

08,09,12

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

© П.В. Петров<sup>1</sup>, И.А. Кокурин<sup>1,2</sup>, Ю.Л. Иванов<sup>1</sup>, Г.Э. Цырлин<sup>3,4</sup>, В.Е. Седов<sup>1</sup>, Н.С. Аверкиев<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия

<sup>2</sup> Мордовский государственный университет им. Н.П. Огарева, Саранск, Россия

<sup>3</sup> Санкт-Петербургский академический университет РАН, Санкт-Петербург, Россия

<sup>4</sup> 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<sup>+</sup>-центра в квантовой яме при учете деформации

Рассмотрим задачу об уровнях энергии A<sup>+</sup>-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<sub>8</sub> и соответствует полному моменту J = 3/2. Учет тождественности частиц и обменного взаимодействия приводит к тому, что две локализованные дырки, входящие в A<sup>+</sup>-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 J<sub>i</sub> (i = 1, 2) — момент i-й дырки (J<sub>1</sub> = J<sub>2</sub> = 3/2). Обменное взаимодействие между двумя дырками считается ферромагнитным, т.е. обменный параметр Δ<sup>hh</sup> 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<sub>J<sub>1z</sub>J<sub>2z</sub></sub><sup>FF<sub>z</sub></sup> — коэффициенты Клебша–Гордана, F = 0, 2, а F<sub>z</sub> = 0 и F<sub>z</sub> = 0, ±1, ±2 соответственно, J<sub>iz</sub> = ±1/2, ±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

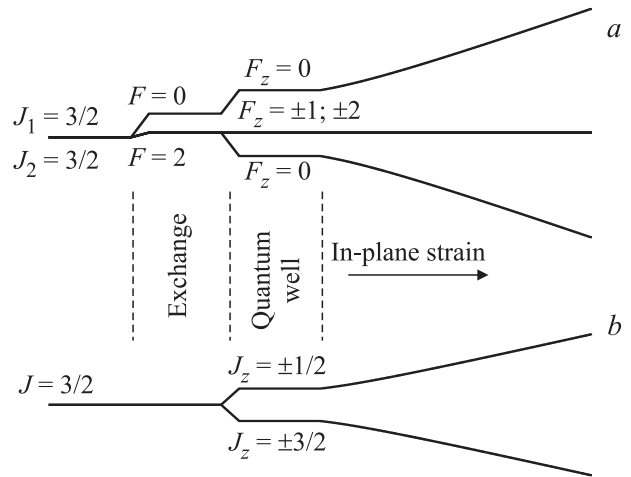


Рис. 1. Схема уровней: a — начального (A<sup>+</sup>-центр) и b — конечного (нейтральный акцептор A<sup>0</sup>) состояния при последовательном учете обменного взаимодействия дырка–дырка, эффекта размерного квантования и деформации в плоскости КЯ.

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 Δ<sup>qw</sup> < 0, так чтобы при действии оператора на одиночную дырку состояния J<sub>z</sub> = ±3/2 оказывались ниже по энергии, чем J<sub>z</sub> = ±1/2.

В базисе состояний |F, F<sub>z</sub>⟩ 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<sup>+</sup> 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 γ<sub>2</sub> = γ<sub>3</sub> → γ̄ = (2γ<sub>2</sub> + 3γ<sub>3</sub>)/5 (см., например, [12]), то для изотропного гамильтониана Бира–Пикуса, действующего одинаково на обе дырки в ком-

плексе  $A^+$  получим (5) с параметром  $\delta$  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  $4 \times 4$  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  $3 \times 3$  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  $\Delta^{qw}$  и  $\delta$ . 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  $2 \times 2$ , 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

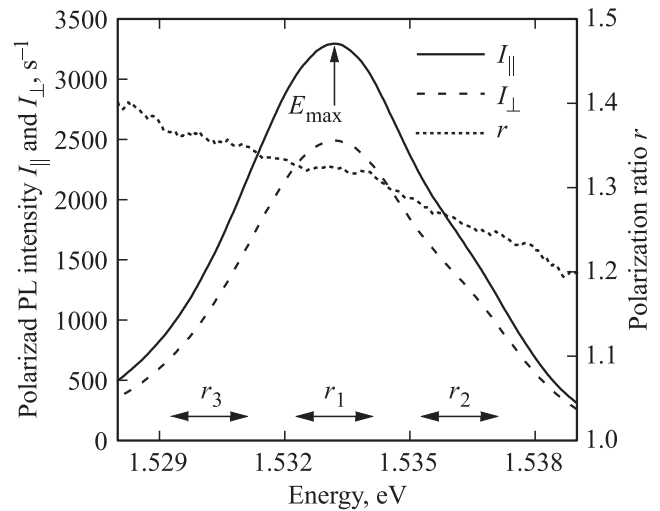
$$\operatorname{tg} \varphi = -\frac{\sqrt{3}\delta'/2}{\Delta^{qw'} - \delta'/2}.$$

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

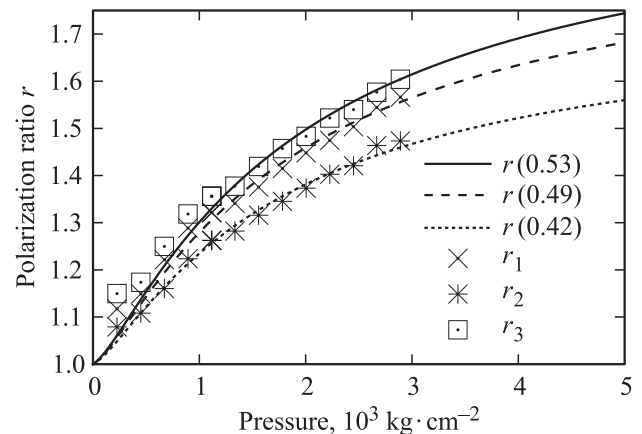
### 3. Эксперимент

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  $10^{17} \text{ cm}^{-3}$ , 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 поперек 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,



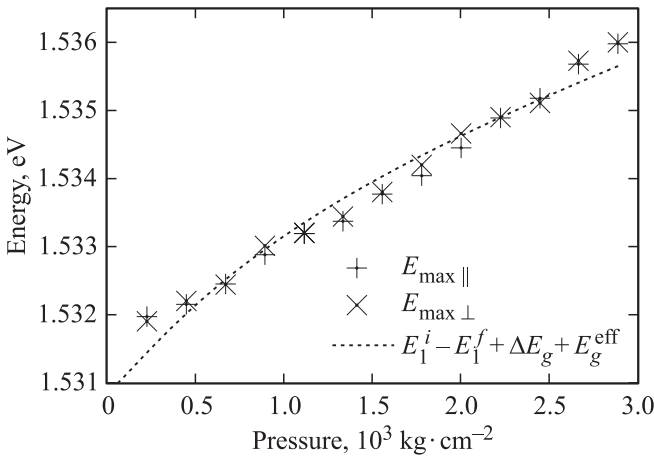
**Рис. 2.** Спектры поляризованной ФЛ перехода фотовозбужденного электрона на  $A^+$ -центр. Двойными стрелками  $r_1$ ,  $r_2$  и  $r_3$  показаны интервалы усреднения поляризационного отношения. Давление  $P = 1417 \text{ kg} \cdot \text{cm}^{-2}$ , положение максимума ФЛ  $E_{\text{max}} = 1.5332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



**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  $\Delta^{qw}$ ,  $\Delta^{qw'}$  и  $\Delta^{hh}$ , 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  $\Psi_1^i$  — волновая функция начального состояния,  $\Psi_j^f$  ( $j = 1, 2$ ) крамеровско-сопряженная пара состояний, соответствующая уровню с энергией  $E_1^f$ , а  $\Psi_j^f$  ( $j = 3, 4$ ) 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  $\Delta^{hh}$ . 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  $\Gamma_8$ .

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  $\Delta^{qw}$  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  $\gamma$  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  $\gamma$  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  $\gamma$  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  $\beta$  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  $\gamma$  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/cm<sup>2</sup>.

## 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).