

УДК 621.315.592

# Механизмы оже-рекомбинации в полупроводниковых наногетероструктурах. Часть 2. Квантовые нити и квантовые точки\* (Обзор)

© Г.Г. Зегря, Н.Л. Баженов

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,  
194021 Санкт-Петербург, Россия

E-mail: zegrya@theory.ioffe.ru

Поступила в Редакцию 10 ноября 2025 г.

В окончательной редакции 18 ноября 2025 г.

Принята к публикации 18 ноября 2025 г.

Вторая часть Обзорной статьи посвящена микроскопической теории механизмов оже-рекомбинации в полупроводниковых квантовых нитях и квантовых точках. Для удобства читателя нумерация глав, рисунков и формул в частях 1 и 2 сквозная.

**Ключевые слова:** полупроводниковые гетероструктуры, квантовые ямы, квантовые нити, квантовые точки, гетерограница, оже-рекомбинация, микроскопическая теория.

DOI: 10.61011/FTP.2025.10.62340.8766-2

## 4. Механизмы оже-рекомбинации в полупроводниковых квантовых нитях

### 4.1. Введение

В настоящем разделе исследуются механизмы оже-рекомбинации (ОР) неравновесных носителей заряда в цилиндрических квантовых нитях. Показано, что в последних присутствуют два различных механизма оже-рекомбинации: квазипороговый и беспороговый. Оба механизма, как и в случае квантовых ям (КЯ), связаны с наличием гетеробарьеров, но имеют различную природу. Квазипороговый механизм обусловлен пространственным ограничением волновых функций носителей заряда областью квантовой нити, при этом нарушается закон сохранения квазимпульса. Беспороговый механизм, аналогично КЯ, связан с рассеянием электрона (дырки) на гетерогранице.

Для описания спектра и волновых функций носителей в квантовой нити используется модель прямоугольной цилиндрической потенциальной ямы конечной глубины для электронов в зоне проводимости и для дырок в валентной зоне. Принципиальное отличие от ситуации в квантовых ямах появляется у беспорогового механизма оже-рекомбинации. В квантовой нити имеются два канала беспороговой оже-рекомбинации: 1) канал, связанный с передачей большого квазимпульса возбужденному носителю заряда (как и в случае плоских квантовых ям); 2) канал, связанный с передачей ему большого момента импульса. Последний процесс также является беспороговым механизмом оже-рекомбинации в квантовых точках (см. разд. 5). Для электронов и дырок

два канала беспороговой оже-рекомбинации имеют различные зависимости от высот гетеробарьеров, а также от радиуса квантовой нити.

### 4.2. Основные уравнения

#### 4.2.1. Уравнения Кейна

Для анализа процессов рекомбинации необходимо знать волновые функции носителей заряда (см. разд. 3).

В случае цилиндрической симметрии естественно выбрать следующий базис [19]:

$$|s \uparrow\rangle, |s \downarrow\rangle, |p_+ \uparrow\rangle, |p_+ \downarrow\rangle, \\ |p_- \uparrow\rangle, |p_- \downarrow\rangle, |p_z + \uparrow\rangle, |p_z \downarrow\rangle, \quad (72)$$

где

$$|p_+\rangle = 1/\sqrt{2}(|p_x + ip_y\rangle), \\ |p_-\rangle = 1/\sqrt{2}(|p_x - ip_y\rangle),$$

а  $|s\rangle$  и  $|p_x\rangle, |p_y\rangle, |p_z\rangle$  — блоховские функции  $s$ - и  $p$ -типа с угловым моментом 0 и 1 соответственно. Первые описывают состояние зоны проводимости, а вторые — состояние валентной зоны в Г-точке. Стрелками обозначено направление спина. Такой выбор отвечает базисным функциям, имеющим определенное значение проекций квазимпульса и углового момента на ось нити, что соответствует симметрии цилиндрической нити. В данном базисе зависимость блоховских амплитуд от координаты  $z$  (ось  $z$  параллельна оси нити) и от аксиального угла принимает простой вид. Волновая функция носителей  $\psi$ , как и в случае КЯ, может быть представлена в виде

$$\psi = \psi_s |s\rangle + \psi |p\rangle,$$

где  $\psi_s$  и  $\psi$  — спиноры. Для нахождения волновых функций и спектра носителей заряда мы используем систему уравнений Кейна (23).

\* Первая часть Обзора опубликована в ФТП, 2025, том 59, вып. 9, с. 540–561.

Используя закон сохранения плотности потока вероятности (см. (21)), можно получить граничные условия для огибающих волновых функций на интерфейсе [30]. В приближении  $\tilde{\gamma}_1, \tilde{\gamma}_2 = \text{const}$ , учитывая, что эффективная масса тяжелых дырок намного больше массы электронов, можно получить условие непрерывности следующих функций:

$$\psi, \quad \frac{d\psi_z}{d\rho}, \quad m_l^{-1} \operatorname{div} \psi, \quad (73)$$

где

$$m_l^{-1} = \frac{2\gamma^2}{E_g - E} + m_0^{-1}(\tilde{\gamma}_1 + 4\tilde{\gamma}_2).$$

#### 4.2.2. Волновые функции в однородном полупроводнике в цилиндрической системе координат

В цилиндрической системе координат полученные из уравнений Кейна (23) волновые функции тяжелых дырок в базисе (72) могут быть представлены в виде

$$\psi_{h1}(\rho, \phi, z) = H_1 \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ -2iqJ_{m-3/2}(k_h \rho) e^{i(m-3/2)\phi} \\ k_h J_{m-1/2}(k \rho) e^{i(m-1/2)\phi} \\ 0 \\ -k_h J_{m+3/2}(k_h \rho) e^{i(m+3/2)\phi} \\ 0 \\ \sqrt{2}k_h J_{m-1/2}(k_h \rho) e^{i(m-1/2)\phi} \end{bmatrix} e^{iqz}, \quad (74)$$

$$\psi_{h2}(\rho, \phi, z) = H_2 \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ -k_h J_{m-3/2}(k_h \rho) e^{i(m-3/2)\phi} \\ 0 \\ k_h J_{m+1/2}(k \rho) e^{i(m+1/2)\phi} \\ -2iqJ_{m+3/2}(k_h \rho) e^{i(m+3/2)\phi} \\ 0 \\ \sqrt{2}k_h J_{m+1/2}(k_h \rho) e^{i(m+1/2)\phi} \end{bmatrix} e^{iqz}, \quad (75)$$

где  $J_m$  — функция Бесселя порядка  $m$ ,  $H_1$  и  $H_2$  — нормировочные константы,  $q$  и  $k_h$  — параллельная и перпендикулярная проекции аксиальной оси квазимпульса, а  $m$  — проекция полного момента на аксиальную ось, принимающая полуцелые значения. Внутри квантовых нитей волновые функции имеют вид линейной комбинации (74) и (75). Если тяжелая дырка локализована, то под барьером ее волновая функция имеет вид, аналогичный (74), (75), за исключением того, что функцию Бесселя  $J_m$  следует заменить на функцию Макдональда  $K_m$  с одновременной заменой  $k_h$  на  $ik_h$ . Для

легких и спин-отщепленных дырок можно записать

$$\psi_{i1}(\rho, \phi, z) = A_1 \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}\hbar(k_i^2+q^2)\gamma}{E_g-E} J_{m-1/2}(k \rho) e^{i(m-1/2)\phi} \\ 0 \\ -k_i(1+\lambda_i) J_{m-3/2}(k_h \rho) e^{i(m-3/2)\phi} \\ 2iqJ_{m-1/2}(k \rho) e^{i(m-1/2)\phi} \\ k_i(\lambda_i-1) J_{m+1/2}(k \rho) e^{i(m+1/2)\phi} \\ 0 \\ \sqrt{2}iqJ_{m-1/2}(k_h \rho) e^{i(m-1/2)\phi} \\ -\sqrt{2}k_i\lambda_i J_{m+1/2}(k_h \rho) e^{i(m+1/2)\phi} \end{bmatrix} e^{iqz} \quad (76)$$

и

$$\psi_{i2}(\rho, \phi, z) = A_2 \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}\hbar(k_i^2+q^2)\gamma}{E_g-E} J_{m+1/2}(k \rho) e^{i(m+1/2)\phi} \\ 0 \\ k_i(\lambda_i-1) J_{m-1/2}(k \rho) e^{i(m-1/2)\phi} \\ 2iq\lambda_i J_{m+1/2}(k \rho) e^{i(m+1/2)\phi} \\ k_i(1+\lambda_i) J_{m+3/2}(k_h \rho) e^{i(m+3/2)\phi} \\ 0 \\ -\sqrt{2}k_i\lambda_i J_{m-1/2}(k_h \rho) e^{i(m-1/2)\phi} \\ \sqrt{2}iqJ_{m+1/2}(k_h \rho) e^{i(m+1/2)\phi} \end{bmatrix} e^{iqz}, \quad (77)$$

где  $i = l, s$  соответствует легким и спин-отщепленным дыркам,  $A_1, A_2$  — нормировочные константы,  $\lambda_i = \delta/(E + 4\delta - \hbar^2(k_i^2 + q^2)/2m_h)$ . Волновые функции электронов имеют вид, полностью аналогичный виду волновых функций легких и спин-отщепленных дырок, необходимо лишь провести замену  $E \rightarrow E_g + \varepsilon$ .

#### 4.2.3. Состояния носителей в квантовой нити

Так как в выбранном базисе проекции импульса и момента импульса носителей на ось  $z$  имеют определенные значения, то переменные  $z$ ,  $\rho$  и  $\phi$  в уравнении (23) разделяются. Поэтому собственные состояния носителей в квантовой нити определяются дисперсионным уравнением, имеющим радиальную зависимость волновых функций при некоторых значениях  $q$  и  $m$ . В отличие от квантовых ям [30], в квантовой нити состояния не могут быть разделены по четности даже для тяжелых дырок, поэтому дисперсионные соотношения получаются чрезмерно громоздкими. Для тяжелых дырок последнее имеет вид

$$\begin{aligned} & \left( \frac{K_{m-3/2}(\kappa_h R)}{J_{m-3/2}(k_h R)} - \frac{K_{m+1/2}(\kappa_h R)}{J_{m+1/2}(k_h R)} \right) \\ & \times \left( \frac{K_{m+3/2}(\kappa_h R)}{J_{m+3/2}(k_h R)} - \frac{K_{m-1/2}(\kappa_h R)}{J_{m-1/2}(k_h R)} \right) \\ & = \frac{4q^2}{\kappa_h^2 k_h^2} \left( k_h \frac{K_{m-3/2}(\kappa_h R)}{J_{m-3/2}(k_h R)} - \kappa_h \frac{K_{m-1/2}(\kappa_h R)}{J_{m-1/2}(k_h R)} \right) \\ & \times \left( k_h \frac{K_{m+3/2}(\kappa_h R)}{J_{m+3/2}(k_h R)} - \kappa_h \frac{K_{m+1/2}(\kappa_h R)}{J_{m+1/2}(k_h R)} \right). \end{aligned} \quad (78)$$

Здесь  $R$  — радиус нити, а  $k_h$ ,  $\kappa$  — модули нормальных к интерфейсу составляющих квазимпульса в яме и в барьерной области соответственно. Квазимпульсы однозначно связаны друг с другом законом дисперсии. В пределе бесконечно широкой или глубокой ямы можно получить упрощенное уравнение дисперсии для тяжелых дырок:

$$\left( \frac{J_m(k_h R)}{J_{m-2}(k_h R)} - 1 \right) \left( \frac{J_{m-1}(k_h R)}{J_{m+1}(k_h R)} - 1 \right) = \frac{4q^2}{k_h^2}. \quad (79)$$

Для легких дырок получается следующее дисперсионное уравнение:

$$\begin{aligned} q^2 & \left[ \frac{m_l}{\tilde{m}_l} \left( \frac{\kappa_l^2 + q^2}{k_l^2 + q^2} \right) - \left( \frac{2\tilde{\lambda}_l - 1}{2\lambda_l - 1} \right)^2 \right] \\ &= \left[ \kappa_l^2 \left( \frac{2\tilde{\lambda}_l - 1}{2\lambda_l - 1} \right)^2 + k_l^2 \left( \frac{m_l}{\tilde{m}_l} \right)^2 \left( \frac{\kappa_l^2 + q^2}{k_l^2 + q^2} \right)^2 \right. \\ &\quad - \kappa_l k_l \frac{m_l}{\tilde{m}_l} \left( \frac{\kappa_l^2 + q^2}{k_l^2 + q^2} \right) \left( \frac{2\tilde{\lambda}_l - 1}{2\lambda_l - 1} \right) \\ &\quad \times \left( \frac{K_{jz-1/2}(\kappa_l R)}{J_{jz-1/2}(k_l R)} \frac{J_{jz+1/2}(k_l R)}{K_{jz+1/2}(\kappa_l R)} \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{K_{jz+1/2}(\kappa_l R)}{J_{jz+1/2}(k_l R)} \frac{J_{jz-1/2}(k_l R)}{K_{jz-1/2}(\kappa_l R)} \right) \right]. \end{aligned} \quad (80)$$

Дисперсионное соотношение для электронов в зоне проводимости выглядит несколько проще, так как оно делится на два уравнения (в квантовых ямах такого разделения не происходит [30]):

$$\begin{aligned} k_c \frac{\sqrt{\lambda_c^2 - 1}}{Z} \sqrt{\frac{K_{m-1/2}(\kappa_c R) J_{m+3/2}(\kappa_c R)}{J_{m+1/2}^2(\kappa_c R)}} \\ = \kappa_c \frac{\sqrt{\tilde{\lambda}_c^2 - 1}}{\tilde{Z}} \sqrt{\frac{K_{m-1/2}(\kappa_c R) J_{m+3/2}(\kappa_c R)}{J_{m+1/2}^2(\kappa_c R)}} \end{aligned} \quad (81)$$

или

$$\begin{aligned} k_c \frac{\sqrt{\lambda_c^2 - 1}}{Z} \sqrt{\frac{J_{m+1/2}(\kappa_c R) J_{m-1/2}(\kappa_c R)}{J_{m-1/2}^2(\kappa_c R)}} \\ = \kappa_c \frac{\sqrt{\tilde{\lambda}_c^2 - 1}}{\tilde{Z}} \sqrt{\frac{K_{m+1/2}(\kappa_c R) K_{m-3/2}(\kappa_c R)}{K_{m-1/2}^2(\kappa_c R)}}, \end{aligned} \quad (82)$$

где  $\varepsilon$  — энергия электрона, отсчитываемая от края зоны проводимости внутри нити,

$$\begin{aligned} \lambda_c &= \frac{\delta}{E_g + 2\delta + \varepsilon}, \\ Z &= \frac{\varepsilon^2 + \varepsilon(2E_g + 3\delta) + (E_g + 3\delta)E_g}{\varepsilon + E_g + 2\delta}, \end{aligned}$$

а  $\tilde{\lambda}$ ,  $\tilde{Z}$  — те же величины, но в подбарьерной области. Волновые функции, соответствующие уравнению (81),

имеют четное значение проекции на ось  $z$  орбитального момента блоховских огибающих, а в случае (82) — нечетное значение. Дальнейшие расчеты матричных элементов будут проводиться в предположении, что электрон, локализованный в квантовой нити, находится на основном уровне размерного квантования, энергия которого определяется из уравнения

$$k_c \frac{\sqrt{\lambda_c^2 - 1}}{Z} \frac{J_1(\kappa_c R)}{J_0(\kappa_c R)} = \kappa_c \frac{\sqrt{\tilde{\lambda}_c^2 - 1}}{\tilde{Z}} \frac{K_1(\kappa_c R)}{K_0(\kappa_c R)}. \quad (83)$$

### 4.3. Матричный элемент оже-рекомбинации

#### 4.3.1. Вероятность оже-рекомбинации

В рамках 1-го порядка теории возмущений по электрон-электронному взаимодействию вероятность оже-рекомбинации в единицу времени дается выражением (28), а матричный элемент выражением (29). С учетом антисимметризации волновых функций матричный элемент оже-перехода можно представить в виде согласно (30). Далее для простоты мы в основном ограничимся рассмотрением СНСС-процесса оже-рекомбинации. При выполнении условия  $E_g - \Delta_{so} \gg T$ , имеющего место для большинства полупроводников типа A<sup>III</sup>B<sup>V</sup>, все качественные выводы будут справедливыми и для СНС-процесса.

#### 4.3.2. Механизмы оже-рекомбинации в квантовых нитях

Волновые функции носителей являются собственными функциями проекций операторов квазимпульса на ось  $z$ . Таким образом, матричный элемент оже-рекомбинации автоматически удовлетворяет законам сохранения импульса и момента импульса и в цилиндрических координатах  $\rho$ ,  $\phi$  и  $z$  имеет вид

$$\begin{aligned} M_I &= \frac{e^2}{\kappa_\infty} \int_0^\infty \rho_1 d\rho_1 \int_0^\infty \rho_2 d\rho_2 \int_0^{2\pi} d\phi_1 \int_0^{2\pi} d\phi_2 \int_{-\infty}^\infty dz_1 \int_{-\infty}^\infty dz_2 \\ &\quad \times \frac{e^{im(\phi_1 - \phi_2) + iq(z_1 - z_2)}}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} (\mathbf{R}_2^*(\rho_1) \mathbf{R}_3(\rho_1)) (\mathbf{R}_1^*(\rho_2) \mathbf{R}_4(\rho_2)), \end{aligned} \quad (84)$$

где  $\mathbf{R}_1$ ,  $\mathbf{R}_2$ ,  $\mathbf{R}_3$ ,  $\mathbf{R}_4$  — радиальные части волновых функций частиц, а

$$\begin{cases} m = m_2 - m_3 = m_4 - m_1, \\ q = q_2 - q_3 = q_4 - q_1 \end{cases}$$

— переданные аксиальные проекции момента импульса и квазимпульса. Матричный элемент  $M_{II}$  получается из  $M_I$  перестановкой индексов 1 и 2 у волновых функций  $\mathbf{R}_1$  и  $\mathbf{R}_2$ . Функция  $\mathbf{R}_1$  соответствует локализованному носителю в начальном состоянии, а  $\mathbf{R}_4$  — носителю в возбужденном состоянии. Рекомбинирующую пару тяжелая дырка-электрон соответствуют волновые функции

**R<sub>2</sub>** и **R<sub>3</sub>**. Для CHCC-процесса функции **R<sub>1</sub>** и **R<sub>4</sub>** соответствуют электронам в зоне проводимости, при описании CHHS-процесса **R<sub>1</sub>** соответствует тяжелой, а **R<sub>4</sub>** — спин-отщепленной дырке. Проводя фурье-преобразование кулоновского потенциала по координатам  $\rho$  и  $\phi$ , получаем

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_{-\infty}^{\infty} dz \frac{e^{im\phi+iqz}}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \begin{cases} 4\pi I_m(q\rho_1)K_m(q\rho_2), & \rho_1 \leq \rho_2, \\ 4\pi I_m(q\rho_2)K_m(q\rho_1), & \rho_1 \geq \rho_2, \end{cases} \quad (85)$$

где  $I_m$  — модифицированная функция Бесселя порядка  $m$ . Так как масса тяжелой дырки велика ( $m_h \gg m_e$ ), ее волновая функция быстро затухает под барьером по сравнению с волновой функцией электрона, и в подбарьерной области перекрытием волновых функций тяжелой дырки и электрона можно пренебречь. Следует отметить, что это вовсе не означает, что задача решается в приближении бесконечного потенциального барьера для тяжелой дырки, так как ее энергетические уровни находятся из точных граничных условий (73). Как уже было отмечено выше, мы будем также предполагать, что рекомбинирующий электрон находится на основном уровне размерного квантования. Из-за сравнительно малой массы электронов это предположение оправдывается даже для достаточно широких квантовых нитей. При этих условиях матричный элемент принимает вид

$$\begin{aligned} M_I = & \frac{4\pi e^2}{\kappa_0} \int_0^R \rho_1 d\rho_1 \mathbf{R}_2^*(\rho_1) \mathbf{R}_3(\rho_1) \\ & \times \sum_{\eta=s,p} \left[ a_{1\eta} a_{4\eta} \int_0^{\rho_1} \rho d\rho K_m(q\rho_1) I_m(q\rho) J_{m_{4\eta}}(k_4\rho) J_{m_{1\eta}}(k_1\rho) \right. \\ & + a_{1\eta} a_{4\eta} \int_{\rho_1}^R \rho d\rho I_m(q\rho_1) K_m(q\rho) J_{m_{4\eta}}(k_4\rho) J_{m_{1\eta}}(k_1\rho) \\ & + b_{1\eta} b_{4\eta} \int_R^\infty \rho d\rho I_m(q\rho_1) K_m(q\rho) J_m(q\rho_1) K_m(q\rho) \\ & \left. \times J_{m_{4\eta}}(k_4\rho) K_{m_{1\eta}}(k_1\rho) \right], \end{aligned} \quad (86)$$

где  $\eta$  соответствует номеру базисной функции и с учетом спина принимает восемь значений, а  $a_{i\eta}$  — множители при функциях Бесселя для радиальных компонент волновых функций

$$R_{1\eta}(\rho) = \begin{cases} a_{1\eta} J_{m_{1\eta}}(k_1\rho), & \rho \leq R, \\ b_{1\eta} K_{m_{1\eta}}(k_1\rho), & \rho > R, \end{cases}$$

$$R_{4\eta}(\rho) = \begin{cases} a_{4\eta} J_{m_{4\eta}}(k_4\rho), & \rho \leq R, \\ b_{4\eta} J_{m_{4\eta}}(k_4\rho), & \rho > R. \end{cases}$$

В матричном элементе (86) можно выделить два различных вклада. Первый из них связан с наличием

разрывов волновых функций и их производных на гетерогранице (в точке  $\rho = R$ ). Процесс, определяемый этим вкладом, соответствует рассеянию на гетеробарьере. Такое рассеяние в случае одиночного барьера приводит к появлению беспорогового канала оже-рекомбинации [13]. Аналогичная ситуация присутствует и в квантовых ямах [30, 15, 16,]. Скорость беспорогового процесса оже-рекомбинации стремится к нулю в пределе нити бесконечного радиуса.

Второй вклад в (86) связан с рассеянием на короткодействующем кулоновском потенциале [30]. В случае CHCC-процесса оже-рекомбинации происходит возбуждение электрона или в непрерывную, или в дискретную часть спектра, соответствующего  $\varepsilon \approx E_g$ . В первом случае электрон приобретает либо большой квазимпульс, перпендикулярный интерфейсу, либо большую величину проекции углового момента на ось  $z$ . Во втором случае электрон приобретает большой квазимпульс, направленный вдоль оси нити. Последний процесс, очевидно, является пороговым, так как требует наличия у дырки такого же квазимпульса.

В квантовых ямах только переход в дискретный спектр отвечает пороговому процессу [30], однако для квантовых нитей такое утверждение несправедливо. При переходе в непрерывный спектр с увеличением углового момента снятия порога не происходит. По этой причине нет смысла рассматривать пороговый процесс отдельно. Его удобнее считать составной частью квазипорогового процесса. Таким образом, разделяя беспороговый и квазипороговый механизмы оже-рекомбинации в квантовых нитях, запишем матричный элемент оже-рекомбинации в виде

$$M_I = M^{(1)} + M^{(2)}. \quad (87)$$

Здесь  $M^{(1)}$  — беспороговый, а  $M^{(2)}$  — квазипороговый матричные элементы. В пределе нити большого радиуса квазипороговый механизм оже-рекомбинации переходит в пороговый.

#### 4.3.3. Матричный элемент беспорогового процесса

Беспороговый оже-процесс связан с рассеянием носителей на гетерогранице. Соответствующий матричный элемент определяется разрывами волновых функций и их производных при  $\rho = R$ . Подробное вычисление беспорогового матричного элемента приведено в *Приложении IV*, где получен следующий результат:

$$\begin{aligned} M^{(1)} = & \frac{8\pi e^2}{\kappa_0(q^2 + k_4^2)} R_{1s}(R) R_{4s}(R) \\ & \times \left\{ qRK_{m-1}(qR) \left[ \frac{3V_c + V_v}{4E_g} \right] + mK_m(qR) \frac{3V_c}{4E_g} \right\} \\ & \times \int_0^R (\mathbf{R}_2^*(\rho) \mathbf{R}_3(\rho)) I_m(q\rho) \rho d\rho. \end{aligned} \quad (88)$$

Первое слагаемое в фигурных скобках пропорционально  $q$  и соответствует беспороговому процессу в квантовой яме [30], второе — пропорционально  $m$  и соответствует каналу беспороговой оже-рекомбинации в квантовых точках [44]. Из (88) видно, что два вклада в  $M^{(1)}$  имеют различную зависимость от высоты барьеров для электронов в зоне проводимости и для дырок в валентной зоне.

#### 4.3.4. Матричный элемент квазипорогового оже-процесса

Квазипороговый процесс связан с ограничением области перекрытия волновых функций объемом квантовой нити. Это в соответствии с принципом неопределенности Гейзенберга ведет к замене  $\delta$ -функции в законе сохранения квазимпульса функцией, стремящейся к ней в пределе  $R \rightarrow \infty$ . В *Приложении V* приводится вычисление квазипорогового матричного элемента, причем окончательное выражение для  $M^{(2)}$  имеет вид

$$M^{(2)} = \frac{4\pi e^2}{\kappa_0(q^2 + k_4^2)} \int_0^R (\mathbf{R}_2^*(\rho) \mathbf{R}_3(\rho)) (\mathbf{R}_1^*(\rho) \mathbf{R}_4(\rho)) \rho d\rho. \quad (89)$$

В пределе  $R \rightarrow \infty$  и при условии, что  $k_1, k_2 \ll k_3, k_4$ , этот матричный элемент становится пропорциональным  $\delta(k_4 - k_3)$ , т. е. квазипороговый процесс переходит в пороговый процесс оже-рекомбинации. Действительно, квазипороговый матричный элемент пропорционален интегралу от четырех функций Бесселя:

$$M^{(2)} \propto \int_0^R J_0(k_1\rho) J_0(k_2\rho) J_m(k_3\rho) J_m(k_4\rho) \rho d\rho. \quad (90)$$

Считая, что  $k_3, k_4 \gg k_1, k_2$ , можно разложить этот интеграл в ряд по первообразным  $J_m(k_3\rho) J_m(k_4\rho)$ . Оставляя первый член ряда, получим

$$\begin{aligned} M^{(2)} &\propto \frac{R}{k_4^2 - k_3^2} J_0(k_1 R) J_0(k_2 R) (k_3 J_{m-1}(k_3 R) \\ &\times J_m(k_4 R) - k_4 J_m(k_3 R) J_{m-1}(k_4 R)). \end{aligned} \quad (91)$$

Для больших  $R$  можно заменить функции Бесселя их асимптотическими приближениями для большого аргумента

$$J_m(z) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \cos\left(z - \frac{\pi m}{2} + \frac{\pi}{4}\right). \quad (92)$$

Подставляя это выражение в (91), окончательно получим

$$M^{(2)} \propto \frac{\sin((k_4 - k_3)R)}{k_4 - k_3}. \quad (93)$$

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

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

#### 4.4. Коэффициент оже-рекомбинации

Скорость ОР вычисляется аналогично случаю квантовой ямы согласно выражению (44). Вклады в скорость оже-рекомбинации от квазипорогового и беспорогового процессов нельзя разделить, так как они интерферируют. При малых значениях радиуса нити эта интерференция особенно существенна, так как оба процесса являются беспороговыми [30]. Для квантовых нитей большого радиуса интерференцией между  $M^{(1)}$  и  $M^{(2)}$  можно пренебречь, так как основные квазипороговые переходы, в отличие от беспороговых, происходят с участием тяжелых дырок, имеющих большой продольный момент импульса или квазимпульса. С учетом изложенного выше, что пренебрежение интерференцией дает почти точный результат для квантовых нитей большого радиуса, а для тонких нитей приводит к правильному по порядку величины результату. Полученная таким образом скорость рекомбинации имеет правильные зависимости от параметров квантовой нити (от ее радиуса, высоты барьеров для дырок и электронов) и от температуры. Введем коэффициент оже-рекомбинации  $C$ , связанный со скоростью  $G$  соотношением

$$G = C n^2 p,$$

где  $n$  и  $p$  — одномерные концентрации электронов и дырок. Пренебрегая интерференцией между вкладами от различных процессов, запишем

$$C = C^{(1)} + C^{(2)}, \quad (94)$$

где коэффициенты  $C^{(1)}$  и  $C^{(2)}$  соответствуют беспороговому и квазипороговому оже-процессам с матричными элементами  $M^{(1)}$  и  $M^{(2)}$  соответственно. Выражение для беспорогового коэффициента оже-рекомбинации может быть получено подстановкой (88) в (44). В результате имеем

$$\begin{aligned} C_1 &\approx \frac{24e^4 \hbar^3 \gamma^4}{\kappa_\infty^2 E_g^5} \frac{F(\Delta_{so}/E_g)}{R^5} \\ &\times \frac{k_c^2 J_0^4(k_c R)}{(J_0^2(k_c R) + J_1^2(k_c R) + K_0^2(\kappa_c R) + K_1^2(\kappa_c R))^2} \\ &\times \left\langle \left( \left[ \frac{3V_c + V_v}{4E_g} \right]^2 + \frac{m^2}{q^2 R^2} \left[ \frac{3V_c}{4E_g} \right]^2 \right) \frac{k_h^2 q^2}{(q^2 + k_4^2)^3 k_f(q)} \right\rangle, \end{aligned} \quad (95)$$

где

$$F(x) = \frac{(1+x/3)(1+x)}{(1+2x/3)(1+x/2)} \frac{1+7x/9+x^2/6}{1+x/4+x^2/6},$$

$$k_f(q) = \sqrt{\frac{2E_g^2}{\hbar^2 \gamma^2} \frac{1+\Delta_{so}/2E_g}{1+\Delta_{so}/3E_g} - q^2}.$$

Угловые скобки означают усреднение по функции распределения тяжелых дырок. В случае распределения

Больцмана, которое обычно имеет место в случае дырок, это усреднение имеет вид

$$\langle f(q_h, k_{mn}) \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{n,m} \int_0^\infty dq_h f(q_h, k_{mn}) \exp\left(-\frac{k_{mn}^2 + q_h^2}{q_T^2}\right),$$

где

$$Z = \frac{q_T \sqrt{\pi}}{2} \sum_{n,m} \exp\left(-\frac{k_{mn}^2}{q_T^2}\right),$$

$n$  — номер уровня дырок,  $m$  — проекция момента импульса,  $k_e, \kappa_e$  — перпендикулярные интерфейсу квазиимпульсы электрона в основном состоянии над и под барьером,  $q_T$  — тепловой импульс тяжелых дырок,

$$q_T = \sqrt{\frac{2m_h T}{\hbar^2}},$$

$k_{mn}$  — квазиимпульс, соответствующий уровню размernого квантования дырок, который для бесконечно глубокой квантовой ямы для тяжелых дырок имеет значение

$$k_{mn} = R/\gamma_{mn},$$

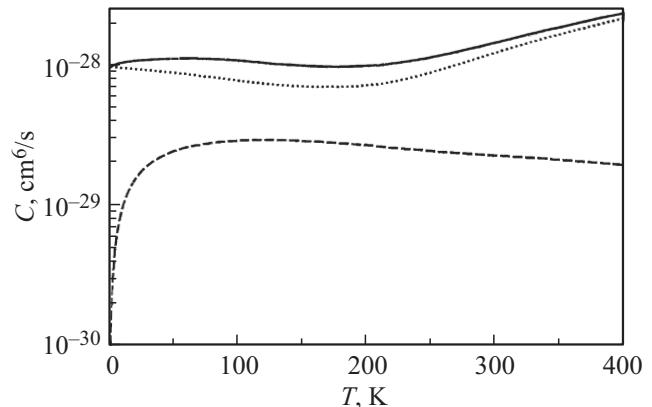
где  $\gamma_{mn}$  —  $n$ -ый корень функции Бесселя  $J_m$ . Для коэффициента квазипорогового оже-процесса мы имеем

$$\begin{aligned} C_2 &\approx \frac{6e^4 \hbar^3 \gamma^4}{\kappa_\infty^2 E_g^5} \frac{F(\Delta_{so}/E_g)}{R^5} \\ &\times \frac{k_c^2 J_0^4(k_c R)}{(J_0^2(k_c R) + J_1^2(k_c R) + K_0^2(k_c R) + K_1^2(k_c R))^2} \\ &\times \left\langle \frac{k_h^2}{(q_h^2 + k_h^2)k_f} \frac{\sin^2(k_f - k_h)R}{(k_f(q) - k_h)^2} \right\rangle. \end{aligned} \quad (96)$$

В пределе нити бесконечного радиуса коэффициент квазипорогового процесса оже-рекомбинации переходит в выражение для коэффициента оже-рекомбинации в однородном полупроводнике. Считая, что уровни размernого квантования носителей сливаются в непрерывный спектр, и проводя по нему интегрирование, получаем

$$C_2 \pi^2 R^4 \rightarrow \frac{16\sqrt{2}\pi^{5/2}}{3} \frac{e^4 \hbar^3}{\kappa_\infty^2 E_g^{5/2} T^{1/2} m_e^{1/2} m_e^{3/2}} \exp\left(-\frac{E_{th}}{T}\right), \quad (97)$$

где  $E_{th}$  — пороговая энергия CHCC-процесса в однородном полупроводнике, которая в модели Кейна примерно равна  $E_{th} \approx (2m_e/m_h)E_g$ . Заметим, что для широких ям необходимо учитывать не только процесс с  $k_f = k_h + k_{c1} + k_{c2}$ , но и еще три процесса, соответствующие  $k_f = k_h + k_{e1} - k_{e2}$ ,  $k_f = k_h - k_{e1} + k_{e2}$  и  $k_f = k_h - k_{e1} - k_{e2}$ . Выражение (97) можно сравнить с известным результатом [10], полученным для коэффициента оже-рекомбинации в однородном полупроводнике (см. (57)). Небольшое отличие в численном коэффициенте связано со сделанным в работе [10] предположением, что  $\Delta_{so} \gg E_g$ .



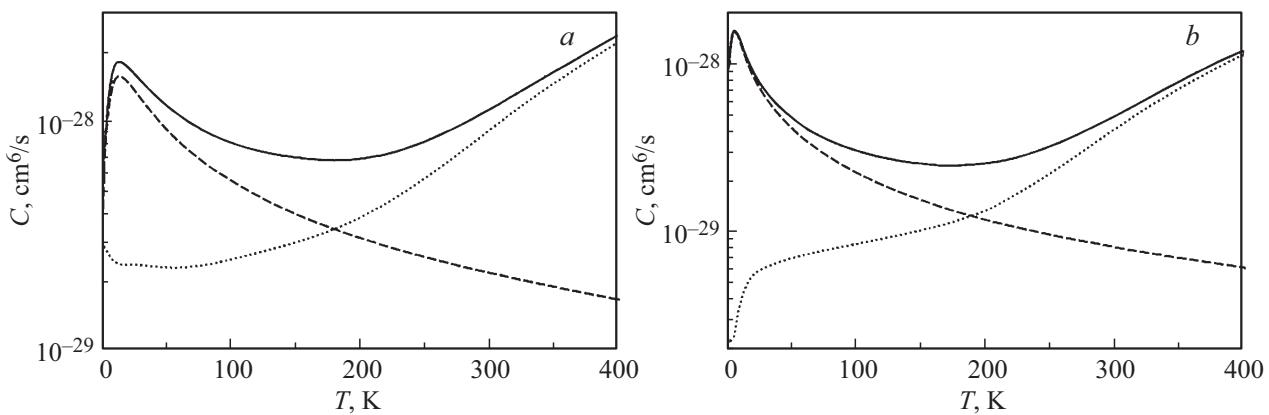
**Рис. 10.** Зависимость коэффициента оже-рекомбинации для CHCC-процесса от температуры для двух механизмов оже-рекомбинации: беспорогового ( $C_1\pi^2R^4$ , штриховая линия) и квазипорогового ( $C_2\pi^2R^4$ , пунктир) для тонкой нити с радиусом  $R = 50$  Å. Сплошная линия соответствует суммарному коэффициенту оже-рекомбинации  $(C_1 + C_2)\pi^2R^4$ .

#### 4.5. Обсуждение результатов

Анализ процессов оже-рекомбинации в полупроводниковых структурах с квантовыми нитями показал, что существуют два различных механизма оже-рекомбинации, беспороговый и квазипороговый. Беспороговый процесс имеет два канала, связанных с рассеянием продольной компоненты квазиимпульса и момента импульса. Первый канал аналогичен беспороговому оже-процессу в квантовых ямах, а второй аналогичен беспороговому каналу оже-рекомбинации в квантовых точках. Коэффициенты, соответствующие этим каналам, имеют различную зависимость от высоты барьеров для электронов и дырок.

Это обстоятельство, в частности, препятствует подавлению оже-рекомбинации в полупроводниковых гетероструктурах второго типа с квантовыми нитями в отличие от структур с квантовыми ямами [45]. В квантовых ямах пороговый CHCC-процесс оже-рекомбинации соответствовал переходу возбужденного электрона в дискретный спектр. Для нитей, как показано выше, существует также пороговый процесс с переходом электрона в непрерывный спектр. По этой причине в нитях нет смысла разделять квазипороговый и пороговый процессы на два отдельных процессы.

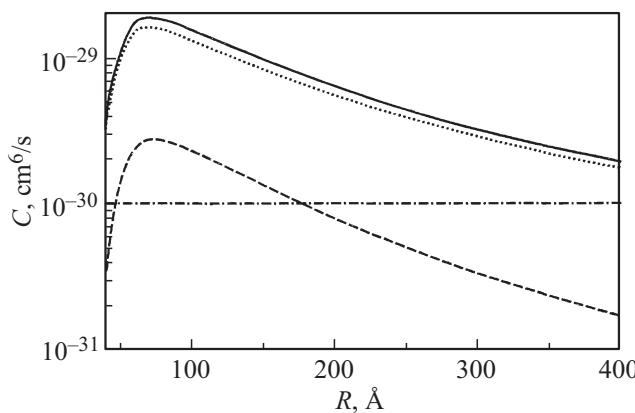
Для анализа коэффициентов оже-рекомбинации взята типичная гетероструктура на основе соединения InGaAsP с энергией запрещенной зоны  $E_g = 1$  эВ. Как видно из рис. 10 и 11, коэффициент  $C_1$ , соответствующий беспороговому процессу оже-рекомбинации, является слабой функцией от температуры для тонких квантовых нитей и убывает с температурой для широких нитей. Квазипороговый коэффициент оже-рекомбинации  $C_2$ , наоборот, возрастает с ростом температуры. Для тонких нитей  $C_2$  также является слабой функцией температуры (рис. 10). С ростом радиуса нити  $R$  зависимость  $C_2$  от температуры усиливается и приближается к



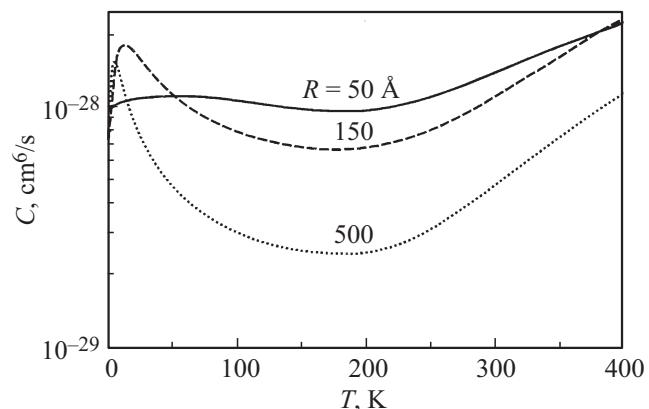
**Рис. 11.** Зависимость коэффициента оже-рекомбинации для СНСС-процесса для двух механизмов оже-рекомбинации: беспорогового ( $C_1\pi^2R^4$ , штриховые кривые) и квазипорогового ( $C_2\pi^2R^4$ , пунктирные кривые) для широких нитей при  $R = 150 \text{ \AA}$  (a) и  $R = 250 \text{ \AA}$  (b). Сплошная линия соответствует суммарному коэффициенту оже-рекомбинации ( $(C_1 + C_2)\pi^2R^4$ ).

пороговой (экспоненциальной) зависимости в объемных полупроводниках (рис. 11). При этом количественное соотношение между  $C_1$  и  $C_2$  также меняется:  $C_1$  убывает с ростом  $R$  быстрее, чем  $C_2$ , так что эффективный трехмерный коэффициент  $C_{3D}^{(1)} = C_1(\pi R^2)^2$  обращается в нуль при  $R \rightarrow \infty$ , а  $C_{3D}^{(2)} = C_2(\pi R^2)^2$  приближается к объемному коэффициенту оже-рекомбинации  $C_{3D}$  (рис. 12). Для тонких квантовых нитей оже-коэффициенты квазипорогового и беспорогового процессов значительно превышают трехмерный коэффициент  $C_{3D}$ , отнесенный к квадрату площади цилиндрического сечения нити  $(\pi R^2)^2$ . Коэффициент оже-рекомбинации является немонотонной функцией радиуса нити в широком диапазоне температур (рис. 13).

Для тонких квантовых нитей малость оже-коэффициента связана в первую очередь со слабым перекрытием



**Рис. 12.** Зависимость коэффициента оже-рекомбинации для беспорогового ( $C_1\pi^2R^4$ , штриховая линия) и квазипорогового ( $C_2\pi^2R^4$ , пунктир) процессов от радиуса квантовой нити при температуре  $T = 300 \text{ K}$ . Сплошная линия соответствует суммарному коэффициенту оже-рекомбинации  $(C_1 + C_2)\pi^2R^4$ , а горизонтальная штрихпунктирная линия соответствует трехмерному коэффициенту СНСС-процесса.



**Рис. 13.** Температурная зависимость суммарного коэффициента оже-рекомбинации при различных радиусах квантовой нити.

волновых функций электронов и дырок, находящихся в связанном состоянии. С увеличением радиуса нити ослабляется влияние гетеробарьеров на процессы оже-рекомбинации, при этом проявляется пороговая природа этих процессов. Таким образом, для нитей большого радиуса происходит уменьшение коэффициента оже-рекомбинации до значения, соответствующего трехмерному оже-коэффициенту однородного полупроводника.

Как следует из проведенного анализа, механизмы оже-рекомбинации в квантовых нитях в целом схожи с такими же механизмами в квантовых ямах [30], имеется лишь количественное различие. Для однородных полупроводников 1-ый порядок теории возмущений по межэлектронному взаимодействию недостаточен для расчета коэффициента оже-рекомбинации. Это связано с тем, что при оже-рекомбинации существенное влияние на пороговый процесс оказывают процессы электрон-фононной и электрон-электронной релаксации, частично снимающие порог оже-рекомбинации. Однако 1-ый порядок теории возмущений дает качественно правиль-

ный результат для полупроводниковых гетероструктур с квантовыми нитями и квантовыми ямами, так как влияние гетеробарьеров на процессы оже-рекомбинации играет более важную роль, чем процессы релаксации, если характерные размеры гетероструктуры меньше длины свободного пробега носителей заряда [46].

## 5. Механизмы оже-рекомбинации в полупроводниковых квантовых точках

### 5.1. Введение

Полупроводниковые квантовые точки все больше и больше привлекают внимание исследователей в связи с тем что, во-первых, их физические свойства принципиально отличаются от свойств однородных (массивных) полупроводников и, во-вторых, возможностью их использования в различных оптоэлектронных устройствах — от лазеров до квантовых компьютеров [47–50]. В последнее время полупроводниковые квантовые точки широко используются в биологии и медицине в качестве меток [51–53] и для диагностики биологических объектов [54,55]. В связи с тем, что интерес к квантовым точкам все больше возрастает, важно понять, какие физические процессы влияют на их оптические и электрические свойства.

В работах [56–58] представлены детальные экспериментальные исследования времени жизни носителей заряда и пороговых токов в лазерах на квантовых точках. Показано, что при высоких уровнях возбуждения процессы безызлучательной оже-рекомбинации вносят существенный вклад в величину порогового тока лазера.

Анализ механизмов оже-рекомбинации в квантовых точках на основе CdS впервые выполнен в работе [50]. В работе [60] представлен обзор экспериментальных и теоретических работ, посвященных исследованию оже-рекомбинации в полупроводниковых кристаллах нанометровых размеров. Так, в работе [61] характерное время оже-рекомбинации в квантовых точках было изучено экспериментально. Показано, что для квантовых точек малого радиуса скорость оже-рекомбинации существенно больше скорости излучательной рекомбинации. Экспериментально измеренное время безызлучательной рекомбинации составляет величину  $\sim 10\text{--}100\text{ ps}$ , тогда как время излучательной рекомбинации  $\sim 1\text{ ns}$ . Однако в теоретических работах, представленных в обзоре [60], отсутствует детальный анализ зависимости скорости оже-рекомбинации от температуры и параметров квантовых точек: от радиуса квантовой точки и от глубины квантовых ям для электронов и дырок.

Для полупроводниковых квантовых точек на основе соединений  $A^{III}B^V$  анализ механизмов оже-рекомбинации был выполнен в работах [44,62,63]. В этих работах рассматривается беспороговый процесс оже-рекомбинации, связанный с рассеянием носителей заря-

да на гетерогранице, который впервые был предсказан в работе [13]. Качественный анализ зависимости скорости беспороговой оже-рекомбинации от радиуса квантовых точек выполнен в работах [58,60,62–64]. Как будет показано далее, беспороговый канал оже-рекомбинации существует для квантовых точек малого радиуса. С ростом радиуса квантовых точек скорость беспорогового процесса оже-рекомбинации убывает очень резко и в пределе, когда радиус квантовой точки стремится к бесконечности, стремится к нулю. Поэтому беспороговый канал оже-рекомбинации — это не единственный безызлучательный процесс оже-рекомбинации в квантовых точках.

В работе [62] впервые была предпринята попытка классифицировать механизмы оже-рекомбинации в квантовых точках. Показано, что для локализованных носителей заряда в квантовых точках возможны два механизма оже-рекомбинации: беспороговый и квазипороговый процессы. Квазипороговый процесс обусловлен пространственным ограничением волновых функций носителей заряда областью квантовой точки. Данный механизм оже-рекомбинации аналогичен квазипороговому процессу в квантовых ямах [30,65] и в квантовых нитях [66]. Беспороговый механизм связан с рассеянием электрона (дырки) на гетерогранице, при этом возбужденному носителю передается большой момент импульса и большой квазимпульс аналогично процессу ОР в квантовых нитях.

В работе [67] показано, что в квантовых точках при больших уровнях возбуждения возможен еще один канал оже-рекомбинации, который связан с кулоновским взаимодействием носителей заряда, локализованных в квантовой точке, с носителями заряда в барьерной области.

### 5.2. Уравнения Кейна и основные соотношения

Базисные функции в случае сферической симметрии выбираем по аналогии с квантовыми нитями (см. (72)), но здесь мы не будем учитывать спин частиц [19]:

$$|s\rangle, |p_+\rangle, |p_-\rangle, |p_z\rangle, \quad (98)$$

$$\begin{aligned} |p_+\rangle &= 1/\sqrt{2} |p_x + ip_y\rangle, \\ |p_-\rangle &= 1/\sqrt{2} |p_x - ip_y\rangle. \end{aligned} \quad (99)$$

В (98)  $|s\rangle$  и  $|p\rangle$  — это блоховские функции  $s$ - и  $p$ -типа, соответствующие собственным значениям углового момента 0 и 1 оператора  $\hat{L}_1^2$ . Первые функции  $s$ -типа описывают состояние зоны проводимости, а  $p$ -типа — состояние валентной зоны в Г-точке. В дальнейшем, однако, мы будем использовать разложение по этому базису с помощью шаровых векторов, являющихся собственными функциями операторов  $\hat{\mathbf{J}}^2$ ,  $\hat{\mathbf{J}}_z$ ,  $\hat{\mathbf{L}}^2$  и  $\hat{\mathbf{L}}_1^2$ . Полный момент частиц равен  $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{L}}_1$ , где  $\hat{\mathbf{L}}$  — оператор орбитального момента, действующего на огибающие волновые функции (отвечает за момент электрона в сферической

квантовой точке), а  $\hat{\mathbf{L}}_1$  — угловой момент, действующий на блоховские функции. При этом для удобства мы не включаем сюда спин электрона, так как в данном разделе спин-орбитальное взаимодействие не учитывается. Тогда без учета спина полный момент электрона будет целым числом. Сохраняющимися величинами, описывающими поведение частиц в рамках симметрии задачи, будут квадрат полного момента и его проекция на ось  $z$ . В дальнейшем для обозначения собственных значений полного момента и его проекции на ось  $z$  мы будем использовать обозначения  $j$  и  $m$ .

Далее, мы будем рассматривать уравнения Кейна без учета спин-орбитального взаимодействия. Как показано в работах [65,66], учет спин-орбитального взаимодействия при расчете скорости оже-рекомбинации приводит к умножению скорости на функцию  $F(\Delta_{\text{so}}/E_g)$ . При любых соотношениях между  $\Delta_{\text{so}}$  и  $E_g$  функция  $F(x)$  меняется мало, максимальное значение равно  $F(x) = 1$ , а минимальное значение равно  $F(x) \approx 0.9$ , т.е. в общем виде  $F(x) \leq 1$ . При этом пренебрежение спин-орбитальным взаимодействием дает возможность существенно упростить уравнения и получить аналитические выражения для вероятности оже-рекомбинации (речь не идет об оже-рекомбинации дырок с переходом в SO-зону).

Волновая функция носителей заряда может быть представлена в виде  $\Psi = \Psi_s |s\rangle + \Psi |p\rangle$ . Перепишем уравнения Кейна для огибающих  $\Psi_s$  и  $\Psi$  в сферическом приближении согласно (5) без учета спин-орбитального взаимодействия:

$$\begin{cases} (E_g - E)\Psi_s - i\hbar\gamma\nabla\Psi = 0, \\ -E\Psi - i\hbar\gamma\nabla\Psi_s + \frac{\hbar^2}{2m} (\gamma_1 + 4\gamma_2) \nabla(\nabla\Psi) - \\ -\frac{\hbar^2}{2m} (\gamma_1 - 2\gamma_2) (\nabla \times (\nabla \times \Psi)) = 0. \end{cases} \quad (100)$$

Фурье-преобразование уравнений системы (100) позволяет получить спектры для электронов и тяжелых дырок:

$$\begin{aligned} k^2 &= \frac{\mathcal{E}(\mathcal{E} + E_g)}{\hbar^2\gamma^2}, & \text{электроны,} \\ E_h &= -\frac{\hbar^2k^2}{2m_h}, & \text{тяжелые дырки.} \end{aligned} \quad (101)$$

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

$$m_h^{-1} = m^{-1}(\gamma_1 - 2\gamma_2). \quad (102)$$

В данном случае  $m_h$  совпадает с массой тяжелой дырки, а масса легкой дырки равна  $m_l^{-1} = \frac{2\gamma^2}{E_g - E} + m^{-1}(\gamma_1 + 4\gamma_2)$ .

Выражение для  $m_l$  совпадает с массой легкой дырки, так как константа спин-орбитального взаимодействия

равна нулю. В дальнейшем нам понадобятся граничные условия для волновых функций на гетерогранице. Из системы уравнений (100) можно получить уравнения Кейна, которые могут быть проинтегрированы через интерфейс (см. (23)):

$$\begin{cases} (E_g - E)\Psi_s - i\hbar\gamma\nabla\Psi = 0, \\ -E\Psi - i\hbar\gamma\nabla\Psi_s + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla[6\gamma_2\nabla\Psi] \\ + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial}{\partial x_k} (\gamma_1 - 2\gamma_2) \frac{\partial}{\partial x_k} \Psi = 0. \end{cases} \quad (103)$$

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

Волновые функции и спектр носителей заряда могут быть получены из решения системы уравнений (100). Состояния электронов и дырок удобно рассматривать отдельно.

#### 5.3.1. Состояния электронов в квантовой точке

Для электронов, как уже было отмечено выше, уравнения Кейна (103) упрощаются, принимая вид

$$\begin{cases} -\mathcal{E}\Psi_s - i\hbar\gamma\nabla\Psi = 0, \\ -(\mathcal{E} + E_g)\Psi - i\hbar\gamma\nabla\Psi_s = 0. \end{cases} \quad (104)$$

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

$$\Psi_s = R(r)Y_{lm}(\theta, \phi). \quad (105)$$

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

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) - \frac{j(j+1)}{r^2} R + k^2 R = 0, \quad (106)$$

где  $k^2$  дается уравнением (101) для электронов. Решение уравнения (106) известно и представляет собой сферические функции Бесселя [ $R \propto j_j(kr)$ ]. Тогда для волновых функций электронов внутри квантовых точек (при  $r < R$ ) получаем

$$\Psi_s = A j_j(kr) Y_{jm}(\theta, \phi), \quad \Psi = \frac{-i\hbar\nabla\Psi_s}{(\mathcal{E} + E_g)},$$

$$\begin{aligned} \nabla\Psi_s &= Ak \left( \sqrt{\frac{j+1}{2j+1}} j_{j+1}(kr) \mathbf{Y}_{lm}^{j+1}(\theta, \phi) \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{\frac{j}{2j+1}} j_{j-1}(kr) \mathbf{Y}_{jm}^{j-1}(\theta, \phi) \right), \end{aligned} \quad (107)$$

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

$$\begin{aligned}\Psi_s &= B k_j(\kappa r) Y_{jm}(\theta, \phi), \quad \Psi = \frac{-i\hbar\nabla\Psi_s}{(\tilde{\mathcal{E}} + E_g)}, \\ \nabla\Psi_s &= B\kappa \left( -\sqrt{\frac{j+1}{2j+1}} k_{j+1}(\kappa r) \mathbf{Y}_{jm}^{j+1}(\theta, \phi) \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{\frac{j}{2j+1}} k_{j-1}(\kappa r) \mathbf{Y}_{jm}^{j-1}(\theta, \phi) \right).\end{aligned}\quad (108)$$

Здесь  $B$  — нормировочная константа,

$$\kappa^2 = -\frac{\tilde{\mathcal{E}}(\tilde{\mathcal{E}} + E_g)}{\hbar^2\gamma^2} = \frac{(V_c - \tilde{\mathcal{E}})(\tilde{\mathcal{E}} + E_g + V_v)}{\hbar^2\gamma^2} \quad (109)$$

и  $k_j(x)$  — модифицированная сферическая функция Бесселя, связанная с цилиндрической соотношением  $k_j(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} K_{j+1/2}(x)$ . Границные условия для огибающих волновых функций можно получить путем интегрирования уравнений Кейна (103) через интерфейс. Используя закон сохранения плотности потока вероятности (см. (21) и (22)) и приближение  $\gamma = \text{const}$ , что является хорошим приближением для полупроводниковых структур  $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$ , получаем непрерывность следующих функций:

$$\begin{aligned}[\Psi_s]_R &= 0, \\ \left( \frac{1}{\tilde{\mathcal{E}} + E_g} \frac{\partial \Psi_s^-}{\partial r} \right)_R &= \left( \frac{1}{\tilde{\mathcal{E}} + E_g + V_v} \frac{\partial \Psi_s^+}{\partial r} \right)_R.\end{aligned}\quad (110)$$

Здесь знаки „<“ и „>“ означают, что величины берутся слева и справа от гетерограницы. Из граничных условий (110) следуют дисперсионные соотношения для электронов

$$\begin{aligned}j_j(kR) \left[ \kappa \tilde{Z} \left( \frac{j k_j(kR)}{\kappa R} - k_{j+1}(kR) \right) \right] \\ = k_j(kR) \left[ k Z \left( \frac{j j_j(kR)}{\kappa R} - j_{j+1}(kR) \right) \right].\end{aligned}\quad (111)$$

Полагая в (111)  $j = 0$ , получаем для дырок и электронов

$$\frac{j_0(kR)}{j_1(kR)} = \frac{kZ}{\kappa \tilde{Z}} \frac{k_0(kR)}{k_1(kR)}, \quad (112)$$

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

### 5.3.2. Волновые функции дырок

Волновые функции легких дырок можно не выписывать. Достаточно заметить, что они аналогичны по виду волновым функциям электронов и отличие проявляется лишь в эффективной массе. Волновые функции тяжелых дырок отличаются по виду от волновых функций электронов. Для их нахождения сначала проводится преобразование Фурье уравнений Кейна (100). Из решения

уравнения Кейна при  $\Psi_s \equiv 0$  получаем две функции тяжелых дырок (имеется вырождение):

$$\begin{aligned}\Psi_{h1}^- &= A_1 j_j(k_h r) \mathbf{Y}_{jm}^j(\theta, \phi), \\ \Psi_{h2}^- &= A_2 \left( \sqrt{\frac{j}{2j+1}} j_{j+1}(k_h r) \mathbf{Y}_{jm}^{j+1}(\theta, \phi) \right. \\ &\quad \left. - \sqrt{\frac{j+1}{2j+1}} j_{j-1}(k_h r) \mathbf{Y}_{jm}^{j-1}(\theta, \phi) \right) \text{ при } r < R, \\ \Psi_{h1}^+ &= B_1 k_j(k_h r) \mathbf{Y}_{jm}^j(\theta, \phi), \\ \Psi_{h2}^+ &= B_2 \left( \sqrt{\frac{j}{2j+1}} k_{j+1}(k_h r) \mathbf{Y}_{jm}^{j+1}(\theta, \phi) \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{\frac{j+1}{2j+1}} k_{j-1}(k_h r) \mathbf{Y}_{jm}^{j-1}(\theta, \phi) \right) \text{ при } r > R,\end{aligned}\quad (113)$$

где  $\kappa_h = \sqrt{\frac{2m_h(V_v - E)}{\hbar^2}}$ ,  $A_i$  и  $B_i$  — нормировочные константы. Видно, что две волновые функции для тяжелых дырок имеют разную поляризацию. Как будет показано далее, первая волновая функция не дает вклада в ожидаемый процесс. Для вывода граничных условий необходимо проинтегрировать уравнения Кейна для тяжелых дырок через интерфейс. Это дает два граничных условия:

$$\begin{aligned}[\Psi_r]_R &= 0, \\ \left[ \frac{d\Psi_\perp}{dr} \right]_R &= 0,\end{aligned}\quad (114)$$

где  $\Psi_\perp$  — огибающая  $p$ -компоненты волновой функции, перпендикулярная радиус-вектору  $\mathbf{r}$ . При выводе (114) считается, что масса тяжелой дырки не меняется при переходе через барьер и что  $m_h \gg m_l$ . Тогда можно пренебречь смешиванием функций для легкой и тяжелой дырок. Окончательно для тяжелых дырок имеем следующее дисперсионное соотношение:

$$\begin{aligned}j_j(k_h R) \frac{\kappa_h}{k_h} \left[ j \left( \frac{(j+1)k_{j+1}(\kappa_h R)}{\kappa_h R} - k_{j+2}(\kappa_h R) \right) \right. \\ \left. + (j+1) \left( \frac{(j-1)k_{j-1}(\kappa_h R)}{\kappa_h R} - k_j(\kappa_h R) \right) \right] \\ = k_j(\kappa_h R) \frac{\kappa_h}{k_h} \left[ j \left( \frac{(j+1)j_{j+1}(k_h R)}{k_h R} - j_{j+2}(k_h R) \right) \right. \\ \left. - (j+1) \left( \frac{(j-1)j_{j-1}(k_h R)}{k_h R} - j_j(k_h R) \right) \right].\end{aligned}\quad (115)$$

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

$$j_j(k_h R) = 0. \quad (116)$$

Решениями уравнения (116) являются

$$(k_h)_{jn} = \frac{\gamma_{jn}}{R}, \quad (117)$$

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

#### 5.4. Вероятность оже-рекомбинации

Вероятность оже-рекомбинации в единицу времени, согласно золотому правилу Ферми, в рамках 1-го порядка теории возмущений имеет вид (28), а матричный элемент кулоновского взаимодействия с учетом антисимметризации волновых функций, аналогично случаю квантовых ям, равен

$$M_{fi} = M_I - M_{II}, \quad (118)$$

где

$$M_I = \left\langle \Psi_3(\mathbf{r}_1)\Psi_4(\mathbf{r}_2) \left| \frac{e^2}{k_0|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \right| \Psi_1(\mathbf{r}_1)\Psi_2(\mathbf{r}_2) \right\rangle, \quad (119)$$

$M_{II}$  получается из  $M_I$  заменой  $\mathbf{r}_1 \leftrightarrow \mathbf{r}_2$ .

Здесь и далее мы будем считать функции с индексами 1 и 2 функциями локализованных электронов, функцию с индексом 3 — функцией тяжелой дырки, а функцию с индексом 4 — функцией возбужденного электрона. Далее для простоты будем считать, что у локализованных электронов момент импульса равен нулю,  $j = 0$ . В квантовых точках, как и в квантовых ямах и в квантовых нитях, основной вклад в вероятность оже-рекомбинации вносят процессы CHCC и CHHS. Далее мы ограничимся рассмотрением только CHCC-процесса оже-рекомбинации. Все зависимости для CHHS-процесса при  $\Delta_{so} < E_g$  имеют качественно такой же вид, как и для CHCC-процесса.

#### 5.5. Матричный элемент оже-рекомбинации

Волновые функции носителей заряда являются собственными функциями операторов полного момента  $\hat{\mathbf{J}}$  и его проекции  $\hat{J}_z$  на ось  $z$ . В этом случае матричный элемент оже-рекомбинации удовлетворяет закону сохранения момента импульса и его проекции на ось  $z$  автоматически. Как было показано выше, для тяжелых дырок существуют две волновые функции, имеющие разную поляризацию (113). Первая волновая функция не дает вклада в матричный элемент оже-процесса. Это следует из того, что для шаровых векторов имеет место соотношение [68]

$$\sum_{\mu=-1}^1 Y_{1\mu}^*(\theta, \phi)(Y_{jm}^j(\theta, \phi))_\mu = 0. \quad (120)$$

Так как такая комбинация обязательно войдет в произведение первой функции тяжелой дырки и функции электрона, то первая функция не даст вклада в процесс

оже-рекомбинации. Рассмотрим теперь произведение волновой функции тяжелой дырки и волновой функции электрона, которые войдут в выражение для матричного элемента (119) оже-процесса,

$$\begin{aligned} \Psi_3^*(\mathbf{r}_1)\Psi_1(\mathbf{r}_1) &= (-1)^m \frac{i\hbar\gamma}{\mathcal{E}_1 + E_g} A_1 A_3 k_1 \\ &\times \sqrt{\frac{j_3(j_3+1)}{4\pi}} \left( \frac{j_j(k_3 r_1)}{k_3 r_1} \right) j_1(k_1 r_1) Y_{jm}(\theta_1, \phi_1). \end{aligned} \quad (121)$$

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

$$\Psi_4^*(\mathbf{r}_2)\Psi_2(\mathbf{r}_2) \approx A_2 A_4 j_0(k_2 r_2) j_{j_4}(k_4 r_2) Y_{j_4 m_4}^*(\theta_2, \phi_2) \frac{1}{\sqrt{4\pi}},$$

$$\Psi_4^*(\mathbf{r}_2)\Psi_2(\mathbf{r}_2) \approx B_2 B_4 k_0(\kappa_2 r_2) j_{j_4}(\kappa_4 r_2) Y_{j_4 m_4}^*(\theta_2, \phi_2) \frac{1}{\sqrt{4\pi}}. \quad (122)$$

В (122) мы пренебрегли слагаемым, содержащим скалярное произведение векторных частей волновых функций, так как отношение его к первому слагаемому пропорционально  $k_2/k_4$ . Состояние „4“ — это возбужденное состояние электрона, поэтому  $k_4 \gg k_2$ . (Напомним, что  $k_4 \approx \frac{\sqrt{2mE_g}}{\hbar}$ , а  $k_2 \approx \frac{\sqrt{2mE_2}}{\hbar}$ , где  $E_2$  — энергия первого уровня размерного квантования электрона, поэтому  $E_2 \ll E_g$ ). Матричный элемент кулоновского взаимодействия в случае сферической симметрии удобнее всего вычислять, используя разложение кулоновского потенциала по мультипольям. Вводя обозначение  $r = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ , запишем

$$\frac{1}{r} = \begin{cases} \frac{4\pi}{r_2} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{2j+1} \left( \frac{r_1}{r_2} \right)^j (Y_j(\Omega_1) \cdot Y_j(\Omega_2)) \\ = \sum_{j=0}^{\infty} F_j^>(r_1, r_2) (Y_j(\Omega_1) \cdot Y_j(\Omega_2)) \text{ при } r_1 < r_2, \\ \frac{4\pi}{r_1} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{2j+1} \left( \frac{r_2}{r_1} \right)^j (Y_j(\Omega_1) \cdot Y_j(\Omega_2)) \\ = \sum_{j=0}^{\infty} F_j^<(r_1, r_2) (Y_j(\Omega_1) \cdot Y_j(\Omega_2)) \text{ при } r_2 < r_1, \end{cases} \quad (123)$$

где

$$Y_j(\Omega_1) \cdot Y_j(\Omega_2) = \sum_{m=-j}^j Y_{jm}^*(\Omega_1) Y_{jm}(\Omega_2). \quad (124)$$

Тогда матричный элемент можно будет представить в виде

$$M_I = (-1)^{m_3} \frac{e^2}{\kappa} \int dV_1 \int dV_2 (\mathbf{R}_3^*(r_1) \mathbf{R}_1(r_1)) \\ \times (\mathbf{R}_4^*(r_2) \mathbf{R}_2(r_2)) Y_{j_3 m_3}(\theta_1, \phi_1) Y_{j_4 m_4}^*(\theta_2, \phi_2) \frac{1}{r}, \quad (125)$$

где  $R_1, R_2, R_3, R_4$  — радиальные части волновых функций частиц. Матричный элемент  $M_{II}$  получается из  $M_I$  перестановкой индексов у волновых функций  $R_1$  и  $R_2$ . Функция  $R_1$  отвечает локализованному состоянию электрона, а  $R_4$  — электрона в возбужденном состоянии. Рекомбинирующей паре электрон–тяжелая дырка отвечают функции  $R_2$  и  $R_3$ . Проинтегрировав выражение (125) по углам, получим следующее выражение:

$$M_I = (-1)^{m_3} \int_0^\infty r_1^2 dr_1 \int_0^\infty r_2^2 dr_2 F_{j_3}(r_1, r_2) \delta_{j_4 j_3} \delta_{m_4, -m_3}. \quad (126)$$

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

$$m = m_4 = -m_3, \quad j = j_4 = j_3. \quad (127)$$

Выражение (127) было получено в пренебрежении моментом импульса для локализованных электронов. Мы считаем, что полный момент импульса у электронов в начальном состоянии равен нулю. Такое предположение существенно упрощает аналитические выражения и незначительно влияет на результат. Вследствие того, что эффективная масса дырки  $m_h \gg m_e$ , волновая функция дырки быстро затухает под барьером, и тогда в матричном элементе можно пренебречь подбарьерной областью перекрытия волновых функций тяжелой дырки и электрона.

Нужно отметить, что это вовсе не означает, что задача решается для тяжелой дырки в приближении бесконечного потенциального барьера, поскольку ее спектр находится из точных граничных условий (114). Как уже было отмечено выше, будем также предполагать, что электрон имеет нулевой полный момент. Это оправданно, так как у электрона сравнительно маленькая масса. При таких предположениях матричный элемент принимает вид

$$M_I = \int_0^R r_1^2 dr_1 (\mathbf{R}_3^*(r_1) \mathbf{R}_1(r_1)) \\ \times \left[ \int_0^{r_1} r_2^2 dr_2 \Phi^< F_j^< + \int_{r_1}^R r_2^2 dr_2 \Phi^< F_j^> + \int_R^\infty r_2^2 dr_2 \Phi^> F_j^> \right]. \quad (128)$$

В матричном элементе (128) можно выделить два различных вклада. Первый из них связан с наличием гетерограницы. Процесс, определяемый этим вкладом в

матричный элемент, соответствует рассеянию возбужденного электрона на гетерогранице. В этом случае возбужденный электрон приобретает большую величину нормальной к интерфейсу компоненты квазимпульса и момента импульса. Такое рассеяние в случае одиночного гетеробарьера [13], квантовой ямы [65] и квантовых нитей [66] приводит к появлению беспорогового канала оже-рекомбинации. В пределе квантовой точки бесконечного радиуса скорость беспорогового процесса оже-рекомбинации стремится к нулю быстрее, чем  $1/R^6$ .

Второй вклад в (128) связан с рассеянием электрона на короткодействующем кулоновском потенциале [30,65]. В случае СНСС-процесса оже-рекомбинации происходит возбуждение электрона в непрерывную часть спектра, соответствующее энергии  $\mathcal{E}_4 \approx E_g$  и квазимпульсу  $k_4 \approx \frac{\sqrt{2m_e E_g}}{\hbar}$ . В этом случае электрон приобретает большую величину проекции углового момента на ось  $z$ . При переходе локализованного электрона в непрерывный спектр с увеличением углового момента для процесса оже-рекомбинации не происходит снятия энергетического порога. Этот механизм оже-рекомбинации переходит в пороговый оже-процесс рекомбинации при стремлении радиуса квантовой точки к бесконечности.

Разделяя беспороговый и квазипороговый механизмы оже-рекомбинации в квантовых точках, запишем матричный элемент оже-рекомбинации (128) в виде

$$M_I = M^{(1)} + M^{(2)}, \quad (129)$$

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

$$M^{(1)} = \int_0^R r_1^2 dr_1 (\mathbf{R}_3^*(r_1) \mathbf{R}_1(r_1)) \\ \times \left[ \int_R^\infty r_2^2 dr_2 \Phi^> F_j^> - \int_R^\infty r_2^2 dr_2 \Phi^< F_j^> \right], \\ M^{(2)} = \int_0^R r_1^2 dr_1 (\mathbf{R}_3^*(r_1) \mathbf{R}_1(r_1)) \\ \times \left[ \int_0^{r_1} r_2^2 dr_2 \Phi^< F_j^< + \int_{r_1}^\infty r_2^2 dr_2 \Phi^> F_j^> \right], \quad (130)$$

где

$$\Phi^< = A_2 A_4 j_0(k_2 r) j_j(k_4 r), \\ \Phi^> = B_2 B_4 k_0(k_2 r) j_j(k_4 r). \quad (131)$$

Отметим, что для квантовых точек и  $M^{(1)}$ , и  $M^{(2)}$ , а следовательно, и  $M_I$  по сути дела являются беспороговыми матричными элементами. Действительно, на них не распространяются ограничения, накладываемые на начальные квазимпульсы и угловые моменты электронов. Однако механизмы, приводящие к несохранению

квазиимпульса в этих слагаемых, различны. В  $M^{(1)}$  несохранение нормальной к интерфейсу компоненты квазиимпульса связано с рассеянием электронов на гетерогранице, а в  $M^{(2)}$  причиной нарушения закона сохранения квазиимпульса является ограничение объема интегрирования по  $r$  областью квантовой точки. Это приводит к появлению функции вида  $\sin(kR)/k$  вместо  $\delta$ -функции  $\delta(k)$ . Итак, указанные выше различия между  $M^{(1)}$  и  $M^{(2)}$  физически означают, что матричный элемент  $M^{(1)}$  соответствует истинному беспороговому процессу, а матричный элемент  $M^{(2)}$  соответствует квазипороговому процессу.

### 5.5.1. Матричный элемент квазипорогового оже-процесса

Рассмотрим матричный элемент квазипорогового оже-процесса  $M^{(2)}$ . Проинтегрируем  $M^{(2)}$  по частям и ограничимся первым членом разложения по параметру  $k_2/k_4$ , тогда первый интеграл в  $M^{(2)}$  равен

$$\begin{aligned} & \int_0^{r_1} r_2^2 dr_2 j_0(k_2 r_2) j_j(k_4 r_2) \frac{r_2^j}{r_1^{j+1}} \approx \frac{j_0(k_2 r_1)}{r_1^{j+2}} \\ & \times \int_0^{r_1} j_j(k_4 r_2) r_2^{j+1} dr_2 = j_0(k_2 r_1) j_{j+1}(k_4 r_1) \left( \frac{r_1}{k_4} \right). \end{aligned} \quad (132)$$

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

$$\begin{aligned} & \int_{r_1}^{\infty} r_2^2 dr_2 j_0(k_2 r_2) j_j(k_4 r_2) \frac{r_1^j}{r_2^{j+1}} \approx r_1^j j_0(k_2 r_1) \\ & \times \int_{r_1}^{\infty} \frac{j_j(k_4 r_2)}{r_2^{j-1}} dr_2 = j_0(k_2 r_1) j_{j-1}(k_4 r_1) \left( \frac{r_1}{k_4} \right). \end{aligned} \quad (133)$$

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

$$M^{(2)} = \frac{\sqrt{4\pi}}{k_4^2} \frac{e^2}{\kappa} \int_0^R r_1^2 dr_1 (\mathbf{R}_3^*(r_1) \mathbf{R}_1(r_1)) (\mathbf{R}_4^*(r_1) \mathbf{R}_2(r_1)). \quad (134)$$

Подставляя в (134) явные выражения для радиальных компонент волновых функций, получаем, что матричный элемент пропорционален интегралу от четырех функций Бесселя:

$$\begin{aligned} M^{(2)} = & (-1)^m \frac{e^2}{\kappa} \frac{1}{k_4^2} \frac{i\hbar\gamma}{\mathcal{E}_1 + E_g} A_1 A_2 A_3 A_4 \frac{k_1}{k_3} \sqrt{j(j+1)} \\ & \times \int_0^R r_1^2 dr_1 (j_j(k_3 r_1) j_j(k_4 r_1)) \left( \frac{j_1(k_1 r_1)}{r_1} j_0(k_2 r_1) \right). \end{aligned} \quad (135)$$

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

$$\begin{aligned} F = & \int_0^R r_1^2 dr_1 j_j(k_3 r_1) j_j(k_4 r_1) \\ = & \frac{R^2}{k_3^2 - k_4^2} [k_4 j_{j-1}(k_4 R) j_j(k_3 R) - k_3 j_{j-1}(k_3 R) j_j(k_4 R)]. \end{aligned} \quad (136)$$

В результате для матричного элемента получаем окончательное выражение

$$\begin{aligned} M^{(2)} \approx & (-1)^m \frac{e^2}{\kappa} \frac{1}{k_4^2} \frac{i\hbar\gamma}{\mathcal{E}_1 + E_g} A_1 A_2 A_3 A_4 \\ & \times \frac{k_1}{k_3 R} \sqrt{j(j+1)} F j_0(k_2 R) j_1(k_1 R). \end{aligned} \quad (137)$$

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

$$\begin{aligned} M^{(2)} \approx & \frac{e^2}{\kappa} \frac{1}{k_4^2} \frac{\hbar\gamma}{\mathcal{E}_1 + E_g} \frac{1}{R^5} \frac{2k_c}{k_3} \sqrt{j(j+1)} \\ & \times \frac{\sin((k_4 - k_3)R)}{k_4 - k_3}. \end{aligned} \quad (138)$$

Итак, мы получили, что

$$M^{(2)} \propto \frac{\sin^*((k_4 - k_3)R)}{k_4 - k_3}. \quad (139)$$

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

$$|M^{(2)}|^2 \propto \frac{\sin^2((k_4 - k_3)R)}{(k_4 - k_3)^2} \rightarrow \frac{\pi R}{2} \delta(k_4 - k_3). \quad (140)$$

Из этой формулы видно наличие закона сохранения квазиимпульса, т.е. порога в этом пределе, и поэтому эффективный коэффициент оже-рекомбинации  $C^{(2)}$  после умножения на  $V^2$  переходит в трехмерное выражение для коэффициента оже-рекомбинации. Здесь  $V = \frac{4\pi}{3} R^3$  — объем квантовой точки.

### 5.5.2. Матричный элемент беспорогового оже-процесса

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

$R \rightarrow \infty$  имеем  $M^{(1)} \rightarrow 0$ . Рассмотрим подробнее беспороговый матричный элемент  $M^{(1)}$ . Из (130) следует, что в него входит также и произведение волновых функций носителей под барьером, которое имеет следующий вид:

$$\Phi^> = B_2 k_0(\kappa_2 r_2) \left( B_4^{(1)} j_j(\kappa_4 r_2) + B_4^{(2)} n_j(\kappa_4 r_2) \right) \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad (141)$$

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

$$\int_R^\infty r_2^2 dr_2 k_0(\kappa_2 r_2) j_j(\kappa_4 r_2) \frac{r_1^j}{r_2^{j+1}} \approx k_0(\kappa_2 R) r_1^j j_{j-1}(\kappa_4 R) \frac{R^{1-j}}{\kappa_4}. \quad (142)$$

Сложив оба вклада в выражении (130) для беспорогового матричного элемента, получаем

$$\begin{aligned} M^{(1)} &= \int_0^R r_1^2 dr_1 (\mathbf{R}_3^*(r_1) \mathbf{R}_1(r_1)) r_1^j \frac{\sqrt{4\pi}}{2j+1} R_{2s}(R) R^{1-j} \\ &\times \left\{ \frac{B_4^{(1)} j_{j-1}(\kappa_4 R) + B_4^{(2)} n_{j-1}(\kappa_4 R)}{\kappa_4} - \frac{A_4 j_{j-1}(\kappa_4 R)}{k_4} \right\}. \end{aligned} \quad (143)$$

Из граничных условий для волновых функций и их производных (110) имеем

$$\begin{cases} A_4 j_j(\kappa_4 R) = B_4^{(1)} j_j(\kappa_4 R) + B_4^{(2)} n_j(\kappa_4 R), \\ k_4 Z A_4 \left[ \frac{j_j(\kappa_4 R)}{\kappa_4 R} - j_{j+1}(\kappa_4 R) \right] \\ = \kappa_4 \tilde{Z} \left\{ B_4^{(1)} \left[ \frac{j_j(\kappa_4 R)}{\kappa_4 R} - j_{j+1}(\kappa_4 R) \right] \right. \\ \left. + B_4^{(2)} \left[ \frac{j_n(\kappa_4 R)}{\kappa_4 R} - n_{j+1}(\kappa_4 R) \right] \right\}. \end{cases} \quad (144)$$

Считая, что  $V_c, V_v \ll E_g$ , разложим выражение (144) по малым параметрам  $\frac{V_c}{E_g}$  и  $\frac{V_v}{E_g}$ . В этом случае также учтем, что величина  $\kappa_4$  мало отличается от  $k_4$ , поэтому будем раскладывать выражение (144) и по параметру  $\eta = \kappa_4 - k_4$ . Тогда величины  $\eta$  и  $\tilde{Z}$  связаны с  $V_c$  и  $V_v$  соотношениями

$$\begin{aligned} 2 \frac{\eta}{k_4} &= \frac{\mathcal{E}(V_v - V_c) - V_c E_g}{\mathcal{E}(\mathcal{E} + E_g)}, \\ \tilde{Z} &\approx Z(1 - V_v Z). \end{aligned} \quad (145)$$

Разложение в (144) и в (143) ведется только до 1-го порядка по  $\eta$  и соответственно по  $\frac{V_c}{E_g}$  и  $\frac{V_v}{E_g}$ . Таким образом можно получить матричный элемент беспорогового процесса. Подставляя соотношения (145) для  $\eta$  и  $\tilde{Z}$  через

высоты гетеробарьеров в (143), для  $M^{(1)}$  получаем

$$\begin{aligned} M^{(1)} &= \int_0^R r_1^2 dr_1 (\mathbf{R}_3^*(r_1) \mathbf{R}_1(r_1)) r_1^j \frac{\sqrt{4\pi}}{2j+1} R_{2s}(R) R^{1-j} \frac{A_4}{k_4} \\ &\times \left\{ \frac{j+1}{k_4 R} j_j(k_4 R) \frac{V_v}{\mathcal{E}_4 + E_g} + j_{j-1}(k_4 R) \frac{V_c}{\mathcal{E}_4} \right\}. \end{aligned} \quad (146)$$

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

$$\begin{aligned} M^{(1)} &= (-1)^{m+1} \frac{e^2}{\kappa} \frac{i\hbar\gamma}{\mathcal{E}_1 + E_g} A_1 A_2 A_3 A_4 \frac{k_1}{k_3^2} \\ &\times \frac{\sqrt{j(j+1)}}{2j+1} j_1(k_1 R) j_0(k_2 R) j_{j+1}(k_3 R) \frac{R}{k_4^2} \\ &\times \left[ (j+1) \frac{V_v}{\mathcal{E}_4 + E_g} j_j(k_4 R) + (k_4 R) \frac{V_c}{\mathcal{E}_4} j_{j-1}(k_4 R) \right]. \end{aligned} \quad (147)$$

Итак, из выражений для  $M^{(1)}$  и  $M^{(2)}$  следует, что в обоих матричных элементах для оже-процесса отсутствует закон сохранения квазимпульса. Однако механизмы, приводящие к снятию запрета на несохранение квазимпульса, для двух процессов, как уже было отмечено выше, разные. Следует отметить, что для сферической ямы конечной глубины существует критический радиус  $R^*$ , при котором связанное состояние для носителей заряда исчезает. Рассмотрим поведение матричных элементов для кулоновского взаимодействия вблизи критического радиуса. При радиусах квантовых точек  $R > R^*$  волновая функция носителей заряда локализована в основном в области под барьером. Это значит, что нормировочные коэффициенты для волновых функций электронов  $A_1$  и  $A_2$  стремятся к нулю. При этом вовсе не нарушается предположение о том, что можно пренебречь перекрытием волновой функцией тяжелой дырки и локализованного электрона. Действительно, для электронов связанное состояние в квантовых точках исчезнет гораздо раньше, чем для тяжелых дырок, так как  $m_h \gg m_e$ . Тогда  $M^{(i)} \propto (R - R^*)$ , где  $i = 1, 2$ .

## 5.6. Скорость и коэффициент оже-рекомбинации

Для нахождения скорости оже-рекомбинации необходимо просуммировать вероятность оже-перехода в единицу времени по всем начальным и конечным состояниям носителей заряда (см. (44)):

$$\begin{aligned} G &= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{k_1, k_2, k_3, k_4} |M_{fi}|^2 f_1 f_2 (1 - f_3) (1 - f_4) \\ &\times \delta(\mathcal{E}_3 + \mathcal{E}_4 - \mathcal{E}_1 - \mathcal{E}_2). \end{aligned} \quad (148)$$

Здесь  $f_1, f_2$  — степени заполнения электронного уровня в начальном состоянии,  $f_3, f_4$  — степени заполнения

в конечном состоянии. В (148) подразумевается также суммирование и по  $j$ , и по  $m$ . Для высоковозбужденных состояний функцию распределения  $f_4$  можно положить равной нулю. Далее, вместо  $1 - f_3$  можно записать  $\tilde{f}_3$ , где  $\tilde{f}_3$  — степень заполнения дырочного уровня;  $\mathcal{E}_1$  и  $\mathcal{E}_2$  — энергии электронов в начальном состоянии,  $\mathcal{E}_3$  — энергия дырки в начальном состоянии,  $\mathcal{E}_4$  — энергия электрона в конечном состоянии. Нужно отметить, что скорость ОР (148) имеет размерность обратного времени ( $\text{с}^{-1}$ ). Вклады в скорость ОР от беспорогового и квазипорогового матричных элементов  $M^{(1)}$  и  $M^{(2)}$  нельзя разделить, так как между ними имеет место интерференция. При малых значениях радиуса квантовой точки эта интерференция особенно существенна, так как оба процесса являются беспороговыми.

Для квантовых точек большого радиуса интерференцией между  $M^{(1)}$  и  $M^{(2)}$  можно пренебречь, так как основные квазипороговые переходы в отличие от беспороговых происходят с участием тяжелых дырок с большим значением момента импульса. С учетом этих замечаний становится ясным, что для квантовых точек большого радиуса пренебрежение интерференцией дает почти точный результат, а для квантовых точек малого радиуса приводит к результату,циальному по порядку величины. Полученная таким образом скорость ОР имеет правильную зависимость от температуры и от параметров квантовой точки: от ее радиуса и высоты барьера для электронов и дырок.

Введем коэффициент ОР, связанный со скоростью следующим соотношением:

$$G = Cn^2p, \quad (149)$$

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

$$C = C^{(1)} + C^{(2)}, \quad (150)$$

где коэффициенты  $C^{(1)}$  и  $C^{(2)}$  соответствуют беспороговому и квазипороговому оже-процессам с матричными элементами  $M^{(1)}$  и  $M^{(2)}$ , которые даются выражениями (147) и (137). Выражение для коэффициента оже-рекомбинации может быть получено при подстановке матричного элемента  $M_{fi}$  в (148). Согласно определению коэффициента оже-рекомбинации, для квантовой точки (149) мы перенормируем функции распределения  $f_i$ , где  $i = 1, 2, 3$ , на единицу, тогда для квантовых точек мы получим нуль-мерный коэффициент оже-рекомбинации. Нуль-мерный коэффициент оже-рекомбинации  $C$ , так же, как и  $G$ , имеет размерность  $\text{с}^{-1}$ .

В дальнейшем мы будем вычислять коэффициент оже-рекомбинации.

Эффективное число состояний для возбужденных электронов имеет вид

$$d\Gamma_4 = \frac{Rdk_4}{\pi}. \quad (151)$$

Согласно дисперсионному уравнению (101), волновой вектор возбужденного электрона равен

$$k_4^2 = \frac{\mathcal{E}_4(\mathcal{E}_4 + E_g)}{\hbar^2\gamma^2}. \quad (152)$$

Поскольку энергия возбужденного электрона  $\mathcal{E}_4 \approx E_g$ , из (152) получаем

$$dk_4 \approx \frac{d\mathcal{E}_4}{\hbar\gamma}. \quad (153)$$

Подставляя все это в (148), мы можем произвести интегрирование по  $k_4$  с помощью  $\delta$ -функции. В результате для коэффициента оже-рекомбинации получаем

$$C = \frac{2}{\hbar} \sum_{k_1, k_2, k_3} \frac{R}{\hbar\gamma} f_1 f_2 \tilde{f}_3 |M_{fi}|^2. \quad (154)$$

Выражение для беспорогового коэффициента оже-рекомбинации может быть получено подстановкой матричного элемента (147) в (154). В результате получаем

$$\begin{aligned} C^{(1)} \approx & \sum_{k_1, k_2, k_3} \frac{2R}{\hbar^2\gamma} f_1 f_2 \tilde{f}_3 \\ & \times \left[ \frac{e^2 \hbar\gamma}{\kappa_0 E_g R^3} \frac{4}{\left( \frac{j_0(k_c R) j_1(k_c R)}{j_0^2(k_c R) k_1(k_c R) k_{-1}(k_c R) - j_1(k_c R) j_{-1}(k_c R)} \right)} \right. \\ & \left. \times \frac{k_1}{k_3^2} \frac{\sqrt{j(j+1)}}{2j+1} \left( \frac{j+1}{k_4 R} \frac{V_v}{\mathcal{E}_4 + E_g} + j_{j-1}(k_4 R) \frac{V_c}{\mathcal{E}_4} \right) \right]^2, \end{aligned} \quad (155)$$

где

$$k_4 \approx \sqrt{\frac{4m_e E_g}{\hbar^2} + 3 \left( k_1^2 + k_2^2 + \frac{m_e}{m_h} k_3^2 \right)}. \quad (156)$$

Выражение для  $C^{(1)}$  можно упростить, переписав его в виде

$$\begin{aligned} C^{(1)} \approx & \frac{128 E_B}{\pi^3 \hbar} \left( \frac{E_R}{E_g} \right)^{3/2} \sum_{k_1, k_2, k_3} f_1 f_2 \tilde{f}_3 \frac{k_1^2}{R^2 k_3^4} \frac{j(j+1)}{(2j+1)^2} \\ & \times \left( \frac{j_0(k_c R) j_1(k_c R)}{j_0^2(k_c R) k_1(k_c R) k_{-1}(k_c R) - j_1(k_c R) j_{-1}(k_c R)} \right)^2 \\ & \times \left( \frac{j+1}{k_4 R} \frac{V_v}{\mathcal{E}_4 + E_g} + j_{j-1}(k_4 R) \frac{V_c}{\mathcal{E}_4} \right)^2. \end{aligned} \quad (157)$$

Здесь  $E_B = \frac{m_e e^4}{2\hbar^2 k_0^2}$  — характерная (боровская) энергия межэлектронного взаимодействия, а  $E_R = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_e R^2}$  — характерная энергия размерного квантования в квантовых точках. При выводе (157) мы учли, что  $\gamma = \sqrt{\frac{E_g}{2m_e}}$ . Следует отметить, что при больших радиусах квантовых

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

Из (157) отчетливо видно, что беспороговый процесс оже-рекомбинации связан с рассеянием носителей заряда на гетерогранице, так как  $C^{(1)}$  пропорционален  $V_c$  и  $V_v$ . Для коэффициента квазипорогового оже-процесса после подстановки матричного элемента (147) в (154) имеем

$$\begin{aligned} C^{(2)} \approx & \sum_{k_1, k_2, k_3} \frac{2R}{\hbar^2 \gamma} f_1 f_2 f_3 \left[ \frac{e^2 \hbar \gamma}{\kappa_0 E_g R^5} \right. \\ & \times \left( \frac{j_0(k_c R) j_1(k_c R)}{\frac{j_0^2(k_c R)}{k_0^2(k_c R)} k_1(k_c R) k_{-1}(k_c R) - j_1(k_c R) j_{-1}(k_c R)} \right) \\ & \times \left. \frac{k_1}{k_3 k_4^2} \sqrt{j(j+1)} \frac{\sin((k_4 - k_3)R)}{k_4 - k_3} \right]^2. \end{aligned} \quad (158)$$

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

$$\begin{aligned} C^{(2)} \approx & \frac{8}{\pi^7} \frac{E_B}{\hbar} \left( \frac{E_R}{E_g} \right)^{7/2} \sum_{k_1, k_2, k_3} f_1 f_2 f_3 \frac{k_1^2}{k_3^2} \\ & \times \left( \frac{j_0(k_c R) j_1(k_c R)}{\frac{j_0^2(k_c R)}{k_0^2(k_c R)} k_1(k_c R) k_{-1}(k_c R) - j_1(k_c R) j_{-1}(k_c R)} \right)^2 \\ & \times j(j+1) \frac{\sin^2((k_4 - k_3)R)}{(k_4 - k_3)^2 R^2}. \end{aligned} \quad (159)$$

Как и следовало ожидать,  $C^{(2)}$  отличается от  $C^{(1)}$ . Отличие между двумя разными процессами рекомбинации выражается разными множителями: в  $C^{(1)}$  входит отношение  $(V_{c,v}/E_g)^2$ , что связано с рассеянием электрона на гетерогранице, а в  $C^{(2)}$  входит множитель  $\sin^2 kR/(kR)^2$ , что является причиной нарушения закона сохранения квазимпульса электрона из-за его локализации в пределах квантовой точки. Следует отметить, что коэффициент  $C^{(2)}$ , как и  $C^{(1)}$ , пропорционален величине полного момента  $j$ . В пределе квантовой точки бесконечного радиуса выражение для квазипорогового коэффициента оже-рекомбинации переходит в выражение для коэффициента оже-рекомбинации в однородном полупроводнике. Чтобы перейти в (158) к пределу при  $R \rightarrow \infty$ , следует перейти от суммирования по дискретным состояниям к интегрированию по непрерывным состояниям, так как в этом случае уровни размерного квантования сливаются в непрерывный спектр. Кроме того, при  $R \rightarrow \infty$  в (158) можно произвести замену

$$\frac{\sin^2((k_4 - k_3)R)}{(k_4 - k_3)^2} \rightarrow \frac{\pi R}{2} \delta(k_4 - k_3). \quad (160)$$

Из этого выражения явно видно наличие порога в этом пределе, когда имеет место закон сохранения квазимпульса. В результате для коэффициента квазипорогового процесса получаем

$$C^{(2)} = \frac{4\sqrt{\pi}}{R^6} \frac{e^4}{\kappa_0^2 m_e^{1/2} m_h^{3/2} E_g^{5/2} T^{1/2}} \exp\left(-\frac{E_{\text{th}}}{T}\right), \quad (161)$$

где  $E_{\text{th}}$  — пороговая энергия СНСС-процесса в однородном полупроводнике (в модели Кейна  $E_{\text{th}} \approx \frac{2m_e}{m_h} E_g$  [13]). Выражение (161) можно сравнить с известными результатом для коэффициента оже-рекомбинации в однородном полупроводнике [10]. Для этого домножим (161) на квадрат объема квантовой точки  $V^2$ . Тогда наше предельное выражение и выражение из работы [10] практически совпадают:

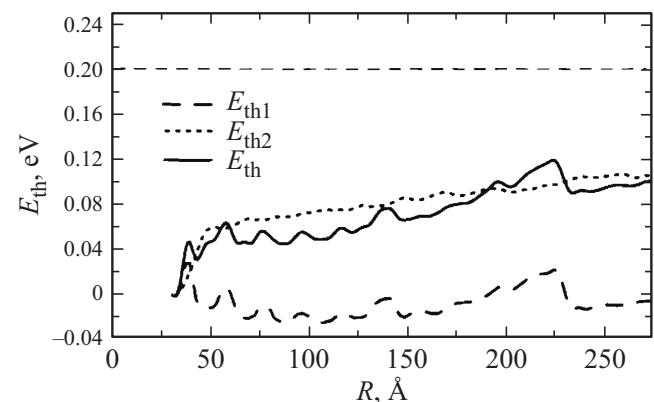
$$V^2 C^{(2)} = \frac{64}{9} \pi^{5/2} \frac{e^4}{\kappa_0^2 m_e^{1/2} m_h^{3/2} E_g^{5/2} T^{1/2}} \exp\left(-\frac{E_{\text{th}}}{T}\right), \quad (162)$$

$$C_{3D} = 6\sqrt{2} \pi^{5/2} \frac{e^4}{\kappa_0^2 m_e^{1/2} m_h^{3/2} E_g^{5/2} T^{1/2}} \exp\left(-\frac{E_{\text{th}}}{T}\right). \quad (163)$$

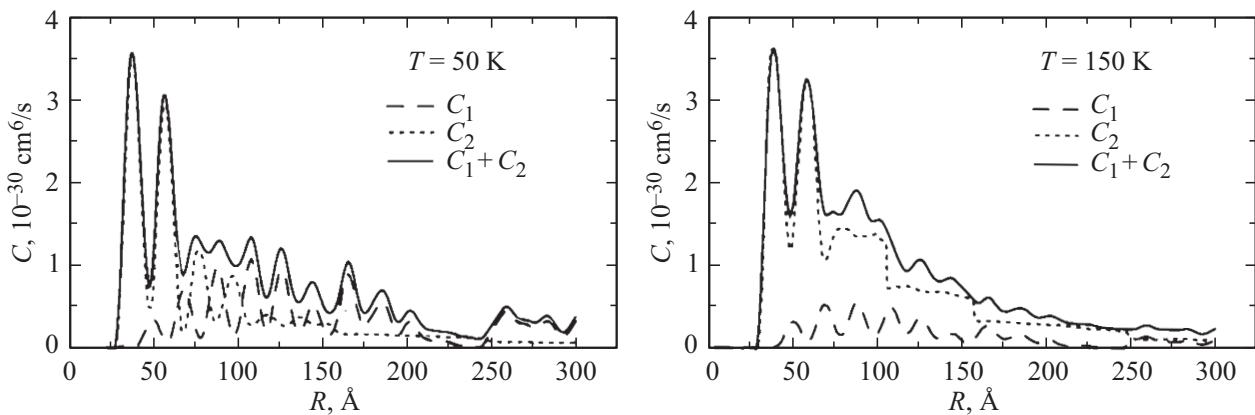
Небольшое отличие в численном коэффициенте связано, главным образом, с тем, что в работе [10] сделано предположение, что  $\Delta_{\text{so}} \gg E_g$ , а в нашем случае мы положили  $\Delta_{\text{so}} = 0$ .

## 5.7. Обсуждение результатов

На рис. 14 представлена зависимость пороговой энергии от радиуса квантовых точек для двух механизмов оже-рекомбинации  $C^{(1)}$  и  $C^{(2)}$  в отдельности и для суммарного процесса оже-рекомбинации  $C = C^{(1)} + C^{(2)}$ ,



**Рис. 14.** Зависимость пороговой энергии для оже-процесса от радиуса квантовой точки при температуре  $T = 300$  К для структуры InGaAsP/GaAs.  $E_{\text{th}1}$  соответствует беспороговому процессу,  $E_{\text{th}2}$  соответствует квазипороговому,  $E_{\text{th}}$  — суммарному процессу. Горизонтальная штриховая линия отвечает пороговой энергии для трехмерного оже-процесса  $E_{\text{th}}^{3D}$ .



**Рис. 15.** Зависимость суммарного оже-коэффициента от радиуса квантовой точки и парциальные вклады при температурах  $T = 50$  К и  $150$  К. При этих температурах скорость оже-процесса для однородного полупроводника на несколько порядков меньше, чем скорость оже-процесса в квантовой точке.

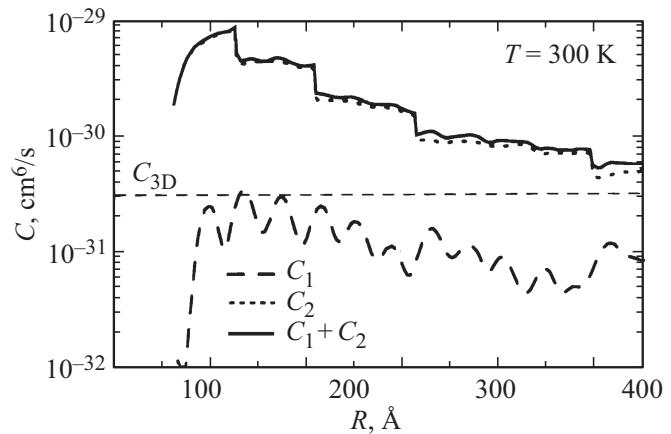
определенной по формуле

$$E_{\text{th}}^i = T^2 \frac{d \ln C^{(i)}}{dT}, \quad i = 1, 2. \quad (164)$$

Горизонтальная штрихпунктирная линия на рис. 14 соответствует пороговой энергии  $E_{\text{th}}^{\text{3D}}$  для трехмерного оже-процесса [10]. Для беспорогового оже-процесса пороговая энергия убывает с ростом радиуса квантовой точки и при определенном значении радиуса становится отрицательной. Такое поведение связано с тем, что для достаточно больших радиусов квантовой точки коэффициент оже-рекомбинации  $C^{(1)}$  становится убывающей функцией температуры (см. далее). Пороговая энергия для квазипорогового процесса положительна и меньше трехмерного значения  $E_{\text{th}}^{\text{3D}}$ , но с ростом радиуса квантовой точки пороговая энергия для суммарного коэффициента оже-рекомбинации стремится к своему предельному значению  $E_{\text{th}}^{\text{3D}}$ .

На рис. 15 и 16 приведены зависимости коэффициентов оже-рекомбинации  $C^{(1)}$  и  $C^{(2)}$  от радиуса квантовых точек при различных температурах для структуры на основе InGaAsP/InP (с шириной запрещенной зоны в области квантовой точки 1 эВ). Во-первых, суммарный коэффициент оже-рекомбинации является немонотонной функцией радиуса квантовых точек в широком диапазоне температур, когда имеется резко выраженный максимум. Важно отметить, что положение максимума слабо зависит от температуры. Во-вторых, как видно из рисунка, с ростом температуры возрастает относительная роль квазипорогового процесса оже-рекомбинации.

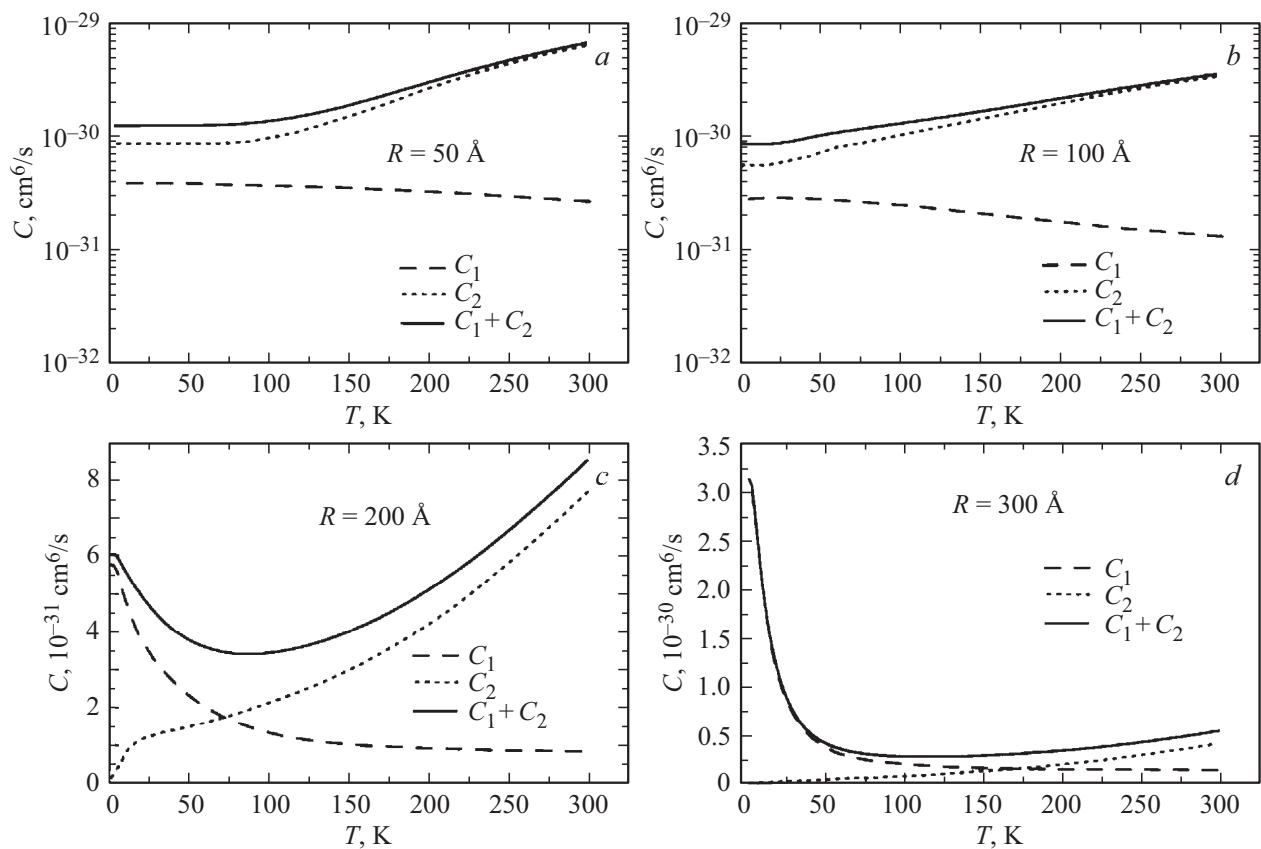
Немонотонная зависимость коэффициента оже-рекомбинации от  $R$  имеет следующее объяснение: для малых значений радиуса квантовых точек малость оже-коэффициента связана в первую очередь со слабым перекрытием волновых функций электронов и дырок, находящихся в связанных состояниях, во-вторых, при  $R = R^*$  связанное состояние вообще отсутствует и интеграл перекрытия равен нулю.



**Рис. 16.** Зависимость суммарного оже-коэффициента от радиуса квантовой точки и парциальные вклады при температуре  $T = 300$  К. Горизонтальная линия соответствует оже-коэффициенту в однородных полупроводниках  $C_{\text{3D}}$ .

При дальнейшем увеличении радиуса квантовых точек коэффициент оже-рекомбинации достигает максимума и затем начинает убывать. С увеличением радиуса квантовых точек уменьшается влияние гетеробарьеров на процессы оже-рекомбинации, при этом проявляется пороговая природа этих процессов. Таким образом, для квантовых точек большого радиуса происходит уменьшение коэффициента оже-рекомбинации до значения, соответствующего трехмерному оже-коэффициенту однородного полупроводника  $C_{\text{3D}}$ .

На рис. 16 представлена зависимость коэффициентов оже-рекомбинации беспорогового ( $C^{(1)}V^2$ ) и квазипорогового ( $C^{(2)}V^2$ ) процессов от радиуса квантовой точки при температуре  $T = 300$  К. Сплошная кривая на этом рисунке соответствует суммарному коэффициенту оже-рекомбинации, горизонтальная линия соответствует трехмерному коэффициенту CHCC-процесса  $C_{\text{3D}}$ . Из анализа следует, что в широком интервале значений



**Рис. 17.** Температурная зависимость оже-коэффициентов при различных радиусах для структуры InGaAsP/GaAs:  $R$ , Å: *a* — 50, *b* — 100, *c* — 200, *d* — 300.

радиуса  $R$  оже-рекомбинация в квантовых точках усиlena по сравнению с оже-рекомбинацией в однородном полупроводнике.

На рис. 17 представлена температурная зависимость суммарного коэффициента оже-рекомбинации и парциальные вклады беспорогового и квазипорогового механизмов при различных радиусах квантовых точек. Из анализа выражения для  $C^{(1)}$  (155) следует, что беспороговый процесс имеет слабую неэкспоненциальную зависимость от температуры. Температуру, при которой начинается спад для  $C^{(1)}$ , можно оценить из равенства энергии размерного квантования дырок температуре,  $T^m \approx \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_e R^2}$ . Квазипороговый коэффициент оже-рекомбинации  $C^{(2)}$ , наоборот, с ростом температуры возрастает. Для квантовых точек малого радиуса  $C^{(2)}$  также является слабой функцией температуры. С ростом радиуса квантовых точек зависимость  $C^{(2)}$  от температуры усиливается и приближается к пороговой (экспоненциальной) зависимости в объемных полупроводниках (рис. 16, 17). При этом количественное соотношение между  $C^{(1)}$  и  $C^{(2)}$  также меняется:  $C^{(1)}$  убывает с ростом  $R$  быстрее, чем  $C^{(2)}$ , так что эффективный трехмерный коэффициент  $C_{3D}^{(1)} = C^{(1)} \cdot V^2$  обращается в нуль при  $R \rightarrow \infty$ , а  $C_{3D}^{(2)} = C^{(2)} \cdot V^2$  приближается к объемному коэффициенту оже-рекомбинации  $C_{3D}$  (рис. 16). При

малых значениях радиуса квантовой точки коэффициенты ОР для беспорогового и квазипорогового процессов, умноженные на квадрат объема квантовой точки  $(\frac{4\pi}{3}R^3)^2$ , значительно превышают трехмерный коэффициент  $C_{3D}$  (см. рис. 16).

Из рис. 17 видно, что для достаточно больших значений радиуса квантовых точек при низких температурах преобладает беспороговый оже-процесс ( $C^{(1)} > C^{(2)}$ ), а при высоких, наоборот, доминирует квазипороговый процесс ( $C^{(1)} < C^{(2)}$ ). Поэтому зависимость суммарного коэффициента оже-рекомбинации от температуры имеет характерный вид с максимумом и минимумом. С увеличением радиуса квантовой точки минимум суммарного коэффициента оже-рекомбинации слабо смещается в сторону высоких температур и в пределе квантовых точек бесконечного радиуса совсем исчезает. Таким образом, в случае однородного полупроводника коэффициент оже-рекомбинации представляет собой монотонную функцию температуры.

## 5.8. Заключение

Отметим, что весь анализ зависимостей коэффициентов оже-рекомбинации  $C^{(1)}$  и  $C^{(2)}$  от температуры и параметров квантовых точек качественно применим в равной мере и к CHCC- и CHHS-процессам. Мы

проиллюстрировали получение всех зависимостей на примере CHCC-процесса. Для CHHS-процесса подробный анализ коэффициентов  $C^{(1)}$  и  $C^{(2)}$  выполнен в работе [69]. Отметим, что полное подавление процессов оже-рекомбинации в квантовых точках возможно при выполнении условий  $(V_c, V_v) > E_g$  и  $E_2 - E_1 > E_g$  ( $E_1$  и  $E_2$  — энергии первого и второго уровней размерного квантования носителей), когда энергии возбужденной частицы недостаточно для перехода в непрерывный спектр или на следующий уровень размерного квантования. Для выполнения этих условий необходимо создание квантовых точек с глубокими и узкими потенциальными ямами как для электронов, так и для дырок.

В конце списка литературы мы приводим ссылки [76–99] на статьи, посвященные оже-рекомбинации в квантовых гетероструктурах, в которых используется подход, развитый в настоящем обзоре.

## Благодарности

Выражаем искреннюю благодарность соавторам В.А. Харченко, А.Д. Андрееву, А.С. Полковникову, Е.Б. Догонкину, Д.М. Самосвату, Л.В. Данилову, А.А. Карповой, К.Д. Мынбаеву за плодотворное сотрудничество. Также выражаем благодарность В.Б. Белькову и В.П. Евтихиеву за важные и полезные замечания.

## Приложение I

### Влияние электрон-электронной релаксации на оже-рекомбинацию прямозонных полупроводников

#### Расчет коэффициентов оже-рекомбинации

Хорошо известно, что внутризонная релаксация носителей заряда играет существенную роль в рекомбинационных процессах [70,27]. Было, в частности, показано, что релаксация приводит к уширению излучательных спектров полупроводниковых лазеров [70]. В объемных полупроводниках релаксационные процессы оказывают более фундаментальное влияние на оже-рекомбинацию. Коэффициент оже-рекомбинации, рассчитанный в 1-ом порядке теории возмущений по электрон-электронному взаимодействию, как было отмечено выше, представляет собой экспоненциальную функцию от температуры для CHCC- и CHHS-процессов [7,10]. В работах [71–73] были изучены оже-процессы в однородных полупроводниках  $A^{III}B^V$ , стимулированные фононами и примесями. Как было показано в работе [70], основной вклад в уширение излучательных спектров полупроводников дает электрон(дырочно)-электронный(дырочный) механизм релаксации. Влияние релаксационных процессов на механизм оже-рекомбинации впервые рассмотрен в работе [5]. Так как при высоких концентрациях электронов и дырок оже-процесс доминирует над другими механизмами рекомбинации и при возрастании концентрации носите-

лей роль электрон(дырочно)-электронного(дырочного) рассеяния носителей на носителях возрастает, можно ожидать, что при расчете скорости оже-рекомбинации оно будет играть главную роль. Далее будет показано, что в однородных полупроводниках эффекты релаксации носителей на носителях изменяют не только величину коэффициента оже-рекомбинации, но и его зависимость от температуры и концентрации носителей заряда.

Далее мы исследуем зависимость оже-коэффициентов от температуры и от концентрации носителей в присутствии и в отсутствие электрон(дырочно)-электронных(дырочных) релаксационных процессов. Для расчета коэффициента оже-рекомбинации используется метод функций Грина. Волновые функции и энергетические спектры электронов и дырок определяются на основе kp-метода  $8 \times 8$  в его варианте, предложенном в работе [30] (см. разд. 3). Проводится сравнение механизмов оже-рекомбинации с участием фононов и оже-рекомбинации с учетом процессов релаксации носителей заряда для двух каналов оже-рекомбинации CHCC- и CHHS-процессов.

Для расчета скорости оже-рекомбинации в работах [71,72] было разработано общее приближение температурных функций Грина. Разработанный в этих работах формализм основан на использовании линейных характеристик в приближении среднего поля. Было показано, что релаксационные процессы устраняют порог, предсказываемый теорией возмущений в 1-ом порядке по кулоновскому взаимодействию, и повышают скорость оже-рекомбинации. В работах [71,72] изучались оже-процессы, сопровождаемые релаксацией на фононах и примесях. Однако волновые функции и интегралы перекрытия были определены феноменологически. В работе [73] была предложена модель, которая позволяет наиболее точно рассчитать фонон-стимулированную оже-рекомбинацию. Правда, авторы этой работы в четырехзонной модели Кейна не учли более высокие зоны, и это привело к тому, что спектр и волновые функции тяжелых дырок оказались неправильными.

В прямозонных полупроводниках  $A^{III}B^V$  эффективная масса электрона обычно значительно меньше эффективной массы тяжелой дырки. Это позволяет пренебречь процессами рассеяния электронов по сравнению с процессами рассеяния дырок [70] и использовать для расчета этих процессов невозмущенные функции Грина. Следуя [10], мы также пренебрегаем импульсами и энергиями электронов в начальном состоянии. Благодаря своей относительно большой массе дырки обычно подчиняются статистике Больцмана, поэтому все выражения для оже-коэффициента будут вычислены с использованием большинских функций распределения дырок. Это позволяет получить все конечные выражения в аналитическом виде, хотя здесь, очевидно, требуется произвести обобщение на случай статистики Ферми-Дирака.

Используя приближение, развитое в работах [71,72], и волновые функции, построенные для модели Кейна  $8 \times 8$

(см. разд. 3), мы получаем выражение для коэффициента Оже CHCC-процесса:

$$C \approx \frac{32\sqrt{2\pi^5}e^4\hbar^2\langle E_c \rangle}{9m_h^{3/2}T^{3/2}E_g\epsilon_\infty^2} \frac{(1+2\Delta_{so}/3E_g)}{(1+\Delta_{so}/E_g)} \times \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\mathcal{E}}{k_c^2(\mathcal{E}+E_g)} \frac{dk_c}{d\mathcal{E}} \exp\left(-\frac{\mathcal{E}}{T}\right) D[k_c(\mathcal{E}+E_g)\mathcal{E}]. \quad (\text{П.И.1})$$

Здесь  $\langle E_c \rangle$  — средняя энергия электронов, равная  $\frac{3}{2}T$ , если они описываются распределением Больцмана,  $\epsilon_\infty$  — высокочастотная диэлектрическая проницаемость,  $k_c(E)$  — волновой вектор как функция энергии в зоне проводимости,  $D(k, E)$  — спектральная функция, связанная с мнимой частью собственной энергии для тяжелой дырки  $\Gamma(k, E)$  соотношением

$$D(k, E) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma(k, E)}{(\Gamma(k, E))^2 + (E - E_h(k))^2},$$

где  $E_h(k)$  — закон дисперсии тяжелых дырок.

Высокочастотная диэлектрическая постоянная  $\epsilon_\infty$  не входит в подынтегральное выражение ввиду малости эффектов экранирования свободных носителей и их слабого влияния на оже-процесс [74]. В (П.И.1) мы пренебрегли реальной частью собственной энергии, так как у полупроводников она обычно мала. Следует заметить, что, хотя формально пределы интегрирования по энергии здесь считаются бесконечными, в действительности в запрещенной зоне энергия дырок отрицательна ( $\mathcal{E} < 0$ ), функция  $\Gamma$  сильно затухает и основной вклад в интеграл дают положительные значения энергии дырок.

Неучет релаксационных процессов позволяет получить для оже-коэффициента хорошо известные выражения [10, 74]:

$$C \approx \frac{8\sqrt{2\pi^5}e^4\hbar^3\langle E_c \rangle}{3m_h^{3/2}m_e^{1/2}T^{3/2}E_g^{5/2}\epsilon_\infty^2} \exp\left(-\frac{E_{th}}{T}\right) F\left(-\frac{\Delta_{so}}{E_g}\right). \quad (\text{П.И.2})$$

где  $F(x)$  — множитель, приблизительно равный единице,

$$F(\alpha) = \left(\frac{1+\alpha}{1+2\alpha/3}\right)^{3/2} \left(\frac{1+\alpha/3}{1+\alpha/2}\right)^{1/2}.$$

Точно таким же образом можно получить выражение для оже-процесса CHHS:

$$C = \frac{16\pi^2e^4\hbar^5\langle E_c \rangle}{3\epsilon_\infty^2m_h^3T^3} \frac{3E_g+2\Delta_{so}}{E_g+\Delta_{so}} \int_0^\infty \int_0^\infty dk_1 dk_2 \int_{-1}^1 d\cos(\vartheta) \times \frac{(1+\lambda_{so})^2}{1+2\lambda_{so}^2 + \frac{\Delta_{so}}{3(E_g-E_{so})} \frac{2\lambda_{so}^2+\lambda_{so}-1}{\lambda_{so}}} \frac{\cos^2(\vartheta)k_1^2}{(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2)^2} \left[1 + \frac{1}{2} \frac{k_2}{k_1} \sin \vartheta\right] \times \int_{-\infty}^{\infty} dED(k_1, E)D(k_2, E_{so} - E_g - E) \exp\left(\frac{E_g - E_{so}}{T}\right), \quad (\text{П.И.3})$$

где  $E_{so} \equiv E_{so}(|\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2|)$  — энергия спин-отщепленной дырки,  $\vartheta$  — угол между волновыми векторами  $\mathbf{k}_1$  и  $\mathbf{k}_2$  и

$$\lambda_{so} = \frac{\Delta_{so}}{3 \left( E_{so} + 4/3\Delta_{so} + \frac{\hbar^2 k_{so}^2(E_{so})}{2m_h} \right)}.$$

Присутствие в подынтегральном выражении множителя  $(1 + \lambda_{so})^2$  означает, что вблизи точки  $\Gamma$  (в центре зоны Брилюэна), где  $E_{so} \approx \Delta_{so}$  и  $\lambda_{so} \approx 1$ , отсутствует перекрытие волновых функций между тяжелыми и спин-отщепленными дырками [72]. Заметим, что для процесса CHHS член, описывающий обменное взаимодействие, не равен нулю, как и в случае процесса CHCC. За это взаимодействие здесь отвечает второй член, стоящий в квадратных скобках подынтегрального выражения уравнения (П.И.3). Если спектральную функцию заменить на  $\delta$ -функцию, то (П.И.1) переходит в выражение, полученное Гельмонтом и др. [10, 71, 72].

### Влияние взаимодействия между частицами на процессы оже-рекомбинации

Теперь мы рассмотрим релаксационные процессы более подробно. В этом разделе мы будем изучать два основных механизма рассеяния, характерных для нелегированных полупроводников: (i) рассеяние на полярных оптических фононах и (ii) рассеяние на электрон-дырочной плазме. Для первого из этих механизмов рассеяния выражение для мнимой части собственно энергетической функции, полученное с учетом сложной зонной структуры (в рамках четырехзонной модели Кейна), имеет вид

$$\Gamma_{ph}(k, E) = \frac{m_h e^2 \omega_{lo}}{4\hbar\epsilon k} \left[ \frac{1}{\exp \frac{\hbar\omega_{lo}}{T} - 1} \int_{(1-\Delta_1(k, E))^2}^{(1+\Delta_1(k, E))^2} d\xi \right. \\ \times \frac{3(\Delta_1(k, E)^2 + 1 - \xi)^2 + 4\Delta_1(k, E)^2}{16\Delta_1(k, E)^2\xi} + \frac{\exp \frac{\hbar\omega_{lo}}{T}}{\exp \frac{\hbar\omega_{lo}}{T} - 1} \\ \left. \times \int_{(1-\Delta_2(k, E))^2}^{(1+\Delta_2(k, E))^2} \frac{3(\Delta_2(k, E)^2 + 1 - \xi)^2 + 4\Delta_2(k, E)^2}{16\Delta_2(k, E)^2\xi} d\xi \right], \quad (\text{П.И.4})$$

где  $\omega_{lo}$  — частота оптических фононов, которая считается не зависящей от волнового вектора.

$\Delta_1(k, E) = \sqrt{\frac{2m_h(E - \hbar\omega_{lo})}{\hbar^2 k^2}}$ , если  $E > \hbar\omega_{lo}$ , и 0 в остальных случаях,

$\Delta_2(k, E) = \sqrt{\frac{2m_h(E + \hbar\omega_{lo})}{\hbar^2 k^2}}$ , если  $E > -\hbar\omega_{lo}$ , и 0 в остальных случаях,

$$\frac{1}{\epsilon} = \frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\kappa_0},$$

где  $\kappa_0$  — низкочастотная диэлектрическая постоянная. Первому и второму членам в (П.И.4) соответствуют поглощение и излучение фононов соответственно. Чтобы учесть эффект экранирования, необходимо в обоих

членах выражения (П.I,4) заменить  $\xi$  на  $\xi/(\xi + \lambda_{\text{TF}}^2)^2/k^2$ , где  $\lambda_{\text{TF}}$  — экранирующий импульс Томаса-Ферми. Интегрирование в (П.I,4) может быть произведено в явном виде, однако результирующее выражение получается достаточно громоздким. В работе [73] было получено выражение, похожее на (П.I,3), но в этой работе были использованы неправильные выражения для волновых функций и для энергетического спектра тяжелых дырок.

Рассмотрим более подробно релаксацию, обвязанную своим происхождением рассеянию дырок на равновесной электрон-дырочной плазме. Наиболее существенный вклад в мнимую часть собственной энергии  $\Gamma$ , связанный с рассеянием носителей на носителях, дается кольцевыми диаграммами [73]

$$\begin{aligned} \Gamma_e(k, E) = & -\frac{me^2}{\epsilon_0 \pi k} \\ & \times \int_0^\infty d\mathcal{E} \int_{q_{\min}}^{q_{\max}} \frac{dq}{q} \left( \frac{1}{\exp\left(\frac{\mathcal{E}-\mu_e}{T}\right) + 1} + \frac{1}{\exp\left(\frac{\mathcal{E}-E}{T}\right) - 1} \right) \\ & \times \frac{\delta\epsilon''(q, E - \mathcal{E})}{(1 + \delta\epsilon'(q, E - \mathcal{E}))^2 + (\delta\epsilon''(q, E - \mathcal{E}))^2} \\ & \times \left[ 1 - \frac{3(E_h(q) - E_h(q_{\min}))(E_h(q_{\max}) - E)}{4E_h(k)\mathcal{E}} \right]. \end{aligned} \quad (\text{П.I},5)$$

Здесь  $\delta\epsilon$  — вклад в диэлектрическую постоянную от свободных носителей. Два штриха относятся к мнимой части, а один штрих — к реальной части величины  $\delta\epsilon$ . Последний множитель в (П.I,5) обязан своим происхождением сложной зонной структуре тяжелых дырок,

$$q_{\min} = \left| \sqrt{\frac{2m_h\mathcal{E}}{\hbar^2}} - k \right| \text{ и } q_{\max} = \sqrt{\frac{2m_h\mathcal{E}}{\hbar^2}} + k.$$

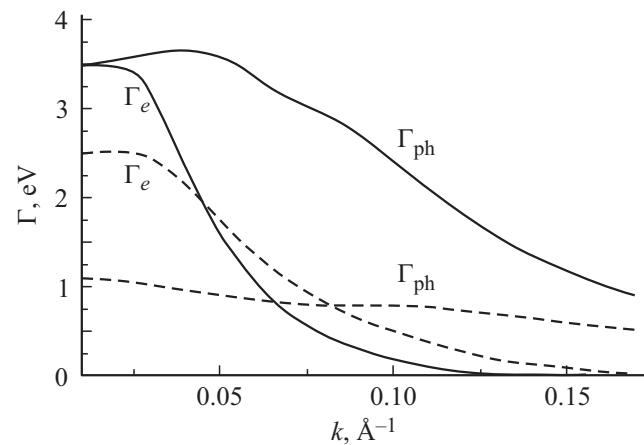
Диэлектрическая постоянная  $\delta\epsilon$  рассчитывается в так называемом приближении случайных фаз [73]. В частности,

$$\begin{aligned} \delta\epsilon''(k, E) = & -\frac{2m_h^2 e^2}{\epsilon_0^2 k^3} \int_{\frac{(E_h(k)-E)^2}{4E_h(k)}}^\infty dE_q (f_h(E_q) - f_h(E_q + E)) \\ & \times \left[ 1 - \frac{3E_h(k)}{4E_q} \frac{E_q - \frac{(E_h(k)-E)^2}{4E_h(k)}}{E_q + E} \right], \end{aligned} \quad (\text{П.I},6)$$

где

$$f_h(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E-\mu_h}{T}\right) + 1}$$

представляет собой функцию распределения тяжелых дырок. И снова в (П.I,6) появляется множитель, обусловленный сложной структурой волновых функций тяжелых дырок. В пределе  $k \rightarrow 0$  этот множитель стремится к единице, и тогда интегрирование может быть произведено в явном виде. Выражение для реальной части  $\delta\epsilon$



**Рис. П.I,1.** Мнимая часть собственной энергии при рассеянии тяжелой дырки на электрон-дырочной плазме ( $\Gamma_e$ ) и продольных оптических фононах ( $\Gamma_{\text{ph}}$ ) как функция импульса тяжелой дырки ( $k$ ) при  $\mathcal{E} = 0$ . Сплошные линии — для  $n = 10^{18} \text{ см}^{-3}$ , штриховые — для  $n = 10^{19} \text{ см}^{-3}$ ,  $T = 300 \text{ K}$ .

получается довольно сложным [30]. Однако, как показывает точный расчет в рамках экранирования Томаса-Ферми, мы получаем очень разумное приближение. В рамках такого приближения функция  $\delta\epsilon''$ , стоящая в знаменателе выражения (П.I,5), должна быть положена равной нулю и

$$\delta\epsilon' = \lambda_{\text{TF}}^2/q^2, \quad (\text{П.I},7)$$

где  $\lambda_{\text{TF}}$  — обратная длина экранирования Томаса-Ферми [71], равная

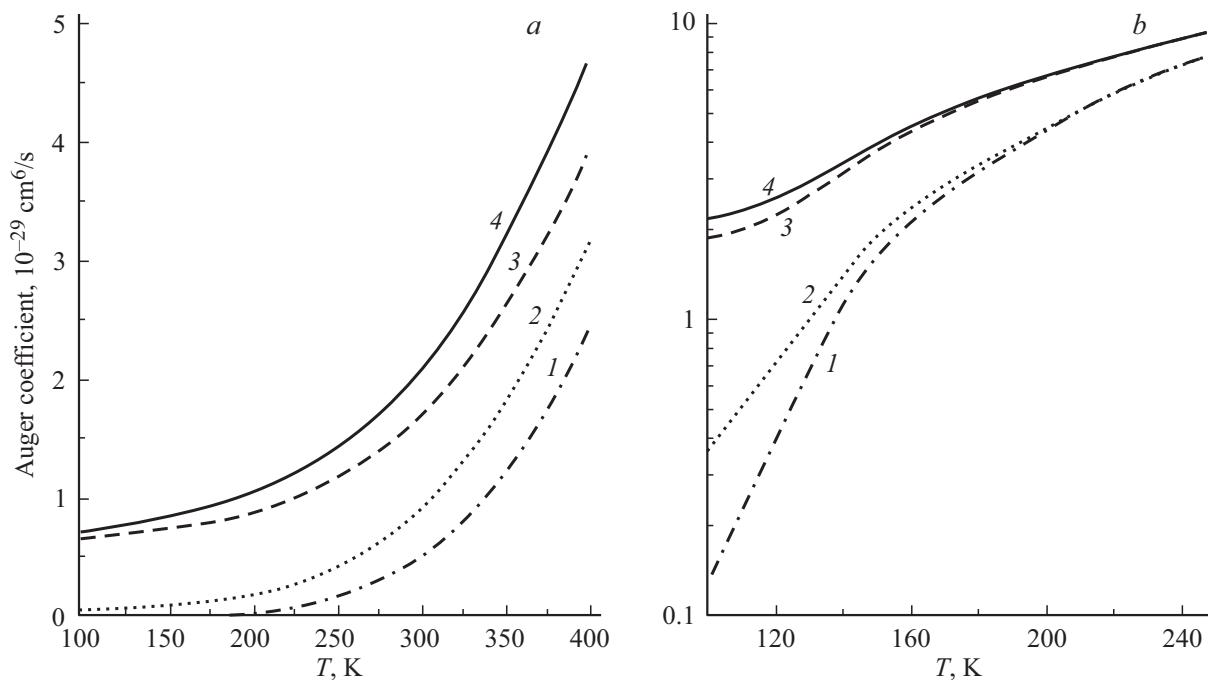
$$\lambda_{\text{TF}} = \sqrt{\frac{4\sqrt{2}e^2\sqrt{T}}{\pi\hbar^3\epsilon_0}} \left( m_h^{3/2}J(\mu_h/T) + m_c^{3/2}J(\mu_e/T) \right), \quad (\text{П.I},8)$$

где

$$J(x) = \int_0^\infty \frac{dy}{\exp(y^2 - x) + 1}.$$

Подстановка (П.I,6) и (П.I,7) в (П.I,5) дает окончательное выражение для времени жизни дырок в случае рассеяния носителей на носителях.

Мнимая часть собственной энергии  $\Gamma_e(k, E)$  сильно зависит от обоих своих аргументов, имеет резкий максимум при  $E_h(k) = E$ , но сильно падает, когда это равенство нарушается. Существуют две основные причины уменьшения  $\Gamma_e$  при  $E_h(k) \neq E$ : (i) при больших передаваемых импульсах кулоновское взаимодействие является относительно слабым и (ii) в равновесной электрон-дырочной плазме имеется экспоненциально малое число носителей с большими импульсами. С другой стороны, рассеяние на фононах почти не зависит от передаваемого импульса, и поэтому  $\Gamma_{\text{ph}}$  представляет собой гладкую функцию всех своих аргументов. На рис. П.I,1 приведены соответствующие зависимости  $\Gamma_e$  и  $\Gamma_{\text{ph}}(k)$  при постоянном значении  $E = 0$ . При малых значениях  $k$  и относительно высоких плотностях носителей

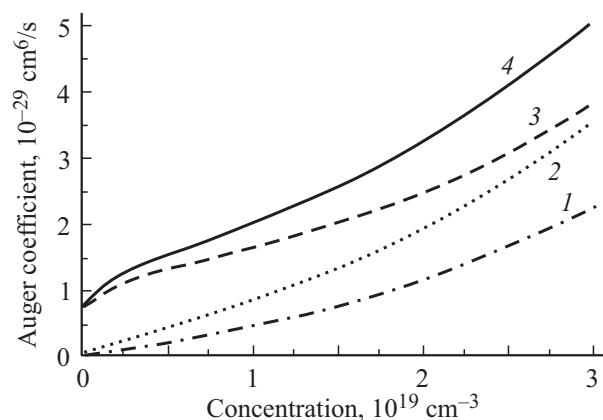


**Рис. П.I.2.** Зависимость коэффициента оже-рекомбинации для CHHS-процесса от температуры: *a*:  $n = 10^{19} \text{ см}^{-3}$ ,  $E_g = 0.8 \text{ эВ}$ , *b*:  $n = 5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ ,  $E_g = 1 \text{ эВ}$ . Без учета релаксации (1), с учетом электрон-электронной релаксации (2), электронно-фононной релаксации (3) и всех механизмов релаксации (4).

величина  $\Gamma_e$  больше величины  $\Gamma_{ph}$ , тогда в рамках экранирования Томаса-Ферми при больших  $k$  или при малых концентрациях носителей заряда эти величины находятся в обратном соотношении. Роль рассеяния носителей на носителях, очевидно, возрастает с ростом концентрации носителей заряда и температуры. При оже-рекомбинации роль больших передаваемых импульсов в процессах релаксации является решающей [10,74]. Поэтому роль механизма рассеяния носителей на носителях здесь не так важна, как при излучательной рекомбинации. Тем не менее при высоких температурах и плотностях носителей этот релаксационный процесс продолжает оставаться эффективным (рис. П.I.2, П.I.3). Для иллюстрации полученных результатов использовались параметры решетки типичного соединения InGaAsP.

Пороговая энергия оже-рекомбинации для процесса CHCC значительно выше пороговой энергии процесса CHHS, поэтому процессы релаксации имеют большое значение для первого из этих процессов вплоть до очень высоких температур  $T$  (рис. П.I.1), тогда как для второго процесса они обычно существенны только при малых  $T$  (рис. П.I.2). При  $T$ , близких к нулю, преобладает фонон-стимулированная оже-рекомбинация, а при более высоких  $T$  снова становится существенной релаксация носителей на носителях (рис. П.I.1). Этот процесс отвечает за более сильную зависимость коэффициента оже-рекомбинации от концентрации носителей (рис. П.I.2).

В заключение отметим, что благодаря релаксационным процессам оже-рекомбинация становится беспо-



**Рис. П.I.3.** Зависимость коэффициента оже-рекомбинации для CHHS-процесса от концентрации носителей заряда для разных механизмов релаксации.  $T = 300 \text{ К}$ ,  $E_g = 0.8 \text{ эВ}$ . Остальные обозначения те же, что и на рис. П.I.2.

роговой, так как процессы релаксации снимают ограничения, налагаемые законами сохранения энергии и импульса. В объемном полупроводнике релаксационные процессы играют такую же роль, как и гетерограницы в гетероструктурах (см. разд. 2 и 3). В разд. 3 показано, что в случае CHCC имеет место предельный переход от 2D-процесса к 3D-процессу при  $a \gg a_c$ , где  $a$  — ширина квантовой ямы,

$$a_c = \lambda_{E_g} \left( \frac{T}{E_{\text{th}}} \right)^{3/2} \exp \left( \frac{E_{\text{th}}}{T} \right), \quad \lambda_{E_g} = \frac{2\pi}{k_c(E_g)}.$$

Для большинства полупроводников  $a_c$  превышает длину свободного пробега электронов и дырок. Это означает, что релаксационные процессы приобретают большое значение в тех случаях, когда ширина квантовой ямы становится сравнимой с длиной свободного пробега, и их влияние с ростом ширины усиливается. Поэтому для правильного описания оже-рекомбинации объемных полупроводников учет релаксационных процессов играет решающую роль. В случае процесса СНСС, если длина свободного пробега равна  $\lambda \gg \tilde{a}_c$ , где

$$\tilde{a}_c = \lambda_{Eg} \left( \frac{T}{E_{\text{th}}} \right) \exp \left( \frac{E_{\text{th}}}{T} \right),$$

релаксационные процессы несущественны, а в остальных случаях они играют очень большую роль.

## Приложение II Волновые функции носителей в прямоугольной потенциальной яме

### Дырки

Выбирая систему координат так, чтобы продольная компонента волнового вектора совпадала с осью  $y$ , и производя преобразование Фурье в этой плоскости, можно получить следующие выражения для волновых функций носителей.

#### Тяжелые дырки:

$$\begin{aligned} \psi_h(q, x) = & H_1 \begin{pmatrix} q \cos k_h x \xi \\ -ik_h \sin k_h x \xi \\ -k_h \sin k_h x \xi + q \cos k_h x \eta \end{pmatrix} \\ & + H_2 \begin{pmatrix} q \sin k_h x \eta \\ ik_h \cos k_h x \eta \\ -q \sin k_h x \xi - k_h \cos k_h x \eta \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{П.II},1)$$

Здесь  $q$ ,  $k_h$  —  $y$ - и  $x$ -компоненты квазиимпульса тяжелых дырок,  $\xi = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$ ,  $\eta = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ ,  $H_1$  и  $H_2$  — нормировочные константы.

#### Легкие дырки:

$$\begin{aligned} \psi_l(q, x) = & L_1 \begin{pmatrix} k_l \sin k_l x \eta - \lambda_l q \cos k_l x \xi \\ -iq \cos k_l x \eta + i\lambda_l k_l \sin k_l x \xi \\ -\lambda_l k_l \sin k_l x \xi + \lambda_l q \cos k_l x \eta \end{pmatrix} \\ & + L_2 \begin{pmatrix} -k_l \cos k_l x \xi - \lambda_l q \sin k_l x \eta \\ -i\lambda_l k_l \cos k_l x \eta - iq \sin k_l x \xi \\ -\lambda_l q \sin k_l x \xi - \lambda_l k_l \cos k_l x \eta \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{П.II},2)$$

$$\psi_{sl} = \frac{i\hbar\gamma(k_l^2 + q^2)}{E_g + \delta - E} [L_1 \cos k_l x \eta + L_2 \sin k_l x \xi]. \quad (\text{П.II},3)$$

$$\lambda_l = \frac{\delta}{E + 2\delta - \hbar^2 k_l^2 / 2m_h},$$

Волновые функции спин-отщепленных дырок аналогичны волновым функциям легких дырок.

Переход к функциям другой симметрии в приведенных выше выражениях может быть осуществлен путем формальной замены  $\xi \leftrightarrow \eta$  для  $|s\rangle$ ,  $|x\rangle$ ,  $|y\rangle$ -компонент и  $\xi \leftrightarrow -\eta$  для  $|z\rangle$ -компонент. В области барьера можно получить волновые функции аналогично уравнениям (П.II,1)–(П.II,3).

Если рассматривать одновременно волновые функции двух и более частиц, то невозможно одновременное обращение в нуль  $z$ -компонент их квазиимпульса. Переход к функции с произвольным направлением квазиимпульса осуществляется при помощи матрицы вращения

$$D_\varphi = R_\varphi \otimes S_\varphi, \quad (\text{П.II},4)$$

где  $R_\varphi$  действует на координатные компоненты волновой функции, а  $S_\varphi$  — на спинорные компоненты. Углы Эйлера при вращении в плоскости  $yz$  на угол  $\varphi$  равны

$$\Phi = -\pi/2, \quad \Theta = \varphi, \quad \Psi = \pi/2.$$

Таким образом,

$$R_\varphi = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos \varphi & \sin \varphi \\ 0 & 0 & -\sin \varphi & \cos \varphi \end{bmatrix},$$

$$S_\varphi = \begin{bmatrix} \cos \varphi/2 & -i \sin \varphi/2 \\ i \sin \varphi/2 & \cos \varphi/2 \end{bmatrix}. \quad (\text{П.II},5)$$

Если вектор  $\mathbf{q}$  имеет компоненты  $q(0, \cos \varphi, \sin \varphi)$  в системе координат  $x, y, z$ , то волновая функция может быть записана в виде

$$\psi_q \equiv \psi_\varphi = D_{-\varphi} \psi_0. \quad (\text{П.II},6)$$

Найденная ранее волновая функция помечена нулевым индексом. Мы здесь приведем волновую функцию тяжелых дырок, найденную ранее с использованием (П.II,6), так как она понадобится далее:

$$\begin{aligned} \psi_h(q, x, \varphi) = & H_1 \begin{bmatrix} q \cos k_h x e^{-i\varphi} \xi \\ -ik_h \sin k_h x \xi - q \cos k_h x \sin \varphi \eta \\ -k_h \sin k_h x \xi + q \cos k_h x \cos \varphi \eta \end{bmatrix} \\ & + H_2 \begin{bmatrix} q \sin k_h x e^{i\varphi} \eta \\ ik_h \cos k_h x \eta + q \sin k_h x \sin \varphi \xi \\ -k_h \cos k_h x \eta - q \sin k_h x \cos \varphi \xi \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{П.II},7)$$

Границные условия для дырочных волновых функций могут быть выведены с помощью интегрирования уравнений Кейна через интерфейс (см. разд. 3.1). Мы также

для простоты будем считать модифицированные параметры Латтинжера  $\tilde{\gamma}_1$  и  $\tilde{\gamma}_2$  непрерывными. Учитывая, что  $m_l^{-1} \approx \frac{2\gamma^2}{E_g + \delta - E} \gg m_h^{-1}$ , мы получаем условия непрерывности на гетерогранице для следующих величин:

- 1)  $\psi$ ,
  - 2)  $\frac{\partial}{\partial x} \psi_{\perp}$ ,
  - 3)  $\frac{1}{E_g + \delta - E} \operatorname{div} \psi$ .
- (П.И.8)

Вообще говоря, волновые функции дырок в квантовой яме являются суперпозицией трех ветвей валентной зоны: тяжелых, легких и спин-отщепленных дырок. Однако последняя из ветвей сильно, экспоненциально, затухает при удалении от интерфейса с показателем экспоненты, равным  $\kappa_{\text{so}} \approx \sqrt{4m_h\Delta_{\text{so}}/3\hbar^2}$ . Как следствие, эта ветвь влияет главным образом на значение производной волновой функции вблизи гетерограницы, а ее влияние на значение самой волновой функции пренебрежимо мало. Подчеркнем, что такое приближение не эквивалентно использованию гамильтониана  $4 \times 4$  с самого начала.

Мы будем искать волновую функцию как суперпозицию ветвей для тяжелых и легких дырок. Вблизи верхнего края валентной зоны  $|\lambda_{\text{so}}| \approx m_h/m_l \gg 1$ . Это означает, что могут быть применены только первое и третье граничные условия (П.И.8). В этом приближении легкие и тяжелые дырки не смешиваются и имеют различные спектры.

Спектр тяжелых дырок совпадает с квантовомеханическим спектром частицы в прямоугольной квантовой яме. Для состояний с четной и нечетной  $|x\rangle$ -компонентой волновой функции тяжелых дырок дисперсионное уравнение принимает вид

$$\begin{aligned} \operatorname{tg} k_h a / 2 &= \frac{k_h}{k_h} \quad \text{для четных состояний и} \\ \operatorname{ctg} k_h a / 2 &= -\frac{k_h}{k_h} \quad \text{для нечетных состояний.} \end{aligned} \quad (\text{П.И.9})$$

Для легких дырок состояния с различной четностью уже не разделяются, и дисперсионное уравнение становится несколько более громоздким:

$$\begin{aligned} &\left[ \frac{E_g + \delta + V_c - E}{E_g + \delta - E} \frac{k_l^2 + q^2}{\kappa_l^2 - q^2} \kappa_l \cot k_l a / 2 + k_l \frac{2\lambda_l - 1}{2\tilde{\lambda}_l - 1} \right] \\ &\times \left[ \frac{E_g + \tilde{\delta} + V_c - E}{E_g + \delta - E} \frac{k_l^2 + q^2}{\kappa_l^2 - q^2} \kappa_l \tan k_l a / 2 - k_l \frac{2\lambda_l - 1}{2\tilde{\lambda}_l - 1} \right] \\ &= q^2 \left[ \frac{2\lambda_l - 1}{2\tilde{\lambda}_l - 1} + \frac{E_g + \tilde{\delta} + V_c - E}{E_g + \delta - E} \frac{k_l^2 + q^2}{\kappa_l^2 - q^2} \right]^2. \end{aligned} \quad (\text{П.И.10})$$

Здесь  $\kappa_l$  и  $\kappa_h$  обозначают модули  $x$ -компоненты квазимпульса легкой и тяжелой дырок в области барьера соответственно,

$$\tilde{\lambda}_i = \frac{\delta}{U_v + E + 2\tilde{\delta} + \hbar^2 \kappa_i^2 / 2m_h}, \quad \tilde{\delta} = \frac{\Delta_{\text{so}}}{3}.$$

Отметим, что при  $q = 0$  состояния легких дырок также расщепляются на состояния с различной четностью. Постоянные  $H_i$  и  $L_i$  в (П.И.1), (П.И.2) определяются условиями нормировки. В частности,

$$H_i = \frac{1}{\sqrt{q^2 + k_h^2}} \frac{1}{\sqrt{a + \frac{1}{\kappa_h} \frac{q^2}{q^2 + k_h^2}}}.$$

Для со-дырок картина противоположная. Компоненты волновых функций легкой и тяжелой дырок быстро осциллируют, и вклад от них в интегралы перекрытия пренебрежимо мал. Аналогично легко проверить, что для со-компоненты  $\psi_x$  и  $\operatorname{div} \psi / (E_g + \delta - E)$  можно считать непрерывными. Вид волновых функций для со-дырок подобен виду волновых функций легких дырок (П.И.2), (П.И.3). Стого говоря, если выполнено условие  $E_g - \Delta_{\text{so}} > U_v$ , спектр спин-орбитально отщепленных дырок непрерывен. Однако если пренебречь быстро осциллирующими вкладами подзон легких и тяжелых дырок, спектр может быть как непрерывным, так и дискретным. В общем случае около такого квазидискретного уровня существует пик плотности состояний с малым импульсом дырки в направлении, перпендикулярном гетерогранице. Дисперсионное уравнение для локализованных со-дырок подобно уравнению для легких дырок.

## Электроны

Электроны подчиняются тем же правилам симметрии, что и дырки. Их волновые функции имеют вид, аналогичный виду волновых функций легких дырок, и могут быть записаны в виде

$$\psi_{sc} = A_1 \cos k_c x \eta + A_2 \sin k_c x \xi, \quad (\text{П.И.11})$$

$$\begin{aligned} \psi_c &= \frac{i\hbar\gamma}{Z} A_1 \begin{pmatrix} k_c \sin k_c x \eta - \lambda_c q \cos k_c x \xi \\ -iq \cos k_c x \eta + i\lambda_c k_c \sin k_c x \xi \\ -\lambda_c k_c \sin k_c x \xi + \lambda_c q \cos k_c x \eta \end{pmatrix} \\ &+ \frac{i\hbar\gamma}{Z} A_2 \begin{pmatrix} -k_c \cos k_c x \xi - \lambda_c q \sin k_c x \eta \\ -i\lambda_c k_c \cos k_c x \eta - iq \sin k_c x \xi \\ -\lambda_c q \sin k_c x \xi - \lambda_c k_c \cos k_c x \eta \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (\text{П.И.12})$$

где

$$Z = \frac{\mathcal{E}^2 + \mathcal{E}(2E_g + 2\delta) + (E_g + 3\delta)E_g}{\mathcal{E} + E_g + 2\delta} \quad (\text{П.И.13})$$

$$\lambda_c = \frac{\delta}{\mathcal{E} + E_g + 2\delta}.$$

Здесь  $q$  и  $k_c$  обозначают  $y$ - и  $x$ -компоненты квазимпульса электронов в квантовой яме. Функции с другой симметрией могут быть выведены путем использования такой же процедуры, как и в случае дырок. Из граничного условия следует, что  $\Psi_s$  и  $\Psi_x$  должны быть непрерывными. Это приводит к дисперсионному уравнению:

$$\left( k_c \operatorname{tg} k_c a / 2 - \frac{Z}{\tilde{Z}} \kappa_c \right) \left( k_c \operatorname{ctg} k_c a / 2 + \frac{Z}{\tilde{Z}} \kappa_c \right) = -q^2 \left( \lambda_c - \tilde{\lambda}_c \frac{Z}{\tilde{Z}} \right)^2, \quad (\text{П.П.14})$$

где  $\kappa_c$  — модуль  $x$ -компонента квазимпульса электрона в барьерной области,

$$\tilde{Z} = \frac{\mathcal{E}^2 + \mathcal{E}(2E_g + 2U_v + 2\tilde{\delta}) + (E_g + U_v + 3\tilde{\delta})(E_g + U_v)}{\mathcal{E} + E_g + U_v + 2\tilde{\delta}},$$

$$\tilde{\lambda}_c = \frac{\tilde{\delta}}{\mathcal{E} + E_g + U_v + 2\tilde{\delta}}.$$

Спектр расщепляется на четные и нечетные состояния, если продольный волновой вектор  $\mathbf{q}$  мал или если выражение в скобках в правой части уравнения (П.П.14) близко к нулю. Последнее условие обычно выполняется, поскольку, как правило,  $U_v \ll E_g$ , что соответствует полупроводникам с близкой зонной структурой. Отметим, что в случае, когда кейновский параметр терпит разрыв  $\gamma \neq \text{const}$ , следует использовать непрерывность  $\gamma\psi_x$  и  $\psi_s$  [21].

### Приложение III

#### Кулоновский потенциал в присутствии гетерограниц

В квантовой яме кулоновский потенциал заряженной частицы отличается от потенциала в однородном полупроводнике вследствие разных диэлектрических постоянных в областях ямы и барьера [75]. Аналогичная картина имеет место при наличии двух интерфейсов, поэтому в КЯ потенциал электрона имеет вид

$$\Phi(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}) = \frac{e}{\kappa_0 |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|} + \tilde{\Phi}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}), \quad (\text{П.П.1})$$

где  $\mathbf{r}_0$  — координата частицы и  $\mathbf{r}$  — координата точки, в которой наблюдается потенциал. Первое слагаемое в (П.П.1) — это потенциал поля заряда, а второе — его изображение. Мы рассмотрим лишь случай, когда частица находится внутри КЯ ( $|x_0| < a/2$ ). Используя метод

изображений (см., например, [75]), можно получить

$$\begin{aligned} \tilde{\Phi} = & \sum_{n \geq 1} \frac{e}{\kappa_0} \left( \frac{\kappa_0 - \tilde{\kappa}_0}{\kappa_0 + \tilde{\kappa}_0} \right)^{2n-1} \left( \frac{1}{\sqrt{(x+x_0-(2n-1)a)^2+\rho^2}} \right. \\ & \left. + \frac{1}{\sqrt{(x+x_0+(2n-1)a)^2+\rho^2}} \right) \\ & + \sum_{n \geq 1} \frac{e}{\kappa_0} \left( \frac{\kappa_0 - \tilde{\kappa}_0}{\kappa_0 + \tilde{\kappa}_0} \right)^{2n} \left( \frac{1}{\sqrt{(x-x_0-2na)^2+\rho^2}} \right. \\ & \left. + \frac{1}{\sqrt{(x-x_0+2na)^2+\rho^2}} \right) \text{ при } |x| < a/2, \\ \tilde{\Phi} = & \frac{e}{\kappa_0 \sqrt{(x-x_0)^2+\rho^2}} \frac{\kappa_0 - \tilde{\kappa}_0}{\kappa_0 + \tilde{\kappa}_0} + \frac{2e}{\kappa_0 + \tilde{\kappa}_0} \sum_{n \geq 1} \left( \frac{\kappa_0 - \tilde{\kappa}_0}{\kappa_0 + \tilde{\kappa}_0} \right)^{2n} \\ & \times \frac{1}{\sqrt{(x-x_0+2na)^2+\rho^2}} + \frac{2e}{\kappa_0 + \tilde{\kappa}_0} \sum_{n \geq 1} \left( \frac{\kappa_0 - \tilde{\kappa}_0}{\kappa_0 + \tilde{\kappa}_0} \right)^{2n-1} \\ & \times \frac{1}{\sqrt{(x+x_0+(2n-1)a)^2+\rho^2}} \text{ при } x > a/2. \end{aligned}$$

Здесь  $\rho^2 = (y - y_0)^2 + (z - z_0)^2$ ,  $a$  — ширина КЯ. Эти потенциалы имеют довольно сложный вид. Однако их можно упростить, если диэлектрические постоянные  $\kappa_0$  и  $\tilde{\kappa}_0$  близки друг к другу. После фурье-преобразования по поперечным координатам ( $y$  и  $z$ ) получаем

$$\begin{aligned} \phi(x, x_0, q) \approx & \frac{e}{2q\kappa_0} \\ & \times \left( e^{-q|x-x_0|} + 2 \frac{\kappa_0 - \tilde{\kappa}_0}{\kappa_0 + \tilde{\kappa}_0} \operatorname{ch}(q(x+x_0)) e^{-qa} \right) \text{ при } |x| < a/2, \\ \phi(x, x_0, q) \approx & \frac{e}{q(\kappa_0 + \tilde{\kappa}_0)} \\ & \times \left( e^{-q(x-x_0)} + \frac{\kappa_0 - \tilde{\kappa}_0}{\kappa_0 + \tilde{\kappa}_0} e^{-q(x+x_0+a)} \right) \text{ при } x > a/2. \end{aligned}$$

Видно, что хотя сам потенциал непрерывен вдоль интерфейса, разность между его левой и правой производными пропорциональна  $(\kappa_0 - \tilde{\kappa}_0)/(\kappa_0 + \tilde{\kappa}_0)$ .

### Приложение IV

#### Вычисление беспорогового матричного элемента

Беспороговый матричный элемент может быть записан в виде

$$M^{(1)} = \frac{4\pi e^2}{\kappa_\infty} \int_0^R \rho_1 d\rho_1 J_m(q\rho_1) \mathbf{R}_2^*(\rho_1) \mathbf{R}_3(\rho_1) J^{(1)}, \quad (\text{П.П.1})$$

где

$$\begin{aligned} J^{(1)} = & \sum_{\eta=s,p} \left[ a_{1\eta} a_{4\eta} \int_0^R \rho d\rho K_m(q\rho) J_{m_{4\eta}}(k_4\rho) J_{m_{1\eta}}(k_1\rho) \right. \\ & \left. + b_{1\eta} b_{4\eta} \int_R^\infty \rho d\rho K_m(q\rho) J_{m_{4\eta}}(k_4\rho) K_{m_{1\eta}}(k_1\rho) \right], \end{aligned} \quad (\text{П.IV},2)$$

$\eta$  соответствует номеру базисной функции и с учетом спина пробегает восемь значений. Так как при беспороговом процессе  $k_4 \gg k_1$ , интегралы можно разложить в ряд по первообразным  $K_m(q\rho) J_{m_{4\eta}}(k_4\rho)$ . Оставляя только члены, линейные по  $V_c/E_g, V_v/E_g$ , разложим (П.IV,2) в ряд по  $q$  и  $m$ . Предположение  $(V_c, V_v) \ll E_g$  обычно справедливо для широкого класса гетероструктур. При таких предположениях можно записать

$$J^{(1)} = [\mathbf{F}_{4s}^1 R_{1s}]_R - [\mathbf{F}_{4\rho}^2 R_{1\rho}^{*\prime}]_R + [\mathbf{F}_{4s}^3 R_{1s}'']_R. \quad (\text{П.IV},3)$$

Здесь нижний индекс нумерует частицу и базисное состояние ( $s, p$ ), квадратные скобки обозначают разрыв функции в точке  $\rho = R$ . Первообразная от произведения  $K_m(q\rho) J_{m_{4\eta}}(k_4\rho)$  порядка  $n$  обозначена как  $\mathbf{F}_4^n$ . Компонента  $\rho$  в используемом базисе (72) имеет вид  $F_\rho = \sqrt{-2F_p+F_p}$ . Подставляя в (П.IV,3) волновые функции конкретного вида (76), получаем (88).

## Приложение V Вычисление квазипорогового матричного элемента

Квазипороговый матричный элемент оже-рекомбинации имеет вид

$$\begin{aligned} M^{(2)} = & \frac{4\pi e^2}{\kappa_\infty} \int_0^R \rho_1 d\rho_1 \mathbf{R}_2^*(\rho_1) \mathbf{R}_3(\rho_1) \sum_{\eta=s,p} a_{1\eta} a_{4\eta} \\ & \times \left[ \int_0^{\rho_1} \rho d\rho K_m(q\rho_1) + I_m(q\rho) J_{m_{4\eta}}(k_4\rho) J_{m_{1\eta}}(k_1\rho) \right. \\ & \left. + \int_{\rho_1}^\infty \rho d\rho I_m(q\rho_1) K_m(q\rho) J_{m_{4\eta}}(k_4\rho) J_{m_{1\eta}}(k_1\rho) \right]. \end{aligned} \quad (\text{П.V},1)$$

При выполнении условия  $k_4^2 + q^2 \gg k_1^2$  можно считать, что хотя бы одна из функций  $J_m(k_4\rho), I_m(q\rho)$  быстро меняется по сравнению с  $J_0(k_1\rho)$ . Тогда, как легко показать, первый неисчезающий член разложения по

параметру  $k_1/(k_4^2 + q^2)^{1/2}$  дает

$$\begin{aligned} M^{(2)} = & \frac{4\pi e^2}{\kappa_\infty} a_{1s} a_{4s} \int_0^R \rho_1 d\rho_1 \mathbf{R}_2^*(\rho_1) \mathbf{R}_3(\rho_1) \\ & \times \frac{\rho_1}{k_4^2 + q^2} J_0(k_1\rho_1) \left[ K_m(q\rho_1) \left( qI_{m-1}(q\rho_1) J_m(k_4\rho_1) \right. \right. \\ & \left. \left. - k_4 I_m(q\rho_1) J_{m-1}(k_4\rho_1) - \frac{m}{\rho_1} I_m(q\rho_1) J_m(k_4\rho_1) \right) \right. \\ & \left. + I_m(q\rho_1) \left( qK_{m-1}(q\rho_1) J_m(k_4\rho_1) + k_4 K_m(q\rho_1) \right. \right. \\ & \left. \left. \times J_{m-1}(k_4\rho_1) - \frac{m}{\rho_1} K_m(q\rho_1) J_m(k_4\rho_1) \right) \right]. \end{aligned} \quad (\text{П.V},2)$$

Используя соотношение

$$K_m(q\rho_1) I_{m-1}(q\rho_1) + K_{m-1}(q\rho_1) I_m(q\rho_1) = \frac{2}{q\rho_1} \quad (\text{П.V},3)$$

(которое можно легко получить дифференцированием его левой части), получаем для матричного элемента выражение (93).

## Список литературы

- [1] В.Н. Абакумов, В.И. Перель, И.Н. Яссиевич. *Безызлучательная рекомбинация в полупроводниках* (ПИЯФ им. Б.П. Константина, СПб., 1997).
- [2] Р.Т. Landsberg. *Recombination in Semiconductors* (Cambridge University Press, 1991).
- [3] P.V. Auger. C. R. Acad Sci.: Paris, **180**, 65 (1925).
- [4] З.Н. Соколова. *Теория межзонной оже-рекомбинации в прямозонных полупроводниках*: автореф. дис. канд. физ.-мат. наук (ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Л., 1982).
- [5] А. Полковников, Г. Зегря. Phys. Rev. B, **64** (7), 073205 (2001).
- [6] Г.Г. Зегря, В.И. Перель. *Основы физики полупроводников* (Физматлит, М., 2009).
- [7] A.R. Beattie, P.T. Landsberg. Proc. Roy. Soc., **A249** (1256), 16 (1959).
- [8] М.П. Михайлова, А.А. Рогачев, И.Н. Яссиевич. ФТП, **10**, 1460 (1976).
- [9] М.П. Михайлова, А.А. Рогачев, И.Н. Яссиевич. ФТП, **11**, 1882 (1977).
- [10] Б.Л. Гельмонт. ЖЭТФ, **75** (8), 536 (1978).
- [11] R.I. Taylor, R.A. Abram. Semicond. Sci. Technol., **3** (9), 859 (1988).
- [12] P. Roussignol, M. Kull, D. Ricard, F. de Rougemont, R. Frey, C. Flytzanis. Appl. Phys. Lett., **51** (23), 1882 (1987).
- [13] Г.Г. Зегря, В.А. Харченко. ЖЭТФ, **101** (1), 327 (1992).
- [14] R.I. Taylor, R.A. Abram, M.G. Burt, C. Smith. Semicond. Sci. Technol., **5** (1), 90 (1990).
- [15] M.I. Dyakonov, V.Yu. Kachorovskii. Phys. Rev. B, **49** (24), 17130 (1994).
- [16] G.G. Zegrya, A.D. Andreev, N.A. Gun'ko, E.V. Frolushkina. Proc. SPIE, 2399, 307 (1995).

- [17] I.V. Kudryashov, G.G. Zegrya, V.P. Evtikhiev, V.E. Tokranov. В сб.: *Compound Semiconductors (ISCS-23) 23th Int. Phys. Conf.* (St. Peterburg, Russia, September 23–27 1996), **155**, Chap. 10, p. 795.
- [18] E.O. Kane. J. Phys. Chem. Sol., **1**, 249 (1957).
- [19] P.C. Sercel, K.J. Vahala. Phys. Rev. B, **42**, 3690 (1990).
- [20] Р.А. Сурис. ФТП, **20** (11), 2008 (1986).
- [21] M.G. Burt. J. Phys.: Condens. Matter., **4**, 6651 (1992).
- [22] B.A. Foreman. Phys. Rev. B, **49**, 1757 (1994).
- [23] Г.Л. Бир, Г.Е. Пикус. *Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках*. (Наука, М., 1972).
- [24] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Квантовая механика. Нелинейистическая теория* (Наука, М., 1989).
- [25] H.L. Wang, M.J. Freeman, D.G. Steel, R. Craig, D.R. Scifres. Optics Lett., **18** (24), 2141 (1995).
- [26] A. Haug. J. Phys. C: Solid State Phys., **16**, 4159 (1983).
- [27] G.P. Agrawal, N.X. Dutta. *Long-Wavelength Semiconductor Lasers* (Van Nostrand Reinhold Company, N.Y., 1993).
- [28] A. Haug. Appl. Phys. A, **51**, 354 (1990).
- [29] A. Haug. J. Phys. Chem. Solids., **49** (6), 599 (1988).
- [30] A.S. Polkovnikov, G.G. Zegrya. Phys. Rev. B, **58** (7), 4039 (1998).
- [31] B.K. Ridley. J. Phys. C: Solid State Phys., **15** (28), 5899 (1982).
- [32] G.G. Zegrya. In: *Antimonide-Related Strained-Layer Heterostructures*, (Gordon and Breach, Amsterdam, 1997) v. 3.
- [33] S. Ideshita, A. Furukawa, Y. Mochizuki, M. Mizuta. Appl. Phys. Lett., **60** (20), 2549 (1992).
- [34] M. Sweeny, J. Xu. Appl. Phys. Lett., **54**, 546 (1989).
- [35] E.P. O'Reilly, M. Silver. Appl. Phys. Lett., **63** (24), 3318 (1993).
- [36] E.P. O'Reilly, A.R. Adams. IEEE J. Quant. Electron., **30** (2), 366 (1994).
- [37] V.Ya. Aleshkin, A.A. Dubinov, V.V. Rumyantsev. J. Appl. Phys., **138**, 135702 (2025).
- [38] Chee-Keong Tan, Wei Sun, Jonathan J. Wierer jr, Nelson Tansu. AIP Advances, **7**, 035212 (2017).
- [39] T. Langer, Al. Chernikov, D. Kalincev, M. Gerhard, H. Bremers, U. Rossow, M. Koch, A. Hangleiter. Appl. Phys. Lett., **103**, 202106 (2013).
- [40] R.M. Barrett, J.M. McMahon, R. Ahumada-Lazo, J.A. Alanis, P. Parkinson, S. Schulz, M.J. Kappers, R.A. Oliver, D. Binks. ACS Photonics, **10**, 2632 (2023).
- [41] T.D. Eales, I.P. Marko1, A.R. Adams, J.R. Meyer, I. Vurgaftman, S.J. Sweeney. J. Phys. D: Appl. Phys., **54**, 055105 (2021).
- [42] V.Ya. Aleshkin, V.V. Rumyantsev, K.E. Kudryavtsev, A.A. Dubinov, V.V. Utochkin, M.A. Fadeev, G. Alymov, N.N. Mikhailov, S.A. Dvoretsky, F. Terpe, V.I. Gavrilenko, S.V. Morozov. J. Appl. Phys., **129**, 133106 (2021).
- [43] K.E. Kudryavtsev, A.A. Yantser, M.A. Fadeev, V.V. Rumyantsev, A.A. Dubinov, V.Ya. Aleshkin, N.N. Mikhailov, S.A. Dvoretsky, V.I. Gavrilenko, S.V. Morozov. Appl. Phys. Lett., **123**, 18 (2013).
- [44] Г.Г. Зегря, А.С. Полковников. Тез. докл. 2-ой Росс. конф. по физике полупроводников **1**, 95, (1996).
- [45] Г.Г. Зегря, А.Д. Андреев. ЖЭТФ, **109** (2), 615 (1996).
- [46] А.С. Полковников, Е.В. Догонкин, Г.Г. Зегря. *Nanostructures: Physics and Technology. 7th Int. Symp.*, (Russia, St. Petersburg, 1999) p. 386.
- [47] Л.В. Асяян, Р.А. Сурис. ФТП, **38** (1), 3 (2004).
- [48] P. Michler, A. Kiraz, C. Becher, W.V. Schoenfeld, P.M. Petroff, L. Zhang, E. Hu, A. Imamoglu. Science, **290** (5500), 2282 (2000).
- [49] G. Yusa, H. Sakaki. Appl. Phys. Lett., **70**, 345 (1997).
- [50] E. Dekel, D. Gershoni, E. Ehrenfreund. Phys. Rev. B, **61**, 11009 (2000).
- [51] M. Brucher, M. Moronne, P. Gin, Sh. Weiss, A.P. Alivisatos. Science, **281** (5385), 2013 (1998).
- [52] W. C.W. Chan, S. Nie. Science, **281** (5385), 2016 (1998).
- [53] M. Han, X. Gao, J.Z. Su, S. Nie. Nature Biotechnol., **19**, 631 (2001).
- [54] X. Michalet, F.F. Pinaud, L.A. Bentolila, J.M. Tsay, S. Doose, J.J. Li, G. Sundaresan, A.M. Wu, S.S. Gambhir, S. Weiss. Science, **307** (5709), 538 (2005).
- [55] X.Y. Cui, R.M. Levenson, W.K. Chung, S. Nie. Nature Biotechnol., **22**, 969 (2004).
- [56] J.L. Pan. Phys. Rev. B, **46**, 3977 (1992).
- [57] S. Fathpour, Z. Mi, P. Bhattacharya, A.R. Kovsh, S.S. Mikhrin, I.L. Krestnikov, A.V. Kozhukhov, N.N. Ledentsov. Appl. Phys. Lett., **85** (22), 5164 (2004).
- [58] И.И. Новиков, Н.Ю. Гордеев, М.В. Максимов, Ю.М. Шерняков, Е.С. Семенова, А.П. Васильев, А.Е. Жуков, В.М. Устинов, Г.Г. Зегря. ФТП, **39** (4), 507 (2005).
- [59] D.I. Chepic, Al.L. Efros, A.I. Ekimov, M. Ivanov, V. Kharchenko, I. Kudriavtsev, T.V. Yazeva. J. Luminesc., **47** (3), 113 (1990).
- [60] Al.L. Efros. In: *Semiconductor Nanocrystals: from Basic Principles to Applications* (Kluwer Academic, N.Y., 2003) chap. 2, p. 52.
- [61] P. Roussignol, D. Ricard, K.C. Rustagi, C. Flytzanis. Optics Commun., **55** (2), 143 (1985).
- [62] Е.В. Догонкин, В.Н. Головач, А.С. Полковников, А.В. Поздняков, Г.Г. Зегря. Proc. 8th Int. Symp. „Nanostructures: Physics and Technology“ (St. Petersburg, Russia, 2000) p. 399.
- [63] V.A. Kharchenko, M. Rosen. J. Luminesc., **70** (1), 158 (1996).
- [64] A.L. Efros, M. Rosen. Phys. Rev. B, **58**, 7120 (1998).
- [65] Г.Г. Зегря, А.С. Полковников. ЖЭТФ, **113** (4), 1491 (1998).
- [66] Е.В. Догонкин, Г.Г. Зегря, А.С. Полковников. ЖЭТФ, **117** (2), 429 (2000).
- [67] LYu. Solov'ev, G.G. Zegrya. Appl. Phys. Lett., **82** (16), 2571 (2003).
- [68] Д.А. Варшалович, А.Н. Москалев, В.К. Херсонский. *Квантовая теория углового момента*. (Наука, Л., 1975).
- [69] Г.Г. Зегря, Д.М. Самосват. ЖЭТФ, **135** (6), 1043 (2009).
- [70] M. Asada. In: *Quantum Well Lasers* (Academic Press, Inc., 1993).
- [71] Masumi Takeshima. Phys. Rev. B, **25**, 5390 (1982).
- [72] M. Takeshima. Phys. Rev. B, **26** (2), 917 (1982).
- [73] A.L. Fetter, J.D. Walecka. *Quantum theory of many-particle systems*. (Dover Publications, Inc., Mineola, N.Y., 2003).
- [74] V.N. Abakumov, V.I. Perel, I.N. Yassievich. *Nonradiative Recombination in Semiconductors* (North-Holland, Amsterdam, 1991).
- [75] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Электродинамика сплошных сред* (Наука, М., 1982).
- [76] А.Д. Андреев, Г.Г. Зегря. ЖЭТФ, **105** (4), 1005 (1994).
- [77] А.Д. Андреев, Г.Г. Зегря. Письма ЖЭТФ, **61** (9), 749 (1995).
- [78] G.G. Zegrya, A.D. Andreev. Appl. Phys. Lett., **67** (18), 2681 (1995).

- [79] Yu.P. Yakovlev, T.N. Danilova, A.N. Imenkov, O.G. Ershov, V.V. Sherstev, G.G. Zegrya. Proc. SPIE, **3001**, 673 (1997).
- [80] V.P. Evtikhiev, I.V. Kudryashov, V.E. Tokranov, D.V. Prilutsky, G.G. Zegrya. Inst. Phys. Conf. Ser., **155** (10), 795 (1997).
- [81] А.Д. Андреев, Г.Г. Зегря. ФТП, **31** (3), 358 (1997).
- [82] A.D. Andreev, G.G. Zegrya. Appl. Phys. Lett., **70** (5), 601 (1997).
- [83] Г.Г. Зегря, М.П. Михайлова, Т.Н. Данилова, Ю.П. Именков. ФТП, **33** (3), 351 (1999).
- [84] Н.А. Гунько, А.С. Полковников, Г.Г. Зегря. ФТП, **34** (4), 462 (2000).
- [85] Л.Е. Воробьев, Г.Г. Зегря, Д.А. Фирсов. Изв. РАН, сер. физ., **65** (2), 231 (2001).
- [86] G.G. Samsonidze, G.G. Zegrya. Phys. Rev. B, **63** (7), 075317–1 (2001).
- [87] А.С. Школьник, В.П. Евтихиев, Г.Г. Зегря. Письма ЖТФ, **32** (15), 51 (2006).
- [88] Г.Г. Зегря, Д.М. Самосват. ЖЭТФ, **131** (6), 1090 (2007).
- [89] Н.Л. Баженов, А.В. Шиляев, К.Д. Мынбаев, Г.Г. Зегря. ФТП, **46** (6), 792 (2012).
- [90] А.Н. Афанасьев, А.А. Гречнов, Г.Г. Зегря. ЖЭТФ, **148** (4), 734 (2015).
- [91] Н.Л. Баженов, К.Д. Мынбаев, Г.Г. Зегря. ФТП, **49** (4), 444 (2015).
- [92] Г.Г. Зегря. *Механизмы оже-рекомбинации в полупроводниковых наногетероструктурах и их влияние на характеристики лазеров* (Изд-во СПбГЭТУ, ЛЭТИ, СПб., 2017).
- [93] А.Н. Афанасьев, А.А. Гречнов, Г.Г. Зегря. Письма ЖЭТФ, **105** (9), 554 (2017).
- [94] A. Karpova, D.M. Samosvat, A.G. Zegrya, G.G. Zegrya, V.E. Bugrov. Rev. Adv. Mater. Sci., **57** (2), 193 (2018).
- [95] Н.Л. Баженов, К.Д. Мынбаев, А.А. Семакова, Г.Г. Зегря. ФТП, **53** (4), 450 (2019).
- [96] Н.Л. Баженов, К.Д. Мынбаев, А.А. Семакова, Г.Г. Зегря. ФТП, **56** (5), 479 (2022).
- [97] А.Н. Афанасьев, А.А. Гречнов, Г.Г. Зегря. ФТП, **58** (11), 620 (2024).
- [98] D. Samosvat, A. Karpova, G. Zegrya. Appl. Phys. A-Mater. Sci. Process., **131**, Art #99 (2025).
- [99] Д.М. Самосват, В.В. Гришунов, Г.Г. Зегря. ЖЭТФ, **168** (3), 285 (2025).

*Редактор А.Н. Смирнов*

## **Auger-recombination mechanisms in semiconductor nanoheterostructures. Part 2. Quantum wires and quantum dots (a review)**

*G.G. Zegrya, N.L. Bazhenov*

Institute Ioffe,  
194021 St. Petersburg, Russia

**Abstract** The Second part of the Review is devoted to a macroscopic theory of Auger-recombination mechanisms in semiconductor quantum wires and quantum dots. For convenience, the numbering of chapters, figures and formulas in Parts 1 and 2 is continuous.