

УДК 535.8; 537.9; 539.23

ВЛИЯНИЕ ВНЕШНЕГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ И ДИССИПАТИВНОГО ТУННЕЛИРОВАНИЯ НА ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНЦИЮ КВАНТОВОЙ МОЛЕКУЛЫ С РЕЗОНАНСНЫМ u -СОСТОЯНИЕМ D_2^- -ЦЕНТРА© 2013 г. В.Д. Кревчик¹, А.Б. Грунин¹, М.Б. Семенов¹, О.Н. Горшков², М.О. Марычев², Д.О. Филатов², С.А. Губина¹, Т.А. Губин¹, С.В. Яшин¹¹Пензенский госуниверситет
²НИФТИ ННГУ им. Н.И. Лобачевского

physics@pnzgu.ru

Поступила в редакцию 04.04.2013

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 осциляторный потенциал, моделирующий квантовую молекулу, становится симметричным. Выявлена высокая чувствительность вероятности фотолюминесценции к таким параметрам диссипативного туннелирования, как температура, частота фононной моды и константа взаимодействия с контактной средой.

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

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 сильного ($>10^5$ 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 квантовой 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 . Двухцентровый потенциал моделируется суперпозицией потенциалов нулевого радиуса мощностью $\gamma_i = 2\pi\hbar^2/(\alpha_i m^*)$ и в декартовой системе координат имеет вид:

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

где α_i определяется энергией $E_i = -\hbar^2\alpha_i^2 \times (2m^*)^{-1}$ электронного локализованного состояния на этих же D^0 -центрах в объемном полупроводнике.

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

$$\hat{H} = -\hbar^2/(2m^*)\nabla^2 + m^*\omega_0^2(x^2 + y^2 + z^2)/2 - |e|E_0x, \quad (2)$$

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 $\Psi_{n_1, n_2, n_3}(x, y, z)$ гамильтониана (2) даются выражениями вида:

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

$$\Psi_{n_1, n_2, n_3}(x, y, z) = 2^{-\frac{n_1+n_2+n_3}{2}} (n_1! n_2! n_3!)^{-\frac{1}{2}} \pi^{-\frac{3}{4}} a^{-\frac{3}{2}} \times \exp\left[-\frac{(x-x_0)^2 + y^2 + z^2}{2a^2}\right] \times H_{n_1}\left(\frac{x-x_0}{a}\right) H_{n_2}\left(\frac{y}{a}\right) H_{n_3}\left(\frac{z}{a}\right), \quad (4)$$

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

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

и имеет вид линейной комбинации

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

где $c_k = (\hat{T}_k \Psi_\lambda)(\vec{R}_{ak}; \vec{R}_{a1}, \vec{R}_{a2})$; $\hat{T}_k = \lim_{\vec{r} \rightarrow \vec{R}_{ak}} [1 + (\vec{r} - \vec{R}_{ak}) \nabla_{\vec{r}}]$; $G(\vec{r}, \vec{R}_{ak}; E_\lambda)$ – одноэлектронная функция Грина, соответствующая источнику в точке \vec{R}_{ai} и энергии $E_\lambda = \hbar^2 (\lambda^2 + i \lambda'^2) \times (2m^*)^{-1}$ (λ' учитывает уширение примесного энергетического уровня за счет туннельного распада, E_λ – энергия, отсчитываемая от дна КТ):

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

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

$$G(\vec{r}, \vec{R}_{ak}; E_\lambda) = -(2\pi)^{-\frac{3}{2}} \beta^{-\frac{1}{2}} E_d^{-1} a_d^{-3} \times \exp\left[-\frac{(x_{ak} - x_0)^2 + y_{ak}^2 + z_{ak}^2 + (x - x_0)^2 + y^2 + z^2}{2a^2}\right] \times \int_0^\infty dt \exp[-\varepsilon_q t] \times \sum_{n_1=0}^\infty \left(\frac{e^{-t}}{2}\right)^{n_1} \frac{H_{n_1}\left(\frac{x_{ak} - x_0}{a}\right) H_{n_1}\left(\frac{x - x_0}{a}\right)}{n_1!} \times \sum_{n_2=0}^\infty \left(\frac{e^{-t}}{2}\right)^{n_2} \frac{H_{n_2}\left(\frac{y_{ak}}{a}\right) H_{n_2}\left(\frac{y}{a}\right)}{n_2!} \times \sum_{n_3=0}^\infty \left(\frac{e^{-t}}{2}\right)^{n_3} \frac{H_{n_3}\left(\frac{z_{ak}}{a}\right) H_{n_3}\left(\frac{z}{a}\right)}{n_3!}, \quad (8)$$

здесь индекс $k=1, 2$; $\varepsilon_q = -\beta(\eta_q'^2 + i \eta_q''^2) + 3/2 - (\beta^{3/2} a_d |e| E_0 / E_d)^2 + i \Gamma_0 \hbar \beta / E_d$; $\eta_q'^2 + i \eta_q''^2 = E_\lambda / E_d$; $\beta = R_0^* / (4\sqrt{U_0^*})$; $R_0^* = 2R_0 / a_d$; R_0 – радиус КТ; $U_0^* = U_0 / E_d$; U_0 – амплитуда потенциала конфайнмента КТ, удовлетворяющая соотношению $2U_0 = m^* \omega_0^2 R_0^2$; 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:

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

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):

$$S = \frac{1}{2} \left(\frac{b'_0 + x_0^*}{a'_0 + x_0^*} + 1 \right) \left(3 - \frac{b'_0 + x_0^*}{a'_0 + x_0^*} \right) \tau_0^* - \frac{1}{2\beta^*} \left(\frac{b'_0 + x_0^*}{a'_0 + x_0^*} + 1 \right)^2 \tau_0^{*2} - \frac{1}{2\gamma^*} \left(\frac{b'_0 + x_0^*}{a'_0 + x_0^*} + 1 \right)^2 \times$$

$$\begin{aligned}
& \times \left(\frac{(1-x_2^*)}{\sqrt{x_1^*}} - \left[\text{cth}(\beta^* \sqrt{x_1^*}) - \right. \right. \\
& - \frac{1}{\text{sh}(\beta^* \sqrt{x_1^*})} \left(\text{ch}((\beta^* - \tau_0^*) \sqrt{x_1^*}) - \text{ch}[\beta^* \sqrt{x_1^*}] \right) + \\
& \quad \left. \left. + \text{ch}((\beta^* - \tau_0^*) \sqrt{x_1^*}) \right] - \right. \\
& - \frac{(1-x_1^*)}{\sqrt{x_2^*}} \left[\text{cth}(\beta^* \sqrt{x_2^*}) - \right. \\
& - \frac{1}{\text{sh}(\beta^* \sqrt{x_2^*})} \left(\text{ch}((\beta^* - \tau_0^*) \sqrt{x_2^*}) - \text{ch}(\beta^* \sqrt{x_2^*}) \right) + \\
& \quad \left. \left. + \text{ch}((\beta^* - \tau_0^*) \sqrt{x_2^*}) \right] \right), \quad (10)
\end{aligned}$$

где

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

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

$$\begin{aligned}
B &= \frac{2 E_d \sqrt{U_0^*}}{\hbar \sqrt{\pi}} \left(\frac{b_0' + x_0^*}{a_0' + x_0^*} + 1 \right) \sqrt{\varepsilon_T^*} \times \\
& \times \left\{ \left[A^* \left[\beta_1^* \text{ch}(\beta_1^*/2) - 1 \right] + \right. \right. \\
& \quad \left. \left. + D^* \left[\beta_2^* \text{ch}(\beta_2^*/2) - 1 \right] \right] \times \right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \times \left\{ A^* \left[\frac{\beta_1^* \text{ch}(\beta_1^*/2 - \tau_{01}^*)}{2 \text{sh}(\beta_1^*/2)} - 1 \right] + \right. \\
& + D^* \left[\frac{\beta_2^* \text{ch}(\beta_2^*/2 - \tau_{02}^*)}{2 \text{sh}(\beta_2^*/2)} - 1 \right] \Big\}^{-\frac{1}{2}} + \\
& + \left(A^* \left(1 - \frac{\beta_1^* \text{ch}(\beta_1^*/2 - \tau_{01}^*)}{2 \text{sh}(\beta_1^*/2)} \right) + \right. \\
& + D^* \left(\frac{\beta_2^* \text{ch}(\beta_2^*/2 - \tau_{02}^*)}{2 \text{sh}(\beta_2^*/2)} - 1 \right) \Big) \times \\
& \times \left\{ A^* \left[\frac{\beta_1^* \text{ch}(\beta_1^*/2 - \tau_{01}^*)}{2 \text{sh}(\beta_1^*/2)} - 1 \right] + \right. \\
& + D^* \left[\frac{\beta_2^* \text{ch}(\beta_2^*/2 - \tau_{02}^*)}{2 \text{sh}(\beta_2^*/2)} - 1 \right] \Big\}^{-\frac{1}{2}} \Big\}, \quad (11)
\end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
A^* &= (2\varepsilon_L^{*2} a^{*2} - x_1^*) / ((x_1^* - x_2^*) x_1^*), \\
D^* &= (2\varepsilon_L^{*2} a^{*2} - x_2^*) / ((x_1^* - x_2^*) x_2^*), \\
\beta_1^* &= \sqrt{2U_0^*} \sqrt{x_1^*} / (a^* \varepsilon_T^*), \\
\beta_2^* &= \sqrt{2U_0^*} \sqrt{x_2^*} / (a^* \varepsilon_T^*), \quad \tau_{01}^* = \tau_0^* \sqrt{x_1^*} / \sqrt{2}, \\
\tau_{02}^* &= \tau_0^* \sqrt{x_2^*} / \sqrt{2}.
\end{aligned}$$

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

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

В результате для электронной функции Грина получим:

$$\begin{aligned}
G(\vec{r}, \vec{R}_{ak}; E_\lambda) &= -(2\pi)^{-\frac{3}{2}} \beta^{-\frac{1}{2}} E_d^{-1} a_d^{-3} \times \\
& \times \int_0^\infty dt \exp[-\varepsilon_q t] \left\{ (1 - e^{-2t})^{-\frac{3}{2}} \times \right. \\
& \quad \times \exp \left[-\frac{(\vec{r} - \vec{R}_{ak})^2}{2a^2} \text{cth}(t) \right] \times \\
& \quad \times \exp \left(-\frac{(x_{ak} - x_0)(x - x_0) + y_{ak} y + z_{ak} z}{a^2} \text{th} \left(\frac{t}{2} \right) \right) \Big\}. \quad (13)
\end{aligned}$$

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

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

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

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:

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

Коэффициенты a_{kj} , входящие в (15), с учетом (13) могут быть записаны в виде:

$$\begin{aligned} a_{kk} &= -(2\pi)^{\frac{3}{2}} \beta^{-\frac{1}{2}} E_d^{-1} a_d^{-3} \times \\ &\times \left\{ \int_0^{+\infty} dt \exp[-\varepsilon_q t] \left[(1 - e^{-2t})^{-\frac{3}{2}} \times \right. \right. \\ &\times \exp \left[-\frac{((x_{ak} - x_0)^2 + y_{ak}^2 + z_{ak}^2) \text{th} \left(\frac{t}{2} \right)}{a^2} \right] - \\ &\left. \left. - (2t)^{-\frac{3}{2}} - \sqrt{\frac{\pi}{2}} \sqrt{\varepsilon_q} \right\}, \quad (16) \\ a_{kj} &= -(2\pi)^{\frac{3}{2}} \beta^{-\frac{1}{2}} E_d^{-1} a_d^{-3} \times \\ &\times \int_0^{+\infty} dt \exp[-\varepsilon_q t] (1 - e^{-2t})^{-\frac{3}{2}} \exp \left[-\frac{(\vec{R}_{ak} - \vec{R}_{aj})^2 \text{cth}(t)}{2a^2} \right] \times \\ &\times \exp \left[-((x_{ak} - x_0)(x_{aj} - x_0) + y_{ak} y_{aj} + z_{ak} z_{aj}) \times \right. \\ &\left. \times a^{-2} \times \text{th} \left(\frac{t}{2} \right) \right]. \quad (17) \end{aligned}$$

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:

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

$$\gamma a_{11} - \gamma a_{12} = 1 \quad (c_1 = -c_2). \quad (19)$$

При этом волновые функции стационарно-го $\Psi_\lambda^s(\vec{r}; \vec{R}_{a1}, \vec{R}_{a2})$ и резонансного D_2^- -состояния $\Psi_\lambda^q(\vec{r}; \vec{R}_{a1}, \vec{R}_{a2})$ в КТ во внешнем электрическом поле ($\vec{R}_{a1} = (0, 0, 0)$ и $\vec{R}_{a2} = (x_{a2}, 0, 0)$ – координаты D^0 -центров) имеют соответственно вид:

$$\Psi_\lambda^s(\vec{r}; \vec{R}_{a1}, \vec{R}_{a2}) = -2^{-\frac{1}{4}} \pi^{-1} \beta^{-\frac{1}{4}} a_d^{-\frac{3}{2}} \times$$

$$\begin{aligned} &\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 \\ &\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 \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) \left. \right)^{-\frac{1}{2}} \times \\ &\times \left(\gamma_1 \int_0^\infty dt \exp[-\varepsilon_s t] (1 - \exp(-2t))^{-\frac{3}{2}} \times \right. \\ &\times \exp \left(-\frac{r^2}{2a^2} \text{cth}(t) \right) \exp \left(\frac{x_0(x - x_0)}{a^2} \text{th} \left(\frac{t}{2} \right) \right) \pm \\ &\pm \gamma_2 \int_0^\infty dt \exp[-\varepsilon_s t] (1 - \exp(-2t))^{-\frac{3}{2}} \times \\ &\times \exp \left(-\frac{(\vec{r} - \vec{R}_{a2})^2}{2a^2} \text{cth}(t) \right) \times \quad (20) \\ &\times \exp \left(-\frac{(x_{a2} - x_0)(x - x_0)}{a^2} \text{th} \left(\frac{t}{2} \right) \right) \left. \right), \\ \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}} \times \\ &\times \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 \\ &\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 \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) \left. \right)^{-\frac{1}{2}} \times \\ &\times \left(\gamma_1 \int_0^\infty dt \exp[-\varepsilon_q t] (1 - \exp(-2t))^{-\frac{3}{2}} \times \right. \\ &\times \exp \left(-\frac{r^2}{2a^2} \text{cth}(t) \right) \exp \left(-\frac{x_0(x - x_0)}{a^2} \text{th} \left(\frac{t}{2} \right) \right) \pm \\ &\pm \gamma_2 \int_0^\infty dt \exp[-\varepsilon_q t] (1 - \exp(-2t))^{-\frac{3}{2}} \times \end{aligned}$$

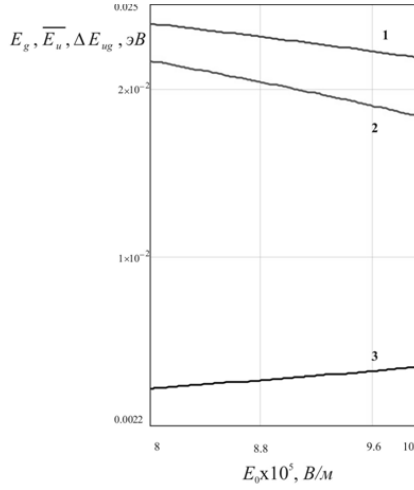


Рис. 1. Зависимость энергии связи E_g симметричного g -состояния (кривая 1), средней энергии связи \bar{E}_u антисимметричного состояния (кривая 2) и расщепления ΔE_{ug} (кривая 3) между g - и u -термами D_2^- -центра ($|E_i| = 2 \times 10^{-3}$ эВ, $R_0 = 80$ нм, $U_0 = 0.2$ эВ) в КМ ($b_0 = 0.5$, $a_0 = 1$, $\epsilon_T = 1$, $\epsilon_c = 1$, $\epsilon_L = 1$) от величины внешнего электрического поля

$$\begin{aligned} & \times \exp\left(-\frac{(\vec{r} - \vec{R}_{a2})^2}{2a^2} \text{cth}(t)\right) \times \\ & \times \exp\left(\frac{(x_{a2} - x_0)(x - x_0)}{a^2} \text{th}\left(\frac{t}{2}\right)\right). \end{aligned} \quad (21)$$

Здесь верхний и нижний знаки относятся к g - и u -состояниям соответственно.

На рис. 1 представлены результаты численного анализа, полученные с помощью дисперсионных уравнений (18) и (19). Как видно из рис. 1, с ростом величины E_0 энергия связи стационарного g -состояния и \bar{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.

Расчет спектра фотолуминесценции

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 (20) и (21) примет вид:

$$\begin{aligned} M_{ug} &= i \lambda_0 \sqrt{\frac{2\pi\alpha^*}{\omega}} I_0 \times \\ & \times E_d \left\langle \Psi_\lambda^{s*}(\vec{r}; \vec{R}_{a1}, \vec{R}_{a2}) (\vec{e}_\lambda, \vec{r}) \Psi_\lambda^g(\vec{r}; \vec{R}_{a1}, \vec{R}_{a2}) \right\rangle = \\ & = 2^{\frac{1}{2}} \pi^{-\frac{7}{4}} \beta^{-\frac{1}{2}} a_d^{-3} \left(-\frac{\Gamma\left(\frac{\epsilon_q}{2}\right) \left(\Psi\left(\frac{\epsilon_q}{2}\right) - \Psi\left(\frac{\epsilon_q-1}{2}\right) \right)}{\Gamma\left(\frac{\epsilon_q-1}{2}\right)} \right)^{-\frac{1}{2}} \times \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \times \left(-\frac{\Gamma\left(\frac{\epsilon_s}{2}\right) \left(\Psi\left(\frac{\epsilon_s}{2}\right) - \Psi\left(\frac{\epsilon_s-1}{2}\right) \right)}{\Gamma\left(\frac{\epsilon_s-1}{2}\right)} \right)^{-\frac{1}{2}} \times \\ & \times \left(\gamma_1^2 \exp\left(-\frac{x_0^2}{a^2}\right) + \gamma_2^2 \exp\left(-\frac{(x_{a2} - x_0)^2}{a^2}\right) \right) \pm \\ & \pm 2\gamma_1\gamma_2 \exp\left(-\frac{x_0(x_{a2} - x_0)}{a^2}\right) \exp\left(-\frac{x_{a2}^2}{2a^2}\right)^{-1} \times \\ & \times i \lambda_0 \sqrt{\frac{2\pi\alpha^*}{\omega}} I_0 E_d \times \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx dy dz (\vec{e}_\lambda, \vec{r}) \times \\ & \times \left(\gamma_1 \int_0^\infty dt \exp[-\epsilon_s t] (1 - \exp(-2t))^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{r^2}{2a^2} \text{cth}(t)\right) \times \right. \\ & \times \exp\left(-\frac{x_0(x - x_0)}{a^2} \text{th}\left(\frac{t}{2}\right)\right) \pm \\ & \pm \gamma_2 \int_0^\infty dt \exp[-\epsilon_s t] (1 - \exp(-2t))^{\frac{3}{2}} \times \\ & \times \exp\left(-\frac{(\vec{r} - \vec{R}_{a2})^2}{2a^2} \text{cth}(t)\right) \times \\ & \times \exp\left(\frac{(x_{a2} - x_0)(x - x_0)}{a^2} \text{th}\left(\frac{t}{2}\right)\right) \left. \right) \times \\ & \times \left(\gamma_1 \int_0^\infty dt \exp[-\epsilon_q t] (1 - \exp(-2t))^{\frac{3}{2}} \times \right. \\ & \times \exp\left(-\frac{r^2}{2a^2} \text{cth}(t)\right) \times \\ & \times \exp\left(-\frac{x_0(x - x_0)}{a^2} \text{th}\left(\frac{t}{2}\right)\right) \pm \\ & \left. \pm \gamma_2 \int_0^\infty dt \exp[-\epsilon_q t] (1 - \exp(-2t))^{\frac{3}{2}} \times \right. \end{aligned}$$

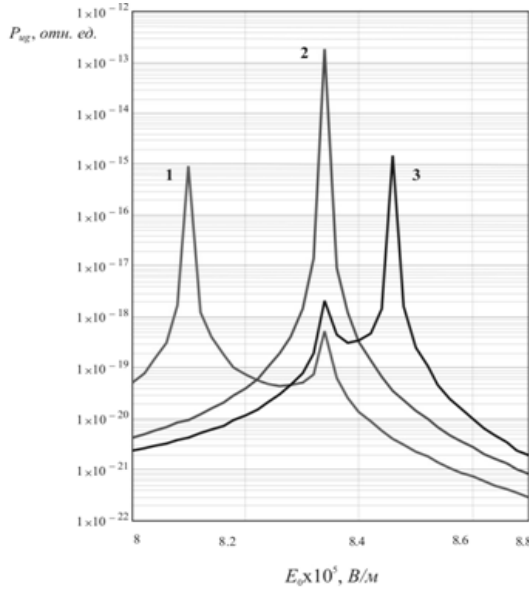


Рис. 2. Зависимость вероятности P_{ug} ФЛ ($|E_i| = 2 \times 10^{-3}$ эВ, $R_0 = 80$ нм, $U_0 = 0.2$ эВ) КМ ($b_0 = 0.5$, $a_0 = 1$, $\epsilon_T = 1$, $\epsilon_c = 1$, $\epsilon_L = 1$) от величины напряженности внешнего электрического поля для различных значений энергии фотона $\hbar\omega$: 1 – $\hbar\omega = 2.26 \times 10^{-3}$ эВ, 2 – $\hbar\omega = 2.37 \times 10^{-3}$ эВ, 3 – $\hbar\omega = 2.43 \times 10^{-3}$ эВ

$$\times \exp\left(-\frac{(\vec{r} - \vec{R}_{a2})^2}{2a^2} \text{cth}(t)\right) \times \exp\left(\frac{(x_{a2} - x_0)(x - x_0)}{a^2} \text{th}\left(\frac{t}{2}\right)\right), \quad (22)$$

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 \bar{E} ; $\alpha^* = |e|^2 / (4\pi\epsilon_0\sqrt{\epsilon}\hbar c)$ – 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_{ug} ФЛ КМ при наличии внешнего электрического поля \vec{E}_0 с учетом плотности конечных состояний излучаемых фотонов запишется в виде:

$$P_{ug} = \frac{\omega^2}{3\pi^2 c^3 \hbar} |M_{ug}|^2 \times \frac{\Gamma_0}{\frac{\hbar^2 \Gamma_0^2}{4} + (E_d(\eta_s'^2 + \eta_q'^2) - \hbar\omega)^2}. \quad (23)$$

На рис. 2 представлена зависимость P_{ug} от E_0 , построенная с помощью формулы (23). Из рис. 2 видно, что на кривой 2 зависимости вероятности P_{ug} 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 $\hbar\omega = \bar{E}_q - E_s$ (здесь \bar{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} фотолуминесценции 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 $\hbar\omega = \bar{E}_q - E_s$, 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 $\hbar\omega = \bar{E}_q - E_s$ 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

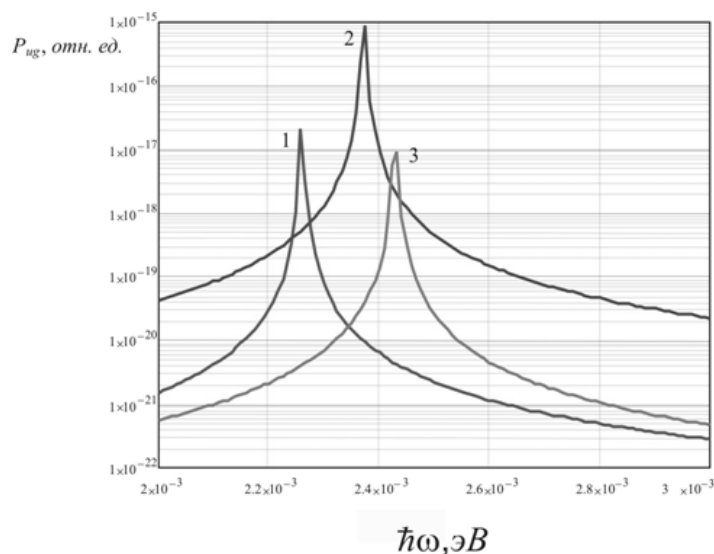


Рис. 3. Спектральная зависимость вероятности P_{ug} ФЛ ($|E_i| = 2 \times 10^{-3}$ эВ, $R_0 = 80$ нм, $U_0 = 0.2$ эВ) КМ ($b_0 = 0.5$, $a_0 = 1$, $\varepsilon_T = 1$, $\varepsilon_c = 1$, $\varepsilon_L = 1$) для различных значений напряженности внешнего электрического поля \vec{E}_0 : 1 – $E_0 = 8 \times 10^5$ В/м, 2 – $E_0 = 8.4 \times 10^5$ В/м, 3 – $E_0 = 8.5 \times 10^5$ В/м

основного состояния $E_{0,0,0}$ электрона в КТ. Это приводит, как видно из кривой 3 рис. 1, к увеличению расщепления термов с ростом внешне-го электрического поля.

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. В дипольном приближении получена аналитическая формула для вероятности ФЛ КМ, связанной с излучательным переходом электрона с резонансного u -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.

Исследование выполнено при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» (соглашение 14.В37.21.0132).

Работа частично выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 12-02-97002) и Фонда фундаментальных исследований в области естественных наук Министерства науки Республики Казахстан (грант 1253/ГФ), федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» (Программное мероприятие № 1.3.1.).

Список литературы

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

**INFLUENCE OF EXTERNAL ELECTRIC FIELD AND DISSIPATIVE TUNNELING
ON PHOTOLUMINESCENCE OF A QUANTUM MOLECULE
WITH RESONANT U-STATE OF D_2^- -CENTER**

*V.D. Krevchik, A.B. Grunin, M.B. Semenov, O.N. Gorshkov, M.O. Marychev,
D.O. Filatov, S.A. Gubina, T.A. Gubin, S.V. Yashin*

In the model of a zero-radius potential, the article studies the influence of an external electric field on the photoluminescence of a quantum molecule, which is connected with the electron radiative transition from U-state to g-term of D_2^- -center under conditions of dissipative tunnelling.

The photoluminescence probability is shown to increase approximately by two orders when the external electric field strength causes the initially asymmetric double-well oscillatory potential (simulating the quantum molecule) to become a symmetric one. The photoluminescence probability has been shown to be highly sensitive to such parameters of dissipative tunneling as temperature, frequency of phonon mode, and the heat-bath interaction constant.

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