

УДК 004.032.84

**В.И. Осинский**<sup>1</sup>, д. -р. техн. наук, **М.С. Оначенко**<sup>2</sup><sup>1</sup>Государственное предприятие «НИИ Микроприборов» НАН Украины,  
ул. Северо-Сырецкая, 3, Киев, 04136, Украина.<sup>2</sup>Национальный технический университет Украины «Киевский политехнический институт»,  
ул. Политехническая, 16, г. Киев-56, 03056, Украина.

## Исследование излучения экситонов как элементов для квантовых вычислений

*Статья посвящена сравнительным исследованиям излучения экситонов прямозонных и непрямозонных материалов. На основании анализа водородоподобных моделей экситонов и полученных результатов исследований экситонов прямозонных и непрямозонных материалов был найден оптимальный подход для практической реализации эффективных элементов для квантовых вычислений. При использовании широкозонных прямозонных материалов  $A^3B^5$  и  $A^2B^6$  открываются новые возможности экситонов и квантовых точек как элементов квантового компьютера с высоким коэффициентом сохранения когерентности электронных состояний при комнатных температурах. Библ. 17, рис. 6.*

**Ключевые слова:** экситон; квантовые вычисления; когерентность; декогерентизация.

### Введение

Для сохранения когерентности электронных состояний при комнатных температурах необходимо использовать обособленные атомные структуры, такие как квантовые точки, экситоны, фуллерены. В элементах квантовых вычислений необходимо обеспечить следующие физико-технологические условия:

- Энергия энергетических переходов электронов в квантовых точках должна существенно превышать тепловую энергию колебаний кристаллической решетки  $kT=26$  мэВ.
- Отсутствие всех видов дефектов кристаллической решетки и границ раздела.
- Высокий квантовый выход излучательной рекомбинации.
- Конструктивно-технологическое обеспечение управляемого туннелирования носителей между элементами структуры.
- Фотонное управление вводом и выводом информации.

Этим условиям удовлетворяют широкозонные материалы  $A^3B^5$ ,  $A^2B^6$  с прямой зонной структурой [1].

### Использование экситонов для квантовых вычислений

Характерной особенностью зонной структуры широкозонных материалов является их полярность, обусловленная кристаллической решеткой вюрцита, классическим примером которых является оксид цинка ZnO, сапфир  $Al_2O_3$ , имеющие эллиптический характер пространственного расположения индексов Миллера и показателей преломления  $n$  по осям координат. В этих структурах S-орбитали имеют симметрию, характерную для  $\Gamma_7$  зоны проводимости, тогда как валентные зоны определяются P-орбиталями и они расщепляются (spin-orbit splitting) на 3 зоны полем кристалла. В отличие от классических полупроводников кремния и германия, из-за вюрцитной геометрии кристаллической решетки в этих материалах валентные зоны не вырождаются. Поэтому энергетические переходы между валентной зоной и зоной проводимости являются экситонными, в которых существует очень сильное кулоновское взаимодействие между электронами и дырками, а электронно-дырочные пары являются пространственно связанными на орбите, похожей на орбиту атома водорода (рис. 1) с энергией связи

$$E = \frac{13,6}{n^2} \cdot \frac{m_t}{m_0} \left( \frac{1}{\epsilon_0} \right)^2, \quad (1)$$

где  $\epsilon_0$  – диэлектрическая константа;  $m_t$  и  $m_0$  – приведенные эффективные массы экситона и свободного электрона; соответственно;  $n$  – квантовое число возбужденных состояний экситона. Так как электрон и дырка связаны вместе кулоновскими силами, которые обеспечивают их пространственную корреляцию, существует большая вероятность рекомбинации и соответствующая эффективность излучения. В узкозонных материалах  $A^3B^5$  и  $A^2B^6$  энергия связи экситонов существенно меньше, чем тепловая энергия  $kT$  при комнатной температуре – 26 мэВ (рис. 2). Широкозонные материалы  $A^3B^5$  и  $A^2B^6$

имеют большую энергию связи экситонов, которая существенно превышает  $kT$  при комнатной температуре. Так, ZnO имеет энергию связи экситонов – 60 мэВ. В этом случае водородоподобный экситон дает более резкий край поглощения, а также обеспечивает резонанс с основным состоянием ширины запрещенной зоны [2].

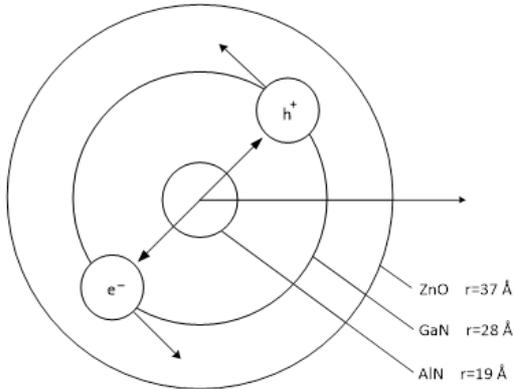


Рис. 1. Изображение водородоподобных моделей экситонов, показывающие силу кулоновских взаимодействий и направления движения центров масс,  $r$  – радиусы экситонов

Уравнение Шредингера для взаимодействующей пары имеет вид [3]:

$$\left[ \frac{\hbar^2}{2m_n^*} \nabla_{r_n}^2 - \frac{\hbar^2}{2m_p^*} \nabla_{r_p}^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0(r_n-r_p)} \right] \Psi(r_n, r_p) = E_\Sigma \Psi(r_n, r_p), \quad (2)$$

где  $\nabla_{r_n}^2$  и  $\nabla_{r_p}^2$  – операторы Лапласа в координатах

натах электрона и дырки;  $E_\Sigma$  – энергия экситона,  $r_n$  и  $r_p$  – радиус-векторы, определяющие положения электрона и дырки,  $m_n^*$  и  $m_p^*$  – их скалярные эффективные массы,  $\epsilon_r$  – относительная диэлектрическая проницаемость среды.

Если ввести радиус-вектор центра тяжести  $R$ , характеризующий положение электронно-дырочной пары, и радиус-вектор  $r$  относительно положения электрона и дырки

$$R = \frac{m_n^* r_n + m_p^* r_p}{m_n^* + m_p^*}, \quad (3)$$

$$r = r_n - r_p, \quad (4)$$

то уравнение (1) в новых координатах будет иметь вид

$$\left[ \frac{\hbar^2}{2M^*} \nabla_R^2 - \frac{\hbar^2}{2m_r^*} \nabla_r^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0|r|} \right] \Psi(R, r) = E_\Sigma \Psi(R, r), \quad (5)$$

где

$$M^* = m_n^* + m_p^* \text{ и } m_r^* = \frac{m_n^* m_p^*}{m_n^* + m_p^*}, \quad (6)$$

есть эффективная и приведенная масса экситона.

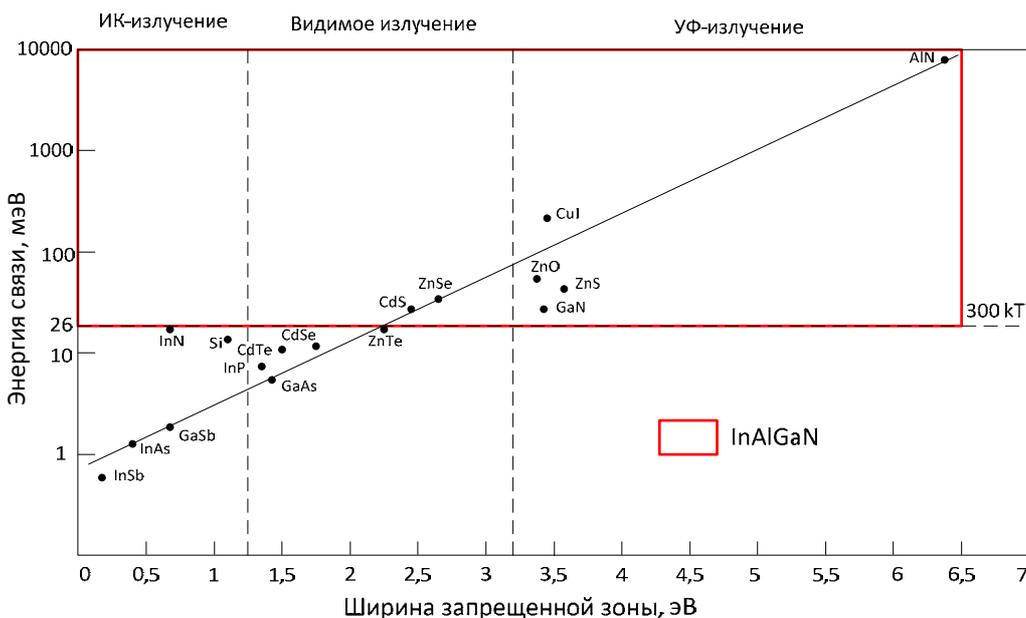


Рис. 2. Графики зависимости энергии связи экситона от ширины запрещенной зоны ряда материалов  $A^3B^5$  и  $A^2B^6$

Собственные волновые функции экситонных состояний, удовлетворяющих уравнению (5) имеют форму

$$\Psi(R, r) = e^{i(k_{ex}R)}\phi(r), \quad (7)$$

где  $k_{ex} = k_n + k_p$  – волновой вектор экситона, а  $k_n$  и  $k_p$  – волновые векторы электрона и дырки.

Плоская волна  $e^{i(k_{ex}R)}$  описывает свободное движение экситона, а волновая функция  $\phi(r)$  описывает состояние внутреннего движения экситона, т.е. движение электрона и дырки относительно центра массы. Подстановка (7) в (5) сводит задачу к водородоподобной:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_r^*}\nabla_r^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0|r|}\right]\phi(r) = (E_\Sigma - \frac{\hbar^2 k_{ex}^2}{2M^*})\phi(r) = E'_{ex}\phi(r). \quad (8)$$

Значения энергии  $E'_{ex}$ , являются энергией связи экситона, которая образует водородоподобную серию

$$E'_{ex} = -\frac{e^4 m_r^*}{32\pi^2 \hbar^2 \epsilon_r^2 \epsilon_0^2 n^2} = -\frac{E_{ex}}{n^2}, \quad (9)$$

где  $E_{ex}$  – энергия экситона, равная:

$$E_{ex} = -\frac{e^4 m_r^*}{32\pi^2 \hbar^2 \epsilon_r^2 \epsilon_0^2}, \quad (10)$$

$n$  – квантовое число, определяющее различные экситонные состояния ( $n \geq 1$ ).

Поскольку в экситоне приведенная масса меньше эффективной массы электрона и дырки (6), энергия связи экситона будет меньше энергии ионизации донора

$$E_d = \frac{13,52Z^2}{\epsilon_r^2} \left( \frac{m^*}{m_0} \right).$$

где  $Z$  – атомное число.

Следовательно, полная энергия экситона с учетом (9), равна:

$$E_\Sigma = \frac{\hbar^2 k_{ex}^2}{2M^*} + E'_{ex} = \frac{\hbar^2 k_{ex}^2}{2M^*} - \frac{E_{ex}}{n^2}. \quad (11)$$

В полупроводниках с прямыми переходами при  $k=0$  экситону ( $n=1$ ) соответствует очень узкий пик на краю поглощения, который уширяется с повышением температуры.

В полупроводниках с непрямыми переходами также возможно образование экситонов. В этом случае длинноволновый край спектра поглощения экситона ( $n=1$ ) определяется из условий для переходов с поглощением фонона

$$h\nu = E_g - E_p - E_{ex} \quad (12)$$

и с испусканием фонона

$$h\nu = E_g + E_p - E_{ex}. \quad (13)$$

В полупроводниках с непрямыми переходами образование экситона сопровождается возникновением ступеньки на краю собственного поглощения. При этом возможны переходы с участием нескольких фононов, испускание и поглощение которых возможны в различных комбинациях, поэтому на краю поглощения будет наблюдаться много ступенек.

При поглощении света полупроводником возможно и такое возбуждение электронов и дырок, когда кулоновское взаимодействие между ними приводит к объединению их с образованием ионоподобных или молекулподобных комплексов. Так, два свободных электрона и одна свободная дырка или две свободные дырки и один свободный электрон, объединяясь, образуют экситонные ионы. Кроме того, два свободных электрона и две дырки могут объединяться в комплекс, напоминающий молекулу позитрония.

Свободная дырка может объединиться с нейтральным донором или акцептором и образовать заряженные экситонные ионы. В этом случае электрон и дырка, связанные с донором, движутся вокруг донора, поэтому такой комплекс называется «связанным экситоном». Образование связанных экситонов может быть и в случае, когда два свободных электрона и одна свободная дырка связаны с донором или когда две дырки и электрон связаны с акцептором.

В достаточно чистом полупроводнике при возбуждении светом, энергия которого близка к ширине запрещенной зоны, возможно возникновение экситона – свободного электрона и свободной дырки, связанных силой кулоновского притяжения. При рекомбинации таких носителей заряда, т.е. при аннигиляции экситона, будет излучаться узкая спектральная линия. В полупроводнике с прямой запрещенной зоной, имеющем разрешенные переходы (рис. 3, а), энергия экситонного излучения равна:

$$h\nu = E_g - E_{ex} \quad (14)$$

Экситон может иметь возбужденные состояния, энергия ионизации которых согласно (9) в  $n^2$  раз меньше, чем энергия ионизации основного состояния, соответствующего  $n=1$ . Поэтому излучение свободного экситона может состоять из серии узких линий.

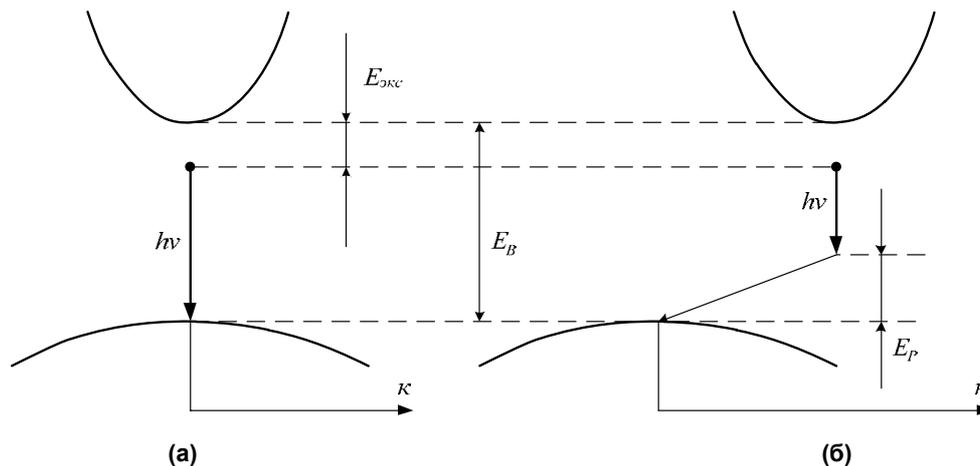


Рис. 3. Экситонная рекомбинация: (а) – прямая; (б) – непрямая

В полупроводнике с непрямой запрещенной зоной (рис. 3, б), у которого закон сохранения квазиимпульса осуществляется за счет испускания оптического фонона с энергией  $E_p$ , энергия излученного фонона

$$h\nu = E_g - E_{ex} - E_p. \quad (15)$$

У полупроводников с прямыми разрешенными переходами излучение свободного экситона может также происходить с испусканием одного или нескольких фононов, но вероятность таких переходов уменьшается и соответствующая линия излучения становится слабее.

В присутствии примесей могут образоваться связанные экситоны. Их спектр излучения состоит из узких линий с энергиями, меньшими, чем при рекомбинации свободного экситона. На рис. (рис. 4) в качестве примера приведен спектр фотолюминесценции достаточно чистого фосфида индия. Пик излучения, обозначенный цифрой 1, обусловлен рекомбинацией связанного экситона с испусканием соответственно 0, 1, 2 и 3 продольных оптических фононов LO, энергия которого составляет 43 мэВ.

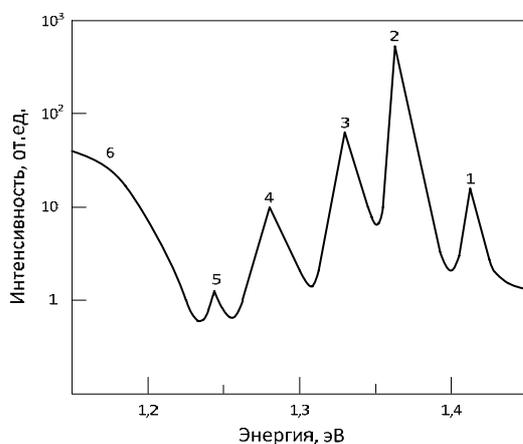


Рис. 4. Спектр фотолюминесценции InP при 6 К

### Излучение экситонов в прямозонных и непрямозонных материалах

Излучательная рекомбинация экситонов – процесс аннигиляции связанных электронно-дырочных пар, единичный акт которого сопровождается испусканием кванта света [4]. Энергия кванта, в простейшем случае, равна энергетическому зазору между рекомбинирующими частицами. В зависимости от начального и конечного состояний рекомбинирующих электронов и дырок относительно акта излучательной рекомбинации различают рекомбинационные переходы типа зона-зона, зона-локальный уровень с закрепленным экситоном. В прямозонных полупроводниках GaAs, GaN, ZnO, InP аннигиляция экситонов в основном сопровождается высокоэффективным, близким к 100% излучением фотонов. В непрямозонных полупроводниках Si, Ge, GaP, SiC и др. излучательные переходы в экситонах являются маловероятными вследствие невыполнения закона сохранения импульса, однако они могут осуществляться, если происходит передача импульса третьей частице – фонону, т.е. акт аннигиляции электрона и дырки происходит с испусканием фотона и фонона (процессы с поглощением фонона маловероятны при низких температурах). Однако, поскольку фонон, унося импульс, уносит и некоторую энергию, то энергия кванта света, образовавшегося в результате излучательной рекомбинации с участием фонона, оказывается меньше энергетического зазора между рекомбинирующими носителями заряда:

$$h\nu = E_g - E_p. \quad (16)$$

Специфической особенностью непрямозонных полупроводников является большое различие между экспериментально наблюдаемым временем жизни  $\tau$  носителей заряда и вычис-

ленным временем жизни относительно излучательной рекомбинации  $T_{abc}$ . Время жизни неосновных носителей заряда в кремнии ( $\tau_r$ ) не превышает  $10^{-3}$  с, в то время как  $T_{abc}$ , найденное из принципа детального равновесия составляет для кремния 3,1 с. Это свидетельствует о наличии эффективных каналов безызлучательной рекомбинации в кремнии, следствием чего является малый квантовый выход излучательной рекомбинации ( $10^{-4}$ - $10^{-5}$ ) [4].

Установлено, что понижение температуры от комнатной до азотной приводит к затуханию излучения зона-зона и к разгоранию рекомбинационного излучения свободных экситонов, однако, как показали Вавилов и Нолле [5], повышение уровня возбуждения при низкой температуре может привести к возникновению междузонной люминесценции. В ряде других работ сообщалось, что кинетика спада рекомбинационного излучения после снятия возбуждения определяется безызлучательным временем жизни, т.е. эффективным временем жизни неосновных носителей заряда в кремнии [4].

Гашение излучательной рекомбинации электронно-дырочных пар наблюдалось в различных дислокационных материалах с дислокациями: Si, GaAs, GaP, InP и других. Уменьшение времени жизни свободных экситонов в дислокационном Ge изучались в работах [6-8]. Методом катодолюминесценции исследовалось пространственное распределение интенсивности излучательной рекомбинации вблизи дефектов. Показано, что интенсивность излучательной рекомбинации, максимальная в бездислокационной части кристалла, падает по мере приближения области возбуждения к дислокации. Например, для GaN падение интенсивности краевой полосы начинается на удалении 5-10 мкм от ядра дислокации [6]. Непрямозонные полупроводники германий и кремний имеют существенно меньший квантовый выход излучательной рекомбинации, для них возможно наблюдение лишь коллективного влияния дислокаций на интенсивность рекомбинационного излучения.

В работе [9] проведено исследование экситонной люминесценции в CdSe и CdS. Показано, что с ростом плотности дислокаций квантовый выход излучения падает, это объясняется процессами неупругого взаимодействия экситонов и дислокаций. Механизм взаимодействия, по мнению авторов [9], заключается в ионизации экситонами локальных дефектов, связанных с дислокациями.

Конкуренция дислокационных безызлучательных каналов рекомбинации и каналов излучательной рекомбинации, не связанных с дислокациями, обнаружена также для рекомбинационного излучения экситонов, локализованных на неионизованных атомах примеси, а также для излучательной рекомбинации через глубокие центры.

Значительный интерес представляют исследования каналов излучательной рекомбинации, непосредственно связанных с дефектами. Результаты таких исследований могут дать информацию об энергетике дефектных состояний, о механизмах захвата и рекомбинации неосновных носителей заряда через дефекты, о взаимодействии дефектов с примесями и дефектами решетки. Новые линии в спектрах рекомбинационного излучения, обусловленные дефектами, были обнаружены в Ge [10], CdSe, CdS, GaAs и др. [11-13].

Для сравнения пиковых значений на рис. 5 представлены спектры рекомбинационного излучения свободных экситонов в InGaN/GaN при температуре  $T=300$  К (а) и в кремнии при температуре  $T=18$  К (б). Для кремния еще в ранних работах [14] показано, что при температуре жидкого азота большая часть рекомбинационного излучения обусловлена излучательной аннигиляцией свободных экситонов с участием фононов. Фононный спектр кремния имеет 4 ветви, поэтому спектр экситонной люминесценции может иметь до 8 однофононных линий, однако при низких температурах переходы с поглощением фононов маловероятны. Линия Е обусловлена излучательным переходом с испусканием ТА-фонона, линия Д-ТО-фонона, линии В и А связаны с двухфононными переходами. Было показано, что линия имеет две компоненты (рис.5). Сложная структура этой линии обусловлена снятием вырождения, вызванного наличием 6 эквивалентных минимумов зоны проводимости. Однако, впоследствии было доказано, что две компоненты линии Д представляют излучательные переходы с различными оптическими фононами ТО и LO, энергия которых составляет 58,02 и 56,1 мэВ, соответственно.

На рис. 6, а представлены интенсивности излучения экситонов прямозонных материалов AlGaInN/GaN с разными плотностями дислокаций N и непрямоzonных Si и Ge. На рис. 6, б показана зависимость степени когерентности материалов от температуры.

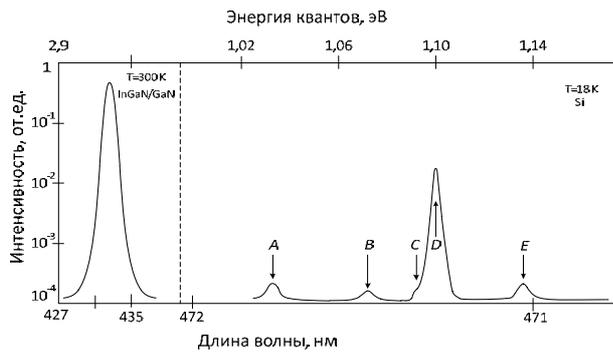
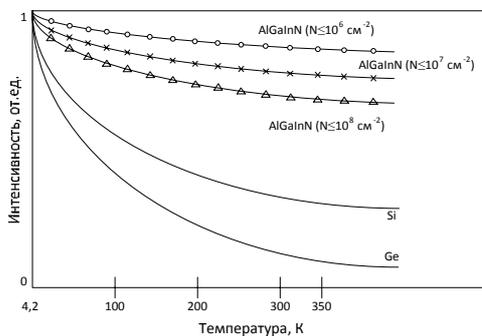
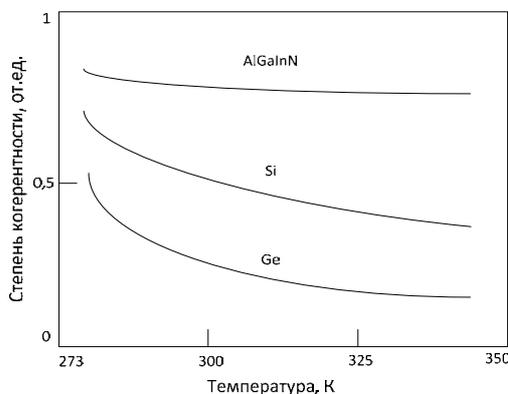


Рис. 5. Сравнение пиковых значений спектров InGaN/GaN и Si, полученных при разных температурах

В ряде работ проводился анализ формы экситонных линий рекомбинационного излучения. В [15] на основе теории Русбрека и Шокли были сопоставлены результаты измерений оптического поглощения и фотолюминесценции. Расчеты показали, что при температуре 18 К наблюдается хорошее совпадение экспериментального и расчетного спектров. Форма линий излучательной рекомбинации свободных экситонов анализировалась и другими авторами.



(а)



(б)

Рис. 6. Интенсивности (а) и степень когерентности (б) излучения экситонов прямозонных AlGaInN/GaN и непрямозонных Si и Ge полупроводников

Температурная зависимость интенсивности рекомбинационного излучения свободных экситонов исследовалась в работе Шлангенотто и др. Было найдено, что с ростом температуры коэффициент излучательной рекомбинации  $B$  падает. Между тем, теоретический расчет на основе принципа детального равновесия дает слабое увеличение  $B$  с температурой. Авторы работы предлагают более сложную модель расчета  $B$ , которая удовлетворительно описывает экспериментальную зависимость  $B(T)$ . В то же время, в работе отмечено, что при использовании точных скорректированных значений концентрации носителей заряда, обычный расчет на основе принципа детального равновесия [16] дает очень хорошее согласие с экспериментом.

В ряде работ исследовались временные характеристики экситонного излучения при возбуждении его короткими световыми или токовыми импульсами. Было показано, что времена спада рекомбинационного излучения после выключения накачки составляют 5–50 мкс и сильно зависят от уровня возбуждения. Затухание экситонной люминесценции происходит экспоненциально в очень больших пределах изменения интенсивности.

### Связанные экситоны

При определённых условиях неравновесные электрон и дырка в кристаллах могут образовывать не только экситон, свободно перемещающийся по кристаллу и называемый свободным (экситон Ванье-Мотта), но и локализованный на дефекте экситон малого радиуса, являющийся связанным (экситон Френкеля) [17].

В большинстве случаев связанные экситоны образуются на нейтральных центрах, хотя в определенных условиях возможно их образование и на заряженных дефектах. С высокой вероятностью связанные экситоны образуются на изоэлектронных ловушках. Изоэлектронной примесью называется атом такого элемента, который находится в одной группе периодической таблицы с замещаемым атомом. Однако не любая изоэлектронная примесь способна связать экситон. Изоэлектронные примеси замещения образуют связанные экситоны тогда, когда примесный и замещаемый атомы существенно отличаются как по электроотрицательности, так и по ковалентным радиусам. В этом случае примесный атом искажает потенциальную энергию электрона в решетке, образуя при этом глубокую потенциальную яму, не превышающую в размере межатомное расстояние. В эту потенциальную яму вблизи изоэлектронной примеси

захватывается электрон или дырка. После того как носитель одного знака (например, электрон) будет захвачен - локализован, изоэлектронный центр приобретает заряд и затем довольно легко захватывает носитель противоположного знака (в нашем случае - дырку). Таким образом, образуется связанная электронно-дырочная пара в виде экситона, сильно локализованного в пространстве. Экситон Френкеля имеет два существенных отличия по сравнению с экситоном Ванье-Мота:

1. Энергетический уровень основного состояния экситона Френкеля находится ниже аналогичного уровня экситона Ванье-Мотта, т. е. энергия диссоциации  $E_{ex}$  для связанного экситона больше, чем для экситона Ванье-Мота. Для некоторых материалов энергия диссоциации может составлять доли электрон вольт. Поэтому экситон Френкеля более стабилен при комнатной температуре по сравнению с экситоном большого радиуса.

2. Поскольку экситон Френкеля локализован в координатном пространстве, то, согласно соотношению неопределенностей Гейзенберга, он полностью делокализован в  $k$ -пространстве. Используя соотношение неопределенностей:  $\Delta p \cdot \Delta r \geq \hbar$ , проведём оценку величины  $\Delta k$ .

Если область локализации электрона в координатном пространстве  $\Delta r \sim a$ , то изменение импульса:  $\Delta p = \Delta(\hbar k) = \hbar \Delta k \geq \frac{\hbar}{\Delta r} = \frac{\hbar}{a}$  отсюда сле-

$$\text{дует: } \Delta k \geq \frac{1}{a}.$$

Другими словами, квазиволновой вектор связанного экситона может принимать любые значения в пределах зоны Бриллюэна. Этот факт достаточно важный для непрямозонных полупроводников, поскольку не требует для связанных экситонов участия фононов в излучательной рекомбинации.

Механизм излучательной рекомбинации связанных экситонов является весьма эффективным в полупроводниках с непрямой структурой энергетических зон (кремний, германий, фосфид галлия), поскольку вероятность излучательной рекомбинации через такой центр существенно больше вероятности непрямых межзонных переходов. Типичным примером изоэлектронной ловушки может служить атом азота N в фосфиде галлия (GaP) - полупроводнике с непрямой структурой энергетических зон. Атом азота N замещает атом фосфора P в узлах решетки. Азот N и фосфор P имеют одинаковую внешнюю электронную конфигурацию

( $1s^2 2s^2 2p^3$  и  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$ ), поскольку оба принадлежат к V группе элементов периодической системы, а структуры их внутренних оболочек сильно различаются.

Спектр излучательной рекомбинации связанных экситонов более узкий, чем спектр свободных экситонов, т. к. связанный экситон локализован в координатном пространстве и его кинетическая энергия невелика по сравнению с таковой у свободного экситона большого радиуса.

### Рекомбинационное излучение «экситонных молекул и капель»

В 1966 году Хейнс, исследуя фотолюминесценцию кремния при достаточно высокой скорости генерации неосновные носители заряда, обнаружил, что понижение температуры образца до 3 K приводит к качественной трансформации спектра, заключающейся в том, что интенсивность линий излучательной рекомбинации свободных экситонов резко падает, однако в спектре появляются три новые полосы (рис.5), смещенные на 16 мэВ в длинноволновую область относительно экситонных линий. Основываясь на развитой Лампертом модели образования в кристаллах электронно-дырочных комплексов (экситонных молекул), подобных позитронной молекуле, Хейнс идентифицировал обнаруженное им излучение как излучательную рекомбинацию носителей в таких комплексах [14, 15].

Спустя несколько лет Келдыш показал, что при низкой температуре и достаточно высоком уровне возбуждения возможен другой механизм связывания экситонов - коллективное состояние электронов и дырок типа жидкости. В отличие от модели экситонных молекул (биэкситонов), согласно которой образуются парные ассоциации экситонов, модель электронно-дырочной жидкости предполагает связывание (конденсацию) большого числа неосновных носителей заряда в "капли" электронно-дырочной жидкости. В физических проявлениях электронно-дырочные капли и биэкситоны должны иметь много различий: контур спектральных линий излучательной рекомбинации, зависимость интенсивности рекомбинационного излучения электронно-дырочной жидкости или биэкситонов от уровня возбуждения, электропроводность образца и др. Тем не менее, в течение нескольких лет не было единой точки зрения на природу линий, обнаруженных Хейнсом, ряд авторов придерживался "биэкситонной" модели, другие считали, что эти линии связаны с элек-

тронно-дырочной жидкостью. К настоящему времени можно считать установленным, что линии Хейнса обусловлены излучательной рекомбинацией неосновных носителей заряда в электронно-дырочной жидкости. Тем не менее, биекситонная концепция также нашла свое подтверждение. Было показано, что при определенных условиях в спектре рекомбинационного излучения кремния наблюдается и линия биекситонов, однако биекситон в кремнии является промежуточной фазой, виртуальным состоянием в процессе конденсации экситонов и образования электронно-дырочной жидкости. Следует отметить, что существует и другая точка зрения на механизмы образования электронно-дырочной жидкости, согласно которой в "капли" связываются не экситоны, а непосредственно свободные электроны и дырки.

Исследованию рекомбинационного излучения электронно-дырочной жидкости посвящено значительное число работ. В большинстве из них высокая плотность неосновных носителей заряда, необходимая для связывания экситонов в электронно-дырочную жидкость, достигается с помощью импульсного оптического возбуждения, однако авторы отдельных работ применяют инжекцию неосновных носителей заряда в *i*-область длинных *p-i-n* диодов или возбуждение образца электронным пучком. Процесс образования электронно-дырочной жидкости носит пороговый характер относительно уровня возбуждения, пороговая концентрация экситонов  $n_0$ , необходимая для их конденсации, была оценена Келдышем, а затем измерена экспериментально. Ее величина составляет  $\approx 1 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$  при  $T=20 \text{ К}$  и  $1 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$  при  $T=4,2 \text{ К}$ . В то же время, концентрация электронно-дырочных пар внутри капли  $n_k$  - величина постоянная  $\sim 3 \cdot 6 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ . Таким образом, при гелиевых температурах  $n_0 < n_k$ , это значит, что при промежуточных уровнях возбуждения, когда  $n_0 < n_{ex} < n_k$ , где  $n_{ex}$  - концентрация свободных экситонов, электронно-дырочная жидкость будет занимать лишь часть образца. Это подтверждается результатами работы по исследованию пространственного распределения электронно-дырочной жидкости в образце. В этой работе показано также, что "капли" электронно-дырочной жидкости окружены плотными облаками экситонов, находящимися в термодинамическом равновесии с электронно-дырочной жидкостью.

Проводимость внутри "капель" имеет металлический характер, однако при малой степени заполнения образца "каплями" этот факт никак не влияет на проводимость всего образца. При повышении уровня возбуждения электронно-

но-дырочная жидкость может заполнить весь образец, его сопротивление в этом случае резко падает.

В ряде работ показано, что центрами конденсации электронно-дырочной жидкости являются примеси и дефекты структуры решетки. При этом, порог образования электронно-дырочной жидкости, ширина линии рекомбинационного излучения, температурная область существования являются функциями концентрации примесей или дефектов. Например, если в специально не легированном материале верхняя температурная граница существования электронно-дырочной жидкости составляет 20К, то в образце *Si* с концентрацией фосфора  $\sim 10^{17} \text{ см}^{-3}$  линия рекомбинационного излучения электронно-дырочной жидкости наблюдалась вплоть до 80 К.

В электронно-дырочной жидкости рекомбинационные процессы имеют ряд специфических особенностей. Время жизни экситонов при  $T=4,2 \text{ К}$ , найденное из кинетики спада экситонного излучения, составляет 5 мкс, кинетика высвечивания линии электронно-дырочной капли не превышает 0,2-0,5 мкс. Таким образом, связывание экситонов в электронно-дырочные капли более чем на порядок понижает их время жизни. В германии, где коллективные взаимодействия экситонов носят тот же характер, что и в кремнии, нет столь резкого различия этих времен. Более того, измерение квантового выхода излучательной рекомбинации в электронно-дырочных каплях для германия и кремния дает значения, различающиеся на три порядка ( $\eta=5 \cdot 10^{-4}$  для *Si* и  $\eta=0,8$  для *Ge*). Большие различия в величинах  $\tau_k$  и  $\eta$  для германия и кремния обусловлены индивидуальными свойствами их зонной структуры. Зонная структура кремния обуславливает большую вероятность безизлучательных Оже-процессов в электронно-дырочной капле, в то время как зонная структура германия разрешает такие переходы только с участием фононов, что существенно уменьшает их вероятность.

Значительный интерес представляет теоретическая работа [15], в которой рассматривается взаимодействие электронно-дырочной жидкости с дислокациями. Показано, что капле электронно-дырочной жидкости энергетически выгодно связаться с дислокацией, при этом, вблизи дислокации капля должна принять форму цилиндра, т.е. растечься вдоль оси дислокации. При наличии в кристалле дислокационной сетки такое растекание может привести к образованию проводящего кластера, образованного из нитей электронно-дырочной жидкости.

Следует заметить, что исследования электронно-дырочной капли и биэкситонов помимо чисто научного интереса имеют прикладное значение, поскольку с их помощью возможно интерпретировать процессы, происходящие в квантово-размерных системах при различных температурах, включая комнатные.

Низкотемпературная область ( $T < 70\text{K}$ ) характеризуется независимостью интенсивности излучения в этих линиях от температуры при малой плотности дефектов, либо экспоненциальной зависимостью  $\exp \frac{E_D}{kT}$ , где энергия активации  $E_D$  достаточно мала, порядка 10 мэВ, для всех типов материалов с наличием дефектов.

### Выводы

- Важными факторами сохранения когерентности квантовых состояний экситонов является их структурная идентичность, т.е. их размеры, 3D форма, расстояние между экситонами и их взаимное расположение. Они должны быть одинаковыми, а кристаллическая структура внутри и на поверхности не содержать дефектов. Энергия размерного квантования должна быть больше 100-150 мэВ и существенно, не меньше, чем в 5-20 раз превышать тепловую энергию частиц при комнатной температуре, которая равна 26 мэВ. В таком соотношении энергий носителей зарядов по сравнению с энергией  $kT$  можно не учитывать. Это обеспечивает длительное сохранение когерентности квантовых состояний при комнатной температуре. Управлять энергетическим спектром экситонов можно изменением их размеров, а также экситонных молекул и капель, что позволяет регулировать области поглощения или излучения ими света. При этом для сохранения когерентности квантовых состояний важно использовать структуры с низкой плотностью дислокаций, каковыми являются наностержни или низкоразмерные наноструктуры, полученные при селективной эпитаксии.
- Для получения экситонов в их молекулах и каплях в нанотехнологиях используются механизмы самосборки атомов при которых отдельные атомы и молекулы «выстраиваются» в упорядоченные структуры силами механических напряжений между подложкой и растущей фазой или каталитическими химическими процессами при росте. Примером таких реакций являются биологические системы в которых катализаторы-ферменты собирают аминокислоты и формируют живые ткани.
- Важным результатом является установление того факта, что захват носителей на дислокационные центры идет в виде свободных экситонов. Хорошо известно, что дислокации являются эффективными центрами захвата и рекомбинации для свободных электронов и дырок. В то же время, проведенные нами эксперименты убедительно показывают, что в широкозонных материалах с прямой структурой помимо этого канала существует канал рекомбинации неравновесных носителей заряда на дислокациях, определяемый захватом на них электронно-дырочных пар, уже связанных в экситоны.
- В непрямозонных материалах типа кремния, фосфида галлия образуются связанные экситоны, сохраняющие высокую степень когерентности без взаимодействия с кристаллической решеткой в диапазоне комнатных температур.
- В широкозонных материалах типа нитридов галлия и алюминия, оксида цинка энергии связи экситонов существенно, на порядок, превышают тепловую энергию  $kT$ , что эквивалентно поведению экситонов при низких температурах – возрастает время жизни экситонов, снижается декогерентизация.

### Список использованных источников

1. *Осинский В.И.* Декогерентизация III-N низкоразмерных наноструктур квантовых процессоров / Осинский В.И., Масол И.В., Оначенко М.С., Суший А.А.// IX Всероссийская конференция «Нитриды галлия, индия и алюминия- структуры и приборы» – М.: СПб. – 2013. – С. 100–101.
2. *J. Muth, A. Osinsky.* Properties of ZnO Alloys, p. 179-204; In the book “Wide Bandgap Light Emitting Materials and Devices” Edited by G.Neumark, I.Kuskovsky, H.Jiang, Wiley-VCH, 2007.
3. *Шалимова К.В.* Физика полупроводников. – М.: Энергоатомиздат, 1985. – 392 ст., ил.
4. *Грибковский В.П.* Теория поглощения и испускания света в полупроводниках. – Минск: Наука и техника, 1975.
5. *Вавилов В.С., Нолле Э.Л.* Рекомбинационное излучение чистого кремния при большом уровне возбуждения. – ФТП, 1968, т.2, вып.5, с.742-744.

6. *Говорков А.В., Колесник Л.И.* Микрока-тодолюминесцентное исследование влияния дефектов структуры на излучательную рекомбинацию в арсениде галлия. – ФТП, 1978, т.12, вып.3, с.448-452.
7. *Rasul A., Davidson S.* A detailed study of radiation and non-radiation recombination around dislocations in GaP. – In: Gallium arsenide and related compound (Edinburgh), 1976, p.306.
8. *Drozhdov N.A., Patrín A.A., Tkachev V.D.* Modification of the dislocation luminescence spectrum by oxygen atmospheres in silicon. – Phys. Stat. sol. (a), 1981, v. 64, №1, p. 61-65.
9. *Осипьян Ю.А., Тимофеев В.Б., Штейнман Э.А.* Рассеяние экситонов на дислокациях в кристаллах Cd Se . – ЖЭТФ, 1972, т.62, вып.1, с.272-279.
10. *Newman R.* Recombination radiation from deformed and alloyed germanium p-n-junction at 80 K. – Phys. Rev., 1957, v.105, N 6, p.1715-1720.
11. *Гиппиус А.А., Вавилов В.С.* Излучательная рекомбинация на дислокациях в германии. – ФТТ, 1962, т.4, вып.9, с.2426-2433.
12. *Гиппиус А.А., Вавилов В.С.* О механизме излучательной рекомбинации на дислокациях в германии. – ФТТ, 1964, т.6, вып.8, с.2361-2368.
13. *Гиппиус А.А., Вавилов В.С., Гончаров М.С., Мурашев М.С.* Излучательная рекомбинация в кристаллах германия с большой плотностью дислокаций. – ФТТ, 1965, т.7, вып.2, с.645-647.
14. *Haynes J.* Experimental proof of the existence of a new electronic complex in silicon. - Phys. Rev. Lett., 1960, v.4, N 7, p.361-363.
15. *Haynes J.R., Lax M., Flood W.F.* The role of excitons in recombination radiation from silicon. – In; Proc. Internat. Conf. on Semiconductor Physics, Prague, 1960, Academic Press., Inc., New-York, 1961, p.423-426.
16. *Ван Русбрек В., Шокли В.* Излучательная рекомбинация электронов и дырок в германии. – В кн.: Проблемы физики полупроводников / Под ред. В.Л.Бонч-Бруевича. – М.: ИЛ, 1957, с.122-127.
17. *Бродін М.* Відкриття та дослідження молекулярних екситонів, Львів, Львівський Національний університет, 2001, 64 с.

Поступила в редакцию 24 марта 2015 г

УДК 004.032.84

**В.І. Осинський<sup>1</sup>**, д.-р. техн. наук, **М.С. Оначенко<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Державне підприємство «НДІ Мікроприладів» НАН України, вул. Північно-Сирецька, 3, Київ, 04136, Україна.

Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут», вул. Політехнічна, 16, м. Київ-56, 03056, Україна.

## Дослідження випромінювання екситонів як елементів для квантових обчислень

Стаття присвячена порівняльним дослідженням випромінювання екситонів прямозонних і непрямозонних матеріалів. На підставі аналізу воднеподібних моделей екситонів та отриманих результатів досліджень екситонів прямозонних і непрямозонних матеріалів був знайдений оптимальний підхід для практичної реалізації ефективних елементів для квантових обчислень. При використанні широкозонних прямозонних матеріалів  $A^3B^5$  і  $A^2B^6$  відкриваються нові можливості екситонів і квантових точок як елементів квантового комп'ютера з високим коефіцієнтом збереження когерентності електронних станів при кімнатних температурах. Бібл. 17, рис. 6.

**Ключові слова:** екситон; квантові обчислення; когерентність; декогерентизація.

UDC 004.032.84

**V. Osinsky**<sup>1</sup>, Dr.Sc., **M. Onachenko**<sup>2</sup><sup>1</sup>Research Institute of Microdevices

St. Pivnichno-Syretska, 3, Kyiv, 04136, Ukraine

<sup>2</sup>National Technical University of Ukraine "Kiev Polytechnic Institute",

st. Polytechnique, 16, Kiev-56, 03056, Ukraine.

## Investigation of exciton emission as elements for quantum computing

*Article is devoted to a comparative study of the exciton emission and indirect-direct-gap materials. Based on the analysis of hydrogen-exciton models and results of studies of excitons and indirect-direct-gap materials was found optimal approach for practical implementation of effective elements for quantum computing. When using wideband direct-gap materials  $A^3B^5$  and  $A^2B^6$  new opportunities excitons and quantum dots as elements of a quantum computer with high conservation of the coherence of electron states at room temperature. Bible. 17, Fig. 6.*

**Keywords:** exciton; quantum computing; coherence; decoherence.

### References

1. Osinsky, V.I., Masol, I.V., Onachenko, M.S., Sushiy, A.A. (2013). Decoherence III-N low-dimensional nanostructures quantum processors. IX Vserossiyskaya konferencia «Gallium, Indium, Aluminium Nitrides and structures and devices» Moscow., Pp. 100–101. (Rus.)
2. Muth, J., Osinsky, A. (2007). Properties of ZnO Alloys". In the book "Wide Bandgap Light Emitting Materials and Devices. Edited by G.Neumark, I.Kuskovsky, H.Jiang, Wiley-VCH, Pp. 179-204.
3. Shalimova, K.V. (1985). Physics of semiconductors. M.: Energoatomizdat, P. 392. (Rus.)
4. Gribkovsky, V.P. (1975). The theory of absorption and emission of light in semiconductors. Minsk: Nauka i tehnika. (Rus.)
5. Vavilov, V.S., Nolle, E.L. (1968). Recombination radiation of pure silicon at high excitation levels. FTP, Issue 5, Vol.2, Pp. 742-744. (Rus.)
6. Govorkov, A.V., Kolesnik, L.I. (1978). Microcathodes Fluorescent investigation of the influence of structural defects on the radiative recombination in gallium arsenide. FTP, Issue 3, Vol.12, Pp.448-452. (Rus.)
7. Rasul, A., Davidson, S. (1976). A detailed study of radiation and non-radiation recombination around dislocations in GaP. In: Gallium arsenide and related compound (Edinburgh), p.306.
8. Drozdov, N.A., Patrin, A.A., Tkachev, V.D. (1981). Modification of the dislocation luminescence spectrum by oxygen atmospheres in silicon. Phys. Stat. sol. (a), Vol. 64, No. 1, Pp. 61-65.
9. Osipyanyan, Yu.A., Timofeev, V.B., Schteinman, E.A. (1972). Exciton scattering on dislocations in CdSe crystals" GETF, Issue 1, Vol.62, Pp.272-279. (Rus.)
10. Newman, R. (1957). Recombination radiation from deformed and alloyed germanium p-n-junction at 80 K. Phys. Rev., Vol. 105, No. 6, Pp.1715-1720.
11. Gippius, A.A., Vavilov, V.S. (1962). Radiative recombination at dislocations in germanium. FTT, Issue 9, Vol.4, pp.2426-2433. (Rus.)
12. Gippius A.A., Vavilov V.S. (1964), "Radiative recombination at dislocations in germanium". FTT, Issue 8, Vol.6, Pp. 2361-2368. (Rus.)
13. Gippius, A.A., Vavilov, V.S., Goncharov, M.S., Murashev, M.S. (1965). Radiative recombination in germanium crystals with a high density of dislocations. FTT, Issue 2, Vol.7, Pp.645-647. (Rus.)
14. Haynes, J. (1960). Experimental proof of the existence of a new electronic complex in silicon. Phys. Rev. Lett., Vol. 4, No. 7, Pp.361-363.
15. Haynes, J.R., Lax, M., Flood, W.F. (1961). The role of excitons in recombination radiation from silicon. In; Proc. Internat. Conf. on Semiconductor Physics, Prague, Academic Press., Inc., New-York, Pp.423-426.
16. Van Rusbrek, V., Shokley, V. (1957). Radiative recombination of electrons and holes in germanium. Problemy fiziki poluprovodnikov / ed. by V.L.Bonch-Bruevich, Moscow, Pp.122-127. (Rus.)
17. Brodin, M. (2001). Discovery and fermentation studies of molecular excitons. Lviv, Lvivsky Natsionalny universitet. P. 64. (Ukr.)