

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК  
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе

---

На правах рукописи

Самосват Дмитрий Михайлович

**Безызлучательные переходы и перенос энергии  
в полупроводниковых квантовых точках**

01.04.10 – физика полупроводников

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

Научный руководитель  
д. физ.-мат. наук., профессор  
Зегря Георгий Георгиевич

Санкт-Петербург – 2015

# Содержание

<b>Введение</b> . . . . .	4
<b>Обзор литературы</b> . . . . .	9
<b>Глава 1. Механизмы оже-рекомбинации в полупроводниковых квантовых точках</b> . . . . .	17
1.1. Введение . . . . .	17
1.2. Уравнения Кейна и основные соотношения . . . . .	19
1.3. Волновые функции носителей заряда в квантовой точке . . . . .	22
1.4. Вероятность оже-рекомбинации . . . . .	26
1.5. Матричный элемент оже-рекомбинации . . . . .	28
1.6. Скорость и коэффициент оже-рекомбинации . . . . .	34
1.7. Эксперимент . . . . .	41
1.8. Время жизни носителей заряда при низких температурах. Матричный элемент и скорость оже-процесса . . . . .	45
1.9. Обсуждение результатов . . . . .	53
1.10. Заключение . . . . .	57
Приложение А: Вычисление квазипорогового матричного элемента . . . . .	59
Приложение Б: Вычисление беспорогового матричного элемента . . . . .	60
<b>Глава 2. Энергетический спектр и время жизни носителей заряда в открытых квантовых точках в электрическом поле</b> . . . . .	63
2.1. Введение . . . . .	63
2.2. Энергетический спектр и волновые функции электронов в открытых квантовых точках . . . . .	65
2.3. Эффект Штарка в открытых квантовых точках . . . . .	71
2.4. Заключение . . . . .	82

Приложение А: Вывод поправок теории возмущений для случая квазистационарных состояний . . . . .	83
<b>Глава 3. Безызлучательный резонансный перенос энергии между полупроводниковыми квантовыми точками . . . . .</b>	<b>86</b>
3.1. Введение . . . . .	86
3.2. Волновые функции носителей заряда . . . . .	87
3.3. Матричный элемент кулоновского взаимодействия . . . . .	90
3.4. Скорость резонансного переноса энергии . . . . .	111
3.5. Обсуждение результатов . . . . .	117
3.6. Заключение . . . . .	120
Приложение А. Интеграл перекрытия в матричном элементе, связанном с подмешиванием состояний. . . . .	122
Приложение Б. Интеграл перекрытия в обменном матричном элементе.	123
<b>Заключение . . . . .</b>	<b>129</b>
<b>Литература . . . . .</b>	<b>133</b>

## Введение

**Актуальность темы исследования.** В настоящее время технология изготовления полупроводниковых гетероструктур позволяет создавать новые низкоразмерные структуры, такие как квантовые ямы, квантовые нити, квантовые точки. Квантовые точки — это уникальный объект в современной физике полупроводников, который имеет многофункциональное применение. За счет пространственного ограничения носителей заряда по всем трем направлениям спектр квантовых точек становится атомоподобным, то есть появляются дискретные уровни энергии и спектр плотности состояний становится дельта-образным с набором уширенных уровней. Такая перестройка спектра и определяет новые физические свойства квантовых точек.

Теория процессов рекомбинации в полупроводниковых квантовых точках развита достаточно хорошо. Вопрос о механизмах безызлучательной оже-рекомбинации в квантовых точках до сих пор остается открытым. Как правило, безызлучательная оже-рекомбинация является важным механизмом, определяющим пороговый ток в длинноволновых лазерах на гетероструктурах.

Помимо лазеров и светодиодов, квантовые точки широко применяются в биологии и медицине. Квантовые точки в форме коллоидных нанокристаллов могут быть использованы в качестве сенсоров для определения типа аминокислот по создаваемому электрическому полю аминокислоты. В этом случае их преимуществом по сравнению с органическими флуорофорами является фотохимическая стабильность и высокий квантовый выход люминесценции. Поскольку такие квантовые точки оказываются уже не в полупроводниковой матрице другого материала а в растворе (они покрыты тонким полимерным слоем), то они являются открытыми квантовыми точками, в которых носители заряда могут протуннелировать и уйти на бесконечность. Спектр носителей заряда в открытых квантовых точках является квазистационарным. В настоящее время спектр для квазистационарных состояний в однородном электрическом поле мало изу-

чен. Поэтому актуальной задачей является построение теории возмущений для квазистационарных состояний и исследование с ее помощью эффекта Штарка в открытых квантовых точках.

Также квантовые точки могут эффективно использоваться в качестве сенсоров для определения связывания таких сложных биологических молекул как белки и цепочки ДНК. В основе такого метода детектирования лежит сильная зависимость безызлучательного переноса энергии от расстояния между квантовыми точками. Тогда, к одной молекуле присоединяется одна квантовая точка, а к другой – другая квантовая точка или органический краситель. Связывание детектируется по тушению люминесценции квантовой точки и передачи этой энергии другой квантовой точке. Поэтому актуальность исследования безызлучательного переноса энергии между квантовыми точками не вызывает сомнений.

В результате исследования процессов безызлучательной рекомбинации в квантовых точках, спектра квазистационарных состояний открытых квантовых точек в электрическом поле и процессов переноса энергии между квантовыми точками являются важными и актуальными для современной физики низкоразмерных систем и будут способствовать разработке устройств с улучшенными характеристиками как для современной электроники, так и для задач биологии и практической медицины.

**Цели и задачи диссертационной работы.** Целью настоящего исследования является построение теории процесса оже-рекомбинации в квантовых точках; исследование эффекта Штарка для квазистационарных состояний а также процесса переноса энергии от одной квантовой точки (донор) к другой (акцептор). Для достижения этих целей в работе решаются конкретные задачи:

1. Построение микроскопической теории Оже-рекомбинации в полупроводниковых квантовых точках.
2. Изучение энергетического спектра носителей заряда в открытых кванто-

вых точках и квантовых ямах и построение теории возмущений для квазистационарных состояний.

3. Изучение безызлучательного резонансного переноса энергии между полупроводниковыми квантовыми точками.

**Научная новизна** работы состоит в получении оригинальных научных результатов:

1. Впервые классифицированы и исследованы два механизма Оже-рекомбинации в квантовых точках: беспороговый и квазипороговый.
2. Предложен и изучен механизм подавления Оже-рекомбинации в квантовых точках при низких температурах.
3. С помощью разработанной теории возмущений для квазистационарных состояний исследуется спектр и время жизни носителей заряда в открытых квантовых точках и квантовых ямах в электрическом поле.
4. В рамках формализма матрицы плотности изучены механизмы безызлучательного резонансного переноса энергии между двумя полупроводниковыми квантовыми точками для произвольных расстояний между ними.

### **Теоретическая и практическая значимость**

Научная значимость работы состоит в следующем. Во-первых, в работе получены аналитические выражения для коэффициентов оже-рекомбинации: беспорогового и квазипорогового. Получены зависимости коэффициентов оже-рекомбинации от радиуса квантовой точки и температуры. Эти зависимости важны, так как позволяют оптимизировать скорость оже-процесса для конкретной системы. Во-вторых, получена поправка к энергии и ее полуширине для квазистационарных состояний в рамках специально разработанной для этого теории возмущений. С помощью этого результата получен сдвиг уровня энергии и ее полуширины для квазистационарных состояний электронов в кванто-

вой точке в электрическом поле. Из первых принципов в рамках формализма матрицы плотности вычислена скорость безызлучательного переноса энергии между двумя полупроводниковыми квантовыми точками для любых расстояний между ними.

Практическая значимость работы состоит в следующем. Во-первых, результаты расчета скорости оже-процесса могут быть использованы для оптимизации параметров оптоэлектронных устройств на квантовых точках. Результат расчета сдвига уровней энергии открытой квантовой точки в электрическом поле может быть использован для создания сенсоров на квантовых точках, которые способны различать тип аминокислот по создаваемому ими электрическому полю. Результат расчета скорости безызлучательного переноса энергии между квантовыми точками важен для создания перспективных сенсоров, способных определять образование сложных молекулярных комплексов.

#### **Положения, выносимые на защиту**

1. В полупроводниковых квантовых точках возможны два механизма оже-рекомбинации: беспороговый, который связан с рассеянием импульса возбужденного электрона на границе, и квазипороговый, который связан с пространственным ограничением носителей заряда областью квантовой точки. Суммарный коэффициент оже-рекомбинации немонотонно зависит от температуры и радиуса квантовой точки.
2. При полном заполнении основного состояния в квантовых точках и пустых возбужденных состояниях имеет место подавление процесса оже-рекомбинации.
3. В открытой квантовой точке знак поправки к полуширине уровня зависит от положения уровня; существует критическое значение энергии ( $E_{cr}$ ), при котором поправка к полуширине меняет знак.
4. Безызлучательный резонансный перенос энергии между квантовыми точ-

ками происходит как благодаря прямому кулоновскому взаимодействию носителей заряда, так и обменному взаимодействию. Для расстояний между квантовыми точками, близких к контактным, вероятность переноса энергии контролируется временем жизни акцептора.

### **Степень достоверности и апробация результатов**

**Апробация работы.** Результаты работы докладывались на семинарах ФТИ им. А.Ф. Иоффе Российской Академии Наук, на Международном симпозиуме “Nanostructures: Physics and Technology” (С.-Петербург 2010,2013) и VIII Российской конференции по физике полупроводников (С.-Петербург 2006), Международной зимней школе по физике полупроводников(Зеленогорск, 2006, 2008) и VII Международной конференции молодых ученых и специалистов "Оптика 2011".

**Публикации.** Материалы диссертации опубликованы в 9 печатных работах, из них 7 статей в рецензируемых журналах и 2 статьи в сборниках трудов конференций, список которых приведен в Заключение.

**Личный вклад автора.** Содержание диссертации и основные положения, выносимые на защиту, отражают персональный вклад автора в опубликованные работы. Подготовка к публикации полученных результатов проводилась совместно с соавторами, причем вклад диссертанта был определяющим. Все представленные в диссертации результаты получены лично автором.

**Структура и объем диссертации.** Диссертация состоит из введения, обзора литературы, трех глав, заключения и библиографии. Общий объем диссертации 142 страницы, из них 127 страниц текста, включая 19 рисунков и 4 таблицы. Библиография включает 100 наименований на 9 страницах.

## Обзор литературы

Электронные и оптические свойства полупроводниковых квантовых точек радикально отличаются от свойств массивного (однородного полупроводника) [1–4]. Интерес к полупроводниковым квантовым точкам обусловлен, в первую очередь, возможностью создания устройств на их основе, таких как лазеры и квантовые компьютеры [1, 5–7]. Также квантовые точки могут эффективно использоваться в биологии и медицине в качестве меток [8–10] и для диагностики биологических объектов [2, 3, 11]. В работах [2, 3, 9] показаны преимущества квантовых точек по сравнению с флуоресцентными хромофорами, в силу высокой эффективности люминесценции квантовых точек, а также фотохимической стабильности. Также показана возможность применения квантовых точек в качестве биосенсоров.

В качестве примера использования нульмерных структур в оптоэлектронике могут служить лазеры на квантовых точках. Как показали теоретические исследования [1], преимущество лазеров на квантовых точках перед используемыми на данный момент лазерами на квантовых ямах состоит в следующем: 1 — более низкие пороговые токи; 2 — большая температурная стабильность. Для создания лазеров важно понимать, какие механизмы приводят к повышению плотности порогового тока. Механизмы рекомбинации делятся на излучательные и безызлучательные [12]. Излучательная рекомбинация изучена достаточно хорошо экспериментально и теоретически [1, 13, 14].

Что касается безызлучательных процессов рекомбинации в квантовых точках, то этот вопрос до сих пор остается открытым [15]. В работах [16, 17] представлены детальные экспериментальные исследования времени жизни носителей заряда и пороговых токов в лазерах на квантовых точках. Показано, что при высоких уровнях возбуждения процессы безызлучательной оже-рекомбинации вносят существенный вклад в величину порогового тока лазера.

Анализ механизмов оже-рекомбинации в квантовых точках на основе CdS

впервые выполнен в работе [18]. В работе [19] представлен обзор экспериментальных и теоретических работ, посвященных исследованию оже-рекомбинации в полупроводниковых кристаллах нанометровых размеров. Так, в работе [20] было экспериментально измерено характерное время оже-рекомбинации в квантовых точках. Показано, что для квантовых точек малого радиуса скорость оже-рекомбинации существенно больше скорости излучательной рекомбинации. Экспериментально измеренное время безызлучательной рекомбинации составляет величину порядка 10–100 пс, тогда как время излучательной рекомбинации — порядка 1 нс. Однако в теоретических работах, представленных в обзоре [19], отсутствует детальный анализ зависимости скорости оже-рекомбинации от температуры и параметров квантовых точек: радиуса квантовых точек и глубины квантовых ям для электронов и дырок. Для полупроводниковых квантовых точек на основе соединений  $A_3B_5$  анализ механизмов оже-рекомбинации был выполнен в работах [21–23]. В этих работах рассматривается беспороговый процесс оже-рекомбинации, связанный с рассеянием носителей заряда на гетерогранице, впервые предсказанный в работе [24]. Качественный анализ зависимости скорости беспороговой оже-рекомбинации от радиуса квантовых точек выполнен в работах [17, 19, 22, 23, 25]. Таким образом, в настоящее время теория оже-рекомбинации в квантовых точках развита недостаточно. Как будет показано ниже, беспороговый канал оже-рекомбинации существует для квантовых точек малого радиуса. С ростом радиуса квантовых точек скорость беспорогового процесса оже-рекомбинации убывает очень резко и в пределе, когда радиус квантовых точек стремится к бесконечности, скорость стремится к нулю. Поэтому беспороговый канал оже-рекомбинации — не единственный безызлучательный процесс оже-рекомбинации в квантовых точках. В работе [22] впервые была предпринята попытка классифицировать механизмы оже-рекомбинации в квантовых точках. Показано, что для локализованных носителей заряда в квантовых точках возможны два механизма оже-рекомбинации: беспороговый и квазипороговый процессы. Квазипороговый процесс обусловлен пространственным

ограничением волновых функций носителей заряда областью квантовой точки. Это, в соответствии с принципом неопределенности Гейзенберга, ведет к замене  $\delta$ -функции в законе сохранения квазиимпульса функцией, стремящейся к ней в пределе  $R \rightarrow \infty$ , где  $R$  — радиус квантовой точки. Данный механизм оже-рекомбинации аналогичен квазипороговому процессу в квантовых ямах [26, 27] и в квантовых нитях [28]. Беспороговый механизм связан с рассеянием электрона (дырки) на гетерогранице, при этом возбужденному носителю передается большой момент импульса и большой квазиимпульс (т.е. нормальная к гетерогранице компонента квазиимпульса). В квантовых ямах беспороговый процесс связан с рассеянием квазиимпульса частицы на гетеробарьере [26], и при этом возбужденному носителю заряда передается большой квазиимпульс. Беспороговый процесс оже-рекомбинации в квантовых нитях связан с рассеянием на гетерогранице как квазиимпульса, так и момента импульса [28]. Недавно в работе [29] было показано, что в квантовых точках, при больших уровнях возбуждения, возможен еще один канал оже-рекомбинации, связанный с кулоновским взаимодействием носителей заряда, локализованных в квантовых точках, с носителями заряда в барьерной области. Характерное время такого канала оже-рекомбинации зависит от концентрации носителей в барьерной области. При высоких температурах данный канал оже-рекомбинации будет контролировать время жизни носителей заряда в квантовых точках.

Что касается поведения времени жизни при низких температурах, то для квантовых точек этот вопрос изучен недостаточно. Время жизни существенно зависит от степени заполнения состояний в квантовых точках. Этот результат подтвержден экспериментально [4]. Интересным является вопрос, как ведет себя процесс оже-рекомбинации в случае, когда полностью заполнены основные уровни размерного квантования в квантовой точке (рис. 1.1). При таком заполнении становится важным учет влияния спиновых эффектов на механизм оже-рекомбинации.

Современные технологии позволяют изготавливать разные виды кванто-

вых точек, как изолированных [30] (такие квантовые точки носят название открытых квантовых точек из-за возможности для электрона протуннелировать сквозь барьер в свободное пространство), так и в полупроводниковой матрице другого материала. Изолированные полупроводниковые квантовые точки (открытые квантовые точки), как показано в ряде экспериментальных работ, находят более эффективное применение в биологии и медицине [2, 9, 11]. В первую очередь, открытые квантовые точки используются для получения изображения и идентификации живых клеток в естественных условиях. Показано [2, 9], что открытые квантовые точки обладают более высоким квантовым выходом излучения, чем флуоресцентные хромофоры, оптической активностью в длинноволновой области спектра и значительно большей фотохимической стабильностью. Таким образом, указанные спектральные свойства открытых квантовых точек являются весьма перспективными для исследований в биологии и медицине. В работе [3] был предложен новый метод диагностики аминокислот с помощью квантовых точек. Речь идет о влиянии взаимодействия аминокислот с квантовыми точками на энергетический спектр квантовых точек. Такое взаимодействие влияет на спектр излучательной рекомбинации электронов и дырок, локализованных в открытых квантовых точках. Биологические объекты по-разному влияют на энергетический спектр электронов и дырок в квантовых точках, в силу различного распределения поля вокруг них. Следовательно, по изменению спектра излучательной рекомбинации открытых квантовых точек можно идентифицировать биологический объект. Поэтому поскольку в медицинских и биологических экспериментах используются именно открытые квантовые точки, то становится важным изучение эффекта Штарка в открытых квантовых точках. Эффект Штарка в обычных (закрытых) квантовых точках изучен достаточно хорошо [31, 32]. Для изучения эффекта Штарка в открытых квантовых точках важно понимать, как строится теория возмущений в этих системах. Теория возмущений для квазистационарных состояний изучена только для первого порядка [33]. Таким образом, появляется необходимость обобщить теорию

возмущений на высшие порядки.

Перенос энергии электронного возбуждения между квантовыми системами представляет одну из важных фундаментальных задач современной физики [34]. Суть явления состоит в том, что энергия электронного возбуждения донора энергии (атома, молекулы, полупроводниковой квантовой точки или квантовой ямы) передается акцептору энергии. Разделяют следующие механизмы переноса энергии: хорошо известный излучательный механизм (когда донор излучает фотон, а акцептор его затем поглощает) (см. например [35]), безызлучательный механизм (когда энергия передается от донора к акцептору одноступенчатым механизмом в отличие от излучательного переноса энергии) [36], [37], механизм переноса электрона (когда возбужденный электрон донора энергии передается акцептору [38]). Два последних механизма осуществляют тушение люминесценции донора, однако первый из них приводит к сенсibilизированной флюоресценции акцептора, а второй — к образованию положительно заряженного донора и отрицательно заряженного акцептора (в случае молекул–пар ионов). Эти механизмы фундаментально различны: безызлучательный перенос энергии происходит благодаря кулоновскому взаимодействию электронов донора и акцептора энергии, перенос электрона определяется только перекрытием волновых функций соответствующих состояний донора и акцептора. Явление безызлучательного переноса энергии впервые наблюдалось в 1923 г. в экспериментах по сенсibilизированной флюоресценции атомов в газовой фазе [39]. Позднее подобные эксперименты были выполнены для паров молекул [40], для жидких растворов красителей [41–43], для твердых растворов органических молекул [44]. Параллельно множество исследований выявило роль безызлучательного переноса энергии в биологических системах (в частности в фотосинтезе) [45], (см. также ссылки в [46]). Впоследствии метод, основанный на переносе энергии между молекулами органических красителей, нашел широкое применение в биологических и медицинских экспериментах (см., например, [47], [48]).

В системах, включающих полупроводниковые квантовые точки, безызлу-

чательный перенос энергии впервые наблюдался в 1996 году [49] и в последующие годы стал интенсивно исследоваться как экспериментально [50] так и теоретически [51–54]. Интерес вызван, прежде всего, тем, что использование квантовых точек расширило возможности био- и медицинских экспериментов, как *in vivo*, так и *in vitro*, благодаря их уникальным оптическим свойствам (узкие спектры люминесценции и возможность изменять спектральные характеристики за счет изменения размера квантовой точки ввиду квантово-размерного эффекта) [55]. Наряду с оптическими характеристиками, фотостабильность и химическая стабильность выгодно отличают квантовые точки от органических красителей, традиционно применяемых в этой области исследований. В литературе обсуждается возможность технических приложений механизма безызлучательного переноса энергии между квантовыми точками для создания быстродействующих квантовых компьютеров [56, 57], полупроводниковых лазеров на квантовых точках [58], [59], солнечных элементов [60], что также стимулирует изучение этого физического процесса.

Первое квантовомеханическое описание безызлучательного резонансного переноса энергии было разработано Ферстером для молекулярных систем [36]. Он предположил, что перенос энергии происходит преимущественно в результате диполь-дипольных взаимодействий молекул. Затем теория была расширена Декстером включением в рассмотрение диполь-квадрупольного и обменного взаимодействий [37]. Выполненные впоследствии теоретические рассуждения и экспериментальные исследования позволяют считать явление переноса энергии между молекулами в настоящее время изученным достаточно хорошо. В последнее время теория Ферстера, однако, применяется и для интерпретации данных экспериментов по переносу энергии между квантовыми точками, что представляется не вполне обоснованным [55].

Теория безызлучательного резонансного переноса энергии в системах, включающих полупроводниковые квантовые структуры, разработана пока недостаточно и является предметом современных исследований. В работе [61] впер-

вые был рассмотрен безызлучательный резонансный перенос энергии в гибридной наноструктуре, состоящей из полупроводниковой квантовой ямы и слоя органического акцептора. Анализ, выполненный с использованием приближения эффективной массы для описания экситона Ванье-Мотта в полупроводниковой квантовой яме и макроскопического электродинамического описания органической среды, показал высокую эффективность безызлучательного переноса энергии экситона к органической молекуле с возможным последующим излучением света. Авторами была предсказана возможность использования таких гибридных структур для оптической накачки органических источников излучения. Затем с использованием того же теоретического подхода был выполнен анализ механизма безызлучательного резонансного переноса энергии от полупроводниковой квантовой точки к органической матрице [62]. Было показано, что в рамках этого механизма возможна передача значительной части энергии от квантовой точки к окружающим ее оптически активным органическим молекулам. Авторами данной работы отмечено, что при электрической накачке квантовой точки этот эффект проявится более ярко по сравнению с оптической накачкой. В работах [63–66] теория переноса энергии в гибридных наноструктурах получила дальнейшее развитие.

Механизм безызлучательного переноса энергии между квантовыми точками исследовался с использованием различных теоретических подходов: метода сильной связи [51], метода полуэмпирического псевдопотенциала [52], простой модели эффективной массы [53], [54]. В работах [51] и [52] показано, что диполь-дипольная аппроксимация кулоновского взаимодействия электронов квантовой точки-донора и квантовой точки-акцептора дает адекватное описание безызлучательного переноса энергии в случае прямозонных полупроводников, а зависимость скорости переноса  $W$  от расстояния между квантовыми точками  $d$  описывается простым законом  $W \sim 1/d^6$ . Вклады более высоких мультиполей пренебрежимо малы вплоть до контактных расстояний между донором и акцептором. Для непрямозонных полупроводников мультипольные члены более суще-

ственны, однако диполь-дипольные вклады остаются доминирующими. Авторами работы [53] было получено, что диполь-дипольный вклад в скорость переноса энергии, как правило, больше диполь-квадрупольного вклада, однако для количественного описания диполь-квадрупольный вклад, зависящий от расстояния между квантовыми точками как  $1/d^8$ , должен приниматься во внимание для малых расстояний, сравнимых с размерами квантовых точек. В [54] было показано, что диполь-дипольное приближение справедливо для описания переноса энергии при дипольно-разрешенных переходах в доноре и акцепторе для всех расстояний между квантовыми точками вплоть до расстояний, близких к контактному. Также было показано, что скорость переноса энергии от донора к акцептору, соответствующая дипольно-запрещенным переходам в акцепторе, также играет существенную роль и при расстояниях, близких к контактному, вклад его может достигать 25 % по сравнению с вкладом переноса при дипольно-разрешенном переходе. Авторы [54] при исследовании переноса энергии между квантовыми точками пренебрегли обменным взаимодействием, считая его несущественным. Таким образом, имеется определенное соответствие результатов этих работ [51–54] для больших расстояний между донором и акцептором и значительное расхождение при малых расстояниях.

## Глава 1

# Механизмы оже-рекомбинации в полупроводниковых квантовых точках

## 1.1. Введение

Настоящая глава посвящается теоретическому исследованию основных механизмов оже-рекомбинации неравновесных носителей заряда в полупроводниковых квантовых точках. Основное внимание будет уделено исследованию беспорогового и квазипорогового процессов рекомбинации. Эти исследования представлены в работе автора [67]. Будет показано, что для беспорогового оже-процесса, связанного с рассеянием носителей заряда на гетеробарьере, вероятность рекомбинации пропорциональна высоте гетеробарьеров для электронов и дырок и величине переданного при рассеянии полного момента импульса. При стремлении радиуса квантовой точки к бесконечности, т. е. при переходе к однородному полупроводнику, вероятность оже-рекомбинации для беспорогового процесса стремится к нулю. Совершенно иначе ведет себя квазипороговый механизм оже-рекомбинации. Квазипороговый процесс связан с ограничением области перекрытия волновых функций частиц объемом квантовой точки. Следовательно, в соответствии с принципом неопределенности Гейзенберга, это ведет к замене  $\delta$ -функции в законе сохранения квазиимпульса функцией, стремящейся к ней в пределе  $R \rightarrow \infty$ . Здесь  $R$  — радиус квантовой точки. Этот механизм оже-рекомбинации переходит в пороговый трехмерный процесс оже-рекомбинации при стремлении радиуса квантовой точки к бесконечности. Вероятность квазипорогового процесса оже-рекомбинации также пропорциональна полному моменту импульса рассеянной частицы. В работе будут получены условия, при которых процессы оже-рекомбинации в квантовых точках преобладают над процессами излучательной рекомбинации. Будет найдено предельное значе-

ние радиуса квантовой точки, при котором пропадает связанное состояние, при этом вероятность оже-рекомбинации стремится к нулю при стремлении радиуса квантовой точки к критическому радиусу. Ниже для простоты рассматривается квантовая точка сферической симметрии.

Время жизни носителей заряда определяется как излучательными, так и безызлучательными механизмами рекомбинации. К числу последних принадлежит и оже-рекомбинация. Интересным является вопрос, как ведет себя процесс оже-рекомбинации в случае, когда полностью заполнены основные уровни размерного квантования в квантовой точке (рис. 1.1). При таком заполнении становится важным учет влияния спиновых эффектов на механизм оже-рекомбинации.

Показано, что процесс оже-рекомбинации в квантовых точках разделяется на два физически различных механизма, беспороговый и квазипороговый. Беспороговый механизм оже-рекомбинации сопровождается рассеянием импульса возбужденного электрона на гетеробарьере. В результате скорость данного процесса имеет слабую (неэкспоненциальную) зависимость от температуры. Квазипороговый процесс связан с пространственным ограничением движения электрона областью квантовой точки. В связи с этим волновой вектор имеет неопределенность, приводящую к частичному снятию порога оже-рекомбинации. Для малых радиусов квантовой точки этот процесс также является беспороговым в широком интервале температур от 4,2 до 300 К [67]. Скорость беспорогового и квазипорогового процессов зависит от уровней возбуждения. Она растет с ростом уровня возбуждения носителей заряда.

Механизм излучательной рекомбинации в квантовых точках детально рассмотрен в обзоре [1]. Показано, что в широком диапазоне температур время излучательной рекомбинации практически не зависит от уровня возбуждения.

В недавних экспериментах обнаружено, что при низких температурах время жизни носителей заряда в квантовых точках InAs не зависит от уровня возбуждения [4] (рис. 1.7). При более высоких температурах ( $T \geq 77K$ ) при

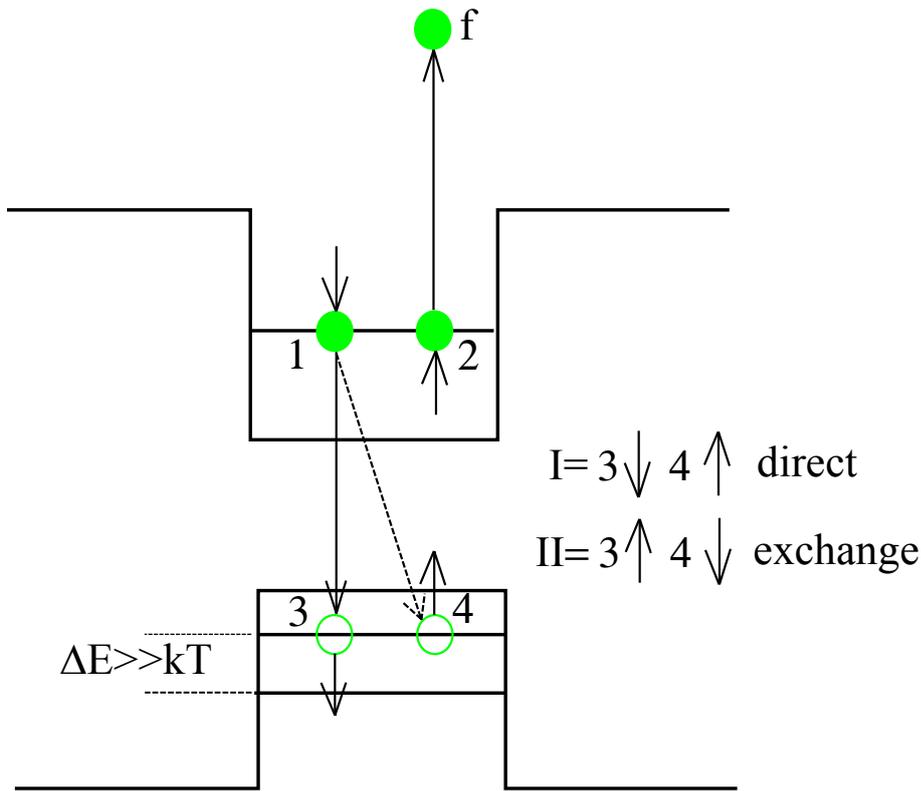


Рис. 1.1. Схема процесса оже-рекомбинации. На схеме показаны оже-переходы по двум каналам (I и II). Диагональные переходы отвечают обменным матричным элементам (см. текст)

увеличении уровня возбуждения время жизни начинает падать, что означает включение дополнительного канала рекомбинации (рис. 1.8).

## 1.2. Уравнения Кейна и основные соотношения

Для исследования механизмов оже рекомбинации в квантовых точках необходимо найти волновые функции и спектр носителей заряда. Для нахождения волновых функций воспользуемся моделью Кейна, которая наиболее точно описывает спектр и волновые функции носителей заряда в узкозонных полупроводниках  $A_3 B_5$  [68]. Волновые функции электронов в зоне проводимости в центре зоны Бриллюэна описываются представлением  $\Gamma_6^+$ . они дважды вырождены. Волновые функции в валентной зоне описываются представлениями  $\Gamma_7^+$  и  $\Gamma_8^+$ , представление  $\Gamma_8^+$  четырехкратно вырождено. Как правило, базисные волновые функции зоны проводимости и валентной зоны берутся в виде собственных функций углового момента [68–70]. Однако в случае сферической симметрии

более подходящим является другое представление базисных функций [69]:

$$|s\rangle, \quad |p_+\rangle, \quad |p_-\rangle, \quad |p_z\rangle, \quad (1.1)$$

$$\begin{aligned} |p_+\rangle &= 1/\sqrt{2} |p_x + ip_y\rangle, \\ |p_-\rangle &= 1/\sqrt{2} |p_x - ip_y\rangle. \end{aligned} \quad (1.2)$$

В (1.1)  $|s\rangle$  и  $|\mathbf{p}\rangle$  — блоховские функции  $s$ - и  $p$ -типа, соответствующие собственным значениям углового момента 0 и 1 оператора  $\hat{\mathbf{L}}_1^2$ . Функции  $s$ -типа описывают состояние зоны проводимости, а  $p$ -типа — состояние валентной зоны в  $\Gamma$ -точке. В дальнейшем, однако, будем использовать разложение по этому базису, используя шаровые векторы, которые являются собственными функциями для операторов  $\hat{\mathbf{J}}^2$ ,  $\hat{\mathbf{J}}_z$ ,  $\hat{\mathbf{L}}^2$  и  $\hat{\mathbf{L}}_1^2$ . Полный момент частиц равен  $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{L}}_1$ , где  $\hat{\mathbf{L}}$  — оператор орбитального момента, действующего на огибающие волновые функции (отвечает за момент электрона в квантовой точке), а  $\hat{\mathbf{L}}_1$  — угловой момент, действующий на блоховские функции. При этом для удобства сюда не включается спин электрона, поскольку в работе спин-орбитальное взаимодействие не учитывается. Тогда без учета спина полный момент будет целым числом. Сохраняющимися величинами, описывающими поведение частиц в рамках симметрии задачи, будут квадрат полного момента и его проекция на ось  $z$ . В дальнейшем для собственных значений полного момента и его проекции на ось  $z$  будут использоваться обозначения  $j$  и  $m$ .

Ниже рассматриваются уравнения Кейна без учета спин-орбитального взаимодействия. Как показано в работах [26] и [28], учет спин-орбитального взаимодействия при расчете скорости оже-рекомбинации приводит к умножению скорости на функцию  $F(\frac{\Delta_{so}}{E_g})$ , где  $\Delta_{so}$  — константа спин-орбитального взаимодействия, а  $E_g$  — ширина запрещенной зоны полупроводника. При любых соотношениях между  $\Delta_{so}$  и  $E_g$  максимальное значение  $F(x) = 1$ , т.е. в общем виде  $F(x) \leq 1$ . При этом пренебрежение спин-орбитальным взаимодействием дает возможность существенно упростить уравнения и получить аналитические выражения для вероятности оже-рекомбинации (речь не идет об оже-рекомби-

нации дырок с переходом в SO-зону).

Волновая функция носителей заряда может быть представлена в виде  $\Psi = \Psi_s |s\rangle + \Psi |p\rangle$ .

Уравнения Кейна для огибающих  $\Psi_s$  и  $\Psi$  в сферическом приближении имеют вид [26]

$$\begin{cases} (E_g - E)\Psi_s - i\hbar\gamma\nabla\Psi = 0, \\ -E\Psi - i\hbar\gamma\nabla\Psi_s + \frac{\hbar^2}{2m}(\gamma_1 + 4\gamma_2)\nabla(\nabla\Psi) - \frac{\hbar^2}{2m}(\gamma_1 - 2\gamma_2)(\nabla \times (\nabla \times \Psi)) = 0. \end{cases} \quad (1.3)$$

Здесь  $\gamma$  — кейновский матричный элемент [68], имеющий размерность скорости,  $\gamma_1$  и  $\gamma_2$  — обобщенные параметры Латтинжера [69],  $m$  — масса свободного электрона. Как показано в [26] и [28], система уравнений Кейна не отличается от обычно используемых в литературе уравнений [70]. В первом уравнении системы (1.3) пренебрегаем слагаемым с тяжелой массой для электронов [24, 71]. Фурье-преобразование уравнений системы (1.3) позволяет получить спектры для электронов и тяжелых дырок

$$\begin{aligned} k^2 &= \frac{\mathcal{E}(\mathcal{E} + E_g)}{\hbar^2\gamma^2} && \text{— электроны,} \\ E_h &= -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_h} && \text{— тяжелые дырки.} \end{aligned} \quad (1.4)$$

Для дырок энергия  $E$  отсчитывается от вершины валентной зоны, а энергия электронов  $\mathcal{E}$  — от дна зоны проводимости. Здесь  $k$  — значение квазиимпульса носителей,

$$m_h^{-1} = m^{-1}(\gamma_1 - 2\gamma_2). \quad (1.5)$$

В данном случае  $m_h$  совпадает с массой тяжелой дырки. Выражение для плотности потока вероятности может быть получено из системы уравнений (1.3) путем подстановки  $E \rightarrow -i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$  или с помощью **кp**-метода во втором порядке теории возмущений [26]. В результате плотность потока вероятности для элек-

тронов и дырок имеют вид

$$\mathbf{j}_e = \gamma(\Psi_s \Psi^* + \Psi_s^* \Psi), \quad (1.6)$$

$$\mathbf{j}_h = \frac{E_g - E}{2m_l} (\Psi_s \Psi^* + \Psi_s^* \Psi) - \frac{i\hbar}{2m_h} (\Psi \times \text{rot} \Psi^* - \Psi^* \times \text{rot} \Psi), \quad (1.7)$$

где  $m_l^{-1} = \frac{2\gamma^2}{E_g - E} + m^{-1}(\gamma_1 + 4\gamma_2)$ .

Выражение для  $m_l$  совпадает с массой легкой дырки, так как константа спин-орбитального взаимодействия равна нулю. Нам в дальнейшем понадобятся граничные условия для волновых функций на гетерогранице. Проблема граничных условий для волновых функций на гетерогранице окончательно до сих пор не решена. Наиболее продуктивным для этого является метод, развитый Бертом [71]. Согласно его методу, из системы уравнений (1.3) можно получить уравнения Кейна, которые могут быть проинтегрированы через интерфейс:

$$\begin{cases} (E_g - E)\Psi_s - i\hbar\gamma\nabla\Psi = 0, \\ -E\Psi - i\hbar\gamma\nabla\Psi_s + \frac{\hbar^2}{2m}\nabla[6\gamma_2\nabla\Psi] + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial x_k}(\gamma_1 - 2\gamma_2)\frac{\partial}{\partial x_k}\Psi = 0. \end{cases} \quad (1.8)$$

Используя эту систему уравнений и закон сохранения плотности потока вероятности, можно получить граничные условия для огибающих волновых функций на интерфейсе [26] (формулы (1.15) и (1.19)). При этом используется приближение  $\gamma_1, \gamma_2 = \text{const}$ , а также учитывается, что эффективная масса тяжелых дырок намного больше эффективной массы электронов,  $m_h \gg m_e$ .

### 1.3. Волновые функции носителей заряда в квантовой точке

Волновые функции и спектр носителей заряда могут быть получены из решения системы уравнений (1.3). Состояния электронов и дырок удобно рассматривать отдельно .

### 1.3.1. Состояния электронов в квантовой точке

Для электронов, как уже было отмечено выше, уравнения Кейна (1.8) упрощаются и имеют вид

$$\begin{cases} -\mathcal{E}\Psi_s - i\hbar\gamma\nabla\Psi = 0, \\ -(\mathcal{E} + E_g)\Psi - i\hbar\gamma\nabla\Psi_s = 0. \end{cases} \quad (1.9)$$

Выражая из второго уравнения  $\Psi$  через  $\Psi_s$  и подставляя это в первое уравнение, получаем уравнение для  $\Psi_s$ . Запишем его в сферической системе координат. Переменные разделяются, и волновая функция может быть представлена в виде

$$\Psi_s = R(r)Y_{jm}(\theta, \phi). \quad (1.10)$$

Здесь  $Y_{jm}(\theta, \phi)$  — сферические функции. Для радиальной части волновой функции  $R(r)$  имеет место уравнение

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) - \frac{j(j+1)}{r^2} R + k^2 R = 0, \quad (1.11)$$

где  $k^2$  дается уравнением (1.4) для электронов. Решение уравнения (1.11) известно и представляет собой сферические функции Бесселя  $R \propto j_j(kr)$ . Тогда для волновых функций электронов внутри квантовых точек (при  $r < R$ ) получим

$$\begin{aligned} \Psi_s &= A j_j(kr) Y_{jm}(\theta, \phi), \\ \Psi &= \frac{-i\hbar\nabla\Psi_s}{(\mathcal{E} + E_g)}, \\ \nabla\Psi_s &= Ak \left( \sqrt{\frac{j+1}{2j+1}} j_{j+1}(kr) \mathbf{Y}_{lm}^{j+1}(\theta, \phi) + \sqrt{\frac{j}{2j+1}} j_{j-1}(kr) \mathbf{Y}_{jm}^{j-1}(\theta, \phi) \right), \end{aligned} \quad (1.12)$$

где  $A$  — нормировочная константа. Аналогично, волновая функция электронов под барьером при  $r > R$  имеет вид

$$\begin{aligned}\Psi_s &= Bk_j(\kappa r)Y_{jm}(\theta, \phi), \\ \Psi &= \frac{-i\hbar\nabla\Psi_s}{(\tilde{\mathcal{E}} + \tilde{E}_g)}, \\ \nabla\Psi_s &= B\kappa \left( -\sqrt{\frac{j+1}{2j+1}}k_{j+1}(\kappa r)\mathbf{Y}_{jm}^{j+1}(\theta, \phi) + \sqrt{\frac{j}{2j+1}}k_{j-1}(\kappa r)\mathbf{Y}_{jm}^{j-1}(\theta, \phi) \right).\end{aligned}\tag{1.13}$$

Здесь  $B$  — нормировочная константа и

$$\kappa^2 = -\frac{\tilde{\mathcal{E}}(\tilde{\mathcal{E}} + E_g)}{\hbar^2\gamma^2} = \frac{(V_c - \mathcal{E})(\mathcal{E} + E_g + V_v)}{\hbar^2\gamma^2},\tag{1.14}$$

где  $V_c$  и  $V_v$  — высоты гетеробарьеров,  $k_j(x)$  — модифицированная сферическая функция Бесселя, связанная с цилиндрической следующим соотношением:  $k_j(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}}K_{j+1/2}(x)$ . Граничные условия для огибающих волновых функций можно получить путем интегрирования уравнений Кейна (1.8) через интерфейс. Используя закон сохранения плотности потока вероятности и условие  $\gamma = \text{const}$ , что является хорошим приближением для полупроводниковых структур  $A_3B_5$ , получаем непрерывность следующих функций:

$$\begin{aligned}[\Psi_s]_R &= 0, \\ \left( \frac{1}{\mathcal{E} + E_g} \frac{\partial\Psi_s^<}{\partial r} \right)_R &= \left( \frac{1}{\mathcal{E} + E_g + V_v} \frac{\partial\Psi_s^>}{\partial r} \right)_R.\end{aligned}\tag{1.15}$$

Здесь значки "<" и ">" означают, что величины берутся слева и справа от гетерограницы. Из граничных условий (1.15) следуют дисперсионные соотношения для электронов

$$j_j(kR) \left[ \kappa\tilde{Z} \left( \frac{j k_j(\kappa R)}{\kappa R} - k_{j+1}(\kappa R) \right) \right] = k_j(\kappa R) \left[ kZ \left( \frac{j j_j(kR)}{kR} - j_{j+1}(kR) \right) \right].\tag{1.16}$$

Полагая в (1.16)  $j = 0$ , для электронов получаем дисперсионное уравнение

$$\frac{j_0(kR)}{j_1(kR)} = \frac{kZ k_0(\kappa R)}{\kappa\tilde{Z} k_1(\kappa R)},\tag{1.17}$$

где  $Z = \frac{1}{\mathcal{E} + E_g}$  и аналогично  $\tilde{Z} = \frac{1}{\mathcal{E} + E_g + V_v}$  справа от барьера.

### 1.3.2. Волновые функции дырок

Волновые функции легких дырок можно не выписывать. Достаточно заметить, что они аналогичны по виду волновым функциям электронов и отличие проявляется лишь в эффективной массе. Волновые функции тяжелых дырок отличаются по виду от волновых функций электронов. В модели Кейна тяжелые дырки являются двухкратно вырожденными, причем, чтобы они были ортогональны функциям легких дырок и электронов, следует положить  $\psi_s = 0$ . Для их нахождения уравнения Кейна (1.3) следует переписать с учетом разложения волновой функции по базису шаровых функций. С учетом сказанного волновые функции имеют вид

$$\begin{aligned}
 \Psi_{h1}^{\leq} &= A_1 j_j(k_h r) \mathbf{Y}_{jm}^j(\theta, \phi), \\
 \Psi_{h2}^{\leq} &= A_2 \left( \sqrt{\frac{j}{2j+1}} j_{j+1}(k_h r) \mathbf{Y}_{jm}^{j+1}(\theta, \phi) - \right. \\
 &\quad \left. - \sqrt{\frac{j+1}{2j+1}} j_{j-1}(k_h r) \mathbf{Y}_{jm}^{j-1}(\theta, \phi) \right) \text{ при } r < R, \\
 \Psi_{h1}^{\geq} &= B_1 k_j(\kappa_h r) \mathbf{Y}_{jm}^j(\theta, \phi), \\
 \Psi_{h2}^{\geq} &= B_2 \left( \sqrt{\frac{j}{2j+1}} k_{j+1}(\kappa_h r) \mathbf{Y}_{jm}^{j+1}(\theta, \phi) + \right. \\
 &\quad \left. + \sqrt{\frac{j+1}{2j+1}} k_{j-1}(\kappa_h r) \mathbf{Y}_{jm}^{j-1}(\theta, \phi) \right) \text{ при } r > R,
 \end{aligned} \tag{1.18}$$

где  $\kappa_h = \sqrt{\frac{2m_h(V_v - E)}{\hbar^2}}$ ,  $A_i$  и  $B_i$  — нормировочные константы. Видно, что две волновые функции для тяжелых дырок имеют разную поляризацию. Как будет показано далее, первая волновая функция не дает вклада в оже-процесс.

Для вывода граничных условий необходимо проинтегрировать уравнения Кейна для тяжелых дырок через интерфейс. Тогда для последних граничные условия примут вид

$$\begin{aligned}
 [\Psi_r]_R &= 0, \\
 \left[ \frac{d\Psi_{\perp}}{dr} \right]_R &= 0,
 \end{aligned} \tag{1.19}$$

где  $\Psi_{\perp}$  — огибающая  $p$ -компонента волновой функции, перпендикулярная радиус-вектору  $\mathbf{r}$ . При выводе (1.19) считается, что масса тяжелой дырки не меняется при переходе через барьер и что  $m_h \gg m_l$ . Тогда можно пренебречь смешиванием функций легкой и тяжелой дырки. Окончательно дисперсионное соотношение для тяжелых дырок имеет вид

$$\begin{aligned}
& j_j(k_h R) \frac{\kappa_h}{k_h} \left[ j \left( \frac{(j+1)k_{j+1}(\kappa_h R)}{\kappa_h R} - k_{j+2}(\kappa_h R) \right) + \right. \\
& \left. + (j+1) \left( \frac{(j-1)k_{j-1}(\kappa_h R)}{\kappa_h R} - k_j(\kappa_h R) \right) \right] = \\
& = k_j(\kappa_h R) \frac{k_h}{\kappa_h} \left[ j \left( \frac{(j+1)j_{j+1}(k_h R)}{k_h R} - j_{j+2}(k_h R) \right) - \right. \\
& \left. - (j+1) \left( \frac{(j-1)j_{j-1}(k_h R)}{k_h R} - j_j(k_h R) \right) \right].
\end{aligned} \tag{1.20}$$

Последнее выражение в пределе бесконечно широкой или бесконечно глубокой квантовой точки переходит в следующее:

$$j_j(k_h R) = 0. \tag{1.21}$$

Решениями уравнения (1.21) являются

$$(k_h)_{jn} = \frac{\gamma_{jn}}{R}, \tag{1.22}$$

где  $\gamma_{jn}$  —  $n$ -й корень сферической функции Бесселя  $j_j(x)$ .

## 1.4. Вероятность оже-рекомбинации

Вероятность оже-рекомбинации в единицу времени, согласно золотому правилу Ферми, в рамках первого порядка теории возмущений имеет вид

$$W_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |M_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i). \tag{1.23}$$

Здесь  $M_{fi}$  — матричный элемент кулоновского взаимодействия. С учетом антисимметризации волновых функций матричный элемент равен

$$M_{fi} = M_I - M_{II}, \tag{1.24}$$

где

$$\begin{aligned}
M_{fi} &= \left\langle \Psi_f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \left| \frac{e^2}{\varepsilon|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \right| \Psi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \right\rangle, \\
M_I &= \left\langle \Psi_3(\mathbf{r}_1)\Psi_4(\mathbf{r}_2) \left| \frac{e^2}{\varepsilon|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \right| \Psi_1(\mathbf{r}_1)\Psi_2(\mathbf{r}_2) \right\rangle, \\
M_{II} &= \left\langle \Psi_3(\mathbf{r}_1)\Psi_4(\mathbf{r}_2) \left| \frac{e^2}{\varepsilon|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \right| \Psi_1(\mathbf{r}_2)\Psi_2(\mathbf{r}_1) \right\rangle,
\end{aligned} \tag{1.25}$$

а  $\varepsilon$  — высокочастотная диэлектрическая проницаемость полупроводника [12]. Здесь и далее считаем функции с индексами 1 и 2 функциями локализованных электронов, функцию с индексом 3 — функцией тяжелой дырки, а функцию с индексом 4 — функцией возбужденного электрона. Ниже для простоты будем считать, что у локализованных электронов момент импульса равен нулю,  $j = 0$ . Это оправданно, поскольку локализованному электрону с малой эффективной массой и энергией соответствует малое значение полного момента  $j$ .

В квантовых точках, как и в квантовых ямах и в квантовых нитях, основной вклад в вероятность оже-рекомбинации вносят два процесса — СНСС и СННС. Такая терминология, строго говоря, не применима по отношению к носителям, локализованным в квантовых точках, если имеется смешивание легких, тяжелых и спин-отщепленных дырок. Как уже было отмечено выше, в случае  $m_l \ll m_h$  смешивание тяжелых и легких дырок мало. Как показано в [26], при выполнении условия  $\Delta_{SO} \gg T$  подмешиванием спин-отщепленных дырок к тяжелым можно пренебречь. Итак, можно пользоваться указанной выше терминологией и для квантовых точек. В настоящей работе ограничимся рассмотрением СНСС-процесса оже-рекомбинации. Все зависимости для СННС-процесса при  $\Delta_{SO} < E_g$  имеют качественно такой же вид, как и для СНСС-процесса. В случае СНСС-процесса в рекомбинации принимают участие два локализованных электрона и одна тяжелая дырка.

## 1.5. Матричный элемент оже-рекомбинации

Волновые функции носителей заряда являются собственными функциями оператора полного момента  $\hat{\mathbf{J}}$  и его проекции  $\hat{J}_z$  на ось  $z$ . В этом случае матричный элемент оже-рекомбинации автоматически удовлетворяет закону сохранения момента импульса и его проекции на ось  $z$ . Как было показано выше, для тяжелых дырок существуют две волновые функции, имеющие разные поляризации (1.18). Первая волновая функция не дает вклада в матричный элемент оже-процесса. Это следует из того, что для шаровых векторов имеет место соотношение [72]

$$\sum_{\mu=-1}^1 Y_{1\mu}^*(\theta, \phi) (\mathbf{Y}_{jm}^j(\theta, \phi))_{\mu} = 0. \quad (1.26)$$

Поскольку такая комбинация входит в произведение первой функции тяжелой дырки и функции электрона, то первая функция не даст вклада в процесс оже-рекомбинации.

Рассмотрим теперь произведение волновой функции тяжелой дырки и волновой функции электрона, которые войдут в выражение для матричного элемента (1.25) оже-процесса

$$\Psi_3^*(\mathbf{r}_1) \Psi_1(\mathbf{r}_1) = (-1)^m \frac{i\hbar\gamma}{\mathcal{E}_1 + E_g} A_1 A_3 k_1 \sqrt{\frac{j_3(j_3 + 1)}{4\pi}} \left( \frac{j_j(k_3 r_1)}{k_3 r_1} \right) j_1(k_1 r_1) Y_{jm}(\theta_1, \phi_1). \quad (1.27)$$

В интеграл перекрытия между состояниями, локализованными в квантовых точках, и состоянием непрерывного спектра входит произведение следующих волновых функций электронов:

$$\begin{aligned} \Psi_4^*(\mathbf{r}_2) \Psi_2(\mathbf{r}_2)^{<} &\approx A_2 A_4 j_0(k_2 r_2) j_{j_4}(k_4 r_2) Y_{j_4 m_4}^*(\theta_2, \phi_2) \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \\ \Psi_4^*(\mathbf{r}_2) \Psi_2(\mathbf{r}_2)^{>} &\approx B_2 B_4 k_0(\kappa_2 r_2) j_{j_4}(\kappa_4 r_2) Y_{j_4 m_4}^*(\theta_2, \phi_2) \frac{1}{\sqrt{4\pi}}. \end{aligned} \quad (1.28)$$

В (1.28) пренебрегаем слагаемым, содержащем скалярное произведение векторных частей волновых функций, так как отношение его к первому слагаемому

пропорционально  $\frac{k_2}{k_4}$ . Состояние "4" — это возбужденное состояние электрона, поэтому  $k_4 \gg k_2$  (напомним, что  $k_4 \approx \frac{\sqrt{2mE_g}}{\hbar}$ , а  $k_2 \approx \frac{\sqrt{2mE_2}}{\hbar}$ , здесь  $E_2$  — энергия первого уровня размерного квантования электрона, поэтому  $E_2 \ll E_g$ ). Матричный элемент кулоновского взаимодействия в случае сферической симметрии удобнее всего вычислять, используя разложение кулоновского потенциала по мультиполям. Вводя обозначение  $r = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ , запишем

$$\frac{1}{r} = \begin{cases} \frac{4\pi}{r_2} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{2^{j+1}} \left(\frac{r_1}{r_2}\right)^j (Y_j(\Omega_1) \cdot Y_j(\Omega_2)) = \\ = \sum_{j=0}^{\infty} F_j^>(r_1, r_2) (Y_j(\Omega_1) \cdot Y_j(\Omega_2)) \text{ при } r_1 < r_2, \\ \frac{4\pi}{r_1} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{2^{j+1}} \left(\frac{r_2}{r_1}\right)^j (Y_j(\Omega_1) \cdot Y_j(\Omega_2)) = \\ = \sum_{j=0}^{\infty} F_j^<(r_1, r_2) (Y_j(\Omega_1) \cdot Y_j(\Omega_2)) \text{ при } r_2 < r_1, \end{cases} \quad (1.29)$$

где

$$Y_j(\Omega_1) \cdot Y_j(\Omega_2) = \sum_{m=-j}^j Y_{jm}^*(\Omega_1) Y_{jm}(\Omega_2). \quad (1.30)$$

Тогда матричный элемент можно представить в виде

$$M_I = (-1)^{m_3} \frac{e^2}{\varepsilon} \int dV_1 \int dV_2 (\mathbf{R}_3^*(r_1) \mathbf{R}_1(r_1)) (\mathbf{R}_4^*(r_2) \mathbf{R}_2(r_2)) \times \\ \times Y_{j_3 m_3}(\theta_1, \phi_1) Y_{j_4 m_4}^*(\theta_2, \phi_2) \frac{1}{r}, \quad (1.31)$$

где  $R_1, R_2, R_3, R_4$  — радиальные части волновых функций частиц. Матричный элемент  $M_{II}$  получается из  $M_I$  перестановкой индексов у волновых функций  $R_1$  и  $R_2$ . Функция  $R_1$  отвечает локализованному состоянию электрона, а функция  $R_4$  — электрону в возбужденном состоянии. Рекомбинирующей паре электрон-тяжелая дырка отвечают функции  $R_2$  и  $R_3$ .

Проинтегрировав выражение (1.31) по углам, получим следующее выражение:

$$M_I = (-1)^{m_3} \int_0^{\infty} r_1^2 dr_1 \int_0^{\infty} r_2^2 dr_2 F_{j_3}(r_1, r_2) \delta_{j_4 j_3} \delta_{m_4, -m_3}. \quad (1.32)$$

Таким образом, для процесса оже-рекомбинации получен закон сохранения момента импульса и его проекции на ось  $z$

$$m = m_4 = -m_3, \quad j = j_4 = j_3. \quad (1.33)$$

Как уже было отмечено выше, выражение (1.33) было получено в пренебрежении моментом импульса локализованных электронов. Такое предположение существенно упрощает аналитические выражения и незначительно влияет на результат. Состояния электронов с большим моментом расположены высоко по энергии, и их заполнением можно пренебречь.

Вследствие того, что эффективная масса дырки  $m_h \gg m_c$ , волновая функция дырки быстро затухает под барьером, тогда в матричном элементе можно пренебречь подбарьерной областью перекрытия волновых функций тяжелой дырки и электрона. Нужно отметить, что это вовсе не означает, что задача решается в приближении бесконечного потенциального барьера для тяжелой дырки, поскольку ее спектр находится из точных граничных условий (1.19).

При таких предположениях матричный элемент принимает вид

$$M_I = \int_0^R r_1^2 dr_1 (\mathbf{R}_3^*(r_1) \mathbf{R}_1(r_1)) \left[ \int_0^{r_1} r_2^2 dr_2 \Phi^{<F_j^<} + \int_{r_1}^R r_2^2 dr_2 \Phi^{<F_j^>} + \int_R^\infty r_2^2 dr_2 \Phi^{>F_j^>} \right]. \quad (1.34)$$

В матричном элементе (1.34) можно выделить два различных вклада. Первый из них связан с наличием гетерограницы. Процесс, определяемый этим вкладом в матричный элемент, соответствует рассеянию возбужденного электрона на гетерогранице. В этом случае возбужденный электрон приобретает большую величину нормальной к интерфейсу компоненты квазиимпульса и момента импульса. Такое рассеяние в случае одиночного гетеробарьера [24], квантовой ямы [26] и квантовых нитей [28] приводит к появлению беспорогового канала оже-рекомбинации. Скорость беспорогового процесса оже-рекомбинации стремится к нулю быстрее, чем  $\frac{1}{R^6}$ , в пределе квантовых точек бесконечного радиуса. Второй вклад в (1.34) связан с рассеянием электрона на короткодействующем куло-

новском потенциале [26, 27]. В случае СНСС-процесса оже-рекомбинации происходит возбуждение электрона в непрерывную часть спектра, соответствующую энергии  $\mathcal{E}_4 \approx E_g$  и квазиимпульсу  $k_4 \approx \frac{\sqrt{2m_c E_g}}{\hbar}$ . В этом случае электрон приобретает большую величину проекции полного момента на ось  $z$ . При переходе локализованного электрона в непрерывный спектр с увеличением полного момента снятие порога для процесса оже-рекомбинации не происходит. Этот механизм оже-рекомбинации переходит в пороговый процесс оже-рекомбинации при стремлении радиуса квантовой точки к бесконечности. Таким образом, разделяя беспороговый и квазипороговый механизмы оже-рекомбинации в квантовой точке, запишем матричный элемент оже-рекомбинации (1.34) в виде

$$M_I = M^{(1)} + M^{(2)}, \quad (1.35)$$

где  $M^{(1)}$  — беспороговый, а  $M^{(2)}$  — квазипороговый матричные элементы. Они равны

$$\begin{aligned} M^{(1)} &= \int_0^R r_1^2 dr_1 (\mathbf{R}_3^*(r_1) \mathbf{R}_1(r_1)) \left[ \int_R^\infty r_2^2 dr_2 \Phi^> F_j^> - \int_R^\infty r_2^2 dr_2 \Phi^< F_j^> \right], \\ M^{(2)} &= \int_0^R r_1^2 dr_1 (\mathbf{R}_3^*(r_1) \mathbf{R}_1(r_1)) \left[ \int_0^{r_1} r_2^2 dr_2 \Phi^< F_j^< + \int_{r_1}^\infty r_2^2 dr_2 \Phi^< F_j^> \right], \end{aligned} \quad (1.36)$$

где

$$\begin{aligned} \Phi^< &= A_2 A_4 j_0(k_2 r) j_j(k_4 r), \\ \Phi^> &= B_2 B_4 k_0(k_2 r) j_j(k_4 r). \end{aligned} \quad (1.37)$$

Отметим, что для квантовых точек и  $M^{(1)}$ , и  $M^{(2)}$ , а следовательно и  $M_I$ , по сути дела, являются беспороговыми матричными элементами. Действительно, на них не распространяются ограничения, накладываемые на начальные квазиимпульсы и полные моменты электронов. Однако механизмы, приводящие к несохранению квазиимпульса в этих слагаемых, различны. В  $M^{(1)}$  несохранение нормальной к интерфейсу компоненты квазиимпульса связано с рассеянием электронов на гетерогранице, тогда как в  $M^{(2)}$  причиной нарушения закона

сохранения квазиимпульса является ограничение объема интегрирования по  $r$  областью квантовой точки. Это приводит к появлению функции вида  $\frac{\sin(kR)}{k}$  вместо  $\delta$ -функции  $\delta(k)$ . Итак, указанные выше различия между  $M^{(1)}$  и  $M^{(2)}$  физически означают, что матричный элемент  $M^{(1)}$  соответствует истинному беспороговому процессу, природа возникновения которого связана с рассеянием квазиимпульса на гетеробарьерах. Матричный элемент  $M^{(2)}$  соответствует квазипороговому процессу, и при радиусе квантовой точки, стремящемся к бесконечности, он переходит в обычный пороговый матричный элемент для однородного полупроводника.

### 1.5.1. Матричный элемент квазипорогового оже-процесса

Как уже было отмечено выше, квазипороговый процесс связан с ограничением области перекрытия волновых функций носителей заряда объемом квантовой точки. Это ведет к замене  $\delta$ -функции на функцию, стремящуюся к ней в пределе  $R \rightarrow \infty$ . Рассмотрим матричный элемент квазипорогового оже-процесса  $M^{(2)}$ . Общее выражение для матричного элемента приведено в приложении А. Приведем выражение для матричного элемента в пределе больших радиусов квантовых точек  $R$

$$M^{(2)} \approx \frac{e^2}{\varepsilon} \frac{1}{k_4^2} \frac{\hbar\gamma}{\mathcal{E}_1 + E_g} \frac{1}{R^5} \frac{2k_c}{k_3} \sqrt{j(j+1)} \frac{\sin((k_4 - k_3)R)}{k_4 - k_3}. \quad (1.38)$$

Итак, получено, что

$$M^{(2)} \propto \frac{\sin(k_4 - k_3)R}{k_4 - k_3}. \quad (1.39)$$

В пределе  $R \rightarrow \infty$  это выражение, возведенное в квадрат, дает  $\delta$ -функцию, умноженную на радиус квантовой точки,

$$|M^{(2)}|^2 \propto \frac{\sin^2(k_4 - k_3)R}{(k_4 - k_3)^2} \rightarrow \frac{\pi R}{2} \delta(k_4 - k_3). \quad (1.40)$$

Отсюда ясно виден закон сохранения квазиимпульса, что приводит к наличию порога в этом пределе, и поэтому коэффициент оже-рекомбинации  $C^{(2)}$  после

умножения на  $V^2$  переходит в трехмерное выражение для коэффициента оже-рекомбинации. Здесь  $V = \frac{4\pi}{3}R^3$  — объем квантовой точки.

### 1.5.2. Матричный элемент беспорогового оже-процесса

Беспороговый оже-процесс связан с рассеянием носителей на гетерогранице. Это означает, что величина  $M^{(1)}$  определяется значениями волновых функций и их производных на гетерогранице, следовательно при  $R \rightarrow \infty$   $M^{(1)} \rightarrow 0$ .

Подробное вычисление матричного элемента приведено в приложении В, здесь же выпишем только окончательное выражение

$$M^{(1)} = (-1)^{m+1} \frac{e^2}{\varepsilon} \frac{i\hbar\gamma}{\mathcal{E}_1 + E_g} A_1 A_2 A_3 A_4 \frac{k_1}{k_3^2} \frac{\sqrt{j(j+1)}}{2j+1} j_1(k_1 R) j_0(k_2 R) j_{j+1}(k_3 R) \frac{R}{k_4^2} \times \\ \times \left[ (j+1) \frac{V_v}{\mathcal{E}_4 + E_g} j_j(k_4 R) + (k_4 R) \frac{V_c}{\mathcal{E}_4} j_{j-1}(k_4 R) \right]. \quad (1.41)$$

Итак, из выражений для  $M^{(1)}$  и  $M^{(2)}$  следует, что в обоих матричных элементах для оже-процесса отсутствует закон сохранения квазиимпульса. Однако механизмы, приводящие к снятию запрета на несохранение квазиимпульса для этих двух процессов, как уже было отмечено выше, разные. Так, в матричном элементе  $M^{(1)}$  несохранение квазиимпульса связано с рассеянием носителей заряда на гетеробарьере, при этом матричный элемент пропорционален высотам гетеробарьеров для электронов и дырок. Также видно, что при  $R \rightarrow \infty$   $M^{(1)} \rightarrow 0$ . Выражение для квазипорогового матричного элемента  $M^{(2)}$  при больших значениях  $R$  пропорционально  $\frac{\sin(k_4 - k_3)R}{k_4 - k_3}$ , и в пределе  $R \rightarrow \infty$  этот множитель переходит в  $\delta$ -функцию. Это означает, что для трехмерного полупроводника данный механизм оже-рекомбинации переходит в обычный пороговый процесс.

Следует отметить, что для сферической ямы конечной глубины существует критический радиус  $R^*$ , при котором связанное состояние носителей заряда исчезает. Рассмотрим поведение матричных элементов для кулоновского взаимодействия вблизи критического радиуса. При радиусах квантовой точки  $R > R^*$

волновая функция носителей заряда локализована, в основном, в области под барьером. Это значит, что при этом нормировочные коэффициенты для волновых функций электронов  $A_1$  и  $A_2$  стремятся к нулю. При этом вовсе не нарушается предположение о том, что перекрытием волновой функцией тяжелой дырки и локализованного электрона можно пренебречь. Действительно, в квантовых точках связанное состояние для электронов исчезает гораздо раньше, чем для тяжелых дырок, поскольку  $m_h \gg m_e$ . Поэтому, в то время как волновая функция электрона локализована под барьером, волновая функция тяжелой дырки под барьером остается быстрозатухающей. Тогда  $M^{(i)} \propto (R - R^*)$ , где  $i = 1, 2$ .

## 1.6. Скорость и коэффициент оже-рекомбинации

Для нахождения скорости оже-рекомбинации необходимо просуммировать вероятность оже-перехода в единицу времени по всем начальным и конечным состояниям носителей:

$$G = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{k_1, k_2, k_3, k_4} |M_{fi}|^2 f_1 f_2 (1 - f_3) (1 - f_4) \delta(\mathcal{E}_3 + \mathcal{E}_4 - \mathcal{E}_1 - \mathcal{E}_2). \quad (1.42)$$

Здесь  $f_1, f_2$  — степени заполнения электронного уровня в начальном состоянии,  $f_3, f_4$  — степени заполнения в конечном состоянии. В (1.42) подразумевается также суммирование и по  $j$ , и по  $m$ . Для высоковозбужденных состояний функцию распределения  $f_4$  можно положить равной нулю. Далее вместо  $1 - f_3$  можно подставить  $\tilde{f}_3$ , где  $\tilde{f}_3$  — степень заполнения дырочного уровня,  $\mathcal{E}_1$  и  $\mathcal{E}_2$  — энергии электронов в начальном состоянии,  $\mathcal{E}_3$  — энергия дырки в начальном состоянии,  $\mathcal{E}_4$  — энергия электрона в конечном состоянии. Нужно отметить, что оже-скорость (1.42) имеет размерность обратного времени ( $\text{с}^{-1}$ ). Вклады в скорость оже-рекомбинации от беспорогового и квазипорогового матричных элементов  $M_1$  и  $M_2$ , вообще говоря, разделить нельзя, так как между ними имеет место интерференция. При малых значениях радиуса квантовой точки эта

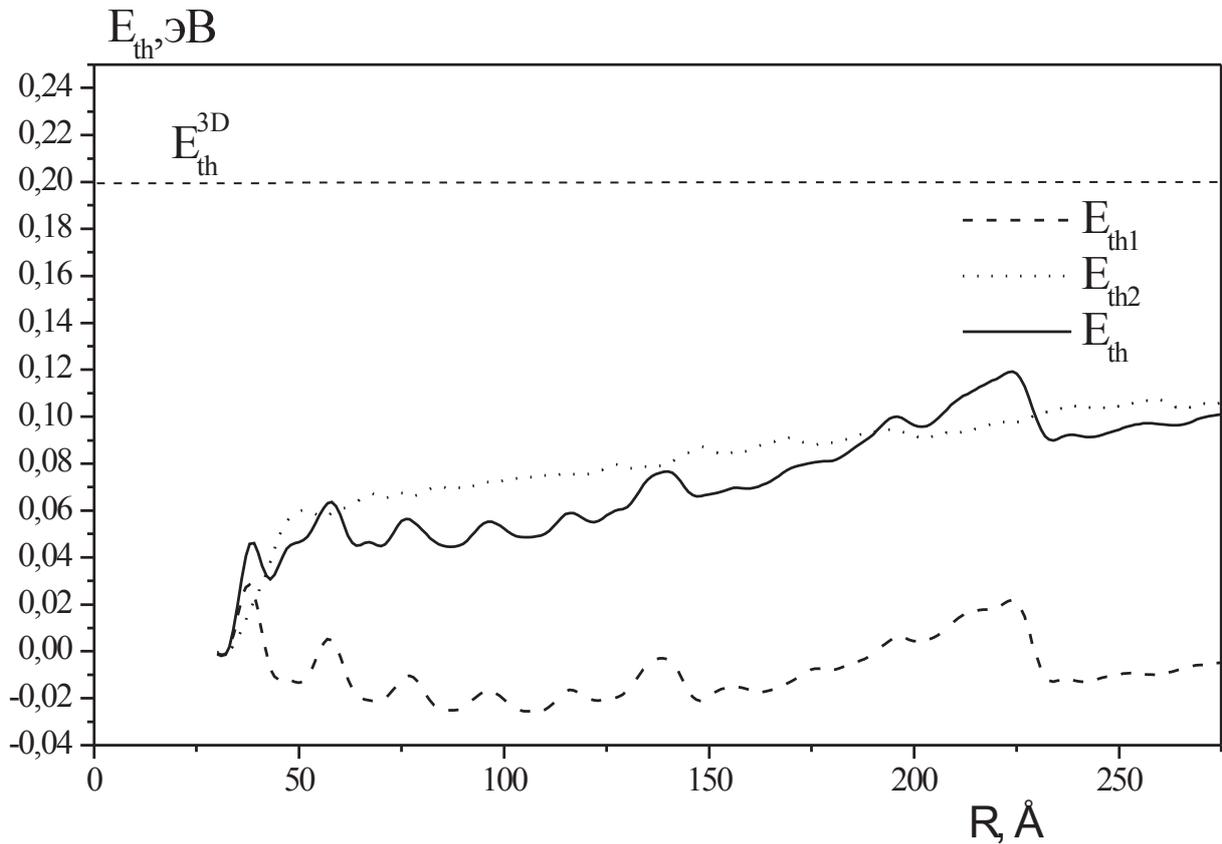


Рис. 1.2. Зависимость пороговой энергии (1.75) для оже-процесса от радиуса квантовых точек при температуре  $T = 300 \text{ K}$  для структуры  $InGaAsP/GaAs$ .  $E_{th1}$  соответствует беспороговому процессу,  $E_{th2}$  соответствует квазипороговому,  $E_{th}$  — суммарному процессу. Горизонтальная штриховая линия отвечает пороговой энергии для трехмерного оже-процесса  $E_{th}^{3D}$ .

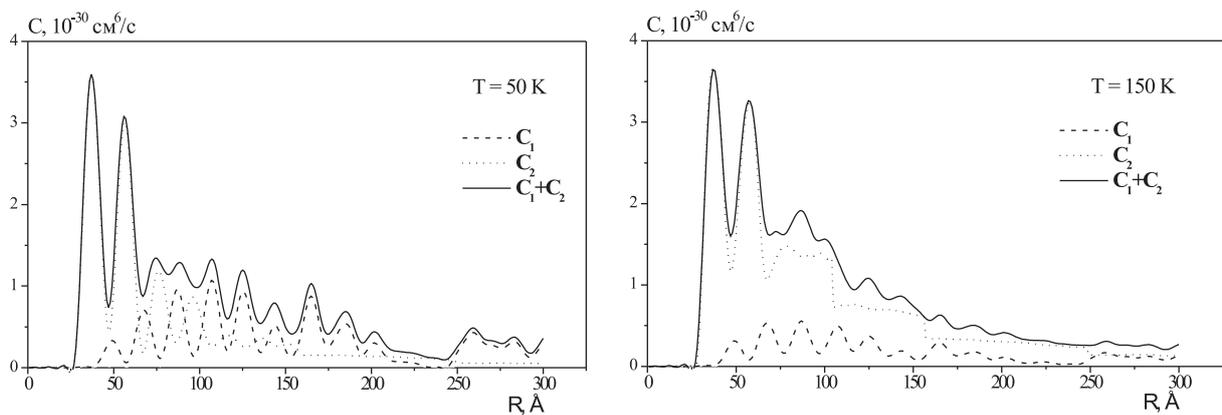


Рис. 1.3. Зависимость суммарного коэффициента Оже от радиуса квантовой точки и парциальные вклады при температурах  $T = 50$  и  $150 \text{ K}$ . При этих температурах скорость оже-процесса для однородного полупроводника на несколько порядков меньше, чем скорость оже-процесса в квантовой точке

интерференция особенно существенна, поскольку оба процесса являются беспо-

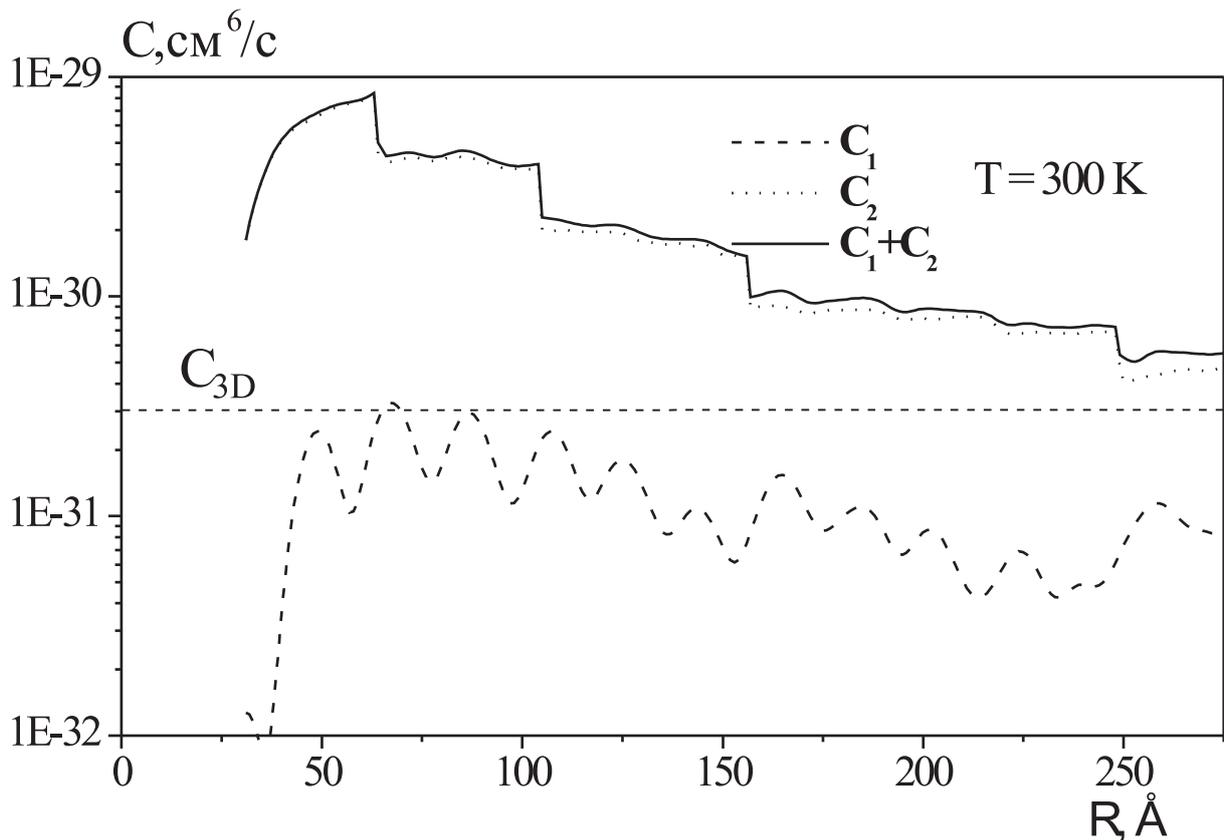


Рис. 1.4. Зависимость суммарного коэффициента Оже от радиуса квантовой точки и парциальные вклады при температуре  $T = 300 \text{ K}$ . Горизонтальная линия соответствует коэффициенту Оже в однородных полупроводниках  $C_{3D}$

роговыми. Для квантовых точек большого радиуса интерференцией между  $M^{(1)}$  и  $M^{(2)}$  можно пренебречь, так как основные квазипороговые переходы, в отличие от беспороговых, происходят с участием тяжелых дырок, имеющих большие значения момента импульса. С учетом этих замечаний становится ясным, что пренебрежение интерференцией дает почти точный результат для квантовых точек большого радиуса и для квантовых точек малого радиуса приводит к результату, правильному по порядку величины. Кроме того, эти два механизма имеют различную температурную зависимость, и поэтому при не слишком маленьких радиусах квантовых точек вклады в суммарный оже-процесс могут быть разделены. Полученная таким образом скорость оже-рекомбинации имеет правильную зависимость от температуры и от параметров квантовой точки: ее радиуса и высот барьеров для электронов и дырок. Введем коэффициент

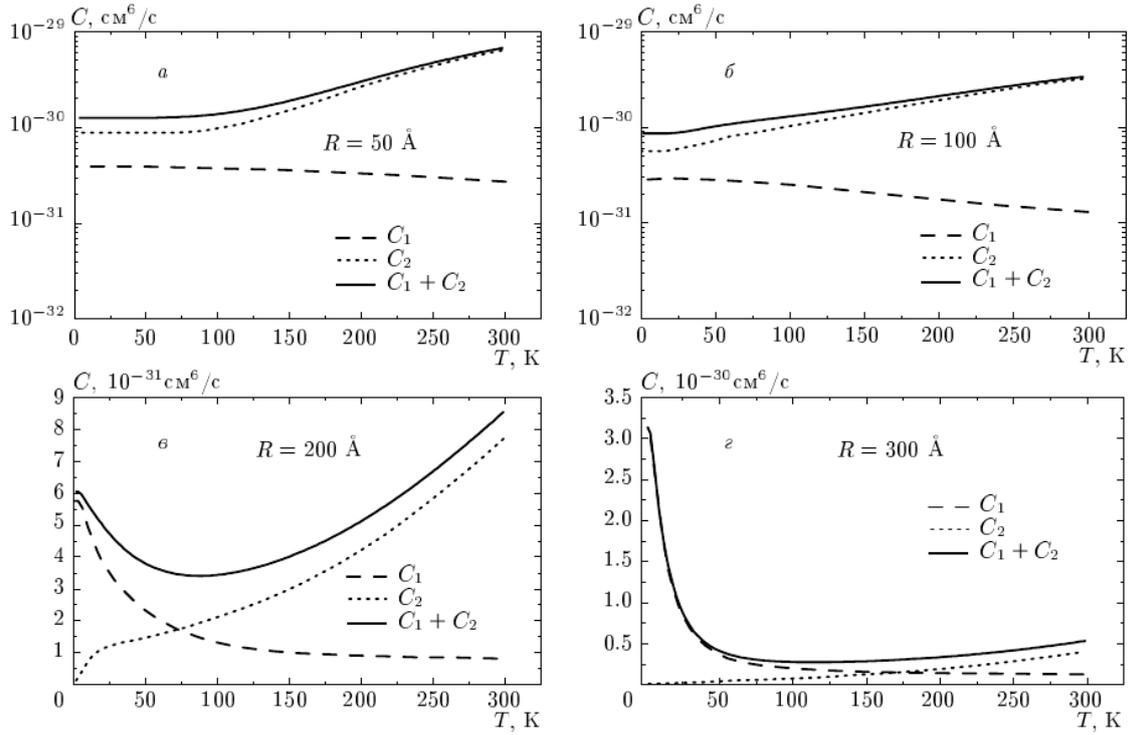


Рис. 1.5. Температурная зависимость оже-коэффициентов при различных радиусах для структуры InGaAsP/GaAs:  $R=50 \text{ \AA}$ (а);  $100 \text{ \AA}$ (б);  $200 \text{ \AA}$ (в);  $300 \text{ \AA}$ (г).

оже-рекомбинации, связанный со скоростью следующим соотношением:

$$G = Cn^2p, \quad (1.43)$$

где  $n$  и  $p$  — число электронов и дырок в квантовой точке. Пренебрегая интерференцией между вкладками от различных процессов, представим коэффициент оже-рекомбинации в виде

$$C = C^{(1)} + C^{(2)}, \quad (1.44)$$

где коэффициенты  $C^{(1)}$  и  $C^{(2)}$  соответствуют беспороговому и квазипороговому оже-процессам с матричными элементами  $M^{(1)}$  и  $M^{(2)}$ , которые даются выражениями (1.41) и (1.81).

Выражение для коэффициента оже-рекомбинации может быть получено при подстановке матричного элемента  $M_{fi}$  в (1.42). Согласно определению коэффициента оже-рекомбинации для квантовой точки (1.43), перенормируем функции распределения  $f_i$ , где  $i = 1, 2, 3$ , на единицу, тогда получим нульмерный коэффициент оже-рекомбинации. Нульмерный коэффициент оже-рекомбинации

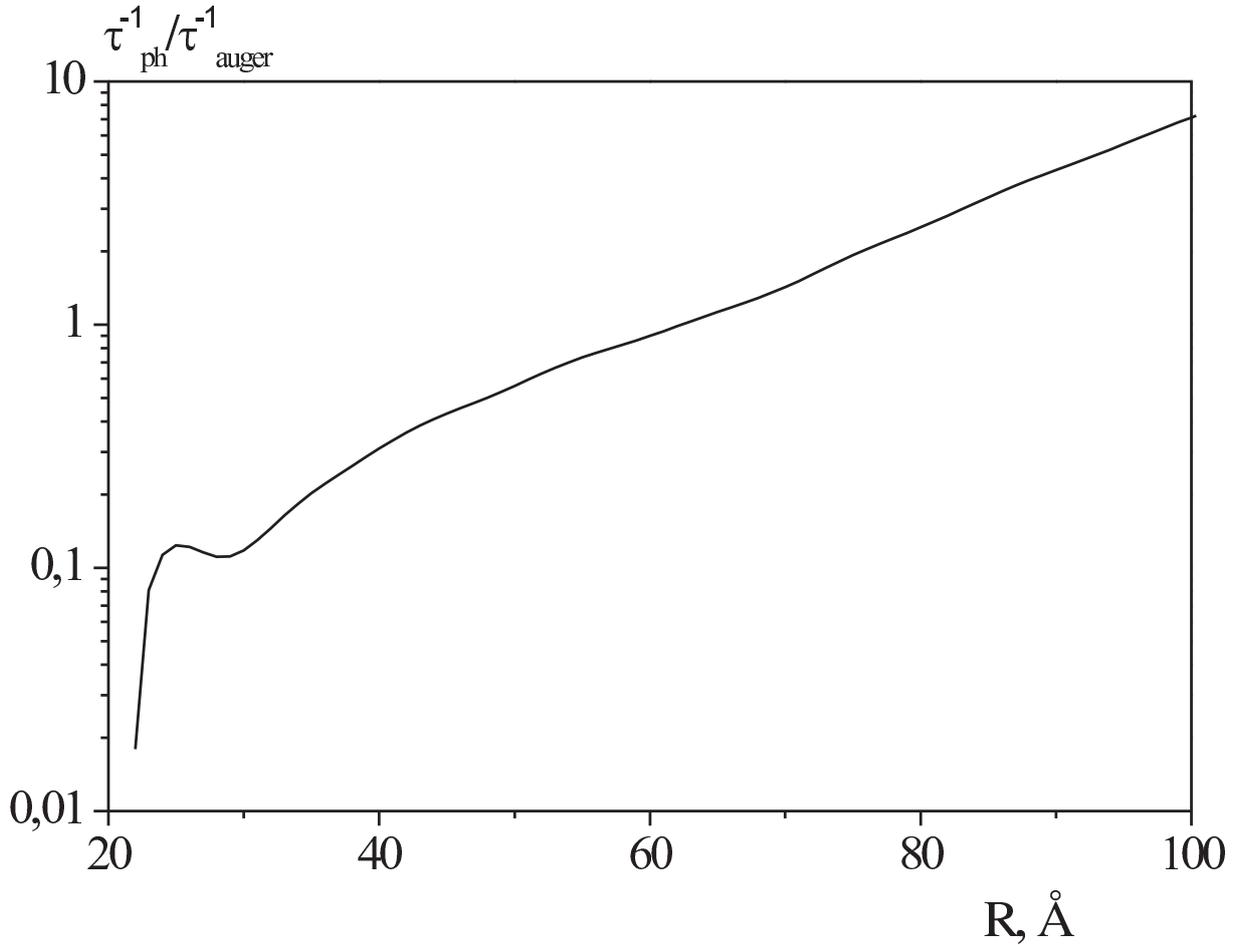


Рис. 1.6. Зависимость отношения вероятностей излучательной и оже-рекомбинации от радиуса квантовой точки  $R$  при температуре  $T = 300\text{ K}$  для структуры InAs/GaAs

$C$ , также как и  $G$ , имеет размерность  $\text{с}^{-1}$ . В дальнейшем будем вычислять коэффициент оже-рекомбинации. Эффективное число состояний для возбужденных электронов имеет вид

$$d\Gamma_4 = \frac{Rdk_4}{\pi}. \quad (1.45)$$

Согласно дисперсионному уравнению (1.4), волновой вектор возбужденного электрона равен

$$k_4^2 = \frac{\mathcal{E}_4(\mathcal{E}_4 + E_g)}{\hbar^2\gamma^2}. \quad (1.46)$$

Поскольку энергия возбужденного электрона  $\mathcal{E}_4 \approx E_g$ , из (1.46) получаем

$$dk_4 \approx \frac{d\mathcal{E}_4}{\hbar\gamma}. \quad (1.47)$$

Подставляя все это в (1.42), можно произвести интегрирование по  $k_4$  с помощью

$\delta$ -функции. В результате для коэффициента оже-рекомбинации получаем

$$C = \frac{2}{\hbar} \sum_{k_1, k_2, k_3} \frac{R}{\hbar \gamma} f_1 f_2 \tilde{f}_3 |M_{fi}|^2. \quad (1.48)$$

Выражение для беспорогового коэффициента оже-рекомбинации может быть получено с помощью подстановки матричного элемента (1.41) в (1.48). В результате получаем

$$\begin{aligned} C^{(1)} &\approx \sum_{k_1, k_2, k_3} \frac{2R}{\hbar^2 \gamma} f_1 f_2 \tilde{f}_3 \left[ \frac{e^2 \hbar \gamma}{\varepsilon} \frac{4}{E_g} \frac{1}{R^3} \times \right. \\ &\times \left( \frac{j_0(k_c R) j_1(k_c R)}{\frac{j_0^2(k_c R)}{k_0^2(\kappa_c R)} k_1(\kappa_c R) k_{-1}(\kappa_c R) - j_1(k_c R) j_{-1}(k_c R)} \right) \times \\ &\times \left. \frac{k_1}{k_3^2} \frac{\sqrt{j(j+1)}}{2j+1} \left( \frac{j+1}{k_4 R} \frac{V_v}{\mathcal{E}_4 + E_g} + j_{j-1}(k_4 R) \frac{V_c}{\mathcal{E}_4} \right) \right]^2, \end{aligned} \quad (1.49)$$

где

$$k_4 \approx \sqrt{\frac{4m_c E_g}{\hbar^2} + 3 \left( k_1^2 + k_2^2 + \frac{m_c}{m_h} k_3^2 \right)}. \quad (1.50)$$

Выражение для  $C^{(1)}$  можно упростить и переписать в виде

$$\begin{aligned} C^{(1)} &\approx \frac{128}{\pi^3} \frac{E_B}{\hbar} \left( \frac{E_R}{E_g} \right)^{3/2} \sum_{k_1, k_2, k_3} f_1 f_2 \tilde{f}_3 \frac{k_1^2}{R^2 k_3^4} \frac{j(j+1)}{(2j+1)^2} \times \\ &\times \left( \frac{j_0(k_c R) j_1(k_c R)}{\frac{j_0^2(k_c R)}{k_0^2(\kappa_c R)} k_1(\kappa_c R) k_{-1}(\kappa_c R) - j_1(k_c R) j_{-1}(k_c R)} \right)^2 \times \\ &\times \left( \frac{j+1}{k_4 R} \frac{V_v}{\mathcal{E}_4 + E_g} + j_{j-1}(k_4 R) \frac{V_c}{\mathcal{E}_4} \right)^2. \end{aligned} \quad (1.51)$$

Здесь  $E_B = \frac{m_c e^4}{2\hbar^2 \varepsilon^2}$  — характерная (боровская) энергия межэлектронного взаимодействия,  $E_R = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_c R^2}$  — характерная энергия размерного квантования в квантовой точке. При выводе (1.51) учтено, что  $\gamma = \sqrt{\frac{E_g}{2m_c}}$ .

Следует отметить, что при больших радиусах квантовых точек, в пределе  $R \rightarrow \infty$ , беспороговый коэффициент оже-рекомбинации стремится к нулю, как  $1/R^7$ . Поэтому даже после умножения на  $R^6$ , т.е. на  $V^2$ ,  $C^{(1)}$  остается убывающей функцией радиуса квантовой точки. Поэтому беспороговый процесс оже-рекомбинации может быть преобладающим только для квантовых точек малого

радиуса. Из (1.51) отчетливо видно, что беспороговый процесс оже-рекомбинации связан с рассеянием носителей заряда на гетерогранице, так как  $C^{(1)}$  пропорционален  $V_c$  и  $V_v$ . Для коэффициента квазипорогового оже-процесса после подстановки матричного элемента (1.38) в (1.48) имеем

$$\begin{aligned}
C^{(2)} \approx & \sum_{k_1, k_2, k_3} \frac{2R}{\hbar^2 \gamma} f_1 f_2 \tilde{f}_3 \left[ \frac{e^2 \hbar \gamma}{\varepsilon E_g} \frac{2}{R^5} \times \right. \\
& \times \left( \frac{j_0(k_c R) j_1(k_c R)}{\frac{j_0^2(k_c R)}{k_0^2(\kappa_c R)} k_1(\kappa_c R) k_{-1}(\kappa_c R) - j_1(k_c R) j_{-1}(k_c R)} \right) \times \\
& \times \left. \frac{k_1}{k_3 k_4^2} \sqrt{j(j+1)} \frac{\sin(k_4 - k_3) R}{k_4 - k_3} \right]^2.
\end{aligned} \tag{1.52}$$

По аналогии с  $C^{(1)}$  можно упростить выражение и для  $C^{(2)}$ :

$$\begin{aligned}
C^{(2)} \approx & \frac{8 E_B}{\pi^7 \hbar} \left( \frac{E_R}{E_g} \right)^{7/2} \sum_{k_1, k_2, k_3} f_1 f_2 \tilde{f}_3 \frac{k_1^2}{k_3^2} \times \\
& \times \left( \frac{j_0(k_c R) j_1(k_c R)}{\frac{j_0^2(k_c R)}{k_0^2(\kappa_c R)} k_1(\kappa_c R) k_{-1}(\kappa_c R) - j_1(k_c R) j_{-1}(k_c R)} \right)^2 \times \\
& \times j(j+1) \frac{\sin^2(k_4 - k_3) R}{(k_4 - k_3)^2 R^2}.
\end{aligned} \tag{1.53}$$

Как и следовало ожидать,  $C^{(2)}$  отличается от  $C^{(1)}$ . Отличие между двумя разными процессами рекомбинации выражается в том, что они имеют разные множители: в  $C^{(1)}$  входит отношение  $\left(\frac{V_{c,v}}{E_g}\right)^2$ , что связано с рассеянием электрона на гетерогранице, а в  $C^{(2)}$  входит множитель  $\frac{\sin^2 kR}{(kR)^2}$ , что является причиной нарушения закона сохранения квазиимпульса электрона из-за его локализации в пределах квантовой точки.

Следует отметить, что коэффициент  $C^{(2)}$ , как и  $C^{(1)}$ , пропорционален величине полного момента  $j$ . В пределе квантовой точки бесконечного радиуса выражение для квазипорогового коэффициента оже-рекомбинации переходит в выражение для коэффициента оже-рекомбинации в однородном полупроводнике. Чтобы перейти в (1.52) к пределу при  $R \rightarrow \infty$ , следует перейти от суммирования по дискретным состояниям к интегрированию по непрерывным состояниям,

так как в этом случае уровни размерного квантования сливаются в непрерывный спектр. Кроме того, при  $R \rightarrow \infty$  в (1.52) можно произвести замену

$$\frac{\sin^2((k_4 - k_3)R)}{(k_4 - k_3)^2} \rightarrow \frac{\pi R}{2} \delta(k_4 - k_3). \quad (1.54)$$

Из этого выражения явно видно наличие порога в этом пределе, т. е. имеет место закон сохранения квазиимпульса. В результате для коэффициента квази-порогового процесса получаем

$$C^{(2)} = \frac{4\sqrt{\pi} e^4}{R^6} \frac{\hbar^3}{\varepsilon^2 m_c^{1/2} m_h^{3/2} E_g^{5/2} T^{1/2}} \exp\left(-\frac{E_{th}}{T}\right), \quad (1.55)$$

где  $E_{th}$  — пороговая энергия СНСС-процесса в однородном полупроводнике, в модели Кейна  $E_{th} \approx \frac{2m_c}{m_h} E_g$  [24]. Выражение (1.55) можно сравнить с известным результатом для коэффициента оже-рекомбинации в однородном полупроводнике [70]. Для этого домножим (1.55) на квадрат объема квантовой точки  $V^2$ . Тогда наше предельное выражение и выражение из работы [70] будут практически совпадать:

$$V^2 C^{(2)} = \frac{64}{9} \pi^{5/2} \frac{e^4}{\varepsilon^2} \frac{\hbar^3}{m_c^{1/2} m_h^{3/2} E_g^{5/2} T^{1/2}} \exp\left(-\frac{E_{th}}{T}\right), \quad (1.56)$$

$$C_{3D} = 6\sqrt{2} \pi^{5/2} \frac{e^4}{\varepsilon^2} \frac{\hbar^3}{m_c^{1/2} m_h^{3/2} E_g^{5/2} T^{1/2}} \exp\left(-\frac{E_{th}}{T}\right). \quad (1.57)$$

Небольшое отличие в численном коэффициенте связано, во-первых, с тем, что в работе [70] сделано предположение, что  $\Delta_{SO} \gg E_g$ , а в нашем случае, наоборот, считается, что  $\Delta_{SO} = 0$ .

## 1.7. Эксперимент

Экспериментально времена жизни носителей заряда изучались в однослойных массивах квантовых точек InAs, выращенных методом молекулярно-пучковой эпитаксии по механизму Странского-Крастанова [73]. Эффективная толщина покрытия InAs составляла 2,9 монослоев. Особенности ростового процесса

описаны в [74]. Образцы состояли из слоя квантовых точек InAs, окруженного барьером GaAs (в 20 нм с каждой стороны). Для повышения эффективности сбора фотовозбужденных носителей заряда барьерные слои GaAs квантовых точек были окружены градиентной короткопериодичной бинарной сверхрешеткой AlAs/GaAs (200 нм с каждой стороны). Со стороны подложки и поверхности гетероструктуры сверхрешетку прикрывали прилегающие слои  $\text{Al}_{0.6}\text{Ga}_{0.4}\text{As}$  (500 и 100 нм соответственно), предотвращая утечку неравновесных носителей к безызлучательным центрам рекомбинации на поверхности образца и в объёмный материал подложки. Для изучения времени жизни неравновесных носителей заряда использовалась установка для проведения фотолюминесцентных исследований с временным разрешением, позволяющая проводить измерения в большом временном интервале (до 150 нс). В установке использовалась техника времясогласованного однофотонного счета [75]. Для реализации фотолюминесцентных измерений с временным разрешением использовался однофотонный Si-лавинный диод с высокой чувствительностью. Измерения спектра излучения с основного состояния квантовой точки с помощью метода фотолюминесценции с временным разрешением были выполнены в широком диапазоне плотностей мощности излучения (0,05–3400 Вт/см<sup>2</sup>). Время жизни неравновесных носителей заряда в основном состоянии в квантовых точках измерялось при двух температурах, 5 и 77 К соответственно, результаты представлены на рис. 1.7 и 1.8. При 5 К время жизни практически не зависит от плотности возбуждения, что говорит о том, что в данном случае работает только излучательный канал рекомбинации. При 77 К время жизни падает, начиная с некоторого уровня возбуждения. Это означает, что в этом случае включается дополнительный канал рекомбинации — оже-рекомбинация.

### 1.7.1. Модель и постановка задачи

В эксперименте используются такие плотности возбуждения, которые соответствуют концентрациям носителей заряда в смачивающем слое  $n \geq 10^{11}$  см<sup>-2</sup>.

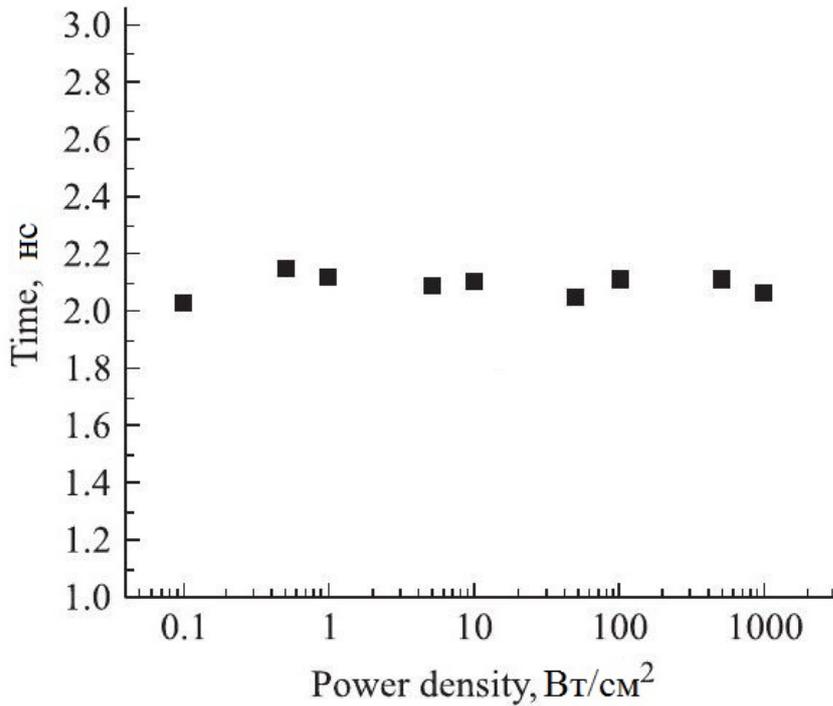


Рис. 1.7. Зависимость времени жизни от плотности возбуждения при 5 К

Эта величина соответствует трехмерной концентрации порядка  $10^{16} \text{ см}^{-3}$ . При такой концентрации дебаевская длина экранирования  $\lambda_D \gg d$ ,  $d$  — расстояние между квантовыми точками. Таким образом, для заряженной квантовой точки (например, когда это две дырки и один электрон) наиболее вероятен захват электрона на эту квантовую точку, поскольку носители заряда выбирают именно ее из всех квантовых точек в пределах длины экранировки. То есть в случае нашей модели, поскольку двумерная концентрация носителей заряда больше двумерной концентрации квантовых точек (поверхностная концентрация массива квантовых точек InAs порядка  $10^{11} \text{ см}^{-2}$ ), считается, что все квантовые точки в целом нейтральны. При таком уровне возбуждения на каждую квантовую точку приходится две частицы в основном состоянии. При таком заполнении частицы находятся на одном уровне энергии с противоположными спинами, поэтому спиновая часть волновой функции обязательно должна быть антисимметричной по отношению к перестановкам двух частиц [76]. Координатная часть волновой функции при этом является симметричной. Поэтому при расчете матричного элемента кулоновского взаимодействия необходимо

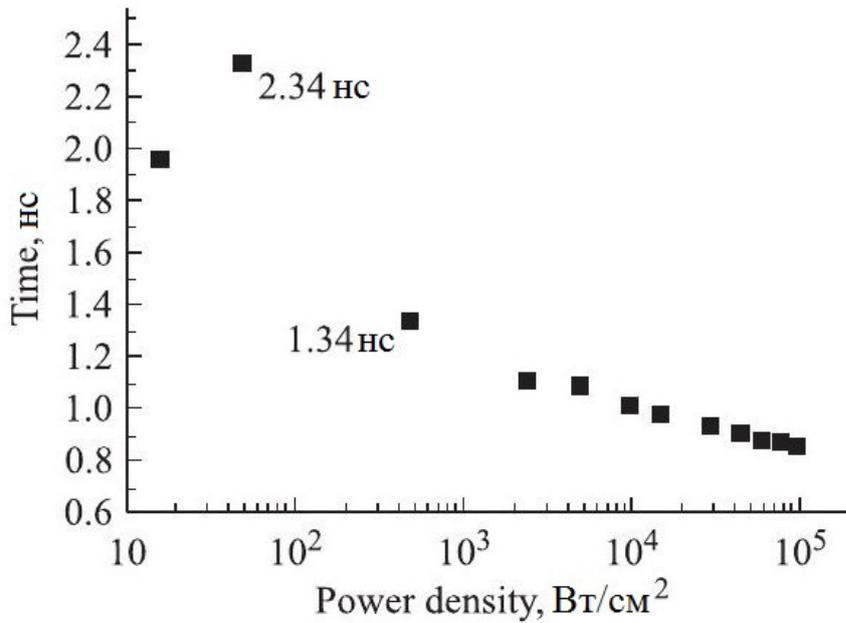


Рис. 1.8. Зависимость времени жизни от плотности возбуждения при 77 К

учитывать симметрию спиновой части волновой функции, заданную принципом Паули. В силу такой симметрии, матричный элемент содержит два вклада, прямой и обменный, которые входят с разными знаками. При полном заполнении основного состояния как для электронов, так и для дырок прямой и обменный вклады могут компенсировать друг друга. Совершенно ясно, что при более высоких уровнях возбуждения на квантовую точку будет захватываться более двух носителей заряда одного знака. Это означает, что в такой системе, когда в квантовую точку захватывается по три и более носителя заряда, вопрос о компенсации прямого и обменного вкладов кулоновского взаимодействия остается открытым. Однако в случае, когда в квантовой точке находится по три носителя заряда, в нее за очень короткое время (порядка  $10^{-12}$  с) захватывается еще по одному носителю заряда. В случае, когда в квантовой точке полностью заполнены основное и возбужденное состояние, также возможна компенсация прямого и обменного вкладов кулоновского взаимодействия.

## 1.8. Время жизни носителей заряда при низких температурах. Матричный элемент и скорость оже-процесса

Целью настоящего параграфа является исследование механизмов оже-рекомбинации в квантовых точках при низких температурах ( $T \sim 4 \text{ K}$ ), когда носители заряда локализованы на основных уровнях размерного квантования зоны проводимости и валентной зоны. Были рассмотрены квантовые точки небольшого размера порядка  $50 \text{ \AA}$ , в этом случае расстояние между дырочными уровнями больше тепловой энергии  $kT$  частиц, тогда температура слабо влияет на заселенность дырочных уровней. В случае низких температур электроны и дырки заселяют только основное состояние и, согласно принципу Паули, имеют противоположный спин. При таком заселении уровней важно учитывать влияние спиновых эффектов на процесс оже-рекомбинации. Как будет показано ниже, механизмы оже-рекомбинации протекают по двум каналам. Первый канал рекомбинации (I) связан с переходом электрона (1 — на рисунке) в состояние тяжелой дырки (3 — на рисунке), при этом вторая тяжелая дырка (4 — на рисунке) остается внутри квантовой точки, а другой электрон (2 — на рисунке) переходит в возбужденное состояние. Этот канал является прямым. Другой канал рекомбинации (II), который связан с переходом электрона (1 — на рисунке) со спином вверх в состояние тяжелой дырки со спином вверх (4 — на рисунке; эта дырка имеет тот же спин, но соответствует перестановке двух частиц, см. (9)). Этот канал является обменным, так как здесь учитывается антисимметрия спиновой части волновой функции. Аналогичные каналы (прямой и обменный) возникают, когда рекомбинирует электрон (2), а электрон (1) возбуждается в непрерывный спектр. Вклады от прямого и обменного процессов в матричный элемент для каналов I и II имеют противоположный знак и равны по модулю. В выражение для вероятности оже-процесса входит квадрат модуля матричного

элемента. Поскольку начальное и конечное состояния идентичны для каждого из каналов, но существуют разные пути протекания, то необходимо складывать сами матричные элементы, а не квадраты их модулей. Данная ситуация аналогична интегралу по траекториям в квантовой механике как суммы амплитуд от всех путей прохождения частицы. При этом в результате суммирования по этим двум каналам (прямой и обменный) оже-рекомбинации матричный элемент обращается в нуль.

Для дальнейших вычислений используется модель Кейна, не учитывающая спин-орбитального взаимодействия. Волновые функции в этой модели могут быть представлены в виде суперпозиции огибающих функций  $s$ - и  $p$ -симметрии на блоховские функции.

Уравнения Кейна для огибающих  $\psi_s$  и  $\psi$  выписаны нами ранее [26] (1.3). Поскольку спин-орбитальное взаимодействие не учитывается, то уравнения Кейна для компонент со спином "вверх" и для компонент со спином "вниз" могут быть разделены. Таким образом, координатные части состояний со спином вверх и со спином вниз будут одинаковыми. В этом случае волновые функции электронов имеют следующий вид:

$$\psi_e = \psi_{ec}(\mathbf{r}) |s \uparrow, \downarrow\rangle + \psi_{ev}(\mathbf{r}) |\mathbf{p} \uparrow, \downarrow\rangle. \quad (1.58)$$

Первый значок в символе  $|\rangle$  соответствует  $s$ - или  $p$ -состоянию, второй — направлению спина. Точные волновые функции могут быть получены как решения уравнений Кейна. Эти волновые функции получены нами в § 1.3. Для тяжелых дырок  $\psi_s = 0$ , так как  $s$ -компонента не дает вклада в волновую функцию. Тогда уравнения Кейна для них имеют более простой вид

$$\begin{cases} \nabla \psi = 0 \\ -E\psi - \frac{\hbar^2}{2m}(\gamma_1 - 2\gamma_2)\nabla \times (\nabla \times \psi) = 0. \end{cases} \quad (1.59)$$

Тогда волновая функция тяжелых дырок содержит только  $p$ -компоненту

$$\psi_h = \psi_{hv}(\mathbf{r}) |\mathbf{p} \uparrow, \downarrow\rangle. \quad (1.60)$$

Уравнение для огибающей части волновой функции имеет два решения, которые имеют разную поляризацию [67, 77, 78]. Разная поляризация соответствует различным проекциям вектора  $\psi$  на вектор  $\mathbf{r}$ , что аналогично случаю ТЕ и ТМ поляризации в электромагнетизме. Эти волновые функции могут быть выписаны как решение уравнений Кейна для тяжелых дырок и были получены в § 1.3.

Отметим, что поляризация  $h1$  отвечает нулевой проекции вектора  $\psi$  на вектор  $\mathbf{r}$ , тогда как поляризация  $h2$  — ненулевой проекции вектора  $\psi$  на вектор  $\mathbf{r}$ . Здесь  $k_h$  — волновой вектор тяжелой дырки,  $A_1$  и  $A_2$  — нормировочные константы, символ ' $<$ ' означает, что величины берутся слева от гетерограницы (т. е. в области квантовой точки). Волновые функции справа от гетерограницы выписываются аналогично [67]. Индексами  $h1$  и  $h2$  обозначены разные поляризации тяжелых дырок. Как показано в [67], в процесс оже-рекомбинации вносит вклад только одна поляризация  $h2$ , именно она и учитывается в дальнейшем. Это можно показать следующим образом. Действительно, в матричный элемент кулоновского взаимодействия входит интеграл по телесному углу от скалярного произведения угловых частей волновых функций. Для волновой функции тяжелой дырки с индексом  $h1$  такой интеграл равен нулю:

$$\int d\Omega \mathbf{Y}_{jm}^{j+1}(\Omega) \mathbf{Y}_{jm}^j(\Omega) = 0. \quad (1.61)$$

Блоховские функции для носителей заряда характеризуются значениями полного момента. В нашей работе не учитывается спин-орбитальное взаимодействие, однако спин носителей заряда учитывается. Таким образом, в квантовой механике орбитальный момент  $l$  и спиновый момент  $s$  складываются по обычным правилам векторного сложения. В модели Кейна полный момент и его проекция на направление  $\mathbf{k}$  (спиральность) являются хорошими квантовыми числами. Таким образом, ветви легких и тяжелых дырок, а также электронов, классифицируются по своим значениям спиральности, и для легких дырок полный момент равен  $\frac{3}{2}$  и спиральности  $\pm\frac{1}{2}$ .

Поскольку два электрона находятся на одном квантовом уровне, то спиновая часть волновой функции должна обязательно быть антисимметричной. Следовательно, координатная часть должна быть симметричной (то же самое для дырок). В результате волновая функция пары частиц с полуцелым спином, локализованных на основном уровне энергии, в модели простых зон имеет вид [76]

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \phi(\mathbf{r}_1)\phi(\mathbf{r}_2)\frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_1(\sigma_1)\chi_2(\sigma_2) - \chi_1(\sigma_2)\chi_2(\sigma_1)). \quad (1.62)$$

Здесь функция  $\phi$  — координатная часть, функция  $\chi$  соответствуют спиновой части волновой функции.

В результате волновые функции пары носителей заряда (пары электронов и пары дырок, расположенных на одном и том же уровне размерного квантования для электронов и дырок соответственно), в модели Кейна имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} \psi_e(\mathbf{r}_1, \nu_1, \mathbf{r}_2, \nu_2) &= \psi_s(\mathbf{r}_1)\psi_s(\mathbf{r}_2) \times \\ &\times \frac{1}{\sqrt{2}} (|s \uparrow\rangle_1 |s \downarrow\rangle_2 - |s \downarrow\rangle_1 |s \uparrow\rangle_2) + \\ &+ \psi_{ev}(\mathbf{r}_1)\psi_{ev}(\mathbf{r}_2) \times \\ &\times \frac{1}{\sqrt{2}} (|\mathbf{p} \uparrow\rangle_1 |\mathbf{p} \downarrow\rangle_2 - |\mathbf{p} \downarrow\rangle_1 |\mathbf{p} \uparrow\rangle_2), \\ \psi_h(\mathbf{r}_3, \nu_3, \mathbf{r}_4, \nu_4) &= \psi_{hv}(\mathbf{r}_3)\psi_{hv}(\mathbf{r}_4) \times \\ &\times \frac{1}{\sqrt{2}} (|\mathbf{p} \uparrow\rangle_3 |\mathbf{p} \downarrow\rangle_4 - |\mathbf{p} \downarrow\rangle_3 |\mathbf{p} \uparrow\rangle_4). \end{aligned} \quad (1.63)$$

Напомним, что  $\psi_s, \psi_{ev}, \psi_{hv}$  — координатные части волновых функций электронов и дырок соответственно (см. (1.62)). Последнее выражение аналогично случаю пары частиц в простой модели (1.62), за исключением того, что здесь рассматриваются дырки с полным моментом  $3/2$ . Волновые функции (1.63) получены в сферическом приближении. Отметим, что в общем случае с учетом спин-орбитального взаимодействия координатные части различны. В на-

шем случае не учитывается спин-орбитальное взаимодействие, поэтому уравнения Кейна могут быть разделены по спину. Однако учет спин-орбитального взаимодействия приведет лишь к количественному переписыванию матричных элементов, качественный результат, относящийся к подавлению оже-процесса, останется таким же.

### 1.8.1. Матричный элемент

Вероятность оже-процесса рассчитывается, согласно золотому правилу Ферми

$$W_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |M_{if}|^2 \delta(E_i - E_f). \quad (1.64)$$

Здесь  $M_{if}$  — матричный элемент перехода из начального состояния в конечное. Энергии  $E_i$  и  $E_f$  соответствуют начальному и конечному состояниям. Скорость оже-процесса  $G$  вычисляется с учетом суммирования (1.64) по всем состояниям зоны проводимости и валентной зоны:

$$G = \sum_{E_1, E_2, E_3, E_4} W_{i \rightarrow f} f_1 f_2 (1 - f_3) (1 - f_4). \quad (1.65)$$

В этом выражении  $f_1, f_2$  — факторы заполнения электронного уровня,  $f_3$  — фактор заполнения дырочного уровня,  $f_4$  — функция распределения возбужденной частицы. Энергии  $E_{1,2}$  — энергии электронов,  $E_3$  — дырки,  $E_4$  — возбужденного носителя заряда. Матричный элемент оже-перехода имеет вид

$$M_{i \rightarrow f} = \left\langle \psi_f(\mathbf{r}_h, \mathbf{r}_2) \left| \frac{e^2}{\varepsilon |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \right| \psi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_h) \right\rangle. \quad (1.66)$$

Здесь  $\psi_i$  — волновая функция, описывающая начальное состояние (описывает пару электронов и дырок на основном уровне),  $\psi_f$  — волновая функция системы в конечном состоянии (описывает возбужденный электрон и дырку),  $\varepsilon$  — диэлектрическая проницаемость среды. Волновые функции в начальном состо-

янии имеют вид произведения волновых функций электронов и дырок:

$$\begin{aligned}
\psi_i &= \psi_e(\mathbf{r}_1, \nu_1, \mathbf{r}_2, \nu_2) \psi_h(\mathbf{r}_1, \nu_3, \mathbf{r}_h, \nu_h) = \\
&= \left( \psi_s(\mathbf{r}_1) \psi_s(\mathbf{r}_2) \times \right. \\
&\quad \times \frac{1}{\sqrt{2}} (|s \uparrow\rangle_1 |s \downarrow\rangle_2 - |s \downarrow\rangle_1 |s \uparrow\rangle_2) + \\
&\quad + \psi_{ev}(\mathbf{r}_1) \psi_{ev}(\mathbf{r}_2) \times \\
&\quad \times \frac{1}{\sqrt{2}} (|\mathbf{p} \uparrow\rangle_1 |\mathbf{p} \downarrow\rangle_2 - |\mathbf{p} \downarrow\rangle_1 |\mathbf{p} \uparrow\rangle_2) \left. \right) \times \\
&\quad \times \left( \psi_{hv}(\mathbf{r}_1) \psi_{hv}(\mathbf{r}_h) \times \right. \\
&\quad \times \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle \mathbf{p} \uparrow|_1 \langle \mathbf{p} \downarrow|_h - \langle \mathbf{p} \downarrow|_1 \langle \mathbf{p} \uparrow|_h) \left. \right). \tag{1.67}
\end{aligned}$$

В конечном состоянии необходимо записать волновые функции оставшейся дырки и электрона в виде произведения волновых функций электронов и дырок:

$$\begin{aligned}
\psi_f &= \psi_{hf}(\mathbf{r}_f, \nu_f, \mathbf{r}_h, \nu_h) = \psi_f(\mathbf{r}_f) \psi_h(\mathbf{r}_h) = \\
&= \psi_f(\mathbf{r}_f) \psi_{hv}(\mathbf{r}_h) |\mathbf{p}\rangle_h. \tag{1.68}
\end{aligned}$$

В результате матричный элемент будет иметь вид

$$\begin{aligned}
M_{i \rightarrow f} &= \int d\mathbf{r}_1 \int d\mathbf{r}_2 \int d\mathbf{r}_h \psi_e(\mathbf{r}_1, \nu_1, \mathbf{r}_2, \nu_2) \times \\
&\quad \times \psi_h(\mathbf{r}_1, \nu_3, \mathbf{r}_h, \nu_h) \frac{e^2}{\varepsilon |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \psi_{hf}(\mathbf{r}_h, \nu_h, \mathbf{r}_2, \nu_f). \tag{1.69}
\end{aligned}$$

Подставляя (1.67) и (1.68) в (1.69), получим в явном виде выражение для матричного элемента

$$M_{i \rightarrow f} = M_I + M_{I(exch)} + M_{II} + M_{II(exch)}, \tag{1.70}$$

где матричные элементы  $M_I, M_{II}$  и  $M_{I(exch)}, M_{II(exch)}$  соответственно, прямые и обменные, причем матричный элемент  $M_I$  относится к первому каналу рекомбинации, а  $M_{II}$  — ко второму (см рис. 1.1). Напомним, что канал I относится к случаю, когда первый электрон рекомбинирует с дыркой, а второй возбуждается высоко в зону. Тогда из-за антисимметрии волновых функций дырок (??)

будем иметь два матричных элемента, прямой и обменный. Распишем теперь более детально выражение для матричного элемента I, используя выражение (1.63)

$$M_I = \int \mathbf{dr}_1 \int \mathbf{dr}_2 \int \mathbf{dr}_h \psi_{ev}(r_1) \psi_{ev}(\mathbf{r}_2) \psi_{hv}(\mathbf{r}_h) \times \psi_f(\mathbf{r}_2) \psi_{hv}(\mathbf{r}_h) \frac{e^2}{\varepsilon |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \frac{1}{2} (\langle \mathbf{p} \uparrow_1 | \mathbf{p} \uparrow \rangle_1 \langle \mathbf{p} \downarrow_h | \mathbf{p} \downarrow \rangle_h). \quad (1.71)$$

В выражение (1.71) для прямого кулоновского взаимодействия вносит вклад только первое слагаемое в волновой функции электронов  $\psi_e$  и первое слагаемое волновой функции для дырок  $\psi_h$ . Аналогично, обменный матричный элемент имеет вид

$$M_{I(exch)} = - \int \mathbf{dr}_1 \int \mathbf{dr}_2 \int \mathbf{dr}_h \psi_{ev}(r_1) \psi_{ev}(\mathbf{r}_2) \psi_{hv}(\mathbf{r}_h) \times \psi_f(\mathbf{r}_2) \psi_{hv}(\mathbf{r}_h) \frac{e^2}{\varepsilon |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \frac{1}{2} (\langle \mathbf{p} \uparrow_1 | \mathbf{p} \uparrow \rangle_1 \langle \mathbf{p} \downarrow_h | \mathbf{p} \downarrow \rangle_h). \quad (1.72)$$

Здесь вносит вклад только первое слагаемое в волновой функции электронов и второе — в волновой функции дырок (см. 1.63). Знак (-) в (1.72) появляется в силу учета обменного вклада, то есть второго слагаемого в волновой функции дырок (1.63). Блоховские функции  $|s\rangle$  и  $|p\rangle$  являются ортогональными. При суммировании было получено, что  $M_I + M_{I(exch)} = 0$ . Матричный элемент  $M_{II}$  имеет аналогичный вид:

$$M_{II} = \int \mathbf{dr}_1 \int \mathbf{dr}_2 \int \mathbf{dr}_h \psi_{ev}(r_1) \psi_{ev}(\mathbf{r}_2) \psi_{hv}(\mathbf{r}_h) \times \psi_f(\mathbf{r}_2) \psi_{hv}(\mathbf{r}_h) \frac{e^2}{\varepsilon |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \frac{1}{2} (\langle \mathbf{p} \downarrow_1 | \mathbf{p} \downarrow \rangle_1 \langle \mathbf{p} \uparrow_h | \mathbf{p} \uparrow \rangle_h). \quad (1.73)$$

В этом выражении вносит вклад только второе слагаемое в волновой функции электронов и первое — для дырок. Обменный матричный элемент имеет вид

$$M_{II(exch)} = - \int \mathbf{dr}_1 \int \mathbf{dr}_2 \int \mathbf{dr}_h \psi_{ev}(r_1) \psi_{ev}(\mathbf{r}_2) \psi_{hv}(\mathbf{r}_h) \times \psi_f(\mathbf{r}_2) \psi_{hv}(\mathbf{r}_h) \frac{e^2}{\varepsilon |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \frac{1}{2} (\langle \mathbf{p} \downarrow_1 | \mathbf{p} \downarrow \rangle_1 \langle \mathbf{p} \uparrow_h | \mathbf{p} \uparrow \rangle_h). \quad (1.74)$$

Видно, что при сложении (1.73) и (1.74) эти вклады сокращаются ( $M_{II} + M_{II(exch)} = 0$ ). Это есть следствие так называемой квантовой интерференции

между путями протекания оже-процесса. Как известно, в квантовой механике амплитуда рассеяния волны оказывается равной сумме по всем путям прохождения волны, то есть равной интегралу по траекториям. В нашем случае картина аналогична. Важно отметить, что необходимо складывать не квадраты модулей матричных элементов, а сами матричные элементы и сумму возводить в квадрат, в силу того что произведено суммирование по всем путям протекания оже-процесса. Это означает, что пути протекания физически эквивалентны и неразличимы.

Вообще говоря, возбужденный уровень энергии также может быть заполнен. При этом возможен процесс оже-рекомбинации, в котором участвует один носитель с основного уровня и один — с возбужденного уровня энергии. При этом один электрон рекомбинирует с тяжелой дыркой, а другой — возбуждается в непрерывный спектр. Здесь возможны два варианта. Первый. когда спиновая часть пары частиц антисимметрична, тогда в матричный элемент кулоновского взаимодействия войдут как прямой, так и обменный вклады с противоположными знаками. В этом случае процесс оже-рекомбинации также подавляется вследствие квантовой интерференции. Вторым вариантом, когда координатная часть пары частиц антисимметрична, а спиновая — симметрична. Поэтому такой оже-процесс подавляться не будет. Однако рассмотрим случай, когда плотности возбуждения такие, что в квантовой точке оказывается больше двух носителей заряда. В случае, когда в квантовой точке находится по три носителя заряда (три электрона и три дырки), может быть эффективно и за очень короткое время (порядка пикосекунды) захвачен четвертый носитель заряда. В этом случае процесс оже-рекомбинации не успевают произойти и в квантовой точке с четырьмя носителями заряда процесс оже-рекомбинации также будет подавлен, как и в случае двух носителей заряда на основном уровне. Вопрос о захвате, зависящий от числа частиц в квантовой точке, является открытым.

## 1.9. Обсуждение результатов

Микроскопический анализ процессов оже-рекомбинации в полупроводниковых структурах с квантовыми точками показал, что существуют два различных механизма оже-рекомбинации, беспороговый и квазипороговый. Беспороговый процесс связан с рассеянием нормальной к интерфейсу компоненты квазиимпульса и момента импульса электрона на гетерогранице. Квазипороговый процесс связан с локализацией носителей заряда внутри квантовой точки, при этом рассеяние электрона происходит на короткодействующем кулоновском потенциале. В квантовых ямах, помимо указанных двух процессов оже-рекомбинации, существует еще и третий процесс, связанный с переходом электрона в дискретный спектр, при этом возбужденный электрон с большой энергией остается в связанном состоянии. В квантовых нитях изменения по сравнению с квантовой точкой претерпевает беспороговый процесс оже-рекомбинации. В квантовых нитях беспороговый процесс имеет два канала, связанных с передачей возбужденному электрону квазиимпульса и момента импульса. На рис. 1.2 представлена зависимость пороговой энергии от радиуса квантовой точки для двух механизмов оже-рекомбинации  $C^{(1)}$  и  $C^{(2)}$  в отдельности и для суммарного процесса оже-рекомбинации  $C = C^{(1)} + C^{(2)}$ , которая была определена по формуле

$$E_{th}^i = T^2 \frac{d \ln C^{(i)}}{dT}, i = 1, 2. \quad (1.75)$$

Горизонтальная штрихпунктирная линия на рис. 1.2 соответствует пороговой энергии  $E_{th}^{3D}$  для трехмерного оже-процесса [70]. Для беспорогового оже-процесса пороговая энергия убывает с ростом радиуса квантовой точки и при определенном значении радиуса становится отрицательной. Такое поведение связано с тем, что для достаточно больших радиусов коэффициент оже-рекомбинации  $C^{(1)}$  становится убывающей функцией температуры (см. рис. 1.5). Пороговая энергия квазипорогового процесса положительна и меньше трехмерного значения  $E_{th}^{3D}$ . С ростом радиуса квантовой точки пороговая энергия для суммарного

коэффициента оже-рекомбинации стремится к своему предельному значению  $E_{th}^{3D}$ .

На рис. 1.3 и 1.4 приведены зависимости коэффициентов оже-рекомбинации  $C^{(1)}$  и  $C^{(2)}$  от радиуса квантовой точки при различных температурах для структуры на основе InGaAsP/InP (с шириной запрещенной зоны в области квантовой точки 1 эВ). Во-первых, суммарный коэффициент оже-рекомбинации является немонотонной функцией радиуса квантовой точки в широком диапазоне температур, т. е. имеется резко выраженный максимум. Важно отметить, что положение максимумов слабо зависят от температуры. Во-вторых, как видно из рисунка, с ростом температуры возрастает относительная роль квазипорогового процесса оже-рекомбинации. Немонотонная зависимость коэффициента оже-рекомбинации от  $R$  имеет следующее объяснение: для малых значений радиуса квантовой точки малость оже-коэффициента связана, в первую очередь, со слабым перекрытием волновых функций электронов и дырок, находящихся в связанных состояниях. Во-вторых, при  $R = R^*$  связанное состояние вообще отсутствует и интеграл перекрытия равен нулю. При дальнейшем увеличении радиуса квантовой точки коэффициент оже-рекомбинации достигает максимума и затем начинает убывать. С увеличением радиуса квантовой точки уменьшается влияние гетеробарьеров на процессы оже-рекомбинации, при этом проявляется пороговая природа этих процессов. Таким образом, для квантовой точки большого радиуса происходит уменьшение коэффициента оже-рекомбинации до значения, соответствующего трехмерному оже-коэффициенту однородного полупроводника  $C_{3D}$ .

На рис. 1.4 представлена зависимость коэффициентов оже-рекомбинации беспорогового ( $C^{(1)}V^2$ ) и квазипорогового ( $C^{(2)}V^2$ ) процессов от радиуса квантовой точки при температуре  $T = 300K$ . Сплошная кривая на этом рисунке соответствует суммарному коэффициенту оже-рекомбинации, горизонтальная линия соответствует трехмерному коэффициенту ШСС-процесса  $C_{3D}$ . Из анализа следует, что в широком интервале значений радиуса  $R$  оже-рекомбинация

усилена по сравнению с оже-рекомбинацией в однородном полупроводнике.

На рис. 1.5 представлена температурная зависимость суммарного коэффициента оже-рекомбинации и парциальные вклады беспорогового и квазипорогового механизмов при различных радиусах квантовой точки. Из анализа выражения для  $C^{(1)}$  (1.49) следует, что беспороговый процесс имеет слабую (неэкспоненциальную) зависимость от температуры. Температуру, при которой начинается спад для  $C^{(1)}$ , можно оценить из равенства энергии размерного квантования дырок температуре:  $T^m \approx \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_h R^2}$ . Квазипороговый коэффициент оже-рекомбинации  $C^{(2)}$ , наоборот, возрастает с ростом температуры. Для квантовой точки малого радиуса  $C^{(2)}$  также является слабой функцией температуры. С ростом радиуса квантовой точки зависимость  $C^{(2)}$  от температуры усиливается и приближается к пороговой (экспоненциальной) зависимости в объемных полупроводниках (рис. 1.4, 1.5). При этом количественное соотношение между  $C^{(1)}$  и  $C^{(2)}$  также меняется:  $C^{(1)}$  убывает с ростом  $R$  быстрее, чем  $C^{(2)}$ , так что эффективный трехмерный коэффициент  $C_{3D}^{(1)} = C^{(1)} \cdot V^2$  обращается в нуль при  $R \rightarrow \infty$ , а  $C_{3D}^{(2)} = C^{(2)} \cdot V^2$  приближается к объемному коэффициенту оже-рекомбинации  $C_{3D}$  (рис. 1.4). При малых значениях радиуса квантовой точки оже-коэффициенты квазипорогового и беспорогового процессов значительно превышают трехмерный коэффициент  $C_{3D}$ , отнесенный к квадрату объема квантовой точки  $(\frac{4\pi}{3} R^3)^2$  (см рис. 1.4). Из рис. 1.5 видно, что для достаточно больших значения радиуса квантовой точки при низких температурах преобладает беспороговый оже-процесс ( $C^{(1)} > C^{(2)}$ ), а при высоких, наоборот, доминирует квазипороговый процесс ( $C^{(1)} < C^{(2)}$ ). Поэтому зависимость суммарного коэффициента оже-рекомбинации от температуры имеет характерный вид с максимумом и минимумом. С увеличением радиуса квантовой точки минимум суммарного коэффициента оже-рекомбинации слабо смещается в сторону высоких температур и в пределе квантовой точки бесконечного радиуса исчезает. Таким образом, в случае однородного полупроводника коэффициент оже-рекомбинации есть монотонная функция температуры.

На рис. 1.6 представлена зависимость отношения вероятностей излучательной и оже-рекомбинации от радиуса квантовой точки. Из анализа следует, что при малых радиусах квантовой точки зависимость  $\frac{1/\tau_{ph}}{1/\tau_{auger}} < 1$ . С ростом радиуса квантовой точки это отношение вероятностей приближается к единице. При дальнейшем увеличении радиуса вероятность излучательной рекомбинации преобладает над вероятностью оже-рекомбинации. Для анализа использовалось выражение для вероятности излучательной рекомбинации из работы [1].

При вычислении коэффициентов оже-рекомбинации использовался только первый порядок теории возмущений. Для однородных полупроводников первый порядок теории возмущений по межэлектронному взаимодействию недостаточен для расчета коэффициента оже-рекомбинации [79]. Это связано с тем, что существенное влияние на пороговый процесс оже-рекомбинации оказывают процессы электрон-фононной и электрон-электронной релаксации, частично снимающие порог оже-рекомбинации. Однако первый порядок теории возмущений по межэлектронному взаимодействию дает качественно правильный результат для полупроводниковых гетероструктур с квантовыми точками, квантовыми нитями и квантовыми ямами, так как влияние гетеробарьеров на процессы оже-рекомбинации играет более важную роль, чем процессы релаксации, если характерные размеры гетероструктуры меньше длины свободного пробега носителей заряда [79, 80].

Кроме того, при расчете коэффициента оже-рекомбинации не было учтено влияние на величину коэффициента кулоновского взаимодействия между электроном и дыркой. Анализ показывает, что учет такого взаимодействия приводит к уменьшению величины переданной энергии для возбужденного электрона. А это, в свою очередь, приводит к увеличению коэффициента как беспороговой, так и квазипороговой оже-рекомбинации. Такой анализ будет проведен в отдельной работе. Также в отдельной работе будет учтено влияние спин-орбитального взаимодействия на процесс оже-рекомбинации, а также будет исследован процесс оже-рекомбинации для тяжелых дырок с переходом в спин-отщепленную

зону, т. е. будет исследован СННС-процесс.

## 1.10. Заключение

Проведенный микроскопический расчет показал, что в полупроводниковых структурах с квантовыми точками имеется два различных механизма оже-рекомбинации: квазипороговый и беспороговый. Коэффициенты оже-рекомбинации указанных процессов  $C^{(1)}$  и  $C^{(2)}$  по-разному зависят как от температуры, так и от параметров квантовой точки: от высот гетеробарьеров для электронов и дырок ( $V_c$  и  $V_v$  и радиуса квантовой точки (см. рис. 1.3–1.5)). В пределе  $R \rightarrow \infty$  квазипороговый коэффициент оже-рекомбинации, умноженный на квадрат объема квантовой точки, стремится к объемному значению коэффициента оже-рекомбинации, а произведение  $C^{(1)}V^2$  при этом стремится к нулю. Для достаточно малых величин радиуса квантовой точки значение коэффициента оже-рекомбинации, умноженное на  $V^2$ , больше трехмерного значения из-за преобладания беспорогового и квазипорогового процессов оже-рекомбинации (см. рис. 1.4). Таким образом, процесс оже-рекомбинации в квантовых точках оказывается усиленным по сравнению с однородным полупроводником. При низких температурах это усиление оказывается тем более существенным. При низких температурах коэффициент оже-рекомбинации  $C_{3D}$  мал из-за наличия малого экспоненциального множителя (1.57). Отметим, что весь анализ зависимостей коэффициентов оже-рекомбинации  $C^{(1)}$  и  $C^{(2)}$  от температуры и параметров квантовых точек качественно применим в равной мере и для СНСС-, и СННС-процессов. Все зависимости проиллюстрированы на примере СНСС-процесса.

Отметим, что полное подавление процессов оже-рекомбинации в квантовых точках возможно при выполнении условий  $(V_c, V_v) > E_g$  и  $E_2 - E_1 > E_g$  ( $E_1$  и  $E_2$  — энергии первого и второго уровней размерного квантования носителей), т. е. в том случае, когда энергии возбужденной частицы недостаточно для

перехода в непрерывный спектр или на следующий уровень размерного квантования. Для выполнения этих условий необходимо создание квантовых точек с глубокими и узкими потенциальными ямами как для электронов, так и для дырок.

В работе экспериментально измерялось время жизни носителей заряда и обнаружен эффект независимости времени жизни от уровня возбуждения при низких температурах. Наиболее вероятно то, что данный эффект связан с эффектом подавления оже-рекомбинации в квантовых точках при низких температурах. В данной работе предложен такой механизм подавления оже-рекомбинации, который может осуществляться при условии полного заполнения основного состояния при низких температурах. Такой механизм ранее не рассматривался. Механизм подавления оже-рекомбинации является следствием принципа неразличимости тождественных частиц в квантовой механике. Данный принцип накладывает определенные ограничения на симметрию и вид волновых функций пары частиц. В начальном состоянии имеем два электрона и две дырки, которые подчиняются принципу Паули. Поэтому при вычислении матричного элемента кулоновского взаимодействия между двумя частицами получаем две части: прямое кулоновское взаимодействие и обменное. Прямой и обменный вклады имеют противоположные знаки и равны по модулю. В результате они полностью компенсируют друг друга.

Таким образом, можно предположить что при низких температурах, когда все носители находятся на основном уровне размерного квантования, время жизни контролируется только процессом излучательной рекомбинации. Обсуждается вопрос о подавлении оже-рекомбинации в случае, когда возбужденное состояние также может быть заполнено. В силу симметрии волновой функции, в случае, когда на возбужденном уровне находится по два носителя заряда, процесс оже-рекомбинации также будет подавлен.

Этот результат может быть использован для создания устройств на квантовых точках с более высоким квантовым выходом за счет изменения параметров

структуры и увеличения расстояния между дырочными уровнями.

## Приложение А: Вычисление квазипорогового матричного элемента

Произведем в  $M^{(2)}$  интегрирование по частям и ограничимся первым членом разложения по параметру  $\frac{k_2}{k_4}$ , тогда первый интергал в  $M^{(2)}$  равен

$$\begin{aligned} \int_0^{r_1} r_2^2 dr_2 j_0(k_2 r_2) j_j(k_4 r_2) \frac{r_2^j}{r_1^{j+1}} &\approx \frac{j_0(k_2 r_1)}{r_1^{j+2}} \int_0^{r_1} j_j(k_4 r_2) r_2^{j+1} dr_2 = \\ &= j_0(k_2 r_1) j_{j+1}(k_4 r_1) \left( \frac{r_1}{k_4} \right). \end{aligned} \quad (1.76)$$

Аналогичным образом для второго интеграла в  $M^{(2)}$  получаем

$$\begin{aligned} \int_{r_1}^{\infty} r_2^2 dr_2 j_0(k_2 r_2) j_j(k_4 r_2) \frac{r_1^j}{r_2^{j+1}} &\approx r_1^j j_0(k_2 r_1) \int_{r_1}^{\infty} \frac{j_j(k_4 r_2)}{r_2^{j-1}} dr_2 = \\ &= j_0(k_2 r_1) j_{j-1}(k_4 r_1) \left( \frac{r_1}{k_4} \right). \end{aligned} \quad (1.77)$$

Сложив эти два вклада, получаем выражение для  $M^{(2)}$  в виде

$$M^{(2)} = \frac{\sqrt{4\pi} e^2}{k_4^2 \varepsilon} \int_0^R r_1^2 dr_1 (\mathbf{R}_3^*(r_1) \mathbf{R}_1(r_1)) (\mathbf{R}_4^*(r_1) \mathbf{R}_2(r_1)). \quad (1.78)$$

Подставляя в (1.78) явные выражения для радиальных компонент волновых функций, получим, что матричный элемент пропорционален интегралу от четырех функций Бесселя

$$\begin{aligned} M^{(2)} &= (-1)^m \frac{e^2}{\varepsilon} \frac{1}{k_4^2} \frac{i\hbar\gamma}{\mathcal{E}_1 + E_g} A_1 A_2 A_3 A_4 \frac{k_1}{k_3} \sqrt{j(j+1)} \times \\ &\times \int_0^R r_1^2 dr_1 (j_j(k_3 r_1) j_j(k_4 r_1)) \left( \frac{j_1(k_1 r_1)}{r_1} j_0(k_2 r_1) \right). \end{aligned} \quad (1.79)$$

Далее учитывая, что  $k_3, k_4 \gg k_1, k_2$ , можно разложить подинтегральное выражение в ряд по быстроосциллирующим функциям. Разложение ведется по

следующей первообразной:

$$F = \int_0^R r_1^2 dr_1 j_j(k_3 r_1) j_j(k_4 r_1) = \frac{R^2}{k_3^2 - k_4^2} [k_4 j_{j-1}(k_4 R) j_j(k_3 R) - k_3 j_{j-1}(k_3 R) j_j(k_4 R)]. \quad (1.80)$$

В результате для матричного элемента получаем окончательное выражение

$$M^{(2)} \approx (-1)^m \frac{e^2}{\varepsilon} \frac{1}{k_4^2} \frac{i\hbar\gamma}{\mathcal{E}_1 + E_g} A_1 A_2 A_3 A_4 \frac{k_1}{k_3 R} \sqrt{j(j+1)} F j_0(k_2 R) j_1(k_1 R). \quad (1.81)$$

При больших значениях радиуса квантовой точки  $R$  можно заменить функции Бесселя их асимптотическими выражениями для большого аргумента. Тогда получаем следующее выражение для асимптотики матричного элемента при больших радиусах квантовых точек  $R$ :

$$M^{(2)} \approx \frac{e^2}{\varepsilon} \frac{1}{k_4^2} \frac{\hbar\gamma}{\mathcal{E}_1 + E_g} \frac{1}{R^5} \frac{2k_c}{k_3} \sqrt{j(j+1)} \frac{\sin((k_4 - k_3)R)}{k_4 - k_3}. \quad (1.82)$$

## Приложение Б: Вычисление беспорогового матричного элемента

Рассмотрим подробнее беспороговый матричный элемент  $M^{(1)}$ . Из (1.36) следует, что в этот матричный элемент входит также и произведение волновых функций носителей под барьером, оно имеет следующий вид:

$$\Phi^> = B_2 k_0(\kappa_2 r_2) \left( B_4^{(1)} j_j(\kappa_4 r_2) + B_4^{(2)} n_j(\kappa_4 r_2) \right) \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad (1.83)$$

где сферическая функция Неймана  $n_j(x)$  связана с цилиндрической функцией  $N_j(x)$  соотношением  $n_j(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} N_{j+1/2}(x)$ . Так как при беспороговом процессе  $\kappa_4 \gg \kappa_2$ , интегралы можно разложить в ряд. Тогда получим

$$\int_R^\infty r_2^2 dr_2 k_0(\kappa_2 r_2) j_j(\kappa_4 r_2) \frac{r_1^j}{r_2^{j+1}} \approx k_0(\kappa_2 R) r_1^j j_{j-1}(\kappa_4 R) \frac{R^{1-j}}{\kappa_4}. \quad (1.84)$$

Сложив оба вклада в выражении (1.36), для беспорогового матричного элемента получаем

$$M^{(1)} = \int_0^R r_1^2 dr_1 (\mathbf{R}_3^*(r_1) \mathbf{R}_1(r_1)) r_1^j \frac{\sqrt{4\pi}}{2j+1} R_{2s}(R) R^{1-j} \times \left\{ \frac{B_4^{(1)} j_{j-1}(\kappa_4 R) + B_4^{(2)} n_{j-1}(\kappa_4 R)}{\kappa_4} - \frac{A_4 j_{j-1}(k_4 R)}{k_4} \right\}. \quad (1.85)$$

Из граничных условий для волновых функций и их производных (1.15) имеем, что

$$\left\{ \begin{aligned} A_4 j_j(k_4 R) &= B_4^{(1)} j_j(\kappa_4 R) + B_4^{(2)} n_j(\kappa_4 R), \\ k_4 Z A_4 \left[ \frac{j j_j(k_4 R)}{k_4 R} - j_{j+1}(k_4 R) \right] &= \\ &= \kappa_4 \tilde{Z} \left\{ B_4^{(1)} \left[ \frac{j j_j(\kappa_4 R)}{\kappa_4 R} - j_{j+1}(\kappa_4 R) \right] + B_4^{(2)} \left[ \frac{j n_j(\kappa_4 R)}{\kappa_4 R} - n_{j+1}(\kappa_4 R) \right] \right\}. \end{aligned} \right. \quad (1.86)$$

Считая, что  $V_c, V_v \ll E_g$ , разложим выражение (1.86) по малым параметрам  $\frac{V_c}{E_g}$  и  $\frac{V_v}{E_g}$  ( $V_c$  и  $V_v$  — высоты гетеробарьеров для электронов и дырок соответственно). В этом случае также учтем, что величина  $\kappa_4$  мало отличается от  $k_4$ , поэтому будем раскладывать выражение (1.86) и по параметру  $\eta = \kappa_4 - k_4$ . Тогда величины  $\eta$  и  $\tilde{Z}$  связаны с  $V_c$  и  $V_v$  соотношениями

$$2 \frac{\eta}{k_4} = \frac{\mathcal{E}(V_v - V_c) - V_c E_g}{\mathcal{E}(\mathcal{E} + E_g)}, \quad (1.87)$$

$$\tilde{Z} \approx Z(1 - V_v Z).$$

Разложение в (1.86) и в (1.85) ведется только до первого порядка по  $\eta$  и соответственно по  $\frac{V_c}{E_g}$  и  $\frac{V_v}{E_g}$ . Таким образом, можно получить матричный элемент беспорогового процесса. Подставляя соотношения (1.87) для  $\eta$  и  $\tilde{Z}$ , через высоты гетеробарьеров в (1.85) для  $M^{(1)}$  получаем

$$M^{(1)} = \int_0^R r_1^2 dr_1 (\mathbf{R}_3^*(r_1) \mathbf{R}_1(r_1)) r_1^j \frac{\sqrt{4\pi}}{2j+1} R_{2s}(R) R^{1-j} \frac{A_4}{k_4} \times \left\{ \frac{j+1}{k_4 R} j_j(k_4 R) \frac{V_v}{\mathcal{E}_4 + E_g} + j_{j-1}(k_4 R) \frac{V_c}{\mathcal{E}_4} \right\}. \quad (1.88)$$

Как и в случае  $M^{(2)}$ , проводя аналогичную процедуру интегрирования по быстроосциллирующей функции, для матричного элемента беспорогового процесса получаем окончательное выражение

$$\begin{aligned}
 M^{(1)} = & (-1)^{m+1} \frac{e^2}{\varepsilon} \frac{i\hbar\gamma}{\mathcal{E}_1 + E_g} A_1 A_2 A_3 A_4 \frac{k_1}{k_3^2} \frac{\sqrt{j(j+1)}}{2j+1} j_1(k_1 R) j_0(k_2 R) j_{j+1}(k_3 R) \frac{R}{k_4^2} \times \\
 & \times \left[ (j+1) \frac{V_v}{\mathcal{E}_4 + E_g} j_j(k_4 R) + (k_4 R) \frac{V_c}{\mathcal{E}_4} j_{j-1}(k_4 R) \right].
 \end{aligned}
 \tag{1.89}$$

## Глава 2

# Энергетический спектр и время жизни носителей заряда в открытых квантовых точках в электрическом поле

## 2.1. Введение

Открытые квантовые точки — это наноразмерные объекты, покрытые тонким слоем другого материала. Спектр электронов и дырок в открытых квантовых точках существенно зависит от таких параметров, как радиус квантовой точки  $r_0$  и толщина покрывающего слоя  $\Delta$ . Поскольку носители заряда могут протуннелировать сквозь барьер конечной ширины  $\Delta$ , то время их жизни во внутренней области квантовой точки конечно и состояния квазистационарны. Время жизни состояний зависит от  $r_0$  и  $\Delta$ .

В настоящей работе состояния в открытых квантовых точках сферической формы рассматриваются в рамках формализма  $S$ -матрицы рассеяния. Будет получено аналитическое выражение для полуширины уровня энергии электрона при всех значениях углового момента  $l$ . В случае  $l = 0$  данное выражение совпадает с известным выражением для полуширины уровня [81, 82]. Отметим, что аналитическое выражение для полуширины уровня энергии для открытых квантовых точек в случае  $l \neq 0$  ранее не рассматривалось. Трудность при решении задачи о поведении квазистационарных состояний в электрическом поле состоит в том, что теория возмущений для квазистационарных уровней недостаточно развита. Данная теория рассматривалась в работах [33, 83, 84]. В работе Зельдовича [33] получен результат только для первого порядка теории возмущений по потенциалу. Однако этим методом нельзя получить формулы теории возмущений для порядков выше первого. В [33] для получения поправок используется

уравнение для логарифмической производной волновой функции. В этом случае метод допускает использование только одного уравнения. Однако для получения второй поправки необходимо использовать два уравнения для различных значений энергии. В настоящей работе будут получены аналитические выражения для поправки второго порядка теории возмущений. Используется между квазистационарными состояниями и стационарными. При рассмотрении структуры волновых функций и матричных элементов переходов между уровнями квазистационарные состояния аналогичны стационарным. Эта аналогия не касается свойств собственно квазистационарного состояния, имеющего конечное время жизни. Это позволяет получить поправки второго и высших порядков для квазистационарных состояний по аналогии со стационарными. Насколько нам известно, такой подход ранее не рассматривался. Однако матричный элемент в квазистационарной теории возмущений отличается от такового в стационарной теории возмущений. По той же схеме можно получить и формулы для высших порядков теории возмущений.

Квазиклассический подход [83, 85] позволяет получать аналитические выражения для поправок к положению и полуширине квазистационарного уровня в открытой квантовой яме. В этом случае используется модифицированное правило квантования Бора-Зоммерфельда для случая открытых систем [85]. Волновая функция внутри системы сшивается с расходящейся волной снаружи. В настоящей работе будет получено аналитическое выражение для сдвига квазистационарного уровня в открытых квантовых ямах во втором порядке теории возмущений. Для его получения используется варьирование модифицированного правила квантования Бора-Зоммерфельда. Результаты для квантовых ям переносятся на случай квантовых точек. Также будет произведено сравнение случая открытых квантовых ям с точным расчетом для открытых квантовых точек. Будет показано, что качественный анализ поведения сдвигов квазистационарных уровней в квантовых точках находится в согласии со случаем открытых квантовых ям.

## 2.2. Энергетический спектр и волновые функции электронов в открытых квантовых точках

Рассмотрим сферическую квантовую точку, покрытую тонким слоем другого материала (рис. 2.1). Волновые функции электронов и дырок подчиняются уравнению Шредингера. В силу сферической симметрии задачи, оно допускает разделение переменных  $\psi_l(\mathbf{r}) = R_l(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$ . Для радиальной части волновой функции уравнение Шредингера принимает вид

$$\begin{cases} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} R + k^2 * R = 0 \text{ в области 1,3 (см. рис. 2.1),} \\ \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} R - \kappa^2 * R = 0 \text{ в области 2,} \end{cases} \quad (2.1)$$

где  $k = \frac{\sqrt{2m_0E}}{\hbar}$  и  $\kappa = \frac{\sqrt{2m_1(U_0-E)}}{\hbar}$ . Здесь  $U_0$  — высота барьера. Решение уравнений (2.1) известно и представляет собой сферические функции Бесселя. В областях 1 и 3 (рис. 2.1) это функции первого рода ( $R \propto j_l(kr)$ ). В области 2 (рис. 2.1) это функции второго рода ( $R \propto i_l(kr)$ ) и ( $R \propto k_l(kr)$ ), связанные с функциями Ханкеля 1-го и 2-го вида ( $h_l^{(1)}(ix)$  и  $h_l^{(2)}(ix)$ ) мнимого аргумента. Сферические функции связаны с цилиндрическими функциями следующими соотношениями:

$$f_l(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} F_{l+1/2}(x), \quad (2.2)$$

где  $f$  — любая сферическая функция, а  $F$  — соответствующая ей цилиндрическая функция. Поскольку существует отличная от нуля вероятность носителей заряда протуннелировать через барьер, то уровни энергии в такой системе не являются стационарными и имеют конечную ширину. Таким образом, данную задачу следует решать в рамках формализма  $S$ -матрицы рассеяния. В данном формализме рассеяние описывается амплитудой рассеяния ( $S$ -матрицей). Согласно общей теории рассеяния [81], она строится следующим образом. Снаружи (на бесконечности) от рассеивающей системы имеются две сферические волны: налетающая ( $R(r) \sim h_l^{(2)}(kr)$ ) и рассеянная ( $R(r) \sim h_l^{(1)}(kr)$ ). Амплитуда

рассеянной волны ( $S_l$ ) имеет полюс в точке резонанса. При комплексных значениях энергии в случае квазистационарных состояний  $S$  имеет полюс  $E = E_r - i\Gamma$  в нижней полуплоскости.  $E_r$  — положение резонанса, а  $\Gamma$  — его полуширина, соответствующая времени жизни электрона в этом состоянии. При рассмотрении спектра носителей заряда мы частично следуем работе [82]. Однако, в отличие от [82], получено аналитическое выражение для спектра (т. е. для уровней энергии и их полуширины) при произвольном квантовом числе  $l$  (где  $l$  — угловой момент).

Ниже будет рассматриваться случай простых зон с квадратичным законом дисперсии. Отметим, что поскольку в задаче речь идет о небольших импульсах и энергиях, то влияние непараболичности спектра несущественно и им можно пренебречь.

Для решения задачи необходимо написать граничные условия для волновых функций. Условие сшивания волновых функций на границах областей имеет вид

$$\begin{cases} R^< = R^>, \\ \frac{1}{m^<} \frac{dR^<}{dr} = \frac{1}{m^>} \frac{dR^>}{dr}. \end{cases} \quad (2.3)$$

Здесь значки « $<$ » и « $>$ » означают величины, взятые с одной и другой стороны границы соответственно. Используя граничные условия (2.3), получим следующую систему уравнений [82]:

$$\begin{cases} A_1 \left( h_l^{(1)}(kr_0) + h_l^{(2)}(kr_0) \right) = A_2 h_l^{(1)}(ikr_0) + A_3 h_l^{(2)}(ikr_0), \\ A_1 \frac{1}{m_0} \frac{d}{dr} \left( h_l^{(1)}(kr) + h_l^{(2)}(kr) \right) \Big|_{r=r_0} = \frac{1}{m_1} \frac{d}{dr} \left( A_2 h_l^{(1)}(ikr) + A_3 h_l^{(2)}(ikr) \right) \Big|_{r=r_0}, \\ A_2 h_l^{(1)}(ikr_1) + A_3 h_l^{(2)}(ikr_1) = h_l^{(2)}(kr_1) - S_l h_l^{(1)}(kr_1), \\ \frac{1}{m_1} \frac{d}{dr} \left( A_2 h_l^{(1)}(ikr) + A_3 h_l^{(2)}(ikr) \right) \Big|_{r=r_1} = \frac{1}{m_1} \frac{d}{dr} \left( h_l^{(2)}(kr) - S_l h_l^{(1)}(kr) \right) \Big|_{r=r_1}. \end{cases} \quad (2.4)$$

Здесь радиальная часть волновой функции во внешнем пространстве ( $r > r_1$ ) имеет вид сходящейся ( $h_l^{(2)}(kr)$ ) и расходящейся ( $h_l^{(1)}(kr)$ ) волны с амплитудой

$S_l$ . Нормировку можно выбрать произвольно (например на  $\delta$ -функцию). Решение данной системы приводит к следующему результату:

$$S_l = \frac{\hat{A}h_l^{(2)}(kr)}{\hat{A}h_l^{(1)}(kr)}, \quad (2.5)$$

где

$$\begin{aligned} \hat{A} = & \left[ \left( \frac{d}{dr} \Big|_{r=r_1} (h_l^{(1)}(i\kappa r)) \frac{d}{dr} \Big|_{r=r_0} (h_l^{(2)}(i\kappa r)) - \right. \right. \\ & \left. \left. - \frac{d}{dr} \Big|_{r=r_1} (h_l^{(2)}(i\kappa r)) \frac{d}{dr} \Big|_{r=r_0} (h_l^{(1)}(i\kappa r)) \right) \times \right. \\ & \times \left( h_l^{(1)}(kr_0) + h_l^{(2)}(kr_0) \right) m_0^2 - \\ & - \left( h_l^{(1)}(kr_0) + h_l^{(2)}(kr_0) \right) \times \\ & \times \left( (h_l^{(1)}(i\kappa r_1)) \frac{d}{dr} \Big|_{r=r_0} (h_l^{(2)}(i\kappa r)) - \right. \\ & \left. - (h_l^{(2)}(i\kappa r_1)) \frac{d}{dr} \Big|_{r=r_0} (h_l^{(1)}(i\kappa r)) \right) \frac{d}{dr} \Big|_{r=r_1} - \\ & - \frac{d}{dr} \Big|_{r=r_0} \left( h_l^{(1)}(kr) + h_l^{(2)}(kr) \right), \\ & \left( \frac{d}{dr} \Big|_{r=r_1} (h_l^{(2)}(i\kappa r)) (h_l^{(1)}(i\kappa r_0)) - \frac{d}{dr} \Big|_{r=r_1} (h_l^{(1)}(i\kappa r)) (h_l^{(2)}(i\kappa r_0)) \right) m_0 m_1 + \\ & + \frac{d}{dr} \Big|_{r=r_0} \left( h_l^{(1)}(kr) + h_l^{(2)}(kr) \right) \times \\ & \times \left( h_l^{(1)}(i\kappa r_1) h_l^{(2)}(i\kappa r_0) - h_l^{(2)}(i\kappa r_1) h_l^{(1)}(i\kappa r_0) \right) \times \\ & \left. \times m_1^2 \frac{d}{dr} \Big|_{r=r_1} \right]. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Ищем положение полюса элементов матрицы рассеяния  $S_l$ . Условие квазистационарности выполняется в случае, когда полуширина уровня мала ( $\Gamma \ll E_r$ ). В этом случае выполнено условие  $\kappa\Delta \gg 1$ . Это означает, что вероятность того, чтобы частица протуннелировала сквозь барьер, мала. Тогда выполнено и условие  $\kappa r_1 \gg 1$ . В этом случае мы для получения аналитического выражения для энергии будем использовать асимптотические выражения для сферических

функций Ханкеля первого и второго вида. Они имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} h_l^{(1)}(x) &\sim \frac{1}{x}(-i)^{l+1} \exp(ix), \\ h_l^{(2)}(x) &\sim \frac{1}{x}i^{l+1} \exp(-ix). \end{aligned} \quad (2.7)$$

Здесь функции Ханкеля  $h_l^{(1)}(kr)$  и  $h_l^{(2)}(kr)$  — расходящиеся и сходящиеся сферические волны. Найдем полюс  $S_l$  и покажем, что в пределе  $r_1 \rightarrow \infty$  полюс  $S_l$  дает в результате дисперсионное соотношение для истинного стационарного состояния в квантовой точке, что соответствует случаю обычных (закрытых) квантовых точек. В данном предельном случае ( $\Delta \rightarrow \infty$ ) выпишем выражение для полюса матрицы рассеяния  $S_l$  (знаменатель выписываем для удобства). Отбрасываем все члены, которые при таком предельном переходе обращаются в нуль. Имеем

$$\begin{aligned} \frac{\hat{A}h_l^{(1)}(kr)}{h_l^{(2)}(i\kappa r)} &\approx \frac{1}{h_l^{(2)}(i\kappa r)} \left[ \left( -\frac{d}{dr} \Big|_{r=r_0} h_l^{(1)}(i\kappa r) \kappa j_l(\kappa r_0) 2m_0^2 - \right. \right. \\ &- \left( 2j_l(\kappa r_0) \left( -\frac{d}{dr} \Big|_{r=r_0} h_l^{(1)}(i\kappa r) \right) \frac{d}{dr} \Big|_{r=r_1} - \right. \\ &- \left. 2 \frac{dj_l(kr)}{dr} \Big|_{r=r_0} \left( \frac{dh_l^{(2)}(i\kappa r)}{dr} \Big|_{r=r_1} \right) \right) m_0 m_1 + \\ &\left. + 2 \frac{dj_l(kr)}{dr} \Big|_{r=r_0} \left( -h_l^{(1)}(i\kappa r_0) \right) m_1^2 \frac{d}{dr} \Big|_{r=r_1} \right] h_l^{(1)}(kr). \end{aligned} \quad (2.8)$$

Тогда получим

$$\begin{aligned} j_l(\kappa r_0) \left( \frac{d}{dr} \Big|_{r=r_0} (h_l^{(1)}(i\kappa r)) (-\kappa m_0^2 + i\kappa m_0 m_1) \right) + \\ + \frac{dj_l(kr)}{dr} \Big|_{r=r_0} \left( h_l^{(1)}(i\kappa r_0) (\kappa m_0 m_1 - i\kappa m_1^2) \right) = 0. \end{aligned} \quad (2.9)$$

В итоге получаем дисперсионное соотношение для закрытых квантовых точек

$$\frac{1}{m_1} \frac{d}{dr} \Big|_{r=r_0} (k_l(\kappa r)) = \frac{1}{m_0} k_l(\kappa r_0) \frac{d}{dr} \Big|_{r=r_0} (j_l(kr)). \quad (2.10)$$

Теперь рассмотрим случай конечной толщины барьера и найдем полуширину резонансного уровня. Поскольку выполняется условие квазистационарности ( $\Gamma \ll E$ ), то можно разложить в ряд выражение для полюса ( $\hat{A}h_l^{(1)}(kr_1) = 0$ ) вокруг энергии стационарного состояния.

### 2.2.1. Аналитическое выражение для энергии и ширины квазистационарного уровня электрона для произвольного углового момента $l$

При дальнейшем рассмотрении считаем, что  $m_0 = m_1 = m$ . Запишем теперь выражение для полюса:

$$\begin{aligned}
& \hat{A}h_l(1)(kr_1) \left[ \left( -\kappa h_l^{(1)}(i\kappa r_1) \frac{d}{dr} \Big|_{r=r_0} h_l^{(2)}(i\kappa r) - \right. \right. \\
& \left. \left. - \kappa h_l^{(2)}(i\kappa r_1) \frac{d}{dr} \Big|_{r=r_0} h_l^{(1)}(i\kappa r) \right) j_l(kr_0) h_l^{(1)}(kr_1) - \right. \\
& \left. - j_l(kr_0) \left( h_l^{(1)}(i\kappa r_1) \frac{d}{dr} \Big|_{r=r_0} h_l^{(2)}(i\kappa r) - \right. \right. \\
& \left. \left. - h_l^{(2)}(i\kappa r_1) \frac{d}{dr} \Big|_{r=r_0} h_l^{(1)}(i\kappa r) \right) \frac{dh_l^{(1)}(kr)}{dr} \Big|_{r=r_1} + \right. \\
& \left. + \frac{dj_l(kr)}{dr} \Big|_{r=r_0} \left( \kappa h_l^{(1)}(i\kappa r_0) h_l^{(2)}(i\kappa r_1) + \right. \right. \\
& \left. \left. + \kappa h_l^{(2)}(i\kappa r_0) h_l^{(1)}(i\kappa r_1) \right) + \right. \\
& \left. + \frac{dj_l(kr)}{dr} \Big|_{r=r_0} \left( h_l^{(1)}(i\kappa r_1) h_l^{(2)}(i\kappa r_0) - h_l^{(2)}(i\kappa r_1) h_l^{(1)}(i\kappa r_0) \right) \frac{dh_l^{(1)}(kr)}{dr} \Big|_{r=r_1} \right]. \tag{2.11}
\end{aligned}$$

В данное выражение входит конструкция следующего вида:

$$F = j_l(kr_0) \frac{d}{dr} \Big|_{r=r_0} (k_l(\kappa r)) - k_l(\kappa r_0) \frac{d}{dr} \Big|_{r=r_0} (j_l(kr)). \tag{2.12}$$

Данная конструкция связана с дисперсионным соотношением для закрытых квантовых точек таким образом, что когда точно выполнено условие  $k = k_{nl}$ , то  $F = 0$ . Здесь  $k_{nl}$  определяется как соответствующий корень дисперсионного уравнения для закрытых квантовых точек. Для квазистационарных состояний это позволяет разложить это выражение в ряд по  $(k - k_{nl})$ . В результате получаем следующее разложение:

$$F = G(k - k_{nl}), \tag{2.13}$$

где

$$G = \frac{\kappa_0^2 r_0}{\kappa} k_{l+1}(\kappa r_0) j_{l-1}(kr_0). \tag{2.14}$$

Здесь  $\kappa_0 = \frac{2mU_0}{\hbar^2}$  и  $j_l(x), k_l(x)$  — сферические функции Бесселя. Теперь рассмотрим полное выражение для условия полюса. С учетом (2.11) и (2.14) получаем для комплексного волнового вектора (полюс)

$$k = k_{nl} + \frac{2}{G\pi} \exp(-2\kappa r_1) \frac{\kappa + ik}{\kappa - ik} \left( i_l(\kappa r_0) \frac{d}{dr} \Big|_{r=r_0} j_l(kr) - j_l(kr_0) \frac{d}{dr} \Big|_{r=r_0} i_l(\kappa r) \right). \quad (2.15)$$

Переходим от волновых векторов к энергиям  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ . Получаем

$$E_r \approx E_{nl},$$

$$\Gamma_{nl} = G^{-1} \exp(-2\kappa r_1) \frac{16\kappa}{\pi\kappa_0^2} \left( i_l(\kappa r_0) \frac{d}{dr} \Big|_{r=r_0} j_l(kr) - j_l(kr_0) \frac{d}{dr} \Big|_{r=r_0} i_l(\kappa r) \right) E_{nl}. \quad (2.16)$$

Здесь  $E_{nl}$  — положение уровня энергии в закрытых квантовых точках. В случае открытых квантовых точек вещественная часть энергии почти не изменяется, поскольку  $\Gamma \ll E_r$ , что соответствует условию квазистационарности уровня.

Теперь проанализируем полученный результат. Видно, что полуширина уровня резко зависит от толщины барьера, поскольку время жизни в квазистационарном состоянии связано с вероятностью туннелирования через барьер. Далее полуширина уровня пропорциональна энергии уровня размерного квантования. Если рассматривать полуширину квазиклассически, то становится понятным, что, чем выше скорость движения частицы в открытой квантовой точке (которая связана с  $E_{nl}$ ), — тем более это случай  $l = 0$  [81, 82]. В этом случае, используя явные выражения для сферических функций Бесселя при  $l = 0$ , вместо (2.16) получим

$$G = \left( \frac{\kappa_0^2 r_0}{\kappa} \frac{\exp(-\kappa r_0)}{(\kappa r_0)^2} (1 + \kappa r_0) \frac{\cos(\kappa r_0)}{\kappa r_0} - 2\kappa r_0 \sin(\kappa r_0) \frac{\exp(-\kappa r_0)}{\kappa r_0} \right) \frac{\pi}{2}, \quad (2.17)$$

$$\Gamma_{nl} = G^{-1} \exp(-2\kappa r_1) \frac{16\kappa}{\pi\kappa_0^2} \times$$

$$\times \left( \frac{\exp(\kappa r_0) \kappa r_0 \cos(\kappa r_0) - \sin(\kappa r_0)}{\kappa r_0 (\kappa r_0)^2} k - \right. \quad (2.18)$$

$$\left. - \kappa \frac{\exp(\kappa r_0) (\kappa r_0 - 1) \sin(\kappa r_0)}{(\kappa r_0)^2 \kappa r_0} \right) E_{nl},$$

$$E_r \approx E_{nl}. \quad (2.19)$$

Для квазистационарных состояний верно (2.19). Это значит, что положение уровня определяется дисперсионным соотношением (2.10). Переписывая его, используем явный вид функций Бесселя, тогда для  $l = 0$  получаем

$$\operatorname{tg}(\kappa r_0) = -\frac{k}{\kappa}. \quad (2.20)$$

Подставляя (2.17) в (2.18) и упрощая результат, приходим к следующему выражению:

$$\Gamma_n = 16E_n \exp(-2\kappa\Delta) \frac{k\kappa^3}{\kappa_0^4(1 + \kappa r_0)}. \quad (2.21)$$

Полученное выражение для ширины квазистационарного уровня полностью совпадает с известным выражением [81, 82].

### 2.3. Эффект Штарка в открытых квантовых точках

Теперь перейдем к рассмотрению эффекта Штарка в открытых квантовых точках. В обычных (закрытых) квантовых точках этот эффект изучен достаточно хорошо [31, 32]. Задача о модификации спектра носителей заряда в открытых квантовых точках в электрическом поле в настоящее время не является решенной. Решение такой задачи представляет некоторые трудности в связи с недостаточной развитостью теории возмущений для квазистационарных состояний. В связи с экспоненциальным ростом Гамовской волновой функции (данная функция регулярна в нуле и соответствует условию излучения на бесконечности) для таких состояний возникает проблема расходящихся интегралов. Такая

функция регулярна в нуле, а на бесконечности претерпевает экспоненциальный рост, в силу комплексности волнового вектора. В первом порядке теории возмущений эта расходимость устраняется регуляризацией по  $\exp(-\alpha r^2)$  и введением нормировки [81]

$$E^{(1)} = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{\int_0^{\infty} \xi_{k_0}^2 V \exp(-\alpha r^2) dr}{\int_0^{\infty} \xi_{k_0}^2 \exp(-\alpha r^2) dr}. \quad (2.22)$$

В [33] рассматривается обобщение на трехмерный случай выражения (2.22) для поправки первого порядка. Следующие поправки теории возмущений для энергии квазистационарных состояний не рассматривались. Ясно, что структура формул ряда теории возмущений для поправок к энергии квазистационарных состояний должна оставаться одинаковой. В таких формулах также должна присутствовать регуляризация интегралов на  $\exp(-\alpha r^2)$  и нормировка. В приложении к работе [84] рассматривается глубокая аналогия между квазистационарными и стационарными состояниями. Поэтому вполне естественно сопоставить формуле обычной теории возмущений формулу теории возмущений квазистационарных уровней (с сохранением общей структуры). Это означает, что по сравнению с обычной теорией возмущений появляется отличие во введении эффективной нормы для состояний, а также модифицируется интеграл от радиальных частей волновой функции. Теперь, пользуясь этой аналогией, перепишем формулу для сдвига уровня энергии в открытых квантовых точках во втором порядке теории возмущений:

$$E^{(2)} = \sum_m \frac{V_{nm} V_{mn}}{E_n - E_m}. \quad (2.23)$$

Здесь, в отличие от обычной формулы теории возмущений,  $E_n$  и  $E_m$  — комплексные уровни энергии, пробегающие все квазистационарные состояния. Матричный элемент в формуле (2.23) запишется с учетом сохранения структуры ряда теории возмущений, как было отмечено выше. При стремлении толщины барьера к бесконечности матричный элемент  $V_{nm}$  переходит в предельное выражение

для матричного элемента в эффекте Штарка в закрытых квантовых точках. В результате получаем

$$V_{nm} = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{\int_0^{\infty} dr r^2 d\Omega \exp(-\alpha r^2) R_1(r) R_2(r) Y_{l_1 m_1}(\theta, \phi) Y_{l_2 m_2}^*(\theta, \phi) V(\mathbf{r})}{\left( \int_0^{\infty} dr r^2 \exp(-\alpha r^2) R_1^2(r) \right)^{1/2} \left( \int_0^{\infty} dr r^2 \exp(-\alpha r^2) R_2^2(r) \right)^{1/2}}. \quad (2.24)$$

Строгий вывод поправок теории возмущений для квазистационарных состояний дается в Приложении А.

В результате численных расчетов по формуле (2.23) получены сдвиги по энергии квазистационарного состояния и изменение его полуширины (рис. 2.3, 2.4). При расчете по формуле (2.23) теории возмущений важно обратить внимание на то, что в очень сильных электрических полях нужно модифицировать данную формулу, включив в рассмотрение непрерывный спектр, лежащий выше высоты барьера  $U_0$ . Это связано с тем, что само электрическое поле создает искажение потенциала, которое изменяет полуширину уровня. В слабых электрических полях ( $E \sim 10^5$  В/см) это несущественно, поскольку основной масштаб задается исходным потенциалом гетероструктуры  $\Delta = r_1 - r_0$  ( $l_{field} \gg \Delta$ ). Здесь  $l_{field}$  — характерный масштаб, определяющийся энергией уровня и электрическим полем и связанный с искривлением зонной диаграммы. На рисунках 3 и 4 отмечены самый нижний и самый верхний квазистационарный уровни. Полуширина квазистационарного уровня на рисунках 3 и 4 отмечена конечной полосой. Для случая, когда  $\Gamma \ll E_r$ , вещественная часть сдвига по энергии почти в точности совпадает со сдвигом для закрытых квантовых точек. Это соответствует условию квазистационарности уровня. А в случае  $\Delta \rightarrow \infty$  сдвиг уровня полностью совпадает со своим стационарным значением. Для нижних энергетических уровней полуширина уменьшается при увеличении напряженности внешнего электрического поля (рис. 2.3). Это легко понимать следующим образом. Поскольку теория возмущений во втором порядке дает отталкивание энергетических уровней, пропорциональное  $\frac{1}{\Delta E}$ , где  $\Delta E$  — разность

энергии между уровнями, то в силу этого нижний уровень "сплющивается" за счет того, что квазистационарные состояния имеют конечную полуширину, и это означает, что величина расталкивания зависит от энергии. Это верно для не слишком высоких энергетических уровней. Для более высоких (близких к  $U_0$ ) энергетических уровней начинает играть роль эффект увеличения туннельной прозрачности, и следовательно, полуширина уровня растет с ростом величины электрического поля (рис. 2.4).

Таким образом, для открытой квантовой точки на энергетической шкале существует две области по энергии уровня: область энергий  $E \ll U_0$ , где полуширина уровня уменьшается с ростом напряженности электрического поля, и область энергий  $E \lesssim U_0$ , где полуширина уровня растет с ростом поля. Таким образом, существует критическая энергия ( $E_{cr}$ ), при которой поправка к полуширине уровня в электрическом поле обращается в нуль (рис. 2.5).

Квазиклассический анализ поведения сдвигов уровней энергии и полуширин проведем на примере открытой квантовой ямы. При рассмотрении задачи во внешнем электрическом поле имеется аналогия между случаями открытой квантовой точки и открытой квантовой ямы. Дело в том, что само возмущение (электрическое поле) одномерно. Поэтому для квазиклассического анализа вместо квантовой точки можно взять квантовую яму, поскольку это не будет существенно влиять на качественное поведение уровней энергии.

### **2.3.1. Квазиклассический подход к рассмотрению случая открытых квантовых ям во внешнем электрическом поле**

Теперь перейдем к рассмотрению квазиклассического подхода к исследованию спектра открытых квантовых систем. Данный подход позволит проанализировать поведение полуширины уровня как функции его положения и толщины барьера в открытых квантовых ямах. Следует отметить, что квазиклассический подход разработан только для одномерного случая. Для трехмерного случая квазиклассика имеется только в ограниченном числе частных случаев

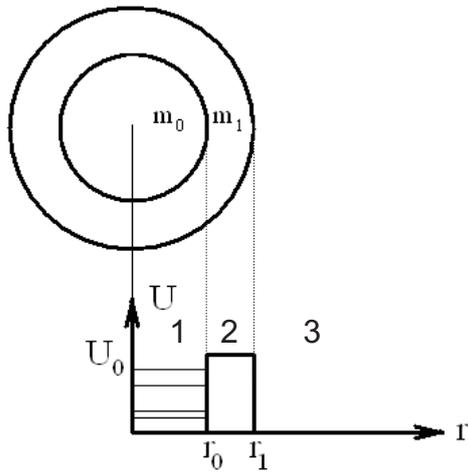


Рис. 2.1. Схематическое изображение открытой квантовой точки и вид потенциальной энергии электрона как функции радиуса

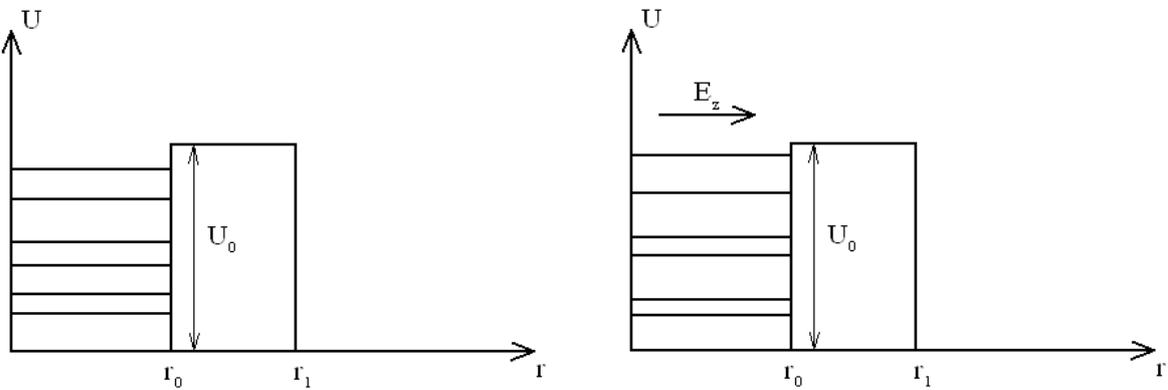


Рис. 2.2. Поведение квазистационарных уровней при эффекте Штарка. На левом рисунке показан энергетический спектр открытой квантовой точки без приложения внешнего электрического поля. На правом рисунке показан энергетический спектр во внешнем электрическом поле. Для верхних уровней полуширина увеличивается, в то время как для нижних — уменьшается.

[86]. Однако подхода, изложенного в [86], не хватает для рассмотрения спектра в открытых квантовых точках. Дело в том, что в [86] рассматривается только асимптотика квазиклассической волновой функции и не рассматриваются правила квантования энергии.

В настоящем разделе сначала рассмотрим случай открытых квантовых ям. На его примере получим результат для поправки второго порядка теории возмущений к энергии уровня. Потом мы обобщим полученные результаты на

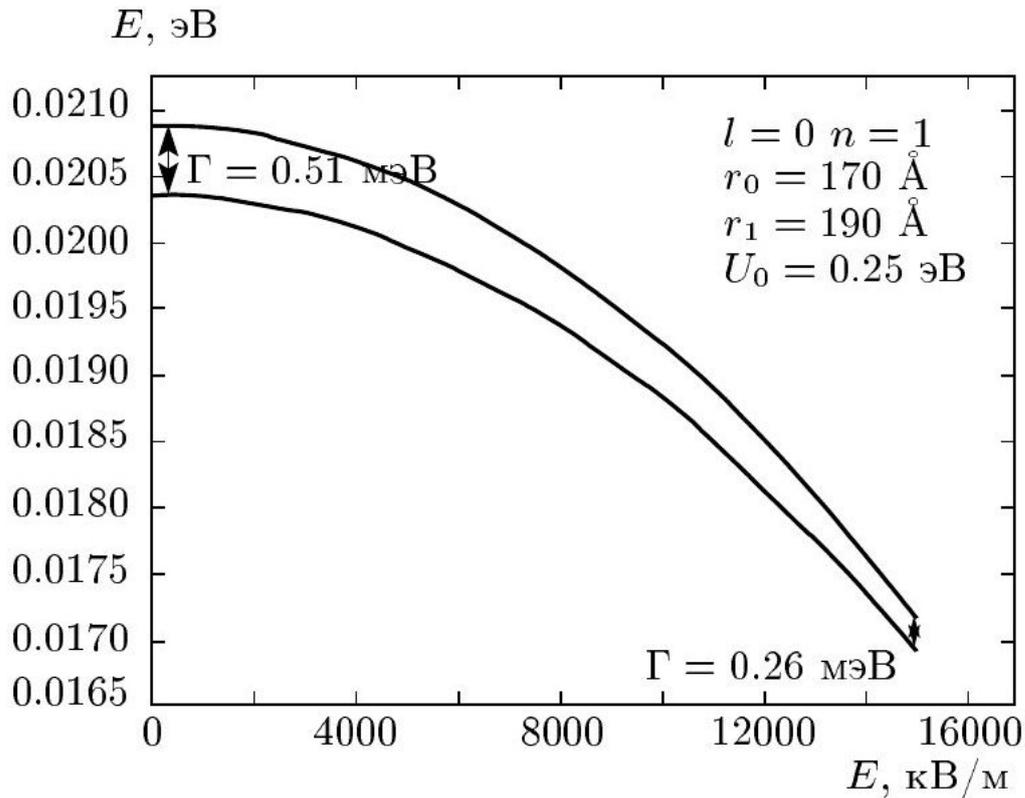


Рис. 2.3. Самый нижний уровень при эффекте Штарка и его полуширина (отмечена конечной полосой) под влиянием электрического поля

случай открытых квантовых точек в электрическом поле.

Выше было показано, что существуют открытые квантовые ямы в электрическом поле. Покажем, что поведение полуширины квазистационарных состояний не отличается от их поведения в случае открытых квантовых точек. Теория возмущений в первом порядке квазиклассического приближения для таких систем была развита в [83], где рассматривается потенциал, имеющий две точки поворота. В этом случае достаточно рассмотреть только первый порядок теории возмущений. В случае открытых квантовых ям имеется четыре точки поворота. В случае приложения к такому потенциалу нечетного возмущения (электрическое поле) вклады от каждой из областей в первом порядке сокращаются и нужно использовать второй порядок теории возмущений.

Квазиклассический подход состоит в том, чтобы рассматривать правило квантования Бора-Зоммерфельда, модифицированное применительно к случаю открытых систем (т. е. для квазистационарных состояний). Рассматривается по-

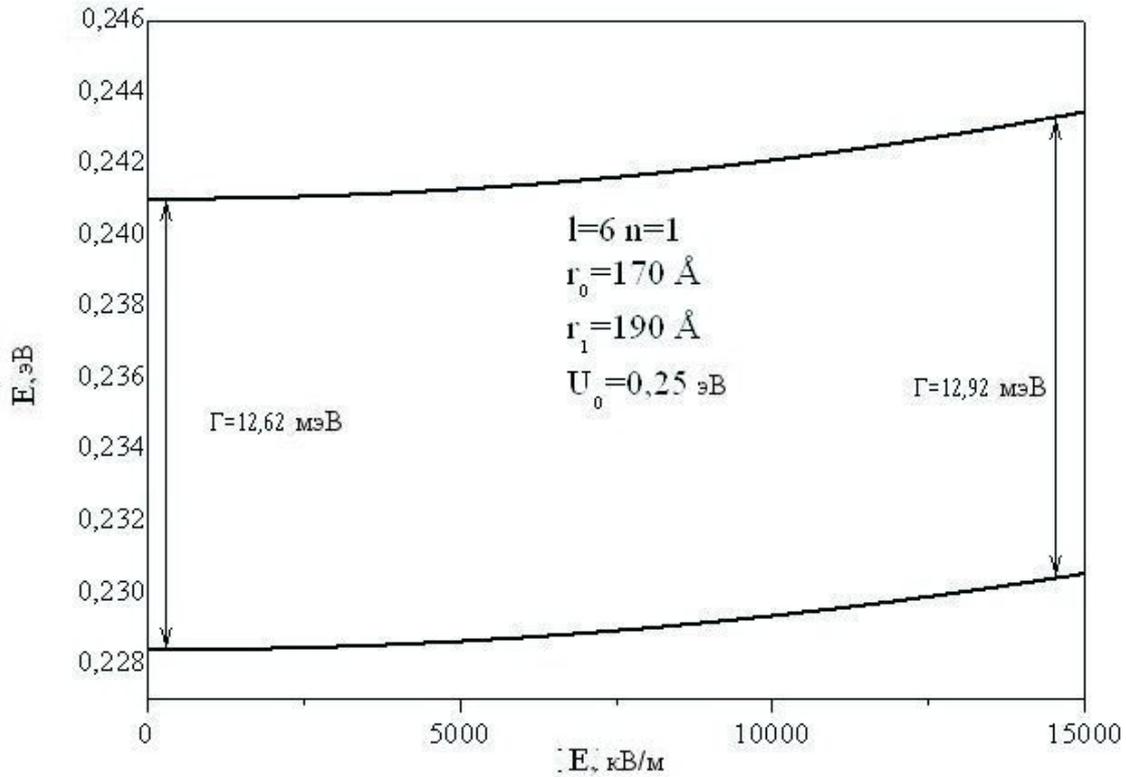


Рис. 2.4. Самый верхний уровень при эффекте Штарка и его полуширина (отмечена конечной полосой) под влиянием электрического поля

тенциал с вершиной барьера в точке  $x = x_m$  (рис. 2.6). Вблизи нее используется параболическое приближение. Уравнение Шредингера в таком случае имеет точное решение

$$\psi(x) = \text{const} D_v (2^{1/2} e^{-i\pi/4} \rho), v = -(1/2 + ia), \quad (2.25)$$

где  $\rho \propto (x - x_m)$ . Данная волновая функция удовлетворяет условию излучения на бесконечности, и сшивание ее с квазиклассической волновой функцией дает правила квантования [85]

$$\int_{x_0}^{x_1} k(x) dx = (N + 1/2)\pi, \quad (2.26)$$

$$N = n - \frac{1}{2\pi} \phi(a), \quad a = \frac{1}{\pi} \int_{x_1}^{x_2} \kappa(x) dx.$$

Будем варьировать правило квантования потенциала (2.26) с точностью до второго порядка. В этом случае  $k(x) = \frac{\sqrt{2m(E+\delta E-U(x)-\delta U(x))}}{\hbar^2}$  и  $\kappa(x) =$

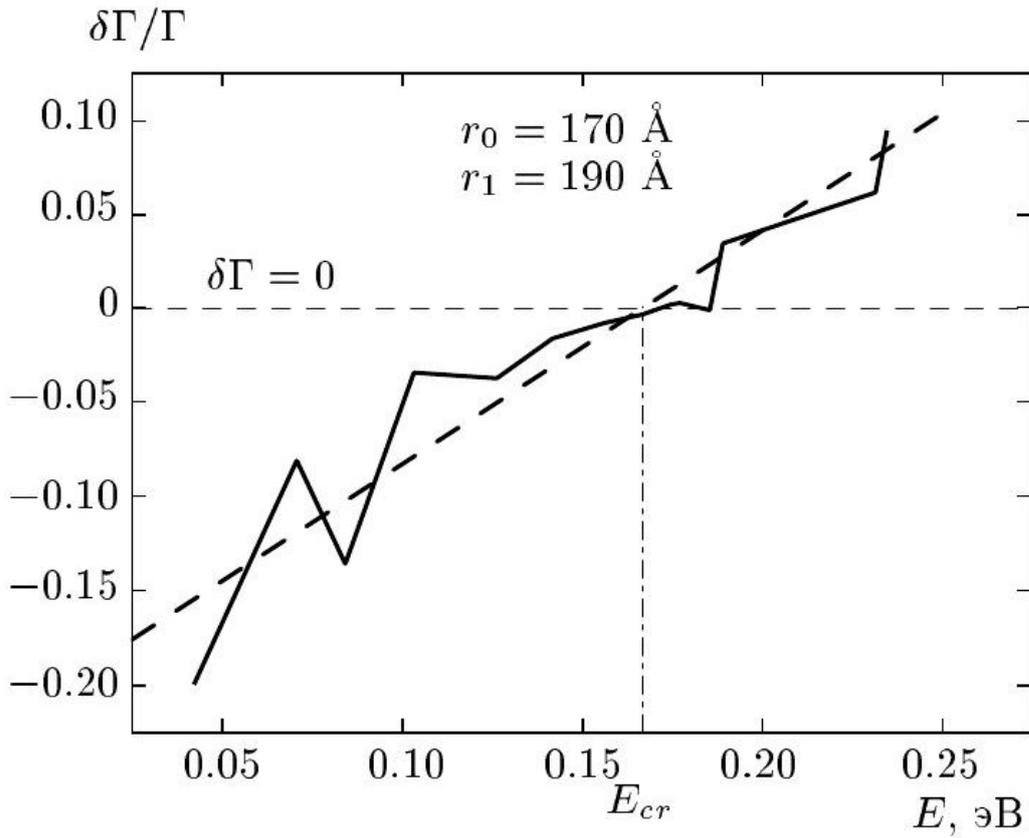


Рис. 2.5. Зависимость величины  $\delta\Gamma/\Gamma$  от положения уровня. Показана критическая энергия и уровень  $\delta\Gamma = 0$

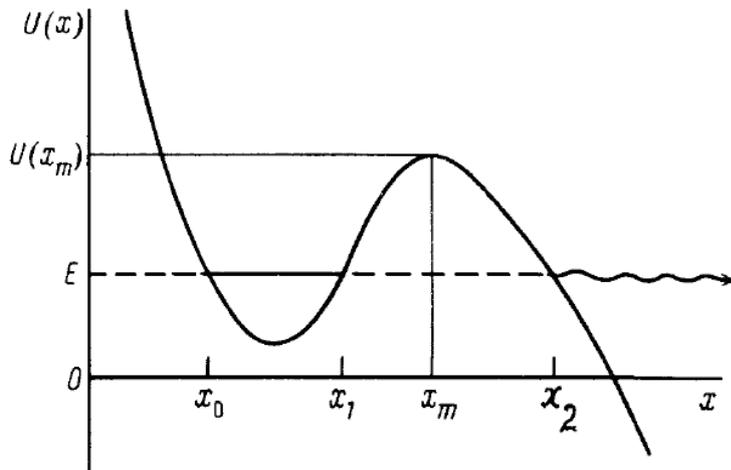


Рис. 2.6. Ход потенциала для задачи о теории возмущений в квазиклассическом приближении (взято из [11])

$\frac{\sqrt{2m(U(x)+\delta U(x)-E-\delta E)}}{\hbar^2}$ . Тогда имеем

$$\begin{aligned} \Delta k(x) &= k_0(x) \left( \frac{\beta - \gamma}{2} - \frac{(\beta - \gamma)^2}{8} \right), \\ \Delta \kappa(x) &= \kappa_0(x) \left( \frac{\beta - \gamma}{2} - \frac{(\beta - \gamma)^2}{8} \right), \end{aligned} \quad (2.27)$$

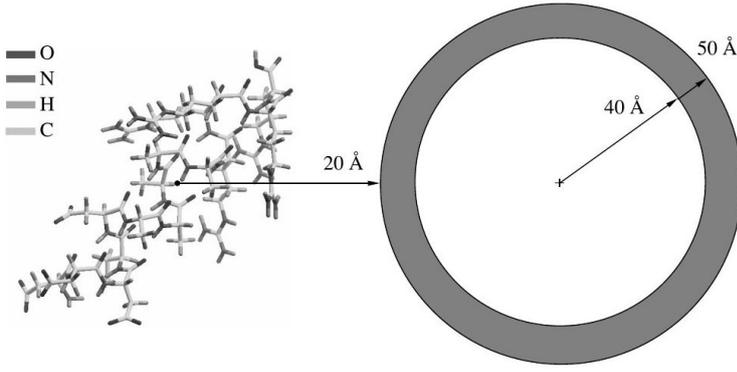


Рис. 2.7. Модельная белковая молекула. На расстоянии 20 ангстрем от ее центра расположена открытая квантовая точка

где  $\beta = \frac{\delta E}{E-U}$  и  $\gamma = \frac{\delta U}{E-U}$ . Далее рассмотрим второй порядок для класса нечетных возмущений (к которому принадлежит возмущение  $V = eEx$ ) в случае открытых квантовых ям. Для таких возмущений первый порядок равен нулю. Это существенно упрощает конечное выражение. Раскладываем модифицированное правило квантования Бора-Зоммерфельда (2.26) по параметрам  $\beta$  и  $\gamma$  до второго порядка. Тогда получим

$$\int_{x_0}^{x_1} k_0(x) \left\{ \frac{\beta}{2} - \frac{(\beta - \gamma)^2}{8} \right\} =$$

$$= \pi \left( \chi(a) \frac{1}{\pi} \int_{x_1}^{x_2} \kappa_0(x) \left\{ \frac{\beta}{2} - \frac{(\beta - \gamma)^2}{8} \right\} + \frac{\eta(a)}{2\pi^2} \left( \int_{x_1}^{x_2} \kappa_0 \frac{\beta}{2} dx \right)^2 \right), \quad (2.28)$$

где  $\eta(a) = \chi'(a)$ . Здесь  $\chi(a) = \frac{1}{2i} \ln \left( \frac{\Gamma(1/2+ia)}{\Gamma(1/2-ia)} (1 + \exp(-2\pi a)) \right) + a(1 - \ln(a))$ . Это выражение взято из [83]. Производная в этих выражениях берется по  $a$ . Члены в (2.28)  $\sim \beta^2$  и  $\sim \beta\gamma$  не дают вклада в конечное выражение, поскольку являются возмущениями порядка выше второго. Таким образом, выражая из (2.28)  $\delta E$ , мы получили поправку второго порядка в квазиклассическом приближении. В результате имеем

$$\delta E = \frac{- \int_{x_0}^{x_1} (\delta U)^2 \frac{1}{4k_0} \frac{2m}{\hbar^2 k_0^2} + \chi(a) \int_{x_1}^{x_2} (\delta U)^2 \frac{1}{4\kappa_0} \frac{2m}{\hbar^2 \kappa_0^2}}{\int_{x_0}^{x_1} \frac{dx}{k_0(x)} + \chi(a) \int_{x_1}^{x_2} \frac{dx}{\kappa_0(x)}}. \quad (2.29)$$

Согласно численным расчетам (как показано выше), в открытой квантовой точке имеется критическое значение энергии уровня, при котором поправка к полуширине меняет свой знак, проходя через нуль. В квазиклассическом подходе можно найти аналитическое выражение для поправки к полуширине и определить условие смены знака. Выясним условие смены знака поправки к полуширине уровня, рассмотрев мнимую часть  $\delta E$ . Рассмотрим два предельных случая, которые позволят проанализировать поведение поправки к полуширине.

В первом случае энергия невелика. Это значит, что  $a \gg 1$  ( $\kappa\Delta \gg 1$ ). Имеем

$$\delta\Gamma = \frac{\exp(-2\pi a)/2 \int_{x_1}^{x_2} dx (\delta U)^2 \frac{1}{4\kappa_0} \frac{2m}{\hbar^2 \kappa_0^2}}{\int_{x_0}^{x_1} \frac{dx}{k_0}} + \frac{\exp(-2\pi a)/2 \int_{x_1}^{x_2} \frac{dx}{\kappa_0} (\delta U)^2 \frac{1}{4\kappa_0} \frac{2m}{\hbar^2 \kappa_0^2} dx}{\left(\int_{x_0}^{x_1} \frac{dx}{k_0}\right)^2}. \quad (2.30)$$

Видно, что поправка к полуширине уровня пропорциональна  $\exp(-2\pi a)$  (толстый барьер) и имеет один знак во всех случаях, когда  $a \gg 1$ . Это соответствует численному результату, полученному по формуле (2.23), и качественному анализу.

Для понимания условия смены знака поправки к полуширине анализируем случай энергий, близких к высоте барьера  $U_0$ . Большие энергии соответствуют случаю  $a \ll 1$ . Тогда разложим  $\chi(a)$  в ряд по  $a$ . Зависимость поправки к полуширине приобретает следующий характер:

$$\delta\Gamma \sim (\pi a - \ln 2). \quad (2.31)$$

В результате  $\delta\Gamma$  обращается в нуль при выполнении равенства

$$a(E_{cr}) = \frac{\ln 2}{\pi}, \text{ а критическая энергия равна} \quad (2.32)$$

$$E_{cr} = U_0 - \frac{\hbar^2 a^2}{2m\Delta^2}.$$

Таким образом, в рамках квазиклассического подхода показано, что в эффекте Штарка для открытых квантовых ям имеются две области, разделенные критической энергией. В области малых энергий ( $E < E_{cr}$ ) полуширина уровня уменьшается с ростом электрического поля, а в области высоких энергий ( $E > E_{cr}$ )

полуширина увеличивается. Наличие критической энергии вполне естественно, поскольку  $a$  характеризует "меру" туннельной прозрачности барьера. Эти результаты для открытых квантовых ям переносятся на случай открытых квантовых точек и соответствуют численному расчету для открытых квантовых точек. Для открытых квантовых точек константа перехода отлична от случая открытых квантовых ям в силу различия в геометрии (отметим, что в данном случае константа различна для разных значений орбитального момента  $l$ ).

### 2.3.2. Расчет сдвигов уровней энергии электрона в открытых квантовых точках в поле белковой молекулы

Получены результаты для сдвига уровней в открытой квантовой точке, взаимодействующей с белковой молекулой. В основе белка лежит полимер, полипептидная цепь, состоящая из аминокислотных остатков. Это было установлено Э. Фишером в начале XX века. Пространственная структура белка может быть очень сложной [87]. Имеется вторичная ( $\alpha$  — спираль и  $\beta$  — тяж), третичная (белковая глобула) и четвертичная (суперглобула). Соответственно, распределение зарядов в пространственной конфигурации белка определяется внешним электрическим полем, создаваемым молекулой.

В качестве открытой квантовой точки выбрана точка со следующими параметрами:

$$r_0 = 40 \text{ \AA}, r_1 = 50 \text{ \AA}, U_0 = 0.25 \text{ эВ}. \quad (2.33)$$

Поскольку в области открытой квантовой точки электрическое поле от белковой молекулы уже не будет однородным, то поправка к энергии будет ненулевой уже в первом порядке теории возмущений. Потенциал, создаваемый молекулой, был рассчитан в программе ICM [88]. Программа имеет в своем составе методы определения энергий и конфигураций сложных белковых молекул с минимальной энергией. При этом данная программа позволяет определять электростатическую энергию различными методами. Нами был использован метод, в основе

которого лежит точное решение уравнения Пуассона. Также возможно применение приближенного метода, основанного на применении формулы Борна [89]. В этом методе молекула разбивается на набор сферических областей и используется метод изображений. Далее был определен потенциал от всей белковой молекулы в различных точках, соответствующих нашей открытой квантовой точке. Данный потенциал использовался для расчетов по теории возмущений. Поскольку вся система находится в воде с диэлектрической проницаемостью  $\epsilon = 78,5$ , то мы использовали метод изображений для определения истинного потенциала, действующего в области квантовой точки. В результате сдвиг основного состояния открытой квантовой точки составил  $\Delta E = -68$  мэВ. Такие сдвиги энергии могут быть экспериментально обнаружены. Данный результат позволяет сделать вывод о возможности идентификации и определения типа биологических молекул в водном растворе с помощью открытых квантовых точек.

## 2.4. Заключение

В рамках формализма  $S$ -матрицы рассеяния выполнен аналитический расчет квазистационарных состояний носителей заряда в открытой квантовой точке. Показано, что результаты, полученные для энергии и полуширины уровня открытой квантовой точки, совпадают с частным случаем углового момента  $l = 0$ . Получены результаты для поправки второго порядка по теории возмущений к энергии и полуширине квазистационарного уровня открытой квантовой точки. Выполнен численный расчет сдвигов уровней для открытой квантовой точки под влиянием электрического поля. Исследовано поведение поправок к полуширине в зависимости от энергии уровня и толщины барьерного слоя. Показано, что существует критическое положение уровня энергии ( $E_{cr}$ ), при котором поправка к полуширине меняет знак. В квазиклассическом приближении найдены аналитические выражения для поправки второго порядка к энергии.

Показано, что в этом случае поправка к полуширине также меняет свой знак при переходе через критическую энергию  $E_{cr}$ . Рассчитан сдвиг уровня энергии открытой квантовой точки в зависимости от поля модельной белковой молекулы, находящейся вблизи нее.

## Приложение А: Вывод поправок к энергии в теории возмущений для случая квазистационарных состояний

Получим результат для поправки второго порядка теории возмущений к энергии уровня. Будем рассматривать потенциал  $V(\mathbf{r})$  как сферически симметричный. Для квазистационарных состояний волновая функция расходится экспоненциально за счет комплексной энергии, поскольку  $\psi \propto \exp(ikr)$ , а  $k = k_r - ik_i$ . В этом случае понятие ортогональности волновых функций уже не применимо. Однако можно воспользоваться приемом регуляризации (таким же образом, как и в первом порядке) и показать, что для квазистационарных состояний можно ввести новый аналог ортогональности. Уравнение Шредингера для квазистационарных состояний имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\phi'' + U(r)\phi = (E - i\Gamma)\phi. \quad (2.34)$$

Выпишем уравнения для двух квазистационарных уровней

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m}\phi_1'' + U(r)\phi_1 = (E_1 - i\Gamma_1)\phi_1 \cdot \phi_2 \exp(-\alpha r^2), \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\phi_2'' + U(r)\phi_2 = (E_2 - i\Gamma_2)\phi_2 \cdot \phi_1 \exp(-\alpha r^2). \end{cases} \quad (2.35)$$

Здесь  $\phi(r) = rR(r)$ .  $R(r)$  — радиальная часть волновой функции.  $U(r)$  — наш сферический потенциал с добавкой центробежной части. После умножения первого уравнения на  $\phi_2 \exp(-\alpha r^2)$ , второго — на  $\phi_1 \exp(-\alpha r^2)$ , интегрирования и

вычитания одного уравнения из другого получаем

$$\begin{aligned} & ((E_2 - i\Gamma_2) - (E_1 - i\Gamma_1)) \int_0^\infty \phi_1 \phi_2 \exp(-\alpha r^2) = \\ & = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \int_0^\infty \phi_1'' \phi_2 \exp(-\alpha r^2) - \int_0^\infty \phi_2'' \phi_1 \exp(-\alpha r^2) \right). \end{aligned} \quad (2.36)$$

Интегрируя два раза по частям, получаем

$$\begin{aligned} & ((E_2 - i\Gamma_2) - (E_1 - i\Gamma_1)) \int_0^\infty \phi_1 \phi_2 \exp(-\alpha r^2) = \\ & = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \phi_1' \phi_2 \exp(-\alpha r^2) \Big|_0^\infty - \phi_2' \phi_1 \exp(-\alpha r^2) \Big|_0^\infty - \right. \\ & \left. \int_0^\infty \phi_1' (\phi_2 \exp(-\alpha r^2))' dr + \int_0^\infty \phi_2' (\phi_1 \exp(-\alpha r^2))' dr \right). \end{aligned} \quad (2.37)$$

Первые два слагаемых обращаются в нуль на бесконечности за счет  $\exp(-\alpha r^2)$ .

Проинтегрировав еще раз, получим

$$\begin{aligned} & ((E_2 - i\Gamma_2) - (E_1 - i\Gamma_1)) \int_0^\infty \phi_1 \phi_2 \exp(-\alpha r^2) = \\ & = -\frac{\hbar^2}{2m} (\phi_1 \phi_2 \exp(-\alpha r^2) (4\alpha^2 r^2 - 2\alpha)). \end{aligned} \quad (2.38)$$

Теперь устремим  $\alpha \rightarrow 0$ . В этом случае последний интеграл стремится к нулю.

Для дальнейшего будет удобно отнормировать волновые функции следующим образом:

$$\phi_{norm}(r) = \frac{\phi(r)}{\left( \lim_{\alpha \rightarrow 0} \int_0^\infty \phi(r)^2 \exp(-\alpha r^2) \right)^{1/2}}. \quad (2.39)$$

Такая нормировка соответствует интегралу (аналог ортогональности для квазистационарных состояний)

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} \int_0^\infty dr \phi_n(r) \phi_m(r) \exp(-\alpha r^2) = \delta_{nm}. \quad (2.40)$$

Дальше используем уже нормированные волновые функции.

Теперь уже нетрудно получить результат для второго порядка. Далее следуем стандартному выводу для теории возмущений [76]. Волновую функцию будем разлагать по волновым функциям квазистационарных состояний:

$$\psi = \sum_i \psi_i^{(0)}. \quad (2.41)$$

Подставим  $\psi$  в уравнение Шредингера:

$$\sum_m c_m (E_m^{(0)} + \hat{V}) \psi_m^{(0)} = \sum_m E \psi_m^{(0)}. \quad (2.42)$$

Умножив равенство на  $R_n(r)Y_{lm}^*(\theta, \phi)$  и проинтегрировав, получаем

$$(E - E_k^0) c_k = \sum_m V_{nm} c_m. \quad (2.43)$$

Отметим, что в (2.42) и в (2.43) энергии — это уже комплексные величины.

Матричный элемент имеет вид

$$V_{nm} = \int_0^\infty dr r^2 d\Omega R_n(r) R_m(r) V(\mathbf{r}) Y_{l_n m_n}(\theta, \phi) Y_{l_m m_m}^*(\theta, \phi). \quad (2.44)$$

Теперь мы будем искать поправки к энергиям и волновым функциям в виде ряда по возмущению. После этого находим первую поправку к энергии квазистационарного уровня

$$E_n^{(1)} = V_{nn}. \quad (2.45)$$

Для второй же поправки получим

$$E_n^{(2)} = \sum_m' \frac{V_{nm} V_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}. \quad (2.46)$$

Отметим, что энергии в (2.46) комплексны (и пробегают все квазистационарные значения энергии), в отличие от стандартной формулы. Для квазистационарных состояний матричный элемент уже не является эрмитовым и  $V_{nm} \neq V_{mn}^*$ .

Таким образом, получаемая поправка имеет вид

$$E_n^{(2)} = E_r^{(2)} - i\Gamma_i^{(2)}. \quad (2.47)$$

## Глава 3

# Безызлучательный резонансный перенос энергии между полупроводниковыми квантовыми точками

## 3.1. Введение

В настоящей главе предложена микроскопическая теория механизма безызлучательного резонансного переноса энергии между сферическими квантовыми точками на основе полупроводников  $A_3B_5$ . Используемые ранее модели не позволяют учитывать реальный спектр полупроводников  $A_3B_5$  и ряд новых эффектов, им обусловленных. Использована модель Кейна как наиболее адекватно описывающая реальный спектр полупроводников  $A_3B_5$  [26, 68]. При учете подмешивания состояний валентной зоны к состояниям зоны проводимости в полном матричном элементе кулоновского взаимодействия появляются дополнительные слагаемые.

В главе рассматривается система двух сферических квантовых точек, расположенных на конечном расстоянии  $d$  друга от друга (рис. 3.1). Предполагается, что квантовые точки состоят из одного и того же материала и помещены в матрицу из другого материала, создающего потенциальные барьеры конечной высоты для электронов ( $V_{cD}$  и  $V_{cA}$ ) и для дырок ( $V_{vD}$  и  $V_{vA}$ ). Индексы  $D$  и  $A$  соответствуют квантовой точке-донору и квантовой точке-акцептору энергии. В процессе безызлучательного переноса энергии возбужденный электрон-донор (1 на рис. 3.2) рекомбинирует с дыркой (2 на рис. 3.2), при этом энергия возбуждения передается электрону валентной зоны акцептора и в акцепторе возникает электрон-дырочная пара (3 и 4 на рис. 3.2). Электрон-фононное взаимодействие в этой работе не включено в рассмотрение, поскольку рассматривается только

резонансный процесс. Также заметим, что процесс безызлучательного переноса энергии аналогичен рассмотренному нами ранее процессу оже-рекомбинации в квантовой точке [67]. Однако в отличие от оже-рекомбинации, когда взаимодействующие электроны локализованы в пределах одной квантовой точки, перенос энергии происходит в результате взаимодействия электронов, локализованных в разных квантовых точках, доноре и акцепторе энергии.

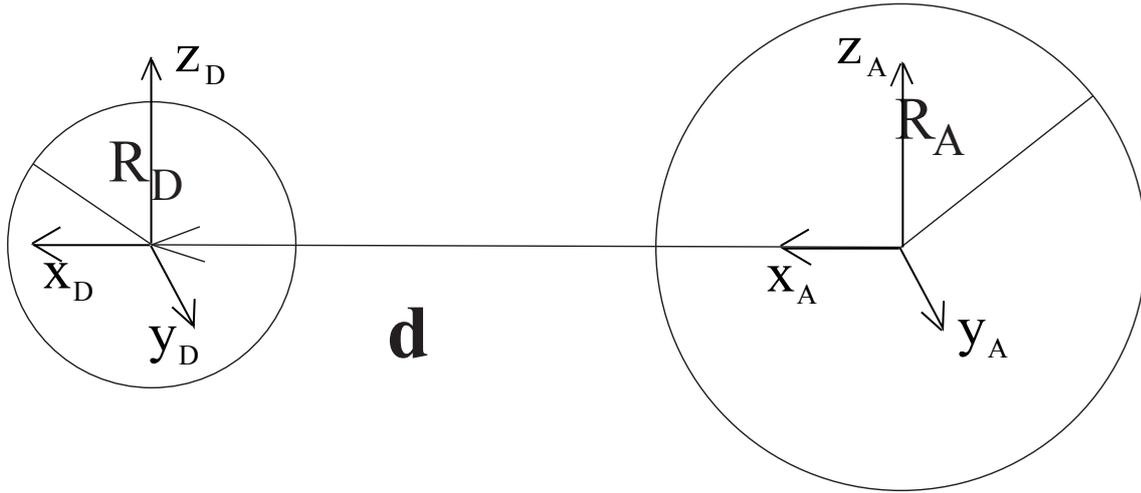


Рис. 3.1. Схема двух квантовых точек: донора с радиусом  $R_D$  и акцептора с радиусом  $R_A$

### 3.2. Волновые функции носителей заряда

Рассматриваем резонансный перенос энергии между сферическими квантовыми точками на основе полупроводников  $A_3B_5$ . Зонная структура таких полупроводников хорошо описывается в рамках модели Кейна [68]. Волновые функции носителей зарядов могут быть записаны как

$$\psi = \psi_s |s\rangle + \psi |p\rangle, \quad (3.1)$$

где  $|s\rangle$  и  $|p\rangle$  — блоховские функции  $s$ - и  $p$ -типа. Функции  $s$ -типа описывают состояние в зоне проводимости, а функции  $p$ -типа описывают состояние валентной зоны, здесь  $\psi_s$  и  $\psi$  — огибающие функции. Уравнения Кейна для огибающих

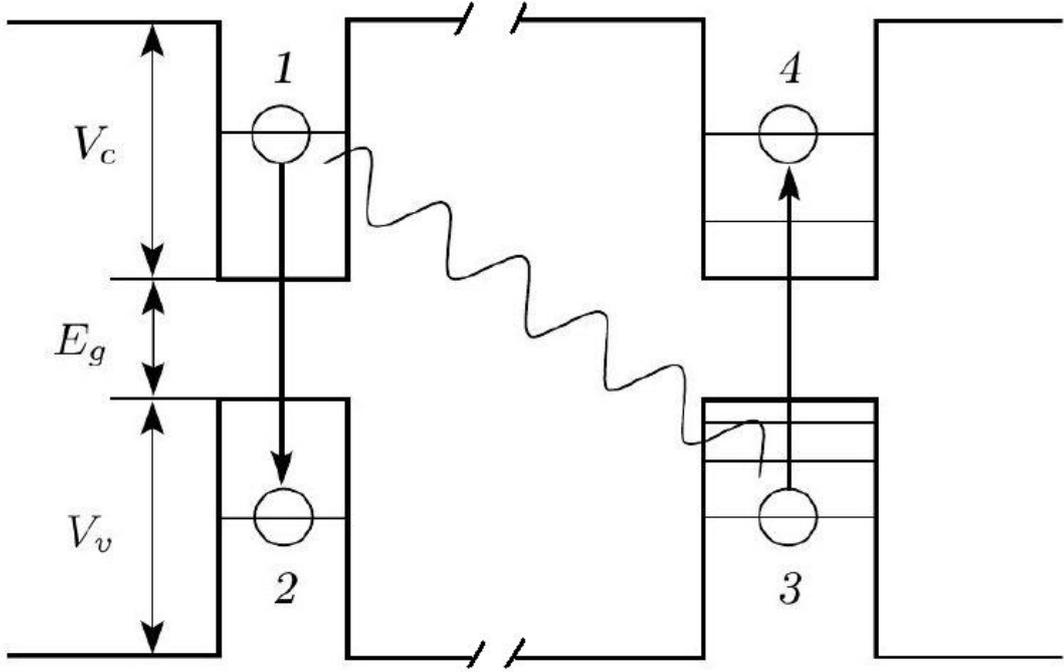


Рис. 3.2. Схематическое изображение процесса безызлучательного резонансного переноса энергии. На рисунке показано начальное состояние системы (электроны 1 и 3) и конечное (электроны 2 и 4)

функций имеют вид [67] (см. (1.3))

$$\begin{cases} (E_g + \delta - E)\psi_s - i\hbar\gamma\nabla\psi = 0, \\ -E\psi - i\hbar\gamma\nabla\psi_s + \frac{\hbar^2}{2m}(\gamma_1 + 4\gamma_2)\nabla(\nabla\psi) - \\ -\frac{\hbar^2}{2m}(\gamma_1 - 2\gamma_2)\nabla \times (\nabla \times \psi) + i\delta\boldsymbol{\sigma} \times \psi = 0. \end{cases} \quad (3.2)$$

Здесь  $\boldsymbol{\sigma}$  — матрицы Паули,  $\delta = \frac{\Delta_{SO}}{3}$  ( $\Delta_{SO}$  — константа спин-орбитального взаимодействия),  $\gamma$  — кейновский матричный элемент, имеющий размерность скорости и связанный с матричным элементом оператора импульса между состояниями зоны проводимости и валентной зоны [90],  $\gamma_1, \gamma_2$  — обобщенные параметры Латтинжера,  $m$  — масса свободного электрона. Ниже для простоты рассмотрен случай, когда константа спин-орбитального взаимодействия — это  $\Delta_{SO} = 0$ . Позднее обсудим влияние спин-орбитального взаимодействия на процесс переноса энергии. Решения уравнений Кейна в сферической системе координат были получены в работе [67]. Для огибающих функций электронов внутри квантовых

точек имеем

$$\begin{aligned} \psi_s &= A j_j(k_c r) Y_{jm}(\theta, \phi), \\ \psi &= -\frac{i\hbar\gamma}{E_c + E_g} A k_c \left( \sqrt{\frac{j+1}{2j+1}} j_{j+1}(k_c r) \mathbf{Y}_{jm}^{j+1}(\theta, \phi) + \right. \\ &\left. + \sqrt{\frac{j}{2j+1}} j_{j-1}(k_c r) \mathbf{Y}_{jm}^{j-1}(\theta, \phi) \right). \end{aligned} \quad (3.3)$$

Здесь  $Y_{jm}(\theta, \phi)$  — сферические функции,  $\mathbf{Y}_{jm}^{j+1}(\theta, \phi)$  и  $\mathbf{Y}_{jm}^{j-1}(\theta, \phi)$  — векторные сферические гармоники,  $j$  и  $m$  — значения полного углового момента и его проекции на ось  $z$  соответственно,  $j_j(k_c r)$  — сферическая функция Бесселя,  $E_g$  — ширина запрещенной зоны,  $E_c$  — энергия электронов, отсчитываемая от дна зоны проводимости,  $k$  — волновое число для электронов и  $A$  — нормировочная константа. В [67] также были получены волновые функции электронов под барьером. В трехзонной модели Кейна состояния тяжелых дырок двукратно вырождены, так как спин-отщепленная зона сливается с зоной тяжелых дырок. Отвечающие тяжелым дыркам волновые функции имеют различные поляризации, которые определяются поляризацией шаровых векторов и не имеют компоненты  $\psi_s$ , это

$$\begin{aligned} \psi_{h1} &= A_1 j_j(k_h r) \mathbf{Y}_{jm}^j(\theta, \phi), \\ \psi_{h2} &= A_2 \left( \sqrt{\frac{j}{2j+1}} j_{j+1}(k_h r) \mathbf{Y}_{jm}^{j+1}(\theta, \phi) - \right. \\ &\left. \sqrt{\frac{j+1}{2j+1}} j_{j-1}(k_h r) \mathbf{Y}_{jm}^{j-1}(\theta, \phi) \right), \end{aligned} \quad (3.4)$$

где  $k_h$  — волновое число для дырки,  $A_1, A_2$  — нормировочные константы. Волновые функции тяжелых дырок под барьером также были получены в [67].

Главное квантовое число  $n_c$  и  $n_h$  в модели Кейна вводится как  $n$ -й корень дисперсионного соотношения для электронов и дырок соответственно. Выпишем дисперсионные соотношения, которые были получены в [67]. Для электро-

нов это дисперсионное соотношение имеет вид

$$\begin{aligned} j_j(kR) \left[ \kappa \tilde{Z} \left( \frac{jk_j(\kappa R)}{\kappa R} - k_{j+1}(\kappa R) \right) \right] = \\ = k_j(\kappa R) \left[ kZ \left( \frac{jj_j(kR)}{kR} - j_{j+1}(kR) \right) \right], \end{aligned} \quad (3.5)$$

где  $Z = 1/(\mathcal{E} + E_g)$  слева от барьера и  $\tilde{Z} = 1/(\mathcal{E} + E_g + V_v)$  справа от барьера. Волновое число  $k$  имеет вид

$$k^2 = \frac{\mathcal{E}(\mathcal{E} + E_g)}{\hbar^2 \gamma^2}. \quad (3.6)$$

А выражение для  $\kappa$  имеет вид

$$\kappa^2 = \frac{(V_c - \mathcal{E})(\mathcal{E} + E_g + V_v)}{\hbar^2 \gamma^2}. \quad (3.7)$$

Аналогично, для дырок дисперсионное соотношение имеет вид

$$\begin{aligned} j_j(k_h R) \frac{\kappa_h}{k_h} \left[ j \left( \frac{(j+1)k_{j+1}(\kappa_h R)}{\kappa_h R} - k_{j+2}(\kappa_h R) \right) + \right. \\ \left. + (j+1) \left( \frac{(j-1)k_{j-1}(\kappa_h R)}{\kappa_h R} - k_j(\kappa_h R) \right) \right] = \\ = k_j(\kappa_h R) \frac{k_h}{\kappa_h} \left[ j \left( \frac{(j+1)j_{j+1}(k_h R)}{k_h R} - j_{j+2}(k_h R) \right) - \right. \\ \left. - (j+1) \left( \frac{(j-1)j_{j-1}(k_h R)}{k_h R} - j_j(k_h R) \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Волновое число для дырок равно

$$k_h^2 = \frac{-2m_h E_h}{\hbar^2}. \quad (3.9)$$

Уравнения (3.5) и (3.8) совместно с законами дисперсии для электронов и дырок [67] определяют уровни размерного квантования электронов и дырок в квантовых точках.

### 3.3. Матричный элемент кулоновского взаимодействия

Для вычисления скорости безызлучательного переноса энергии между двумя квантовыми точками необходимо найти матричный элемент кулоновского

взаимодействия для электронов донора и акцептора при переходе системы из начального состояния в конечное (см. рис. 3.2). В начальном состоянии в доноре имеется электрон-дырочная пара, а электрон акцептора находится в валентной зоне, в конечном состоянии системы электрон-дырочная пара имеется в акцепторе, а электрон донора — в валентной зоне. Таким образом, матричный элемент кулоновского взаимодействия имеет вид

$$M_{if} = \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \int d^3r_1 d^3r_2 \psi_f^*(\xi_1, \xi_2) \frac{e^2}{\varepsilon |\mathbf{d} + \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \psi_i(\xi_1, \xi_2), \quad (3.10)$$

где  $\varepsilon$  — статическая диэлектрическая проницаемость,  $\xi_i = (\mathbf{r}_i, \sigma_i)$ . Здесь  $\sigma$  — спиновые переменные,  $\mathbf{r}_1$  и  $\mathbf{r}_2$  — координаты носителей заряда в доноре и акцепторе соответственно. Начальным и конечным состояниям системы отвечают антисимметризованные произведения

$$\begin{aligned} \psi_i(\xi_1, \xi_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \psi_{cD}(\mathbf{r}_1) \chi_{cD}(\sigma_1) \psi_{hA}(\mathbf{r}_2) \chi_{hA}(\sigma_2) - \right. \\ &\quad \left. - \psi_{cD}(\mathbf{r}_2) \chi_{cD}(\sigma_2) \psi_{hA}(\mathbf{r}_1) \chi_{hA}(\sigma_1) \right), \\ \psi_f(\xi_1, \xi_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \psi_{hD}(\mathbf{r}_1) \chi_{hD}(\sigma_1) \psi_{cA}(\mathbf{r}_2) \chi_{cA}(\sigma_2) - \right. \\ &\quad \left. - \psi_{hD}(\mathbf{r}_2) \chi_{hD}(\sigma_2) \psi_{cA}(\mathbf{r}_1) \chi_{cA}(\sigma_1) \right), \end{aligned} \quad (3.11)$$

где  $\chi(\sigma)$  — спиновые волновые функции,  $\psi_{cD}(\mathbf{r}_1)$  — координатные волновые функции электрона и  $\psi_{hD}(\mathbf{r}_1)$  — координатные волновые функции дырок в доноре (аналогично для акцептора). В результате матричный элемент кулоновского взаимодействия разделяется на два вклада: прямой кулоновский матричный элемент  $M_{coul}$  и обменный матричный элемент  $M_{ex}$ :

$$M_{if} = M_{coul} - M_{ex}, \quad (3.12)$$

где прямой кулоновский матричный элемент имеет вид

$$\begin{aligned} M_{coul} &= \int d^3r_1 d^3r_2 \psi_{cD}(\mathbf{r}_1) \psi_{hD}^*(\mathbf{r}_1) \frac{e^2}{\varepsilon |\mathbf{d} + \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}, \\ \psi_{cA}^*(\mathbf{r}_2) \psi_{hA}(\mathbf{r}_2) &\sum_{\sigma_1, \sigma_2} \chi_{hD}^*(\sigma_1) \chi_{cA}^*(\sigma_2) \chi_{cD}(\sigma_1) \chi_{hA}(\sigma_2), \end{aligned} \quad (3.13)$$

а обменный матричный элемент равен

$$M_{ex} = \int d^3r_1 d^3r_2 \psi_{cD}(\mathbf{r}_1) \psi_{cA}^*(\mathbf{r}_1) \frac{e^2}{\varepsilon |\mathbf{d} + \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}, \quad (3.14)$$

$$\psi_{hD}^*(\mathbf{r}_2) \psi_{hA}(\mathbf{r}_2) \sum_{\sigma_2, \sigma_1} \chi_{hD}^*(\sigma_2) \chi_{cA}^*(\sigma_1) \chi_{cD}(\sigma_1) \chi_{hA}(\sigma_2).$$

Из выражения (3.13) следует, что прямой кулоновский матричный элемент не равен нулю, если  $\chi_{cD} = \chi_{hD}$  и  $\chi_{cA} = \chi_{hA}$ , то есть если переходы как в доноре, так и в акцепторе происходят с сохранением спина. Для обменного матричного элемента (3.14) спиновые правила отбора другие: он не равен нулю, если  $\chi_{cD} = \chi_{cA}$  и  $\chi_{hD} = \chi_{hA}$ . Однако при этом не является необходимым, чтобы  $\chi_c(D, A) = \chi_h(D, A)$ , так что спины для донора и акцептора могут изменяться одновременно при сохранении полного спина системы.

### 3.3.1. Матричный элемент прямого кулоновского взаимодействия

Для вычисления матричного элемента прямого кулоновского взаимодействия удобно использовать Фурье-представление для потенциальной энергии

$$\frac{e^2}{\varepsilon |\mathbf{d} + \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \frac{1}{\varepsilon 2\pi^2} \int d^3q \frac{1}{q^2} \exp(i\mathbf{q}(\mathbf{d} + \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)). \quad (3.15)$$

Тогда матричный элемент (3.13) принимает вид

$$M_{coul} = \frac{1}{\varepsilon 2\pi^2} \int d^3q \exp(i\mathbf{q}\mathbf{d}) \frac{1}{q^2} I_D(q) I_A^*(q), \quad (3.16)$$

где

$$I_D(\mathbf{q}) = \int d^3\mathbf{r}_1 \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_1) \psi_{cD}(\mathbf{r}_1) \psi_{hD}^*(\mathbf{r}_1), \quad (3.17)$$

$$I_A(\mathbf{q}) = \int d^3\mathbf{r}_2 \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_2) \psi_{cA}(\mathbf{r}_2) \psi_{hA}^*(\mathbf{r}_2).$$

Выражения  $I_D$  и  $I_A$  играют роль интегралов перекрытия электронных и дырочных состояний донора и акцептора соответственно. Для электронов и тяжелых дырок в доноре волновые функции, согласно (1), (3) и (4), могут быть записаны как

$$\psi_{cD}(\mathbf{r}_1) = \psi_{cSD}(\mathbf{r}_1) |s\rangle + \psi_{cD}(\mathbf{r}_1) |\mathbf{p}\rangle, \quad (3.18)$$

$$\psi_{hD}(\mathbf{r}_1) = \psi_{hD}(\mathbf{r}_1) |\mathbf{p}\rangle.$$

Поскольку в нашей модели ( $\Delta_{SO} = 0$ ) существуют две тяжелые дырки разной поляризации, то под  $\psi_h$  следует понимать соответствующие волновые функции тяжелых дырок  $\psi_{h1}$  и  $\psi_{h2}$ . При учете (3.18) интеграл перекрытия  $I_D(\mathbf{q})$  принимает вид

$$I_D(\mathbf{q}) = \int d^3\mathbf{r}_1 \langle \mathbf{p} | \psi_{hD}^*(\mathbf{r}_1) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_1) \times \\ \times (\psi_{cSD}(\mathbf{r}_1) |s\rangle + \psi_{cD}(\mathbf{r}_1) |p\rangle) = I_{D1} + I_{D2}, \quad (3.19)$$

где

$$I_{D1}(\mathbf{q}) = \int d^3\mathbf{r}_1 \langle \mathbf{p} | \psi_{hD}^*(\mathbf{r}_1) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_1) \times \\ \times (\psi_{cSD}(\mathbf{r}_1) |s\rangle) \quad (3.20)$$

и

$$I_{D2}(\mathbf{q}) = \int d^3\mathbf{r}_1 \langle \mathbf{p} | \psi_{hD}^*(\mathbf{r}_1) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_1) \times \\ \times (\psi_{cD}(\mathbf{r}_1) |p\rangle). \quad (3.21)$$

Важно отметить, что  $I_{D1}$  — интеграл перекрытия без подмешивания состояний, а  $I_{D2}$  — интеграл перекрытия, учитывающий подмешивание состояний валентной зоны к состояниям зоны проводимости. Аналогично может быть представлен интеграл перекрытия для акцептора  $I_A$ :

$$I_A(\mathbf{q}) = \int d^3\mathbf{r}_2 \langle \mathbf{p} | \psi_{hA}^*(\mathbf{r}_2) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_2) \times \\ \times (\psi_{cSA}(\mathbf{r}_2) |s\rangle + \psi_{cA}(\mathbf{r}_2) |p\rangle) = I_{A1} + I_{A2}. \quad (3.22)$$

Тогда матричный элемент (3.16) может быть записан как

$$M_{coul} = \frac{4\pi e^2}{\varepsilon} \int \frac{d^3q}{q^2(2\pi)^3} (I_{D1}I_{A1}^* + I_{D2}I_{A1}^* + \\ + I_{D1}I_{A2}^* + I_{D2}I_{A2}^*) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{d}). \quad (3.23)$$

Первое слагаемое в (3.23), пропорциональное произведению  $I_{D1}I_{A1}$ , представляет собой вклад в матричный элемент, который соответствует волновым функциям без учета подмешивания. При учете двух поляризаций тяжелых дырок эта часть матричного элемента (пропорциональная  $I_{D1}I_{A1}$ ) разбивается на два вклада:  $M_{coul}^{(1)}$  и  $M_{coul}^{(2)}$ . Последнее слагаемое в (3.23), пропорциональное

$I_{D2}I_{A2}$ , представляет вклад подмешивания  $s$ - и  $p$ -состояний в  $M_{ad}^{(1)}$ . Второе и третье слагаемые в (3.23)  $M_{ad}^{(2)} \propto I_{D2}I_{A1}$  и  $M_{ad}^{(3)} \propto I_{D1}I_{A2}$  являются перекрестными членами.

Чтобы вычислить эти интегралы перекрытия, разделим интегрирование по быстроосциллирующей блоховской составляющей и интегрирование по медленно меняющейся огибающей волновой функции кристалла. Введем обозначение  $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_{\mathbf{k}1} + \mathbf{r}_{\mathbf{D}1}$ . Здесь  $\mathbf{r}_{\mathbf{k}1}$  — радиус-вектор  $k$ -той элементарной ячейки, а  $\mathbf{r}_{\mathbf{D}1}$  — радиус-вектор электрона внутри элементарной ячейки донора. Также введем объем одной элементарной ячейки  $V_0$ . Считаем, что плавная огибающая часть волновой функции медленно меняется в пределах одной элементарной ячейки кристалла. При этом искомые интегралы могут быть представлены как

$$I_{D1}(\mathbf{q}) = V_0 \sum_k \psi_{hD}^*(\mathbf{r}_{\mathbf{k}1}) \psi_{cSD}(\mathbf{r}_{\mathbf{k}1}) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_{\mathbf{k}1}) \times \\ \times \frac{1}{V_0} \int d^3\mathbf{r}_{\alpha 1} \langle \mathbf{p} | \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_{\alpha 1}) | s \rangle \quad (3.24)$$

и

$$I_{D2} = V_0 \sum_k \psi_{hD}^*(\mathbf{r}_{\mathbf{k}1}) \psi_{cD}(\mathbf{r}_{\mathbf{k}1}) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_{\mathbf{k}1}) \times \\ \times \frac{1}{V_0} \int d^3\mathbf{r}_{\alpha 1} \langle \mathbf{p} | \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_{\alpha 1}) | \mathbf{p} \rangle. \quad (3.25)$$

Аналогичные выражения получаются и для акцептора:

$$I_{A1}(\mathbf{q}) = V_0 \sum_k \psi_{hA}^*(\mathbf{r}_{\mathbf{k}1}) \psi_{cSA}(\mathbf{r}_{\mathbf{k}1}) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_{\mathbf{k}1}) \times \\ \times \frac{1}{V_0} \int d^3\mathbf{r}_{\alpha 1} \langle \mathbf{p} | \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_{\alpha 1}) | s \rangle \quad (3.26)$$

и

$$I_{A2} = V_0 \sum_k \psi_{hA}^*(\mathbf{r}_{\mathbf{k}1}) \psi_{cA}(\mathbf{r}_{\mathbf{k}1}) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_{\mathbf{k}1}) \times \\ \times \frac{1}{V_0} \int d^3\mathbf{r}_{\alpha 1} \langle \mathbf{p} | \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_{\alpha 1}) | \mathbf{p} \rangle. \quad (3.27)$$

Далее используем длинноволновое приближение  $qa \ll 1$  ( $a$  — постоянная решетки полупроводника) и разложение  $\exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_{\alpha 1})$  в ряд Тейлора, ограничиваясь первыми двумя членами  $\exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_{\alpha 1}) \approx 1 + i(\mathbf{q}\mathbf{r}_{\alpha 1})$ .

Рассмотрим выражение (3.24) для интеграла  $I_{D1}$ , не учитывающего подмешивание. Здесь ненулевой вклад в интеграл по объему элементарной ячейки дает второй член разложения  $i\mathbf{q}\mathbf{r}_{\alpha_1}$ . Заменяя суммирование по элементарным ячейкам интегрированием по объему квантовой точки, для  $I_{D1}$  получим

$$I_{D1} \approx \int d^3\mathbf{r}_1 \psi_{hD}^*(\mathbf{r}_1) \psi_{cSD}(\mathbf{r}_1) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_1) \langle \mathbf{p} | i\mathbf{q}\mathbf{r}_\alpha | s \rangle. \quad (3.28)$$

Интеграл  $I_{D1}$  пропорционален матричному элементу оператора координаты  $\langle \mathbf{p} | \mathbf{r}_\alpha | s \rangle$ , который можно выразить через параметры полупроводника [90]

$$\langle s | z | Z \rangle = \frac{P}{E_g}. \quad (3.29)$$

Здесь  $Z$  — компонента блоховской функции  $p$ -типа для валентной зоны, которая преобразуется как соответствующая координата, величина  $P = \hbar\gamma$  — параметр Кейна. Следует отметить, что в этом рассмотрении не учитывается взаимная ориентация дипольных моментов переходов в доноре и в акцепторе, поскольку координатные оси в доноре и акцепторе полагаются параллельными. (Проведение усреднения по углам приводит к появлению множителя  $2/3$  в матричном элементе.) В итоге интеграл  $I_{D1}$  принимает вид

$$I_{D1} = i \frac{P}{E_g} \int d^3\mathbf{r}_1 (\mathbf{q} \cdot \psi_{hD}^*(\mathbf{r}_1)) \psi_{cSD}(\mathbf{r}_1) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_1). \quad (3.30)$$

Рассмотрим выражение (3.25) для интеграла перекрытия  $I_{D2}(q)$ , связанного с подмешиванием  $p$ -состояний валентной зоны к  $s$ -состояниям зоны проводимости в (3.3). В разложении  $\exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_\alpha)$  в ряд Тейлора можно ограничиться первым членом. Тогда для  $I_{D2}$  можно получить следующее выражение:

$$I_{D2} = \int d^3\mathbf{r}_1 \psi_{hD}^*(\mathbf{r}_1) \psi_{cD}(\mathbf{r}_1) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_1). \quad (3.31)$$

Здесь учтено, что  $\langle \mathbf{p} | \mathbf{p} \rangle = 1$ .

Переходим к вычислению интеграла  $I_{D1}$ , не включающего подмешивание. Для вычисления скалярного произведения в выражении (3.30) удобно воспользоваться его представлением в циклических координатах [72]

$$\mathbf{q}\psi_{hD}^* = \sum_{\mu} q_{\mu} (\psi_{hD}^*)^{\mu}. \quad (3.32)$$

Ковариантные циклические координаты вектора  $\mathbf{q}$  могут быть представлены в виде

$$q_\mu = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} q Y_{1\mu}(\Omega_q), \quad (3.33)$$

где  $Y_{1\mu}(\Omega_q)$  — сферические функции. Для векторных сферических гармоник их ковариантные координаты представляются в виде [72]

$$(\mathbf{Y}_{jm}^l(\Omega))_\mu = C_{l,m+\mu,1,-\mu}^{jm} Y_{l,m+\mu}(\Omega) (-1)^\mu. \quad (3.34)$$

Здесь  $C_{l,m+\mu,1,-\mu}^{jm}$  — коэффициенты Клебша-Гордана.

Поскольку состояния тяжелых дырок двукратно вырождены (см. формулы (4)), вклад в скорость переноса дают два матричных элемента, соответствующих волновым функциям различной поляризации  $\psi_{h1}$  и  $\psi_{h2}$ , и обозначим их как  $M_{coul}^{(1)}$  и  $M_{coul}^{(2)}$ . Рассмотрим матричный элемент  $M_{coul}^{(1)}$ , определяемый волновой функцией  $\psi_{h1}$ . Плоская волна в выражении (3.28) может быть представлена в виде разложения по сферическим функциям [72]

$$\exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_1) = 4\pi \sum_{l_1=0}^{\infty} \sum_{m_1=-l_1}^{l_1} i^{l_1} j_{l_1}(qr_1) Y_{l_1 m_1}^*(\Omega_q) Y_{l_1 m_1}(\Omega_1). \quad (3.35)$$

В результате получим интеграл по углу  $\Omega_1$  от трех сферических функций, который легко вычисляется [72],

$$\begin{aligned} & \int d\Omega_1 Y_{l_1 m_1}(\Omega_1) Y_{j_{cD} m_{cD}}(\Omega_1) Y_{j_{hD} m_{hD} + \mu_1}^*(\Omega_1) = \\ & = \sqrt{\frac{(2l_1 + 1)(2j_{cD} + 1)}{4\pi(2j_{hD} + 1)}} C_{l_1, 0, j_{cD}, 0}^{j_{hD}, 0} C_{l_1, m_1, j_{cD}, m_{cD}}^{j_{hD}, m_{hD} + \mu_1}. \end{aligned} \quad (3.36)$$

Сферическая симметрия квантовых точек позволяет устранить зависимость  $I_{D1}$  от угловых координат вектора  $\mathbf{q}$  [54]. Аналогичные преобразования могут быть выполнены для  $I_{A1}$ . Учитывая (3.32)–(3.36) и аналогичные выражения для ак-

цептора, можно представить матричный элемент в следующем виде:

$$\begin{aligned}
M_{coul}^{(1)} &= \frac{2}{\pi} \frac{e^2}{\varepsilon} \left( \frac{P}{E_g} \right)^2 A_{cD} A_{hDl} A_{cA} A_{hAl} \int_0^{R_D} r_1^2 dr_1 \int_0^{R_A} r_2^2 dr_2 \times \\
&\times \frac{1}{3} \sum_{l_1, l_2=0}^{\infty} (j_{j_{cD}}(k_{cD}r_1) j_{j_{hD}}(k_{hD}r_1)) (j_{j_{cA}}(k_{cA}r_2) j_{j_{hA}}(k_{hA}r_2)) \times \\
&\times (2l_1 + 1)(2l_2 + 1) i^{l_1 - l_2} C_{l_1, 0, j_{cD}, 0}^{j_{hD}, 0} C_{l_1, 0, j_{cD}, m_{cD}}^{j_{hD}, m_{hD}} \times \\
&\times C_{l_2, 0, j_{cA}, 0}^{j_{hA}, 0} C_{l_2, 0, j_{cA}, m_{cA}}^{j_{hA}, m_{hA}} I(q),
\end{aligned} \tag{3.37}$$

где

$$\begin{aligned}
I(q) &= \int dq q^2 d\Omega_q j_{l_1}(qr_1) j_{l_2}(qr_2) \exp(iqd \cos(\theta_q)) \times \\
&\times (Y_{10}(\Omega_q))^2.
\end{aligned} \tag{3.38}$$

Здесь  $R_D$  и  $R_A$  — радиусы квантовых точек, донора и акцептора соответственно,  $A_{cD}$  и  $A_{hDl}$  — нормировочные константы для волновых функций электронов и дырок донора соответственно (аналогично для акцептора),  $k_{cD}$  и  $k_{hD}$  — волновые числа для электронов и дырок донора соответственно (аналогично для акцептора). Отметим, что в матричном элементе можно ограничиться интегрированием по области квантовой точки, так как волновая функция тяжелых дырок быстро затухает под барьером. Далее сформулируем правила отбора для матричного элемента  $M_{coul}^{(1)}$ :

$$\left\{ \begin{array}{l} m_{cA} = m_{hA}, \\ m_{cD} = m_{hD}, \\ l_1 + j_{cD} + j_{hD} \text{ четное}, \\ l_2 + j_{cA} + j_{hA} \text{ четное}, \\ |l_1 - j_{cD}| \leq j_{hD} \leq l_1 + j_{cD}, \\ |l_2 - j_{cA}| \leq j_{hA} \leq l_2 + j_{cA}. \end{array} \right. \tag{3.39}$$

Правила отбора (3.39) следуют из свойств симметрии коэффициентов Клебша-Гордана в выражении (3.37). Для интегрирования по  $q$  в (3.38) воспользуемся

следующим разложением плоской волны:

$$\exp(iqd \cos(\theta_q)) = \sqrt{4\pi} \sum_{l=0}^{\infty} i^l j_l(qd) \sqrt{2l+1} Y_{l0}(\Omega_q). \quad (3.40)$$

Произведение двух сферических функций выражается как [72]

$$(Y_{10}(\Omega_q))^2 = \sum_{LM} \sqrt{\frac{9}{4\pi(2L+1)}} C_{1010}^{L0} C_{1010}^{LM} Y_{LM}(\Omega_q). \quad (3.41)$$

В силу свойств симметрии коэффициентов Клебша-Гордана, в выражении (3.41) отличны от нуля только коэффициенты, для которых  $L = 0, 2$ . В этом случае  $l = L = 0, 2$ . Таким образом, интеграл (3.38) может быть представлен в виде

$$I(q) = \frac{1}{d^3} (I_0 - 2I_2), \quad (3.42)$$

где

$$I_l = \int_0^{\infty} t^2 dt j_l(t) j_{l_1}\left(t \frac{r_1}{d}\right) j_{l_2}\left(t \frac{r_2}{d}\right), \quad (3.43)$$

а  $l$  принимает два значения: 0 и 2. Интеграл (3.43) может быть выражен через гипергеометрическую функцию Аппеля  $F_4(a, b; c, d; x, y)$  [91]

$$\begin{aligned} I_l = \pi^{\frac{3}{2}} \frac{1}{2} \left(\frac{r_1}{d}\right)^{l_1} \left(\frac{r_2}{d}\right)^{l_2} & \left[ \frac{\Gamma\left(\frac{l_1+l_2+l+3}{2}\right)}{\Gamma\left(l_1+\frac{3}{2}\right)\Gamma\left(l_2+\frac{3}{2}\right)\Gamma\left(\frac{l-(l_1+l_2)}{2}\right)} \times \right. \\ & \times F_4\left(\frac{l_1+l_2-l+2}{2}, \frac{l_1+l_2+l+3}{2}; \right. \\ & \left. \left. l_1+\frac{3}{2}, l_2+\frac{3}{2}; \left(\frac{r_1}{d}\right)^2, \left(\frac{r_2}{d}\right)^2\right) \right], \end{aligned} \quad (3.44)$$

где  $\Gamma(x)$  — гамма-функция. Вычисленный интеграл входит в выражение для матричного элемента (3.37). Из свойств  $\Gamma$ -функции следует, что матричный элемент  $M_{coul}^{(1)}$  отличен от нуля, если выполняется одно из условий:

$$\begin{cases} 1. l_1 = l_2 = 0, \\ 2. l_1 + l_2 \text{ нечетное.} \end{cases} \quad (3.45)$$

Подставляя выражение (3.42) в (3.37), получаем следующее выражение для матричного элемента:

$$\begin{aligned}
M_{coul}^{(1)} &= \frac{2}{\pi} \frac{e^2}{\varepsilon d^3} \left( \frac{P}{E_g} \right)^2 A_{cD} A_{hD1} A_{cA} A_{hA1} \int_0^{R_D} r_1^2 dr_1 \int_0^{R_A} r_2^2 dr_2 \times \\
&\times \frac{1}{3} \sum_{l_1, l_2=0}^{\infty} (j_{j_{cD}}(k_{cD} r_1) j_{j_{hD}}(k_{hD} r_1)) (j_{j_{cA}}(k_{cA} r_2) j_{j_{hA}}(k_{hA} r_2)) \times \\
&\times C_{l_2, 0, j_{cA}, 0}^{j_{hA}, 0} C_{l_2, 0, j_{cA}, m_{cA}}^{j_{hA}, m_{hA}} (I_0 - 2I_2).
\end{aligned} \tag{3.46}$$

В том случае, когда  $l_1 = l_2 = 0$ ,

$$\begin{aligned}
I_0 &= 0, \\
I_2 &= \pi^{3/2} \frac{1}{2} \frac{\Gamma(5/2)}{\Gamma(3/2)\Gamma(3/2)\Gamma(1)} = \frac{3\pi}{2}.
\end{aligned} \tag{3.47}$$

Выполняя интегрирование по  $r_1$  и по  $r_2$ , получаем

$$\begin{aligned}
M_{coul}^{(1)} &= \frac{e^2}{\varepsilon d^3} \left( \frac{P}{E_g} \right)^2 A_{cD} A_{hD1} A_{cA} A_{hA1} \times \\
&\times (k_{hD} j_{j_{hD}-1}(k_{hD} R_D) j_{j_{cD}}(k_{cD} R_D) - \\
&- k_{cD} j_{j_{hD}}(k_{hD} R_D) j_{j_{cD}-1}(k_{cD} R_D)) \frac{R_D^2}{k_{cD}^2 - k_{hD}^2} \times \\
&\times (k_{hA} j_{j_{hA}-1}(k_{hA} R_A) j_{j_{cA}}(k_{cA} R_A) - \\
&- k_{cA} j_{j_{hA}}(k_{hA} R_A) j_{j_{cA}-1}(k_{cA} R_A)) \frac{R_A^2}{k_{cD}^2 - k_{hD}^2} \times \\
&\times C_{j_{hD}, m_{hD}, 1, 0}^{j_{hD}, m_{hD}} C_{j_{hA}, m_{hA}, 1, 0}^{j_{hA}, m_{hA}} \delta_{j_{cD}, j_{hD}} \delta_{m_{cD}, m_{hD}} \delta_{j_{cA}, j_{hA}} \delta_{m_{cA}, m_{hA}}.
\end{aligned} \tag{3.48}$$

Из правил отбора (3.39) следует, что при  $l_1 = l_2 = 0$  матричный элемент отличен от нуля, если переходы в доноре и в акцепторе, происходят между состояниями дырок и электронов с равными угловыми моментами  $j_{cD} = j_{hD}$  и  $j_{cA} = j_{hA}$ , то есть если переходы являются дипольно-разрешенными. Этим значениям  $l_1$  и  $l_2$  соответствует зависимость матричного элемента переноса энергии от расстояния между донором и акцептором вида  $M_{coul}^{(1)} \sim 1/d^3$ , как это следует из выражений (3.44) и (3.46). Если  $l_1 + l_2$  — нечетное число суммы угловых моментов состояний, вовлеченных в переход, то  $j_{cD} + j_{hD}$  и  $j_{cA} + j_{hA}$  должны

иметь противоположную четность. Минимальные возможные значения  $l_1$  и  $l_2$  есть 0 и 1 соответственно. При этом условия, налагаемые на допустимые значения угловых моментов в (3.39), имеют вид  $j_{cD} = j_{hD}$  и  $|1 - j_{cA}| \leq j_{hA} \leq 1 + j_{cA}$ . В акцепторе, согласно этому, вклад в матричный элемент кулоновского взаимодействия могут давать только дипольно-запрещенные переходы. В этих случаях  $M_{coul}^{(1)}$  зависит от расстояния между донором и акцептором, как  $1/d^4$ . Для того, чтобы матричный элемент был отличен от нуля, соотношение радиусов донора и акцептора  $R_D$  и  $R_A$  должно быть всегда таким, при котором энергия перехода в доноре равна энергии перехода в акцепторе. Очевидно, что в случае квантовых точек с  $R_D = R_A$  в резонанс попадают переходы между уровнями с совпадающими значениями угловых моментов как дырок, так и электронов для обеих квантовых точек.

Рассмотрим теперь матричный элемент  $M_{coul}^{(2)}$  с волновой функцией тяжелой дырки второй поляризации  $\psi_{h2}$ . Вычисление данного матричного элемента может быть выполнено аналогично вычислению  $M_{coul}^{(1)}$ . Полученное выражение

для  $M_{coul}^{(2)}$  имеет вид

$$\begin{aligned}
M_{coul}^{(2)} &= \frac{e^2}{\varepsilon d^3} \frac{2}{3\pi} \left( \frac{P}{E_g} \right)^2 A_{cD} A_{hD2} A_{cA} A_{hA2} \int_0^{R_D} \int_0^{R_A} dr_1 r_1^2 dr_2 r_2^2 \times \\
&\times \sum_{l_1, l_2=0}^{\infty} \left( j_{j_{cD}}(k_{cD} r_1) \left( \sqrt{\frac{j_{hD}}{2j_{hD}+1}} j_{j_{hD}+1}(k_{hD} r_1) \times \right. \right. \\
&\times \left. \left. C_{l_1, 0, j_{cD}, 0}^{j_{hD}-1, 0} C_{l_1, 0, j_{cD}, m_{cD}}^{j_{hD}-1, m_{hD}} \right) \right) \times \\
&\times \left( j_{j_{cA}}(k_{cA} r_2) \left( \sqrt{\frac{j_{hA}}{2j_{hA}+1}} j_{j_{hA}+1}(k_{hA} r_2) \times \right. \right. \\
&\times C_{j_{hA}+1, m_{hA}, 1, 0}^{j_{hA}, m_{hA}} \sqrt{\frac{2j_{cA}+1}{2j_{hA}+3}} C_{l_2, 0, j_{cA}, 0}^{j_{hA}+1, 0} C_{l_2, 0, j_{cA}, m_{cA}}^{j_{hA}+1, m_{hA}} - \\
&- \sqrt{\frac{j_{hA}+1}{2j_{hA}+1}} j_{j_{hA}-1}(k_{hA} r_2) C_{j_{hA}-1, m_{hA}, 1, 0}^{j_{hA}, m_{hA}} \sqrt{\frac{2j_{cA}+1}{2j_{hA}-1}} \times \\
&\times \left. \left. C_{l_2, 0, j_{cA}, 0}^{j_{hA}-1, 0} C_{l_2, 0, j_{cA}, m_{cA}}^{j_{hA}-1, m_{hA}} \right) \right) \times \\
&\times i^{l_1-l_2} (2l_1+1)(2l_2+1) (I_0 - 2I_2),
\end{aligned} \tag{3.49}$$

где  $I_0$  и  $I_2$  представлены выражением (3.44). Из свойств  $\Gamma$ -функции в (3.44) следует, что  $M_{coul}^{(2)} \neq 0$ , когда

$$\begin{cases} l_1 + l_2 = 0, \\ l_1 + l_2 \text{ нечетное.} \end{cases} \tag{3.50}$$

Из свойств симметрии коэффициентов Клебша-Гордана следуют правила

отбора для матричного элемента кулоновского взаимодействия  $M_{coul}^{(2)}$

$$\left\{ \begin{array}{l} m_{cA} = m_{hA}, \\ m_{cD} = m_{hD}, \\ l_1 + j_{cD} + j_{hD} \text{ нечетное,} \\ l_2 + j_{cA} + j_{hA} \text{ нечетное,} \\ |l_1 - j_{cD}| \leq j_{hD} \pm 1 \leq l_1 + j_{cD}, \\ |l_2 - j_{cA}| \leq j_{hA} \pm 1 \leq l_2 + j_{cA}, \\ \text{кроме того, } j_{hD}, j_{hA} \geq 1. \end{array} \right. \quad (3.51)$$

В случае, когда  $l_1 + l_2 = 0$ , выражение (3.49) упрощается и приобретает следующий вид:

$$\begin{aligned} M_{coul}^{(2)} &= \frac{e^2}{\varepsilon d^3} \left( \frac{P}{E_g} \right)^2 A_{cD} A_{hD2} A_{cA} A_{hA2} \int_0^{R_D} r_1^2 dr_1 \int_0^{R_A} r_2^2 dr_2 \times \\ &\times \left( j_{j_{cD}}(k_{cD} r_1) \left( \sqrt{\frac{j_{hD}}{2j_{hD} + 1}} j_{j_{hD}+1}(k_{hD} r_1) C_{j_{hD}+1, m_{hD}, 1, 0}^{j_{hD}, m_{hD}} \times \right. \right. \\ &\times \delta_{j_{cD}, j_{hD}+1} \delta_{m_{cD}, m_{hD}} - \sqrt{\frac{j_{hD} + 1}{2j_{hD} + 1}} j_{j_{hD}-1}(k_{hD} r_1) \times \\ &\times \left. \left. C_{j_{hD}-1, m_{hD}, 1, 0}^{j_{hD}, m_{hD}} \delta_{j_{cD}, j_{hD}-1} \delta_{m_{cD}, m_{hD}} \right) \right) \times \\ &\times \left( j_{j_{cA}}(k_{cA} r_2) \left( \sqrt{\frac{j_{hA}}{2j_{hA} + 1}} j_{j_{hA}+1}(k_{hA} r_2) C_{j_{hA}+1, m_{hA}, 1, 0}^{j_{hA}, m_{hA}} \times \right. \right. \\ &\times \delta_{j_{cA}, j_{hA}+1} \delta_{m_{cA}, m_{hA}} - \sqrt{\frac{j_{hA} + 1}{2j_{hA} + 1}} j_{j_{hA}-1}(k_{hA} r_2) \times \\ &\times \left. \left. C_{j_{hA}-1, m_{hA}, 1, 0}^{j_{hA}, m_{hA}} \delta_{j_{cA}, j_{hA}-1} \delta_{m_{cA}, m_{hA}} \right) \right). \end{aligned} \quad (3.52)$$

Заметим, что интегралы в выражении (3.52) для матричного элемента также могут быть вычислены в точном виде, как и в случае  $M_{coul}^{(1)}$ .

Из правил отбора (3.51) следует, что при  $l_1 = l_2 = 0$  матричный элемент отличен от нуля только для дипольно-запрещенных переходов в доноре и акцеп-

торе, удовлетворяющих условиям  $j_{cD} = j_{hD} \pm 1$  и  $j_{cA} = j_{hA} \pm 1$ . Из выражений (3.49) и (3.44) следует, что при этом матричный элемент  $M_{coul}^{(2)}$  зависит от расстояния между донором и акцептором, как  $1/d^3$ . Если  $l_1 + l_2$  — нечетное число с минимальными возможными значениями  $l_1 = 0$  и  $l_2 = 1$ , то матричный элемент отличен от нуля для дипольно-запрещенных переходов в доноре, удовлетворяющих условию  $j_{cD} = j_{hD} \pm 1$ , тогда на переходы в акцепторе налагаются ограничения такие, что  $j_{cA} + j_{hA}$  — четное число и  $|1 - j_{cA}| \leq j_{hA} \pm 1 \leq 1 + j_{cA}$ . Матричный элемент  $M_{coul}^{(2)}$  в этих случаях зависит от расстояния  $d$ , как  $1/d^4$ . Как уже отмечалось, для того, чтобы матричный элемент был отличен от нуля, соотношение значений  $R_D$  и  $R_A$  должно обеспечивать выполнение условия резонанса для соответствующих переходов. В случае квантовых точек с  $R_D = R_A$  в резонанс попадают переходы между уровнями с совпадающими значениями угловых моментов как дырок, так и электронов для обеих квантовых точек.

### 3.3.2. Матричный элемент прямого кулоновского взаимодействия с учетом подмешивания $s$ - и $p$ -состояний

До сих пор при вычислении матричных элементов кулоновского взаимодействия не было учтено подмешивание  $p$ -состояний к  $s$ -состояниям зоны проводимости. Как было показано, при учете подмешивания в выражении для матричного элемента (3.23) появляются дополнительные слагаемые, включающие следующие интегралы перекрытия:

$$I_{D2} = \int d^3\mathbf{r}_1 \psi_{hD}^*(\mathbf{r}_1) \psi_{cD}(\mathbf{r}_1) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_1) \quad (3.53)$$

и

$$I_{A2} = \int d^3\mathbf{r}_2 \psi_{hA}^*(\mathbf{r}_2) \psi_{cA}(\mathbf{r}_2) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_2). \quad (3.54)$$

Вычисление этих интегралов выполнено, подобно вычислению интегралов перекрытия  $I_{D1}$  и  $I_{A1}$ , когда использовался переход к циклическим координатам для шаровых векторов и разложение плоских волн по сферическим функциям. Учет подмешивания вносит дополнительный вклад в матричный элемент,

который имеет вид

$$\begin{aligned}
M_{ad}^{(1)} &= \frac{4\pi e^2}{\varepsilon} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{1}{q^2} I_{D2}(q) I_{A2}^*(q) = \\
&= 2\sqrt{\pi} \frac{e^2}{\varepsilon d} \left( \frac{P}{E_g} \right)^2 A_{cD} A_{hD}^* A_{cA}^* A_{hA} k^2 I_{ad}^{(1)},
\end{aligned} \tag{3.55}$$

где  $I_{ad}^{(1)}$  определено в приложении А. Правила отбора для этого вклада с учетом формулы (3.93) из приложения А имеют вид

$$\left\{ \begin{array}{l}
l_1 + l_2 \text{ нечетное,} \\
j_{hD} + j_{cD} + l_1 \text{ нечетное,} \\
j_{hA} + j_{cA} + l_2 \text{ нечетное,} \\
|j_{cD} + 1 - l_1| \leq j_{hD} \leq j_{cD} + 1 + l_1, \\
|j_{cA} + 1 - l_2| \leq j_{hA} \leq j_{cA} + 1 + l_2, \\
|j_{cD} - 1 - l_1| \leq j_{hD} \leq j_{cD} - 1 + l_1, \\
j_{cD} \geq 1, \\
|j_{cA} - 1 - l_2| \leq j_{hA} \leq j_{cA} - 1 + l_2, \\
j_{cA} \geq 1, \\
m_{cD} = m_{cA}, \\
m_{hD} = m_{hA}.
\end{array} \right. \tag{3.56}$$

Из (3.56) следует, что минимальные возможные значения  $l_1$  и  $l_2$ , при которых матричный элемент  $M_{ad}^{(1)}$  отличен от нуля, — это  $l_1 = 1$ ,  $l_2 = 2$  (или  $l_1 = 2$ ,  $l_2 = 1$ ). Это определяет противоположную чётность сумм  $j_{cD} + j_{hD}$  и  $j_{cA} + j_{hA}$ . Неравенства в (3.56) налагают дополнительные ограничения на допустимые значения угловых моментов донорных и акцепторных состояний, которые могут давать вклад в перенос энергии. Зависимость матричного элемента от расстояния между квантовыми точками имеет вид  $M_{coul}^{(2)} \sim 1/d^4$ . Этот вклад подмешивания состояний отличен от нуля только при радиусах  $R_D \neq R_A$  и их соотношениях, обеспечивающих выполнение условия резонанса для соответствующих переходов.

Перекрестное слагаемое в матричном элементе (3.23) пропорционально произведению интегралов перекрытия  $I_{D2}$  и  $I_{A1}$  и имеет вид

$$M_{ad}^{(2)} = \frac{4e^2}{\pi^{3/2}\varepsilon d^2} A_{cD} A_{hD}^* A_{cA}^* A_{hA} \left( \frac{P}{E_g} \right)^2 k_{cD} I_{ad}^{(2)}, \quad (3.57)$$

где  $I_{ad}^{(2)}$  приведено в приложении А (3.94). Правила отбора для этого вклада, определяемые выражением (3.94), имеют вид

$$\left\{ \begin{array}{l} l_1 > 0, \\ l_1 + l_2 \text{ нечетное}, \\ j_{hD} + j_{cD} + l_1 \text{ нечетное}, \\ j_{hA} + j_{cA} + l_2 \text{ четное}, \\ |j_{cD} + 1 - l_1| \leq j_{hD} \leq j_{cD} + 1 + l_1, \\ |j_{cA} - l_2| \leq j_{hA} \leq j_{cA} + 1 + l_2, \\ |j_{cD} - 1 - l_1| \leq j_{hD} \leq |j_{cD} - 1 + l_1|, \\ m_{cA} = m_{hA}, \\ m_{cD} = m_{hD}. \end{array} \right. \quad (3.58)$$

Перекрестный матричный элемент  $M_{ad}^{(2)} \neq 0$  при минимальных возможных значениях  $l_1 = 1$  и  $l_2 = 0$ . При этом согласно правилам отбора (3.58), суммы угловых моментов электронов и дырок как в доноре, так и в акцепторе должны быть четными числами. Дополнительные условия для значений угловых моментов донорных и акцепторных состояний, которые могут давать вклад в перенос энергии, определяются неравенствами в (3.58). При  $l_1 = 1$  и  $l_2 = 0$  из этих неравенств следует, что в переносе энергии могут участвовать только дипольно-разрешенные переходы и в доноре, и в акцепторе. Зависимость матричного элемента от расстояния между квантовыми точками, как это следует из выражения (3.94), имеет вид  $M_{ad}^{(2)} \sim 1/d^3$ . При больших значениях  $l_1$  и  $l_2$ , удовлетворяющих условию, когда  $l_1 + l_2$  — нечетное число,  $M_{ad}^{(2)}$  убывает с расстоянием, как  $1/d^5$ , или быстрее.

### 3.3.3. Матричный элемент обменного взаимодействия

В предыдущих параграфах рассматривался процесс безызлучательного переноса энергии между квантовыми точками без учета обменного взаимодействия. Однако для малых расстояний между донором и акцептором энергии должен быть также учтен вклад обменного взаимодействия, который определяется только пространственным перекрытием волновых функций электронов донора и акцептора. Вследствие этого обменное взаимодействие допускает перенос энергии для всех разрешенных и запрещенных переходов в доноре и акцепторе. При малых расстояниях между донором и акцептором скорость переноса в рамках обменного механизма может быть значительной в сравнении со скоростью переноса в рамках прямого кулоновского механизма. Когда прямой кулоновский перенос запрещен правилами отбора, роль обменного механизма становится определяющей. В работе [37] показано, что обменный вклад в скорость переноса энергии для типичной пары примесей, расположенной в соседних ячейках кристалла NaCl, составляет  $(10^{10} - 10^{11}) \text{ с}^{-1}$ , тогда как для кулоновского вклада получена величина  $(10^{12} - 10^{13}) \text{ с}^{-1}$ .

Поскольку в нашем случае явно выделена ось, соединяющая центры двух квантовых точек, решать задачу удобно в цилиндрической системе координат. Для вычисления обменного матричного элемента (3.14) следует перейти к координатам, отсчитываемым от одного центра, например от центра квантовой точки-акцептора. При этом координатная часть матричного элемента приобретает вид

$$M_{ex} = \int d^3 r'_1 \int d^3 r_2 \psi_{csD}(\mathbf{r}'_1 - \mathbf{d}) \psi_{csA}^*(\mathbf{r}'_1) \frac{e^2}{\varepsilon |\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}_2|} \times \quad (3.59)$$

$$\times \psi_{hD}^*(\mathbf{r}_2 - \mathbf{d}) \psi_{hA}(\mathbf{r}_2).$$

Рассматривая вклад обменного взаимодействия в перенос энергии, ограничились вычислением матричного элемента  $M_{ex}$  с первым членом волновой функции электронов  $\psi_s |s\rangle$  и с волновой функцией тяжелых дырок  $\psi_{h1} |\mathbf{p}\rangle$ , то есть здесь  $\psi_h |\mathbf{p}\rangle = \psi_{h1} |\mathbf{p}\rangle$ .

Чтобы упростить вычисления, для сферических функций и шаровых векторов в волновых функциях электронов и дырок были приняты их значения при  $\theta_1 = 0$  и  $\theta_2 = 0$ ,  $\theta'_1 = \pi$  и  $\theta'_2 = \pi$ , определяемые угловыми моментами и их проекциями

$$\begin{aligned}
Y_{jm}(0, \phi) &= \delta_{m0} \sqrt{\frac{2j+1}{4\pi}}, \\
Y_{jm}(\pi, \phi) &= (-1)^j \delta_{m0} \sqrt{\frac{2j+1}{4\pi}}, \\
\mathbf{Y}_{jm}^j(0, \phi) &= \begin{cases} -m \sqrt{\frac{2j+1}{8\pi}} \mathbf{e}_m, & \text{если } m = \pm 1, \\ 0 & \text{в остальных случаях,} \end{cases} \\
\mathbf{Y}_{jm}^j(\pi, \phi) &= (-1)^j \mathbf{Y}_{jm}^j(0, \phi).
\end{aligned} \tag{3.60}$$

Следует отметить, что такое приближение позволило вести расчет не для всех значений проекций углового момента на ось  $z$ . Допустимыми являются значения  $m_{cD} = m_{cA} = 0$  и  $m_{hD} = m_{hA} = \pm 1$ . При других значениях проекций угловых моментов необходимо более точное рассмотрение зависимостей  $Y_{jm}(\theta, \phi)$  и  $\mathbf{Y}_{jm}^j(\theta, \phi)$ . Радиальные части волновых функций электронов донора для трех областей (для области донора, под барьером и для области акцептора) могут быть записаны как

$$\begin{aligned}
\phi_{csD}(d - z'_1) &= A_{cD} j_{j_{cD}}(k_{cD}(d - z'_1)), & d - R_D \leq z'_1 \leq d, \\
\phi_{csD}(d - z'_1) &= B_{cD} k_{j_{cD}}(\kappa_{cD}(d - z'_1)), & R_A \leq z'_1 \leq d - R_D, \\
\phi_{csD}(d - z'_1) &= C_{cD} j_{j_{cD}}(k_{cD}(d - z'_1)), & 0 \leq z'_1 \leq R_A.
\end{aligned} \tag{3.61}$$

Граничные условия для этих функций имеют вид

$$\begin{aligned}
A_{cD} j_{j_{cD}}(k_{cD} R_D) &= B_{cD} k_{j_{cD}}(\kappa_{cD} R_D), \\
B_{cD} k_{j_{cD}}(\kappa_{cD}(d - R_A)) &= C_{cD} j_{j_{cD}}(k_{cD}(d - R_A)).
\end{aligned} \tag{3.62}$$

Аналогично могут быть представлены радиальные части волновых функций электронов акцептора, а также дырок донора и акцептора и граничные условия для этих функций.

Для рассматриваемой системы кулоновский потенциал в цилиндрической системе координат представляется выражением

$$\frac{e^2}{\varepsilon r} = \frac{e^2}{\varepsilon \sqrt{p^2 + z^2}}, \quad (3.63)$$

где  $r = |\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}_2|$ ,  $z = z'_1 - z_2$  и  $p^2 = \rho_1^2 + \rho_2^2 - 2\rho_1\rho_2 \cos(\varphi_1 - \varphi_2)$ . Далее может быть использована интегральная формула

$$\frac{1}{\sqrt{p^2 + z^2}} = \int_0^\infty e^{-q|z|} J_0(qp) dq. \quad (3.64)$$

Здесь  $J_0(qp)$  — функция Бесселя нулевого знака. Теперь матричный элемент (3.59) приобретает вид

$$\times \int_0^\infty dq \phi_{cD}(d - z'_1) \phi_{csA}^*(z'_1) \exp(-q|z'_1 - z_2|) J_0(qp) \phi_{hD}^*(d - z_2) \phi_{hA}(z_2), \quad (3.65)$$

где

$$S = (-1)^{j_{cD} + j_{hD} + m_{hD} + 1} \delta_{m_{cD}, 0} \sqrt{\frac{2j_{cD} + 1}{4\pi}} \delta_{m_{cA}, 0} \sqrt{\frac{2j_{cD} + 1}{4\pi}} \times \\ \times (\delta_{m_{hD}, 1} + \delta_{m_{hD}, -1}) \sqrt{\frac{2j_{hD} + 1}{8\pi}} \sqrt{\frac{2j_{hA} + 1}{8\pi}} \delta_{m_{hD}, m_{hA}}. \quad (3.66)$$

Использование теоремы сложения Графа [91] позволяет представить  $J_0(qp)$  как

$$J_0(qp) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(q\rho_1) J_n(q\rho_2) e^{in(\varphi_1 - \varphi_2)}, \quad (3.67)$$

где переменные  $\rho_1$ ,  $\rho_2$ ,  $\varphi_1$ ,  $\varphi_2$  разделяются. Подставляя (3.67) в (3.65), получаем матричный элемент в виде

$$M_{ex} \approx \frac{e^2}{\varepsilon} 4\pi^2 S \int \rho_1 d\rho_1 dz'_1 \int \rho_2 d\rho_2 dz_2 \times \\ \times \int_0^\infty dq \phi_{csD}(d - z'_1) \phi_{csA}^*(z'_1) \exp(-q|z'_1 - z_2|) J_0(q\rho_1) J_0(q\rho_2) \phi_{hD}^*(d - z_2) \phi_{hA}(z_2), \quad (3.68)$$

так как все интегралы по  $\varphi_1$  и  $\varphi_2$  равны нулю при всех  $n$ , кроме  $n = 0$ . Область интегрирования по  $\rho$  следует ограничить значениями  $\rho_{max}$ , для которых справедливо выбранное приближение для функций  $Y_{jm}(\theta, \phi)$  и  $\mathbf{Y}_{jm}^j$ , то есть должно

выполняться условие  $\rho_{max} \ll d$ . Для вычисления интегралов по  $\rho$  в (3.68) воспользуемся следующим представлением [91]:

$$\int_0^{\rho_{max}} \rho_{1(2)} J_0(q\rho_{1(2)}) d\rho_{1(2)} = \frac{\rho_{max}}{q} J_1(q\rho_{max}). \quad (3.69)$$

Тогда для обменного матричного элемента  $M_{ex}$  получаем

$$\begin{aligned} M_{ex} \approx & \frac{e^2}{\varepsilon} 4\pi^2 S \rho_{max}^2 \int_0^{\infty} \frac{dq}{q^2} J_1^2(q\rho_{max}) \times \\ & \times \int dz'_1 \int dz_2 \phi_{csD}(d - z'_1) \phi_{csA}^*(z'_1) e^{-q|z'_1 - z_2|} \phi_{hD}^*(d - z_2) \phi_{hA}(z_2). \end{aligned} \quad (3.70)$$

В (3.70) можно выполнить интегрирование по  $q$  [92]:

$$\begin{aligned} & \int_0^{\infty} \frac{dq}{q^2} J_1^2(q\rho_{max}) \exp(-q|z'_1 - z_2|) = \\ & = \rho_{max} \left\{ \frac{4}{3\pi} (\eta^2 + 1)^{1/2} \left[ \eta^2 K \left( (\eta^2 + 1)^{-1/2} \right) + (1 - \eta^2) E \left( (\eta^2 + 1)^{-1/2} \right) \right] - \eta \right\}. \end{aligned} \quad (3.71)$$

Здесь  $\eta = |z'_1 - z_2|/(2\rho_{max})$ ,  $K(\xi)$ ,  $E(\xi)$  — полные эллиптические интегралы 1-го и 2-го рода. Введем следующие величины:

$$\begin{aligned} P(\eta_{1(2)}^2) = & \rho_{max} \left\{ \frac{4}{3\pi} (\eta_{1(2)}^2 + 1)^{1/2} \times \right. \\ & \times \left. \left[ \eta_{1(2)}^2 K \left( (\eta_{1(2)}^2 + 1)^{-1/2} \right) + (1 - \eta_{1(2)}^2) E \left( (\eta_{1(2)}^2 + 1)^{-1/2} \right) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (3.72)$$

где  $\eta_1 = (z'_1 - z_2)/(2\rho_{max})$  при  $z'_1 > z_2$  и  $\eta_2 = (z_2 - z'_1)/(2\rho_{max})$  при  $z'_1 < z_2$ .

Теперь выражение для матричного элемента (3.70) может быть переписано в

виде

$$\begin{aligned}
M_{ex} \approx & \frac{e^2}{\varepsilon} 4\pi^2 S \rho_{max}^3 \left[ \int_0^{R_A} \phi_{csD}^*(d - z'_1) \phi_{csA}(z'_1) dz'_1 + \right. \\
& + \int_{R_A}^{d-R_D} \phi_{csD}(d - z'_1) \phi_{csA}^*(z'_1) dz'_1 + \\
& \left. + \int_{d-R_D}^d \phi_{csD}(d - z'_1) \phi_{csA}^*(z'_1) dz'_1 \right] \times \\
& \times \left[ \int_0^{z'_1} \phi_{hD}^*(d - z_2) \phi_{hA}(z_2) (P(\eta_1^2) - \eta_1) dz_2 + \right. \\
& \left. + \int_{z'_1}^d \phi_{hD}^*(d - z_2) \phi_{hA}(z_2) (P(\eta_2^2) - \eta_2) dz_2 \right]. \tag{3.73}
\end{aligned}$$

Тогда матричный элемент может быть представлен в виде

$$M_{ex} \approx \frac{e^2}{\varepsilon} 4\pi^2 S \rho_{max}^3 [J_1 + J_2 + J_3]. \tag{3.74}$$

Выражения для  $J_1$ ,  $J_3$  и  $J_2$  содержат вклады, отвечающие интегрированию по области акцептора, донора, а также по области между донором и акцептором и приведены в приложении В. Для расстояний между квантовыми точками, близких к контактным, можно полагать вклад последней области малым по сравнению с вкладами областей квантовых точек. Для частного случая одинаковых квантовых точек, в силу симметрии системы, численное значение  $J_3$  равно численному значению  $J_1$ . Тогда для расстояний, близких к контактным, матричный элемент может быть записан как

$$M_{ex} \approx \frac{e^2}{\varepsilon} 4\pi^2 S \rho_{max}^3 2J_1. \tag{3.75}$$

Анализ показывает, что  $J_1$  (приложение В, формула (3.100)) зависит от расстояния  $d$  между донором и акцептором энергии как

$$J_1 \sim (kd)^{-2} \exp(-\kappa(d - 2R)). \tag{3.76}$$

Это выражение для  $J_1$  получено для значений полного углового момента  $j_{cD} = j_{hD} = 1$  и  $j_{cA} = j_{hA} = 1$ . Для переходов между уровнями с другими значениями полных угловых моментов зависимость  $J_1$  от расстояния  $d$  будет иметь такой же вид. В результате зависимость матричного элемента обменного взаимодействия от расстояния  $\mathbf{d}$  определяется выражениями (3.75) и (3.100) (см. приложение В). В итоге матричный элемент обменного взаимодействия как функция расстояния  $d$  изменяется по закону

$$M_{ex} \sim \frac{e^2}{\varepsilon} 4\pi^2 S \rho_{max}^3 (kd)^{-2} \exp(-\kappa(d - 2R)). \quad (3.77)$$

Здесь была выделена только зависимость матричного элемента от расстояния  $d$  между квантовыми точками, так как она является основной характеристикой процесса переноса энергии.

### 3.4. Скорость резонансного переноса энергии

Теперь перейдем к рассмотрению вопроса о вычислении скорости безызлучательного резонансного переноса энергии между квантовыми точками. Рассматриваем перенос энергии от квантовой точки-донора (D) к квантовой точке-акцептору (A).

В дальнейшем мы будем интересоваться процессом переноса энергии в системе, когда передача энергии от квантовой точки-донора к квантовой точке-акцептору носит необратимый характер и связана с процессами релаксации возбужденных состояний. Для описания процессов переноса энергии в квантовомеханической системе с диссипацией удобно использовать формализм матрицы плотности, который дает возможность феноменологически учесть как релаксационные процессы внутри системы, так и взаимодействие квантовой системы с ее окружением [34, 76]. Уравнение для матрицы плотности  $\hat{\rho}$  в нашем случае

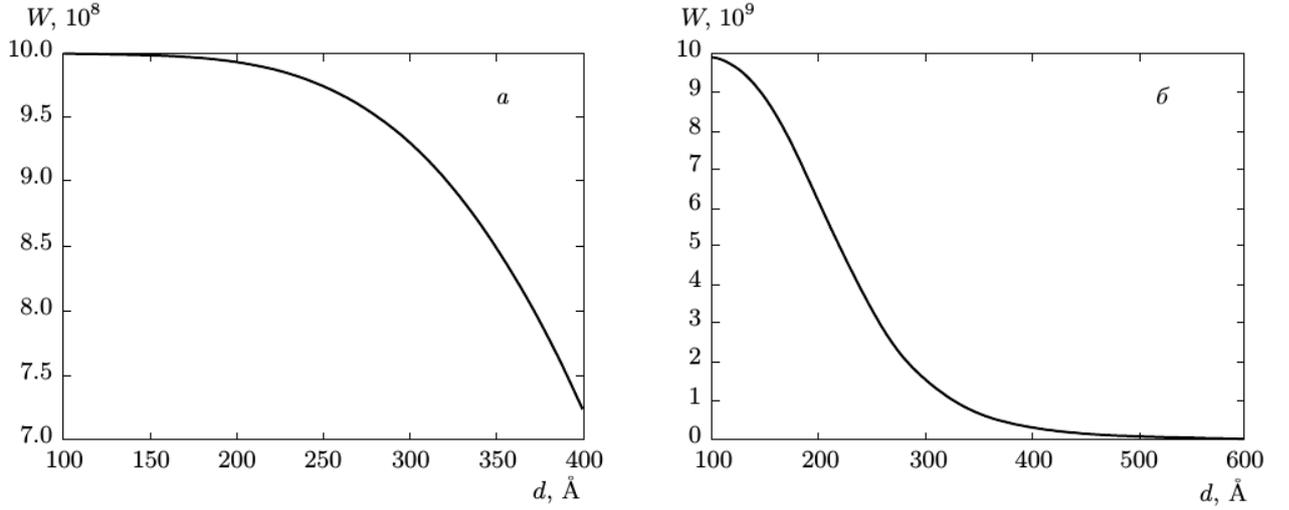


Рис. 3.3. Зависимость скорости безызлучательного резонансного переноса энергии от расстояния между квантовыми точками. Вычисление выполнено для перехода в доноре и акцепторе с квантовыми числами  $n_c = n_h = 1$  для волновой функции тяжелой дырки второй поляризации для основного перехода с  $\psi_{h2}$ . Для расчета принимались следующие параметры  $R_D = R_A = 3$  нм,  $V_c = V_v = 0,52$  эВ,  $E_g = 0,38$  эВ,  $m_c = 0,03m_0$ ,  $m_h = 0,5m_0$ ,  $\tau_A = 10^{-9}$  с (а),  $\tau_A = 10^{-10}$  с (б).  $M_{coul}^{(2)}$  вычислен для значений углового момента и его проекции  $(0,0), (1,0)$

имеет следующий вид [34, 93]:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \rho_{jj}}{\partial t} &= [M_c, \rho]_{jj} + \frac{i\hbar}{T_1} (\rho_{jj}^e - \rho_{jj}), \\ i\hbar \frac{\partial \rho_{ij}}{\partial t} &= (E_i - E_j) \rho_{ij} + [M_c, \rho]_{ij} - \frac{i\hbar}{T_2} \rho_{ij}. \end{aligned} \quad (3.78)$$

Здесь  $M_c$  — матричный элемент кулоновского взаимодействия между квантовыми точками,  $\rho_{ii}$  — диагональные элементы матрицы плотности,  $\rho_{ij}$  — недиагональные элементы,  $\rho_{jj}^e$  — равновесное значение диагонального элемента матрицы плотности,  $T_1$  — "продольное" время релаксации диагональных элементов матрицы плотности (это время излучательных и безызлучательных переходов между уровнями, определяющее населенность состояний),  $T_2$  — "поперечное" время, которое характеризует релаксацию недиагональных элементов матрицы плотности,  $E_i - E_j$  — разность энергий между начальным и возбужденным состояниями.

Рассмотрим матрицу плотности для следующих состояний (донора и ак-

цептора):

$$|1\rangle = \psi'_D \psi_A, |2\rangle = \psi_D \psi'_A, |3\rangle = \psi_D \psi_A. \quad (3.79)$$

Здесь штрих относится к возбужденному состоянию донора и акцептора соответственно. Состояние  $|3\rangle$ , когда обе квантовые точки находятся в основном состоянии (не возбуждены), необходимо для сохранения нормировки  $\rho_{11} + \rho_{22} + \rho_{33} = 1$ . В нашем случае (комнатная температура) ширина запрещенной зоны квантовой точки-донора и квантовой точки-акцептора  $E_g^{D,A} \gg k_B T$  ( $k_B$  — постоянная Больцмана,  $T$  — абсолютная температура). Тогда очевидно, что равновесные значения диагональных элементов матрицы плотности равны  $\rho_{11}^e = \rho_{22}^e = 0$ ,  $\rho_{33}^e = 1$ . В результате из (3.78) получаем систему уравнений для элементов матрицы плотности [34]

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho_{11}}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} ((M_c)_{12} \rho_{21} - (M_c)_{21} \rho_{12}) - \frac{\rho_{11}}{\tau_D}, \\ \frac{\partial \rho_{22}}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} ((M_c)_{21} \rho_{12} - (M_c)_{12} \rho_{21}) - \frac{\rho_{22}}{\tau_A}, \\ \frac{\partial \rho_{12}}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} (M_c)_{12} (\rho_{22} - \rho_{11}) - \frac{\rho_{12}}{T_2} + \frac{\Delta E}{i\hbar} \rho_{12}, \\ \frac{\partial \rho_{21}}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} (M_c)_{21} (\rho_{11} - \rho_{22}) - \frac{\rho_{21}}{T_2} - \frac{\Delta E}{i\hbar} \rho_{21}. \end{cases} \quad (3.80)$$

Здесь  $\Delta E = E_g^A - E_g^D$  (расстройка резонанса),  $\tau_D$  и  $\tau_A$  — продольное время релаксации для донора и акцептора. Время поперечной релаксации для двух взаимодействующих квантовых точек (D и A) связано с полуширинами уровней в доноре и акцепторе  $\Gamma_D$  и  $\Gamma_A$  следующим образом:  $\frac{2}{T_2} = \frac{\Gamma_D}{\hbar} + \frac{\Gamma_A}{\hbar}$ . Проанализируем систему уравнений (3.80), следуя работе [34]. Во-первых, общее решение системы (3.80) имеет характер затухающих осцилляций. Во-вторых, возбужденный донор может "сбросить" энергию (т. е. релаксировать с характерным временем  $\tau_l$ ) благодаря двум процессам: излучательной рекомбинации  $1/\tau_D$  или переносу энергии к акцептору, т. е.

$$\frac{1}{\tau_l} \equiv \left[ \int_0^\infty \rho_{11}(t) dt \right]^{-1} = \frac{1}{\tau_D} + \overline{W}, \quad (3.81)$$

где  $\overline{W}$  можно рассматривать как обобщенную вероятность переноса энергии от донора к акцептору. Далее решим систему уравнений (3.80) методом, предложенным в работе [94]. Для этого проведем преобразование Лапласа над компонентами матрицы плотности

$$f_{ij}(s) = \mathcal{L}(\rho_{ij}) = \int_0^{\infty} \exp(-st) \rho_{ij}(t) dt, \quad \int_0^{\infty} \exp(-st) \frac{\partial \rho_{ij}}{\partial t} dt = s f_{ij}(s) - \rho_{ij}(0). \quad (3.82)$$

В результате преобразований Лапласа система уравнений (3.80) принимает вид

$$\begin{cases} s f_{11} - \rho_{11}(0) = \frac{1}{i\hbar} ((M_c)_{12} f_{21} - (M_c)_{21} f_{12}) - \frac{f_{11}}{\tau_D}, \\ s f_{22} - \rho_{22}(0) = \frac{1}{i\hbar} ((M_c)_{21} f_{12} - (M_c)_{12} f_{21}) - \frac{f_{22}}{\tau_A}, \\ s f_{12} - \rho_{12}(0) = \frac{1}{i\hbar} (M_c)_{12} (f_{22} - f_{11}) - \frac{f_{12}}{T_2} + \frac{\Delta E}{i\hbar} f_{12}, \\ s f_{21} - \rho_{21}(0) = \frac{1}{i\hbar} (M_c)_{21} (f_{11} - f_{22}) - \frac{f_{21}}{T_2} - \frac{\Delta E}{i\hbar} f_{21}. \end{cases} \quad (3.83)$$

Следует заметить, что, согласно (3.81) и (3.82), обобщенную вероятность можно представить в виде

$$\overline{W} = -\frac{1}{\tau_D} + f_{11}^{-1}(0), \quad (3.84)$$

где

$$f_{11}^{-1}(0) = \int_0^{\infty} \rho_{11}(t) dt. \quad (3.85)$$

Полагая в (3.83)  $s=0$ , учитывая начальные условия  $\rho_{11}(0) = 1$  и  $\rho_{ij}(0) = 0$ , при  $i \neq 1$  или  $j \neq 1$  получаем следующее решение:

$$f_{11}^{-1}(0) = \left[ \int_0^{\infty} \rho_{11}(t) dt \right]^{-1} = \frac{1}{\tau_D} + \frac{2|(M_c)_{12}|^2 T_2 / \hbar^2}{1 + \left(\frac{T_2 \Delta E}{\hbar}\right)^2 + \frac{2|(M_c)_{12}|^2}{\hbar^2} T_2 \tau_A}. \quad (3.86)$$

В результате для обобщенной вероятности переноса  $\overline{W}$  получаем

$$\overline{W} = \frac{2|(M_c)_{12}|^2 T_2 / \hbar^2}{1 + \left(\frac{T_2 \Delta E}{\hbar}\right)^2 + \frac{2|(M_c)_{12}|^2}{\hbar^2} T_2 \tau_A}. \quad (3.87)$$

Для анализа полученного решения и выяснения физического смысла рассмотрим ряд конкретных случаев [34].

Случай малого расстояния между квантовыми точками, когда взаимодействие между ними велико, так что

$$|M_c| \gg \frac{\hbar}{\tau_D}, \frac{\hbar}{\tau_A}, \frac{\hbar}{T_2}. \quad (3.88)$$

В этом случае решение (3.80) для  $\rho_{11}$  (при  $\Delta E = 0$ ) осциллирует с частотой  $\Omega = \frac{2|M_c|}{\hbar}$  и в системе происходит "перекачка" энергии от донора к акцептору и обратно. В этом предельном случае обобщенная вероятность  $\widehat{W}$  стремится к  $1/\tau_A$ , т. е. скорость переноса энергии определяется скоростью перехода акцептора из возбужденного состояния в основное (см. рис. 3.3). Результаты расчета для  $\Omega$  для разных случаев представлены в табл. 3.1 и 3.2.

Зависимость обобщенной вероятности переноса энергии  $\overline{W}$  (расчитанная по формуле (3.87)) от расстояния между квантовыми точками представлена на рис. 3.3 (а,б) для двух значений  $\tau_A$ . Чем больше значение времени жизни акцептора, тем больше расстояние между квантовыми точками, при котором происходит насыщение обобщенной вероятности  $\overline{W}$ .

При слабом взаимодействии между квантовыми точками, когда  $\frac{2|M_c|^2}{\hbar^2} T_2 \tau_A \ll 1$ , согласно (3.87), получаем

$$\overline{W} = W = \frac{2|(M_c)_{12}|^2 T_2 / \hbar^2}{1 + \left(\frac{T_2 \Delta E}{\hbar}\right)^2}. \quad (3.89)$$

В этом случае перенос энергии от донора к акцептору является необратимым процессом и величина  $W$  соответствует истинной скорости переноса энергии в единицу времени. Следует отметить, что выражение (3.89) может быть получено в рамках обычной теории возмущений. Выражение (3.89) может быть переписано в виде

$$W = \frac{2\pi}{\hbar} |(M_c)_{12}|^2 \rho_f, \quad (3.90)$$

где

$$\rho_f = \frac{1}{\pi} \frac{T_2 / \hbar}{1 + \frac{(T_2 \Delta E)^2}{\hbar^2}}. \quad (3.91)$$

Выше были вычислены матричные элементы кулоновского взаимодействия, соответствующие двум поляризациям тяжелых дырок  $M_{coul}^{(1)}$  (3.37) и  $M_{coul}^{(2)}$  (3.49),

матричные элементы, связанные с подмешиванием состояний валентной зоны к состояниям зоны проводимости  $M_{ad}^{(1)}$  (3.55),  $M_{ad}^{(2)}$  (3.57) и  $M_{ad}^{(3)}$ , а также обменный матричный элемент  $M_{ex}$  (3.75). Соответственно этому, их вклады в скорость переноса энергии принимают вид

$$W_{D \rightarrow A}^{(\alpha)} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\alpha} |(M_c)_{12}^{(\alpha)}|^2 \rho_f, \quad (3.92)$$

где  $(M_c)_{12}^{(\alpha)}$  обозначает один из перечисленных матричных элементов для перехода системы из состояния 1 в состояние 2. Переходы, участвующие в переносе энергии, определены соответствующими правилами отбора. Поскольку все эти вклады независимы, полная скорость переноса энергии от квантовой точки-донора к квантовой точке-акцептору представляется выражением (3.92).

В численных расчетах для времени жизни электрона в основном состоянии зоны проводимости принято значение  $\tau_{DA} = 10^{-9}$  с [95]. Экспериментальные значения этой величины приводятся в ряде работ. В [96] получено значение времени жизни  $\tau = 882$  пс. Это близко к значению времени жизни излучательной рекомбинации  $\tau = 0.7$  нс, полученному в работе [1]. Время жизни электрона в возбужденном состоянии зоны проводимости меньше вследствие внутризонной релаксации. Для возбужденных состояний было принято значение  $\tau = 10^{-11}$  с [54].

Результаты численных расчетов в скорости переноса энергии, согласно (3.92), представлены в табл. 3.3 и 3.4. Расчеты были выполнены для квантовых точек InAs в матрице GaAs с  $R_D = R_A = 3$  нм при  $V_c = V_v = 0,52$  эВ,  $E_g = 0,38$  эВ,  $m_c = 0,03m_0$ ,  $m_h = 0,5m_0$  и  $\tau = 10^{-9}$  с для основного состояния и  $\tau = 10^{-11}$  с для возбужденных уровней.

Кроме того, рассмотрим еще один предельный случай, когда время релаксации в доноре много больше времени релаксации в акцепторе ( $\tau_D \gg \tau_A$ ). Тогда становится применимой теория возмущений (3.92). В этом случае перенос энергии также является необратимым процессом. Для этого необходимо выполнение условия совпадения резонансов переходов в доноре и акцепторе с разными кван-

товыми числами. Такой расчет был проделан, и для  $R_d = 3$  нм было получено ненулевое значение скорости переноса при  $R_a = 4,36$  нм. В этом случае квантовые числа принимают следующие значения:  $n_{cd} = 1$ ,  $l_{cd} = 0$ ,  $m_{cd} = 0$ ,  $n_{hd} = 1$ ,  $l_{hd} = 1$ ,  $m_{hd} = 0$ ; и для акцептора  $n_{ca} = 1$ ,  $l_{ca} = 0$ ,  $m_{ca} = 0$ ,  $n_{ha} = 2$ ,  $l_{ha} = 1$ ,  $m_{ha} = 0$ . Для этих квантовых чисел и для наших параметров было получено  $W_{coul}^{(2)} = 7,050 \cdot 10^9$ . В этом случае вероятность переноса  $W \ll \frac{\hbar}{\tau_A}$ , но  $W \gg \frac{\hbar}{\tau_D}$ . Таким образом, теория возмущений становится применимой, и достигается высокая эффективность процесса переноса энергии.

Отметим, что все матричные элементы в нашей работе были найдены на основании модели Кейна, не учитывающей спин-орбитальное взаимодействие. В работах [26, 67] было показано, что включение в модель Кейна спин-орбитального взаимодействия приводит к умножению скорости оже-рекомбинации на функцию  $F(\Delta_{SO}/E_g)$ , где  $\Delta_{SO}$  — константа спин-орбитального взаимодействия. Вычисления показали, что при любых соотношениях между  $\Delta_{SO}$  и  $E_g$  функция  $F(\Delta_{SO}/E_g)$  меняется мало, имея максимальное значение  $F(\Delta_{SO}/E_g) = 1$  и минимальное —  $F(\Delta_{SO}/E_g) = 0,9$ . Поскольку скорость переноса энергии определяется матричными элементами, подобными тем, что определяют скорость оже-рекомбинации, такой же множитель должен появиться в выражении для скорости переноса энергии при включении в уравнения Кейна спин-орбитального взаимодействия.

### 3.5. Обсуждение результатов

Детально рассмотрены переходы в доноре и акцепторе, вклады которых в скорость переноса энергии убывают с расстоянием  $d$  не быстрее, чем  $1/d^8$ , для системы двух квантовых точек с равными радиусами  $R_D = R_A$ . Матричные элементы переноса энергии, вычисленные с волновой функцией тяжелых дырок  $\psi_{h1}$  и с волновой функцией электронов  $s$ -симметрии (без учета подмешивания), а также с учетом подмешивания  $p$ -симметрии в волновой функции до-

Квантовые числа		$\Omega, c^{-1}$
$(n_{cD}, j_{cD}, m_{cD}), (n_{hD}, j_{hD}, m_{hD})$	$(n_{cA}, j_{cA}, m_{cA}), (n_{hA}, j_{hA}, m_{hA})$	
(1,1,1),(1,1,1)	(1,1,1),(1,1,1)	$1,268 \cdot 10^{11}$
(1,1,1),(2,1,1)	(1,1,1),(2,1,1)	$2,022 \cdot 10^{10}$

Таблица 3.1. Частота  $\Omega$ , вычисленная с матричным элементом  $M_{coul}^{(1)}$  в предельном случае малых расстояний. Для расчета используются следующие параметры:  $R_D = R_A = 3$  нм,  $d = 16$  нм,  $V_c = V_v = 0,52$  эВ,  $E_g = 0,38$  эВ,  $m_c = 0,03m_0$ ,  $m_h = 0,5m_0$ .

Квантовые числа		$\Omega, c^{-1}$
$(n_{cD}, j_{cD}, m_{cD}), (n_{hD}, j_{hD}, m_{hD})$	$(n_{cA}, j_{cA}, m_{cA}), (n_{hA}, j_{hA}, m_{hA})$	
(1,0,0),(1,1,0)	(1,0,0),(1,1,0)	$1,773 \cdot 10^{10}$
(1,1,1),(1,2,1)	(1,1,1),(1,2,1)	$5,932 \cdot 10^9$
(1,1,0),(1,2,0)	(1,1,0),(1,2,0)	$7,909 \cdot 10^9$
(1,0,0),(2,1,0)	(1,0,0),(2,1,0)	$2,514 \cdot 10^9$

Таблица 3.2. Частота  $\Omega$ , вычисленная с матричным элементом  $M_{coul}^{(2)}$  в предельном случае малых расстояний. Для расчета используются следующие параметры:  $R_D = R_A = 3$  нм,  $d = 16$  нм,  $V_c = V_v = 0,52$  эВ,  $E_g = 0,38$  эВ,  $m_c = 0,03m_0$ ,  $m_h = 0,5m_0$ .

Квантовые числа		$\mathbf{W}, c^{-1}$
$(n_{cD}, j_{cD}, m_{cD}), (n_{hD}, j_{hD}, m_{hD})$	$(n_{cA}, j_{cA}, m_{cA}), (n_{hA}, j_{hA}, m_{hA})$	
(1,1,1),(1,1,1)	(1,1,1),(1,1,1)	$1,385 \cdot 10^9$
(1,1,1),(2,1,1)	(1,1,1),(2,1,1)	$3,526 \cdot 10^7$

Таблица 3.3. Скорость безызлучательного переноса энергии, вычисленная с матричным элементом  $M_{coul}^{(1)}$ . Для расчета используются следующие параметры:  $R_D = R_A = 3$  нм,  $d = 48$  нм,  $V_c = V_v = 0,52$  эВ,  $E_g = 0,38$  эВ,  $m_c = 0,03m_0$ ,  $m_h = 0,5m_0$ .

Квантовые числа		$W, c^{-1}$
$(n_{cD}, j_{cD}, m_{cD}), (n_{hD}, j_{hD}, m_{hD})$	$(n_{cA}, j_{cA}, m_{cA}), (n_{hA}, j_{hA}, m_{hA})$	
(1,0,0),(1,1,0)	(1,0,0),(1,1,0)	$4,632 \cdot 10^8$
(1,1,1),(1,2,1)	(1,1,1),(1,2,1)	$3,032 \cdot 10^6$
(1,1,0),(1,2,0)	(1,1,0),(1,2,0)	$5,390 \cdot 10^6$
(1,0,0),(2,1,0)	(1,0,0),(2,1,0)	$5,447 \cdot 10^5$

Таблица 3.4. Скорость безызлучательного переноса энергии, вычисленная с матричным элементом  $M_{coul}^{(2)}$ . Для расчета используются следующие параметры:  $R_D = R_A = 3$  нм,  $d = 48$  нм,  $V_c = V_v = 0,52$  эВ,  $E_g = 0,38$  эВ,  $m_c = 0,03m_0$ ,  $m_h = 0,5m_0$ .

нора (акцептора), определяют дипольно-разрешенные и дипольно-запрещенные переходы в доноре и акцепторе, вклады которых в скорость переноса энергии  $W_{coul}^{(1)}$ ,  $W_{ad}^{(2)}$  и  $W_{ad}^{(3)}$  имеют зависимость от расстояния  $d$  вида  $1/d^6$ . Вклад в скорость переноса энергии, определяемый волновой функцией тяжелых дырок  $\psi_{h2}$  и волновой функцией электронов  $s$ -симметрии  $W_{coul}^{(2)}$  в случае  $R_D = R_A$  отличен от нуля только для дипольно-запрещенных переходов. Для него скорость переноса пропорциональна  $1/d^6$ . Для квантовых точек при  $R_D \neq R_A$  возможен перенос энергии, вовлекающий дипольно-запрещенные состояния с зависимостью скорости переноса от  $d$  вида  $1/d^8$ . Вклад,  $W_{ad}^{(1)}$ , определяемый подмешиванием  $p$ -состояний валентной зоны к  $s$ -состояниям зоны проводимости как для донора, так и для акцептора, согласно правилам отбора, может быть отличен от нуля только тогда, когда радиусы донора и акцептора различны. Скорость переноса в этом случае зависит от расстояния, как  $1/d^8$ . Получено, что наибольший вклад в скорость переноса энергии вносят основные переходы в доноре и акцепторе. На рис. 3.3 (а,б) представлена зависимость скорости прямого кулоновского вклада, вычисленного с участием волновой функции  $\psi_{h2}$ . Расчет проводился по общей формуле вне рамок приближения теории возмущений для двух времен релаксации в акцепторе  $\tau_A = 10^{-9}$  с и  $\tau_A = 10^{-10}$  с. Следует отметить, что практически важным являются вклады, для которых скорость переноса энергии

превышает скорость релаксации возбужденного состояния электрона в доноре. Выполнен численный расчет вероятности переноса энергии между квантовыми точками разных размеров. Наряду с вкладом в матричный элемент от прямого кулоновского переноса энергии между квантовыми точками, был вычислен вклад от механизма обменного переноса. Получено аналитическое выражение для матричного элемента обменного взаимодействия между квантовыми точками одинакового радиуса  $R_D = R_A$  с участием волновой функции тяжелых дырок  $\psi_{h1}$  и волновой функции электронов, не учитывающей подмешивание  $s$ - и  $p$ -состояний. Показано, что для обменного взаимодействия скорость переноса энергии зависит от расстояния  $d$  между центрами квантовых точек по степенному закону  $1/d^4$  при малых расстояниях и приобретает экспоненциальный характер с увеличением  $d$ . Следовательно, для количественного описания процесса безызлучательного переноса энергии должен приниматься во внимание обменный вклад.

### 3.6. Заключение

В работе в рамках модели Кейна выполнен микроскопический анализ механизмов переноса энергии между сферическими квантовыми точками (донором и акцептором). Показано, что учет подмешивания  $p$ -состояний к  $s$ -состояниям зоны проводимости приводит к появлению дополнительных вкладов в скорость переноса энергии по сравнению с теми, которые были получены при использовании других теоретических подходов [18–21]. Получены выражения для матричных элементов переноса энергии вследствие прямого кулоновского взаимодействия электронов донора и акцептора как для дипольно-разрешенных, так и для дипольно-запрещенных межзонных переходов в доноре и акцепторе. Численные расчеты были выполнены для донора и акцептора как с одинаковыми, так и с разными радиусами. Показано, что наибольшим вкладом в скорость переноса энергии является вклад основного перехода в доноре и акцепторе. В

работе выполнен также анализ скорости переноса энергии вследствие обменного взаимодействия электронов донора и акцептора. Численный расчет показал, что при малых расстояниях между донором и акцептором вклад обменного взаимодействия в скорость переноса энергии того же порядка, что и наибольший вклад подмешивания состояний. Следовательно, при количественном описании процесса переноса энергии он тоже должен приниматься во внимание. Впервые была проанализирована зависимость скорости переноса энергии от высоты гетербарьеров для электронов и дырок в доноре и акцепторе.

Безызлучательный перенос энергии между донором и акцептором, конъюгированными с биомолекулами, широко используется в медицинских и биологических экспериментах. Применение полупроводниковых квантовых точек в качестве доноров и акцепторов увеличивает возможности экспериментов [55]. Высокая чувствительность скорости переноса к изменению расстояния между донором и акцептором энергии позволяет детектировать образование комплексов антиген-антитело, фермент-субстрат, гибридизацию ДНК, а также изучать структуру и динамику биомолекул там, где необходимы измерения малых расстояний в пределах одной молекулы [55], [97–99]. Данные таких исследований имеют большое значение для диагностики и терапии ряда заболеваний, в том числе онкологических [100], см. также литературу в [55]. Развитие адекватной теории переноса энергии, учитывающей как прямое кулоновское взаимодействие электронов донора и акцептора, так и их обменное взаимодействие, необходимо для корректной интерпретации экспериментальных данных.

## Приложение А. Интеграл перекрытия в матричном элементе, связанном с подмешиванием состояний.

Интеграл в выражении  $M_{ad}^{(1)}$  (3.55) имеет вид

$$\begin{aligned}
I_{ad}^{(1)} &= \frac{1}{\sqrt{(2j_{cD} + 1)(2j_{hD} + 1)}} \frac{1}{\sqrt{(2j_{cA} + 1)(2j_{hA} + 1)}} \times \\
&\times \sum_{l_1=0}^{\infty} \sum_{l_2=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\frac{l_1+l_2+1}{2})}{\Gamma(l_1 + 3/2)\Gamma(l_2 + 3/2)\Gamma(1 - \frac{l_1+l_2}{2})} \int_0^{R_D} r_1^2 dr_1 \sum_{\mu_1=-1}^1 (i)^{l_1} (2l_1 + 1) \times \\
&\times \left\{ \sqrt{(j_{cD} + 1)(2j_{cD} + 3)} j_{j_{cD}+1}(k_{cD}r_1) j_{j_{hD}}(k_{hD}r_1) \times \right. \\
&\times \sqrt{j_{cD}(2j_{cD} - 1)} j_{j_{cD}-1}(k_{cD}r_1) j_{j_{hD}}(k_{hD}r_1) \times \\
&\times \int_0^{R_A} r_2^2 dr_2 \sum_{\mu_2=-1}^1 (-i)^{l_2} (2l_2 + 1) \times \\
&\times \left\{ \sqrt{(j_{cA} + 1)(2j_{cA} + 3)} j_{j_{cA}+1}(k_{cA}r_2) j_{j_{hA}}(k_{hA}r_2) \times \right. \\
&\times C_{j_{cA}+1, m_{cA}+\mu_2, 1, -\mu_2}^{j_{cA}, m_{cA}} C_{j_{hA}, -m_{hA}-\mu_2, 1, \mu_2}^{j_{hA}, -m_{hA}} C_{j_{cA}+1, 0, l_2, 0}^{j_{hA}, 0} C_{j_{cA}+1, m_{cA}+\mu_2, l_2, 0}^{j_{hA}, m_{hA}+\mu_2} + \\
&+ \sqrt{j_{cA}(2j_{cA} - 1)} j_{j_{cA}}(k_{cA}r_2) j_{j_{hA}}(k_{hA}r_2) \times \\
&\times \left. C_{j_{cA}-1, m_{cA}+\mu_2, 1, -\mu_2}^{j_{cA}, m_{cA}} C_{j_{hA}, -m_{hA}-\mu_2, 1, \mu_2}^{j_{hA}, -m_{hA}} C_{j_{cA}-1, 0, l_2, 0}^{j_{hA}, 0} C_{j_{cA}-1, m_{cA}+\mu_2, l_2, 0}^{j_{hA}, m_{hA}+\mu_2} \right\} \times \\
&\times \left( \frac{r_1}{d} \right)^{l_1} \left( \frac{r_2}{d} \right)^{l_2} F_4 \left( \frac{l_1 + l_2}{2}, \frac{l_1 + l_2 + 1}{2}; l_1 + 3/2, l_2 + 3/2; \left( \frac{r_1}{d} \right)^2, \left( \frac{r_2}{d} \right)^2 \right).
\end{aligned} \tag{3.93}$$

Интеграл, связанный с перекрестным членом, имеет вид

$$\begin{aligned}
I_{ad}^{(2)} &= i \sqrt{\frac{2j_{cA} + 1}{2j_{hA} + 1}} \frac{1}{\sqrt{(2j_{cD} + 1)(2j_{hD} + 1)}} \times \\
&\times \int_0^{R_D} dr_1 r_1^2 \sum_{\mu=-1}^1 \sum_{l_1=1}^{\infty} (i)^{l_1} (2l_1 + 1) \left\{ \sqrt{(j_{cD} + 1)(2j_{cD} + 3)} j_{j_{cD}+1}(k_{cD}r_1) j_{j_{hD}}(k_{hD}r_1) \times \right. \\
&\times C_{j_{cD}+1, m_{cD}+\mu, 1, -\mu}^{j_{cD}, m_{cD}} C_{j_{hD}, -m_{hD}-\mu, 1, \mu}^{j_{hD}, -m_{hD}} C_{j_{cD}+1, 0, l_1, 0}^{j_{hD}, 0} C_{j_{cD}+1, m_{cD}+\mu, l_1, 0}^{j_{hD}, m_{hD}+\mu} + \\
&+ \sqrt{j_{cD}(2j_{cD} - 1)} j_{j_{cD}-1}(k_{cD}r_1) j_{j_{hD}}(k_{hD}r_1) \times \\
&\times \left. C_{j_{cD}-1, m_{cD}+\mu, 1, -\mu}^{j_{cD}, m_{cD}} C_{j_{hD}, -m_{hD}-\mu, 1, \mu}^{j_{hD}, -m_{hD}} C_{j_{cD}-1, 0, l_1, 0}^{j_{hD}, 0} C_{j_{cD}-1, m_{cD}+\mu, l_1, 0}^{j_{hD}, m_{hD}+\mu_1} \right\} \times \\
&\times \int_0^{R_A} dr_2 r_2^2 j_{j_{hA}}(k_{hA}r_2) j_{j_{cA}}(k_{cA}r_2) \sum_{l_2=0}^{\infty} (-i)^{l_2} (2l_2 + 1) C_{j_{hA}, -m_{hA}, 1, 0}^{j_{hA}, -m_{hA}} C_{j_{cA}, 0, l_2, 0}^{j_{hA}, 0} C_{j_{cA}, m_{cA}, l_2, 0}^{j_{hA}, m_{hA}} \times \\
&\times \left( \frac{r_1}{d} \right)^{l_1} \left( \frac{r_2}{d} \right)^{l_2} \frac{\Gamma(\frac{l_1+l_2+3}{2})}{\Gamma(l_1 + 3/2) \Gamma(l_2 + 3/2) \Gamma(1 - \frac{l_1+l_2}{2})} \times \\
&\times F_4\left(\frac{l_1 + l_2}{2}, \frac{l_1 + l_2 + 3}{2}; l_1 + 3/2, l_2 + 3/2; \left(\frac{r_1}{d}\right)^2, \left(\frac{r_2}{d}\right)^2\right)
\end{aligned} \tag{3.94}$$

## Приложение Б. Интеграл перекрытия в обменном матричном элементе.

Интеграл перекрытия имеет вид

$$\begin{aligned}
J_1 = & \int_0^{R_A} \phi_{csD}(d - z'_1) \phi_{csA}^*(z'_1) dz'_1 \\
& \left[ \int_0^{z'_1} \phi_{hD}(d - z_2) \phi_{hA}(z_2) P_1(\eta_1) dz_2 + \right. \\
& + \int_{z'_1}^{R_A} \phi_{hD}^*(d - z_2) \phi_{hA}(z_2) P_2(\eta_2) dz_2 + \\
& + \int_{R_A}^{d-R_D} \phi_{hD}^*(d - z_2) \phi_{hA}(z_2) P_2(\eta_2) dz_2 + \\
& \left. + \int_{d-R_D}^d \phi_{hD}^*(d - z_2) \phi_{hA}(z_2) P_2(\eta_2) dz_2 \right]. \tag{3.95}
\end{aligned}$$

Подобные выражения могут быть выписаны для  $J_2$  и  $J_3$ . В радиальных частях волновых функций (3.62) перейдем к цилиндрическим функциям, полагая в дальнейшем  $k_{hD} = k_{hA} = k$  и введем новые переменные интегрирования  $y = kz_2$

и  $x = kz'_1$ . В результате получим следующее выражение для  $J_1$

$$\begin{aligned}
J_1 = & A_{cD} A_{cA}^* A_{hD}^* A_{hA} \left( \frac{\pi}{2k} \right)^2 \times \\
& \times \frac{J_{j_{cD}+1/2}(kR_D)}{J_{j_{cD}+1/2}(k(d-R_A))} \frac{K_{j_{cD}+1/2}(\kappa(d-R_A))}{K_{j_{cD}+1/2}(\kappa R_D)} \times \\
& \times \int_0^{kR_A} \frac{1}{\sqrt{x(kd-x)}} J_{j_{cD}+1/2}(kd-x) J_{j_{cA}+1/2}(x) dx \times \\
& \times \left\{ \frac{J_{j_{cD}+1/2}(kR_D)}{J_{j_{cD}+1/2}(k(d-R_A))} \frac{K_{j_{cD}+1/2}(\kappa(d-R_A))}{K_{j_{cD}+1/2}(\kappa R_D)} \times \right. \\
& \times \left[ \int_0^x \frac{1}{\sqrt{y(kd-y)}} J_{j_{hD}+1/2}(kd-y) J_{j_{hA}+1/2}(y) \left( P(\eta_1^2) - \frac{x-y}{2k\rho_{max}} \right) dy + \right. \\
& + \left. \int_x^{kR_A} \frac{1}{\sqrt{y(kd-y)}} J_{j_{hD}+1/2}(kd-y) J_{j_{hA}+1/2}(y) \left( P(\eta_2^2) - \frac{y-x}{2k\rho_{max}} \right) dy \right] + \\
& + \frac{J_{j_{hA}+1/2}(kR_A)}{J_{j_{hA}+1/2}(k(d-y))} \frac{K_{j_{hA}+1/2}(\kappa_{hA}(d-R_D))}{K_{j_{hA}+1/2}(\kappa_{hA}R_A)} \times \\
& \times \left. \int_{k(d-R_D)}^{kd} \frac{1}{\sqrt{y(kd-y)}} J_{j_{hD}+1/2}(kd-y) J_{j_{hA}+1/2}(y) \left( P(\eta_2^2) - \frac{y-x}{2k\rho_{max}} \right) dy \right\} \quad (3.96)
\end{aligned}$$

Учет граничных условий приводит это выражение к виду

$$\begin{aligned}
J_1 = & A_{cD} A_{cA}^* A_{hD}^* A_{hA} \left( \frac{\pi}{2k} \right)^2 \\
& \frac{J_{j_{cD}+1/2}(kR_D)}{J_{j_{cD}+1/2}(k(d-R_A))} \exp(-\kappa_{cD}(d-R_A-R_D)) \sqrt{\frac{R_D}{d-R_A}} \\
& \int_0^{kR_A} \frac{1}{\sqrt{x(kd-x)}} J_{j_{cD}+1/2}(kd-x) J_{j_{cA}+1/2}(x) dx \times \\
& \times \left\{ \frac{J_{j_{hD}+1/2}(kR_D)}{J_{j_{hD}+1/2}(k(d-R_A))} \exp(-\kappa_{hD}(d-R_A-R_D)) \sqrt{\frac{R_D}{d-R_A}} \times \right. \\
& \times \left[ \int_0^x \frac{1}{\sqrt{y(kd-y)}} J_{j_{hD}+1/2}(kd-y) J_{j_{hA}+1/2}(y) \left( P(\eta_1^2) - \frac{x-y}{2k\rho_{max}} \right) dy + \right. \\
& \left. \left. + \int_x^{kR_A} \frac{1}{\sqrt{y(kd-y)}} J_{j_{hD}+1/2}(kd-y) J_{j_{hA}+1/2}(y) \left( P(\eta_2^2) - \frac{y-x}{2k\rho_{max}} \right) dy \right] + \right. \\
& \left. + \frac{J_{j_{hA}+1/2}(kR_A)}{J_{j_{hA}+1/2}(k(d-R_D))} \exp(-\kappa_{hA}(d-R_A-R_D)) \sqrt{\frac{R_A}{d-R_D}} \times \right. \\
& \left. \times \int_{k(d-R_D)}^{kd} \frac{1}{\sqrt{y(kd-y)}} J_{j_{hD}+1/2}(kd-y) J_{j_{hA}+1/2}(y) \left( P(\eta_2^2) - \frac{y-x}{2k\rho_{max}} \right) dy \right\}. \tag{3.97}
\end{aligned}$$

Величина  $J_1$  может быть рассмотрена для переходов в доноре и акцепторе между уровнями с определенными значениями полных угловых моментов. Рассмотрим переходы, соответствующие  $j_{cD} = j_{hD} = 1$  и  $j_{cA} = j_{hA} = 1$ . Для этого подставим в  $J_1$  явные выражения для функций Бесселя

$$\begin{aligned}
J_{3/2}(kd-y) &= \sqrt{\frac{2}{\pi(kd-y)}} \left( \frac{\sin(kd-y)}{kd-y} - \cos(kd-y) \right), \\
J_{3/2}(y) &= \sqrt{\frac{2}{\pi y}} \left( \frac{\sin(y)}{y} - \cos(y) \right). \tag{3.98}
\end{aligned}$$

Тогда получим

$$\begin{aligned}
J_1 = & A_{cD} A_{cA}^* A_{hD}^* A_{hA} \frac{\pi}{2} \frac{1}{k^2} \frac{J_{3/2}(kR)}{J_{3/2}(k(d-R))} \exp(-\kappa_{cD}(d-2R)) \sqrt{\frac{R}{d-R}} \times \\
& \times \int_0^{kR} \frac{1}{x(kd-x)} \left( \frac{\sin(kd-x)}{kd-x} - \cos(kd-x) \right) \left( \frac{\sin(x)}{x} - \cos(x) \right) dx \times \\
& \times \left\{ \frac{J_{3/2}(kR)}{J_{3/2}(k(d-R))} \exp(-\kappa_{hD}(d-2R)) \sqrt{\frac{R}{d-R}} \times \right. \\
& \times \left[ \int_0^x \frac{1}{y(kd-y)} \left( \frac{\sin(kd-y)}{kd-y} - \cos(kd-y) \right) \right. \\
& \left. \left( \frac{\sin y}{y} - \cos y \right) \left( P(\eta_1^2) - \frac{x-y}{2k\rho_{max}} \right) dy + \right. \\
& \left. + \int_x^{kR} \frac{1}{y(kd-y)} \left( \frac{\sin(kd-y)}{kd-y} - \cos(kd-y) \right) \left( \frac{\sin y}{y} - \cos y \right) \right. \\
& \left. \left( P(\eta_2^2) - \frac{y-x}{2k\rho_{max}} \right) dy \right] + \\
& + \frac{J_{3/2}(kR)}{J_{3/2}(k(d-R))} \exp(-\kappa_{hA}(d-2R)) \frac{R}{d-R} \times \\
& \times \int_{k(d-R)}^d \frac{1}{y(kd-y)} \left( \frac{\sin(kd-y)}{kd-y} - \cos(kd-y) \right) \\
& \left. \left( \frac{\sin y}{y} - \cos y \right) \left( P(\eta_2^2) - \frac{y-x}{2k\rho_{max}} \right) dy \right\}. \tag{3.99}
\end{aligned}$$

В интегралах в  $J_1$  входит функция  $(kd-y)^{-1}$ . Вынося множитель  $kd$  за скобки

и разлагая в степенной сходящийся ряд дробь  $(1 - \frac{y}{kd})^{-1} = \sum_{n=0}^{\infty} (\frac{y}{kd})^n$ , получим

$$\begin{aligned}
J_1 = & A_{cD} A_{cA}^* A_{hD}^* A_{hA} \frac{\pi}{2} \frac{1}{k^2} \frac{J_{3/2}(kR)}{J_{3/2}(k(d-R))} \exp(-\kappa_{cD}(d-2R)) \sqrt{\frac{R}{d-R}} \frac{1}{(kd)^2} \times \\
& \times \int_0^{kR} \frac{1}{x} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{x}{kd}\right)^n \left(\frac{\sin(kd-x)}{kd-x} - \cos(kd-x)\right) \left(\frac{\sin x}{x} - \cos x\right) dx \times \\
& \times \left\{ \frac{J_{3/2}(kR)}{J_{3/2}(k(d-R))} \exp(-\kappa_{hD}(d-2R)) \sqrt{\frac{R}{d-R}} \times \right. \\
& \times \left[ \int_0^x \frac{1}{y} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{y}{kd}\right)^n \left(\frac{\sin(kd-y)}{kd-y} - \cos(kd-y)\right) \right. \\
& \left. \left(\frac{\sin y}{y} - \cos y\right) \left(P(\eta_1^2) - \frac{x-y}{2k\rho_{max}}\right) dy + \right. \\
& \left. + \int_x^{kR} \frac{1}{y} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{y}{kd}\right)^n \left(\frac{\sin(kd-y)}{kd-y} - \cos(kd-y)\right) \right. \\
& \left. \left(\frac{\sin y}{y} - \cos y\right) \left(P(\eta_2^2) - \frac{y-x}{2k\rho_{max}}\right) dy \right] + \\
& + \frac{J_{3/2}(kR)}{J_{3/2}(k(d-R))} \exp(-\kappa_{hA}(d-2R)) \frac{R}{d-R} \times \\
& \times \int_{k(d-R)}^d \frac{1}{y} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{y}{kd}\right)^n \left(\frac{\sin(kd-y)}{kd-y} - \cos(kd-y)\right) \\
& \left. \left(\frac{\sin y}{y} - \cos y\right) \left(P(\eta_2^2) - \frac{y-x}{2k\rho_{max}}\right) dy \right\}.
\end{aligned} \tag{3.100}$$

Вычисления показывают, что функции  $P(\eta_1^2)$  и  $P(\eta_2^2)$  принимают практически постоянные значения в областях изменения аргументов. Получившиеся интегралы берутся в виде сходящихся рядов по степеням  $(kd)^{-n}$ .

## Заключение

В диссертации получены следующие **основные результаты**.

- Построена теория безызлучательной оже-рекомбинации в полупроводниковых квантовых точках. Показано, что в квантовых точках существует два механизма оже-рекомбинации: беспороговый и квазипороговый. Беспороговый механизм связан с рассеянием возбужденного электрона на гетеробарьере, в то время как квазипороговый механизм связан с пространственным ограничением волновых функций областью квантовой точки, что приводит к частичному снятию порога рекомбинации для этого механизма. Показано, что беспороговый механизм имеет слабую (неэкспоненциальную) зависимость от температуры, в то время как квазипороговый имеет резкую (экспоненциальную) зависимость от температуры при больших радиусах и слабую при малых радиусах квантовой точки.
- Изучен механизм оже-рекомбинации при низких температурах. Показано, что в условиях полного заполнения основного состояния для электронов и дырок данный процесс подавляется за счет влияния спиновых эффектов. Этот результат подтвержден экспериментально.
- Исследованы квазистационарные уровни энергии в открытой квантовой точке и их поведение во внешнем электрическом поле. Получены значения положения уровня и его полуширины.
- Построена квазистационарная теория возмущений, которая позволила вычислить поправку второго порядка для уровня и его полуширины. Также построена теория возмущений для второго порядка в квазиклассическом приближении. Показано, что во внешнем электрическом поле поведение уровней энергии открытой квантовой точки может характеризоваться критической энергией, разделяющей случаи увеличения и уменьшения по-

луширины.

- Рассчитан сдвиг уровней энергии открытой квантовой точки в поле модельной белковой молекулы и показано, что его можно наблюдать экспериментально.
- Изучен процесс безызлучательного переноса энергии от одной квантовой точки к другой. Рассмотрен как прямой кулоновский вклад, так и вклады с участием подмешивания состояний валентной зоны и зоны проводимости, а также член, обусловленный обменным взаимодействием. Показано, что прямой кулоновский вклад имеет насыщение при малых расстояниях между квантовыми точками и зависит от расстояния, как  $1/d^6$ , — при больших. Матричный элемент подмешивания зависит от расстояния так же, как и прямой кулоновский вклад.

Основные результаты диссертационной работы изложены в публикациях:

- [A1] Г. Г. Зегря, Д. М. Самосват. Механизмы оже-рекомбинации в полупроводниковых квантовых точках // *ЖЭТФ* **131**, 1090–1106 (2007).
- [A2] Г. Г. Зегря, Д. М. Самосват. Энергетический спектр и время жизни носителей заряда в открытых квантовых точках в электрическом поле // *ЖЭТФ* **135**, 1043–1055 (2009).
- [A3] A. S. Stepashkina, D. M. Samosvat, O. P. Chikalova-Luzina, G. G. Zegrya. Nonradiative resonance energy transfer between quantum dots // *J. Phys.: Conf. Ser.* **461**, 1, ArtNo: 012001 (2013).
- [A4] Д. М. Самосват, В. П. Евтихийев, А. С. Школьник, Г. Г. Зегря. Время жизни носителей заряда в квантовых точках при низких температурах // *ФТП* **47**, 1, 24–29 (2013).

- [A5] Д. М. Самосват, О. П. Чикалова-Лузина, А. С. Степашкина, Г. Г. Зегря. Безызлучательный резонансный перенос энергии между двумя полупроводниковыми квантовыми точками // Письма ЖТФ **39**, 1, 39–46 (2013).
- [A6] О. П. Чикалова-Лузина, Д. М. Самосват, Г. Г. Зегря. Роль обменного взаимодействия в безызлучательном переносе энергии между полупроводниковыми квантовыми точками // Письма ЖТФ **40**, 8, 64–49 (2014).
- [A7] Д. М. Самосват, О. П. Чикалова-Лузина, Г. Г. Зегря. Безызлучательный резонансный перенос энергии между двумя полупроводниковыми квантовыми точками // ЖЭТФ **148**, 1, 88 (2015).
- [A8] D. M. Samosvat, A. S. Shkolnik, V. P. Evtikhiev, G. G. Zegrya. Suppression of Auger recombination in semiconductor quantum dots at low temperatures // Proc. Int. Symp. "Nanostructures: Physics and Technology" (St.-Petersburg, Russia, 2010), pp. 114–115.
- [A9] D. M. Samosvat, O. P. Chikalova-Luzina, G. G. Zegrya. Nonradiative resonant energy transfer between two quantum dots // Proc. Int. Symp. "Nanostructures: Physics and Technology" (St.-Petersburg, Russia, 2013), pp. 174–175.

Автор выражает благодарность своему научному руководителю Г.Г. Зегре. Работа под его руководством была для меня очень ценна и важна.

Автор благодарит А. Грешнова за ценные замечания касающиеся третьей главы диссертации.

Автор благодарен М.Ф. Брыжиной за помощь, любезно оказанную при оформлении диссертации.

В заключение автор благодарит своих родителей за их поддержку и участие.

## Литература

1. Асрян Л. В., Сурис Р. А. Теория пороговых характеристик полупроводниковых лазеров на квантовых точках // ФТП. 2004. Т. 38. С. 3–25.
2. Michalet X., Pihaud F. F., et al. L. A. B. Quantum Dots for Live Cells, in Vivo Imaging, and Diagnostics // Science. 2005. Vol. 307. P. 538.
3. Зегря Г. Г. Новый метод диагностики аминокислот с помощью полупроводниковых квантовых точек // Письма в ЖТФ. 2006. Т. 32. С. 75.
4. Shkolnik A. S., Evtikhiev V. P., Zegrya G. G. Relationship between quasi-threshold and thresholdless Auger recombination processes in InAs/GaAs quantum dots // Technical Physics Letters. 2006. Vol. 32. P. 670.
5. Michler P., Kiraz A., Becher C. et al. A Quantum Dot Single-Photon Turnstile Device // Science. 2000. Vol. 290. P. 2282.
6. Yusa G., Sakaki. Trapping of photogenerated carriers by InAs quantum dots and persistent photoconductivity in novel GaAs/n-AlGaAs field-effect transistor structures // Appl. Phys. Lett. 1997. Vol. 70. P. 345.
7. Dekel E., Gershoni D., Ehrenfreund E. Carrier-carrier correlations in an optically excited single semiconductor quantum dot // Phys. Rev. B. 2000. Vol. 61. P. 11009.
8. Brucher M., Moronne M., Gin P. et al. Semiconductor Nanocrystals as Fluorescent Biological Labels // Science. 1998. Vol. 281. P. 2013.
9. Chan W. C. W., Nie S. Quantum Dot Bioconjugates for Ultrasensitive Nonisotopic Detection // Science. 1998. Vol. 281. P. 2061.
10. Han M., X. Gao J. Z. S., Nie S. Quantum-dot-tagged microbeads for multi-

- plexed optical coding of biomolecules // Nature Biotechnol. 2001. Vol. 19. P. 631.
11. Cui X. Y., Lenenson R. M., Chung W. K., Nie S. In vivo cancer targeting and imaging with semiconductor quantum dots // Nature Biotechnol. 2004. Vol. 22. P. 969.
  12. Абакумов В. Н., Перель В. И., Ясиевич И. Н. Безызлучательная рекомбинация в полупроводниках. Гатчина: ПИЯФ, 1997.
  13. Yoffe A. D. Semiconductor quantum dots and related systems: Electronic, optical, luminescence and related properties of low dimensional systems // Advances in physics. 2001. Vol. 50. P. 1.
  14. Bimberg D., Grudman M., Ledentsov N. N. Quantum Dot Heterostructures. Chichester: Wiley, 1999.
  15. Pan J. L. Reduction of the Auger rate in semiconductor quantum dots // Phys. Rev. B. 1992. Vol. 46. P. 3977.
  16. Fathpour S., Mi Z., Bhattachatya P. et al. The role of Auger recombination in the temperature-dependent output characteristics ( $T_0 = \infty$ ) of p-doped 1.3  $\mu\text{m}$  quantum dot lasers // Appl. Phys. Lett. 2004. Vol. 85. P. 5164.
  17. Новиков И. И., Гордеев Н. Ю., Максимов М. В. и др. Температурная зависимость эффективного коэффициента оже-рекомбинации в лазерах InAs/GaAs на квантовых точках с длиной волны излучения 1.3 мкм // ФТП. 2005. Т. 39. С. 507.
  18. Chepic D. I., Efros A. L., Ekimov A. I. et al. Auger ionization of semiconductor quantum drops in a glass matrix // Journal of Luminescence. 1990. Vol. 47. P. 113.

19. Efros A. L. Auger Processes in Nanosize Semiconductor Crystals // *Condens. Matter*. 2002. Vol. 1. P. 0204437.
20. Roussignal P., Ricard D., Rustagi K. C., Flytzanis C. Optical phase conjugation in semiconductor-doped glasses // *Optics Commun.* 1985. Vol. 55. P. 143.
21. Зегря Г. Г., Полковников А. С. Теория безызлучательной рекомбинации в полупроводниковых квантовых точках // Тез. докл. 2-й Росс. конф. по физике полупроводников. Т. 1. 1996. С. 95.
22. Dogonkine E. B., Golovach V. N., Polkovnikov A. S. et al. Theoretical investigation of Auger recombination in spherical quantum dots // *Proc. 8th Int. Symp. "Nanostructures: Physics and Technology"*. 2000. P. 399–401.
23. Kharchenko V., Rosen M. Auger relaxation processes in semiconductor nanocrystals and quantum wells // *Journal of Luminescence*. 1996. Vol. 70. P. 158.
24. Зегря Г. Г., Харченко В. А. Новый механизм оже-рекомбинации неравновесных носителей тока в полупроводниковых гетероструктурах // *ЖЭТФ*. 1992. Т. 101. С. 327.
25. Efros A. L., Rosen M. Quantum size level structure of narrow-gap semiconductor nanocrystals: Effect of band coupling // *Phys. Rev. B*. 1998. Vol. 58. P. 7120.
26. Зегря Г. Г., Полковников А. С. Механизмы оже-рекомбинации в квантовых ямах // *ЖЭТФ*. 1998. Т. 113. С. 1491.
27. Polkovnikov A. S., Zegrya G. G. Auger recombination in semiconductor quantum wells // *Phys. Rev. B*. 1998. Vol. 58. P. 4039.
28. Догонкин Е. Б., Зегря Г. Г., Полковников А. С. Микроскопическая теория оже-рекомбинации в квантовых нитях // *ЖЭТФ*. 2000. Т. 117. С. 429.

29. Solov'ev I. Y., Zegrya G. G. Nonradiative recombination in quantum dots via Coulomb interaction with carriers in the barrier region // *Appl. Phys. Lett.* 2003. Vol. 82. P. 2571.
30. *Biological Nanostructures and Applications of Nanostructures in Biology Electrical, Mechanical, and Optical Properties* / Ed. by M. A. Stroschio, M. Dutta. New York: Kluwer Academic, Plenum Publishers, 2004.
31. Wen G. W., Lin J. Y., Jiang H. X. Quantum-confined Stark effects in semiconductor quantum dots // *Phys. Rev. B.* 1995. Vol. 52. P. 5913.
32. Pokutnyi S. I., Jacak L., Misiewicz J. et al. Stark effect in semiconductor quantum dots // *J. Appl. Phys.* 2004. Vol. 96. P. 1115.
33. Зельдович . Б. К теории нестабильных состояний // *ЖЭТФ.* 1960. Т. 39. С. 776.
34. Агранович В. М., Галанин М. Д. Перенос энергии электронного возбуждения в конденсированных средах. М.: Наука, 1978.
35. Basko D., Rossa G. C. L., Bassani F., Agranovich V. Forster energy transfer from a semiconductor quantum well to an organic material overlayer // *Eur. Phys. J. B.* 1999. Vol. 8. P. 353.
36. Forster T. Zwischenmolekulare Energiewanderung und Fluoreszenz // *Ann. Phys.* 1948. Vol. 437. P. 55.
37. Dexter D. L. A Theory of Sensitized Luminescence in Solids // *J. Chem. Phys.* 1953. Vol. 21. P. 836.
38. Mulliken R. S. Structures of Complexes Formed by Halogen Molecules with Aromatic and with Oxygenated Solvents // *J. Am. Chem. Soc.* 1950. Vol. 72. P. 600.

39. Cario G., Franck J. Uber sensibilisierte fluoreszenz von gasen // Z. Physik. 1923. Vol. 17. P. 202.
40. Теренин А. Н., Карякин А. В. // Известия Акад. Наук, сер. Физика. 1951. Т. 15. С. 550.
41. Perrin J., Chocroun C. R. // habd. Acad. Sci. Seances. 1929. Vol. 189. P. 1213.
42. Forster T. Versuche zum zwischenmolekularen Ubergang von Electroneneanregungsenergie // Z. Electrochem. 1949. Vol. 53. P. 93.
43. Галанин М. Д., Левшин В. Л. // ЖЭТФ. 1951. Т. 21. С. 121.
44. Теренин А. Н., Ермолаев В. Л. // Докл. Ан. СССР. 1951. Т. 85. С. 547.
45. Emerson R., Arnold W. A separation of the reactions in photosynthesis by means of intermittent light // J. Gen. Physiol. 1932. Vol. 16. P. 191.
46. Scholes G. D. Long-range resonance energy transfer in molecular systems // Annu. Rev. Phys. Chem. 2003. Vol. 54. P. 57.
47. Ha T., Enderle T., Ogletree D. F. et al. Probing the interaction between two single molecules: fluorescence resonance energy transfer between a single donor and a single acceptor // Proc. Natl. Acad. Sci. USA, Biophysics. Vol. 93. 1996. P. 6264.
48. Kao M. W.-P., Yang L.-L., Lin J. C.-K. et al. Strategy for Efficient Site-Specific FRET-Dye Labeling of Ubiquitin // Bioconjugate Chem. 2008. Vol. 19. P. 1124.
49. Kagan C. R., Murray C. B., Nirmal M., Bawendi M. J. Electronic Energy Transfer in CdSe Quantum Dot Solids // Phys. Rev. Lett. 1996. Vol. 76. P. 1517.

50. Clapp A. R., Medintz I. L., Mattoussi H. Forster resonance energy transfer investigations using quantum-dot fluorophores // *Chem. Phys. Chem.* 2006. Vol. 7. P. 47.
51. Delerue C., Allan G. Energy transfer between semiconductor nanocrystals: Validity of Forster's theory // *Phys. Rev. B.* 2007. Vol. 75. P. 195311.
52. Curutchet C., Franceschetti A., Zunger A. Examining Forster Energy Transfer for Semiconductor Nanocrystalline Quantum Dot Donors and Acceptors // *J. Phys. Chem. C.* 2008. Vol. 112. P. 13336.
53. Baer R., Rabani E. Theory of resonance energy transfer involving nanocrystals: The role of high multipoles // *J. Chem. Phys.* 2008. Vol. 128. P. 184710.
54. Kruchinin S. Y., Fedorov A. V., A N. B. et al. Resonant energy transfer in quantum dots: Frequency-domain luminescent spectroscopy // *Phys. Rev. B.* 2008. Vol. 78. P. 125311.
55. Frano V. F., Chaniotakis N. Semiconductor Quantum Dots in Chemical Sensors and Biosensors // *Sensors.* 2009. Vol. 9. P. 7266.
56. Scholes G. D., Andrews D. L. Resonance energy transfer and quantum dots // *Phys. Rev. B.* 2005. Vol. 72. P. 125331.
57. Lovett B. W., Reina J. H., Nazir A., Breggs A. D. Optical schemes for quantum computation in quantum dot molecules // *Phys. Rev. B.* 2003. Vol. 68. P. 205319.
58. Noda S. Seeking the Ultimate Nanolaser // *Science.* 2006. Vol. 314. P. 260.
59. Heitz R., Mukhamedov I., Zeng J. et al. Excitation transfer in novel self-organized quantum dot structures // *Superlattices Microstruct.* 1999. Vol. 25. P. 97.

60. Law M., Luther J. M., Song O. et al. Structural, Optical, and Electrical Properties of PbSe Nanocrystal Solids Treated Thermally or with Simple Amines // *J. Am. Chem. Soc.* 2008. Vol. 130. P. 5974.
61. Agranovich V. M., Rossa G. C. L., Bassani F. Efficient electronic energy transfer from a semiconductor quantum well to an organic material // *Письма ЖЭТФ.* 1997. Vol. 66. P. 714.
62. Агранович В. М., Баско Д. М. Резонансный перенос энергии от полупроводниковой квантовой точки к органической матрице // *Письма ЖЭТФ.* 1999. Т. 69. С. 232.
63. Basko D., Rossa G. C. L., Bassani F., Agranovich V. M. Forster energy transfer from a semiconductor quantum well to an organic material overlayer // *Eur. Phys. J. B.* 1999. Vol. 8. P. 353.
64. Basko D. M., Agranovich V. M., Bassani F., Rossa G. C. L. Energy transfer from a semiconductor quantum dot to an organic matrix // *Eur. Phys. J. B.* 2000. Vol. 13. P. 653.
65. Agranovich V. M., Gardstein Y. N., Litinskaya M. Hybrid Resonant Organic-Inorganic Nanostructures for Optoelectronic Applications // *J. Chem. Rev.* 2011. Vol. 111. P. 5179.
66. Agranovich V. M., Basko D. M., Rossa G. C. L. Efficient optical pumping of organic-inorganic heterostructures for nonlinear optics // *Phys. Rev. B.* 2012. Vol. 86. P. 165204.
67. Зегря Г. Г., Самосват Д. М. Механизмы оже-рекомбинации в полупроводниковых квантовых точках // *ЖЭТФ.* 2007. Т. 131. С. 1090.
68. Kane E. O. Band structure of indium antimonide // *J. Phys. Chem. Sol.* 1957. Vol. 1. P. 249.

69. Sercel P. C., Vahala K. J. Analytical formalism for determining quantum-wire and quantum-dot band structure in the multiband envelope-function approximation // Phys. Rev. B. 1990. Vol. 42. P. 3690.
70. Гельмонт Б. Л. Трехзонная модель Кейна и Оже рекомбинация // ЖЭТФ. 1978. Т. 75. С. 536.
71. Burt M. G. The justification for applying the effective-mass approximation to microstructures // J. Phys. Condens. Matter. 1992. Vol. 4. P. 6651.
72. Варшалович Д. А., Москалев А. Н., Херсонский В. К. Квантовая теория углового момента. Ленинград: Наука, 1975.
73. Оура К., Лившиц В. Г., Саранин А. А. Введение в физику поверхности / Под ред. В. И. Сергиенко. М.: Наука, 2006.
74. Евтихийев В. П., Токранов В. Е., Крыжановский А. К. и др. Особенности роста квантовых точек InAs на вицинальной поверхности GaAs (001), ра- зориентированной в направлении [010] // ФТП. 1998. Т. 32. С. 860.
75. Shkolnik A. S., Karachinsky L. Y., Gordeev N. Y. et al. Observation of the biexponential ground state decay time behaviour in InAs self-assembled quan- tum dots grown on misoriented substrates // Appl. Phys. Lett. 2005. Vol. 86. P. 211112.
76. Ландау Л. Д., Лившиц Е. М. Квантовая механика. М.: Физматлит, 2001.
77. Сокольский А. В., Сурис Р. А. // ФТП. 1987. Т. 21. С. 866.
78. Зегря Г. Г. Излучательные и безызлучательные переходы носителей за- ряда в полупроводниковых гетероструктурах: Докторская диссертация / Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе. Санкт-Петербург, 1995.

79. Polkovnikov A. S., Zegrya G. G. Electron-electron relaxation effect on Auger recombination in direct-band semiconductors // *Phys. Rev. B*. 2001. Vol. 64. P. 073205.
80. Polkovnikov A. S., Dogonkine E., Zegrya G. G. Mechanisms of Auger recombination in semiconductor quantum wires // *Proc. 7th Int. Symp. "Nanostructures: Physics and Technology"*. 1999. P. 386.
81. Базь А. И., Зельдович . Б., Переломов А. М. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. М.: Наука, 1971.
82. Ткач Н. В., Сетти Ю. А., Зегря Г. Г. Электронные свойства открытых полупроводниковых квантовых точек // *Письма в ЖТФ*. 2007. Т. 33. С. 70.
83. Попов В. С., Мур В. Д. Теория возмущений для квазистационарных уровней // *Письма в ЖЭТФ*. 1994. Т. 60. С. 64.
84. Базь А. И. Приложение IX в книге Э. Ч. Титчмарша "Разложения по собственным функциям, связанные с дифференциальными уравнениями второго порядка т. 2. М.: ИЛ, 1961. С. 533.
85. Мур В. Д., Попов В. С. Квантование с учетом проницаемости барьера // *Письма в ЖЭТФ*. 1990. Т. 51. С. 499.
86. Шкловский Б. И., Эфрос А. Л. Электронные свойства легированных полупроводников. Москва: Наука, 1979.
87. Финкельштейн А. В., Птицин О. Б. Физика белка. М.: Книжный дом университет, 2002.
88. Abagyan R., Totrov M. Biased probability Monte Carlo conformational searches and electrostatic calculations for peptides and proteins // *J. Mol. Biol.* 1994. Vol. 235. P. 983.

89. Борн М., Вольф Э. Основы оптики (2-е издание). М.: Наука, 1973.
90. Ансельм А. И. Введение в теорию полупроводников. М.: Наука, 1978.
91. Бейтмен Г., Эрдейи А. Высшие трансцендентные функции, пер. Н. Я. Виленкина, т. 1. М.: Наука, 1973.
92. Прудников А. П., Брычков Ю. А., Маричев О. И. Интегралы и ряды. Том 3. Специальные функции. Дополнительные главы. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2001.
93. Пантел Р., Путхоф Г. Основы квантовой электроники. М.: Мир, 1972.
94. Коньшев В. П., Бурштейн А. И. Кинетика переноса энергии в конденсированной фазе // Теор. и эксп. химия. 1968. Т. 4. С. 192.
95. Самосват Д. М., Евтихийев В. П., Школьник А. С., Зегря Г. Г. Время жизни носителей заряда в квантовых точках при низких температурах // ФТП. 2013. Т. 47. С. 24.
96. Wang G., Fafard S., Leonard D. и др. Time resolved optical characterization of InGaAs/GaAs quantum dots // ФТП. 2013. Т. 47. С. 24.
97. Li Y., Ma Q., Su X. W. X. Fluorescence resonance energy transfer between two quantum dots with immunocomplexes of antigen and antibody as a bridge // Luminescence. 2007. Vol. 22. P. 60.
98. Xin-YanWeng, Ma Q., Li Y.-B. et al. // Canadian Journal of Analytical Sciences and Spectroscopy. 2005. Vol. 50. P. 141.
99. Schobel U., Egelhaaf H. J., Brecht A. et al. // BioconjugateChem. 1999. Vol. 10. P. 1107.
100. Liu T.-C., Zhang H.-L., Jian-HaoWang // Anal. Bioanal. Chem. 2008. Vol. 391. P. 2819.