

## К теории молекулярных состояний $A^+$ -центров в полупроводниковых квантовых ямах

В. Ч. Жуковский<sup>1,a</sup>, В. Д. Кревчик<sup>2,b</sup>, А. В. Левашов<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет, кафедра теоретической физики. Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2.

<sup>2</sup>Пензенский государственный университет. Россия, 440026, Пенза, ул. Красная, д. 40.

E-mail: <sup>a</sup>vlchzh@gmail.com, <sup>b</sup>physics@pnzgu.ru

Статья поступила 25.01.2011, подписана в печать 27.04.2011

В рамках модели потенциала нулевого радиуса рассчитаны спектры фотолюминесценции в квантовых ямах GaAs/AlGaAs с  $A_2^+$ -центрами. Показано, что модель  $A_2^+$ -центров в состоянии адекватно описать экспериментальные данные, свидетельствующие о существовании молекулярных состояний  $A^+$ -центров в 2D-структурах GaAs/AlGaAs.

**Ключевые слова:** молекулярное состояние акцепторных центров, квантовая яма, спектры фотолюминесценции, энергия связи, термы молекулярного иона.

УДК: 530.19. PACS: 78.67.De.

### Введение

Анализ экспериментальных данных, полученных в работе [1], позволяет сделать вывод о том, что в двумерных структурах GaAs/AlGaAs, содержащих  $A^+$ -центры, возможно существование молекулярных акцепторных состояний. Авторами [1] было выдвинуто предположение о том, что такими примесными молекулами могут стать два близко расположенных  $A^+$ -центра, связанных за счет поляронного эффекта [1]. Однако биполярное спаривание свободных носителей заряда в полярных полупроводниках возможно только при достаточной величине постоянной электрон-фононного взаимодействия  $\alpha$ . По теоретическим оценкам [2], наименьшее значение  $\alpha$ , при котором возможно образование стабильных пар в двумерной структуре, составляет  $\alpha = 2.9$ , что на порядок превышает величину  $\alpha$  в GaAs  $p$ -типа. В настоящей работе предложена иная точка зрения на возникновение молекулярных состояний в структурах, содержащих квантовые ямы (КЯ) GaAs/AlGaAs, которая заключается в том, что молекулярные состояния образуются  $A_2^+$ -центрами — двумя близко расположенными  $A^0$ -центрами, на которых локализована дырка.

### 1. Особенности энергетического спектра $A_2^+$ -центра в полупроводниковой квантовой яме

В настоящем разделе методом потенциала нулевого радиуса теоретически исследуются  $A_2^+$ -состояния в КЯ с потенциалом конфайнмента в виде прямоугольной потенциальной ямы с бесконечно высокими стенками.

Двухцентровый потенциал моделируется суперпозицией потенциалов нулевого радиуса мощностью  $\gamma_i = 2\pi\hbar^2/(\alpha_i m_h^*)$ ,  $i = 1, 2$  [3]:

$$V_\delta(\boldsymbol{\rho}, z, z_{a1}, z_{a2}) = \sum_{i=1}^2 \gamma_i \delta(\boldsymbol{\rho}) \delta(z - z_{ai}) \left[ 1 + \boldsymbol{\rho} \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\rho}} + (z - z_{ai}) \frac{\partial}{\partial z} \right],$$

где  $z_{ai}$  — координаты  $A^0$ -центров вдоль оси роста структуры;  $\alpha_i$  определяется энергией  $E_i$  дырочного

локализованного состояния на этих же  $A^+$ -центрах в объемном полупроводнике;  $m_h^*$  — эффективная масса дырки. При этом предполагается, что  $A^+$ -центры имеют одинаковые координаты в плоскости интерфейса  $\mathbf{r}_i = (\boldsymbol{\rho}, z_i)$ .

Волновая функция дырки  $\psi_\lambda(\boldsymbol{\rho}, z_{a1}, z_{a2})$ , локализованной на  $A_2^0$ -центре, удовлетворяет уравнению Липпмана–Швингера для связанного состояния [3]

$$\psi_\lambda(\boldsymbol{\rho}, z_{a1}, z_{a2}) = \int dz_1 G(\boldsymbol{\rho}, z, z_1; E_\lambda) V_\delta(\boldsymbol{\rho}, z_1, z_{a1}, z_{a2}) \psi_\lambda(\boldsymbol{\rho}, z_{a1}, z_{a2}),$$

где  $G(\boldsymbol{\rho}, z, z_1; E_\lambda)$  — однодырочная функция Грина, определяемая выражением

$$G(\boldsymbol{\rho}, z, z_1; E_\lambda) = -\frac{m_h^*}{\hbar^2 (2\pi)} \int_0^\infty \frac{dk k J_0(k\rho)}{\sqrt{\lambda^2 + k^2}} \times \\ \times \left( \text{ch}(\sqrt{\lambda^2 + k^2} (L - |z_1 - z|)) - \text{ch}(\sqrt{\lambda^2 + k^2} (L - |z_1 + z|)) \right) \times \\ \times \text{cosech} \left( L (\sqrt{\lambda^2 + k^2}) \right), \quad (1)$$

соответствующая источнику в точке с координатами  $\mathbf{r}_1 = (\boldsymbol{\rho}, z_1)$  и энергии  $E_\lambda = -\hbar^2 \lambda^2 / (2m_h^*)$ .

Подставляя двухцентровый потенциал в уравнение Липпмана–Швингера и принимая во внимание, что  $A^0$ -центры расположены на оси роста КЯ с координатами  $\mathbf{r}_i = (0, 0, z_i)$ , получим

$$\psi_\lambda(0, z, z_{a1}, z_{a2}) = \gamma_1 G(0, z, z_{a1}; E_\lambda) (\hat{T}_1 \psi_\lambda)(0, z_{a1}, z_{a1}, z_{a2}) + \\ + \gamma_2 G(0, z, z_{a2}; E_\lambda) (\hat{T}_2 \psi_\lambda)(0, z_{a2}, z_{a1}, z_{a2}), \quad (2)$$

где

$$(\hat{T}_i \psi_\lambda)(0, z_{ai}) = \lim_{\substack{\boldsymbol{\rho} \rightarrow 0, \\ z \rightarrow z_{ai}}} \left[ 1 + \boldsymbol{\rho} \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\rho}} + (z - z_{ai}) \frac{\partial}{\partial z} \right] \psi_\lambda(\boldsymbol{\rho}, z).$$

Применяя последовательно операцию  $\hat{T}_i$  к обеим частям соотношения (1), получим систему алгебраических уравнений вида

$$\begin{cases} c_{1n} = \gamma_1 a_{11} c_{1n} + \gamma_2 a_{12} c_{2n}, \\ c_{2n} = \gamma_1 a_{21} c_{1n} + \gamma_2 a_{22} c_{2n}, \end{cases} \quad (3)$$

где

$$\begin{aligned} c_1 &= (\hat{T}_1 \psi_\lambda)(0, z_{a1}, z_{a1}, z_{a2}), \\ c_2 &= (\hat{T}_2 \psi_\lambda)(0, z_{a2}, z_{a1}, z_{a2}), \\ a_{i,j} &= (\hat{T}_i \psi_A)(0, z_{ai}, z_{aj}; E_\lambda), \quad i, j = 1, 2. \end{aligned}$$

Исключив из системы (3) коэффициенты, содержащие неизвестную функцию, получим дисперсионное уравнение, определяющее зависимость энергии связанного состояния  $E_\lambda$  дырки, локализованной на  $A_2^0$ -центре, от координат  $A^0$ -центров и параметров КЯ:

$$\gamma_1 a_{11} + \gamma_2 a_{22} - 1 = \gamma_1 \gamma_2 (a_{11} a_{22} - a_{12} a_{21}). \quad (4)$$

В случае когда  $\gamma_1 = \gamma_2 = \gamma$ , уравнение (3) распадается на два уравнения, определяющие симметричное ( $g$ -терм) и антисимметричное ( $u$ -терм) состояния дырки соответственно:

$$\begin{aligned} \gamma a_{11} &= 1 - \gamma a_{12} \quad \text{при } c_1 = c_2, \\ \gamma a_{11} &= 1 + \gamma a_{12} \quad \text{при } c_1 = -c_2, \end{aligned} \quad (5)$$

Учитывая явный вид однодырочной функции Грина (1), а также учитывая, что  $a_{12}$  определяется как

$$\begin{aligned} a_{12} &= (\hat{T}_1 \psi_\lambda)(0, z, z_{a2}; E_\lambda) = \\ &= \lim_{\substack{\rho \rightarrow 0, \\ z \rightarrow z_{a1}}} \left[ 1 + \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + (z - z_{a1}) \frac{\partial}{\partial z} \right] G(\rho, z, z_{a2}; E_\lambda), \end{aligned} \quad (6)$$

и принимая во внимание, что

$$G(\rho, z; z_a, E_\lambda) = G_0(\rho, z; z_a, E_\lambda) + G_{\text{reg}}(\rho, z; z_a, E_\lambda),$$

для расходящейся части функции Грина получим

$$\begin{aligned} \lim_{\substack{\rho \rightarrow 0, \\ z \rightarrow z_{a1}}} \left[ 1 + \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + (z - z_{a1}) \frac{\partial}{\partial z} \right] G_0(\rho, z; z_{a2}, E_\lambda) = \\ = - \frac{m_h^*}{\hbar^2 (2\pi)} \frac{e^{-\lambda |z_{a2} - z_{a1}|}}{|z_{a2} - z_{a1}|}, \end{aligned}$$

соответственно для регуляризованной функции Грина будем иметь

$$\begin{aligned} \lim_{\rho \rightarrow 0, z \rightarrow z_{a1}} \left[ 1 + \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + (z - z_{a1}) \frac{\partial}{\partial z} \right] G_{\text{reg}}(\rho, z; z_{a2}, E_\lambda) = \\ = \frac{m_h^*}{\hbar^2 (2\pi)} \left\{ \frac{e^{-\lambda |z_{a2} - z_{a1}|}}{|z_{a2} - z_{a1}|} \times \right. \\ \left. \left[ {}_2F_1 \left( 1, -\frac{|z_{a2} - z_{a1}|}{2L}; 1 - \frac{|z_{a2} - z_{a1}|}{2L}; e^{2L\lambda} \right) - \right. \right. \\ \left. \left. - e^{2\lambda |z_{a2} - z_{a1}|} {}_2F_1 \left( 1, -\frac{|z_{a2} - z_{a1}|}{2L}; 1 + \frac{|z_{a2} - z_{a1}|}{2L}; e^{2L\lambda} \right) \right] - \right. \\ \left. - \frac{1}{L} \left[ \ln \left( \text{th} \left( \frac{L\lambda}{2} \right) \right) + i\pi \right] \right\}. \end{aligned}$$

Переходя к новой переменной  $z = |z_{a2} - z_{a1}|$ , определяющей расстояние между  $A^0$ -центрами, выражение (6) можно записать в виде

$$\begin{aligned} a_{12} &= \frac{m_h^* e^{-\eta z^*}}{2\pi \hbar^2 a_h z^*} \left[ {}_2F_1 \left( 1, -\frac{z^*}{2L^*}; 1 - \frac{z^*}{2L^*}; e^{2L^* \eta} \right) - \right. \\ &\quad \left. - e^{2\eta z^*} {}_2F_1 \left( 1, -\frac{z^*}{2L^*}; 1 + \frac{z^*}{2L^*}; e^{2L^* \eta} \right) - 1 \right] - \\ &\quad - \frac{\ln \left( \text{th} \left( \frac{L^* \eta}{2} \right) \right) + i\pi}{L^*} = - \frac{m_h^*}{4\pi \hbar^2 a_h L^* z^*} \times \\ &\quad \times \left[ 2e^{-\eta z^*} L^* + z^* \left( 2i\pi + B_{e^{2L^* \eta}} \left( -\frac{z^*}{2L^*}, 0 \right) + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + B_{e^{2L^* \eta}} \left( \frac{z^*}{2L^*}, 0 \right) + 2 \ln \left( \text{th} \left( \frac{L^* \eta}{2} \right) \right) \right) \right]. \end{aligned}$$

Здесь  $\eta_i = \sqrt{|E_i|/E_h}$ ,  $\eta = \sqrt{|E_\lambda|/E_h}$ ,  $z_a^* = z_a/a_h$ ,  $L^* = L/a_h$ ,  $a_h$  — эффективный борковский радиус дырки,  ${}_2F_1(a, b; c; z)$  — гипергеометрическая функция Гаусса,  $B_x(\alpha, \beta)$  — неполная бета-функция. Аналогично для коэффициента  $a_{11}$  можно записать следующее выражение:

$$\begin{aligned} a_{11} &= (\hat{T}_1 \psi_{\lambda_2})(0, z, z_{a1}; E_\lambda) = \\ &= \lim_{\substack{\rho \rightarrow 0, \\ z \rightarrow z_{a1}}} \left[ 1 + \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + (z - z_{a1}) \frac{\partial}{\partial z} \right] G(\rho, z, z_{a1}; E_\lambda). \end{aligned} \quad (7)$$

Переходя к переменной  $z$  в выражении (7), получим

$$\begin{aligned} a_{11} &= \frac{m_h^*}{4\pi \hbar^2 a_h L^* (L^* + z^*)} \left[ (L^* + z^*) B_{e^{2L^* \eta}} \left( \frac{L^* - z^*}{2L^*}, 0 \right) + \right. \\ &\quad \left. + 2L^* e^{(L^* + z^*) \eta} {}_2F_1 \left( 1, \frac{L^* + z^*}{2L^*}; \frac{1}{2} \left( 3 + \frac{z^*}{L^*} \right); e^{2L^* \eta} \right) + \right. \\ &\quad \left. + 2(L^* + z^*) (i\pi + \ln(2 \text{sh}(L^* \eta))) \right]. \end{aligned}$$

Учитывая, что  $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha$ , уравнения (5) примут вид

$$\begin{aligned} \frac{\alpha m_h^*}{2\pi \hbar^2} &= a_{11} + a_{12}, \quad u\text{-терм}, \\ \frac{\alpha m_h^*}{2\pi \hbar^2} &= a_{11} - a_{12}, \quad g\text{-терм}. \end{aligned} \quad (8)$$

Подставляя в (8) соответствующие выражения для  $a_{11}$  и  $a_{12}$ , получим в боровских единицах дисперсионные уравнения, определяющие  $u$ - и  $g$ -термы:

$$\begin{aligned} \alpha &= e^{-z^* \eta} \times \\ &\times \left[ 2L^* z^* e^{(L^* + 2z^*) \eta} {}_2F_1 \left( 1, \frac{L^* + z^*}{2L^*}; \frac{1}{2} \left( 3 + \frac{z^*}{L^*} \right); e^{2L^* \eta} \right) + \right. \\ &\quad \left. + (L^* + z^*) \left[ z^* e^{-z^* \eta} \left[ B_{e^{2L^* \eta}} \left( \frac{L^* - z^*}{2L^*}, 0 \right) + \right. \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \left\{ \begin{array}{l} 0 \\ 4i\pi \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{l} \ln \left( 2 \text{sh} \left( \frac{L^* \eta}{2} \right) \right) \\ \ln \left( 2 \text{ch} \left( \frac{L^* \eta}{2} \right) \right) \end{array} \right\} \mp \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \mp B_{e^{2L^* \eta}} \left( -\frac{z^*}{2L^*}, 0 \right) \mp B_{e^{2L^* \eta}} \left( \frac{z^*}{2L^*}, 0 \right) \right] \mp 2L^* \right] = \\ &= \eta_i z^* L^* (L^* + z^*), \end{aligned}$$

где верхний знак соответствует  $g$ -терму, а нижний  $u$ -терму.

На рис. 1 приведена зависимость энергии связи дырки  $|E_\lambda|$  от расстояния  $z$  между  $A^0$ -центрами, расположенными на оси размерного квантования. Можно видеть, что в случае  $g$ -терма (кривая 1)  $E_\lambda \rightarrow \infty$  при  $z \rightarrow 0$ , т.е. имеет место своеобразное падение на центр. Напротив, у состояния с меньшей энергией связи ( $u$ -терм, кривая 2)  $|E_\lambda|$  уменьшается при  $z \rightarrow 0$ . Таким

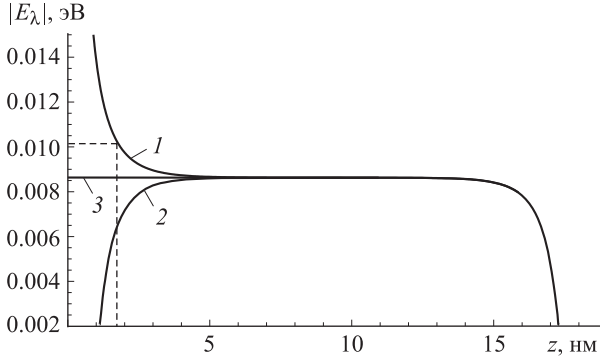


Рис. 1. Термы  $A_2^+$ -центра квантовой ямы GaAs (штрихпунктирная линия показывает характерное расстояние между примесными центрами при энергии связи 10.08 мэВ): 1 —  $g$ -терм; 2 —  $u$ -терм; 3 — случай изолированного  $A_2^+$ -центра

образом, с уменьшением  $z$  возникает расщепление между вырожденными при  $z > 5$  нм  $g$ - и  $u$ -термами. В пределе, когда  $z \rightarrow \infty$ , имеем случай изолированного  $A^+$ -центра (кривая 3). С помощью кривых 1 и 2 можно определить эффективные расстояния между  $A^0$ -центрами при заданном значении энергии связи  $|E_\lambda| = 10.08$  мэВ, полученной из эксперимента [6].

## 2. Примесная фотолюминесценция в 2D-структурах

Рассмотрим фотолюминесценцию, связанную с излучательной рекомбинацией  $2D$ -электронов со дна зоны проводимости, и дырок, локализованных на  $A^0$ -центрах. Спектральная плотность излучения, определяемая переходом электрона из начального состояния в конечное состояние, связана с вероятностью перехода в единицу времени [5] и с учетом дисперсии размеров КЯ определяется следующим выражением:

$$\Phi(\omega) = \frac{4\omega^2 \varepsilon e^2 N_A}{c^3} \left| \frac{\mathbf{P}_{eh} \mathbf{e}_0}{m_0} \right|^2 \int dL \sum_i \int d\mathbf{k}_e \times \quad (9)$$

$$\times \left| \int \psi_e^*(z, \boldsymbol{\rho}, \mathbf{k}_e) \psi_\lambda(z, \boldsymbol{\rho}) dz d\boldsymbol{\rho} \right|^2 \delta(E_i - E_f - \hbar\omega) f_G(L, \bar{L}, \sigma),$$

где  $m_0$  — масса свободного электрона,  $e$  — заряд электрона,  $\mathbf{P}_{eh}$  — матричный элемент оператора импульса на блоховских амплитудах зонных носителей,  $\omega$  — частота излучаемой электромагнитной волны поляризации  $\mathbf{e}_0$ ,  $\varepsilon$  — диэлектрическая проницаемость материала КЯ,  $N_A$  — количество  $A_2^+$ -центров в КЯ. Энергия начального состояния определяется выражением  $E_i = E_g + \hbar^2 \pi^2 n^2 / 2m_e^* L^2 + \hbar^2 k_e^2 / 2m_e^*$ , соответственно энергия конечного состояния  $E_f = \hbar^2 \lambda^2 / 2m_h^*$  (энергия

отсчитывается от потолка валентной зоны) и  $E_g$  — ширина запрещенной зоны. При этом предполагается, что дисперсия КЯ по размерам описывается гауссовским распределением  $f_G(L, \bar{L}, \sigma) = (1/\sqrt{2\pi}\sigma) \exp(-(L - \bar{L})^2 / 2\sigma^2)$ , где  $\bar{L}$  — средняя ширина КЯ,  $\sigma$  — среднеквадратичный разброс ширины КЯ в окрестности  $\bar{L}$ .

Волновая функция конечного состояния в случае  $A_2^+$ -центров выбирается в виде

$$\psi_\lambda(\boldsymbol{\rho}, z; z_a, E_\lambda) = \frac{C_A}{(2\pi)^2} \int \frac{d\mathbf{k} e^{i\mathbf{k}\boldsymbol{\rho}}}{\sqrt{\lambda_A^2 + k^2}} \times \\ \times \left( \text{ch} \left( \sqrt{\lambda_A^2 + k^2} (L - |z_{a1} - z|) \right) - \text{ch} \left( \sqrt{\lambda_A^2 + k^2} (L - |z_{a1} + z|) \right) + \right. \\ \left. + \text{ch} \left( \sqrt{\lambda_A^2 + k^2} (L - |z_{a2} - z|) \right) - \text{ch} \left( \sqrt{\lambda_A^2 + k^2} (L - |z_{a2} + z|) \right) \right) \times \\ \times \text{cosech} \left( L \sqrt{\lambda_A^2 + k^2} \right),$$

где константа нормировки  $C_A$  равна

$$C_A = (2\pi\lambda_A \text{sh}[L\lambda_A])^{1/2} \times \\ \times \left( 2 \text{ch}[L\lambda_A] - \text{ch}[(L - 2z_{a1})\lambda_A] - \text{ch}[(L - 2z_{a2})\lambda_A] - \right. \\ \left. - 2 \text{ch}[(L - z_{a1} - z_{a2})\lambda_A] + 2 \text{ch}[(L - |z_{a2} - z_{a1}|)\lambda_A] \right)^{-1/2}.$$

Учитывая явный вид волновых функций электронов в зоне проводимости

$$\psi_e(z, \boldsymbol{\rho}, \mathbf{k}_e) = \frac{1}{\sqrt{S}} e^{i\mathbf{k}_e \boldsymbol{\rho}} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi n z}{L},$$

интеграл от волновых функций, входящий в (9), запишется в виде

$$\int \psi_e^*(z, \boldsymbol{\rho}, \mathbf{k}_e) \psi_\lambda(z, \boldsymbol{\rho}, ) dz d\boldsymbol{\rho} = C_A \int_0^L dz \sqrt{\frac{2}{SL}} \times \\ \times \left( \text{ch} \left( \sqrt{\lambda_A^2 + k^2} (L - |z_{a1} - z|) \right) - \text{ch} \left( \sqrt{\lambda_A^2 + k^2} (L - |z_{a1} + z|) \right) + \right. \\ \left. + \text{ch} \left( \sqrt{\lambda_A^2 + k^2} (L - |z_{a2} - z|) \right) - \text{ch} \left( \sqrt{\lambda_A^2 + k^2} (L - |z_{a2} + z|) \right) \right) \times \\ \times \frac{\text{cosech} \left( L \sqrt{\lambda^2 + k_e^2} \right)}{\sqrt{\lambda^2 + k_e^2}} \sin \frac{\pi n z}{L}. \quad (10)$$

При этом выражение (9) примет вид

$$\Phi(\omega) = \frac{4\omega^2 \varepsilon e^2 N_A}{c^3} \left| \frac{\mathbf{P}_{eh} \mathbf{e}_0}{m_0} \right|^2 \int dL \sum_n \int d\mathbf{k}_e f_G(L, \bar{L}, \sigma_A^+) C_A^2 \times \\ \times \frac{8 \left[ \sin \left( \frac{z_{a1} \pi n}{L} \right) + \sin \left( \frac{z_{a2} \pi n}{L} \right) \right]^2}{L \left( \frac{\pi^2 n^2}{L^2} + (k_e^2 + \lambda_A^2) \right)^2} \times \\ \times \delta \left( E_g + \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2m_e^* L^2} + \frac{\hbar^2 k_e^2}{2m_e^*} - \frac{\hbar^2 \lambda_A^2}{2m_h^*} - \hbar\omega \right),$$

где  $n_A$  — поверхностная концентрация  $A_2^+$ -центров в КЯ. В дальнейшем мы будем предполагать, что

процессы люминесценции связаны с переходом электрона из нижней размерно-квантованной подзоны зоны проводимости в основное состояние  $A_2^+$ -центров. Это вполне оправданно, если учесть, что при  $\hbar\omega \gg kT$  электроны находятся в состоянии первой размерно-квантованной подзоны. Учет мезоскопического уширения пика примесной люминесценции требует замены  $\delta$ -функции на лоренцевский контур. В безразмерных переменных последнее выражение можно представить в виде

$$\Phi(X) = \frac{2X^2 \alpha^{*2} \varepsilon n_A C_A^{*2}}{c \hbar} \left| \frac{\mathbf{P}_{eh} \mathbf{e}_0}{m_0} \right|^2 \int dL^* \int k_e^* dk_e^* \times \\ \times \frac{f_G(L^*, \bar{L}^*, \sigma^*)}{L^* \left( \frac{\pi^2}{L^{*2}} + (k_e^{*2} + \eta_A^2) \right)^2} \left( \sin \left( \frac{z_{a1}^* \pi}{L^*} \right) + \sin \left( \frac{z_{a2}^* \pi}{L^*} \right) \right)^2 \times \\ \times \frac{\Gamma_A^*}{\left( G + \frac{\gamma \pi^2}{L^{*2}} + \gamma k_e^{*2} - \eta_A^2 - X \right)^2 + \Gamma_A^{*2}},$$

где  $\gamma = m_h/m_e$ ,  $L^* = L/\bar{L}$ ,  $\bar{L}^* = \bar{L}/a_h$ ,  $k_e^* = k_e a_h$ ,  $\eta_A = \lambda_A a_h$ ,  $\Gamma_A^* = \Gamma_A/E_h$ ,  $X = \hbar\omega/E_h$ ,  $\sigma_A^* = \sigma_A/a_h$ ,  $z_{a1}^* = z_{a1}/a_h$ ,  $z_{a2}^* = z_{a2}/a_h$ ,  $G = E_g/E_h$ ,  $\alpha^*$  — постоянная тонкой структуры с учетом диэлектрической проницаемости, а  $C_A^*$  — коэффициент нормировки:

$$C_A^* = (2\pi \eta_A \text{sh}[\bar{L} L^* \eta_A])^{1/2} \times \\ \times \left( 2 \text{ch}[\bar{L} L^* \eta_A] - \text{ch}[(\bar{L} L^* - 2z_{a1}^*) \eta_A] - \text{ch}[(\bar{L} L^* - 2z_{a2}^*) \eta_A] - \right. \\ \left. - 2 \text{ch}[(\bar{L} L^* - z_{a1}^* - z_{a2}^*) \eta_A] + 2 \text{ch}[(\bar{L} L^* - |z_{a2}^* - z_{a1}^*|) \eta_A] \right)^{-1/2},$$

функция распределения  $f_G(L^*, \bar{L}^*, \sigma_A^*)$  в безразмерных переменных:

$$f_G(L^*, \bar{L}^*, \sigma_A^*) = \left( 1/\sqrt{2\pi} \sigma_A^* \right) \exp \left( - (L^* \bar{L}^* - \bar{L}^*)^2 / 2\sigma_A^{*2} \right).$$

Выполняя интегрирование по квазиимпульсу электрона, получим следующее выражение для спектральной зависимости интенсивности излучения:

$$\Phi_A(X) = \int dL^* \times \\ \times A C_A^{*2} n_A X^2 f_G(L^*, \bar{L}^*, \sigma^*) \left( \sin \left( \frac{z_{a1}^* \pi}{\bar{L}^* L^*} \right) + \sin \left( \frac{z_{a2}^* \pi}{\bar{L}^* L^*} \right) \right)^2 \times \\ \times \left[ (L^*)^{-2} \left( \pi^2 + \bar{L}^{*2} L^{*2} \eta_A^2 \right)^{-1} \left( \pi^2 \bar{L}^{*2} L^{*2} (\eta_A^2 + k_0^*) \right)^{-1} \times \right. \\ \left. \times \left( \Gamma_A^{*2} + (X - G + (1 + \gamma) \eta_A^2)^2 \right)^{-2} \right] \times \\ \times \left\{ k_0^* \bar{L}^{*4} L^{*4} \Gamma_A^* \left( \Gamma_A^{*2} + (X - G + (1 + \gamma) \eta_A^2)^2 \right) - \right. \\ \left. - \gamma \left( \pi^2 + \bar{L}^{*2} L^{*2} \eta_A^2 \right) \left( \pi^2 \bar{L}^{*2} L^{*2} (\eta_A^2 + k_0^*) \right) \times \right. \\ \left. \times \left[ \left( (X + G + (1 + \gamma) \eta_A^2)^2 - \Gamma_A^* \right) \times \right. \right. \\ \left. \left. \times \left( \arctg \left( \frac{G \bar{L}^{*2} L^{*2} + \pi \gamma - \bar{L}^{*2} L^{*2} (X + \eta_A^2)}{\Gamma_A^* \bar{L}^{*2} L^{*2}} \right) - \right. \right. \right.$$

$$\left. - \arctg \left( \frac{G \bar{L}^{*2} L^{*2} + \pi^2 \gamma - \bar{L}^{*2} L^{*2} (X - k_0^* \gamma + \eta_A^2)}{\Gamma_A^* \bar{L}^{*2} L^{*2}} \right) \right) \left. \right] \left. \right\} + \\ + \Gamma_A^* (G - X - (1 + \gamma) \eta_A^2) \times \\ \times \left( 2 \ln \left( \pi^2 + \bar{L}^{*2} L^{*2} (\eta_A^2 + k_0^*) \right) - 2 \ln \left( \pi^2 + \bar{L}^{*2} L^{*2} \eta_A^2 \right) + \right. \\ \left. + \ln \left( G^2 \bar{L}^{*4} L^{*4} + \pi^4 \gamma^2 - 2 \bar{L}^{*2} L^{*2} \pi^2 \gamma (X + \eta_A^2) - \right. \right. \\ \left. \left. - 2G \left( \bar{L}^{*4} L^{*4} (X + \eta_A^2) - \bar{L}^{*2} L^{*2} \pi^2 \gamma \right) + \right. \right. \\ \left. \left. + \bar{L}^{*4} L^{*4} (\Gamma_A^{*2} + (X + \eta_A^2)^2) \right) - \right. \\ \left. - \ln \left( G^2 \bar{L}^{*4} L^{*4} + \pi^4 \gamma^2 - 2 \bar{L}^{*2} L^{*2} (\pi^2 \gamma (X - k_0^* \gamma + \eta_A^2) - \right. \right. \\ \left. \left. - G (\pi^2 \gamma - \bar{L}^{*2} L^{*2} (X - k_0^* \gamma + \eta_A^2))) + \right. \right. \\ \left. \left. + \bar{L}^{*4} L^{*4} (\Gamma_A^{*2} + (X - k_0^* \gamma + \eta_A^2)^2) \right) \right) \left. \right\}.$$

При этом было учтено, что при низких температурах ( $T \approx 4$  К) верхний предел интегрирования по квазиимпульсу ограничен некоторым эффективным значением кинетической энергии электрона, определяемым главным образом соответствующей температурой образца. В безразмерных переменных верхний предел полагался равным  $k_0^* = \sqrt{kT/E_h}$ , соответственно константа  $A$  определяется выражением  $A = \left| \alpha^* \sqrt{2\varepsilon} \mathbf{P}_{eh} \mathbf{e}_0 / (\sqrt{c\hbar} m_0) \right|^2$ .

### Заключение

На рис. 2 представлена кривая спектральной зависимости в случае примесной фотолюминесценции с участием  $A_2^+$ -центров для квантовых ям GaAs/AlGaAs шириной  $L = 18$  нм. При численных расчетах энергия связи  $A_2^+$ -центров полагалась равной  $E_\lambda = 10.08$  мэВ [6]. Эффективные массы электрона и дырки соответственно равны  $m_e = 0.07m_0$ ,  $m_h = 0.45m_0$ , где  $m_0$  — масса свободного электрона. Исходя из экспериментальных данных работы [1], полуширина пиков фотолюминесценции для молекулярных состояний  $\Gamma_A$  составляет  $\Gamma_A = 2.5$  мэВ. Соответственно ширина запрещенной зоны в приближении эффективной массы полагалась равной  $E_g = 1.51$  эВ [6], а значение  $\sigma^* = 10^{-3}$ .

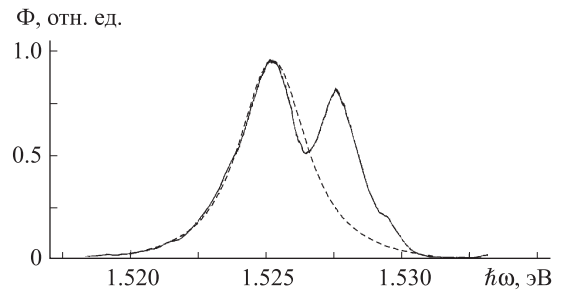


Рис. 2. Спектральная зависимость примесной фотолюминесценции  $A_2^+$ -центров: сплошная линия — эксперимент [1] с учетом данных работы [6], штриховая линия — теоретический расчет

Поскольку вероятность образования молекулярных состояний  $A_2^+$ -центров зависит от концентрации легирующей примеси, то интенсивность линии фотолюминесценции, связанной с молекулярными состояниями, сильно зависит от поверхностной концентрации  $A^0$ -центров. С ростом концентрации интенсивность линии фотолюминесценции, связанной с молекулярными состояниями, растет, а интенсивность линии фотолюминесценции атомарных  $A^+$ -центров соответственно уменьшается. Представленный на рис. 2 экспериментальный спектр фотолюминесценции был снят соответственно при поверхностной концентрации  $A^0$ -центров, равной  $1.8 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ , и температуре  $T = 4.2 \text{ К}$ . На рис. 2 помимо линии, связанной с коллективными состояниями  $A_2^+$ -центров, также видна линия фотолюминесценции атомарных состояний, связанная с рекомбинацией электронов со дна зоны проводимости, и дырки в основном состоянии  $A^+$ -центра, которая находится выше по энергии, чем линия фотолюминесценции молекулярных состояний.

Следует отметить, что легирование нейтральными акцепторами (бериллием) производилось в  $\delta$ -слои, расположенные в центре ямы шириной 3 нм, с концентрацией  $5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ . В настоящей работе для упрощения расчетов и получения аналитического выражения для спектральной зависимости фотолюминесценции рассматривалась ситуация, когда два близко расположенных нейтральных акцептора расположены симметрично относительно центра КЯ. При этом энергии связи каждого нейтрального акцептора с дыркой равны, так как энергия связи зависит только от расстояния между  $A^0$ -центром и границей квантовой ямы. При этом остается открытым вопрос о зависимости энергии связи от концентрации нейтральных акцепторов внутри КЯ. Если предположить что энергия связи зависит от расстояния между нейтральными акцепторами, то при увеличении концентрации выше некоторого критического значения, следует ожидать увеличения

интенсивности линии фотолюминесценции, связанной с молекулярными состояниями, а также сдвига линии в сторону меньших частот. Необходимо отметить, что подобная ситуация может наблюдаться в слаболегированных и сильнокомпенсированных массивных полупроводниках при низких температурах  $T \rightarrow 0$ . В этом случае энергия локализованных на мелких примесях электронов существенно зависит от мелкомасштабных флуктуаций примесного потенциала, и большинство электронов находится в потенциальных ямах, образованных при сближении двух заряженных доноров. Такие пары могут быть рассмотрены как аналог молекулярного иона водорода  $H_2^+$  с некоторым характерным расстоянием между ядрами  $R \geq a$ , где  $a$  — борковский радиус электрона, локализованного на доноре. При увеличении концентрации доноров происходит сдвиг линии поглощения в сторону длинноволнового участка спектра [7].

Таким образом, анализ, проведенный в настоящей работе, позволяет сделать вывод о том, что рассмотренная модель  $A_2^+$ -центров может претендовать на описание экспериментальных данных, свидетельствующих о существовании молекулярных состояний  $A^+$ -центров в 2D-структурах GaAs/AlGaAs.

#### Список литературы

1. Петров П.В., Иванов А.Е., Жуков Ю.Л. // ФТП. 2007. **41**, № 7. С. 850.
2. Smondyrev M.A., Devreese J.T., Peeters F.M. // Phys. Rev. B. 1995. **46**. P. 15008.
3. Кревчик В.Д., Грунин А.Б., Семенов М.Б. и др. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2004. № 3. С. 7.
4. Кревчик В.Д., Иمامов Э.З. // ФТП. 1983. **17**, № 7. С. 1235.
5. Леванюк А.П., Осипов В.В. // УФН. 1981. **133**. С. 427.
6. Петров П.В., Иванов Ю.Л., Михрин В.С., Жуков А.Е. // ФТП. 2008. **42**, № 10. С. 1219.
7. Александров В.Н., Гершензон Е.М., Мельников А.П. и др. // Письма в ЖЭТФ. 1975. **22**, № 11. С. 573.

#### To the theory of the molecular states $A_2^+$ -centres in semiconductor quantum wells

V. Ch. Zhukovskij<sup>1,a</sup>, V. D. Krevchik<sup>2,b</sup>, A. V. Levashov<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Department of Theoretical Physics, Faculty of Physics, M. V. Lomonosov Moscow State University, Moscow 119991, Russia.

<sup>2</sup>Faculty of Physics, Penza State University, Krasnaya str. 40, Penza 440026, Russia.

E-mail: <sup>a</sup>vlchzh@gmail.com, <sup>b</sup>physics@pnzgu.ru.

Within the framework of zero-range potential model the photoluminescence spectra in GaAs/AlGaAs quantum wells with  $A_2^+$  centers have been calculated. It is shown that the  $A_2^+$  centers — model can adequately describe the experimental evidence of the  $A^+$  centers — molecular states existence in 2D-GaAs/AlGaAs structures.

**Keywords:** molecular state of the acceptor centers, quantum well, photoluminescence spectra, binding energy, terms of the molecular ion.

PACS: 78.67.De.

Received 25 January 2011.

English version: *Moscow University Physics Bulletin* 4(2011).

#### Сведения об авторах

1. Жуковский Владимир Чеславович — докт. физ.-мат. наук, профессор, зам. зав. кафедрой; e-mail: vlchzh@gmail.com.
2. Кревчик Владимир Дмитриевич — докт. физ.-мат. наук, профессор, зав. кафедрой; e-mail: physics@pnzgu.ru.
3. Левашов Александр Владимирович — канд. физ.-мат. наук, доцент.