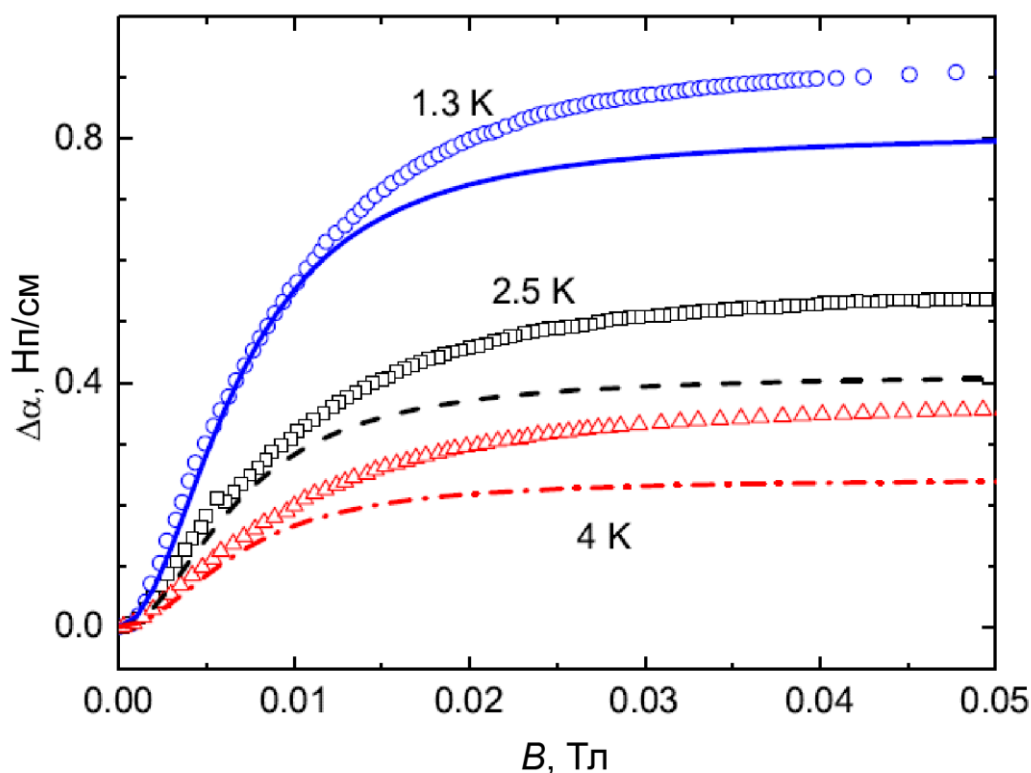


Рисунок 2: Зависимость поглощения медленной поперечной ультразвуковой волны с частотой $\omega/2\pi = 33$ МГц в $\text{ZnSe}:\text{Cr}^{2+}$ от приложенного постоянного магнитного поля $\mathbf{V} \parallel [110]$. Синие кружки (эксперимент) и непрерывная кривая (теоретический расчет) соответствуют $T = 1,3$ К, черные квадратики (эксперимент) и прерывистая линия (теория) – $T = 2,5$ К, красные треугольники (эксперимент) и пунктирная через одну точку линия (теория) – $T = 4$ К. Теоретический расчет проведен в предположении вклада в релаксацию магнитоиндуцированного туннелирования с параметрами $\tau_2 = 6 \cdot 10^{-10}$ с и $E_{JT}/\hbar\omega_e = 1,2$. Поле $V = 0,05$ Тл (правый край рисунка) отвечает границе применимости выражений (3.18) и (3.20) – $\Gamma\tau_2 \approx 1/3$.

Кроме того, в разделе 3.5 обсужден случай постоянного магнитного поля, направленного вдоль оси [001]. В этом случае орбитальные состояния, расщепляемые звуковой волной, начинают эффективно смешиваться, образуя расщепленные магнитным полем когерентные состояния уже в самых малых полях (порядка 3 мТл). Это приводит к тому, что гамильтониан взаимодействия со звуком в базисе собственных состояний центра перестает быть диагональным, и ультразвук начинает смешивать состояния центра, расщепленные магнитным полем. Как следствие, это приводит к резонансному механизму поглощения. Тем не менее, из-за того, что частоты звука, используемые в эксперименте сравнимы с амплитудой звуковой волны, наблюдается лишь хвост резонансного поглощения звука в данном направлении поля.

В разделе 3.6 приведены выводы к третьей главе.

В **заключении** сформулированы основные результаты работы:

- Предложено решение многочастичной $(\Gamma_8 + \Gamma_8) \otimes e$ -задачи для примесного центра замещения $\text{Cu}_{\text{Ga}}^{2+}$ в GaAs с учетом обменного взаимодействия между двумя дырками, локализованными на данном центре. Получено аналитическое выражение для туннельного расщепления основного вибронного состояния центра $\text{Cu}_{\text{Ga}}^{2+}$ в GaAs в квазиклассическом приближении и приближении одномерного пути туннелирования между минимумами соответствующего адиабатического потенциала, а также проведен численный расчет туннельного расщепления для данного центра. Показано, что величина и знак туннельного расщепления основного вибронного состояния центра зависит от энергии обменного взаимодействия носителей заряда.
- Рассчитаны коэффициенты поглощения звука на центре $\text{Cu}_{\text{Ga}}^{2+}$ в GaAs с учетом особенностей основного вибронного состояния центра. Показано, что в этих центрах при низких температурах возможно наблюдать как релаксационное поглощение, так и резонансное поглощение медленной поперечной ультразвуковой волны, распространяющейся в направлении [110] кристалла GaAs. Резонансные переходы происходят между туннельно-расщепленными вибронными состояниями центра, модифицированными обменным взаимодействием.
- Установление термодинамического равновесия между состояниями центра $\text{Cr}_{\text{Zn}}^{2+}$ при низких температурах при отсутствии туннелирования между эквивалентными минимумами адиабатического потенциала центра происходит за счет однофононных переходов в возбужденное состояние, отщепленное спин-орбитальным взаимодействием. Рассчитаны интенсивности таких однофононных переходов и произведено сравнение с экспериментальными данными для времени релаксации центра $\text{Cr}_{\text{Zn}}^{2+}$.

- Приложение внешнего постоянного магнитного поля к кристаллу ZnSe:Cr приводит к появлению орбитального смешивания основных вибронных состояний примесного комплекса $\text{Cr}_{\text{Zn}}4\text{Se}$, и как следствие, к туннелированию между минимумами соответствующего адиабатического потенциала. Этот эффект магнитоиндуцированного туннелирования приводит к возникновению в магнитном поле дополнительного эффективного канала релаксации, что влечет за собой увеличение поглощения медленной поперечной ультразвуковой волны, распространяющейся вдоль направления $[110]$ с поляризацией $[1\bar{1}0]$, при приложении магнитного поля вдоль направлений $[110]$ и $[1\bar{1}0]$. Из сравнения теории и эксперимента оценено время дефазировки такой системы $\tau_2 \approx 6 \cdot 10^{-10}$ с.
- Показано, что при включении магнитного поля вдоль оси $[001]$ смешивание орбитальных состояний $\text{Cr}_{\text{Zn}}^{2+}$ в ZnSe приводит к образованию расщепленных магнитным полем когерентных состояний уже в самых малых полях (порядка 3 мТл). Это означает, что происходит переход от релаксационного поглощения звука к резонансному поглощению звука в ненулевых магнитных полях. Показано, что в эксперименте наблюдается лишь хвост резонансного поглощения звука в данном направлении поля.

В **Приложениях А и Б** приведены подробные вычисления, посвященные симметричному анализу колебательных мод тетраэдрических молекул, и расчет экстремальных точек $T \otimes (e + t_2)$ -задачи методом Опики и Прайса [22], а также анализ их устойчивости.

Основные результаты диссертационной работы изложены в публикациях:

По перечню ВАК:

1) *Барышников К. А., Аверкиев Н. С., Монахов А. М., Гудков В. В.* Резонансное и релаксационное поглощение ультразвука анизотропными ян-теллеровскими центрами в GaAs // Физика твердого тела – 2012. – Т. 54 – № 3– 442–449с.

2) *Аверкиев Н. С., Барышников К. А., Берсукер И. Б., Гудков В. В., Жевстовских И. В., Маякин В. Ю., Монахов А. М., Сарычев М. Н., Седов В. Е.* Релаксационное и резонансное поглощение ультразвука ян-теллеровскими центрами в кристалле GaAs:Cu // Письма в ЖЭТФ – 2012. – Т. 96 – № 4– 252–256с.

3) *Averkiev N. S., Bersuker I. B., Gudkov V. V., Baryshnikov K. A., Zhevstovskikh I. V., Mayakin V. Y., Monakhov A. M., Sarychev M. N., Sedov V. E., Surikov V. T.* Ultrasonic investigation of the Jahn-Teller effect in GaAs semiconductors doped by transition metals // J. Appl. Phys. – 2014. – Т. 116 – № 10– 103708с.

4) *Averkiev N. S., Bersuker I. B., Gudkov V. V., Baryshnikov K. A., Colibaba G. V., Zhevstovskikh I. V., Mayakin V. Y., Monakhov A. M., Nedeoglo D. D., Sarychev M. N., Surikov V. T.* Ultrasonic exploration of vacancy centres with the Jahn–Teller effect: Application to the ZnSe crystal // *Phys. Status Solidi Basic Res.* – 2014. – Т. 251 – № 8– 1590–1595с.

5) *Averkiev N. S., Bersuker I. B., Gudkov V. V., Zherlitsyn S., Yasin S., Zhevstovskikh I. V., Baryshnikov K. A., Monakhov A. M., Sarychev M. N., Korostelin Y. V., Landman A. I.* Relaxation attenuation of ultrasound by the Jahn–Teller centers in ZnSe:Cr in high magnetic fields // *Solid State Phenom.* – 2015. – Т. 233-234– 125–128с.

Другие публикации:

1) *Барышников К. А.* Резонансное поглощение ультразвука анизотропными ян-теллеровскими центрами в GaAs // *Международная зимняя школа по физике полупроводников, Научные сообщения молодых ученых – Санкт-Петербург, Зеленогорск, 25-28 февраля 2011 – 7с.*

2) *Барышников К. А.* Резонансное и релаксационное поглощение ультразвука анизотропными ян-теллеровскими центрами в GaAs // *Тезисы докладов конференции по физике и астрономии для молодых ученых Санкт-Петербурга и Северо-Запада (ФизикА.СПб) – Санкт-Петербург, 26-27 октября 2011 – 101с.*

3) *Аверкиев Н. С., Барышников К. А., Берсукер И. Б., Гудков В. В., Монахов А. М., Седов В. Е.* Взаимодействие ультразвука с анизотропными Ян-Теллеровскими центрами в полупроводниках // *XIX Уральская международная зимняя школа по физике полупроводников, Программа и тезисы докладов – Екатеринбург, 20-25 февраля 2012 – Т-02 – 146с.*

4) *Аверкиев Н. С., Барышников К. А., Берсукер И. Б., Гудков В. В., Жевстовских И. В., Маякин В. Ю., Монахов А. М., Сарычев Н. Н., Седов В. Е.* Взаимодействие ультразвука с ян-теллеровскими центрами в кристалле GaAs:Cu // *XIX Уральская международная зимняя школа по физике полупроводников, Программа и тезисы докладов – Екатеринбург, 20-25 февраля 2012 – Т-19 – 178с.*

5) *Барышников К. А.* Поглощение ультразвука на ян-теллеровских центрах в кубических полупроводниках в магнитном поле // *XIX Уральская международная зимняя школа по физике полупроводников, Программа и тезисы докладов – Екатеринбург, 20-25 февраля 2012 – Т-20 – 180с.*

6) *Аверкиев Н. С., Барышников К. А., Гудков В. В., Берсукер И. Б., Жевстовских И. В., Маякин В. Ю., Монахов А. М., Сарычев М. Н., Седов В. Е.* Ультразвуковые исследования эффекта Яна-Теллера в кристалле GaAs:Cu // *XXXVI совещание по физике низких температур, Тезисы докладов – Санкт-Петербург, 2-6 июля 2012 – L6 – 59с.*

7) *Барышников К. А.* Поглощение ультразвука на ян-теллеровских центрах в кубических кристаллах в магнитном поле // Российская молодежная конференция по физике и астрономии Физика.СПб, Тезисы докладов – Санкт-Петербург, 24-25 октября 2012 – 115с.

8) *Averkiev N. S., Baryshnikov K. A., Bersuker I. B., Gudkov V. V., Zhevstovskikh I. V., Mayakin V. Y., Monakhov A. M., Sarychev M. N.* The Jahn-Teller effect in ZnSe:Cr in magnetic fields. Ultrasound investigation // V Euro-Asian Symposium «Trends in MAGnetism»: Nanomagnetism (EASTMAG-2013), Abstracts – Владивосток, 15-21 сентября 2013 – Tu-3A-O2 – 115с.

9) *Аверкиев Н. С., Барышников К. А., Берсукер И. Б., Гудков В. В., Жевстовских И. В., Маякин В. Ю., Монахов А. М., Сарычев М. Н., Седов В. Е.* Ультразвуковые исследования вибронного взаимодействия в кристалле GaAs:Cu // Тезисы докладов XI Российской конференции по физике полупроводников (XI РКФП) – Санкт-Петербург, 16-20 сентября 2013 – 7.Примеси и дефекты – ЧТ-7.19с (Rep_0194) – 339с.

10) *Барышников К. А.* Влияние эффекта Яна-Теллера на поглощение ультразвука в кубическом полупроводнике ZnSe, легированном хромом, в магнитном поле // Тезисы докладов 15-й всероссийской молодежной конференции «Физика полупроводников и наноструктур, полупроводниковая опто- и наноэлектроника» – Санкт-Петербург, 25-29 ноября 2013 – Объемные свойства полупроводников – 3с.

11) *Baryshnikov K. A.* Ultrasound attenuation on anisotropic Jahn-Teller complex $\text{Cr}_{\text{Zn}}4\text{Se}$ in a magnetic field // International Conference and School «Single dopants» – Россия, Санкт-Петербург, 1-5 июня 2014 – URL:http://www.ioffe.ru/dopants/Single_Dopants_2014/Students_and_Posters_files/BaryshnikovKA.pdf

12) *Барышников К. А.* Оптическая ориентация изовалентной примеси и внутрицентровая люминесценция в CdMnTe // Российская молодежная конференция по физике и астрономии Физика.СПб – Санкт-Петербург, 28-30 октября 2014 – URL: <http://reg.physica.spb.ru/theses2014.php>

13) *Averkiev N. S., Bersuker I. B., Gudkov V. V., Zherlitsyn S., Yasin S., Zhevstovskikh I. V., Baryshnikov K. A., Monakhov A. M., Sarychev M. N., Korostelin Yu. V., Landman A. I.* Relaxation attenuation of ultrasound by the Jahn-Teller centers in ZnSe:Cr in strong magnetic field // Moscow International Symposium on Magnetism MISM-2014, Book of Abstracts – Россия, Москва, 29 июня - 3 июля 2014 – IPO-J1-12 – 519с.

14) *Averkiev N. S., Baryshnikov K. A., Bersuker I. B., Gudkov V. V., Korostelin A. V., Landman A. I., Monakhov A. M., Sarychev A. N., Yasin S., Zherlitsyn S., Zhevstovskikh I. V.* Evidence of magnetic field dependent relaxation in ZnSe:Cr crystal in ultrasonic experiment // XXII International Symposium on the Jahn-Teller effect, Book of Abstracts – Австрия, Грац, 18-22 августа 2014 – O07 – 17с.

15) *Zhevstovskikh I. V., Bersuker I. B., Averkiev N. S., Baryshnikov K. A., Monakhov A. M., Gudkov V. V., Sarychev M. N., Zherlitsyn S., Yasin S., Korostelin Y.V.* Effect of magnetic field on the ground state of the Jahn-Teller center in ZnSe:Cr^{2+} // International Conference «Spin physics, spin chemistry and spin technology» SPCT-2015 – Россия, Санкт-Петербург, 1-5 июня 2015 – URL: [http://spinconf.com/pdf/Effect of magnetic field on the ground state.pdf](http://spinconf.com/pdf/Effect%20of%20magnetic%20field%20on%20the%20ground%20state.pdf)

16) *Аверкиев Н. С., Берсукер И. Б., Гудков В. В., Жерлицын С., Ясин С., Жевстовских И. В., Барышников К. А., Монахов А. М., Сарычев М. Н., Коростелин Ю.В.* Ультразвуковое определение параметров эффекта Яна-Теллера в полупроводниковом кристалле CdSe:Cr^{2+} // Тезисы докладов XII Российской конференции по физике полупроводников – Ершово, Россия, 21-25 сентября 2015 – Примеси и дефекты – СР 7-22с – 325с.

17) *Барышников К. А.* Пик поглощения ультразвука в ZnSe:Cr в малых магнитных полях // Тезисы докладов Международной молодежной конференции Физика.СПб – Россия, Санкт-Петербург, 26-29 октября 2015 – 226с. – URL: <http://physica.spb.ru/wp-content/uploads/2015/10/Physica2015Thesises.pdf>

18) *Baryshnikov K. A., Averkiev N. S., Bersuker I. B., Gudkov V. V., Zhevstovskikh I. V.* Tunneling and Relaxation between Orthogonal Jahn-Teller Distortions in $\text{Cr}^{2+}:\text{ZnSe}$ Centers Induced by Magnetic Fields Via Orbital Interactions // Vibronic Coupling and Electron-Phonon Interactions in Molecules and Crystals: XXIII International Symposium on the Jahn-Teller Effect, Book of Abstracts – Эстония, Тарту, 27 августа - 1 сентября 2016 – О36 – 49с.

19) *Zhevstovskikh I. V., Gudkov V. V., Sarychev M. N., Zherlitsyn S., Yasin S., Bersuker I. B., Averkiev N. S., Baryshnikov K. A., Monakhov A. M., Korostelin Y. V.* Magnetic Field Induced Relaxation Attenuation of Ultrasound by Jahn-Teller Centers: Application to ZnSe:Cr^{2+} // Appl. Magn. Reson. – 2016. – Т. 47 – № 7– 685–692с.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Абакумов В.Н. Безызлучательная рекомбинация в полупроводниках / В. Н. Абакумов, В. И. Перель, И. Н. Ясиевич – С.-Петербург: Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова РАН, 1997.– 376с.
2. Антонова И.В. Трансформация при отжиге электрически активных дефектов в кремнии, имплантированном ионами высоких энергий / И. В. Антонова, С. С. Шаймеев, С. А. Смагулова // Физика и техника полупроводников – 2006. – Т. 40 – № 5– 557–562с.
3. Бир Г.Л. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках / Г. Л. Бир, Г. Е. Пикус – Москва: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1972.– 584с.
4. Вихнин В.С. Реориентация и спин-решеточная релаксация, обусловленная туннельно-контролируемым процессом / В. С. Вихнин // Физика твердого

тела – 1978. – Т. 20 – № 5– 1340–1346с.

5. Власенко Л.С. Поверхностное геттерирование фоновых примесей и дефектов в пластинах GaAs / Л. С. Власенко, А. Т. Гореленок, В. В. Емцев, А. В. Каманин, Д. С. Полоскин, Н. М. Шмидт // Физика и техника полупроводников – 2001. – Т. 35 – № 2– 184–187с.

6. Грэхэм К. Импульсные $\text{Cr}^{2+}:\text{ZnS}$ - и $\text{Cr}^{2+}:\text{ZnSe}$ -лазеры среднего ИК диапазона с накачкой неодимовыми лазерами с модуляцией добротности и сдвигом частоты излучения с помощью ВКР / К. Грэхэм, В. В. Федоров, С. Б. Мирон, М. Е. Дорошенко, Т. Т. Басиев, Ю. В. Орловский, В. В. Осико, В. В. Бадиков, В. Л. Панютин // Квантовая электроника – 2004. – Т. 34 – № 1– 8–14с.

7. Ландау Л.Д. Теоретическая физика: Учеб. пособие для вузов в 10 т. Т. III. Квантовая механика (нерелятивистская теория). / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц – Москва: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1989. Вып. 4– 768с.

8. Ланно М. Точечные дефекты в полупроводниках / М. Ланно, Ж. Бургуэн – Москва: Мир, 1984.– 264с.

9. Ницук Ю.А. Энергетические состояния иона Cr^{2+} в кристаллах ZnSe / Ю. А. Ницук // Физика и техника полупроводников – 2013. – Т. 47 – № 6– 728–731с.

10. Пагава Т.А. Особенности отжига радиационных дефектов в облученных кристаллах p-Si / Т. А. Пагава // Физика и техника полупроводников – 2007. – Т. 41 – № 6– 651–653с.

11. Пикус Г.Е. Основы теории полупроводниковых приборов / Г. Е. Пикус – Москва: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1965.– 448с.

12. Alkauskas A. Tutorial: Defects in semiconductors – Combining experiment and theory / A. Alkauskas, M. D. McCluskey, C. G. Van De Walle // J. Appl. Phys. – 2016. – Т. 119– 181101с.

13. Averkiev N.S. Ultrasonic exploration of vacancy centres with the Jahn–Teller effect: Application to the ZnSe crystal / N. S. Averkiev, I. B. Bersuker, V. V. Gudkov, K. A. Baryshnikov, G. V. Colibaba, I. V. Zhevstovskikh, V. Y. Mayakin, A. M. Monakhov, D. D. Nedeoglo, M. N. Sarychev, V. T. Surikov // Phys. Status Solidi Basic Res. – 2014. – Т. 251 – № 8– 1590–1595с.

14. Averkiev N.S. Ultrasonic investigation of the Jahn-Teller effect in GaAs semiconductors doped by transition metals / N. S. Averkiev, I. B. Bersuker, V. V. Gudkov, K. A. Baryshnikov, I. V. Zhevstovskikh, V. Y. Mayakin, A. M. Monakhov, M. N. Sarychev, V. E. Sedov, V. T. Surikov // J. Appl. Phys. – 2014. – Т. 116 – № 10– 103708с.

15. Baryshnikov K.A. Resonant optical alignment and orientation of Mn^{2+} spins in CdMnTe crystals / K. A. Baryshnikov, L. Langer, I. A. Akimov, V. L. Korenev, Y. G. Kusrayev, N. S. Averkiev, D. R. Yakovlev, M. Bayer // Phys. Rev. B – 2015. –

T. 92– 205202c.

16. Bersuker I.B. The Jahn-Teller effect / I. B. Bersuker – Cambridge: Cambridge University Press, 2006.– 632c.

17. Gudkov V. Low temperature ultrasonic investigation of ZnSe crystals doped with Ni / V. Gudkov, A. Lonchakov, V. Sokolov, I. Zhevstovskikh, N. Gruzdev // Phys. Status Solidi Basic Res. – 2005. – T. 242 – № 3– 30–32c.

18. Gudkov V.V. Ultrasonic investigation of ZnSe:V²⁺ and ZnSe:Mn²⁺: Lattice softening and low-temperature relaxation in crystals with orbitally degenerate states / V. V. Gudkov, A. T. Lonchakov, V. I. Sokolov, I. V. Zhevstovskikh, V. T. Surikov // Phys. Rev. B – 2008. – T. 77– 155210c.

19. Gudkov V.V. Ultrasonic investigations of the Jahn–Teller effect in a ZnSe:Fe²⁺ crystal / V. V. Gudkov, A. T. Lonchakov, I. V. Zhevstovskikh, V. I. Sokolov, V. T. Surikov // Low Temp. Phys. – 2009. – T. 35 – № 1– 76–78c.

20. Gudkov V.V. Ultrasonic evaluation of the Jahn-Teller effect parameters. Application to ZnSe:Cr²⁺ / V. V Gudkov, I. B. Bersuker, I. V Zhevstovskikh, Y. V Korostelin, A. I. Landman // J. Phys. Condens. Matter – 2011. – T. 23– 115401c.

21. Gudkov V.V. Ultrasonic Consequences of the Jahn-Teller Effect / под ред. H. Koppel, D.R. Yarkony, H. Barentzen. Heidelberg, Dordrecht, London, New York: Springer, 2009. – 743–766c.

22. Opik U. Studies of the Jahn-Teller Effect. I. A Survey of the Static Problem / U. Opik, M. H. L. Pryce // Proc. R. Soc. A – 1957. – T. 238 – № 1215– 425–447c.

23. Sturge M.D. The Jahn-Teller effect in solids / под ред. F. Seitz, D. Turnbull, H. Ehrenreich. New York, London: Academic Press, 1967. – 92–211c.

24. Vallin J.T. EPR of Cr²⁺ in II-VI lattices / J. T. Vallin, G. D. Watkins // Phys. Rev. B – 1974. – T. 9 – № 5– 2051c.

25. Zhevstovskikh I.V. Numerical adiabatic potentials of orthorhombic Jahn-Teller effects retrieved from ultrasound attenuation experiments. Application to the SrF₂:Cr crystal / I. V. Zhevstovskikh, I. B. Bersuker, V. V. Gudkov, N. S. Averkiev, M. N. Sarychev, S. Zherlitsyn, S. Yasin, G. S. Shakurov, V. A. Ulanov, V. T. Surikov // J. Appl. Phys. – 2016. – T. 119– 225108c.