

УДК 535.8; 537.9; 539.33
doi:10.21685/2072-3040-2021-4-12

Особенности температурного гашения рекомбинационного излучения в полупроводниковых квантовых точках с примесными комплексами

В. Д. Кревчик¹, А. В. Разумов², М. Б. Семенов³,
Е. А. Печерская⁴, И. М. Мойко⁵, П. Е. Голубков⁶

^{1,2,3,4,5,6}Пензенский государственный университет, Пенза, Россия

^{1,2,3,5}physics@pnzgu.ru, ⁴peal@list.ru, ⁶golpavpnz@yandex.ru

Аннотация. *Актуальность и цели.* Полупроводниковые квантовые точки, благодаря своим уникальным оптическим свойствам, являются перспективным материалом для создания приборов оптоэлектроники. В то же время параметры приборов существенным образом меняются в широком диапазоне температур, что требует знания температурной зависимости как зонной структуры, так и энергии примесных уровней в квантовых точках. При этом электрон-фононное взаимодействие выступает в качестве важнейшего механизма температурного сдвига энергетических уровней. Цель работы заключается в теоретическом исследовании влияния электрон-фононного взаимодействия на температурную зависимость излучательной рекомбинации в примесном комплексе ($A^+ + e$) в полупроводниковой квазинульмерной структуре. *Материалы и методы.* Теоретическое рассмотрение влияния температуры на энергетические уровни в полупроводниковой квантовой точке проводилось статистическим методом в предположении, что основной вклад в температурную зависимость дает электрон-фононное взаимодействие. Дисперсионное уравнение, определяющее энергию связи дырки в примесном комплексе ($A^+ + e$) в сферически симметричной квантовой точке, получено в рамках адиабатического приближения в модели потенциала нулевого радиуса. Расчет спектральной интенсивности рекомбинационного излучения в квазинульмерной структуре с примесными комплексами ($A^+ + e$) выполнен в дипольном приближении с учетом дисперсии радиуса квантовых точек. Кривые температурной зависимости построены для случая квантовых точек на основе InSb. *Результаты.* Рассчитана температурная зависимость энергии связи в комплексе ($A^+ + e$) для различных значений радиуса квантовой точки. Показано, что с ростом температуры энергия связи дырки уменьшается, что связано с температурным «расплыванием» волновой функции квазистационарного A^+ -состояния в условиях электрон-фононного и дырочно-фононного взаимодействия. Найдено, что с уменьшением радиуса квантовой точки энергия связи A^+ -состояния увеличивается за счет роста энергии основного состояния адиабатического потенциала электрона. Рассчитана зависимость спектральной интенсивности рекомбинационного излучения от энергии перехода для различных значений температуры. Найдено, что с ростом температуры происходит сдвиг пороговой энергии перехода в коротковолновую область спектра и имеет место температурное гашение рекомбинационного излучения. Это связано с уменьшением интеграла перекрытия волновых функций начального и конечного состояний электрона из-за роста энергии перехода. *Выводы.* Влияние электрон-фононного взаимодействия на рекомбинационные процессы в примесном комплексе ($A^+ + e$) в сфе-

рически симметричной квантовой точке проявляется в температурном гашении спектральной интенсивности рекомбинационного излучения. Эффект выхода на «плато», по-видимому, является общим для разных механизмов фотолюминесценции.

Ключевые слова: квантовая точка, примесный комплекс, метод потенциала нулевого радиуса, адиабатическое приближение, электрон-фононное взаимодействие, интенсивность рекомбинационного излучения

Финансирование: работа выполнена при поддержке гранта Министерства науки и высшего образования Российской Федерации № 0748-2020-0012.

Для цитирования: Кревчик В. Д., Разумов А. В., Семенов М. Б., Печерская Е. А., Мойко И. М., Голубков П. Е. Особенности температурного гашения рекомбинационного излучения в полупроводниковых квантовых точках с примесными комплексами // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. 2021. № 4. С. 155–177. doi:10.21685/2072-3040-2021-4-12

Features of recombination radiation temperature reduction in semiconductor quantum dots with extrinsic complexes

V.D. Krevchik¹, A.V. Razumov², M.B. Semenov³,
E.A. Pecherskaya⁴, I.M. Moyko⁵, P.E. Golubkov⁶

^{1,2,3,4,5,6}Penza State University, Penza, Russia

^{1,2,3,5}physics@pnzgu.ru, ⁴peal@list.ru, ⁶golpavpnz@yandex.ru

Abstract. *Background.* Semiconductor quantum dots, due to their unique optical properties, are a promising material for creating optoelectronic devices. At the same time, the devices' parameters change significantly over a wide temperature range, which requires knowledge of the temperature dependence of both the band structure and the energy of impurity levels in quantum dots. In this case, the electron-phonon interaction acts as the most important mechanism for the temperature shift of energy levels. The purpose of this work is to theoretically study the effect of electron-phonon interaction on the temperature dependence of radiative recombination in an extrinsic complex ($A^+ + e$) in a semiconductor quasi-zero-dimensional structure. *Materials and methods.* The theoretical consideration of the temperature effect on the energy levels in a semiconductor quantum dot was carried out by a statistical method under the assumption that the main contribution to the temperature dependence comes from the electron-phonon interaction. The dispersion equation, which determines the binding energy of a hole in an extrinsic complex ($A^+ + e$) in a spherically symmetric quantum dot, was obtained in the framework of the adiabatic approximation in the model of a zero-radius potential. The calculation of the spectral intensity of recombination radiation in a quasi-zero-dimensional structure with extrinsic complex ($A^+ + e$) was performed in the dipole approximation taking into account the dispersion of the radius of quantum dots. The temperature dependence curves are plotted for the case of InSb-based quantum dots. *Results.* The temperature dependence of the binding energy in the complex ($A^+ + e$) is calculated for various values of the quantum dot radius. It is shown that, with increasing temperature, the hole binding energy decreases, which is associated with the temperature “spreading” of the wave function of the quasistationary A^+ -state under conditions of electron-phonon and hole-phonon interactions. It was found that with a decrease in the radius of a quantum dot, the binding energy of the A^+ -state increases due to an increase in the energy of the ground state of the adiabatic potential of an electron. The dependence of the spectral intensity of the recombination radiation on the transition energy is calculated for various values of temperature. It was found that with increasing temperature,

the threshold transition energy shifts to the short-wavelength region of the spectrum, and temperature quenching of the recombination radiation takes place. This is due to a decrease in the overlap integral of the wave functions of the initial and final states of an electron due to an increase in the transition energy. *Conclusions.* The effect of electron-phonon interaction on recombination processes in extrinsic complexes ($A^+ + e$) in a spherically symmetric quantum dot manifests itself in temperature reduction of the spectral intensity of the recombination radiation. The effect of reaching a “plateau” appears to be common to different photoluminescence mechanisms.

Keywords: quantum dot, extrinsic complex, zero-radius potential method, adiabatic approximation, electron-phonon interaction, intensity of recombination radiation

Acknowledgments: the work was supported within the grant No. 0748-2020-0012 of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation.

For citation: Krevchik V.D., Razumov A.V., Semenov M.B., Pecherskaya E.A., Moyko I.M., Golubkov P.E. Features of recombination radiation temperature reduction in semiconductor quantum dots with extrinsic complexes. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki = University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences.* 2021;(4):155–177. (In Russ.). doi:10.21685/2072-3040-2021-4-12

Введение

Как правило, температурная зависимость фотолюминесценции в квантовых точках определяется конкурирующими процессами, связанными с радиационным и безызлучательным механизмами релаксации носителей заряда. Так, например, в работе [1] экспериментально исследовалась рекомбинация носителей заряда в квантовых точках (КТ) на основе Ge, выращенных на подложках Si и SiO₂. Наблюдавшиеся низкие энергии активации температурного гашения линий фотолюминесценции (ФЛ) авторы работы объясняют тем, что при повышении температуры дырки с уровней размерного квантования переходят на уровни дефекта, локализованного в окрестности КТ. В этом случае разность энергии активации температурного гашения ФЛ и энергии локализации дырок на уровнях размерного квантования равна энергии залегания дефекта. Таким образом, при повышении температуры возникает недостаток дырок в КТ, и рост ФЛ оказывается невозможным. В работе [2] показано, что характер температурного затухания интенсивности люминесценции самоорганизованных квантовых точек в квантовых ямах, образованных слоями CdTe в ZnTe, зависит от частоты возбуждающего света, а при надбарьерном возбуждении сильно зависит от плотности оптического возбуждения. Обнаружено, что увеличение интенсивности возбуждения приводит к насыщению термического тушения люминесценции в области низких температур. Сделан вывод, что такое поведение отражает насыщение центров безызлучательной рекомбинации фотовозбужденными носителями.

Для понимания экстремального вида температурных зависимостей ФЛ может оказаться полезной модель экситонной люминесценции полупроводниковых КТ [3, 4]. Авторы [3] с использованием трехуровневой энергетической схемы получили согласующееся с экспериментом уравнение, описывающее температурную зависимость интенсивности ФЛ в полупроводниковых КТ. Экспериментально наблюдаемый эффект температурного разгорания фотолюминесценции кластеров nc-Si в пленках SiO₂ связан с увеличением плотности триплетных возбуждений, выступающих в качестве излучательных

состояний [3]. В работе [4] рассмотрены процессы возбуждения–релаксации размерно-ограниченных экситонов в полупроводниковых КТ при непрямом высокоэнергетическом возбуждении. Для описания температурного поведения ФЛ КТ в диэлектрической матрице SiO_2 использована модель, учитывающая процесс заселения триплетных состояний КТ при переносе возбуждения подвижными экситонами матрицы. Получены аналитические выражения, учитывающие многостадийные схемы релаксационных переходов. Авторы [4] делают вывод о том, что сложный характер температурных зависимостей при непрямом возбуждении ФЛ может быть связан с многоэтапным процессом передачи энергии с участием экситонных состояний матрицы и КТ. Таким образом, многообразие возможных механизмов возбуждения ФЛ в КТ требует детального анализа в каждом конкретном случае с учетом реализации различных схем переноса поглощаемой энергии и типа электронных переходов.

Цель настоящей работы заключается в теоретическом исследовании влияния электрон-фононного взаимодействия на энергию связи дырки в примесном комплексе $(A^+ + e)$ в сферически симметричной КТ, а также на температурную зависимость спектральной интенсивности рекомбинационного излучения (СИРИ) квазиульмерной структуры с примесными комплексами $(A^+ + e)$.

Температурная зависимость энергетических уровней в полупроводниковой квантовой точке

Как известно [5–8], с ростом температуры в полупроводниковых материалах наблюдается уменьшение ширины запрещенной зоны $E_g(T)$. Исключение составляют некоторые узкозонные полупроводники на основе халькогенидов свинца, где с ростом температуры ширина запрещенной зоны увеличивается [5].

В случае полупроводниковой КТ роль, аналогичную ширине запрещенной зоны, играет расстояние между уровнями основного состояния в размерно-квантованных зонах. При этом для большинства полупроводниковых материалов наиболее существенный вклад в температурную динамику указанных энергетических уровней вносит электрон-фононное взаимодействие [8, 9]. Теоретическое рассмотрение влияния температуры на энергетические уровни в полупроводниковой КТ можно провести статистическим методом (см. например [8]) в предположении, что основной вклад в температурную зависимость вносит электрон-фононное взаимодействие.

Вероятность того, что электрон находится в состоянии с энергией E_n , задается функцией Ферми

$$f(\Psi) = \frac{1}{1 + \exp\left[\frac{E_n - E_F}{kT}\right]}, \quad (1)$$

где E_F – энергия Ферми.

Как известно, в квантовой статистике величина E_n имеет смысл свободной энергии и определяется квантовым каноническим распределением Гиббса

$$w(E) = \exp\left(\frac{E_n - E}{kT}\right), \quad (2)$$

где $w(E)$ – вероятность заданного дискретного значения энергии E .

В нашем случае E_n – это энергия электрона, усредненная по колебательным состояниям кристаллической решетки и определяемая как

$$\exp\left(-\frac{E_n}{kT}\right) = \sum_{i=0}^{\infty} \exp\left(-\frac{E_{ni}}{kT}\right), \quad (3)$$

здесь E_{ni} – энергия электрона, когда он находится в состоянии n , а кристаллическая решетка в состоянии i . Эта энергия складывается из электронного слагаемого E_{en} , энергии фонона E_p и энергии электрон-фононного взаимодействия E_{ep} :

$$E_{ni} = E_{en} + E_p + E_{ep}. \quad (4)$$

Если $\mathbf{q}$ – волновой вектор фонона, $\omega_{LA}(\mathbf{q})$, $\omega_{TA}(\mathbf{q})$ – частоты продольных (LA) и поперечных (TA) акустических фононов, а $\hbar\omega_{LA}(\mathbf{q})$, $\hbar\omega_{TA}(\mathbf{q})$ – энергии двухчастичного электрон-фононного взаимодействия, то для E_p и E_{ep} можно записать в виде

$$E_p + E_{ep} = \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \hbar [\omega_{LA}(\mathbf{q}) + 2\omega_{TA}(\mathbf{q}) + \omega_{eLA}(\mathbf{q}) + 2\omega_{eTA}(\mathbf{q})] \left[N_i + \frac{1}{2}\right] dq, \quad (5)$$

здесь a – постоянная решетки; $N_i = 0, 1, 2, \dots$ – фононные числа заполнения.

Для интегрирования в (5) необходимо знание соответствующих законов дисперсии. Для трех ветвей акустических фононов (продольной и двух поперечных) в приближении длинных волн справедлив линейный закон дисперсии:

$$\omega_p(\mathbf{q}) = v_j q, \quad (6)$$

где v_j – скорость звука для j -й ветви фононов.

Энергия электрон-фононного взаимодействия определяется выражением [10]:

$$\hbar\omega_{ep}(\mathbf{q}) = \frac{\Xi}{v_j} \sqrt{\frac{kT}{2\rho V}} G, \quad (7)$$

где Ξ – деформационный потенциал; ρ – плотность материала КТ; G – интеграл перекрытия.

Тогда, выполняя в (5) интегрирование, получим

$$\exp\left(-\frac{E_n}{kT}\right) = \exp\left(-\frac{E_{en}}{kT}\right) \sum_{i=0}^{\infty} \exp\left(-\frac{\Omega}{\sqrt{kT}} \left(\frac{1}{v_{LA}} + \frac{2}{v_{TA}}\right) \left(N_i + \frac{1}{2}\right)\right), \quad (8)$$

здесь v_{LA} и v_{TA} – скорости продольных и поперечных фононов и введено обозначение

$$\Omega = \frac{\pi \hbar \Xi G}{a} \sqrt{\frac{2}{\rho V}}, \quad (9)$$

где a – постоянная кристаллической решетки.

Проводя суммирование в (8) для температурной зависимости n -го энергетического уровня, получим

$$E_n = E_{en} + kT \ln \left[4sh \left(\frac{\Omega}{v_{LA} \sqrt{kT}} \right) sh \left(\frac{2\Omega}{v_{TA} \sqrt{kT}} \right) \right]. \quad (10)$$

Температурная зависимость энергии связи дырок в комплексах $(A^+ + e)$ в полупроводниковых КТ

Рассмотрим далее задачу о связанных состояниях дырки в примесном комплексе $(A^+ + e)$ в полупроводниковой сферически симметричной КТ. В качестве модели удерживающего потенциала КТ используется потенциал бесконечно глубокой сферически симметричной потенциальной ямы:

$$U(r) = \begin{cases} 0, & \text{если } r < R_0, \\ \infty, & \text{если } r \geq R_0, \end{cases} \quad (11)$$

где R_0 – радиус КТ.

Взаимодействие электрона, находящегося в основном состоянии в КТ с дыркой, локализованной на A^0 -центре, будем рассматривать в рамках адиабатического приближения [11]. В этом случае электронный потенциал $V_{n,l,m}(\mathbf{r})$, действующий на дырку, можно считать усредненным по движению электрона [11]:

$$V_{nlm}(\vec{r}) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \int_0^{R_0} \frac{|\Psi_{nlm}(\vec{r}_e)|^2}{|\vec{r} - \vec{r}_e|} d\vec{r}_e, \quad (12)$$

где e – заряд электрона; ϵ – диэлектрическая проницаемость материала КТ; ϵ_0 – электрическая постоянная; $l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ – магнитное квантовое число; $l = 0, 1, 2, \dots$ – орбитальное квантовое число; $\Psi_{nlm}(\vec{r}_e)$ – волновая функция электрона в КТ, определяемая выражением

$$\Psi_{nlm}(\vec{r}_e) = Y_{lm}(\theta_e, \varphi_e) \frac{J_{l+\frac{3}{2}}(K_{nl}r_e)}{\sqrt{2\pi R_0} \sqrt{r} J_{l+\frac{3}{2}}(K_{nl}R_0)}, \quad (13)$$

здесь K_{nl} определяется выражением

$$K_{nl} = \sqrt{\frac{X_{n,l}^2}{R_0^2} + \frac{kT}{E_h R_0^2} \ln \left[4 \operatorname{sh} \left(\frac{\Omega}{v_{LA} \sqrt{kT}} \right) \operatorname{sh} \left(\frac{2\Omega}{v_{TA} \sqrt{kT}} \right) \right]}. \quad (14)$$

Рассмотрим случай, соответствующий p -состоянию электрона, при этом $l=1, m=0$, тогда выражение (12) можно представить в виде

$$V_{n,1,0}(\vec{r}_h) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \int_0^\pi \sin \theta_e d\theta_e \int_0^{2\pi} d\varphi_e \times \\ \times \left(\int_0^{r_h} \frac{|\Psi_{n,1,0}(r_e, \theta_e, \varphi_e)|^2 r_e^2 dr_e}{\sqrt{r_h^2 + r_e^2 - 2r_h r_e \cos \theta_e}} + \int_{r_h}^{R_0} \frac{|\Psi_{n,1,0}(r_e, \theta_e, \varphi_e)|^2 r_e^2 dr_e}{\sqrt{r_h^2 + r_e^2 - 2r_h r_e \cos \theta_e}} \right), \quad (15)$$

или, учитывая явное выражение для волновой функции:

$$V_{n,1,0}(\vec{r}_h) = -\frac{3e^2}{32\pi^3\epsilon_0\epsilon R_0^2 J_{\frac{5}{2}}^2(K_{n1}R_0)} \int_0^\pi \sin \theta_e \times \\ \times \cos^2 \theta_e d\theta_e \int_0^{2\pi} d\varphi_e \left(\int_0^{r_h} \frac{J_{\frac{5}{2}}^2(K_{n1}r_e) r_e dr_e}{\sqrt{r_h^2 + r_e^2 - 2r_h r_e \cos \theta_e}} + \int_{r_h}^{R_0} \frac{J_{\frac{5}{2}}^2(K_{n1}r_e) r_e dr_e}{\sqrt{r_h^2 + r_e^2 - 2r_h r_e \cos \theta_e}} \right). \quad (16)$$

После интегрирования по угловым переменным φ_e, θ_e и по радиальной координате электрона r_e получим

$$V_{n,1,0}(r_h) = \frac{e^2}{2^7 \pi^3 \epsilon_0 \epsilon R_0^6 K_{n1}^{*5} r_h^{*4} J_{\frac{5}{2}}^2(K_{n1}^* r_h^*)} \left[3R_0^{*4} + 6K_{n1}^{*2} R_0^{*4} r_h^{*2} + 9r_h^{*4} + \right. \\ \left. + 6K_{n1}^{*2} R_0^{*2} r_h^{*4} - 4K_{n1}^{*4} R_0^{*4} r_h^{*4} - 9r_h^{*4} \cos(2K_{n1}^* R_0^*) + 12K_{n1}^{*2} R_0^{*2} r_h^{*4} \cos(2K_{n1}^* R_0^*) - \right. \\ \left. - 3R_0^{*4} \cos(2K_{n1}^* R_0^*) + 4K_{n1}^{*4} R_0^{*4} r_h^{*4} \left(Ci(2K_{n1}^* R_0^*) - Ci(2K_{n1}^* r_h^*) \right) - \right. \\ \left. - 4K_{n1}^{*4} R_0^{*4} r_h^{*4} \ln \left(\frac{R_0^*}{r_h^*} \right) - \left(9r_h^{*3} + 3R_0^{*3} - K_{n1}^{*2} R_0^{*3} r_h^{*2} \right) 2K_{n1}^* R_0^* r_h^* \sin(2K_{n1}^* R_0^*) \right], \quad (17)$$

где

$$r_h^* = r_h/a_h, \quad R_0^* = R_0/a_h, \quad K_n^* = \sqrt{\frac{X_{n,l}^2}{R_0^{*2}} + \frac{kT}{E_h R_0^{*2}} \ln \left[4 \operatorname{sh} \left(\frac{\Omega}{v_{LA} \sqrt{kT}} \right) \operatorname{sh} \left(\frac{2\Omega}{v_{TA} \sqrt{kT}} \right) \right]},$$

$Ci(x)$ – интегральный косинус.

В рассматриваемом случае p -состояния с $m = 0$ минимум потенциальной энергии смещен относительно центра КТ. Положение минимума $r_{h \min}$ определяется из решения трансцендентного уравнения вида

$$\frac{dV_{n,1,0}(r_h)}{dr_h} = 0. \quad (18)$$

Раскладывая выражение (17) в ряд Тейлора вблизи $r_{h \min}$ и ограничиваясь квадратичным по радиальной координате дырки r_h слагаемым, получим

$$\begin{aligned} V_{n,1,0}(r_h) = & \frac{e^2}{2^7 \pi^3 \varepsilon_0 \varepsilon R_0^{*6} K_{n1}^{*5} r_{h \min}^{*6} J_{5/2}^2(K_{n1}^* R_0^*)} \times \\ & \times \left[r_{h \min}^{*2} \left(2K_{n1}^{*2} R_0^{*2} r_{h \min}^{*2} \left(3R_0^{*2} + 3r_{h \min}^{*2} - 2K_{n1}^{*2} R_0^{*2} r_{h \min}^{*2} \right) + \right. \right. \\ & + 4K_{n1}^{*4} R_0^{*4} r_{h \min}^{*4} \left(Ci(2K_{n1}^* R_0^*) - Ci(2K_{n1}^* r_{h \min}^*) - \ln\left(\frac{R_0^*}{r_{h \min}^*}\right) \right) - 2K_{n1}^* r_{h \min}^* R_0^* \times \\ & \times \left(K_{n1}^{*2} R_0^{*3} r_{h \min}^{*2} \sin(2K_{n1}^* r_{h \min}^*) - 9r_{h \min}^{*3} \sin(2K_{n1}^* R_0^*) - 3R_0^{*3} \sin(2K_{n1}^* r_{h \min}^*) \right) + \\ & + (r_h^* - r_{h \min}^*) 2R_0^{*4} r_{h \min}^{*4} \left(-6 - 6K_{n1}^{*2} r_{h \min}^{*2} + 2K_{n1}^{*4} r_{h \min}^{*4} + 6(1 - K_{n1}^{*2} r_{h \min}^{*2}) \times \right. \\ & \times \cos(2K_{n1}^* r_{h \min}^*) + K_{n1}^* r_{h \min}^* (K_{n1}^{*2} r_{h \min}^{*2} - 12) \sin(2K_{n1}^* r_{h \min}^*) \left. \right) - (r_h^* - r_{h \min}^*)^2 \times \\ & \times 2R_0^{*4} \left(-15 - 9K_{n1}^{*2} r_{h \min}^{*2} + K_{n1}^{*4} r_{h \min}^{*4} + (15 - 21K_{n1}^{*2} r_{h \min}^{*2} + K_{n1}^{*4} r_{h \min}^{*4}) \times \right. \\ & \left. \left. \times \cos(2K_{n1}^* r_{h \min}^*) + (30K_{n1}^* r_{h \min}^* - 7K_{n1}^{*3} r_{h \min}^{*3}) \sin(2K_{n1}^* r_{h \min}^*) \right) \right], \quad (19) \end{aligned}$$

здесь $r_{h \min}^* = r_{h \min} / a_h$.

После преобразований выражение (19) можно представить как

$$V_{n,1,0}(r_h^*) = -\frac{e^2}{\varepsilon R_0^*} \beta_n - \frac{m_h \omega_n^2 (r_h^* - r_T^*)^2}{2}, \quad (20)$$

где величины β_n , ω_n и r_T^* определяются следующим образом:

$$\begin{aligned} \beta_n = & \frac{1}{2^7 \pi^3 R_0^{*5} K_{n1}^{*5} r_{h \min}^{*6} J_{5/2}^2(K_{n1}^* R_0^*)} \times \\ & \times \left(r_{h \min}^{*2} \left(2K_{n1}^{*2} R_0^{*2} r_{h \min}^{*2} \left(3R_0^{*2} + 3r_{h \min}^{*2} - 2K_{n1}^{*2} R_0^{*2} r_{h \min}^{*2} \right) + \right. \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& +3R_0^{*4} + 9r_{h\min}^{*4} + 3r_{h\min}^{*4} \cos\left(2K_{n1}^* R_0^*\right) \left(6K_{n1}^{*2} R_0^{*2} - 3\right) - 3R_0^{*4} \cos\left(2K_{n1}^* r_{h\min}^*\right) + \\
& + 4K_{n1}^{*4} R_0^{*4} r_{h\min}^{*4} \left(Ci\left(2K_{n1}^* R_0^*\right) - Ci\left(2K_{n1}^* r_{h\min}^*\right) - \ln\left(\frac{R_0^*}{r_{h\min}^*}\right) \right) - 2K_{n1}^* r_{h\min}^* R_0^* \times \\
& \times \left(K_{n1}^{*2} R_0^{*3} r_{h\min}^{*2} \sin\left(2K_{n1}^* r_{h\min}^*\right) - 9r_{h\min}^{*3} \sin\left(2K_{n1}^* R_0^*\right) - 3R_0^{*3} \sin\left(2K_{n1}^* r_{h\min}^*\right) \right) + \\
& + 2R_0^{*4} r_{h\min}^{*2} \left(-6 - 6K_{n1}^{*2} r_{h\min}^{*2} + 2K_{n1}^{*4} r_{h\min}^{*4} + 6\left(1 - K_{n1}^{*2} r_{h\min}^{*2}\right) \cos\left(2K_{n1}^* r_{h\min}^*\right) + \right. \\
& + K_{n1}^* r_{h\min}^* \left(K_{n1}^{*2} r_{h\min}^{*2} - 12 \right) \sin\left(2K_{n1}^* r_{h\min}^*\right) \left. \right]^2 \times \left[15 + 9K_{n1}^{*2} r_{h\min}^{*2} - K_{n1}^{*4} r_{h\min}^{*4} - \right. \\
& - \cos\left(2K_{n1}^* r_{h\min}^*\right) \times \left(15 - 21K_{n1}^{*2} r_{h\min}^{*2} + K_{n1}^{*4} r_{h\min}^{*4} \right) - \\
& \left. - \left(30K_{n1}^* r_{h\min}^* - 7K_{n1}^{*3} r_{h\min}^{*3} \right) \sin\left(2K_{n1}^* r_{h\min}^*\right) \right]^{-1}, \quad (21)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\hbar\omega_n = & \left[\frac{\hbar^2 e^2}{2^5 m_h^* \pi^3 \varepsilon_0 \varepsilon R_0^{*2} K_{n1}^{*5} r_{h\min}^{*6} J_{5/2}^2(K_{n1} R_0^*)} \times \right. \\
& \times \left(15 + 9K_{n1}^{*2} r_{h\min}^{*2} - K_{n1}^{*4} r_{h\min}^{*4} - \cos\left(2K_{n1}^* r_{h\min}^*\right) \left(15 - 21K_{n1}^{*2} r_{h\min}^{*2} + K_{n1}^{*4} r_{h\min}^{*4} \right) - \right. \\
& \left. \left. - \left(30K_{n1}^* r_{h\min}^* - 7K_{n1}^{*3} r_{h\min}^{*3} \right) \sin\left(2K_{n1}^* r_{h\min}^*\right) \right]^{1/2} \quad (22)
\end{aligned}$$

и

$$\begin{aligned}
r_T^* = & -r_{h\min}^* - \frac{r_{h\min}^*}{2} \left(-6 - 6K_{n1}^{*2} r_{h\min}^{*2} + 2K_{n1}^{*4} r_{h\min}^{*4} + 6\left(1 - K_{n1}^{*2} r_{h\min}^{*2}\right) \times \right. \\
& \times \cos\left(2K_{n1}^* r_{h\min}^*\right) + K_{n1}^* r_{h\min}^* \left(K_{n1}^{*2} r_{h\min}^{*2} - 12 \right) \sin\left(2K_{n1}^* r_{h\min}^*\right) \left. \right) \times \\
& \times \left[-15 - 9K_{n1}^{*2} r_{h\min}^{*2} + K_{n1}^{*4} r_{h\min}^{*4} + \left(15 - 21K_{n1}^{*2} r_{h\min}^{*2} + K_{n1}^{*4} r_{h\min}^{*4} \right) \times \right. \\
& \times \cos\left(2K_{n1}^* r_{h\min}^*\right) + \left. \left(30K_{n1}^* r_{h\min}^* - 7K_{n1}^{*3} r_{h\min}^{*3} \right) \sin\left(2K_{n1}^* r_{h\min}^*\right) \right]^{-1}. \quad (23)
\end{aligned}$$

Уровни энергии осциллятора (20) с учетом (10) даются в виде

$$\begin{aligned}
E_{n_1, n_2, n_3}^n(T) = & -\frac{e^2 \beta_n}{\varepsilon_0 \varepsilon R_0} + \hbar\omega_n \left(n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2} \right) + \\
& + kT \ln \left[4 \operatorname{sh} \left(\frac{\Omega}{v_{LA} \sqrt{kT}} \right) \operatorname{sh} \left(\frac{2\Omega}{v_{TA} \sqrt{kT}} \right) \right], \quad (24)
\end{aligned}$$

а соответствующие одночастичные волновые функции запишутся как

$$\Psi_{n_1, n_2, n_3}^n(x, y, z) = C_n \exp\left(-\frac{x^2 + y^2 + z^2}{2a_n^2}\right) H_{n_1}\left(\frac{x}{a_n}\right) H_{n_2}\left(\frac{y}{a_n}\right) H_{n_3}\left(\frac{z}{a_n}\right), \quad (25)$$

где $C_n = \left[2^{n_1+n_2+n_3} n_1! n_2! n_3! \pi^{3/2} a_n^3\right]^{-1/2}$; $a_n = \sqrt{\hbar / (m_h^* \omega_n)}$; $H_n(x)$ – полиномы Эрмита; n_1, n_2, n_3 – квантовые числа, соответствующие энергетическим уровням гармонического осциллятора.

Далее, используя процедуру метода потенциала нулевого радиуса (см. например [12]), получим уравнение, определяющее зависимость энергии дырки в комплексе ($A^+ + e$) от температуры T и параметров КТ.

Короткодействующий потенциал примеси моделируется потенциалом нулевого радиуса мощностью $\gamma = 2\pi\hbar^2 / (\alpha m^*)$, который имеет вид

$$V_\delta(x, y, z; x_a, y_a, z_a) = \gamma \delta(x - x_a) \delta(y - y_a) \delta(z - z_a) \left[1 + (\mathbf{r} - \mathbf{r}_a) \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\right], \quad (26)$$

где α определяется энергией связи E_i этого же A^+ -центра в объемном полупроводнике.

В приближении эффективной массы волновая функция $\Psi_{\lambda h}(x, y, z; x_a, y_a, z_a)$ электрона, локализованного на короткодействующем потенциале, удовлетворяет уравнению Шредингера:

$$\begin{aligned} (E_{\lambda h} - \mathbf{H}) \Psi_{\lambda h}(x, y, z; x_a, y_a, z_a) = \\ = V_\delta(x, y, z; x_a, y_a, z_a) \Psi_{\lambda h}(x, y, z; x_a, y_a, z_a), \end{aligned} \quad (27)$$

где $E_{\lambda h} = -\hbar^2 \lambda^2 / (2m_h^*)$ – собственные значения оператора Гамильтона $\mathbf{H}^\delta = \mathbf{H} + V_\delta(x, y, z; x_a, y_a, z_a)$.

Для определения энергии связи дырки в комплексе ($A^+ + e$) в адиабатическом приближении необходимо построить одночастичную функцию Грина $G(x, y, z; x_a, y_a, z_a; E_{\lambda h})$ к уравнению Шредингера с гамильтонианом, содержащим потенциал (26):

$$G(x, y, z; x_a, y_a, z_a; E_{\lambda h}) = - \sum_{n_1, n_2, n_3} \frac{\Psi_{n_1, n_2, n_3}^{n*}(x_a, y_a, z_a) \Psi_{n_1, n_2, n_3}^n(x, y, z)}{|E_{\lambda h}| + E_{n_1, n_2, n_3}^n(T)}, \quad (28)$$

Уравнение Липпмана – Швингера для A^+ -состояния в КТ с параболическим потенциалом конфайнмента запишется как

$$\Psi_{\lambda h}(x, y, z; x_a, y_a, z_a) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 dy_1 dz_1 G(x, y, z; x_a, y_a, z_a; E_{\lambda h}) \times$$

$$\times V_{\delta}(x, y, z; x_a, y_a, z_a) \Psi_{\lambda h}(x_1, y_1, z_1, x_a, y_a, z_a). \quad (29)$$

Подставив (26) в (29), получим

$$\Psi_{\lambda h}(x, y, z; x_a, y_a, z_a) = \gamma G(x, y, z; x_a, y_a, z_a; E_{\lambda h}) \times \\ \times (\mathbf{T} \Psi_{\lambda h})(x, y, z; x_a, y_a, z_a), \quad (30)$$

где

$$(\mathbf{T} \Psi_{\lambda h})(x, y, z; x_a, y_a, z_a) \equiv \lim_{\substack{r \rightarrow r_a \\ \varphi \rightarrow \varphi_a \\ \theta \rightarrow \theta_a}} \left[1 + (\mathbf{r} - \mathbf{r}_a) \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right] \Psi_{\lambda h}(x, y, z; x_a, y_a, z_a). \quad (31)$$

Действуя оператором $\mathbf{T}$ на обе части соотношения (30), получим уравнение, определяющее зависимость энергии связанного состояния $E_{\lambda h}$ A^+ -центра от параметров КТ, положения $\mathbf{R}_a = (x_a, y_a, z_a)$ примеси и температуры T :

$$\alpha = \frac{2\pi\hbar^2}{m_h^*} (\mathbf{T} G)(x_a, y_a, z_a; x_a, y_a, z_a; E_{\lambda h}). \quad (32)$$

Тогда для функции Грина (28) с учетом (24) и (25) получим в боровских единицах:

$$G(x, y, z, x_a, y_a, z_a; \eta_{\lambda h}^2) = -\frac{1}{\frac{3}{\pi^2} a_n^2 E_h} \exp\left(-\frac{x^{*2} + y^{*2} + z^{*2} + x_a^{*2} + y_a^{*2} + z_a^{*2}}{2}\right) \times \\ \times \sum_{n_1, n_2, n_3} \frac{H_{n_1}(x^*) H_{n_1}(x_a^*)}{2^{n_1} n_1!} \frac{H_{n_2}(y^*) H_{n_2}(y_a^*)}{2^{n_2} n_2!} \frac{H_{n_3}(z^*) H_{n_3}(z_a^*)}{2^{n_3} n_3!} \times \\ \times \left\{ \eta_{\lambda h}^2 - \frac{e^2 \beta_n}{\epsilon_0 \epsilon R_0^* E_h a_h} + \beta^{-1} \left(n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2} \right) + \right. \\ \left. + \frac{kT}{E_h} \ln \left[4 \operatorname{sh} \left(\frac{\Omega}{v_{LA} \sqrt{kT}} \right) \operatorname{sh} \left(\frac{2\Omega}{v_{TA} \sqrt{kT}} \right) \right] \right\}^{-1}, \quad (33)$$

где введены обозначения $\eta_{\lambda h}^2 = |E_{\lambda h}|/E_h$; $\beta = E_h/\hbar\omega_n$, E_h – боровская энергия дырки.

Далее с учетом того, что

$$\left(\beta \eta_{\lambda h} - \frac{e^2 \beta \beta_n}{\epsilon_0 \epsilon R_0^* E_h a_h} + \frac{kT \beta}{E_h} \ln \left[4 \operatorname{sh} \left(\frac{\Omega}{v_{LA} \sqrt{kT}} \right) \operatorname{sh} \left(\frac{2\Omega}{v_{TA} \sqrt{kT}} \right) \right] \right) +$$

$$+n_1+n_2+n_3+\frac{3}{2})^{-1} \beta = \int_0^\infty dt \exp \left[-t \left(\beta \eta_{\lambda h}^2 - \frac{e^2 \beta \beta_n}{\epsilon_0 \epsilon R_0^* E_h a_h} + n_1 + n_2 + n_3 + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{3}{2} + \frac{kT\beta}{E_h} \ln \left[4 \operatorname{sh} \left(\frac{\Omega}{v_{LA} \sqrt{kT}} \right) \operatorname{sh} \left(\frac{2\Omega}{v_{TA} \sqrt{kT}} \right) \right] \right] \right], \quad (34)$$

выражение для функции Грина примет следующий вид:

$$G(x, y, z, x_a, y_a, z_a, \eta_{\lambda h}^2) = -\frac{1}{\pi^{3/2} a_n^2 \beta E_h} \exp \left(-\frac{x^2 + x_a^2 + y^2 + y_a^2 + z^2 + z_a^2}{2a_n} \right) \times \\ \times \int_0^\infty dt \exp \left[-t \left(\beta \eta_{\lambda h} - \frac{e^2 \beta \beta_n}{\epsilon_0 \epsilon R_0^* E_h a_h} + \frac{kT\beta}{E_h} \ln \left[4 \operatorname{sh} \left(\frac{\Omega}{v_{LA} \sqrt{kT}} \right) \operatorname{sh} \left(\frac{2\Omega}{v_{TA} \sqrt{kT}} \right) \right] + \frac{3}{2} \right) \right] \times \\ \times \sum_{n_1=0}^\infty \left(\frac{e^{-t}}{2} \right)^{n_1} \frac{H_{n_1} \left(\frac{x}{a_n} \right) H_{n_1} \left(\frac{x_a}{a_n} \right)}{n_1!} \sum_{n_2=0}^\infty \left(\frac{e^{-t}}{2} \right)^{n_2} \frac{H_{n_2} \left(\frac{y}{a_n} \right) H_{n_2} \left(\frac{y_a}{a_n} \right)}{n_2!} \times \\ \times \sum_{n_3=0}^\infty \left(\frac{e^{-t}}{2} \right)^{n_3} \frac{H_{n_3} \left(\frac{z}{a_n} \right) H_{n_3} \left(\frac{z_a}{a_n} \right)}{n_3!}. \quad (35)$$

Выполняя суммирование по квантовым числам n_1, n_2, n_3 и выделяя расходящуюся часть выражения для функции Грина (35), получим

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{R}_a, \eta_{\lambda h}^2) = -\frac{1}{\pi^{\frac{3}{2}} a_n^2 \beta E_h} \int_0^\infty dt \exp \left[-t \left(\beta \eta_{\lambda h} - \frac{e^2 \beta \beta_n}{\epsilon_0 \epsilon R_0^* E_h a_h} + \frac{kT\beta}{E_h} \times \right. \right. \\ \left. \left. \times \ln \left[4 \operatorname{sh} \left(\frac{\Omega}{v_{LA} \sqrt{kT}} \right) \operatorname{sh} \left(\frac{2\Omega}{v_{TA} \sqrt{kT}} \right) \right] + \frac{3}{2} \right) \right] \left\{ (1 - \exp(-t))^{\frac{3}{2}} \exp \left(-\frac{r^2 + R_a^2}{2a_n} \right) \times \right. \\ \left. \times \exp \left(\frac{2(\mathbf{r} \mathbf{R}_a) e^{-t} - (r^2 + R_a^2) e^{-2t}}{a_n (1 - e^{-2t})} \right) - \frac{1}{t \sqrt{t}} \exp \left[-\frac{(r - R_a)^2}{2a_n^2 t} \right] \right\} - \frac{1}{2\pi^{\frac{3}{2}} a_n \beta E_h} \times \\ \times \frac{1}{|r - R_a|} \exp \left(- \left[2 \left(\lambda_h - \frac{e^2 \beta_n}{\epsilon R_0^* E_h a_h} + \frac{kT}{E_h} \times \right. \right. \right. \\ \left. \left. \left. \times \ln \left[4 \operatorname{sh} \left(\frac{\Omega}{v_{LA} \sqrt{kT}} \right) \operatorname{sh} \left(\frac{2\Omega}{v_{TA} \sqrt{kT}} \right) \right] + \frac{3}{2} \right) \right]^{-1/2} \frac{|r - R_a|}{a_n} \right). \quad (36)$$

Подставляя (36) в (30), получим дисперсионное уравнение, определяющее зависимость энергии связи дырки $|E_{\lambda h}|$ в комплексе $(A^+ + e)$ от параметров КТ, температуры T и электронного квантового числа n :

$$\begin{aligned} \eta_i = & \sqrt{\eta_{\lambda h} - \frac{e^2 \beta_n}{\epsilon R_0^* E_h a_h} + \frac{kT}{E_h} \ln \left[4 \operatorname{sh} \left(\frac{\Omega}{v_{LA} \sqrt{kT}} \right) \operatorname{sh} \left(\frac{2\Omega}{v_{TA} \sqrt{kT}} \right) \right] + \frac{3}{2} +} \\ & + \sqrt{\frac{2}{\beta \pi} \int_0^\infty dt \exp \left\{ -t \left(\beta \eta_{\lambda h} - \frac{e^2 \beta \beta_n}{\epsilon R_0^* E_h a_h} + \frac{3}{2} + \frac{kT \beta}{E_h} \times \right. \right.} \\ & \quad \left. \left. \times \ln \left[4 \operatorname{sh} \left(\frac{\Omega}{v_{LA} \sqrt{kT}} \right) \operatorname{sh} \left(\frac{2\Omega}{v_{TA} \sqrt{kT}} \right) \right] \right\} \times} \\ & \times \left[\frac{1}{2t \sqrt{2t}} - (1 - e^{-2t})^{-\frac{3}{2}} \exp \left(-\frac{R_a^{*2} \beta^{-1}}{2} \times \frac{1 - e^{-t}}{1 + e^{-t}} \right) \right], \end{aligned} \quad (37)$$

где $\eta_i = \sqrt{|E_i| / E_h}$.

На рис. 1 показан результат численного анализа дисперсионного уравнения (37) для случая центрированного A^+ -центра ($R_a^* = 0$) при разных значениях радиуса КТ R_0^* . При этом было учтено, что энергия связи A^+ -состояния отсчитывается от уровня основного состояния адиабатического потенциала электрона. Видно, что с ростом температуры энергия связи дырки уменьшается, это связано с температурным «расплыванием» волновой функции квазистационарного A^+ -состояния в условиях электрон-фононного и дырочно-фононного взаимодействия.

Температурная зависимость интенсивности рекомбинационного излучения

Рассмотрим далее процесс излучательного перехода возбужденного электрона на уровень A^+ -центра. Энергетический спектр электрона в размерно-квантованной зоне с учетом (10) запишется в виде

$$E_{n,l} = \frac{\tilde{X}_{n,l}^2 E_h}{R_0^{*2}} + kT \ln \left[4 \operatorname{sh} \left(\frac{\Omega}{v_{LA} \sqrt{kT}} \right) \operatorname{sh} \left(\frac{2\Omega}{v_{TA} \sqrt{kT}} \right) \right], \quad (38)$$

здесь $\tilde{X}_{n,l}$ – корень функции Бесселя полуцелого порядка $(l + 1/2)$.

Волновая функция электрона дается выражением вида (13).

СИРИ с учетом дисперсии размеров КТ определяется выражением вида [13]:

$$\Phi(\omega) = \frac{4\omega^2 \sqrt{\epsilon} e^2}{c^3 V} \left| \frac{\mathbf{p}_{eh} \mathbf{e}_0}{m_0} \right| \int \sum_n |M_{1\lambda}|^2 P(u) \delta(E_i - E_f - \hbar\omega) du, \quad (39)$$

где m_0 – масса свободного электрона; $\mathbf{P}_{eh}$ – матричный элемент оператора импульса на блоховских амплитудах зонных носителей; ω – частота излучаемой электромагнитной волны поляризации $\mathbf{e}_0$; V – объем КТ; $P(u)$ – функция Лифшица – Слезова [14]:

$$P(u) = \begin{cases} \frac{3^4 e u^2 \exp[-1/(1-2u/3)]}{2^{5/3} (u+3)^{7/3} (3/2-u)^{11/3}}, & u < \frac{3}{2}, \\ 0, & u > \frac{3}{2}. \end{cases} \quad (40)$$

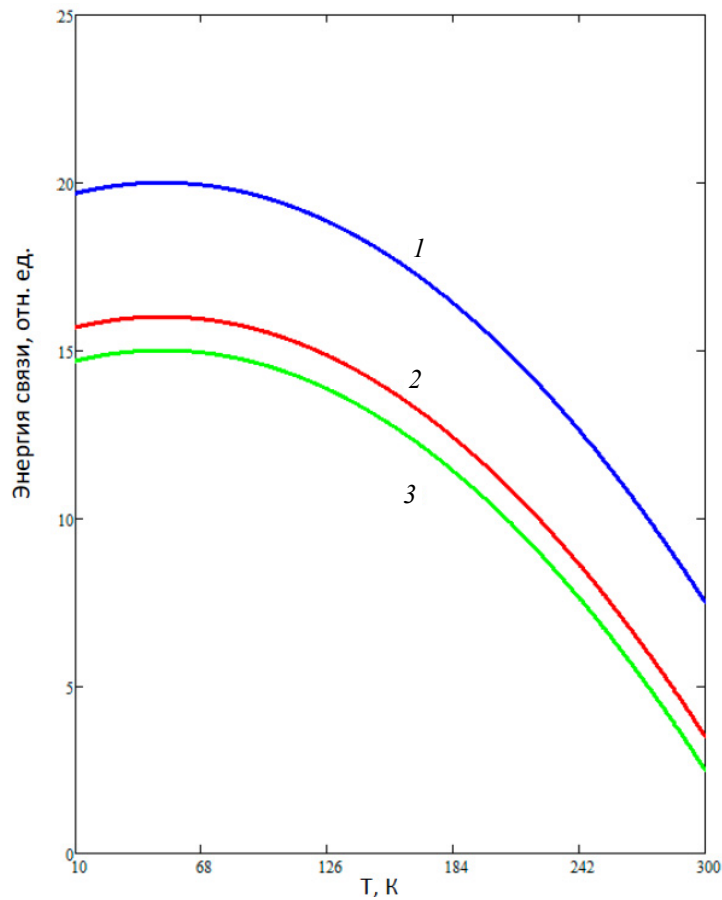


Рис. 1. Температурная зависимость энергии связи дырки в комплексе $(A^+ + e)$ при $\eta_i = 7$ для различных значений радиуса КТ R_0^* ; кривые: 1 – $R_0^* = 1$; 2 – $R_0^* = 1,5$; 3 – $R_0^* = 2$

Волновая функция A^+ -состояния только постоянным множителем отличается от функции Грина (35) и в случае центрального расположения A^+ -центра в КТ определяется выражением

$$\Psi_h(r) = -C \int_0^\infty dt \exp \left\{ -\beta_h t \left(\frac{2}{\lambda_h} - \frac{e^2 \beta_n}{\varepsilon R_0^* E_h a_h} + \frac{kT}{E_h} \times \right. \right. \\ \left. \times \ln \left[4 \operatorname{sh} \left(\frac{\Omega}{v_{LA} \sqrt{kT}} \right) \operatorname{sh} \left(\frac{2\Omega}{v_{TA} \sqrt{kT}} \right) \right] + \frac{3}{2} \right\} \times \\ \left. \times (1 - \exp(-t))^{-\frac{3}{2}} \exp \left(-\frac{(1+e^{-2t})}{(1-e^{-2t})} \times \frac{r^2}{2a_n^2} \right) \right\}, \quad (41)$$

где C – нормировочный множитель, определяемый выражением вида

$$C = \left\{ \frac{2\sqrt{\pi}}{[\eta_{\lambda h}^2(T)]^2} \frac{\Gamma \left(1 + \frac{\eta_{\lambda h}^2(T)}{2} \right) a_n^3}{\Gamma \left(\frac{\eta_{\lambda h}^2(T)-1}{2} \right)} \times \right. \\ \left. \times \left[\frac{\eta_{\lambda h}^2(T)}{2} \left(\Psi \left(\frac{\eta_{\lambda h}^2(T)}{2} + 1 \right) - \Psi \left(\frac{\eta_{\lambda h}^2(T)}{2} - \frac{1}{2} \right) - 1 \right) \right] \right\}^{-1/2}, \quad (42)$$

здесь $\eta_{\lambda h}^2(T)$ определяется дисперсионным уравнением (37).

Матричный элемент излучательного перехода возбужденного электрона на уровень δ -центра имеет вид

$$M_{1,\lambda} = i\lambda_0 \sqrt{\frac{2\pi\alpha^* I_0}{\omega}} (E_{n,l,m} - E_{\lambda h}) \langle \Psi_{\lambda h}(r) | (\vec{e}_\lambda, \vec{r}) | \Psi_{n,l,m}(\rho, \theta, \varphi) \rangle. \quad (43)$$

Учитывая (13), (33) и (41), матричный элемент излучательного перехода электрона из основного состояния размерно-квантованной зоны на уровень A^+ -центра в КТ можно представить в виде

$$M_{1,\lambda} = \frac{a_h^{-1} 2^{-\frac{3}{2}} \pi^{-\frac{5}{4}} \sqrt{3} \beta^{\frac{1}{2}}}{\sqrt{2\pi} R_0^{*4} J_{\frac{3}{2}}(\tilde{X}_{n,1})} \left[\frac{\Gamma \left(1 + \frac{\eta_{\lambda h}^2(T)}{2} \right)}{[\eta_{\lambda h}^2(T)]^2 \Gamma \left(\frac{\eta_{\lambda h}^2(T)-1}{2} \right)} \times \right. \\ \left. \times \left[\frac{\eta_{\lambda h}^2(T)}{2} \left(\Psi \left(\frac{\eta_{\lambda h}^2(T)}{2} + 1 \right) - \Psi \left(\frac{\eta_{\lambda h}^2(T)}{2} - \frac{1}{2} \right) - 1 \right) \right] \right]^{-\frac{1}{2}} \times$$

$$\begin{aligned} & \times \int_0^{+\infty} \int_{-\pi}^{\pi} \int_0^{2\pi} d\theta d\varphi dr^* r^{*2} \cos \theta \sin \theta \times \\ & \times \int_0^{\infty} dt \exp \left[-t \left(\beta \eta_{\lambda h} - \frac{e^2 \beta_n}{\varepsilon_0 \varepsilon R_0^* E_h a_h} + \frac{kT \beta}{E_h} \ln \left[4 \operatorname{sh} \left(\frac{\Omega_n}{v_{LA} \sqrt{kT}} \right) \operatorname{sh} \left(\frac{2\Omega_n}{v_{TA} \sqrt{kT}} \right) \right] + \frac{3}{2} \right) \right] + \\ & + (1 - \exp(-t))^{-\frac{3}{2}} \exp \left(-\frac{(1 + e^{-2t})}{(1 - e^{-2t})} \times \frac{r^{*2}}{2} \right) Y_{l,m}(\theta, \varphi) \frac{J_{l+3/2} \left(\frac{\tilde{X}_{n,l}}{R_0^*} r^* \right)}{\sqrt{r^*} J_{l+3/2}(\tilde{X}_{n,l})}. \quad (44) \end{aligned}$$

После интегрирования для квадрата матричного элемента (44) имеем

$$\begin{aligned} |M_{1,\lambda}|^2 &= \frac{\beta_h \tilde{X}_{n,1}}{2^2 \pi^{\frac{5}{2}} a_h^2 R_0^{*9} |J_{3/2}(\tilde{X}_{n,1}) J_{5/2}(\tilde{X}_{n,1})|^2} \left| \frac{\Gamma \left(1 + \frac{\eta_{\lambda h}^2}{2} \right)}{\left[\eta_{\lambda h}^2 \right]^2 \Gamma \left(\frac{\eta_{\lambda h}^2 - 1}{2} \right)} \times \right. \\ & \times \left. \left[\frac{\eta_{\lambda h}^2}{2} \left(\Psi \left(\frac{\eta_{\lambda h}^2}{2} + 1 \right) - \Psi \left(\frac{\eta_{\lambda h}^2}{2} - \frac{1}{2} \right) - 1 \right) \right] \right|^{-1} \times \\ & \times \left| \int_0^{\infty} dt \exp \left[-t \left(\beta \eta_{\lambda h} - \frac{e^2 \beta_n}{\varepsilon_0 \varepsilon R_0^* E_h a_h} + \frac{kT \beta}{E_h} \ln \left[4 \operatorname{sh} \left(\frac{\Omega}{v_{LA} \sqrt{kT}} \right) \operatorname{sh} \left(\frac{2\Omega}{v_{TA} \sqrt{kT}} \right) \right] + \frac{3}{2} \right) \right] \right| \times \\ & \times (1 - \exp(-t))^{-\frac{3}{2}} \exp \left(-\frac{1}{2} \left(\frac{1 - e^{-2t}}{1 + e^{-2t}} \right) \left(\frac{\tilde{X}_{n,l}}{R_0^*} \right)^2 \right) \left(\frac{1 - e^{-2t}}{1 + e^{-2t}} \right)^{\frac{3}{2}} \Bigg|^2. \quad (45) \end{aligned}$$

Тогда для СИРИ в КТ (39) можно записать

$$\begin{aligned} \Phi(X, T) &= \frac{a_h^4 \beta_h \tilde{X}_{n,1} X^2 E_h \sqrt{\varepsilon} e^2}{2^2 \pi^{\frac{7}{2}} R_0^{*12} \hbar^2 c^3 |J_{3/2}(\tilde{X}_{n,1}) J_{5/2}(\tilde{X}_{n,1})|^2} \times \left| \frac{\mathbf{P}_{eh} \mathbf{e}_0}{m_0} \right| \times \int_0^{\frac{3}{2}} du P(u) \times \\ & \times \left| \frac{\Gamma \left(1 + \frac{\eta_{\lambda h}^2}{2} \right)}{\left[\eta_{\lambda h}^2 \right]^2 \Gamma \left(\frac{\eta_{\lambda h}^2 - 1}{2} \right)} \left[\frac{\eta_{\lambda h}^2}{2} \left(\Psi \left(\frac{\eta_{\lambda h}^2}{2} + 1 \right) - \Psi \left(\frac{\eta_{\lambda h}^2}{2} - \frac{1}{2} \right) - 1 \right) \right] \right|^{-1} \times \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \times \left| \int_0^\infty dt \exp \left[-t \left(\beta \eta_{\lambda h} - \frac{e^2 \beta \beta_n}{\varepsilon R_0^* E_h a_h} + \frac{kT \beta}{E_h} \ln \left[4 \operatorname{sh} \left(\frac{\Omega}{v_{LA} \sqrt{kT}} \right) \operatorname{sh} \left(\frac{2\Omega}{v_{TA} \sqrt{kT}} \right) \right] + \frac{3}{2} \right) \right] \times \right. \\
& \quad \times (1 - \exp(-t))^{-\frac{3}{2}} \exp \left(-\frac{1}{2} \left(\frac{1 - e^{-2t}}{1 + e^{-2t}} \right) \left(\frac{\tilde{X}_{n,l}}{R_0^*} \right)^2 \right) \left(\frac{1 - e^{-2t}}{1 + e^{-2t}} \right)^{\frac{3}{2}} \Bigg|^2 \times \\
& \quad \times \delta \left(\frac{X_{n,1}^2}{R_0^{*2} u^2} + \frac{kT}{E_h} \ln \left[4 \operatorname{sh} \left(\frac{\Omega}{v_{LA} \sqrt{kT}} \right) \operatorname{sh} \left(\frac{2\Omega}{v_{TA} \sqrt{kT}} \right) \right] + \eta_{\lambda h}^2 - X \right), \quad (46)
\end{aligned}$$

где $X = \hbar \omega / E_h$.

После интегрирования в (46) получим

$$\begin{aligned}
\Phi(X, T) &= \Phi_0 \times \frac{\beta_h a_h^4 E_h X^2 \tilde{X}_{n,1} \Delta_n^2}{(X - \eta_{\lambda h}^2)^2 |J_{3/2}(\tilde{X}_{n,1}) J_{5/2}(\tilde{X}_{n,1})|^2 \bar{R}_0^{*14} \Delta_n} \times P(\Delta_n) \times \\
& \times \left| \frac{\Gamma \left(1 + \frac{\eta_{\lambda h}^2(T)}{2} \right) \left[\frac{\eta_{\lambda h}^2(T)}{2} \left(\Psi \left(\frac{\eta_{\lambda h}^2(T)}{2} + 1 \right) - \Psi \left(\frac{\eta_{\lambda h}^2(T)}{2} - \frac{1}{2} \right) - 1 \right) \right]}{\left[\eta_{\lambda h}^2(T) \right]^2 \Gamma \left(\frac{\eta_{\lambda h}^2(T) - 1}{2} \right)} \right|^{-1} \times \\
& \times \left| \int_0^\infty dt \exp \left[-t \left(\beta \eta_{\lambda h} - \frac{e^2 \beta \beta_n}{\varepsilon_0 \varepsilon R_0^* E_h a_h} + \frac{kT \beta}{E_h} \ln \left[4 \operatorname{sh} \left(\frac{\Omega}{v_{LA} \sqrt{kT}} \right) \operatorname{sh} \left(\frac{2\Omega}{v_{TA} \sqrt{kT}} \right) \right] + \frac{3}{2} \right) \right] \times \right. \\
& \quad \times (1 - \exp(-t))^{-\frac{3}{2}} \exp \left(-\frac{1}{2} \left(\frac{1 - e^{-2t}}{1 + e^{-2t}} \right) \left(\frac{\tilde{X}_{n,l}}{R_0^* \Delta_n} \right)^2 \right) \left(\frac{1 - e^{-2t}}{1 + e^{-2t}} \right)^{\frac{3}{2}} \Bigg|^2, \quad (47)
\end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
\Phi_0 &= \sqrt{\varepsilon} e^2 |\mathbf{P}_{eh} \mathbf{e}_0| / 4\pi^{\frac{5}{2}} \hbar^2 c^3 m_0; \\
\Delta_n &= \left(X_{n,1} + \frac{kT}{E_h} \ln \left[4 \operatorname{sh} \left(\frac{\Omega}{v_{LA} \sqrt{kT}} \right) \operatorname{sh} \left(\frac{2\Omega}{v_{TA} \sqrt{kT}} \right) \right] \right) \times \left(\bar{R}_0^* \sqrt{X - \eta_{\lambda h}^2} \right)^{-1}.
\end{aligned}$$

На рис. 2 показана зависимость СИРИ от температуры T и от величины среднего радиуса КТ $\bar{R}_0^*$, построенная с помощью формулы (47).

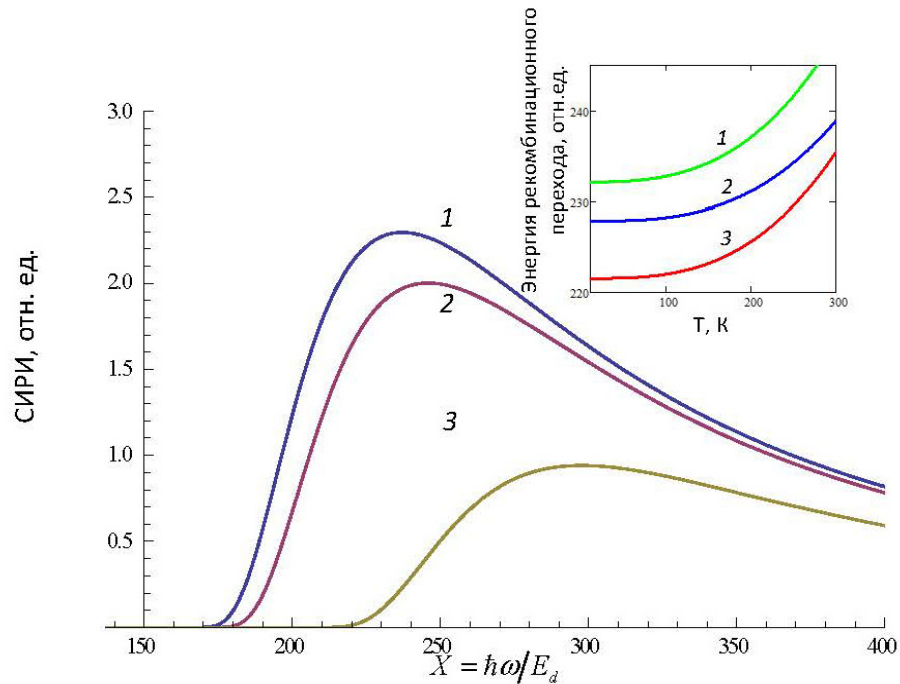


Рис. 2. Зависимость спектральной интенсивности рекомбинационного излучения от энергии перехода, рассчитанная по формуле (47), при $E_i = 7$ мэВ и $\bar{R}_0^* = 1$ для различных значений температуры T ; кривые: 1 – $T = 100$ К; 2 – $T = 200$ К; 3 – $T = 300$ К. На вставке показана зависимость энергии рекомбинационного перехода от температуры T для разных значений радиуса КТ R_0^* ; кривые: 1 – $R_0^* = 1$; 2 – $R_0^* = 1,5$; 3 – $R_0^* = 2$

Видно, что с ростом температуры происходит сдвиг пороговой энергии перехода в коротковолновую область спектра (рис. 2) и имеет место температурное гашение рекомбинационного излучения. Это связано с уменьшением интеграла перекрытия волновых функций начального и конечного состояний электрона из-за роста энергии перехода.

На рис. 3 показана зависимость максимума СИРИ (кривые 1, 2 и 3) от обратной температуры $1000/T$, рассчитанного по формуле (47). Можно видеть, что при низких температурах ($1000/T > 25$) кривые максимума СИРИ выходят на «плато», а при больших температурах имеет место «температурное гашение» рекомбинационного излучения. Такую особенность температурной зависимости максимума СИРИ можно объяснить слабым влиянием электрон-фононного взаимодействия на энергию рекомбинационного перехода при низких температурах, вследствие чего интеграл перекрытия волновых функций электрона и дырки практически не меняется. С ростом температуры влияние электрон-фононного взаимодействия проявляется в различной динамике уровня p -состояния электрона и примесного уровня A^+ -центра, что приводит к уменьшению интенсивности рекомбинационного излучения. На вставке (рис. 3) показан результат эксперимента по измерению темпера-

турной зависимости максимума ФЛ в КТ на основе ab-Si при возбуждении излучением эксимерного лазера с длиной волны 511 нм [15] (показано точками). Можно видеть, что характер температурной зависимости максимума ФЛ соответствует ходу кривых максимума СИРИ, т.е. эффект выхода на «плато», по-видимому, является общим для разных механизмов ФЛ.

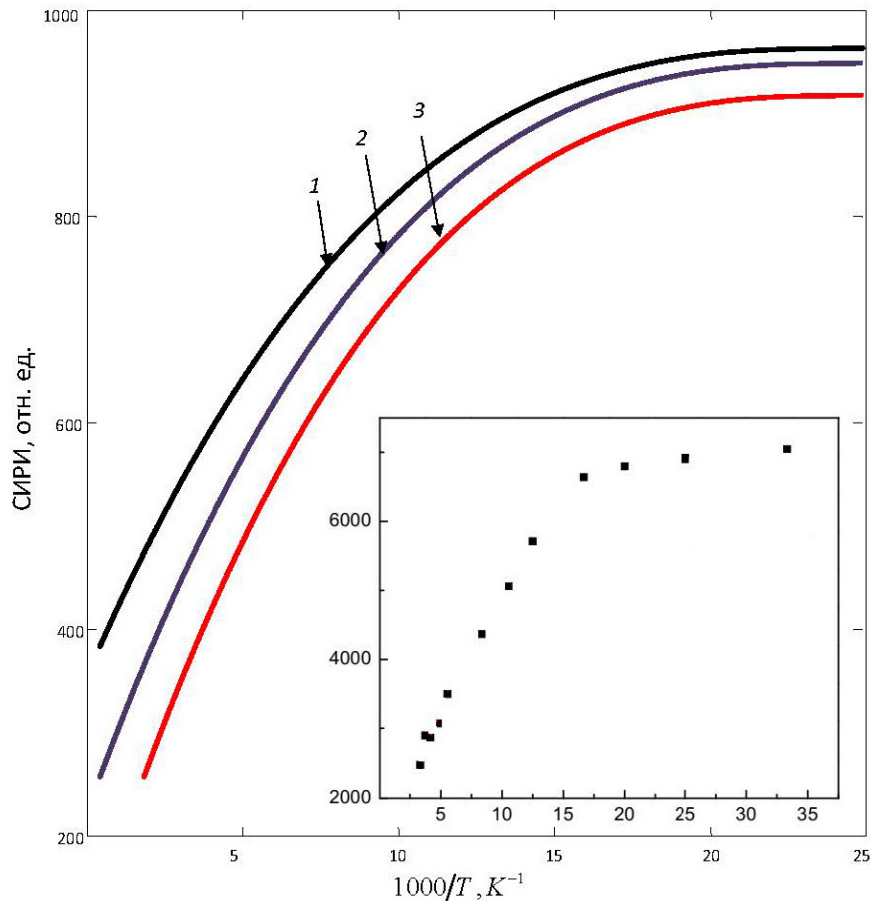


Рис. 3. Зависимость максимума спектральной интенсивности рекомбинационного излучения от обратной температуры, рассчитанная по формуле (47), при $E_i = 7$ мэВ (сплошные линии) для различных значений среднего радиуса КТ $\bar{R}_0$; кривые: 1 – $\bar{R}_0^* = 1$; 2 – $\bar{R}_0^* = 1,5$; 3 – $\bar{R}_0^* = 2$. На вставке показаны результаты эксперимента по измерению температурной зависимости максимума фотолюминесценции в КТ на основе ab-Si [15]

Закключение

Методом потенциала нулевого радиуса в адиабатическом приближении рассчитана температурная зависимость энергии связи дырки в комплексе ($A^+ + e$) в КТ. Показано, что с ростом температуры энергия связи A^+ -состояния монотонно уменьшается, что связано с температурным расплыванием волновой функции квазистационарного A^+ -состояния в условиях интенсивного электрон-фононного и дырочно-фононного взаимодействия. В диполь-

ном приближении проведен расчет зависимости СИРИ от энергии излучательного перехода для квазиульмерной структуры с учетом дисперсии радиуса КТ. Показано, что с ростом температуры происходит сдвиг пороговой энергии перехода в коротковолновую область спектра и имеет место температурное гашение рекомбинационного излучения. Это связано с уменьшением интеграла перекрытия волновых функций начального и конечного состояний электрона из-за роста энергии перехода. Найдено, что при малых значениях радиуса КТ появляется низкотемпературный порог СИРИ, ниже которого рекомбинационный переход не происходит. Установлено, что эффект выхода на «плато» кривых максимума СИРИ, по-видимому, является общим для разных механизмов ФЛ.

Список литературы

1. Шамирзаев Т. С., Сексенбаев М. С., Журавлев К. С., Никифоров А. И. [и др.]. Фотолюминесценция квантовых точек германия, выращенных в кремнии на монослое SiO_2 // Физика твердого тела. 2005. Т. 47, № 1. С. 80–82.
2. Резницкий А. Н., Клочихин А. А., Пермогоров С. А. Температурная зависимость интенсивности фотолюминесценции самоорганизованных квантовых точек CdTe в матрице ZnTe при разных условиях возбуждения // Физика твердого тела. 2012. Т. 54, № 1. С. 115–124.
3. Бирюков Д. Ю., Зацепин А. Ф. Уравнение температурной зависимости фотолюминесценции полупроводниковых квантовых точек // Физика твердого тела. 2014. Т. 56, № 3. С. 611–614.
4. Зацепин А. Ф., Бирюков Д. Ю. Температурная зависимость фотолюминесценции полупроводниковых квантовых точек при непрямом возбуждении в диэлектрической матрице SiO_2 // Физика твердого тела. 2015. Т. 57, № 8. С. 1570–1575.
5. Вайнштейн И. А., Зацепин А. Ф., Кортов В. С. О применимости эмпирического соотношения Варшни для температурной зависимости ширины запрещенной зоны // Физика твердого тела. 1999. Т. 41, № 6. С. 994–998.
6. Седракян Д. М., Петросян П. Г., Григорян Л. Н., Бадалян В. Д. Исследование температурного коэффициента энергии запрещенной зоны полупроводниковых наноструктур $\text{CdSe}_{1-x}\text{S}_x$ // Известия НАН Армении, Физика. 2007. Т. 42, № 1. С. 9–16.
7. Гулямов Г., Шарипбаев Н. Ю. Влияние температуры на ширину запрещенной зоны полупроводника // Физическая инженерия поверхности. 2011. Т. 9, № 1. С. 40–43.
8. Ридли Б. Квантовые процессы в полупроводниках. М. : Мир. 1986. 304 с.
9. Липатова Ж. О., Колобкова Е. В., Бабкина А. Н., Никоноров Н. В. Размерные и температурные зависимости ширины запрещенной зоны квантовых точек селенида кадмия во фторофосфатных стеклах // Физика и техника полупроводников. 2017. Т. 51, № 3. С. 339–341.
10. Питер Ю., Кардона М. Основы физики полупроводников. М. : Физматлит, 2002. 560 с.
11. Екимов А. И., Онущенко А. А., Эфрос Ал. Л. Квантование энергетического спектра дырок в адиабатическом потенциале электрона // Письма в журнал экспериментальной и теоретической физики. 1986. Т. 43, № 6. С. 292–294.
12. Эфрос Ал. Л., Эфрос А. Л. Межзонное поглощение света в полупроводниковом шаре // Физика и техника полупроводников. 1982. Т. 16, № 7. С. 1209–1214.
13. Кревчик В. Д., Грунин А. Б., Зайцев Р. В. Анизотропия магнитооптического поглощения комплексов «квантовая точка – примесный центр» // Физика и техника полупроводников. 2002. Т. 36, № 10. С. 1225–1232.
14. Zhou Hai-Yang, Gu Shi-Wei, Shi Yao-Ming. Electronic and Shallow Impurity States in Semiconductor Heterostructures Under an Applied Electric Field // Commun. Theor. Phys. 2005. Vol. 44. P. 375.

15. Лифшиц И. М., Слезов В. В. О кинетике диффузионного распада пересыщенных твердых растворов // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 1958. Т. 35, № 2 (8). С. 479–492.

References

1. Shamirzaev T.S., Seksenbaev M.S., Zhuravlev K.S., Nikiforov A.I. [et al.]. Photoluminescence of germanium quantum dots grown in silicon on a monolayer SiO₂. *Fizika tverdogo tela = Solid state physics*. 2005;47(1):80–82. (In Russ.)
2. Reznitskiy A.N., Klochikhin A.A., Permogorov S.A. Temperature dependence of the photoluminescence intensity of self-organized CdTe quantum dots in the Zn Tepri matrix under different excitation conditions. *Fizika tverdogo tela = Solid state physics*. 2012;54(1):115–124. (In Russ.)
3. Biryukov D.Yu., Zatsepin A.F. Equation of temperature dependence of photoluminescence of semiconductor quantum dots. *Fizika tverdogo tela = Solid state physics*. 2014;56(3):611–614. (In Russ.)
4. Zatsepin A.F., Biryukov D.Yu. Temperature dependence of photoluminescence of semiconductor quantum dots under indirect excitation in a dielectric matrix SiO₂. *Fizika tverdogo tela = Solid state physics*. 2015;57(8):1570–1575. (In Russ.)
5. Vaynshteyn I.A., Zatsepin A.F., Kortov V.S. On the applicability of the empirical Varshni relation for the temperature dependence of the band gap. *Fizika tverdogo tela = Solid state physics*. 1999;41(6):994–998. (In Russ.)
6. Sedrakyan D.M., Petrosyan P.G., Grigoryan L.N., Badalyan V.D. Researching the temperature coefficient of energy of the forbidden zone of semiconductor nanostructures CdSe1-xSx. *Izvestiya NAN Armenii, Fizika = Proceedings of the National Academy of Sciences of Armenia, Physics*. 2007;42(1):9–16. (In Russ.)
7. Gulyamov G., Sharibaev N.Yu. Effect of temperature on the semiconductor band gap. *Physical surface engineering*. 2011;9(1):40–43. (In Russ.)
8. Ridli B. *Kvantovye protsessy v poluprovodnikakh = Quantum processes in semiconductors*. Moscow: Mir. 1986:304. (In Russ.)
9. Lipatova Zh.O., Kolobkova E.B., Babkina A.H., Nikonorov H.B. Dimensional and temperature dependences of the band gap of cadmium selenide quantum dots in fluorophosphate glasses. *Fizika i tekhnika poluprovodnikov = Semiconductor physics and technology*. 2017;51(3):339–341. (In Russ.)
10. Piter Yu., Kardona M. *Osnovy fiziki poluprovodnikov = Fundamentals of semiconductor physics*. Moscow: Fizmatlit, 2002:560. (In Russ.)
11. Ekimov A.I., Onushchenko A.A., Efros A.L. Quantization of the energy spectrum of holes in the adiabatic potential of an electron. *Pis'ma v zhurnal eksperimental'noy i teoreticheskoy fiziki = Letters to the journal of experimental and theoretical physics*. 1986;43(6):292–294. (In Russ.)
12. Efros A.L., Efros A.L. Interband light absorption in a semiconductor ball. *Fizika i tekhnika poluprovodnikov = Semiconductor physics and technology*. 1982;16(7):1209–1214. (In Russ.)
13. Krevchik V.D., Grunin A.B., Zaytsev R.V. Anisotropy of magneto-optical absorption of complexes “quantum dot - extrinsic center”. *Fizika i tekhnika poluprovodnikov = Semiconductor physics and technology*. 2002;36(10):1225–1232. (In Russ.)
14. Zhou Hai-Yang, Gu Shi-Wei, Shi Yao-Ming. Electronic and Shallow Impurity States in Semiconductor Heterostructures Under an Applied Electric Field. *Commun. Theor. Phys*. 2005;44:375.
15. Lifshits I.M., Slezov V.V. On the kinetics of diffusional decomposition of supersaturated solid solutions. *Zhurnal eksperimental'noy i teoreticheskoy fiziki = Journal of experimental and theoretical physics*. 1958;35(2):479–492. (In Russ.)

Информация об авторах / Information about the authors

Владимир Дмитриевич Кревчик

доктор физико-математических наук,
профессор, декан факультета
информационных технологий
и электроники, Пензенский
государственный университет
(Россия, г. Пенза, ул. Красная, 40)

E-mail: physics@pnzgu.ru

Алексей Викторович Разумов

кандидат физико-математических наук,
доцент, доцент кафедры общей физики
и методики обучения физике,
Пензенский государственный
университет (Россия, г. Пенза,
ул. Красная, 40)

E-mail: physics@pnzgu.ru

Михаил Борисович Семенов

доктор физико-математических наук,
профессор, заведующий кафедрой
физики, Пензенский государственный
университет (Россия,
г. Пенза, ул. Красная, 40)

E-mail: physics@pnzgu.ru

Екатерина Анатольевна Печерская

доктор технических наук, доцент,
заведующий кафедрой информационно-
измерительной техники и метрологии,
Пензенский государственный
университет (Россия,
г. Пенза, ул. Красная, 40)

E-mail: peal@list.ru

Ирина Михайловна Мойко

ассистент кафедры высшей
и прикладной математики, Пензенский
государственный университет
(Россия, г. Пенза, ул. Красная, 40)

E-mail: physics@pnzgu.ru

Павел Евгеньевич Голубков

инженер кафедры информационно-
измерительной техники и метрологии,
Пензенский государственный
университет (Россия,
г. Пенза, ул. Красная, 40)

E-mail: golpavpnz@yandex.ru

Vladimir D. Krevchik

Doctor of physical and mathematical
sciences, professor, dean of the faculty
of information technology and electronics,
Penza State University (40 Krasnaya
street, Penza, Russia)

Aleksey V. Razumov

Candidate of physical and mathematical
sciences, associate professor, associate
professor of the sub-department of general
physics and physics teaching methods,
Penza State University (40 Krasnaya
street, Penza, Russia)

Mikhail B. Semenov

Doctor of physical and mathematical
sciences, professor, head of the
sub-department of physics, Penza
State University (40 Krasnaya street,
Penza, Russia)

Ekaterina A. Pecherskaya

Doctor of engineering sciences, associate
professor, head of the sub-department
of information and measuring technology
and metrology, Penza State University
(40 Krasnaya street, Penza, Russia)

Irina M. Moyko

Assistant of the sub-department of higher
and applied mathematics, Penza State
University (40 Krasnaya street,
Penza, Russia)

Pavel E. Golubkov

Engineer of the sub-department
of information and measuring technology
and metrology, Penza State University
(40 Krasnaya street, Penza, Russia)

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов / The authors declare no conflicts of interests.

Поступила в редакцию / Received 28.10.2021

Поступила после рецензирования и доработки / Revised 10.11.2021

Принята к публикации / Accepted 15.11.2021