

ОСОБЕННОСТИ МОЛЕКУЛЯРНЫХ СОСТОЯНИЙ A^+ -ЦЕНТРОВ В 2D-СТРУКТУРАХ

Аннотация. В рамках потенциала нулевого радиуса рассчитаны спектры фотолюминесценции в квантовых ямах GaAs/AlGaAs с A^+ - и 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.

Abstract. Within the framework of zero – range potential model in GaAs/AlGaAs quantum well with A^+ and A_2^+ centers are calculated. Shown that the model A_2^+ centers can adequately describe the experimental evidence of the existence of molecular states A^+ centers in 2D – GaAs/AlGaAs structures.

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

Введение

Анализ экспериментальных данных [1] позволяет сделать вывод о том, что в двумерных структурах GaAs/AlGaAs, содержащих A^+ -центры, возможно существование молекулярных акцепторных состояний. Авторами было выдвинуто предположение о том, что такими примесными молекулами могут стать два близко расположенных A^+ -центра, связанных за счет полярного эффекта [1]. Биполярное спаривание свободных носителей заряда в полярных полупроводниках возможно только при достаточной величине постоянной электрон-фотонного взаимодействия α . По теоретическим оценкам [2], наименьшее значение α , при котором возможно образование стабильных пар в двумерной структуре, составляет $\alpha = 2,9$, что на порядок превышает величину α в GaAs p -типа. В настоящей работе предложена иная точка зрения на возникновение молекулярных состояний в структурах, содержащих квантовые ямы GaAs/AlGaAs, заключающаяся в том, что молекулярные состояния образуются A_2^+ -центрами – двумя близко расположенными A^0 -центрами, на которых локализована дырка.

1. Энергетический спектр A^+ -центра в полупроводниковой квантовой яме

Рассмотрим A^+ -состояния в прямоугольной потенциальной яме. Будем считать, что квантовая яма (КЯ) имеет бесконечно высокие стенки. Если направить ось Z вдоль главной оси структуры, то в этом случае потенциальная энергия, отсчитываемая от «дна» ямы, может быть представлена как

$$U(z) = \begin{cases} \infty, & \text{если } z < 0, \\ 0, & \text{если } 0 \leq z \leq L, \\ \infty, & \text{если } z > L, \end{cases} \quad (1)$$

где L – ширина квантовой ямы.

Волновая функция дырки в прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками имеет вид

$$\psi_{\vec{k},n}(\vec{\rho},z) = \frac{1}{\sqrt{S}} e^{i\vec{k}\vec{\rho}} \varphi_n(z), \quad (2)$$

где $\vec{k}$ – двумерный волновой вектор с компонентами k_x и k_y , описывающий движение дырок в плоскости интерфейсов (x, y) ; S – площадь КЯ в этой плоскости; $\vec{\rho}$ – двумерный вектор с компонентами $(\rho_x = x, \rho_y = y)$. Волновая функция $\varphi_n(z)$ имеет вид

$$\varphi_n(z) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi n z}{L}. \quad (3)$$

Энергия невозмущенных примесями однодырочных состояний в рассматриваемой модели будет иметь вид

$$E_{\vec{k},n} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h^*} + \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2m_h^* L^2}, \quad (4)$$

где m_h^* – эффективная масса дырки, $n = 1, 2, 3, \dots$

Пусть A^+ -центр расположен в точке с координатами $x = 0, y = 0, z_a = L/2$. Потенциал примеси описывается в рамках модели потенциала нулевого радиуса мощностью $\gamma = 2\pi\hbar^2/(\alpha m_h^*)$, который имеет вид

$$V_\delta(\vec{\rho}, z, z_a) = \gamma \delta(\vec{\rho}) \delta(z - z_a) \left[1 + \vec{\rho} \frac{\partial}{\partial \vec{\rho}} + (z - z_a) \frac{\partial}{\partial z} \right], \quad (5)$$

где α определяется энергией E_i связанного состояния этого же примесного центра в объемном полупроводнике; $\delta(x)$ – дельта-функция Дирака.

Такая модель, как известно [3], применима для описания A^+ -состояний, соответствующих присоединению дополнительной дырки к мелкому акцептору. В приближении эффективной массы волновая функция $\psi_\lambda(\vec{\rho}, z; z_a)$ дырки, локализованной на короткодействующем потенциале примесного центра, удовлетворяет уравнению Шредингера

$$(E_\lambda - \hat{H}) \psi_\lambda(\vec{\rho}, z; z_a) = V_\delta(\vec{\rho}, z; z_a) \psi_\lambda(\vec{\rho}, z; z_a), \quad (6)$$

где $E_\lambda = -\hbar^2 \lambda^2 / (2m_h^*)$ – собственные значения оператора Гамильтона $\hat{H}_\delta = \hat{H} + V_\delta(\vec{\rho}, z; z_a)$.

Однодырочная функция Грина к уравнению Шредингера (6), соответствующая источнику в точке $\vec{r}_1$ и энергии E_λ , запишется в виде

$$G(\vec{\rho}, z; z_a, E_\lambda) = \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^2} e^{i\vec{k}\vec{\rho}} \sum_n \frac{\Psi_{\vec{k},n}^*(\vec{\rho}, z; z_a) \Psi_{\vec{k},n}(\vec{\rho}, z; z)}{(E_\lambda - E_{\vec{k},n})}. \quad (7)$$

Подставляя в (7) явные выражения для волновых функций энергии дырки в прямоугольной потенциальной яме и энергии связи примесного центра, соответственно будем иметь

$$G(\vec{\rho}, z; z_a, E_\lambda) = -\frac{4 L^2 m_h^*}{\hbar^2 \pi^2} \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^2} e^{i\vec{k}\vec{\rho}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin\left(\frac{\pi n z_a}{L}\right) \sin\left(\frac{\pi n z}{L}\right)}{n^2 + \frac{L^2}{\pi^2} (k^2 + \lambda^2)}, \quad (8)$$

преобразуя подынтегральное выражение (8) к виду

$$\begin{aligned} & \frac{4 L^2 m_h^*}{\hbar^2 \pi^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin\left(\frac{\pi n z_a}{L}\right) \sin\left(\frac{\pi n z}{L}\right)}{n^2 + \frac{L^2}{\pi^2} (k^2 + \alpha^2)} = \\ & = \frac{4 L m_h^*}{\hbar^2 \pi^2} \left[\sum_{n=1}^{\infty} \frac{\cos\left(\frac{\pi n [z_a - z]}{L}\right)}{n^2 + \frac{L^2}{\pi^2} (k^2 + \lambda^2)} - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\cos\left(\frac{\pi n [z_a + z]}{L}\right)}{n^2 + \frac{L^2}{\pi^2} (k^2 + \lambda^2)} \right] \end{aligned} \quad (9)$$

и выполняя соответственно суммирование по n [4], получим

$$\begin{aligned} & \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\cos\left(\frac{\pi n [z_a - z]}{L}\right)}{n^2 + \frac{L^2}{\pi^2} (k^2 + \lambda^2)} = \\ & = \frac{\pi^2 \left(L \sqrt{\lambda^2 + k^2} \operatorname{ch} \left(\sqrt{\lambda^2 + k^2} (L - |z_a - z|) \right) \operatorname{cosech} \left(L \sqrt{\lambda^2 + k^2} \right) \right) - 1}{2 L^2 (\lambda^2 + k^2)}; \end{aligned} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} & \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\cos\left(\frac{\pi n [z_a + z]}{L}\right)}{n^2 + \frac{L^2}{\pi^2} (k^2 + \lambda^2)} = \\ & = \frac{\pi^2 \left(L \sqrt{\lambda^2 + k^2} \operatorname{ch} \left(\sqrt{\lambda^2 + k^2} (L - |z_a + z|) \right) \operatorname{cosech} \left(L \sqrt{\lambda^2 + k^2} \right) \right) - 1}{2 L^2 (\lambda^2 + k^2)}. \end{aligned} \quad (11)$$

Окончательно для функции Грина будем иметь следующее выражение:

$$G(\vec{\rho}, z; z_a, E_\lambda) = -\frac{m_h^*}{\hbar^2 (2\pi)^2} \int \frac{d\vec{k} e^{i\vec{k}\vec{\rho}}}{\sqrt{\lambda^2 + k^2}} \operatorname{cosech} \left(L \left(\sqrt{\lambda^2 + k^2} \right) \right) \times \\ \times \left(\operatorname{ch} \left(\sqrt{\lambda^2 + k^2} (L - |z_a - z|) \right) - \operatorname{ch} \left(\sqrt{\lambda^2 + k^2} (L - |z_a + z|) \right) \right). \quad (12)$$

Выполняя в (12) интегрирование по углам с помощью равенства

$$\int_0^{2\pi} d\varphi e^{ik\rho \cos \varphi} = 2\pi J_0(k\rho), \quad (13)$$

выражение (12) можно представить в виде

$$G(\vec{\rho}, z; z_a, E_\lambda) = -\frac{m_h^*}{\hbar^2 (2\pi)} \int_0^\infty \frac{dk k J_0(k\rho)}{\sqrt{\lambda^2 + k^2}} \operatorname{cosech} \left(L \left(\sqrt{\lambda^2 + k^2} \right) \right) \times \\ \times \left(\operatorname{ch} \left(\sqrt{\lambda^2 + k^2} (L - |z_a - z|) \right) - \operatorname{ch} \left(\sqrt{\lambda^2 + k^2} (L - |z_a + z|) \right) \right). \quad (14)$$

Для выделения расходящейся части функции Грина к выражению (14) прибавим и вычтем интеграл Вебера

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^\infty \frac{dk k J_0(k\rho) e^{-\sqrt{\lambda^2 + k^2} |z - z_a|}}{\sqrt{\lambda^2 + k^2}} = \frac{1}{2\pi} \frac{e^{-\lambda \sqrt{\rho^2 + (z - z_a)^2}}}{\sqrt{\rho^2 + (z - z_a)^2}}. \quad (15)$$

Таким образом, выражение (14) можно представить в виде суммы расходящейся $G_0(\vec{\rho}, z; z_a, E_\lambda)$ и регулярной $G_{\text{reg}}(\vec{\rho}, z; z_a, E_\lambda)$ частей функции Грина (14)

$$G(\vec{\rho}, z; z_a, E_\lambda) = G_0(\vec{\rho}, z; z_a, E_\lambda) + G_{\text{reg}}(\vec{\rho}, z; z_a, E_\lambda), \quad (16)$$

где соответственно

$$G_0(\vec{\rho}, z; z_a, E_\lambda) = -\frac{1}{2\pi} \frac{e^{-\lambda \sqrt{\rho^2 + (z - z_a)^2}}}{\sqrt{\rho^2 + (z - z_a)^2}}; \quad (17)$$

$$G_{\text{reg}}(\vec{\rho}, z; z_a, E_\lambda) = \frac{m_h^*}{\hbar^2 (2\pi)} \int_0^\infty \frac{dk k J_0(k\rho)}{\sqrt{\lambda^2 + k^2}} \left(\operatorname{ch} \left(\sqrt{\lambda^2 + k^2} |z_a - z| \right) \times \right. \\ \left. \times \left(1 - \operatorname{cth} \left(L \sqrt{\lambda^2 + k^2} \right) \right) + \operatorname{ch} \left(\sqrt{\lambda^2 + k^2} (L - z_a - z) \right) \operatorname{cosech} \left(L \sqrt{\lambda^2 + k^2} \right) \right). \quad (18)$$

Замена переменных $\sqrt{\lambda^2 + k^2} \rightarrow t$ позволяет записать формулу (18) в виде

$$G_{\text{reg}}(\vec{\rho}, z; z_a, E_\lambda) = \frac{m_h^*}{\hbar^2 (2\pi)} \int_{\lambda}^{\infty} dt J_0(\sqrt{t^2 - \lambda^2}) \times \\ \times \left(\text{ch}(t|z_a - z|) (1 - \text{cth}(Lt)) + \text{ch}(t(L - z_a - z)) \text{cosech}(Lt) \right). \quad (19)$$

Уравнение Липпмана – Швингера для A^+ -состояния в КЯ запишется как

$$\psi_\lambda(\vec{\rho}, z; z_a) = \int d\vec{\rho}_1 \int_0^L dz_1 G(\vec{\rho} - \vec{\rho}_1, z; z_1, E_\lambda) V_\delta(\vec{\rho}_1, z_1; z_a) \psi_\lambda(\vec{\rho}_1, z_1; z_a). \quad (20)$$

Подставляя (5) в (20), получим

$$\psi_\lambda(\vec{\rho}, z, z_a) = \gamma G(\vec{\rho}, z, z_a, E_\lambda) (\hat{T}\psi_\lambda)(0, z_a, z_a), \quad (21)$$

где

$$(\hat{T}\psi_\lambda)(0, z_a) \equiv \lim_{\substack{\vec{\rho} \rightarrow 0 \\ z \rightarrow z_a}} \left[1 + \vec{\rho} \frac{\partial}{\partial \vec{\rho}} + (z - z_a) \frac{\partial}{\partial z} \right] \psi_\lambda(\vec{\rho}, z). \quad (22)$$

Действуя оператором $\hat{T}$ на обе части соотношения (22), получим уравнение, определяющее зависимость энергии связанного состояния E_λ примесного центра от параметров КЯ и положения z_a примеси:

$$\frac{\alpha m_h^*}{2\pi\hbar^2} = (\hat{T}G)(0, z_a, z_a, E_\lambda). \quad (23)$$

Учитывая, что

$$\lim_{\substack{\vec{\rho} \rightarrow 0 \\ z \rightarrow z_a}} G_{\text{reg}}(\vec{\rho}, z, z_a, E_\lambda) = \frac{m_h^*}{\hbar^2 (2\pi)} \int_{\lambda}^{\infty} \left(1 - \text{cth}(Lt) + \text{ch}(t(L - z_a)) \text{cosech}(Lt) \right) dt = \\ = \frac{m_h^*}{\hbar^2 (4\pi)L z_a} \left(z_a B_{e^{2L\lambda}} \left(1 - \frac{z_a}{L}, 0 \right) + e^{2z_a\lambda} L {}_2F_1 \left(1, \frac{z_a}{L}; \frac{L + z_a}{L}; e^{2L\lambda} \right) + \right. \\ \left. + 2z_a (i\pi - L\lambda + \ln(2\text{sh}(L\lambda))) \right); \quad (24)$$

$$\lim_{\substack{\vec{\rho} \rightarrow 0 \\ z \rightarrow z_a}} \left[(z - z_a) \frac{\partial}{\partial z} G_{\text{reg}}(\vec{\rho}, z, z_a, E_\lambda) + \vec{\rho} \frac{\partial}{\partial \vec{\rho}} G_{\text{reg}}(\vec{\rho}, z, z_a, E_\lambda) \right] = 0; \quad (25)$$

$$\lim_{\substack{\vec{\rho} \rightarrow 0 \\ z \rightarrow z_a}} \left[(z - z_a) \frac{\partial}{\partial z} G_0(\vec{\rho}, z, z_a, E_\lambda) + \vec{\rho} \frac{\partial}{\partial \vec{\rho}} G_0(\vec{\rho}, z, z_a, E_\lambda) + \right.$$

$$+ G_0(\vec{\rho}, z, z_a, E_\lambda) \Big] = \frac{m_h^* \lambda}{\hbar^2 (2\pi)}, \quad (26)$$

где $B_x(\alpha, \beta)$ – неполная бета-функция; ${}_2F_1(a_1, a_2; b; z)$ – обобщенная гипергеометрическая функция, уравнение (23) в безразмерных величинах переписывается в виде

$$z_a^* B_{e^{2L^*}\eta} \left(1 - \frac{z_a^*}{L^*}, 0 \right) + e^{2z_a^* \eta L^*} {}_2F_1 \left(1, \frac{z_a^*}{L^*}; 1 + \frac{z_a^*}{L^*}; e^{2L^* \eta} \right) + \\ + 2z_a^* (i\pi + \ln(2 \operatorname{sh}(L^* \eta))) = 2L^* z_a^* \eta_i. \quad (27)$$

Здесь $\eta_i = \sqrt{|E_i|/E_h}$, $\eta = \sqrt{|E_\lambda|/E_h}$; $E_h = m_h^* e^4 / 2\hbar^2 \epsilon^2$ – эффективная боровская энергия с учетом эффективной массы дырки m_h^* и диэлектрической проницаемости ϵ ; $E_i = \hbar^2 \alpha^2 / 2m_h^{*2}$ – энергия основного состояния примесного центра в массивном полупроводнике; $z_a^* = z_a / a_h$, a_h – эффективный боровский радиус дырки; $L^* = L / a_h$.

На рис. 1 представлены результаты численного анализа дисперсионного уравнения применительно к A^+ -состояниям в КЯ GaAs при различных значениях E_i .

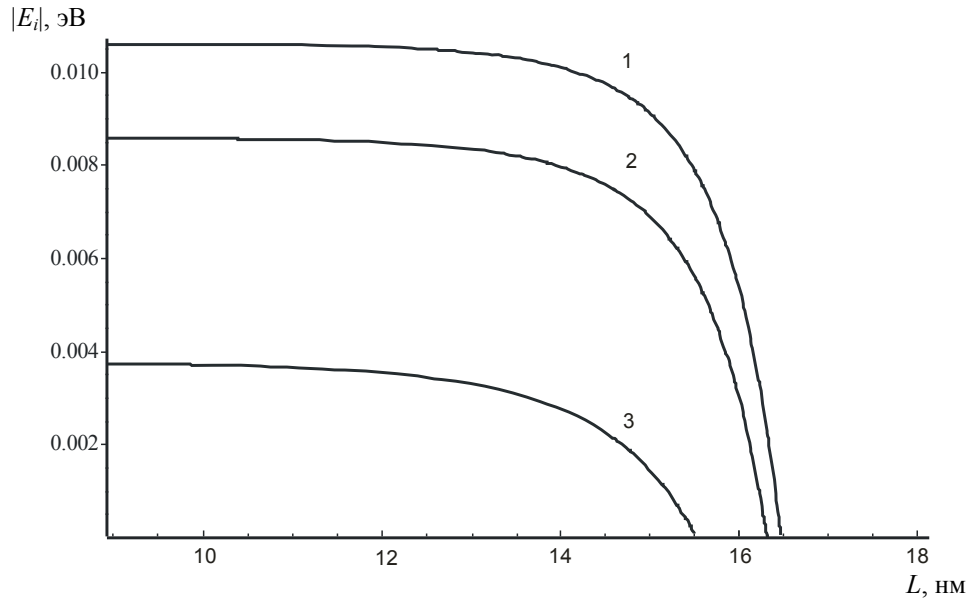


Рис. 1. Зависимость энергии связи $|E_\lambda^{OW}|$ A^+ -состояния от координаты примесного центра L_a в КЯ GaAs при $L = 18$ нм и различных значениях E_i :

1 – $E_i = 8,6$ мэВ; 2 – $E_i = 4$ мэВ; 3 – $E_i = 1,08$ мэВ

Из рис. 1 видно, что в КЯ энергия связи A^+ -состояния является убывающей функцией координат A^+ -центра за счет квантового размерного эффекта и, как следовало ожидать, растет с ростом мощности потенциала нулевого радиуса.

2. Особенности энергетического спектра A_2^+ -центра в полупроводниковой квантовой яме

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

Двухцентровой потенциал моделируется суперпозицией потенциалов нулевого радиуса мощностью $\gamma_i = 2\pi\hbar^2 / (\alpha_i m_h^*)$, $i = 1, 2$ [5]:

$$V_\delta(\vec{\rho}, z, z_{a1}, z_{a2}) = \sum_{i=1}^2 \gamma_i \delta(\vec{\rho}) \delta(z - z_{ai}) \left[1 + \vec{\rho} \frac{\partial}{\partial \vec{\rho}} + (z - z_{ai}) \frac{\partial}{\partial z} \right], \quad (28)$$

где z_{ai} – координаты A^0 -центров вдоль оси роста структуры; α_i определяется энергией E_i дырочного локализованного состояния на этих же A^+ -центрах в массивном полупроводнике; m_h^* – эффективная масса дырки; при этом предполагается, что A^+ -центры имеют одинаковые координаты в плоскости интерфейса $\vec{r}_i = (\vec{\rho}, z_i)$.

Волновая функция дырки $\psi_{\lambda_2}(\vec{\rho}, z_{a1}; z_{a2})$, локализованной на A_2^0 -центре, удовлетворяет уравнению Липпмана – Швингера для связанного состояния

$$\psi_{\lambda_2}(\vec{\rho}, z, z_{a1}, z_{a2}) = \int dz_1 G(\vec{\rho}, z, z_1; E_\lambda) V_\delta(\vec{\rho}, z_1, z_{a1}, z_{a2}) \psi_{\lambda_2}(\vec{\rho}, z_1, z_{a1}, z_{a2}), \quad (29)$$

где $G(\vec{\rho}, z, z_1; E_\lambda)$ – однодырочная функция Грина, определяемая выражением (14) и соответствующая источнику в точке с координатами $\vec{r} = (\vec{\rho}, z_1)$ и энергии $E_\lambda = -\hbar^2 \lambda^2 / (2m_h^*)$.

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

$$\begin{aligned} \psi_{\lambda_2}(0, z, z_{a1}, z_{a2}) = & \gamma_1 G(0, z, z_{a1}; E_\lambda) (\hat{T}_1 \psi_{\lambda_2})(0, z_{a1}, z_{a1}, z_{a2}) + \\ & + \gamma_2 G(0, z, z_{a2}; E_\lambda) (\hat{T}_2 \psi_{\lambda_2})(0, z_{a2}, z_{a1}, z_{a2}), \end{aligned} \quad (30)$$

где

$$(\hat{T}_i \psi_{\lambda_2})(0, z_{ai}) \equiv \lim_{\substack{\vec{\rho} \rightarrow 0 \\ z \rightarrow z_{ai}}} \left[1 + \vec{\rho} \frac{\partial}{\partial \vec{\rho}} + (z - z_{ai}) \frac{\partial}{\partial z} \right] \psi_{\lambda_2}(\vec{\rho}, z). \quad (31)$$

Применяя последовательно операцию $\hat{T}_i$ к обеим частям соотношения (31), получим систему алгебраических уравнений вида

$$\begin{cases} c_{1n} = \gamma_1 a_{11} c_{1n} + \gamma_2 a_{12} c_{2n}, \\ c_{2n} = \gamma_1 a_{21} c_{1n} + \gamma_2 a_{22} c_{2n}, \end{cases} \quad (32)$$

где

$$c_1 = (\hat{T}_1 \psi_{\lambda_2})(0, z_{a1}, z_{a1}, z_{a2}), c_2 = (\hat{T}_2 \psi_{\lambda_2})(0, z_{a2}, z_{a1}, z_{a2}),$$

$$a_{i,j} = (\hat{T}_i \psi_{\lambda_2})(0, z_{ai}, z_{aj}; E_\lambda); \quad i, j = 1, 2. \quad (33)$$

Исключив из системы (32) коэффициенты c_i , содержащие неизвестную функцию, получим дисперсионное уравнение, определяющее зависимость энергии связанного состояния E_λ дырки, локализованной на A_2^0 -центре, от координат A^0 -центров и параметров КЯ:

$$\gamma_1 a_{11} + \gamma_2 a_{22} - 1 = \gamma_1 \gamma_2 (a_{11} a_{22} - a_{12} a_{21}). \quad (34)$$

В случае, когда $\gamma_1 = \gamma_2 = \gamma$, уравнение (34) распадается на два уравнения, определяющие симметричное (g -терм) и антисимметричное (u -терм) состояния дырки соответственно:

$$\gamma a_{11} = \begin{cases} 1 - \gamma a_{12}, & \text{при } (c_1 = c_2), \\ 1 + \gamma a_{12}, & \text{при } (c_1 = -c_2). \end{cases} \quad (35)$$

Учитывая явный вид однодырочной функции Грина (14)

$$G(\vec{\rho}, z; z_a, E_\lambda) = -\frac{m_h^*}{\hbar^2 (2\pi)} \int_0^\infty \frac{dk k J_0(k\rho)}{\sqrt{\lambda^2 + k^2}} \operatorname{cosech} \left(L \left(\sqrt{\lambda^2 + k^2} \right) \right) \times$$

$$\times \left(\operatorname{ch} \left(\sqrt{\lambda^2 + k^2} (L - |z_a - z|) \right) - \operatorname{ch} \left(\sqrt{\lambda^2 + k^2} (L - |z_a + z|) \right) \right), \quad (36)$$

а также принимая во внимание, что a_{11} определяется следующим выражением:

$$a_{12} = (\hat{T}_1 \psi_{\lambda_2})(0, z, z_{a2}; E_\lambda) = \lim_{\substack{\vec{\rho} \rightarrow 0 \\ z \rightarrow z_{a1}}} \left[1 + \vec{\rho} \frac{\partial}{\partial \vec{\rho}} + (z - z_{a1}) \frac{\partial}{\partial z} \right] G(\vec{\rho}, z, z_{a2}; E_\lambda), \quad (37)$$

и учитывая, что

$$G(\vec{\rho}, z; z_a, E_\lambda) = G_0(\vec{\rho}, z; z_a, E_\lambda) + G_{reg}(\vec{\rho}, z; z_a, E_\lambda), \quad (38)$$

для расходящейся части функции Грина получим

$$\lim_{\substack{\vec{\rho} \rightarrow 0 \\ z \rightarrow z_{a1}}} \left[1 + \vec{\rho} \frac{\partial}{\partial \vec{\rho}} + (z - z_{a1}) \frac{\partial}{\partial z} \right] G_0(\vec{\rho}, z; z_{a2}, E_\lambda) = -\frac{m_h^*}{\hbar^2 (2\pi)} \frac{e^{-\lambda|z_{a2} - z_{a1}|}}{|z_{a2} - z_{a1}|}, \quad (39)$$

соответственно для регуляризованной функции Грина будем иметь

$$\lim_{\substack{\bar{\rho} \rightarrow 0 \\ z \rightarrow z_{a1}}} \left[1 + \bar{\rho} \frac{\partial}{\partial \bar{\rho}} + (z - z_{a1}) \frac{\partial}{\partial z} \right] G_{reg}(\bar{\rho}, z; z_{a2}, E_\lambda) =$$

$$= \frac{m_h^*}{\hbar^2 (2\pi)} \left\{ \frac{e^{-\lambda|z_{a2}-z_{a1}|}}{|z_{a2}-z_{a1}|} \left[{}_2F_1 \left(1, -\frac{|z_{a2}-z_{a1}|}{2L}; 1 - \frac{|z_{a2}-z_{a1}|}{2L}; e^{2L\lambda} \right) - e^{2\lambda|z_{a2}-z_{a1}|} \times \right. \right.$$

$$\left. \times {}_2F_1 \left(1, -\frac{|z_{a2}-z_{a1}|}{2L}; 1 + \frac{|z_{a2}-z_{a1}|}{2L}; e^{2L\lambda} \right) \right] - \frac{1}{L} \left[\ln \left(\operatorname{th} \left(\frac{L\lambda}{2} \right) \right) + i\pi \right] \right\}. \quad (40)$$

Переходя к безразмерным переменным и вводя новую переменную $z = |z_{a2} - z_{a1}|$, определяющую расстояние между A^0 -центрами, выражение (37) запишется в виде

$$a_{12} = \frac{m_h^* e^{-\eta z^*}}{2\pi \hbar^2 a_h z^*} \left[{}_2F_1 \left(1, -\frac{z^*}{2L^*}; 1 - \frac{z^*}{2L^*}; e^{2L^*\eta} \right) - \right.$$

$$\left. - e^{2\eta z^*} {}_2F_1 \left(1, -\frac{z^*}{2L^*}; 1 + \frac{z^*}{2L^*}; e^{2L^*\eta} \right) - 1 \right] -$$

$$- \frac{\ln \left(\operatorname{th} \left(\frac{L^*\eta}{2} \right) \right) + i\pi}{L^*} = - \frac{m_h^*}{4\pi \hbar^2 a_h L^* z^*} \left[2e^{-\eta z^*} L^* + \right.$$

$$\left. + z^* \left(2i\pi + B_{e^{2L^*\eta}} \left(-\frac{z^*}{2L^*}, 0 \right) + B_{e^{2L^*\eta}} \left(\frac{z^*}{2L^*}, 0 \right) + 2 \ln \left(\operatorname{th} \left(\frac{L^*\eta}{2} \right) \right) \right) \right], \quad (41)$$

здесь $\eta_i = \sqrt{|E_i|/E_h}$, $z_a^* = z_a/a_h$, $L^* = L/a_h$; a_h – эффективный боровский 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:

$$a_{11} = (\hat{T}_1 \psi_{\lambda_2})(0, z, z_{a1}; E_\lambda) = \lim_{\substack{\bar{\rho} \rightarrow 0 \\ z \rightarrow z_{a1}}} \left[1 + \bar{\rho} \frac{\partial}{\partial \bar{\rho}} + (z - z_{a1}) \frac{\partial}{\partial z} \right] G(\bar{\rho}, z, z_{a1}; E_\lambda). \quad (42)$$

Учитывая явный вид соотношений (24)–(26) и переходя к переменной z , выражение (42) в безразмерных переменных можно записать в виде

$$a_{11} = \frac{m_h^*}{4\pi \hbar^2 a_h L^* (L^* + z^*)} \left[(L^* + z^*) B_{e^{2L^*\eta}} \left(\frac{L^* - z^*}{2L^*}, 0 \right) + 2L^* e^{(L^* + z^*)\eta} \times \right.$$

$$\times {}_2F_1\left(1, \frac{L^* + z^*}{2L^*}; \frac{1}{2}\left(3 + \frac{z^*}{L^*}\right); e^{2L^* \eta}\right) + 2(L^* + z^*)(i\pi + \ln(2 \operatorname{sh}(L^* \eta))) \Bigg], \quad (43)$$

Учитывая, что $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha$, можно переписать уравнения (35) в виде

$$\begin{aligned} \frac{\alpha m_h^*}{2\pi\hbar^2} &= a_{11} + a_{12}, \quad u\text{-терм}, \\ \frac{\alpha m_h^*}{2\pi\hbar^2} &= a_{11} - a_{12}, \quad g\text{-терм}. \end{aligned} \quad (44)$$

Подставляя в (44) соответствующие выражения для a_{11} и a_{12} , получим в боровских единицах дисперсионные уравнения, определяющие u - и g -термы

$$\begin{aligned} \alpha &= e^{-z^* \eta} \left[2L^* z^* e^{(L^* + 2z^*) \eta} {}_2F_1\left(1, \frac{L^* + z^*}{2L^*}; \frac{1}{2}\left(3 + \frac{z^*}{L^*}\right); e^{2L^* \eta}\right) + \right. \\ &+ (L^* + z^*) \left[z^* e^{-z^* \eta} \left[B_{e^{2L^* \eta}}\left(\frac{L^* - z^*}{2L^*}, 0\right) + \left\{ \frac{0}{4i\pi} \right\} + \left\{ \frac{\ln(2 \operatorname{sh}(L^* \eta/2))}{\ln(2 \operatorname{ch}(L^* \eta/2))} \right\} \mp \right. \right. \\ &\left. \left. \mp B_{e^{2L^* \eta}}\left(-\frac{z^*}{2L^*}, 0\right) \mp B_{e^{2L^* \eta}}\left(\frac{z^*}{2L^*}, 0\right) \right] \mp 2L^* \right] = \eta_i z^* L^* (L^* + z^*), \quad (45) \end{aligned}$$

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

На рис. 2 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 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 [7].

Примесная фотолюминесценция в 2D-структурах

Рассмотрим фотолюминесценцию, связанную с излучательной рекомбинацией 2D-электронов со дна зоны проводимости, и дырок, локализованных на A^0 -центрах.

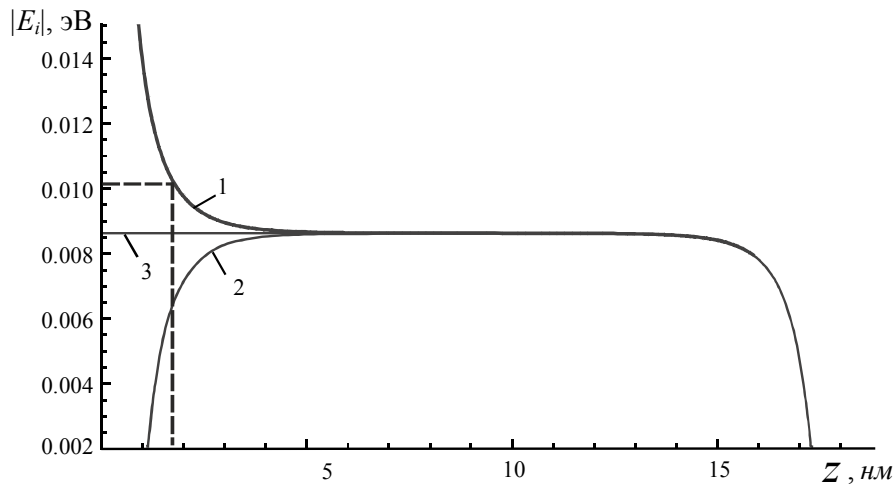


Рис. 2. Термы A_2^+ -центра КЯ GaAs (штрих-пунктирная линия показывает z , нм характерное расстояние между примесными центрами при энергии связи 10,08 мэВ: 1 – g -терм; 2 – u -терм; 3 – случай изолированного A^+ -центра

Спектральная плотность излучения, определяемая переходом электрона из начального состояния в конечное, связана с вероятностью перехода в единицу времени [6] и с учетом дисперсии размеров КЯ определяется следующим выражением:

$$\Phi(\omega) = \frac{4\omega^2 \sqrt{\epsilon} e^2 N_{A^+}}{c^3} \left| \frac{P_{eh} e_0}{m_0} \right| \left| \int \sum_i \int \int \psi_e^*(z, \vec{\rho}) \psi_\lambda(z, \vec{\rho}) dz d\vec{\rho} \right|^2 \times \\ \times f_G(L, \bar{L}, \sigma) d\vec{k}_e dL \delta(E_i - E_f - \hbar\omega), \quad (46)$$

где m_0 – масса свободного электрона; e – заряд электрона; P_{eh} – матричный элемент оператора импульса на блоховских амплитудах зонных носителей; ω – частота излучаемой электромагнитной волны поляризации e_0 ; ϵ – диэлектрическая проницаемость материала КЯ; N_{A^+} – количество A^+ -центров в КЯ.

Энергия начального состояния определяется выражением

$$E_i = E_g + \hbar^2 \pi^2 n^2 / 2 m_e^* L^2 + \hbar^2 k_e^2 / 2 m_e^*,$$

соответственно энергия конечного состояния $E_f = \hbar^2 \lambda^2 / 2 m_h^*$ (энергия отсчитывается от потолка валентной зоны) и E_g – ширина запрещенной зоны. При этом предполагается, что дисперсия КЯ по размерам описывается гауссовским распределением

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

где $\bar{L}$ – средняя ширина КЯ; σ – среднеквадратичный разброс ширины КЯ в окрестности $\bar{L}$.

Волновая функция конечного состояния в случае A^+ -центров берется в виде

$$\begin{aligned} \psi_{\lambda}(\vec{\rho}, z; z_a, E_{\lambda}) = & \frac{C_{A^+}}{(2\pi)^2} \int \frac{d\vec{k} e^{i\vec{k}\vec{\rho}}}{\sqrt{\lambda^2 + k^2}} \operatorname{cosech} \left(L \left(\sqrt{\lambda^2 + k^2} \right) \right) \times \\ & \times \left(\operatorname{ch} \left(\sqrt{\lambda^2 + k^2} (L - |z_a - z|) \right) - \operatorname{ch} \left(\sqrt{\lambda^2 + k^2} (L - |z_a + z|) \right) \right), \end{aligned} \quad (47)$$

где константа нормировки C_{A^+} равна

$$C_{A^+} = \sqrt{\frac{2\pi\lambda \operatorname{sh}[L\lambda]}{(\operatorname{ch}[L\lambda] - \operatorname{ch}[(L - z_a)\lambda])}}. \quad (48)$$

Учитывая явный вид волновых функций электронов в зоне проводимости,

$$\psi_e(z, \vec{k}_y) = \frac{1}{\sqrt{S}} e^{i\vec{k}_e\vec{\rho}} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi n z}{L}. \quad (49)$$

Интеграл от волновых функций, входящий в (46), запишется в виде

$$\begin{aligned} & \int \psi_e^*(z, \vec{\rho}) \psi_{\lambda}(z, \vec{\rho}) dz d\vec{\rho} = \\ & = C_{A^+} \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^2} \int d\vec{\rho} e^{-i\vec{\rho}(\vec{k} - \vec{k}_e)} \int_0^L dz \frac{1}{\sqrt{S}} \sqrt{\frac{2}{L}} \left(\operatorname{ch} \left(\sqrt{\lambda^2 + k^2} (L - |z_a - z|) \right) - \right. \\ & \quad \left. - \operatorname{ch} \left(\sqrt{\lambda^2 + k^2} (L - |z_a + z|) \right) \right) \frac{\operatorname{cosech} \left(L \left(\sqrt{\lambda^2 + k^2} \right) \right)}{\sqrt{\lambda^2 + k^2}} \sin \frac{\pi n z}{L}, \end{aligned} \quad (50)$$

учитывая, что $\int d\vec{\rho} e^{-i\vec{\rho}(\vec{k} - \vec{k}_e)} = (2\pi)^2 \delta(\vec{k} - \vec{k}_e)$, выражение (50) перепишется в виде

$$\begin{aligned} \int \psi_e^*(z, \vec{\rho}) \psi_{\lambda}(z, \vec{\rho}) dz d\vec{\rho} = & C_{A^+} \int_0^L dz \sqrt{\frac{2}{L}} \frac{\operatorname{cosech} \left(L \left(\sqrt{\lambda^2 + k_e^2} \right) \right)}{\sqrt{\lambda^2 + k_e^2}} \sin \frac{\pi n z}{L} \times \\ & \times \left(\operatorname{ch} \left(\sqrt{\lambda^2 + k_e^2} (L - |z_a - z|) \right) - \operatorname{ch} \left(\sqrt{\lambda^2 + k_e^2} (L - |z_a + z|) \right) \right). \end{aligned} \quad (51)$$

Интеграл в последнем выражении можно вычислить, в результате получим

$$\int \psi_e^*(z, \vec{\rho}) \psi_{\lambda}(z, \vec{\rho}) dz d\vec{\rho} = \frac{2\sqrt{2} \sin \left(\frac{z_a \pi n}{L} \right)}{\sqrt{S} L \left(\frac{\pi^2 n^2}{L^2} + (k_e^2 + \lambda^2) \right)}, \quad (52)$$

и выражение (46) запишется в виде

$$\begin{aligned} \Phi_{A^+}(\omega) = & \frac{4a_h^3 \omega^2 \sqrt{\varepsilon} e^2 n_{A^+}}{c^3} \left| \frac{P_{eh} e_0}{m_0} \right|^2 \times \\ & \times \int dL \sum_n \int d\vec{k}_e f_G(L, \bar{L}, \sigma_{A^+}) C_{A^+}^2 \frac{8 \sin\left(\frac{z_a \pi n}{L}\right)^2}{\left(\frac{\pi^2 n^2}{L^2} + (k_e^2 + \lambda_{A^+}^2)\right)^2} \times \\ & \times \delta\left(E_g + \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2m_e^* L^2} + \frac{\hbar^2 k_e^2}{2m_e^*} - \frac{\hbar^2 \lambda_{A^+}^2}{2m_h^*} - \hbar\omega\right), \end{aligned} \quad (53)$$

где n_{A^+} – концентрация A^+ -центров в объеме КЯ.

В дальнейшем мы будем предполагать, что процессы люминесценции связаны с переходом электрона из нижней размерно-квантованной зоны проводимости в основное состояние A^+ - и A_2^+ -центров. Это вполне оправдано, если учесть, что при $\hbar\omega \gg kT$ электроны находятся в состоянии первой размерно-квантованной подзоны.

Учет мезоскопического уширения пика примесной люминесценции требует замены δ -функции на лоренцевский контур

$$\begin{aligned} \Phi_{A^+}(\omega) = & \frac{4\omega^2 \sqrt{\varepsilon} e^2 n_{A^+}}{c^3} \left| \frac{P_{eh} e_0}{m_0} \right|^2 \int dL \int d\vec{k}_e f_G(L, \bar{L}, \sigma_{A^+}) C_{A^+}^2 \times \\ & \times \frac{8 \sin\left(\frac{z_a \pi}{L}\right)^2}{\left(\frac{\pi^2}{L^2} + (k_e^2 + \lambda_{A^+}^2)\right)^2} \frac{1}{2\pi} \frac{\Gamma_{A^+}}{\left(E_g + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_e^* L^2} + \frac{\hbar^2 k_e^2}{2m_e^*} - \frac{\hbar^2 \lambda_{A^+}^2}{2m_h^*} - \hbar\omega\right)^2 + \Gamma_{A^+}^2}, \end{aligned} \quad (54)$$

где Γ_{A^+} – параметр мезоскопического уширения для одноцентровой задачи.

В безразмерных переменных последнее выражение можно представить в виде

$$\begin{aligned} \Phi_{A^+}(X) = & \frac{16X^2 \alpha^* e^2 n_{A^+} C_{A^+}^{*2}}{c^2} \left| \frac{P_{eh} e_0}{m_0} \right|^2 \int dL^* \int k_e^* dk_e^* f_G(L^*, \bar{L}^*, \sigma_{A^+}^*) \times \\ & \times \frac{\sin\left(\frac{z_a^* \pi}{L^* \bar{L}^*}\right)^2}{\left(\frac{\pi^2}{\bar{L}^2 L^{*2}} + (k_e^{*2} + \eta_{A^+}^2)\right)^2} \frac{\bar{L}^* \Gamma_{A^+}^*}{\left(G + \frac{\gamma \pi^2}{\bar{L}^2 L^{*2}} + \gamma k_e^{*2} - \eta_{A^+}^2 - X\right)^2 + \Gamma_{A^+}^{*2}}, \end{aligned} \quad (55)$$

где $\gamma = m_h / m_e$, $L^* = L / \bar{L}$, $\bar{L}^* = \bar{L} / a_h$, $k_e^* = k_e a_h$, $\eta_{A^+} = \lambda_{A^+} a_h$, $\Gamma_{A^+}^* = \Gamma_{A^+} / a_h$, $X = \hbar\omega / E_h$, $\sigma_{A^+}^* = \sigma_{A^+} / a_h$, $z_a^* = z_a / a_h$, α^* – постоянная тонкой структуры с учетом диэлектрической проницаемости, а коэффициент нормировки $C_{A^+}^*$ и функция распределения $f_G(L^*, \bar{L}^*, \sigma_{A^+}^*)$ в безразмерных переменных определяются следующими выражениями:

$$C_{A^+}^* = \sqrt{\frac{2\pi\eta_{A^+} \operatorname{sh}[\bar{L}^* \eta_{A^+}]}{(\operatorname{ch}[\bar{L}^* \eta_{A^+}] - \operatorname{ch}[(\bar{L}^* - z_a^*)\eta_{A^+}])}}; \quad (56)$$

$$f_G(L^*, \bar{L}^*, \sigma_{A^+}^*) = \left(1 / \sqrt{2\pi\sigma_{A^+}^*}\right) \exp\left(-\left(L^* \bar{L}^* - \bar{L}^*\right)^2 / 2\sigma_{A^+}^{*2}\right). \quad (57)$$

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

$$\begin{aligned} \Phi_{A^+}(X) = & A \int dL^* \frac{C_{A^+}^2 n_{A^+} X^2 f_G(L^*, \bar{L}^*, \sigma_{A^+}^*) \left(\sin\left(\frac{z_a^* \pi}{\bar{L}^* L^*}\right)\right)^2}{L^* \left(\pi^2 + \bar{L}^{*2} L^{*2} \eta_{A^+}^2\right) \left(\pi^2 + \bar{L}^{*2} L^{*2} \left(\eta_{A^+}^2 + k_0^*\right)\right)} \times \\ & \times \frac{1}{\left(\Gamma_{A^+}^{*2} + \left(X - G + (1 + \gamma) \eta_{A^+}^2\right)^2\right)^2} \times \\ & \times \left\{ k_0^* \bar{L}^{*4} L^{*4} \Gamma_{A^+}^* \left(\Gamma_{A^+}^{*2} + \left(X - G + (1 + \gamma) \eta_{A^+}^2\right)^2\right) - \right. \\ & \left. - \gamma \left(\pi^2 + \bar{L}^{*2} L^{*2} \eta_{A^+}^2\right) \left(\pi^2 + \bar{L}^{*2} L^{*2} \left(\eta_{A^+}^2 + k_0^*\right)\right) \times \right. \\ & \times \left[\left(\left(X + G + (1 + \gamma) \eta_{A^+}^2\right)^2 - \Gamma_{A^+}^*\right) \left(\operatorname{arctg} \left(\frac{G \bar{L}^{*2} L^{*2} + \pi^2 \gamma - \bar{L}^{*2} L^{*2} \left(X + \eta_{A^+}^2\right)}{\Gamma_{A^+}^* \bar{L}^{*2} L^{*2}}\right) - \right. \right. \\ & \left. \left. - \operatorname{arctg} \left(\frac{G \bar{L}^{*2} L^{*2} + \pi^2 \gamma - \bar{L}^{*2} L^{*2} \left(X - k_0^* \gamma + \eta_{A^+}^2\right)}{\Gamma_{A^+}^* \bar{L}^{*2} L^{*2}}\right) \right) + \Gamma_{A^+}^* \left(G - X - (1 + \gamma) \eta_{A^+}^2\right) \times \right. \\ & \left. \times \left(2 \ln \left(\pi^2 + \bar{L}^{*2} L^{*2} \left(\eta_{A^+}^2 + k_0^*\right)\right) - 2 \ln \left(\pi^2 + \bar{L}^{*2} L^{*2} \eta_{A^+}^2\right) + \right. \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \ln \left(G^2 \bar{L}^{*4} L^{*4} + \pi^4 \gamma^2 - 2 \bar{L}^{*2} L^{*2} \pi^2 \gamma \left(X + \eta_{A^+}^2 \right) - \right. \\
& - 2G \left(\bar{L}^{*4} L^{*4} \left(X + \eta_{A^+}^2 \right) - \bar{L}^{*2} L^{*2} \pi^2 \gamma + \bar{L}^{*4} L^{*4} \left(\Gamma_{A^+}^{*2} + \left(X + \eta_{A^+}^2 \right)^2 \right) \right) - \\
& - \ln \left(G^2 \bar{L}^{*4} L^{*4} + \pi^4 \gamma^2 - 2 \bar{L}^{*2} L^{*2} \left(\pi^2 \gamma \left(X - k_0^* \gamma + \eta_{A^+}^2 \right) - \right. \right. \\
& \left. \left. - G \left(\pi^2 \gamma - \bar{L}^{*2} L^{*2} \left(X - k_0^* \gamma + \eta_{A^+}^2 \right) \right) \right) \right) + \bar{L}^{*4} L^{*4} \left(\Gamma_{A^+}^{*2} + \left(X - k_0^* \gamma + \eta_{A^+}^2 \right)^2 \right) \left. \right) \right), \quad (58)
\end{aligned}$$

где при интегрировании было учтено, что при низких температурах ($T \approx 4,3 \text{ K}$) 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 $k_0 = \sqrt{kT/a_h}$, соответственно константа A определяется выражением

$$A = \left| \frac{P_{eh} e_0}{m_0} \right|^2 \frac{16 \pi \alpha^* e^2}{c^2}. \quad (59)$$

Рассмотрим теперь случай A_2^+ -центров. Волновая функция A_2^+ -состояния имеет следующий вид:

$$\begin{aligned}
\psi_{\lambda}(\vec{\rho}, z; z_a, E_{\lambda}) &= \frac{C_{A_2^+}}{(2\pi)^2} \int \frac{d\vec{k} e^{i\vec{k}\vec{\rho}}}{\sqrt{\lambda_{A_2^+}^2 + k^2}} \text{cosech} \left(L \left(\sqrt{\lambda_{A_2^+}^2 + k^2} \right) \right) \times \\
&\times \left(\text{ch} \left(\sqrt{\lambda_{A_2^+}^2 + k^2} (L - |z_{a1} - z|) \right) - \text{ch} \left(\sqrt{\lambda_{A_2^+}^2 + k^2} (L - |z_{a1} + z|) \right) + \right. \\
&+ \left. \text{ch} \left(\sqrt{\lambda_{A_2^+}^2 + k^2} (L - |z_{a2} - z|) \right) - \text{ch} \left(\sqrt{\lambda_{A_2^+}^2 + k^2} (L - |z_{a2} + z|) \right) \right), \quad (60)
\end{aligned}$$

где z_{a1} , z_{a2} — координаты A_2^0 -центров вдоль оси роста структуры, а константа нормировки $C_{A_2^+}$ двуцентральной волновой функции равна

$$\begin{aligned}
C_{A_2^+} &= \left(2\pi \lambda_{A_2^+} \text{sh} \left[L \lambda_{A_2^+} \right] \right)^{\frac{1}{2}} \left(2 \text{ch} \left[L \lambda_{A_2^+}^2 \right] - \text{ch} \left[(L - 2z_{a1}) \lambda_{A_2^+}^2 \right] - \right. \\
&- \left. \text{ch} \left[(L - 2z_{a2}) \lambda_{A_2^+}^2 \right] - 2 \text{ch} \left[(L - z_{a1} - z_{a2}) \lambda_{A_2^+}^2 \right] + 2 \text{ch} \left[(L - |z_{a2} - z_{a1}|) \lambda_{A_2^+}^2 \right] \right)^{-\frac{1}{2}}. \quad (61)
\end{aligned}$$

Спектральная плотность излучения для A_2^+ -центров в безразмерных переменных с учетом лоренцева уширения примет следующий вид:

$$\begin{aligned} \Phi_{A_2^+}(X) = & \frac{16X^2 \alpha^* e^2 n_{A_2^+} C_{A_2^+}^{*2}}{c^2} \left| \frac{P_{eh} e_0}{m_0} \right|^2 \times \\ & \times \int dL^* \int k_e^* dk_e^* \frac{f_G(L^*, \bar{L}^*, \sigma^*)}{\left(\frac{\pi^2}{L^{*2}} + \left(k_e^{*2} + \eta_{A_2^+}^2 \right) \right)^2} \left(\sin \left(\frac{z_{a1}^* \pi}{L^*} \right) + \right. \\ & \left. + \sin \left(\frac{z_{a2}^* \pi}{L^*} \right) \right)^2 \frac{\bar{L}^* \Gamma_{A_2^+}^*}{\left(G + \frac{\gamma \pi^2}{L^{*2}} + \gamma k_e^{*2} - \eta_{A_2^+}^2 - X \right)^2 + \Gamma_{A_2^+}^{*2}}, \end{aligned} \quad (62)$$

где $n_{A_2^+}$ – концентрация A_2^+ -центров в объеме КЯ; $\Gamma_{A_2^+}^*$ – параметр мезоскопического уширения в случае двуцентральной задачи, а константа нормировки $C_{A_2^+}^*$ в безразмерных переменных определяется следующим выражением:

$$\begin{aligned} C_{A_2^+} = & \left(2\pi \eta_{A_2^+} \operatorname{sh} \left[L \eta_{A_2^+} \right] \right)^{\frac{1}{2}} \left(2 \operatorname{ch} \left[L \eta_{A_2^+}^2 \right] - \operatorname{ch} \left[(L - 2z_{a1}) \eta_{A_2^+}^2 \right] - \right. \\ & \left. - \operatorname{ch} \left[(L - 2z_{a2}) \eta_{A_2^+}^2 \right] - 2 \operatorname{ch} \left[(L - z_{a1} - z_{a2}) \eta_{A_2^+}^2 \right] + 2 \operatorname{ch} \left[(L - |z_{a2} - z_{a1}|) \eta_{A_2^+}^2 \right] \right)^{\frac{1}{2}}, \end{aligned} \quad (63)$$

где $z_{a1}^* = z_{a1} / a_h$, $z_{a2}^* = z_{a2} / a_h$.

После интегрирования в безразмерных переменных соответственно получим выражение, определяющее спектральную интенсивность излучения для двуцентральной задачи:

$$\begin{aligned} \Phi_{A_2^+}(X) = & A \int dL^* \times \\ & \times \frac{C_{A_2^+}^2 n_{A_2^+} X^2 f_G(L^*, \bar{L}^*, \sigma^*) \left(\sin \left(\frac{z_{a1}^* \pi}{L^*} \right) + \sin \left(\frac{z_{a2}^* \pi}{L^*} \right) \right)^2}{L^* \left(\pi^2 + \bar{L}^{*2} L^{*2} \eta_{A_2^+}^2 \right) \left(\pi^2 + \bar{L}^{*2} L^{*2} \left(\eta_{A_2^+}^2 + k_0^* \right) \right) \left(\Gamma_{A_2^+}^{*2} + \left(X - G + (1 + \gamma) \eta_{A_2^+}^2 \right)^2 \right)^2} \times \\ & \times \left(k_0^* \bar{L}^{*4} L^{*4} \Gamma_{A_2^+}^* \left(\Gamma_{A_2^+}^{*2} + \left(X - G + (1 + \gamma) \eta_{A_2^+}^2 \right)^2 \right) - \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\gamma \left(\pi^2 + \bar{L}^{*2} L^{*2} \eta_{A_2^+}^2 \right) \left(\pi^2 + \bar{L}^{*2} L^{*2} \left(\eta_{A_2^+}^2 + k_0^* \right) \right) \times \\
& \times \left(\left(\left(X + G + (1 + \gamma) \eta_{A_2^+}^2 \right)^2 - \Gamma_{A_2^+}^* \right) \arctg \left(\frac{G \bar{L}^{*2} L^{*2} + \pi^2 \gamma - \bar{L}^{*2} L^{*2} \left(X + \eta_{A_2^+}^2 \right)}{\Gamma_{A_2^+}^* \bar{L}^{*2} L^{*2}} \right) - \right. \\
& \left. - \arctg \left(\frac{G \bar{L}^{*2} L^{*2} + \pi^2 \gamma - \bar{L}^{*2} L^{*2} \left(X - k_0^* \gamma + \eta_{A_2^+}^2 \right)}{\Gamma_{A_2^+}^* \bar{L}^{*2} L^{*2}} \right) \right) + \Gamma_{A_2^+}^* \left(G - X - (1 + \gamma) \eta_{A_2^+}^2 \right) \times \\
& \times \left(2 \ln \left(\pi^2 + \bar{L}^{*2} L^{*2} \left(\eta_{A_2^+}^2 + k_0^* \right) \right) - 2 \ln \left(\pi^2 + \bar{L}^{*2} L^{*2} \eta_{A_2^+}^2 \right) + \ln \left(G^2 \bar{L}^{*4} L^{*4} + \right. \right. \\
& \left. \left. + \pi^4 \gamma^2 - 2 \bar{L}^{*2} L^{*2} \pi^2 \gamma \left(X + \eta_{A_2^+}^2 \right) - 2 G \left(\bar{L}^{*4} L^{*4} \left(X + \eta_{A_2^+}^2 \right) - \bar{L}^{*2} L^{*2} \pi^2 \gamma + \right. \right. \right. \\
& \left. \left. \left. + \bar{L}^{*4} L^{*4} \left(\Gamma_{A_2^+}^{*2} + \left(X + \eta_{A_2^+}^2 \right)^2 \right) \right) \right) - \right. \\
& \left. - \ln \left(G^2 \bar{L}^{*4} L^{*4} + \pi^4 \gamma^2 - 2 \bar{L}^{*2} L^{*2} \left(\pi^2 \gamma \left(X - k_0^* \gamma + \eta_{A_2^+}^2 \right) - \right. \right. \right. \\
& \left. \left. \left. - G \left(\pi^2 \gamma - \bar{L}^{*2} L^{*2} \left(X - k_0^* \gamma + \eta_{A_2^+}^2 \right) \right) \right) \right) + \bar{L}^{*4} L^{*4} \left(\Gamma_{A_2^+}^{*2} + \left(X - k_0^* \gamma + \eta_{A_2^+}^2 \right)^2 \right) \right) \right), \quad (64)
\end{aligned}$$

где $n_{A_2^+}$ – концентрация A_2^+ -центров в КЯ.

На рис. 3 представлены кривые спектральной зависимости в случае примесной фотолюминесценции с участием A^+ - и A_2^+ -центров. При численных расчетах применялись следующие численные значения величин: $\eta_1 = 0,45$, $\eta_2 = 0,504$, что соответствует энергии связи A^+ -центров $E_{A^+\lambda} = 8,6$ мэВ и A_2^+ -центров $E_{A_2^+\lambda} = 10,08$ мэВ [7]. При этом эффективная масса электрона и масса дырки считались равными $m_e = 0,07 m_0$, $m_h = 0,45 m_0$, где m_0 – масса свободного электрона. Исходя из экспериментальных данных [1], полуширина пиков фотолюминесценции принималась равной соответственно $\Gamma_{A^+} = 0,0017$ эВ и $\Gamma_{A_2^+} = 0,0025$ эВ, а ширина запре-

щенной зоны в приближении эффективной массы, исходя из экспериментальных данных [7], полагалась равной $E_g = 1,51$ эВ.

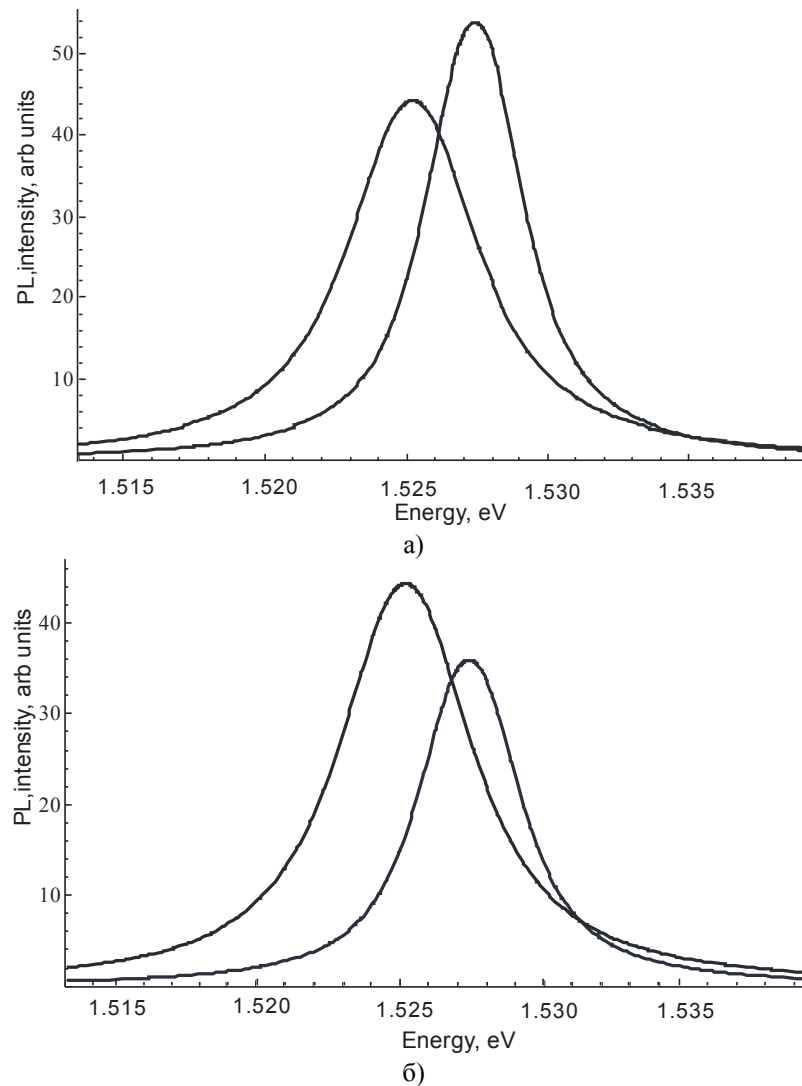


Рис. 3. Спектральная зависимость примесной фотолюминесценции при различных значениях концентрации A^+ - и A_2^+ -центров: а – $n_{A^+}/n_{A_2^+} = 50$, б – $n_{A^+}/n_{A_2^+} = 33$

Из рис. 3 видно, что интенсивность спектральной зависимости сильно зависит от концентрации A^+ - и A_2^+ -центров. С уменьшением концентрации A^+ -центров интенсивность соответствующей линии падает, а интенсивность линии, соответствующей A_2^+ -центрам, растет. Такое поведение амплитуд линий фотолюминесценции можно объяснить тем, что с увеличением степени легирования отдельные A^+ -центры постепенно переходят в A_2^+ -состояния. Следует также отметить хорошее согласие между значениями энергий, на которые приходятся максимумы амплитуд теоретических и эксперименталь-

ных линий фотолюминесценции [1]. Таким образом, анализ, проведенный в данной работе, позволяет утверждать, что модель A_2^+ -центров в состоянии адекватно описать экспериментальные данные, свидетельствующие о существовании молекулярных состояний A^+ -центров в 2D-структурах GaAs/AlGaAs.

Список литературы

1. **Петров, П. В.** Молекулярное состояние A^+ -центров в квантовых ямах GaAs/AlGaAs / П. В. Петров, Ю. Л. Иванов, А. Е. Жуков // ФТП. – 2007. – Т. 41. – № 7. – С. 850.
2. **Smondryev, M. A.** Polaron effect in GaAs/AlGaAs quantum wells / M. A. Smondryev, J. T. Devreese, F. M. Peeters // Phys. Rev. B. 46. – 1995. – V. 51. – P. 15008.
3. **Кревчик, В. Д.** Особенности поглощения света глубокими примесными центрами в тонких полупроводниковых слоях / В. Д. Кревчик, Э. З. Имамов // ФТП. – 1983. – Т. 17. – № 7. – Р. 1235.
4. **Прудников, А. П.** Интегралы и ряды / А. П. Прудников, Ю. А. Брычков, О. И. Маричев. – М.: Наука, 1981.
5. **Кревчик, В. Д.** Термы одномерного молекулярного иона D_2^- в продольном магнитном поле / В. Д. Кревчик, А. Б. Грунин, М. Б. Семенов, А. А. Марко, В. Ч. Жуковский // Вестник Московского государственного университета. – 2004. – V. 5. – С. 7. – (Сер. 3. Физика, астрономия).
6. **Леванюк, А. П.** Краевая люминесценция прямозонных полупроводников / А. П. Леванюк, В. В. Осипов // УФН. – 1981. – Т. 133. – С. 427.
7. **Петров, П. В.** Роль флуктуаций потенциала в энергетической структуре квантовых ям GaAs/AlGaAs с A^+ -центрами / П. В. Петров, Ю. Л. Иванов, В. С. Михрин, А. Е. Жуков // ФТП. – 2008. – Т. 42. – № 10. – С. 1219.

Кревчик Владимир Дмитриевич

доктор физико-математических наук,
профессор, заведующий кафедрой
физики, Пензенский государственный
университет

E-mail: physics@pnzgu.ru

Krevchik Vladimir Dmitrievich

Doctor of physical and mathematical
sciences, professor, head of physics
sub-department, Penza State University

Левашов Александр Владимирович

кандидат физико-математических наук,
доцент, кафедра физики, Пензенский
государственный университет

E-mail: physics@pnzgu.ru

Levashov Alexander Vladimirovich

Candidate of physical and mathematical
sciences, associate professor,
sub-department of physics,
Penza State University

УДК 539.23; 539.216.1

Кревчик, В. Д.

Особенности молекулярных состояний A^+ -центров в 2D-структурах /
В. Д. Кревчик, А. В. Левашов // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2010. – № 4 (16). – С. 165–183.