

**ДВУХЭЛЕКТРОННЫЕ ПРИМЕСНЫЕ ЦЕНТРЫ С ОТРИЦАТЕЛЬНОЙ
КОРРЕЛЯЦИОННОЙ ЭНЕРГИЕЙ**

Назаров Б. Ж.

Тураев Э. Ю.

Термизский государственный университет.

Аннотация

Методом Мессбауэровской спектроскопии на изотопе ^{119}Sn проведена идентификация двухэлектронных центров олова с отрицательной корреляционной энергией. Установлена, что благоприятные условия для обмена реализуется в PbSe , поскольку для этого материала концентрация дырок значительно выше, чем для PbS .

Ключевые слова: Примесные центры, точечные дефекты, отрицательная корреляционная энергия, энергия ионизации, акцепторный уровень, квадрупольное расщепление, электронная структура, спектры, изомерный сдвиг.

Представления о поведении примесных атомов в полупроводниках традиционны при замещении примесным атомом атома решетки в запрещенной зоне полупроводника образуется либо донорный, либо акцепторный уровень, способный при изменении положения уровня Ферми отдавать (принимать) один электрон (так называемые «одноэлектронные центры»).

Впервые Хаббард [1] провел теоретический анализ поведения точечных дефектов, способных при взаимодействии с кристаллической решеткой отдавать (принимать) два электрона («двухэлектронные центры»).

В запрещенной зоне полупроводников в этом случае образуются две полосы локализованных состояний, разделенных на величину внутриатомной энергии (энергия Хаббарда или корреляционная энергия)

$$U = E_2 - E_1$$

где E_1 и E_2 - первая и вторая энергии ионизации центра

Если $U < 0$ то возникает схема уровней, для обозначения которой приняты термины «двухэлектронные центры с отрицательной корреляционной энергией или **U-центры**».

Существенной особенностью **U** центров является неустойчивость их промежуточного (однократно ионизованного) зарядового состояния. Каждой паре однократно ионизованных центров энергетически выгодно распасться на один нейтральный и один двукратно ионизованный центры. В равновесии концентрация **U** центров в промежуточном зарядовом состоянии всегда экспоненциально (т.е. $\sim \exp[-U/2kT]$) мала по сравнению с их полной концентраций [2].

Цель работы

Методом Мессбауэровской спектроскопии на изотопе ^{119}Sn провести идентификацию двухэлектронных центров олова с отрицательной корреляционной энергией, вводимых

в халькогениды свинца. Примесь олова в халькогенидах свинца является типичным представителем двухэлектронного центра с отрицательной корреляционной энергией и она наиболее детально изучена методом Мессбауэровской спектроскопии [3,4]. Настоящая работа в значительной степени посвящена дальнейшему развитию этих исследований

Метод исследования

Явление ядерного гамма резонанса было открыто в 1958 г. Р. Мессбауэром. Мессбауэровские спектры характеризуются следующими параметрами: вероятность эффекта (фактор Мессбауэра), ширина спектральной линии, изомерный сдвиг, квадрупольное расщепление и зеемановское расщепление. Совокупность этих параметров позволяет определить зарядовое состояние исследуемых атомов, их электронную структуру, симметрию локального окружения, электрическое и магнитные поля, действующие на ядро-зонд, колебательные спектры матриц.

Полученные результаты и обсуждение

Для изучения процесса электронного обмена между центрами олова в **PbS** был выбран образец состава **Pb_{0.06}Sn_{0.02}As_{0.02}S**. Как видно из Мессбауэровских спектров в спектре этого образца при 80 и 295 К наблюдались только линии **Sn⁺²** и **Sn⁺⁴** изомерные сдвиги которых практически совпадают с изомерными сдвигами известных центров **[Sn]⁰** и **[Sn]⁺²** и наблюдается лишь незначительное сближение этих линий. Сближение линий не зависит от концентрации примесных атомов олова. Иными словами, в **PbS** процесс электронного обмена между центрами **[Sn]⁰** и **[Sn]⁺²** протекает значительно более медленно, чем в **PbSe**. Для объяснения этого явления следует иметь в виду, что скорость электронного обмена контролируется состояниями в валентной зоне и очевидно, в **PbSe** этот процесс облегчается за счет того, что уровни **5S** электронов олова располагаются в валентной зоне. Наконец, если один из этапов перезарядки центров олова связан с захватом дырки, то наиболее благоприятные условия для обмена реализуются в **PbSe** поскольку для этого материала концентрация дырок значительно выше, чем для **PbS**.

Литература

1. J. Hubbard. Proc. Roy. Soc. A277. 237 (1964).
2. В.Ф. Мастеров, Ф.С. Насрединов, П.П. Серегин Физика твердого тела, 37, 1265, 1995.
3. Н.Ю. Тураев, П.П. Серегин, Э.Ю. Тураев. Узб. физ. журнал, № 5, 20, 1991.
4. E.Yu.Turaev, P.P.Seregin, F.S. Nasredinov. Phys. Stat.sol. (b), 161, 287, 1991.