

08,09,12

Тонкая структура уровней и пьезоспектроскопия A^+ -центров в квантовых ямах GaAs/AlGaAs

© П.В. Петров¹, И.А. Кокурин^{1,2}, Ю.Л. Иванов¹, Г.Э. Цырлин^{3,4}, В.Е. Седов¹, Н.С. Аверкиев¹

¹ Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия

² Мордовский государственный университет им. Н.П. Огарева, Саранск, Россия

³ Санкт-Петербургский академический университет РАН, Санкт-Петербург, Россия

⁴ Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

E-mail: pavel.petrov@gmail.com

(Поступила в Редакцию 30 июня 2017 г.)

Представлено экспериментальное и теоретическое пьезоспектроскопическое исследование A^+ -центров в квантовых ямах GaAs/AlGaAs легированных бериллием. Экспериментально исследованы спектры линейно поляризованной фотолюминесценции в зависимости от приложенного одноосного давления. Построена модель A^+ -центра в квантовой яме в присутствии одноосной деформации в плоскости квантовой ямы. Получены аналитические выражения для энергии уровней, интенсивностей оптических переходов и поляризационного отношения. В рамках предложенной теории объясняется наблюдаемое в эксперименте изменение поляризационного отношения в зависимости от давления, а также сдвиг максимума линии в коротковолновую сторону.

Работа частично поддержана проектами РФФИ: теоретические расчеты выполнены в рамках проекта 17-12-01182 (И.А.К), обсуждения и сравнение с экспериментальными данными — проект 14-42-00015 (Н.С.А).

DOI: 10.21883/FTT.2018.02.45389.212

1. Введение

Нейтральный акцептор в кубических полупроводниках способен электростатически захватить дополнительную дырку и образовать твердотельный аналог отрицательно заряженного иона водорода [1]. Такой двухчастичный положительно заряженный комплекс принято называть A^+ -центром. В силу сложного строения валентной зоны и обменного взаимодействия дырок, тонкая структура уровней подобных центров имеет нетривиальный вид [2]. Размерное квантование частично снимает вырождение уровней энергии по сравнению с объемным материалом и упрощает тем самым исследование энергетической структуры центра. Пьезоспектроскопия является экспериментальным методом, способным исследовать относительный вклад волновых функций тяжелых и легких дырок в энергетические состояния комплекса. Метод состоит в том, что в определенном кристаллографическом направлении к образцу прикладывается давление, при этом исследуются спектральные и поляризационные характеристики фотолюминесценции (ФЛ) переходов, соответствующих определенным состояниям [3].

Исследование A^+ -центров в квантовых ямах (КЯ) имеет определенные преимущества перед объемными материалами. Одновременным легированием ям и барьеров достигается ситуация, когда в яме образуются термодинамически равновесные A^+ -центры [4], в отличие от

объемных полупроводников, где A^+ и D^- -центры всегда неравновесны [5]. В легированной подобным образом структуре основным каналом рекомбинации являются оптические переходы фотовозбужденных электронов на равновесные A^+ -центры [6]. Изучение спектральных и поляризационных свойств этого перехода позволяет реконструировать тонкую энергетическую структуру A^+ -центров в КЯ.

Теоретическая модель, используемая в настоящей работе, учитывает квантоворазмерное расщепление начального A^+ и конечного A^0 состояний, а также обменное взаимодействие двух дырок в начальном состоянии. В рекомбинации подобных многочастичных комплексов, таких как связанный на нейтральном акцепторе экситон, обычно принято учитывать обменное взаимодействие дырок с электроном [7,8]. В структурах с A^+ -центрами присутствуют случайные электростатические поля заряженных A^+ -центров в ямах и ионизованных акцепторов в барьерах. Электроны и дырки пространственно разделяются этими полями, вследствие чего обменное взаимодействие между ними подавляется, и им можно пренебречь в теоретическом описании.

В экспериментальной части работы исследовались спектры линейно поляризованной ФЛ оптических переходов электронов на A^+ -центры в образцах с легированными бериллием КЯ GaAs/AlGaAs в зависимости от приложенного давления при температуре $T = 4.2$ К. При этом наблюдалась спектральная зависимость поля-

ризационного отношения, а также сдвиг линии ФЛ в коротковолновую область. Полученные в экспериментах особенности ФЛ объяснены в рамках построенной модели.

2. Структура уровней A^+ -центра в квантовой яме при учете деформации

Рассмотрим задачу об уровнях энергии A^+ -центра в КЯ при наличии деформации, приложенной в плоскости структуры. Основное состояние одиночной локализованной дырки в рамках сферического приближения гамильтониана Латтинджера [9,10] принадлежит представлению Γ_8 и соответствует полному моменту $J = 3/2$. Учет тождественности частиц и обменного взаимодействия приводит к тому, что две локализованные дырки, входящие в A^+ -центр, описываются полным моментом $F = 0, 2$ [2]. Модельный гамильтониан обменного взаимодействия имеет стандартный вид

$$H^{ex} = -\Delta^{hh} \mathbf{J}_1 \cdot \mathbf{J}_2, \tag{1}$$

где \mathbf{J}_i ($i = 1, 2$) — момент i -й дырки ($J_1 = J_2 = 3/2$). Обменное взаимодействие между двумя дырками считается ферромагнитным, т.е. обменный параметр Δ^{hh} положителен.

Согласно общим правилам сложения моментов указанный оператор диагонализует к виду

$$\begin{aligned} H^{ex} &= -\frac{\Delta^{hh}}{2} [F(F+1) - J_1(J_1+1) - J_2(J_2+1)] \\ &= -\frac{\Delta^{hh}}{2} \left[F(F+1) - \frac{15}{2} \right], \end{aligned} \tag{2}$$

т.е. обменное взаимодействие снимает вырождение по величине полного момента, и уровни энергии, соответствующие моментам $F = 0, 2$ имеют вид

$$E_0 = \frac{15\Delta^{hh}}{4}, \quad E_2 = \frac{3\Delta^{hh}}{4}.$$

Волновые функции таких двухчастичных состояний определяются стандартным образом

$$|F, F_z\rangle = \Psi_{F_z}^F = \sum_{J_{1z}, J_{2z}} C_{J_{1z}J_{2z}}^{FF_z} \Psi_{J_{1z}}^{3/2} \Psi_{J_{2z}}^{3/2}, \tag{3}$$

где $C_{J_{1z}J_{2z}}^{FF_z}$ — коэффициенты Клебша–Гордана, $F = 0, 2$, а $F_z = 0$ и $F_z = 0, \pm 1, \pm 2$ соответственно, $J_{iz} = \pm 1/2, \pm 3/2$, индекс z соответствует проекции момента импульса на произвольно выбранную ось, в нашем случае — на направление роста.

Размерное квантование в КЯ дополнительно снимает вырождение, действуя на волновую функцию каждой из

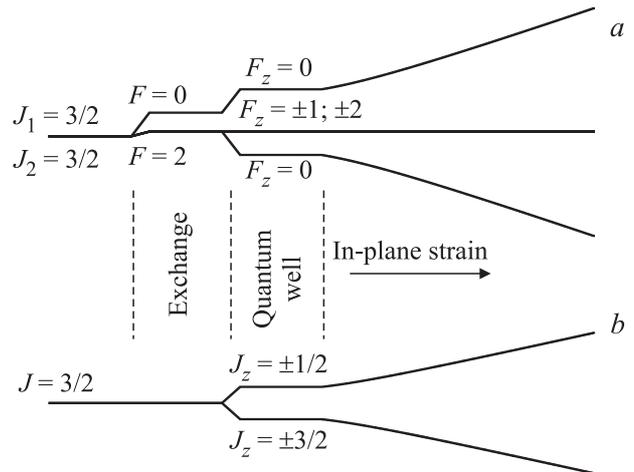


Рис. 1. Схема уровней: a — начального (A^+ -центр) и b — конечного (нейтральный акцептор A^0) состояния при последовательном учете обменного взаимодействия дырка–дырка, эффекта размерного квантования и деформации в плоскости КЯ.

дырок в (3) с помощью оператора

$$H^{qw} = \frac{\Delta^{qw}}{2} \left(J_{1z}^2 + J_{2z}^2 - \frac{5}{2} \right), \tag{4}$$

где считаем $\Delta^{qw} < 0$, так чтобы при действии оператора на одиночную дырку состояния $J_z = \pm 3/2$ оказывались ниже по энергии, чем $J_z = \pm 1/2$.

В базисе состояний $|F, F_z\rangle$ отличным от нуля оказывается единственный матричный элемент оператора (4)

$$\langle 0, 0 | H^{qw} | 2, 0 \rangle = \Delta^{qw},$$

что приводит к перемешиванию указанных состояний и дополнительному расщеплению (см. рис. 1, a).

Так как при построении комплекса A^+ использовалось сферическое приближение гамильтониана Латтинджера [9,10], то будет излишним использовать при учете влияния деформации на дырочные состояния полный гамильтониан Бира–Пикуса [11]. Здесь мы ограничимся также изотропным случаем, т.е. не будем учитывать кубическую симметрию кристалла. В этом приближении запишем оператор, учитывающий влияние деформации по оси x на каждую из дырок комплекса в следующем виде

$$H^{st} = \frac{\delta}{2} \left(J_{1x}^2 + J_{2x}^2 - \frac{5}{2} \right), \tag{5}$$

где параметр δ пропорционален приложенному давлению. Поскольку по симметрии гамильтонианы Латтинджера и Бира–Пикуса эквивалентны, а для первого из них считается, что изотропное приближение ведет себя наилучшим образом при следующем усреднении параметров $\gamma_2 = \gamma_3 \rightarrow \bar{\gamma} = (2\gamma_2 + 3\gamma_3)/5$ (см., например, [12]), то для изотропного гамильтониана Бира–Пикуса, действующего одинаково на обе дырки в ком-

плексе A^+ получим (5) с параметром δ вида

$$\delta = \frac{P}{5} \left(\frac{4b'}{C_{11} - C_{12}} + \frac{\sqrt{3}d'}{C_{44}} \right), \quad (6)$$

где P — давление приложенное к образцу, C_{11} , C_{12} , C_{44} — отличные от нуля упругие константы кубических кристаллов, b' , d' — деформационные потенциалы, определяющие расщепление связанной дырки. Сдвиг системы уровней как целого, связанный с деформационным потенциалом a' в гамильтониане (5) не учитывается, но будет учтен вместе со сдвигом электронного уровня за счет деформации при нахождении положения линии ФЛ, соответствующей рекомбинации электрона с одной из дырок A^+ -центра.

Найдем теперь собственные значения и собственные векторы полного гамильтониана $H = H^{ex} + H^{qw} + H^{st}$, последовательно учитывающего обменное взаимодействие между дырками, размерное квантование и влияние деформации в плоскости КЯ. В базисе $|F, F_z\rangle$ отличны от нуля следующие матричные элементы оператора H^{st}

$$\langle 0, 0 | H^{st} | 2, 0 \rangle = -\frac{\delta}{2}, \quad \langle 0, 0 | H^{st} | 2, \pm 2 \rangle = \frac{\delta\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}.$$

Тогда окончательно, полный гамильтониан, записанный в базисе $|0, 0\rangle$, $|2, 2\rangle$, $|2, 1\rangle$, $|2, 0\rangle$, $|2, -1\rangle$, $|2, -2\rangle$ имеет вид,

$$H = \begin{pmatrix} \frac{15}{4}\Delta^{hh} & \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}\delta & 0 & \Delta^{qw} - \frac{\delta}{2} & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}\delta \\ \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}\delta & \frac{3}{4}\Delta^{hh} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{3}{4}\Delta^{hh} & 0 & 0 & 0 \\ \Delta^{qw} - \frac{\delta}{2} & 0 & 0 & \frac{3}{4}\Delta^{hh} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{3}{4}\Delta^{hh} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}\delta & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{3}{4}\Delta^{hh} \end{pmatrix}. \quad (7)$$

Видно, что энергии состояний $|2, \pm 1\rangle$ не меняются под действием размерного квантования и деформации ($E_{2,\pm 1} = 3\Delta^{hh}/4$). Кроме того, в оставшемся гамильтониане размера 4×4 при помощи унитарного преобразования, переводящего две базисные функции $|2, \pm 2\rangle$ в

$$|2, \pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|2, 2\rangle \pm |2, -2\rangle)$$

можно отделить состояние $|2, -\rangle$ с энергией $E_{2,-} = 3\Delta^{hh}/4$, после чего в оставшемся базисе $|0, 0\rangle$, $|2, 0\rangle$ и $|2, +\rangle$ гамильтониан размерности 3×3 будет иметь вид

$$H_{3 \times 3} = \begin{pmatrix} \frac{15}{4}\Delta^{hh} & \Delta^{qw} - \frac{\delta}{2} & \frac{\sqrt{3}\delta}{2} \\ \delta^{qw} - \frac{\delta}{2} & \frac{3}{4}\Delta^{hh} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}\delta}{2} & 0 & \frac{3}{4}\Delta^{hh} \end{pmatrix}. \quad (8)$$

Данный гамильтониан удастся диагонализировать аналитически:

$$E_1^i = \frac{9}{4}\Delta^{hh} - \sqrt{\left(\frac{3}{2}\Delta^{hh}\right)^2 + \left(\Delta^{qw} - \frac{\delta}{2}\right)^2 + \frac{3}{4}\delta^2}, \quad (9)$$

$$E_2^i = \frac{3}{4}\Delta^{hh}, \quad (10)$$

$$E_3^i = \frac{9}{4}\Delta^{hh} + \sqrt{\left(\frac{3}{2}\Delta^{hh}\right)^2 + \left(\Delta^{qw} - \frac{\delta}{2}\right)^2 + \frac{3}{4}\delta^2}. \quad (11)$$

Соответствующие собственные векторы (их компоненты есть коэффициенты разложения по указанному базису) имеют вид

$$\mathbf{a}_1^i = \begin{pmatrix} \sin \frac{\phi}{2} \\ \cos \theta \cos \frac{\phi}{2} \\ -\sin \theta \cos \frac{\phi}{2} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{a}_2^i = \begin{pmatrix} 0 \\ \sin \theta \\ \cos \theta \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{a}_3^i = \begin{pmatrix} \cos \frac{\phi}{2} \\ -\cos \theta \sin \frac{\phi}{2} \\ \sin \theta \sin \frac{\phi}{2} \end{pmatrix}, \quad (12)$$

где

$$\text{tg } \theta = -\frac{\sqrt{3}\delta/2}{\Delta^{qw} - \delta/2},$$

$$\text{ctg } \phi = \frac{3\Delta^{hh}/2}{\sqrt{(\Delta^{qw} - \delta/2)^2 + 3\delta^2/4}}.$$

Эволюция уровней A^+ -центра при последовательном действии обменного взаимодействия, размерного квантования и давления в плоскости КЯ приведена на рис. 1, а.

Кроме того, так как мы будем исследовать рекомбинацию электрона на A^+ -центр, то нам необходимо учесть влияние размерного квантования и деформации на остающийся в конечном состоянии нейтральный акцептор A^0 . Здесь в силу разной пространственной протяженности дырочных состояний в A^+ и A^0 формально следует взять параметры квантоворазмерного и деформационного расщеплений, отличные от Δ^{qw} и δ . Подействуем на 4-хкратно вырожденное состояние нейтрального акцептора A^0 ($J = 3/2$) [9] следующим оператором

$$H_{A^0} = \frac{\Delta^{qw'}}{2} \left(J_z^2 - \frac{5}{4} \right) + \frac{\delta'}{2} \left(J_x^2 - \frac{5}{4} \right), \quad (13)$$

описывающим эффект размерного квантования и деформации в плоскости КЯ.

Такой оператор попарно смешивает состояния $J_z = 3/2, -1/2$ и $J_z = -3/2, 1/2$, т.е. гамильтониан распадается на два блока размера 2×2 , описывающих кramerсово-сопряженные состояния

$$H_{2 \times 2} = \begin{pmatrix} \frac{\Delta^{qw'}}{2} - \frac{\delta'}{4} & \frac{\sqrt{3}\delta'}{4} \\ \frac{\sqrt{3}\delta'}{4} & -\frac{\Delta^{qw'}}{2} + \frac{\delta'}{4} \end{pmatrix}, \quad (14)$$

которые в свою очередь легко диагонализуются. Уровни энергии конечного состояния и соответствующие собственные векторы имеют вид

$$E_{1,2}^f = \mp \sqrt{\left(\frac{\Delta^{qw'}}{2} - \frac{\delta'}{4}\right)^2 + \frac{3\delta'^2}{16}}, \quad (15)$$

$$\mathbf{a}_1^f = \begin{pmatrix} \cos \frac{\phi}{2} \\ -\sin \frac{\phi}{2} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{a}_2^f = \begin{pmatrix} \sin \frac{\phi}{2} \\ \cos \frac{\phi}{2} \end{pmatrix}, \quad (16)$$

где

$$\operatorname{tg} \varphi = -\frac{\sqrt{3}\delta'/2}{\Delta^{qw'} - \delta'/2}.$$

Эволюция уровней энергии нейтрального акцептора A^0 за счет размерного квантования и деформации в плоскости КЯ приведена на рис. 1, *b*.

3. Эксперимент

Экспериментальная часть работы состояла в исследовании спектров линейно поляризованной ФЛ оптического перехода электрон- A^+ -центр в КЯ GaAs/AlGaAs в зависимости от приложенного давления. Исследованные образцы изготавливались из эпитаксиальной структуры, выращенной методом молекулярно-пучковой эпитаксии на подложке GaAs в направлении $[001]$. На подложке последовательно выращивался буферный слой GaAs толщиной 250 nm, барьер 100 nm $Al_{0.35}Ga_{0.65}As$, далее были выращены 20 периодов КЯ/барьер с толщинами 13 и 20 nm соответственно. Для получения термодинамически равновесных A^+ состояний барьеры и ямы легировались примесью бериллия: в центрах ям легировался слой 2 nm с концентрацией 10^{17} cm^{-3} , центры барьеров легировались при той же температуре источника бериллия в слой шириной 3.1 nm. Параметры легирования были выбраны с учетом известных скоростей роста барьеров и ям таким образом, чтобы обеспечить поверхностную концентрацию A^+ -центров в ямах на уровне $2 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$. Последний барьер структуры шириной 200 nm был закрыт 20 nm слоем GaAs для предотвращения окисления поверхности. Образец представлял собой параллелепипед со сторонами $0.3 \times 2.0 \times 10 \text{ mm}$ ориентированный по направлению $[110]$ вдоль длинной стороны. Давление прикладывалось вдоль направления $[110]$, ФЛ измерялась вдоль направления $[001]$. Возбуждение ФЛ производилось полупроводниковым лазером с длиной волны 660 nm. Для регистрации спектров ФЛ использовался монохроматор ДФС-12, оборудованный фотоумножителем ФЭУ-62, работающим в режиме счета фотонов. Для повышения отношения сигнал/шум поляризация ФЛ-излучения модулировалась посредством ячейки Поккельса с частотой 180 Гц. В процессе измерений образец был погружен в жидкий гелий, температура 4.2 К.

На рис. 2 приведены спектры линейно поляризованной ФЛ и спектральная зависимость поляризационного отношения линии перехода фотовозбужденного электрона на A^+ -центр, измеренные при давлении $1417 \text{ kg} \cdot \text{cm}^{-2}$. Интенсивности ФЛ, линейно поляризованной вдоль оси деформации и поперк нее в плоскости КЯ обозначены I_{\parallel} и I_{\perp} соответственно, поляризационное отношение $r = I_{\parallel}/I_{\perp}$. Хорошо видна неоднородность поляризационного отношения по спектру: r уменьшается с ростом энергии фотона. Для детального описания зависимости от давления поляризационное отношение усреднялось по трем энергетическим интервалам шириной 2 meV,

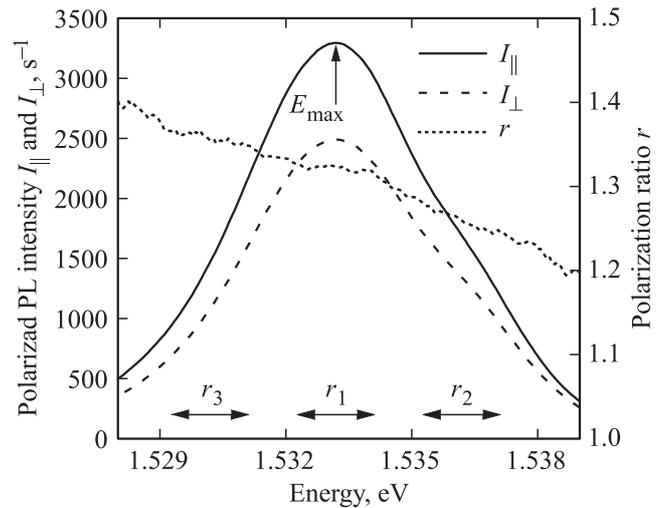


Рис. 2. Спектры поляризованной ФЛ перехода фотовозбужденного электрона на A^+ -центр. Двойными стрелками r_1 , r_2 и r_3 показаны интервалы усреднения поляризационного отношения. Давление $P = 1417 \text{ kg} \cdot \text{cm}^{-2}$, положение максимума ФЛ $E_{\text{max}} = 1.5332 \text{ eV}$.

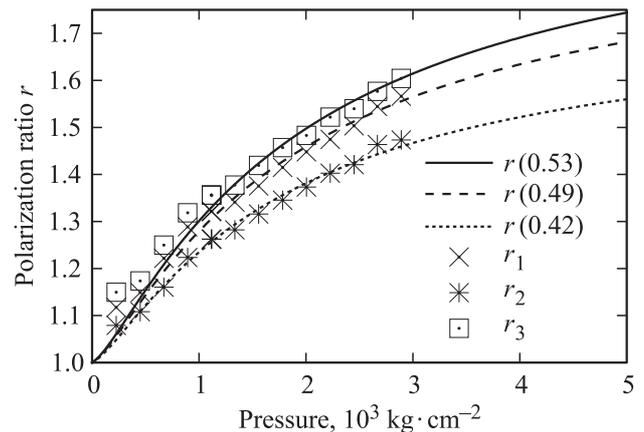


Рис. 3. Зависимость измеренных поляризационных отношений усредненных по спектральным интервалам r_1 , r_2 и r_3 от давления. Теоретические кривые построены с помощью формулы (19) для значений параметра g , указанных на рисунке в скобках. При подгонке $r(g)$ использовались следующие значения квантоворазмерного расщепления начального и конечного состояний и обменного параметра: $\Delta^{qw} = -7 \text{ meV}$, $\Delta^{qw'} = -1 \text{ meV}$, $\Delta^{hh} = 1.0 \text{ meV}$.

расположенным в максимуме линии (r_1) и на расстоянии 3 meV справа (r_2) и слева (r_3) от максимума. Полученные зависимости поляризационных отношений от приложенного к образцу давления приведены на рис. 3. Подробное обсуждение результатов, приведенных на рис. 2 и 3, будет проведено в следующем разделе.

Экспериментальная зависимость энергетического сдвига положения максимума линии от давления приведена на рис. 4 как для продольной, так и для поперечных поляризаций. Видно, что энергетический

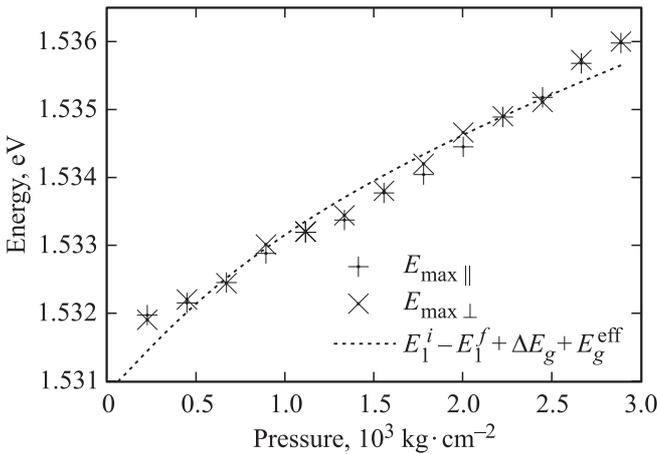


Рис. 4. Зависимость энергетического положения максимума линии ФЛ перехода электрона на A^+ -центр в зависимости от величины приложенного давления. $E_{\max \parallel}$ и $E_{\max \perp}$ — энергии максимумов ФЛ, измеренной для каждого из направлений поляризации. При подгонке теоретической кривой использовались те же самые величины параметров Δ^{qw} , $\Delta^{qw'}$ и Δ^{hh} , что и на рис. 3. Параметр $a' = -8.6$ eV.

сдвиг ФЛ с увеличением давления близок к линейному, а положение максимумов для продольной и поперечной поляризации с хорошей точностью совпадают.

4. Обсуждение результатов

Расщепление между основным и первым возбужденным состоянием A^+ -центра (даже в отсутствие деформации) для типичных параметров КЯ и обменного взаимодействия составляет несколько meV, поэтому при гелиевых температурах можно учитывать рекомбинацию дырок A^+ -центра только в основном состоянии. С ростом деформации расщепление дополнительно увеличивается (см. рис. 1, а). Рассмотрим интенсивности переходов из основного состояния A^+ -центра с энергией E_1^i в два конечных состояния A^0 с энергиями $E_{1,2}^f$. Учитывая, что интенсивность ФЛ, поляризованной вдоль направления деформации I_{\parallel} и перпендикулярно ему I_{\perp} есть

$$I_{\parallel(\perp)}^{1(2)} \propto \sum_{s=\uparrow, \downarrow} \sum_{j=1,2(3,4)} |\langle s, \Psi_1^i | p_{x(y)} | \Psi_j^f \rangle|^2,$$

где p_j — оператор проекции импульса ($j = x, y$), можно найти поляризационное отношение каждой из линий в спектре ФЛ

$$r^i = \frac{I_{\parallel}^i}{I_{\perp}^i}, \quad i = 1, 2. \quad (17)$$

Здесь Ψ_1^i — волновая функция начального состояния, Ψ_j^f ($j = 1, 2$) крамеровско-сопряженная пара состояний, соответствующая уровню с энергией E_1^f , а Ψ_j^f ($j = 3, 4$) соответствуют уровню E_2^f .

Легко показать, что интенсивность рекомбинации, оставляющей в конечном состоянии нейтральный акцептор в возбужденном состоянии I^2 примерно на порядок слабее, чем интенсивность I^1 с основным конечным состоянием. Для простоты оценок будем считать, что квантоворазмерное и деформационное расщепление начального и конечного состояний описывается одними и теми же параметрами, а также полагать интегралы перекрытия равными 1 (оценка снизу, так как явный учет изменения интенсивностей переходов за счет интегралов перекрытия приводит к дополнительному росту вероятности переходов с участием дырочных состояний с $J_z = \pm 3/2$ по сравнению с $J_z = \pm 1/2$). В этом случае отношение интенсивностей линий, отличающихся конечным состоянием $E_{1,2}^f$ есть

$$\left(\frac{I^1}{I^2}\right)_0 = \frac{3(\sqrt{4(\Delta^{qw})^2 + 9(\Delta^{hh})^2} + 2|\Delta^{qw}|)}{(\sqrt{4(\Delta^{qw})^2 + 9(\Delta^{hh})^2} - 2|\Delta^{qw}|)}, \quad (18)$$

что при $|\Delta^{qw}| \sim \Delta^{hh}$ дает оценку $(I^1/I^2)_0 \sim 10$. Эта величина растет с уменьшением Δ^{hh} . С ростом деформации соотношение между интенсивностями линий возрастает. В соответствии с этим далее рассматриваем только переход с участием основного состояния A^0 .

Принимая во внимание правила отбора для межзонной рекомбинации и учитывая интегралы перекрытия, которые в модели бесконечно глубокой КЯ (такое приближение хорошо выполняется для электронов зоны проводимости в КЯ шириной 13 nm, а акцепторы, расположенные в центре такой КЯ с большой точностью могут быть описаны как объемные) могут быть выражены через Фурье-образы радиальных огибающих дырки на акцепторе [13], получим для интенсивностей при рекомбинации электрона со дна основной подзоны

$$I_{\parallel(\perp)}^1 \propto \left(-\sin \frac{\phi}{2} \cos \frac{\varphi}{2} \mp \sin \frac{\phi}{2} \sin \frac{\varphi}{2} \frac{g}{\sqrt{3}} - \cos \theta \cos \frac{\phi}{2} \cos \frac{\varphi}{2} \pm \cos \theta \cos \frac{\phi}{2} \sin \frac{\varphi}{2} \frac{g}{\sqrt{3}} - \sin \theta \cos \frac{\phi}{2} \sin \frac{\varphi}{2} \mp \sin \theta \cos \frac{\phi}{2} \cos \frac{\varphi}{2} \frac{g}{\sqrt{3}} \right)^2, \quad (19)$$

где Фурье-образы радиальных огибающих $R^{\pm}(k) = R_0(k) \pm R_2(k)$ определяют параметр $g = R^-(k_0)/R^+(k_0)$, $k_0 = \pi/w$, w — ширина КЯ. В отсутствие деформации $\delta, \delta' \rightarrow 0$, а значит $\theta, \varphi \rightarrow 0$, откуда следует, что поляризационное отношение равно единице, поскольку нет взаимодействия, которое бы обеспечивало анизотропию в плоскости КЯ.

В предположении, что эффект КЯ и деформация действуют одинаково на дырки в начальном и конечном состоянии, т.е. $\delta = \delta'$, $\Delta^{qw} = \Delta^{qw'}$ (что приводит к $\theta = \varphi$) получим достаточно простую формулу для поляризационного отношения

$$r^1 = \frac{\left(1 + \frac{g}{\sqrt{3}} \operatorname{tg} \frac{\varphi}{2}\right)^2}{\left(1 - \frac{g}{\sqrt{3}} \operatorname{tg} \frac{\varphi}{2}\right)^2}. \quad (20)$$

Отметим, что такой же результат получается для поляризационного отношения перехода $e - A^0$ с участием основного состояния нейтрального акцептора.

Если теперь разложить это выражение по малости $\delta/|\Delta^{qw}|$, то при $\delta \rightarrow 0$ получим

$$r_0^1 = 1 + \frac{3g\delta}{|\Delta^{qw}|}, \quad (21)$$

а в области сильных деформаций ($\delta \rightarrow \infty$)

$$r_\infty^1 = \frac{(1 + g/3)^2}{(1 - g/3)^2}, \quad (22)$$

что при $g = 1$ приводит к известному результату $r = 4$ для поляризационного отношения при рекомбинации свободных носителей. Таким образом, подгонка зависимости $r(P)$ является двухпараметрической: параметр g определяет величину r в насыщении, а $g/|\Delta^{qw}|$ наклон кривой при малых деформациях.

Для простых оценок параметра g используем модель потенциала нулевого радиуса [14], в рамках которой зависимости $R_0(k)$, $R_2(k)$ могут быть найдены аналитически [15].

$$R_{0,2}(k) = C \left(\frac{1}{|E^*| + E_{hh}(k)} \pm \frac{1}{|E^*| + E_{lh}(k)} \right). \quad (23)$$

Здесь E^* — энергия связи акцептора, $E_{lh(hh)}(k)$ — энергия легкой (тяжелой) дырки, C — нормировочная константа. В этом случае параметр g определяется выражением

$$g = \frac{|E^*| + E_{hh}(k_0)}{|E^*| + E_{lh}(k_0)}. \quad (24)$$

Используя значения энергии ионизации акцептора $|E^*| = 20$ meV, ширины КЯ $w = 13$ nm, масс легкой и тяжелой дырок $m_{lh} = 0.085m_0$, $m_{hh} = 0.51m_0$, получим $g = 0.53$, что приведет к значительному уменьшению поляризационного отношения. Поскольку для мелкого кулоновского центра величины R_0 , R_2 , а с ними и параметр g могут быть найдены только численно, то далее будем просто рассматривать g в качестве подгоночного параметра.

Экспериментальные данные [16] (поведение диамагнитного сдвига линии в магнитном поле) указывают на то, что в рекомбинации участвуют локализованные электроны. Наиболее вероятной причиной локализации являются флуктуации потенциала случайно расположенных заряженных центров. С точки зрения теории существенным отличием в случае локализованных носителей является ориентационная зависимость интенсивностей ФЛ и поляризационного отношения, т.е. поляризация ФЛ зависит от угла ориентации между направлением от дырки к электрону и осью деформации. Для использованных в эксперименте значений концентрации примесей и с учетом того, что образцы были легированы по центру КЯ легко видеть, что наибольший вклад в интегралы перекрытия дают экспоненциальные хвосты электронных и дырочных огибающих в плоскости КЯ. Для

оценок здесь мы снова используем метод потенциалов нулевого радиуса применительно как к локализованной дырке, так и к электрону. Усредненные по направлениям в плоскости КЯ интенсивности поляризованной ФЛ и поляризационное отношение демонстрируют уменьшение с ростом расстояния между участвующими в рекомбинации локализованными носителями. В то же время, в отличие от случая рекомбинации свободного электрона на акцептор, здесь нельзя последовательно строго ввести параметр подгонки аналогичный параметру g , поскольку последний будет являться функцией расстояния между рекомбинирующими носителями. Интегральный (усредненный по R) параметр g тоже не совсем пригоден, поскольку из-за кулоновского взаимодействия положение линии зависит от расстояния R и обеспечивает неоднородное уширение. Тем не менее подгонка с одним единственным параметром является вполне удовлетворительной и избавляет от сложной многопараметрической теории.

Подгонка с использованием различных параметров g приведена на рис. 3. Следует отметить, что без учета перенормировки поляризационного отношения, связанной с параметром g , невозможно объяснить значительное уменьшение наблюдаемого в эксперименте поляризационного отношения по сравнению с межзонными переходами в КЯ [3] при использовании разумных величин деформационных потенциалов и квантоворазмерных расщеплений.

Если считать, что неоднородное уширение линии ФЛ связано с разбросом по относительному положению рекомбинирующих носителей, то можно применить следующие рассуждения для объяснения экспериментальной зависимости поляризационного отношения по спектру. С ростом расстояния между частицами R параметр g убывает, а значит убывает и поляризационное отношение. В то же время, с увеличением R возрастает и энергия перехода, так как аналогично донорно-акцепторной рекомбинации, энергия кванта зависит и от кулоновского слагаемого $-e^2/R$. Таким образом, зависимость поляризационного отношения по ширине линии такова, что поляризационное отношение убывает к высокоэнергетическому краю, что качественно совпадает с экспериментальными данными.

Положение линии определяется из условия

$$\hbar\omega = E_1^i - E_1^f + \Delta E_g + E_g^{eff}, \quad (25)$$

где E_g^{eff} — эффективная ширина запрещенной зоны, включающая энергии связи A^0 - и A^+ -центров, энергию кулоновского взаимодействия локализованного электрона и дырки на A^+ -центре $-e^2/R$, ширину запрещенной зоны объемного материала и квантоворазмерные сдвиги электронов и дырок. Гидростатическая часть сдвига линии с давлением определяется формулой

$$\Delta E_g = -a'P/(C_{11} + 2C_{12}).$$

На рис. 4 приведены экспериментальная и теоретическая зависимости положения линии ФЛ перехода

$e - A^+$ от приложенного давления. Некоторое расхождение может быть объяснено тем, что входящие в E_g^{eff} энергии ионизации A^0 - и A^+ -центров могут зависеть от приложенного давления более сложным образом, чем линейная зависимость определяемая деформационным потенциалом a' подобно тому, как это имеет место для свободных дырок вблизи вершины валентной зоны Γ_8 .

Обсудим величины использованных при подгонке параметров. Для расчета сдвига линии необходимо знать константу деформационного потенциала a' , отвечающую за сдвиг уровней как целого. В качестве первого приближения нами использовалось значение $a' = -8.6$ eV, взятое из работы [17]. В этой работе исследовался дефект меди в объемном GaAs, так же как и A^+ -центр, состоящий из двух обменно-взаимодействующих дырок. Найденное в ней значение a' учитывало сдвиги как начального, так и конечного состояний.

Деформационные потенциалы акцептора b' , d' в первом приближении соотносятся с соответствующими величинами b , d для свободной дырки, как расщепление состояний связанной дырки Δ^{qw} за счет размерного квантования с расщеплением между подзонами тяжелой и легкой дырок $\Delta^{lh} < 0$

$$\gamma = \frac{\Delta^{qw}}{\Delta^{lh}} = \frac{b'}{b} = \frac{d'}{d} = \frac{1}{5} \left(8 \int_0^\infty dr r^2 R_0^2(r) - 3 \right), \quad (26)$$

где $R_0(r)$ — радиальная огибающая для локализованной дырки в сферическом приближении с орбитальным моментом $l = 0$ [9]. Отметим, что похожее соотношение для деформационных потенциалов было получено ранее в работе [18]. Согласно экспериментальным данным по люминесценции объемного GaAs [19] перенормировка деформационных потенциалов для мелких акцепторов не слишком велика и γ в (26) составляет 0.56–0.88 в зависимости от преобладающего типа легирования.

Для сравнения найдем перенормировку деформационных потенциалов и квантоворазмерного расщепления для акцептора, описываемого потенциалом нулевого радиуса. В этом случае радиальные волновые функции могут быть найдены аналитически [20,21], что позволяет найти параметр γ в явном виде

$$\gamma = \frac{1}{5} \left[1 + \frac{16\beta}{(\beta^{3/2} + 1)(\beta^{1/2} + 1)} \right], \quad (27)$$

где $\beta = m_{lh}/m_{hh}$ — отношение масс легкой и тяжелой дырок. Формула (27) дает монотонное изменение γ от 0.2 до 1.0 при $\beta \rightarrow 0$ и $\beta \rightarrow 1$ соответственно. В случае мелкого кулоновского центра, рассчитанного вариационным методом, в обоих предельных случаях получается тот же результат [2], но при конечных β перенормировка отличается. Для характерных значений эффективных масс в GaAs $\beta = 0.17$ получим согласно (27) $b'/b = d'/d = 0.56$, что может служить в качестве оценки нижней границы параметра γ как для A^0 , так и для A^+ -состояний.

Для A^+ -центров перенормировка должна быть меньше, в силу большего радиуса локализации. Поэтому, для подгонки поляризационного отношения нами применялись деформационные потенциалы свободных носителей валентной зоны $b' = -1.96$ eV, $d' = -5.4$ eV [19]. Это не противоречит сделанным выше оценкам констант деформационного потенциала b' и d' : ключевым является выполнение условия $0.56 < \gamma < 1$. Мы использовали величины упругих констант GaAs, полученные в работе [22] и равные $C_{11} = 11.76$, $C_{12} = 5.27$, $C_{44} = 5.96$ в единицах 10^{11} dyn/cm².

5. Заключение

Экспериментально и теоретически исследованы спектры поляризованной ФЛ излучательной рекомбинации электрона с A^+ -центром в зависимости от приложенного давления в КЯ GaAs/AlGaAs. В эксперименте наблюдались два основных отличия поляризационных свойств ФЛ при приложении давления к образцу от свойств обычных межзонных переходов [3] в КЯ GaAs/AlGaAs. Поляризационное отношение уменьшилось по величине, а также появилась неоднородность его по спектру. Для объяснения наблюдаемых особенностей была построена теоретическая модель A^+ -центра в КЯ в условиях одноосной деформации в плоскости КЯ. Получены аналитические выражения для энергии уровней, интенсивности переходов и их поляризации. Расчеты хорошо описывают экспериментальные зависимости поляризационного отношения ФЛ и энергетического сдвига максимума линии от давления. Наблюдаемое уменьшение поляризационного отношения ФЛ по сравнению с межзонными переходами объясняется в рамках модели тем, что в КЯ при рекомбинации электрона на локализованные состояния дырок изменяется относительный вклад легких и тяжелых дырок в интенсивность перехода. Неоднородность поляризационного отношения по спектру также объясняется перенормировкой, связанной с пространственно непрямой рекомбинацией носителей заряда при наличии кулоновских флуктуаций. При этом переходы с разным расстоянием между локализованными носителями заряда имеют разную энергию излучаемого кванта и различное поляризационное отношение.

Список литературы

- [1] Н. Bethe. Z. Phys. **57**, 815 (1929).
- [2] Н.С. Аверкиев, А.В. Родина. ФТТ **35**, 1051 (1993).
- [3] Н.С. Аверкиев, Ю.Л. Ива́нов, А.А. Красивичев, П.В. Петров, Н.И. Саблина, В.Е. Седов. ФТП **42**, 322 (2008).
- [4] П.В. Петров, Ю.Л. Ива́нов, Н.С. Аверкиев. ФНТ **41**, 119 (2015).
- [5] Е.М. Гершензон, А.П. Мельников, Р.И. Рабинович, Н.А. Серебрякова. УФН **132**, 353 (1980).
- [6] Ю.Л. Ива́нов, Н.В. Агринская, П.В. Петров, В.М. Устинов, Г.Э. Цырлин. ФТП **36**, 993 (2002).
- [7] М. Schmidt, T.N. Morgan, W. Schairer. Phys. Rev. B **11**, 5002 (1975).

- [8] P.V. Petrov, I.A. Kokurin, G.V. Klimko, S.V. Ivanov, Yu.L. Ivánov, P.M. Koenraad, A.Yu. Silov, N.S. Averkiev. *Phys. Rev. B* **94**, 115307 (2016).
- [9] Б.Л. Гельмонт, М.И. Дьяконов. *ФТП* **5**, 2191 (1971).
- [10] A. Baldereschi, N.O. Lipari. *Phys. Rev. B* **8**, 2697 (1973).
- [11] Г.Л. Бир, Г.Е. Пикус. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. Наука, М. (1972).
- [12] Б.И. Шкловский, А.Л. Эфрос. Электронные свойства легированных полупроводников. Наука, М. (1979).
- [13] И.А. Кокурин, П.В. Петров, Н.С. Аверкиев. *ФТП* **47**, 1244 (2013).
- [14] Ю.Н. Демков, В.Н. Островский. Метод потенциалов нулевого радиуса в атомной физике. Изд-во ЛГУ, Л. (1975).
- [15] A.M. Monakhov, K.S. Romanov, I.E. Panaiotti, N.S. Averkiev. *Solid State Commun.* **140**, 422 (2006).
- [16] П.В. Петров, Ю.Л. Ива́нов, Н.С. Аверкиев. *ФТП* **45**, 794 (2011).
- [17] Н.С. Аверкиев, З.А. Адамия, Д.И. Аладашвили, Т.К. Аширов, А.А. Гуткин, Е.Б. Осипов, В.Е. Седов. *ФТП* **21**, 421 (1987).
- [18] Ш.М. Коган, А.Ф. Полупанов. *ЖЭТФ* **80**, 394 (1981).
- [19] R.N. Bhargava, M.I. Nathan. *Phys. Rev.* **161**, 695 (1967).
- [20] Ю.Ф. Берковская, Е.М. Вахабова, Б.Л. Гельмонт, И.А. Меркулов. *ЖЭТФ* **94**, 183 (1988).
- [21] Н.С. Аверкиев, С.Ю. Ильинский. *ФТТ* **36**, 503 (1994).
- [22] Ю.А. Буренков, Ю.М. Бурдуков, С.Ю. Давыдов, С.П. Никаноров. *ФТТ* **15**, 1757 (1973).