УДК 535.8; 537.9; 539.23

В. Д. Кревчик, А. Б. Грунин, В. А. Рудин

ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ КВАНТОВОЙ МОЛЕКУЛЫ С РЕЗОНАНСНЫМ u-СОСТОЯНИЕМ D_2^- -ЦЕНТРА ВО ВНЕШНЕМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ ПРИ НАЛИЧИИ ДИССИПАТИВНОГО ТУННЕЛИРОВАНИЯ 1

Аннотация. В модели потенциала нулевого радиуса исследовано влияние внешнего электрического поля на фотолюминесценцию квантовой молекулы, связанную с излучательным переходом электрона с резонансного u-состояния на g-терм D_2^- -центра при наличии диссипативного туннелирования. Показано, что вероятность фотолюминесценции возрастает примерно на два порядка при напряженности внешнего электрического поля, для которой исходно асимметричный двухъямный осцилляторный потенциал, моделирующий квантовую молекулу, становится симметричным. Выявлена высокая чувствительность вероятности фотолюминесценции к таким параметрам диссипативного туннелирования, как температура, частота фононной моды и константы взаимодействия с контактной средой.

Ключевые слова: квантовая молекула, вероятность фотолюминесценции, внешнее электрическое поле, диссипативное туннелирование.

Abstract. In the model of zero radius potential the authors have investigated the influence of external electric field on photoluminescence of a quantum molecule, bound with emtting electron transition from resonance u-state to g-term of D_2^- center involving dissipative tunneling. It is shown that the probability of photoluminescence increases approximately by a factor of a hundred under conditions of external electric field intensity, for which the initially asymmetric double-well oscillatory potential, simulating a quantum molecule, becomes symmetric. The researchers discover high sensitivity of photoluminescence probability to such parameters of dissipative tunneling as temperature, frequency of phonon mode and constant of interaction with coupling media.

Key words: quantum molecule, photoluminescence probability, external electric field, dissipative tunneling.

Введение

Интерес к квантовой молекуле (КМ) с резонансным u-состоянием D_2^- -центра связан с перспективой создания новых источников стимулированного излучения на примесных переходах [1]. Использование внешнего электрического поля для управления временем жизни резонансного u-состояния в КМ требует детального исследования спектров фотолюминесценции (ФЛ) КМ в зависимости от величины прикладываемого внешнего электрического поля. В работе [2] продемонстрировано различие в характере действия

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 12-02-97002), Фонда фундаментальных исследований в области естественных наук Министерства науки Республики Казахстан (грант 1253/ГФ) и федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 годы Министерства образования и науки Российской Федерации (грант № 01201278459).

сильного (>10⁵ В/см) внешнего электрического поля на ФЛ квантовых точек (КТ) CdSe различной формы, определена связь между величиной внешнего электрического поля и средним временем затухания ФЛ. Цель данной работы — установление зависимости ФЛ, связанной с излучательным переходом электрона с резонансного u-состояния в стационарное g-состояние D_2^- -центра в КМ, от величины внешнего электрического поля в условиях туннельного распада.

Расчет энергетического спектра D_2^- -центра в кантовой молекуле с резонансным u -состоянием

Рассмотрим состояние D_2^- -центра в одной из КТ, образующих КМ. Пусть D^0 -центры молекулярного иона расположены в точках с координатами $\vec{R}_{a1} = (0,0,0)$ и $\vec{R}_{a2} = (x_{a2},0,0)$, здесь $\vec{R}_{ai} = (x_{ai},y_{ai},z_{ai})$ (i=1,2) — прямоугольные декартовы координаты D^0 -центров относительно одной из КТ. Внешнее электрическое поле \vec{E}_0 направлено вдоль оси x. Двухцентровой потенциал моделируется суперпозицией потенциалов нулевого радиуса мощностью $\gamma_i = 2\pi\hbar^2/(\alpha_i m^*)$ и в декартовой системе координат имеет вид

$$V_{\delta}(\vec{r}; \vec{R}_{a1}, \vec{R}_{a2}) = \sum_{i=1}^{2} \gamma_i \delta(\vec{r} - \vec{R}_{ai}) \times \left[1 + (\vec{r} - \vec{R}_{ai})\nabla_{\vec{r}}\right], \tag{1}$$

где α_i определяется энергией $E_i = -\hbar^2 \alpha_i^2 / (2 \, m^*)$ электронного локализованного состояния на этих же D^0 -центрах в объемном полупроводнике.

Для невозмущенных примесями одноэлектронных состояний в продольном электрическом поле гамильтониан соответствующей спектральной задачи в модели параболического потенциала конфайнмента имеет вид

$$\hat{H} = -\hbar^2 / (2m^*) \nabla^2 + m^* \omega_0^2 (x^2 + y^2 + z^2) / 2 - |e| E_0 x, \qquad (2)$$

где m^* – эффективная масса электрона; ω_0 – характерная частота удерживающего потенциала КТ; |e| – абсолютное значение заряда электрона.

Собственные значения $E_{n_1,\,n_2,n_3}$ и соответствующие собственные функции $\Psi_{n_1,\,n_2,n_3}\left(x,y,z\right)$ гамильтониана (2) даются выражениями вида

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \hbar \omega_0 \left(n_1 + n_2 + n_3 + 3/2 \right) - |e|^2 E^2 / \left(2m^* \omega_0^2 \right); \tag{3}$$

$$\Psi_{n_1, n_2, n_3}(x, y, z) = 2^{-\frac{n_1 + n_2 + n_3}{2}} \left(n_1! \, n_2! \, n_3!\right)^{-\frac{1}{2}} \pi^{-\frac{3}{4}} a^{-\frac{3}{2}} \times$$

$$\times \exp\left(-\left[\left(x-x_{0}\right)^{2}+y^{2}+z^{2}\right]/\left(2a^{2}\right)\right)H_{n_{1}}\left(\frac{x-x_{0}}{a}\right)H_{n_{2}}\left(\frac{y}{a}\right)H_{n_{3}}\left(\frac{z}{a}\right),$$
 (4)

где $n_1, n_2, n_3 = 0, 1, 2...$ – квантовые числа, соответствующие уровням энергии осцилляторной сферически-симметричной потенциальной ямы; $a = \sqrt{\hbar/\left(m^*\omega_0\right)}$ – характерная длина удерживаемого потенциала; $x_0 = |e|E/\left(m^*\omega_0^2\right)$; $H_n\left(x\right)$ – полиномы Эрмита.

В приближении эффективной массы волновая функция электрона $\Psi_{\lambda}(\vec{r};\vec{R}_{a1},\vec{R}_{a2})$, локализованного на D_2^- -центре, удовлетворяет уравнению Липпмана – Швингера

$$\Psi_{\lambda}(\vec{r}; \vec{R}_{a1}, \vec{R}_{a2}) = \int d\vec{r}_1 G(\vec{r}, \vec{r}_1; E_{\lambda}) V_{\delta}(\vec{r}_1; \vec{R}_{a1}, \vec{R}_{a2}) \Psi_{\lambda}(\vec{r}_1; \vec{R}_{a1}, \vec{R}_{a2})$$
(5)

и имеет вид линейной комбинации:

$$\Psi_{\lambda}(\vec{r}; \vec{R}_{a1}, \vec{R}_{a2}) = \sum_{k=1}^{2} \gamma_k c_k G(\vec{r}, \vec{R}_{ak}; E_{\lambda}),$$
 (6)

где

$$c_{k} = \left(\hat{T}_{k} \Psi_{\lambda}\right) \left(\vec{R}_{ak}; \vec{R}_{a1}, \vec{R}_{a2}\right); \hat{T}_{k} = \lim_{\vec{r} \to \bar{R}_{ak}} \left[1 + \left(\vec{r} - \vec{R}_{ak}\right) \nabla_{\vec{r}}\right];$$

 $G(\vec{r}, \vec{R}_{ak}; E_{\lambda})$ — одноэлектронная функция Грина, соответствующая источнику в точке \vec{R}_{ai} и энергии $E_{\lambda} = \hbar^2 \left({\lambda'}^2 + i {\lambda''}^2 \right) / \left(2m^* \right); \; \lambda''$ учитывает уширение примесного энергетического уровня за счет туннельного распада; E_{λ} — энергия, отсчитываемая от дна КТ;

$$G(\vec{r}, \vec{r}_1; E_{\lambda}) = \sum_{n_1, n_2, n_3} \frac{\Psi_{n_1, n_2, n_3}^*(\vec{r}_1) \Psi_{n_1, n_2, n_3}(\vec{r})}{E_{\lambda} - E_{n_1, n_2, n_3}}.$$
 (7)

Используя выражения (3) и (4), для одноэлектронной функции Грина в (7) получим

$$G(\vec{r}, \vec{R}_{ak}; E_{\lambda}) = -(2\pi)^{-\frac{3}{2}} \beta^{-\frac{1}{2}} E_{d}^{-1} a_{d}^{-3} \times \\ \times \exp\left[-\frac{\left(x_{ak} - x_{0}\right)^{2} + y_{ak}^{2} + z_{ak}^{2} + \left(x - x_{0}\right)^{2} + y^{2} + z^{2}}{2a^{2}}\right] \times \\ \times \int_{0}^{\infty} dt \exp\left[-\varepsilon_{q} t\right] \times \sum_{n=-0}^{\infty} \left(\frac{e^{-t}}{2}\right)^{n_{1}} \frac{H_{n_{1}}\left(\frac{x_{ak} - x_{0}}{a}\right) H_{n_{1}}\left(\frac{x - x_{0}}{a}\right)}{n_{1}!} \times$$

$$\times \sum_{n_2=0}^{\infty} \left(\frac{e^{-t}}{2}\right)^{n_2} \frac{H_{n_2}\left(\frac{y_{ak}}{a}\right) H_{n_2}\left(\frac{y}{a}\right)}{n_2!} \times$$

$$\times \sum_{n_3=0}^{\infty} \left(\frac{e^{-t}}{2}\right)^{n_3} \frac{H_{n_3}\left(\frac{z_{ak}}{a}\right) H_{n_3}\left(\frac{z}{a}\right)}{n_2!},\tag{8}$$

здесь индекс k = 1, 2;

$$\begin{split} \varepsilon_{q} &= -\beta \Big(\eta_{q}^{\prime \, 2} + i \, \eta_{q}^{\prime \prime \, 2} \Big) + 3 \, / \, 2 \, - \Big(\beta^{3/2} a_{d} \, \big| e \big| E_{0} \, / \, E_{d} \, \Big)^{2} + i \, \Gamma_{0} \hbar \, \beta / E_{d} \; ; \\ \eta_{q}^{\prime \, 2} &+ i \, \eta_{q}^{\prime \prime \, 2} = E_{\lambda} / E_{d} \; ; \beta = R_{0}^{*} \, / \Big(4 \sqrt{U_{0}^{*}} \, \Big) ; \; R_{0}^{*} = 2 \, R_{0} \, / \, a_{d} \; ; \end{split}$$

 R_0 — радиус КТ; $U_0^* = U_0 / E_d$; U_0 — амплитуда потенциала конфайнмента КТ, удовлетворяющая соотношению $2\,U_0 = m^*\,\omega_0^2\,R_0^2$; m^* — эффективная масса электрона; ω_0 — характерная частота удерживающего потенциала КТ; E_d , a_d — эффективная боровская энергия и боровский радиус соответственно; Γ_0 — вероятность диссипативного туннелирования.

Вероятность диссипативного туннелирования Γ_0 рассчитана в одноинстантонном приближении. При этом КМ моделировалась двухъямным осцилляторным потенциалом вида

$$U(q) = \frac{\omega_0^2}{2} (q - a_0)^2 \theta(q) + \frac{\omega_0^2}{2} (q + a_0)^2 \theta(-q) - |e| \left| \vec{E}_0 \right| q,$$
 (9)

где q — координата туннелирования; ω_0 — характерная частота потенциала; $\theta(q)$ — единичная функция Хевисайда.

В случае взаимодействия с выделенной локальной модой одноинстантонное действие запишется в виде (в боровских единицах):

$$\begin{split} S &= \frac{1}{2} \left(\frac{b_0' + x_0^*}{a_0' + x_0^*} + 1 \right) \left(3 - \frac{b_0' + x_0^*}{a_0' + x_0^*} \right) \tau_0^* - \frac{1}{2\beta^*} \left(\frac{b' + x_0^*}{a_0' + x_0^*} + 1 \right)^2 \tau_0^{*2} - \\ &- \frac{1}{2\gamma^*} \left(\frac{b_0' + x_0^*}{a_0' + x_0^*} + 1 \right)^2 \left(\frac{\left(1 - x_2^* \right)}{\sqrt{x_1^*}} - \left[\operatorname{cth} \left(\beta^* \sqrt{x_1^*} \right) - \frac{\operatorname{ch} \left[\left(\beta^* - \tau_0^* \right) \sqrt{x_1^*} \right] - \operatorname{ch} \left[\beta^* \sqrt{x_1^*} \right]}{\operatorname{sh} \left(\beta^* \sqrt{x_1^*} \right)} + \\ &+ \operatorname{ch} \left(\left(\beta^* - \tau_0^* \right) \sqrt{x_1^*} \right) \right] - \frac{\left(1 - x_1^* \right)}{\sqrt{x_2^*}} \left[\operatorname{cth} \left(\beta^* \sqrt{x_2^*} \right) - \right] \end{split}$$

$$-\frac{\operatorname{ch}\left(\left(\beta^{*}-\tau_{0}^{*}\right)\sqrt{x_{2}^{*}}\right)-\operatorname{ch}\left(\beta^{*}\sqrt{x_{2}^{*}}\right)}{\operatorname{sh}\left(\beta^{*}\sqrt{x_{2}^{*}}\right)}+\operatorname{ch}\left(\left(\beta^{*}-\tau_{0}^{*}\right)\sqrt{x_{2}^{*}}\right)\right],\tag{10}$$

где

$$\begin{split} x_{1,2}^* &= \frac{1}{2} \left[\frac{\varepsilon_L^* a^{*2}}{4U_0^*} + 1 + \frac{\varepsilon_c^4 a^{*2}}{4\varepsilon_L^* 2U_0^*} \mp \sqrt{\left(\frac{\varepsilon_L^* a^{*2}}{4U_0^*} + 1 + \frac{\varepsilon_c^4 a^{*2}}{4\varepsilon_L^* 2U_0^*} \right)^2 - \frac{\varepsilon_L^* a^{*2}}{U_0^*}} \right], \\ \gamma^* &= \sqrt{\left(\varepsilon_L^* a^{*2} \middle/ \left(4U_0^* \right) + 1 + \varepsilon_c^{*4} a^{*2} \middle/ \left(4\varepsilon_L^* 2U_0^* \right) \right)^2 - \varepsilon_L^* a^{*2} \middle/ U_0^*} \;, \\ \tau_0^* &= \operatorname{arcsh} \left[\left(1 - \frac{b_0' + x_0^*}{a_0' + x_0^*} \right) \operatorname{sh} \left(\beta^* \right) \middle/ \left(1 + \frac{b_0' + x_0^*}{a_0' + x_0^*} \right) \right] + \beta^* \;, \\ \varepsilon_T^* &= kT/E_d \;, \; \varepsilon_L^* = \hbar \omega_L/E_d \;, \; \varepsilon_c^* = \hbar \sqrt{c}/E_d \;, \; \beta^* = \sqrt{U_0^*} \middle/ a^* \varepsilon_T^* \;, \\ b_0' &= b_0/a_d \;, \; a_0' = a_0/a_d \;, \; x_0^* = x_0/a_d \;. \end{split}$$

С экспоненциальной точностью вероятность туннелирования Γ_0 оценивается как $\Gamma_0 \sim \exp(-S)$. Предэкспоненциальный множитель B определяется вкладом траекторий, близко расположенных от инстантона. Для его вычисления действие раскладывалось до квадратичного члена по отклонениям $q-q_B$ и проводилось интегрирование в функциональном пространстве. Выражение для предэкспоненты с учетом влияния локальной моды среды запишется в виде

$$B = \frac{2E_{d}\sqrt{U_{0}^{*}}}{\hbar\sqrt{\pi}} \left(\frac{b_{0}' + x_{0}^{*}}{a_{0}' + x_{0}^{*}} + 1\right) \sqrt{\varepsilon_{T}^{*}} \times \left\{ \frac{A^{*} \left[\beta_{1}^{*} \operatorname{ch}\left(\frac{\beta_{1}^{*}}{2}\right) - 1\right] + D^{*} \left[\beta_{2}^{*} \operatorname{ch}\left(\frac{\beta_{2}^{*}}{2}\right) - 1\right]}{\left\{A^{*} \left[\frac{\beta_{1}^{*}}{2} - \tau_{01}^{*}\right] - 1\right\} + D^{*} \left[\frac{\beta_{2}^{*}}{2} - \tau_{02}^{*}\right] - 1\right\}^{\frac{1}{2}} + \left\{A^{*} \left[\frac{\beta_{1}^{*}}{2} - \tau_{01}^{*}\right] - 1\right\} + D^{*} \left[\frac{\beta_{2}^{*}}{2} - \tau_{02}^{*}\right] - 1\right\}^{\frac{1}{2}} + \left\{A^{*} \left[\frac{\beta_{1}^{*}}{2} - \tau_{01}^{*}\right] - 1\right\} + D^{*} \left[\frac{\beta_{2}^{*}}{2} - \tau_{02}^{*}\right] - 1\right\}^{\frac{1}{2}} + \left\{A^{*} \left[\frac{\beta_{1}^{*}}{2} - \tau_{01}^{*}\right] - 1\right\} + D^{*} \left[\frac{\beta_{2}^{*}}{2} - \tau_{02}^{*}\right] - 1\right\}$$

$$A^{*} \left[1 - \frac{\beta_{1}^{*}}{2} \frac{\operatorname{ch} \left(\frac{\beta_{1}^{*}}{2} - \tau_{01}^{*} \right)}{\operatorname{sh} \left(\frac{\beta_{1}^{*}}{2} \right)} + D^{*} \left[\frac{\beta_{2}^{*}}{2} \frac{\operatorname{ch} \left(\frac{\beta_{2}^{*}}{2} - \tau_{02}^{*} \right)}{\operatorname{sh} \left(\frac{\beta_{2}^{*}}{2} \right)} - 1 \right] + \left[A^{*} \left[\frac{\beta_{1}^{*}}{2} \frac{\operatorname{ch} \left(\frac{\beta_{1}^{*}}{2} - \tau_{01}^{*} \right)}{\operatorname{sh} \left(\frac{\beta_{1}^{*}}{2} \right)} - 1 \right] + D^{*} \left[\frac{\beta_{2}^{*}}{2} \frac{\operatorname{ch} \left(\frac{\beta_{2}^{*}}{2} - \tau_{02}^{*} \right)}{\operatorname{sh} \left(\frac{\beta_{2}^{*}}{2} \right)} - 1 \right] \right]^{\frac{1}{2}} \right\}, \quad (11)$$

где
$$A^* = \left(2\varepsilon_L^{*2}a^{*2} - x_1^*\right) / \left(\left(x_1^* - x_2^*\right)x_1^*\right), \quad D^* = \left(2\varepsilon_L^{*2}a^{*2} - x_2^*\right) / \left(\left(x_1^* - x_2^*\right)x_2^*\right),$$
 $\beta_1^* = \sqrt{2\,U_0^*}\,\sqrt{x_1^*}\, / \left(a^*\varepsilon_T^*\right), \qquad \beta_2^* = \sqrt{2\,U_0^*}\,\sqrt{x_2^*}\, / \left(a^*\varepsilon_T^*\right), \qquad \tau_{01}^* = \tau_0^*\sqrt{x_1^*}\, / \sqrt{2}\,,$ $\tau_{02}^* = \tau_0^*\sqrt{x_2^*}\, / \sqrt{2}\,.$

Суммирование в (8) по квантовым числам n_1 , n_2 , n_3 можно выполнить, воспользовавшись формулой Мелера [3]:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{e^{-t}}{2} \right)^n \frac{H_n \left(\frac{z_a}{a} \right) H_n \left(\frac{z}{a} \right)}{n!} = \frac{1}{\sqrt{1 - e^{-2t}}} \exp \left\{ \frac{2z_a z e^{-t} - \left(z_a^2 + z^2 \right) e^{-2t}}{a^2 \left(1 - e^{-2t} \right)} \right\}. \tag{12}$$

В результате для электронной функции Грина получим

$$G\left(\vec{r}, \vec{R}_{ak}; E_{\lambda}\right) = -(2\pi)^{-\frac{3}{2}} \beta^{-\frac{1}{2}} E_{d}^{-1} a_{d}^{-3} \times \left[\times \int_{0}^{\infty} dt \exp\left[-\varepsilon_{q} t\right] \left\{ \left(1 - e^{-2t}\right)^{-\frac{3}{2}} \times \exp\left[-\frac{\left(\vec{r} - \vec{R}_{ak}\right)^{2}}{2a^{2}} \operatorname{cth}(t)\right] \right\} \times \left[-\frac{\left(x_{ak} - x_{0}\right)\left(x - x_{0}\right) + y_{ak}y + z_{ak}z}{a^{2}} \operatorname{th}\left(\frac{t}{2}\right) \right].$$

$$(13)$$

Функция Грина (10) записана для резонансного u-состояния $D_2^{\left(-\right)}$ -центра в КМ.

Применяя последовательно операцию \hat{T}_k (k = 1, 2) к обеим частям выражения (6), получим систему алгебраических уравнений вида

$$\begin{cases}
c_1 = \gamma_1 \, a_{11} \, c_1 + \gamma_2 \, a_{12} \, c_2, \\
c_2 = \gamma_1 \, a_{21} \, c_1 + \gamma_2 \, a_{22} \, c_2,
\end{cases} \tag{14}$$

здесь
$$a_{kj} = \left(\hat{T}_k G \right) \left(\vec{R}_{ak}, \vec{R}_{aj}; E_{\lambda} \right); i, j = 1, 2.$$

Исключая из системы (14) коэффициенты c_i , содержащие неизвестную волновую функцию $\Psi_{\lambda}(\vec{r};\vec{R}_{a1},\vec{R}_{a2})$, получим дисперсионное уравнение электрона, локализованного на D_2^- -центре с резонансным u-состоянием в КМ:

$$\gamma_1 a_{11} + \gamma_2 a_{22} - 1 = \gamma_1 \gamma_2 (a_{11} a_{22} - a_{12} a_{21}).$$
 (15)

Коэффициенты $a_{k\,j}$, входящие в (15), с учетом (13) могут быть записаны в виде

$$a_{k k} = -(2\pi)^{-\frac{3}{2}} \beta^{-\frac{1}{2}} E_{d}^{-1} a_{d}^{-3} \left\{ \int_{0}^{+\infty} dt \exp\left[-\varepsilon_{q} t\right] \left(\left(1 - e^{-2t}\right)^{-\frac{3}{2}} \times \right) \right\}$$

$$\times \exp\left[-\frac{\left(\left(x_{ak} - x_{0}\right)^{2} + y_{ak}^{2} + z_{ak}^{2}\right) \operatorname{th}(t/2)}{a^{2}} \right] - \left(2t\right)^{-\frac{3}{2}} - \sqrt{\frac{\pi}{2}} \sqrt{\varepsilon_{q}} \right\}; \quad (16)$$

$$a_{k j} = -(2\pi)^{-\frac{3}{2}} \beta^{-\frac{1}{2}} E_{d}^{-1} a_{d}^{-3} \int_{0}^{+\infty} dt \exp\left[-\varepsilon_{q} t\right] \left(1 - e^{-2t}\right)^{-\frac{3}{2}} \times$$

$$\times \exp\left[-\frac{\left(\vec{R}_{ak} - \vec{R}_{aj}\right)^{2} \operatorname{cth}(t)}{2a^{2}} \right] \times$$

$$\times \exp\left[-\frac{\left(x_{ak} - x_{0}\right)\left(x_{aj} - x_{0}\right) + y_{ak} y_{aj} + z_{ak} z_{aj}}{a^{2}} \operatorname{th}\left(\frac{t}{2}\right) \right]. \quad (17)$$

В случае, когда $\gamma_1 = \gamma_2 = \gamma$, уравнение (15) распадается на два уравнения, определяющих симметричное (*g*-терм) и антисимметричное (*u*-терм) состояния электрона соответственно:

$$\gamma a_{11} + \gamma a_{12} = 1 \quad (c_1 = c_2),$$
 (18)

$$\gamma \, a_{11} - \gamma \, a_{12} = 1 \, \left(c_1 = -c_2 \right). \tag{19}$$

С помощью выражений (6) и (13) проведем нормировку волновых функций стационарных и квазистационарных g- и u-состояний (верхние и нижние знаки соответственно) электрона в КТ во внешнем электрическом поле; $\vec{R}_{a1} = (0,0,0)$ и $\vec{R}_{a2} = (x_{a2},0,0)$ – координаты D^0 -центров.

Из условия нормировки для волновой функции $\Psi_{\lambda}(\vec{r};\vec{R}_{a1},\vec{R}_{a2})$ стационарного D_2^- -состояния имеем

$$\int_{V} dV \left| \Psi_{\lambda} \left(\vec{r}; \vec{R}_{a1}, \vec{R}_{a2} \right) \right|^{2} = \gamma_{1}^{2} C_{1}^{2} \int_{-\infty - \infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left| G \left(\vec{r}, \vec{R}_{a1}; E_{\lambda} \right) \right|^{2} dx dy dz +$$

$$+ 2\gamma_{1} \gamma_{2} C_{1} C_{2} \int_{-\infty - \infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} G \left(\vec{r}, \vec{R}_{a1}; E_{\lambda} \right) G \left(\vec{r}, \vec{R}_{a2}; E_{\lambda} \right) dx dy dz +$$

$$+ \gamma_{2}^{2} \left| C_{2}^{2} \right|^{2} \int_{-\infty - \infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left| G \left(\vec{r}, \vec{R}_{a2}; E_{\lambda} \right) \right|^{2} dx dy dz = 1.$$
(20)

Каждый интеграл в выражении (20) вычисляется на основе определения одноэлектронной функции Грина (7), т.е.

$$\int_{-\infty-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} G\left(\vec{r}, \vec{R}_{aj}; E_{\lambda}\right) G\left(\vec{r}, \vec{R}_{ak}; E_{\lambda}\right) dx dy dz =
= \sum_{n_{1}, n_{2}, n_{3}} \sum_{n'_{1}, n'_{2}, n'_{3}} \frac{\Psi_{n_{1}, n_{2}, n_{3}}\left(\vec{R}_{aj}\right) \Psi_{n'_{1}, n'_{2}, n'_{3}}^{*}\left(\vec{R}_{ak}\right)}{\left(E_{\lambda} - E_{n_{1}, n_{2}, n_{3}}\right) \left(E_{\lambda} - E_{n'_{1}, n'_{2}, n'_{3}}\right)} \times
\times \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{n_{1}, n_{2}, n_{3}}^{*}\left(\vec{r}\right) \Psi_{n'_{1}, n'_{2}, n'_{3}}^{*}\left(\vec{r}\right) dx dy dz .$$
(21)

Вычисление интеграла в (21) выполним с использованием условия ортогональности собственных волновых функций (4):

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{n_1, n_2, n_3}^* (\vec{r}) \Psi_{n_1', n_2', n_3'} (\vec{r}) dx dy dz = \delta_{n_1, n_1'} \times \delta_{n_2, n_2'} \times \delta_{n_3, n_3'}, \quad (22)$$

в результате получим

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} G(\vec{r}, \vec{R}_{aj}; E_{\lambda}) G(\vec{r}, \vec{R}_{ak}; E_{\lambda}) dx dy dz =$$

$$= \sum_{n_1, n_2, n_3} \frac{\Psi_{n_1, n_2, n_3} \left(\vec{R}_{aj}\right) \Psi_{n_1, n_2, n_3}^* \left(\vec{R}_{ak}\right)}{\left(E_{\lambda} - E_{n_1, n_2, n_3}\right)^2}, \tag{23}$$

где j, k = 1, 2.

Согласно (7) правая часть выражений (23) может быть представлена в виде

$$\sum_{n_{1},n_{2},n_{3}} \frac{\Psi_{n_{1},n_{2},n_{3}}(\vec{R}_{aj})\Psi_{n_{1},n_{2},n_{3}}^{*}(\vec{R}_{ak})}{\left(E_{\lambda} - E_{n_{1},n_{2},n_{3}}\right)^{2}} =$$

$$= -\frac{\partial G(\vec{R}_{aj}, \vec{R}_{ak}; E_{\lambda})}{\partial E_{\lambda}} = (\hbar\omega_{0})^{-2} a^{-3} \frac{\partial G_{0}(\vec{R}_{aj}, \vec{R}_{ak}; \varepsilon_{s})}{\partial \varepsilon_{s}}, \qquad (24)$$

где $G_0\left(\vec{r},\vec{R}_a\,;E_\lambda\right)$ – безразмерная функция Грина;

$$\varepsilon_s = \beta \eta_s'^2 + 3/2 - \left(\beta^{3/2} a_d |e| E_0 / E_d\right)^2; \ \eta_s'^2 = |E_{\lambda}| / E_d; \ E_{\lambda} = -\hbar^2 \lambda^2 / (2m^*).$$

С учетом (21)–(24) условие нормировки для волновой функции $\Psi_{\lambda}\left(\vec{r};\vec{R}_{a1},\vec{R}_{a2}\right)$ стационарного D_{2}^{-} -состояния записывается как

$$1 = \int_{V} dV \left| \Psi_{\lambda} \left(\vec{r}; \vec{R}_{a1}, \vec{R}_{a2} \right) \right|^{2} = -\left(\gamma_{1}^{2} C_{1}^{2} \frac{\partial G \left(\vec{R}_{a1}, \vec{R}_{a1}; E_{\lambda} \right)}{\partial E_{\lambda}} + 2 \gamma_{1} \gamma_{2} C_{1} C_{2} \frac{\partial G \left(\vec{R}_{a1}, \vec{R}_{a2}; E_{\lambda} \right)}{\partial E_{\lambda}} + \gamma_{2}^{2} C_{2}^{2} \frac{\partial G \left(\vec{R}_{a2}, \vec{R}_{a2}; E_{\lambda} \right)}{\partial E_{\lambda}} \right). \tag{25}$$

Тогда выражения для нормировочных множителей симметричного ($C_1 = C_2$) и антисимметричного ($C_1 = -C_2$) $D_2^{\left(-\right)}$ -состояний примут вид

$$C_1^2 = -\left\{ \gamma_1^2 \frac{\partial G(\vec{R}_{a1}, \vec{R}_{a2}; E_{\lambda})}{\partial E_{\lambda}} \pm \frac{\partial G(\vec{R}_{a1}, \vec{R}_{a2}; E_{\lambda})}{\partial E_{\lambda}} + \gamma_2^2 \frac{\partial G(\vec{R}_{a2}, \vec{R}_{a2}; E_{\lambda})}{\partial E_{\lambda}} \right\}^{-1}, \tag{26}$$

здесь верхний и нижний знаки относятся к g- и u-состояниям соответственно. Вычислим в формуле (26) производные, перейдя к безразмерной функции Грина $G_0\left(\vec{r},\vec{R}_a\;;E_\lambda\right)$ путем несложного преобразования

$$G(\vec{r}, \vec{R}_a; E_{\lambda}) = a^{-3} (\hbar \omega_0)^{-1} G_0(\vec{r}, \vec{R}_a; \varepsilon_s), \qquad (27)$$

где

$$G_0(\vec{r}, \vec{R}_a; \varepsilon_s) \simeq -2^{-1} \pi^{-\frac{3}{2}} \times \exp\left(-\frac{(x_a - x_0)(x - x_0) + y_a y + z_a z}{a^2}\right) \times \exp\left[-\frac{(\vec{r} - \vec{R}_a)^2}{2a^2}\right] B\left(\frac{\varepsilon_s}{2}, -\frac{1}{2}\right), \tag{28}$$

в результате получим

$$\frac{\partial G_0\left(\vec{r}, \vec{R}_a; \varepsilon_s\right)}{\partial \varepsilon_s} \simeq -2^{-1} \pi^{-\frac{3}{2}} \times \exp\left(-\frac{\left(x_a - x_0\right)\left(x - x_0\right) + y_a y + z_a z}{a^2}\right) \times \frac{\partial B\left(\frac{\varepsilon_s}{2}, -\frac{1}{2}\right)}{\partial \varepsilon_s} = 2^{-1} \pi^{-1} \times \exp\left(-\frac{\left(x_a - x_0\right)\left(x - x_0\right) + y_a y + z_a z}{a^2}\right) \times \frac{\Gamma'\left(\frac{\varepsilon_s}{2}\right) \Gamma\left(\frac{\varepsilon_s}{2} - \frac{1}{2}\right) - \Gamma\left(\frac{\varepsilon_s}{2}\right) \Gamma'\left(\frac{\varepsilon_s}{2} - \frac{1}{2}\right)}{\Gamma^2\left(\frac{\varepsilon_s}{2} - \frac{1}{2}\right)} = 2^{-1} \pi^{-1} \times \frac{\Gamma'\left(\frac{\varepsilon_s}{2}\right) \Gamma\left(\frac{\varepsilon_s}{2} - \frac{1}{2}\right)}{\Gamma^2\left(\frac{\varepsilon_s}{2} - \frac{1}{2}\right)} = 2^{-1} \pi^{-1} \times \frac{\Gamma'\left(\frac{\varepsilon_s}{2}\right) \Gamma\left(\frac{\varepsilon_s}{2} - \frac{1}{2}\right)}{\Gamma^2\left(\frac{\varepsilon_s}{2} - \frac{1}{2}\right)} = 2^{-1} \pi^{-1} \times \frac{\Gamma'\left(\frac{\varepsilon_s}{2}\right) \Gamma\left(\frac{\varepsilon_s}{2} - \frac{1}{2}\right)}{\Gamma^2\left(\frac{\varepsilon_s}{2} - \frac{1}{2}\right)} = 2^{-1} \pi^{-1} \times \frac{\Gamma'\left(\frac{\varepsilon_s}{2}\right) \Gamma\left(\frac{\varepsilon_s}{2} - \frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{\varepsilon_s}{2} - \frac{1}{2}\right)} = 2^{-1} \pi^{-1} \times \frac{\Gamma\left(\frac{\varepsilon_s}{2}\right) \Gamma\left(\frac{\varepsilon_s}{2} - \frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{\varepsilon_s}{2} - \frac{1}{2}\right)} = 2^{-1} \pi^{-1} \times \frac{\Gamma\left(\frac{\varepsilon_s}{2}\right) \Gamma\left(\frac{\varepsilon_s}{2} - \frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{\varepsilon_s}{2} - \frac{1}{2}\right)} = 2^{-1} \pi^{-1} \times \frac{\Gamma\left(\frac{\varepsilon_s}{2}\right) \Gamma\left(\frac{\varepsilon_s}{2} - \frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{\varepsilon_s}{2} - \frac{1}{2}\right)} = 2^{-1} \pi^{-1} \times \frac{\Gamma\left(\frac{\varepsilon_s}{2} - \frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{\varepsilon_s}{2} - \frac{1}{2}\right)} = 2^{-1} \pi^{-1} \times \frac{\Gamma\left(\frac{\varepsilon_s}{2} - \frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{\varepsilon_s}{2} - \frac{1}{2}\right)} = 2^{-1} \pi^{-1} \times \frac{\Gamma\left(\frac{\varepsilon_s}{2} - \frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{\varepsilon_s}{2} - \frac{1}{2}\right)} = 2^{-1} \pi^{-1} \times \frac{\Gamma\left(\frac{\varepsilon_s}{2} - \frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{\varepsilon_s}{2} - \frac{1}{2}\right)} = 2^{-1} \pi^{-1} \times \frac{\Gamma\left(\frac{\varepsilon_s}{2} - \frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{\varepsilon_s}{2} - \frac{1}{2}\right)} = 2^{-1} \pi^{-1} \times \frac{\Gamma\left(\frac{\varepsilon_s}{2} - \frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{\varepsilon_s}{2} - \frac{1}{2}\right)} = 2^{-1} \pi^{-1} \times \frac{\Gamma\left(\frac{\varepsilon_s}{2} - \frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{\varepsilon_s}{2} - \frac{1}{2}\right)} = 2^{-1} \pi^{-1} \times \frac{\Gamma\left(\frac{\varepsilon_s}{2} - \frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{\varepsilon_s}{2} - \frac{1}{2}\right)} = 2^{-1} \pi^{-1} \times \frac{\Gamma\left(\frac{\varepsilon_s}{2} - \frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{\varepsilon_s}{2} - \frac{1}{2}\right)} = 2^{-1} \pi^{-1} \times \frac{\Gamma\left(\frac{\varepsilon_s}{2} - \frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{\varepsilon_s}{2} - \frac{1}{2}\right)} = 2^{-1} \pi^{-1} \times \frac{\Gamma\left(\frac{\varepsilon_s}{2} - \frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{\varepsilon_s}{2} - \frac{1}{2}\right)} = 2^{-1} \pi^{-1} \times \frac{\Gamma\left(\frac{\varepsilon_s}{2} - \frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{\varepsilon_s}{2} - \frac{1}{2}\right)} = 2^{-1} \pi^{-1} \times \frac{\Gamma\left(\frac{\varepsilon_s}{2} - \frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{\varepsilon_s}{2} - \frac{1}{2}\right)} = 2^{-1} \pi^{-1} \times \frac{\Gamma\left(\frac{\varepsilon_s}{2} - \frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{\varepsilon_s}{2} - \frac{1}{2}\right)} = 2^{-1} \pi^{-1} \times \frac{\Gamma\left(\frac{\varepsilon_s}{2} - \frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{\varepsilon_s}{2} - \frac{1}{2}\right)}$$

$$\times \exp\left(-\frac{\left(x_{a}-x_{0}\right)\left(x-x_{0}\right)+y_{a}y+z_{a}z}{a^{2}}\right)\frac{\Gamma\left(\frac{\varepsilon_{s}}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{\varepsilon_{s}}{2}-\frac{1}{2}\right)}\left(\psi\left(\frac{\varepsilon_{s}}{2}\right)-\psi\left(\frac{\varepsilon_{s}}{2}-\frac{1}{2}\right)\right), (29)$$

где $\psi(x) = \Gamma'(x)/\Gamma(x)$ – логарифмическая производная гамма-функции $\Gamma(x)$.

Запишем окончательное выражение для нормировочных множителей волновых функций $\Psi^s_\lambda(\vec{r};\vec{R}_{a1},\vec{R}_{a2})$ стационарных симметричного и антисимметричного D_2^- -состояний:

$$C_{1}^{2} = 2^{\frac{5}{2}} \pi \beta^{-\frac{1}{2}} E_{d}^{2} a_{d}^{3} \left\{ \frac{\Gamma\left(\frac{\varepsilon_{s}}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{\varepsilon_{s}}{2} - \frac{1}{2}\right)} \left(\psi\left(\frac{\varepsilon_{s}}{2}\right) - \psi\left(\frac{\varepsilon_{s}}{2} - \frac{1}{2}\right) \right) \right\}^{-1} \left\{ \gamma_{1}^{2} \exp\left(-\frac{x_{0}^{2}}{a^{2}}\right) \pm 2 \gamma_{1} \gamma_{2} \exp\left(\frac{x_{0}(x_{a2} - x_{0})}{a^{2}}\right) \exp\left(-\frac{x_{a2}^{2}}{2a^{2}}\right) + \gamma_{2}^{2} \exp\left(-\frac{(x_{a2} - x_{0})^{2}}{a^{2}}\right) \right\}^{-1} \right\}. (30)$$

С помощью выражения (30) для волновой функции $\Psi^s_{\lambda}(\vec{r};\vec{R}_{a1},\vec{R}_{a2})$ стационарного D^-_2 -состояния в КТ во внешнем электрическом поле $(\vec{R}_{a1}=(0,0,0)$ и $\vec{R}_{a2}=(x_{a2},0,0)$ – координаты D^0 - центров) получим

$$\Psi_{\lambda}^{s}(\vec{r};\vec{R}_{a1},\vec{R}_{a2}) = -2^{-\frac{1}{4}}\pi^{-1}\beta^{-\frac{1}{4}}a_{d}^{-\frac{3}{2}}\left(\frac{\Gamma\left(\frac{\varepsilon_{s}}{2}\right)\left(\psi\left(\frac{\varepsilon_{s}}{2}\right) - \psi\left(\frac{\varepsilon_{s}-1}{2}\right)\right)}{\Gamma\left(\frac{\varepsilon_{s}-1}{2}\right)}\right)^{-\frac{1}{2}} \times \left(\gamma_{1}^{2}\exp\left(-\frac{x_{0}^{2}}{a^{2}}\right) + \gamma_{2}^{2}\exp\left(-\frac{(x_{a2}-x_{0})^{2}}{a^{2}}\right) \pm 2\gamma_{1}\gamma_{2}\exp\left(\frac{x_{0}(x_{a2}-x_{0})}{a^{2}}\right) \times \left(\gamma_{1}^{2}\exp\left(-\frac{x_{0}^{2}}{2a^{2}}\right)\right)^{-\frac{1}{2}}\left(\gamma_{1}\int_{0}^{\infty}dt\exp\left[-\varepsilon_{s}t\right]\left(1 - \exp(-2t)\right)^{-\frac{3}{2}}\exp\left(-\frac{r^{2}}{2a^{2}}cth(t)\right) \times \left(\sum_{s=0}^{\infty}\left(\frac{x_{0}(x-x_{0})}{a^{2}}\right) + \sum_{s=0}^{\infty}\left(\frac{x_{0}(x-x_{0})}{a^{2}}\right) + \sum_{s=0}^{\infty}\left(\frac{x_{0}(x-x_{0})}{a^{2}$$

здесь верхний и нижний знаки относятся к g- и и-состояниям соответственно.

В случае квазистационарных D_2^- -состояний методика вычисления нормировочных множителей симметричного ($C_1=C_2$) и антисимметричного ($C_1=-C_2$) D_2^- -состояний аналогична приведенной выше. В результате выражения для нормировочных множителей волновых функций квазистационарных g- и u-состояний (верхние и нижние знаки соответственно) имеют вид

$$C_{1}^{2} = 2^{\frac{5}{2}} \pi^{\frac{3}{2}} \beta^{\frac{1}{2}} E_{d}^{2} a_{d}^{3} \left\{ \frac{\Gamma\left(\frac{\varepsilon_{q}}{2}\right) \left(\psi\left(\frac{\varepsilon_{q}}{2}\right) - \psi\left(\frac{\varepsilon_{q}-1}{2}\right)\right)}{\Gamma\left(\frac{\varepsilon_{q}-1}{2}\right)} \right\}^{-\frac{1}{2}} \left\{ \gamma_{1}^{2} \exp\left(-\frac{x_{0}^{2}}{a^{2}}\right) \pm 2 \gamma_{1} \gamma_{2} \exp\left(\frac{x_{0}(x_{a2}-x_{0})}{a^{2}}\right) \exp\left(-\frac{x_{a2}^{2}}{2a^{2}}\right) + \gamma_{2}^{2} \exp\left(-\frac{(x_{a2}-x_{0})^{2}}{a^{2}}\right) \right\}^{-1}. (32)$$

 № 3 (23), 2012
 Физ

 Используя
 выражение
 (32),

 получим волновую $\Psi^q_{\lambda}\left(ec{r};ec{R}_{a1},ec{R}_{a2}
ight)$ квазистационарного D_2^- -состояния в КТ во внешнем электрическом поле ($\vec{R}_{a1} = (0,0,0)$ и $\vec{R}_{a2} = (x_{a2},0,0)$ – координаты D^0 -центров):

$$\Psi_{\lambda}^{q}(\vec{r};\vec{R}_{a1},\vec{R}_{a2}) = -2^{\frac{1}{4}}\pi^{-\frac{3}{4}}\beta^{-\frac{1}{4}}a_{d}^{-\frac{3}{2}}\left(-\frac{\Gamma\left(\frac{\varepsilon_{q}}{2}\right)\left(\psi\left(\frac{\varepsilon_{q}}{2}\right) - \psi\left(\frac{\varepsilon_{q}-1}{2}\right)\right)}{\Gamma\left(\frac{\varepsilon_{q}-1}{2}\right)}\right)^{\frac{1}{2}} \times \left(\gamma_{1}^{2}\exp\left(-\frac{x_{0}^{2}}{a^{2}}\right) + \gamma_{2}^{2}\exp\left(-\frac{(x_{a2}-x_{0})^{2}}{a^{2}}\right) \pm 2\gamma_{1}\gamma_{2}\exp\left(-\frac{x_{0}(x_{a2}-x_{0})}{a^{2}}\right) \times \left(\gamma_{1}\int_{0}^{\infty}dt\exp\left[-\varepsilon_{q}t\right](1-\exp(-2t))^{-\frac{3}{2}}\exp\left(-\frac{r^{2}}{2a^{2}}\operatorname{cth}(t)\right) \times \left(\varepsilon_{q}\left(\frac{x_{0}}{2}\right)^{2}\right) + \gamma_{2}\int_{0}^{\infty}dt\exp\left[-\varepsilon_{q}t\right](1-\exp(-2t))^{-\frac{3}{2}}\times \left(\varepsilon_{q}\left(\frac{r^{2}-r_{0}}{2a^{2}}\right)^{2}\right) + \varepsilon_{q}\left(\frac{r^{2}-r_{0}}{2a^{2}}\operatorname{cth}(t)\right) + \varepsilon_{q}\left(\frac$$

На рис. 1 представлены рассчитанные с помощью дисперсионных уравнений (18) и (19) зависимости энергии связи $E_{m{g}}$ симметричного g-состояния (кривая 1), средней энергии связи $\overline{E_u}\,$ антисимметричного резонансного u-состояния (кривая 2) и величины расщепления ΔE_{ug} (кривая 3) между g- и u-термами D_2^- -центра в КМ от величины напряженности внешнего электрического поля $\vec{E_0}$.

Как видно из рис. 1, с ростом величины $\,E_0\,$ энергия связи стационарного g-состояния и $\overline{E_u}$ уменьшаются вследствие электронной поляризации и штарковского сдвига энергии. При этом величина расщепления ΔE_{ug} между термами увеличивается за счет разной «скорости» движения g- и u-термов с ростом E_0 . Таким образом, электрическое поле стимулирует распад D_2 -центра с резонансным u-состоянием в КМ.

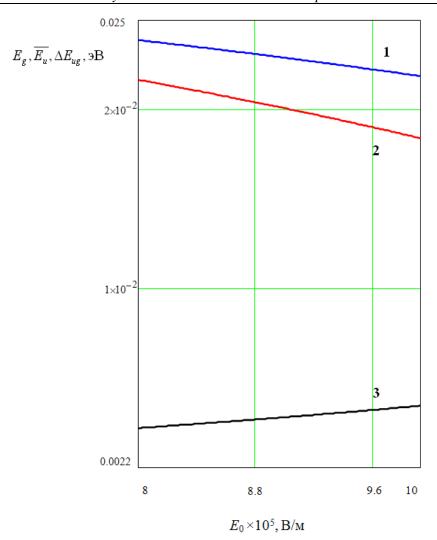


Рис. 1. Зависимость энергии связи E_g симметричного g-состояния (кривая 1), средней энергии связи $\overline{E_u}$ антисимметричного состояния (кривая 2) и расщепления ΔE_{ug} (кривая 3) между g- и u-термами D_2^- -центра ($|E_i|=2\times 10^{-3}$ эВ , $R_0=80$ нм , $U_0=0,2$ эВ) в КМ ($b_0=0.5$, $a_0=1$, $\epsilon_T=1$, $\epsilon_C=1$, $\epsilon_L=1$) от величины внешнего электрического поля

Расчет спектра фотолюминесценции

Рассмотрим ФЛ КМ при излучательном переходе электрона из квазистационарного u-состояния в стационарное g-состояние D_2^- -центра.

В дипольном приближении матричный элемент M_{ug} соответствующего оптического перехода с учетом выражений (31) и (33) примет вид

$$M_{ug} = i \lambda_0 \sqrt{\frac{2\pi\alpha^*}{\omega}} I_0 E_d \left\langle \Psi_{\lambda}^{s*} \left(\vec{r}; \vec{R}_{a1}, \vec{R}_{a2} \right) \middle| \left(\vec{e}_{\lambda}, \vec{r} \right) \middle| \Psi_{\lambda}^{q} \left(\vec{r}; \vec{R}_{a1}, \vec{R}_{a2} \right) \right\rangle =$$

$$= \frac{1}{2^{2}} \frac{7}{\pi^{-4}} \frac{1}{\beta^{-2}} \frac{1}{a_{d}^{-3}} \left(-\frac{\Gamma\left(\frac{\varepsilon_{q}}{2}\right) \left(\psi\left(\frac{\varepsilon_{q}}{2}\right) - \psi\left(\frac{\varepsilon_{q}-1}{2}\right) \right)}{\Gamma\left(\frac{\varepsilon_{q}-1}{2}\right)} \right)^{2} \times \left(-\frac{\Gamma\left(\frac{\varepsilon_{s}}{2}\right) \left(\psi\left(\frac{\varepsilon_{s}}{2}\right) - \psi\left(\frac{\varepsilon_{s}-1}{2}\right) \right)}{\Gamma\left(\frac{\varepsilon_{s}-1}{2}\right)} \right)^{\frac{1}{2}} \times \left(\gamma_{1}^{2} \exp\left(-\frac{x_{0}^{2}}{a^{2}}\right) + \gamma_{2}^{2} \exp\left(-\frac{\left(x_{a2}-x_{0}\right)^{2}}{a^{2}}\right) + \frac{1}{2} \exp\left(-\frac{x_{0}^{2}}{a^{2}}\right) + \frac{1}{2} \exp\left(-\frac{\left(x_{a2}-x_{0}\right)^{2}}{a^{2}}\right) + \frac{1}{2} \exp\left(-\frac{r^{2}}{2a^{2}} \operatorname{cth}(t)\right) \times \left(\exp\left(-\frac{\left(r-R_{a2}\right)^{2}}{a^{2}} \operatorname{cth}(t)\right) + \frac{1}{2} \exp\left(-\frac{\left(r-R_{a$$

где $\lambda_0 = E_{eff} / E_0$ — коэффициент локального поля, учитывающий увеличение амплитуды оптического перехода за счет того, что эффективное локальное поле примесного центра E_{eff} превышает среднее макроскопическое поле в кристалле \overline{E} ; $\alpha^* = |e|^2 / \left(4\pi\epsilon_0 \sqrt{\epsilon} \, \hbar c\right)$ — постоянная тонкой структуры с учетом статической относительной диэлектрической проницаемости ϵ ;

c — скорость света в вакууме; I_0 — интенсивность света; ω — частота излучения с единичным вектором поляризации \vec{e}_{λ} .

Вероятность $P_{u\,g}$ ФЛ КМ при наличии внешнего электрического поля \vec{E}_0 с учетом плотности конечных состояний излучаемых фотонов запишется в виде

$$P_{ug} = \frac{\omega^2}{3\pi^2 c^3 \hbar} \left| M_{ug} \right|^2 \frac{\Gamma_0}{\frac{\hbar^2 \Gamma_0^2}{4} + \left(E_d \left(\eta_s'^2 + \eta_q'^2 \right) - \hbar \omega \right)^2}.$$
 (35)

На рис. 2 представлена зависимость $P_{u\,g}$ от E_0 , построенная с помощью формулы (35). Из рис. 2 видно, что на кривой 2 зависимости вероятности $P_{u\,g}$ ФЛ от напряженности \vec{E}_0 внешнего электрического поля имеется максимум, связанный с появлением пика на полевой зависимости вероятности диссипативного туннелирования Γ_0 . Последний объясняется тем, что первоначально асимметричный двухъямный осцилляторный потенциал КМ трансформируется в симметричный под влиянием внешнего электрического поля.

Изменение энергии $\hbar \omega$ фотона при ФЛ по отношению к средней энергии перехода $\hbar \omega = \overline{E}_q - E_s$ (здесь \overline{E}_q — средняя энергия квазистационарного состояния, E_s — энергия стационарного состояния D_2^- -центра) в силу неопределенности энергии электрона в u-состоянии приводит к уменьшению вероятности P_{ug} ФЛ, что видно из рис. 3 (см. кривую 2). Так как ширина ΔE_q примесного уровня в u-состоянии имеет монотонную зависимость от вероятности туннелирования Γ_0 , то с изменением величины напряженности \vec{E}_0 внешнего электрического поля вероятность ФЛ P_{ug} убывает. Это видно из сравнения кривых 1 и 3 с кривой 2 на рис. 2. По этой же причине максимумы спектральных зависимостей вероятности P_{ug} фотолюминесценции для значений напряженности электрического поля, отличных от той, при которой вероятность туннелирования Γ_0 достигает максимума, становятся меньше (ср. кривые 1 и 3 с кривой 2 на рис. 3).

Также из рис. 2 видно, что на полевой зависимости вероятности P_{ug} ФЛ наблюдаются два максимума: больший соответствует ФЛ с энергией фотона $\hbar\omega = \overline{E}_q - E_s$, а меньший – максимуму на полевой зависимости вероятности туннелирования Γ_0 (см. кривые 1 и 3 на рис. 2). Если же энергия фотона становится равной средней энергии оптического перехода, соответствующей максимуму Γ_0 , то указанные выше максимумы объединяются в один (см. кривую 2 рис. 2).

Смещение максимума ФЛ для энергии фотона $\hbar \omega = \overline{E}_q - E_s$ в коротковолновую область спектра с увеличением напряженности электрического поля объясняется соответствующим поведением резонансного u-состояния и стационарного g-состояния (см. рис. 1): u-терм приближается (кривая 2), а

g-терм удаляется (кривая 1) от уровня энергии основного состояния $E_{0,\,0,0}$ электрона в КТ. Это приводит, как видно из кривой 3 на рис. 1, к увеличению расщепления термов с ростом внешнего электрического поля.

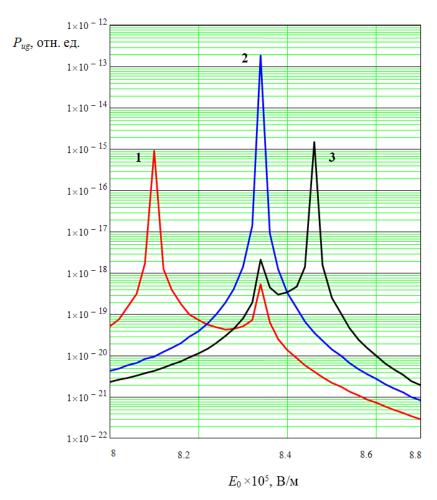


Рис. 2. Зависимость вероятности $P_{u\,g}$ ФЛ ($\left|E_i\right|=2\cdot10^{-3}$ эВ , $R_0=80$ нм , $U_0=0,2$ эВ) КМ ($b_0=0,5$, $a_0=1$, $\epsilon_T=1$, $\epsilon_c=1$, $\epsilon_L=1$) от величины напряженности внешнего электрического поля для различных значений энергии фотона $\hbar\omega:1-\hbar\omega=2,26\cdot10^{-3}$ эВ , $2-\hbar\omega=2,37\cdot10^{-3}$ эВ , $3-\hbar\omega=2,43\cdot10^{-3}$ эВ

Заключение

Исследована ФЛ КМ, содержащей D_2^- -центр с резонансным u-состоянием и квазистационарным g-состоянием. КМ представляет собой две туннельно-связанные КТ с параболическим потенциалом конфайнмента. В модели потенциала нулевого радиуса получены дисперсионные уравнения, описывающие соответствующие u- и g-термы, при наличии внешнего электрического поля. Показано, что внешнее электрическое поле стимулирует распад $D_2^{(-)}$ -центра с резонансным u-состоянием.

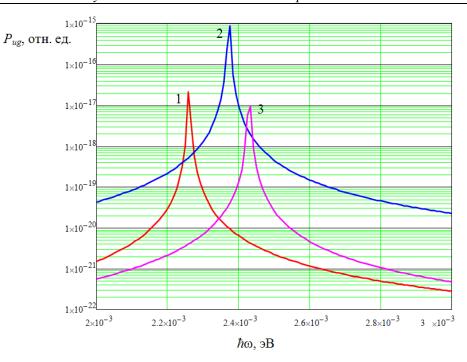


Рис. 3. Спектральная зависимость вероятности P_{ug} ФЛ ($\left|E_i\right|=2\cdot10^{-3}$ эВ , $R_0=80$ нм , $U_0=0.2$ эВ) КМ ($b_0=0.5$, $a_0=1$, $\epsilon_T=1$, $\epsilon_c=1$, $\epsilon_L=1$) для различных значений напряженности внешнего электрического поля \vec{E}_0 : $1-E_0=8\cdot10^5$ В/м , $2-E_0=8.4\cdot10^5$ В/м , $3-E_0=8.5\cdot10^5$ В/м

В дипольном приближении получена аналитическая формула для вероятности ФЛ КМ, связанной с излучательным переходом электрона с резонансного *и*-состояния в квазистационарное *g*-состояние. Исследованы полевая и спектральная зависимости вероятности ФЛ КМ. Показано, что вероятность ФЛ возрастает примерно на два порядка при напряженности внешнего электрического поля, для которой исходно асимметричный двухъямный осцилляторный потенциал, моделирующий КМ, становится симметричным. Таким образом, выявлена возможность эффективного управления ФЛ КМ с помощью внешнего электрического поля, что открывает определенные перспективы для создания новых источников излучения на основе структур с КМ.

Список литературы

- 1. **Алешкин, В. Я.** Примесные резонансные состояния в полупроводниках. Обзор. / В. Я. Алешкин, Л. В. Гавриленко, М. А. Одноблюдов, И. Н. Яссиевич // Физика и техника полупроводников. 2008. Т. 42, № 8. С. 899–922.
- 2. **Гуринович**, **Л. И.** Влияние электрического поля на фотолюминесценцию нанокристаллов селенида кадмия / Л. И. Гуринович, А. А. Лютин, А. П. Ступак и др. // Журнал прикладной спектроскопии. 2010. Т. 77, №1. С. 129—135.
- 3. **Бейтмен,** Г. Высшие трансцендентные функции : в 2 т. / Г. Бейтмен, А. Эрдейн. М. : Наука, 1973.

Кревчик Владимир Дмитриевич

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

E-mail: physics@pnzgu.ru

Грунин Александр Борисович

доктор физико-математических наук, профессор, кафедра физики, Пензенский государственный университет

E-mail: physics@pnzgu.ru

Рудин Вадим Александрович

аспирант, Пензенский государственный университет

E-mail: physics@pnzgu.ru

Krevchik Vladimir Dmitrievich

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

Grunin Alexander Borisovich

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

Rudin Vadim Alexandrovich

Postgraduate student, Penza State University

УДК 535.8; 537.9; 539.23

Кревчик, В. Д.

Фотолюминесценция квантовой молекулы с резонансным u-состоянием D_2^- -центра во внешнем электрическом поле при наличии диссипативного туннелирования / В. Д. Кревчик, А. Б. Грунин, В. А. Рудин // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. — 2012. — N 2010. — 2010. 2010. — 2010.