

Модуляция рекомбинационного излучения квантовых нитей электрическим полем и возможности ее использования в квантовой электронике

А.М.Мандель, В.Б.Ошурко, С.М.Першин, Е.Е.Карпова

Рассчитано сечение процесса однофотонной рекомбинации свободных носителей заряда в 1D геометрии тонкой квантовой нити в сильном продольном электрическом поле. Установлено, что спектр рекомбинационного излучения является не менее чистым (близким к разреженному линейчатому) и стабильным, чем у квантовых точек. Считается, что продольная классическая степень свободы «размывает» спектральные линии за счет неопределенности кинетической энергии продольного движения носителей. Показано, что сильное электрическое поле снимает эту неопределенность, позволяя при этом варьировать как частоту излучения, так и интенсивность процесса рекомбинации. Выявлена сложная осцилляционная зависимость интенсивности рекомбинации от напряженности однородного электрического поля. Дополнительным преимуществом является естественная направленность излучения вдоль нити в сильном поле. Квазиклассический подход позволил установить, что процесс рекомбинации преимущественно локализуется в окрестности отдельных точек нити, где выполняются дисперсионные соотношения для излучаемого фотона. Электрическое поле способно влиять на положение этих точек и модулировать пространственное распределение, спектр и анизотропию рекомбинационного излучения. Полученные теоретические результаты использованы для интерпретации обширных экспериментальных исследований рекомбинационного излучения нитей CdSe в электрическом поле.

Ключевые слова: тонкие квантовые нити, продольное сильное электрическое поле, монохроматическое направленное рекомбинационное излучение с управляемыми характеристиками.

1. Введение

Квантовые нити (полупроводниковые 1D гетероструктуры в полупроводниковой матрице) используются в современной квантовой электронике далеко не столь широко, как квантовые точки и квантовые ямы. Между тем совершенно очевидно, что сама геометрия квантовых нитей весьма выигрышная для генерации направленного излучения. Достаточно тонкая квантовая нить создает условия для устойчивого прямолинейного движения микрочастиц. Продольное электрическое поле в этой ситуации может играть роль как дополнительного источника энергии этих частиц, так и управляющего параметра для характеристик рекомбинационного излучения.

Различные виды лазеров на квантовых нитях создают и используются с начала 1990-х гг. (см., напр., [1, 2]). Первоначальные надежды на то, что очень высокая плотность состояний носителей заряда в 1D структурах приведет к предельно низкому порогу генерации, вполне подтвердились. В настоящее время, по-видимому, основное направление совершенствования лазеров подобного типа связывают с оптимизацией химической структуры и

текстуры нитей и совершенствованием технологии формирования их интерфейса.

Однако высокая плотность состояний – далеко не единственное преимущество квантовых нитей по сравнению с другими гетероструктурами. Например, значительная разреженность энергетических уровней поперечного движения в тонкой нити приводит к тому, что рассеивание электронов на фононах и дефектах структуры, чаще всего идущее на малые углы с небольшим изменением энергии поперечного движения, в сильной степени подавлено. Это должно существенно увеличивать устойчивость продольного движения и длину свободного пробега носителей заряда в нити*. В свою очередь, это ведет к повышению энергии рекомбинационных фотонов и ее зависимости от напряженности внешнего электрического поля.

Очевидно также, что и интенсивность рекомбинационного излучения становится управляемой внешним полем, хотя зависимость сечения рекомбинации от напряженности поля носит довольно сложный характер (далее это будет показано). Следует ожидать, что и направление рекомбинационного излучения естественным образом должно ориентироваться вдоль оси нити, что позволит существенно «сэкономить» на фокусирующей оптике. Дело в том, что наиболее вероятный излучательный процесс при столкновении электрона и дырки, разогнанных навстречу друг другу электрическим полем, – именно однофотонная рекомбинация. Конкурирующие процессы типа двухфотонной или безызлучательной рекомбина-

А.М.Мандель, Е.Е.Карпова. Московский государственный технологический университет «СТАНКИН», Россия, 127994 Москва, Вадковский пер., 3А; e-mail: arkadimandel@mail.ru

В.Б.Ошурко. Московский государственный технологический университет «СТАНКИН», Россия, 127994 Москва, Вадковский пер., 3А; Институт общей физики им. А.М.Прохорова РАН, Россия, 119991 Москва, ул. Вавилова, 38

С.М.Першин. Институт общей физики им. А.М.Прохорова РАН, Россия, 119991 Москва, ул. Вавилова, 38

* В определенном смысле это напоминает явление сверхпроводимости, когда передача небольшого квазиимпульса от электрона к решетке при низких температурах подавлена широкой энергетической щелью.

ции имеют более высокий порядок малости по постоянной тонкой структуры. Здесь ситуация аналогична явлению внутреннего фотоэффекта в электрическом поле (эффект Келдыша–Франца [3]), ибо процессы однофотонной рекомбинации и фоторождения электронно-дырочной пары кросс-симметричны. Но тогда направление движения рекомбинационного фотона будет совпадать с осью квантовой нити вследствие закона сохранения квазиимпульса, если поперечные квазиимпульсы частиц скомпенсированы.

Почему столь очевидные преимущества квантовых нитей практически не используются при работе лазеров? Формирование ответа на этот вопрос является основной целью настоящей работы.

2. Экспериментальные особенности излучения квантовых нитей в электрическом поле

Рекомбинация в квантовых нитях в электрическом поле наиболее подробно и последовательно исследовалась, насколько нам известно, в работах [4–6]. В результате выявлен целый ряд довольно неожиданных особенностей рекомбинационного излучения, требующих специального объяснения. Строго говоря, исследуемые в этих работах цилиндрические нанотрубки CdSe квантовыми нитями не являются. Это не линейные внедрения узкозонного полупроводника в широкозонную матрицу, а длинные сплошные нанотрубки, свободно плавающие в химически нейтральном растворе. Тем не менее характерные черты их рекомбинационного излучения свойственны и чисто твердотельным квантовым нитям.

Кратко отметим эти основные черты. Во-первых, это сильная пространственная неоднородность интенсивности излучения. Наиболее отчетливо она выражена сразу после включения поля, когда излучение полностью локализовано вблизи положительного электрода. Далее, по мере развития процесса эта область может «размываться». Изменение направления поля приводит к локализации излучения у противоположного электрода. Важно, что эффект локализации рекомбинационного свечения вызывается только постоянным полем. С ростом частоты поля он все менее заметен, а при частоте ~ 500 кГц исчезает совсем [5].

Во-вторых, связь между интенсивностью рекомбинационного излучения и напряженностью поля весьма неоднозначна. Как осторожно отмечают авторы [5], «в некоторых случаях результирующая интенсивность излучения возрастает на порядок по сравнению с нулевым полем, но чаще... в 2–3 раза». Видим, что такого рода констатация весьма далека от количественного описания.

Авторы упомянутых работ интерпретируют полученные результаты, на наш взгляд, весьма странно. В качестве определяющего фактора выдвигается «пассивация поверхностных дефектов», играющих роль ловушек, из которых электрическое поле «вытягивает» свободные электроны (эффект Пула–Френкеля). В более поздней работе [6] построена кинетическая модель, описывающая изменение концентрации свободных и связанных зарядов со временем. По нашему мнению, для объяснения столь сложной связи интенсивности рекомбинации с величиной поля этого явно недостаточно. Решающую роль здесь играет не столько концентрация подвижных зарядов, сколько вероятность (сечение процесса) рекомбинации и зависимость ее от напряженности поля. Тем труднее объ-

яснить поверхностными ловушками эффект локализации процесса рекомбинации и его исчезновение при возрастании частоты поля. Авторы лишь фиксируют концентрацию свободных зарядов на концах нити и осторожно отмечают, что «эффект связан, по-видимому, с поведением электронов».

В данной работе мы предлагаем совершенно другое объяснение этим экспериментальным фактам. Оно базируется только на влиянии сильного постоянного электрического поля на процесс рекомбинации в квантовых нитях. Что касается поверхностных ловушек и связанного с ними эффекта Пула–Френкеля, то они могут лишь усложнять и разнообразить пространственное распределение интенсивности рекомбинации, никак не меняя его основных признаков.

3. Волновые функции и уровни энергии носителей заряда

Рассмотрим состояния свободных носителей заряда, локализованные на квантовой нити, в сильном продольном электрическом поле. В качестве материалов матрицы (барьера) и нити возьмем материалы с простыми невырожденными зонами как для электронов, так и для дырок. Это позволит продемонстрировать основную идею работы без дополнительных осложнений, связанных, например, с перемешиванием волновых функций легких и тяжелых дырок на потолке валентной зоны. Подобная ситуация, как известно, типична для наиболее распространенных материалов $A^{III}B^V$, что значительно осложняет как расчет волновых функций носителей, так и правила отбора для энергии связанных уровней в нити (см., напр., [7, 8]).

Из-за малых поперечных размеров нить не является фрагментом объемного полупроводника с присущей ему зонной структурой, поскольку уровни энергии поперечного движения сильно разрежены. Это приводит, кроме подавления рассеивания носителей заряда на малые углы, к зависимости эффективной массы носителей в нити от ее поперечных размеров [9–11]. Эффективные массы электрона и дырки совпадают с объемными значениями, характерными для материала нити, только в достаточно широкой нити, когда структура поперечных уровней полностью сформировалась и соответствует объемному полупроводнику. При этом основное состояние электрона практически «садится» на дно зоны проводимости материала нити, а дырки – соответственно, на потолок валентной зоны. По порядку величины объемные значения эффективных масс электрона и дырки в материалах с простой зоной составляют [3]

$$m_c^* \sim m_n^* \sim m E_g / E_p,$$

где E_p – энергия Кейна, пропорциональная квадрату межзонного матричного элемента оператора импульса между интерферирующими состояниями электрона и дырки; E_g – ширина запрещенной зоны; m – масса свободного электрона. Однако в гетероструктурах с энергетическими зонами, «недостроенными» из-за их малых размеров, роль ширины запрещенной зоны играет щель между основными состояниями электрона и дырки (как раз равная энергии рекомбинационного фотона в отсутствие электрического поля). Именно поэтому эффективные массы носителей заряда, локализованных на нити, зави-

сят от ее поперечных размеров [10]. В результате, строго говоря, задача расчета волновых функций и энергии связи носителей становится самосогласованной и требует совместного решения уравнений Шредингера и уравнений Кейна. Однако, если нить тонкая, состояния электрона и дырки в ней будут слабосвязанными [9, 11], так что упомянутая энергетическая щель практически совпадает с шириной запрещенной зоны матрицы. Другими словами, массы квазичастиц в тонкой нити «не успевают перенормироваться» и остаются практически матричными. Поэтому в дальнейшем мы не будем усложнять и без того непростую ситуацию и учитывать поправки к массам квазичастиц в нити.

Пусть квантовая нить – цилиндр радиусом R и длиной $L \gg R$ из узкозонного материала в широкозонной матрице, ориентированный вдоль оси z . Электрическое поле параллельно оси нити; $-\Delta E_c$ и ΔE_v – скачок дна зоны проводимости и потолка валентной зоны на гетерогранице соответственно (рис.1). Нить полагаем достаточно тонкой, чтобы щели между поперечными уровнями энергии были порядка нескольких десятых эВ, что много больше kT . Тогда уравнение Шредингера для пространственной части волновой функции электрона, локализованного на нити во внешнем электрическом поле, принимает вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m_c^*} \Delta \psi(\mathbf{r}) - \left\{ \begin{array}{l} -\Delta E_c + E \\ E \end{array} \right. \psi(\mathbf{r}) - e\mathcal{E}z\psi(\mathbf{r}) + \left\{ \begin{array}{l} V_{in} \\ V_{ex} \end{array} \right. \psi(\mathbf{r}) = 0, \quad (1)$$

где Δ – трехмерный лапласиан в цилиндрической системе; \mathcal{E} – напряженность внешнего электрического поля; V_{in} и V_{ex} – периодический блоховский потенциал в материале нити и барьера (матрицы) соответственно; остальные обозначения стандартные. Верхние индексы уравнения соответствуют внутреннему пространству нити, $r < R$,

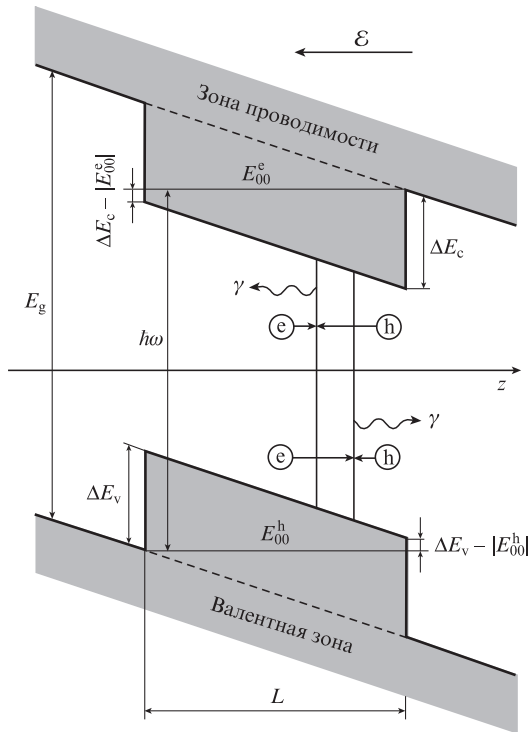


Рис.1. Энергетическая диаграмма рекомбинационного перехода электрона из зоны проводимости в валентную зону. Зоны наклонены за счет продольного электрического поля. Показано направление движения носителей заряда и фотона в точках рекомбинации.

нижние – материалу матрицы, $r > R$. Уравнение для дырок отличается от (1) только величиной эффективной массы, знаками зарядов и энергетических скачков на гетерогранице.

После разделения переменных и решения полученных обыкновенных дифференциальных уравнений для отдельных цилиндрических координат для волновой функции электрона, локализованного на нити, имеем следующее выражение:

$$\psi_{lqk}(\mathbf{r}) = \frac{(2m_c^*)^{1/3}}{\sqrt{\pi} \hbar^{2/3} (e\mathcal{E})^{1/6}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E^c t\right) B_{lq}^c \exp(iq\varphi) \times Ai(-\tilde{z}_e) \begin{cases} J_l(\kappa r) u_{ck}(\mathbf{r}), & r < R, \\ K_l(\kappa' r) \tilde{u}_{ck}(\mathbf{r}), & r > R. \end{cases} \quad (2)$$

Здесь l, q, k – квантовые числа соответственно радиального, углового и продольного движения (l и q – целые, k – действительное). Нормировочная постоянная B_{lq}^c , входящая в волновую функцию поперечного движения,

$$B_{lq}^c = \left[\int_0^R dr r J_l^2(\kappa r) + \int_R^\infty dr r K_l^2(\kappa' r) \right]^{-1/2}.$$

Нормировка функции Эйри $Ai(-\tilde{z}_e)$ взята из [12], а ее аргумент

$$\tilde{z}_e = (2m_c^*)^{1/3} (e\mathcal{E}\hbar)^{-2/3} (\Delta E_c - |E_{lq}^c| + e\mathcal{E}z).$$

Волновые числа радиального движения носителей заряда в материале нити и матрице (κ и κ' соответственно), входящие в аргументы функций Бесселя J_l и Неймана K_l , имеют вид

$$\kappa = \frac{[2m_c^* (\Delta E_c - |E_{lq}^c|)]^{1/2}}{\hbar}, \quad \kappa' = \frac{(2m_c^* |E_{lq}^c|)^{1/2}}{\hbar},$$

а волновые числа продольного движения –

$$k = \frac{[2m_c^* (\Delta E_c - |E_{lq}^c| + e\mathcal{E}z)]^{1/2}}{\hbar}, \quad k' = \frac{[2m_c^* (|E_{lq}^c| - e\mathcal{E}z)]^{1/2}}{\hbar}.$$

Здесь энергия связи поперечных уровней электрона в нити $E_{lq}^c < 0$ (во избежание недоразумений со знаками везде в дальнейшем будем брать ее по модулю). Определяются эти уровни из условия сшивания логарифмической производной радиальной составляющей волновой функции огибающей на границе нити $r = R$ [9]:

$$\sqrt{\Delta E_c - |E_{lq}^c|} \frac{1}{J_l(\kappa R)} \frac{dJ_l(\kappa R)}{dr} = \sqrt{|E_{lq}^c|} K_l(\kappa' R) \frac{dK_l(\kappa' R)}{dr}. \quad (3)$$

Отметим, что это трансцендентное граничное условие можно значительно упростить, используя относительную малость как радиуса нити, так и величины E_{lq}^c , по сравнению с ΔE_c для слабосвязанных состояний [13, 14]. Наконец, $u_{ck}(\mathbf{r})$ и $\tilde{u}_{ck}(\mathbf{r})$ – быстро осциллирующие функции Блоха в цилиндрической системе координат. Ясно, что в материале нити и матрице они различны (с – индекс зоны проводимости).

Сделаем важное замечание по поводу границ применимости решения (2) и граничных условий (3). Строго говоря, когда электрон движется вне нити, аргумент функции Эйри $Ai(-\tilde{z}_e)$ должен несколько отличаться от \tilde{z}_e :

$$z'_e = (2m_e^*)^{1/3} (e\mathcal{E}\hbar)^{-2/3} (e\mathcal{E}z - |E_{lq}^e|) \neq \tilde{z}_e.$$

Однако мы не будем это учитывать и усложнять тем самым волновую функцию (2) и условия (3). Дело в том, что далее будет проведен расчет матричного элемента и вероятности рекомбинации электронно-дырочной пары только в основном состоянии с квантовыми числами $l = q = 0$. Легко видеть, что вероятность встречи электрона и дырки в таком состоянии вне нити, несмотря на малость ее поперечных размеров, экспоненциально мала по сравнению с аналогичным процессом внутри нити. Поэтому и нормировку волновой функции рекомбинационного фотона в матричном элементе мы будем использовать в виде «один фотон на объем нити» $\pi R^2 L$. Наконец, полная энергия электрона в (2), отсчитанная от дна зоны проводимости матрицы, определяется как

$$E^e = \Delta E_c - |E_{lq}^e| + e\mathcal{E}z.$$

Решение типа (2) для дырочных состояний имеет аналогичный вид с учетом естественных замен масс и знаков энергетических сдвигов. Наиболее существенна замена в аргументе функций Эйри: $z \rightarrow L - z$. Так,

$$\tilde{z}_h = (2m_h^*)^{1/3} (e\mathcal{E}\hbar)^{-2/3} [\Delta E_v - |E_{lq}^h| + e\mathcal{E}(L - z)];$$

аналогично в волновых числах продольного движения k и k' . Ясно, что дырка разгоняется электрическим полем от противоположного конца нити, т. е. не от точки $z = 0$, а от точки $z = L$, и движется навстречу электрону.

4. Вероятность однофотонной рекомбинации носителей. Характеристики рекомбинационного фотона

Перейдем к расчету матричного элемента и вероятности однофотонной рекомбинации средствами обычной квантовой механики. Гамильтониан возмущения ограничиваем первым порядком по постоянной тонкой структуры [3] (следующие члены ряда дают эффекты и поправки, которые мы в этой работе не рассматриваем):

$$\hat{H} = -i \frac{e\hbar}{mc} A_0 \exp[-i(\omega t - \chi r)] (e\nabla), \quad (4)$$

где m – масса свободного электрона; χ – волновой вектор фотона; e – вектор его поляризации; A_0 – амплитуда векторного потенциала; остальные обозначения стандартные. Выразим амплитуду A_0 через плотность энергии фотонов:

$$|A_0|^2 = \frac{2\pi N \hbar c^2}{\omega n^2},$$

где n – показатель преломления среды; N – концентрация фотонов. (Как уже ранее отмечалось, $N = 1/(\pi R^2 L)$.)

Расчет матричного элемента однофотонной рекомбинации \mathcal{P}_{cv} с этим гамильтонианом в обкладках типа (2) не слишком отличается от расчета внутреннего фотоэффекта в электрическом поле (известный эффект Франца–Келдыша) [3], поскольку это – кросс-симметричные реакции. Специфика расчета связана только с явной цилиндрической симметрией огибающих в выражении (2) и в

аналогичной функции дырок. В результате матричный элемент однофотонной рекомбинации электрона и дырки в основном состоянии в электрическом поле имеет вид

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{cv}^{00} &= \int d\mathbf{r} \psi_{00k}^{e*}(\mathbf{r}) \hat{H} \psi_{00k'}^h(\mathbf{r}) = \frac{4\pi \hbar c e}{m \omega n^2 R^2 L} B_{00}^e B_{00}^h \\ &\times \left[\int_0^R dr r J_0(\kappa_e r) J_0(\kappa_h r) + \int_R^\infty dr r K_0(\kappa_e r) K_0(\kappa_h r) \right] \\ &\times \int_{-\infty}^\infty dz Ai(-\tilde{z}_e) Ai(-\tilde{z}_h) \frac{1}{\Omega} \int_\Omega d\mathbf{r} u_{ck}^*(\mathbf{r}) e(-i\hbar\nabla) u_{vk'}(\mathbf{r}), \quad (5) \end{aligned}$$

а вероятность рекомбинации (в единицу времени), соответственно,

$$\begin{aligned} W_{cv}^{00} &= 2 \frac{2\pi}{\hbar} \int_0^\infty d\omega |\mathcal{P}_{cv}^{00}|^2 \delta(\Delta E - \hbar\omega) = \frac{256\pi^3 e^2}{m^2 n^2 R^2 \Delta E} \\ &\times \left(\frac{2\mu}{\hbar^2} \right)^{2/3} |ep_{vc}(k)|^2 (e\mathcal{E})^{-1/3} Ai^2\left(-\frac{T}{\hbar\omega\mathcal{E}}\right) (B_{00}^e)^2 (B_{00}^h)^2 \\ &\times \left[\int_0^R dr r J_0(\kappa_e r) J_0(\kappa_h r) + \int_R^\infty dr r K_0(\kappa_e r) K_0(\kappa_h r) \right]^2. \quad (6) \end{aligned}$$

Здесь дополнительный множитель 2 появился из-за двух возможных ориентаций спинов фотона (спины носителей заряда в силу закона сохранения момента должны быть параллельны);

$$\Delta E = E_g - |E_{00}^e| - |E_{00}^h| + e\mathcal{E}L = \hbar\omega \quad (7)$$

– полная энергетическая щель между основными состояниями носителей (с учетом дополнительной кинетической энергии заряженных частиц в поле, рис.1), равная энергии рекомбинационного фотона;

$$T = \Delta E_c - |E_{lq}^e| + \Delta E_v - |E_{lq}^h| + e\mathcal{E}L \quad (8)$$

– суммарная кинетическая энергия локализованных на нити носителей; E_g – ширина запрещенной зоны в матрице;

$$|ep_{vc}(k)| = \frac{1}{\Omega} \int_\Omega d\mathbf{r} u_{ck}^*(\mathbf{r}) e(-i\hbar\nabla) u_{vk'}(\mathbf{r})$$

– свертка вектора поляризации фотона e с оператором дипольного перехода между блоховскими состояниями из точки $E_c(k)$ зоны проводимости в точку $E_v(k')$ валентной зоны (рис.1); Ω – объем элементарной ячейки. Ясно, что этот переход практически прямой из-за малости волнового вектора фотона ($\chi \ll k, k'$). Для возможности однофотонной рекомбинации необходимо только, чтобы в группе симметрии кристалла этот переход был разрешен [3]. Кроме того, в (6) введено обозначение

$$\hbar\omega_{\mathcal{E}} = (\hbar e\mathcal{E})^{2/3} (2\mu)^{-1/3},$$

где μ – приведенная масса носителей.

Особое внимание обратим на быстрые и сильные осцилляции вероятности рекомбинации с ростом напряженности поля, обусловленные квадратом функции Эйри в выражении (6). Именно эти осцилляции и обуславливают, на наш взгляд, сложный характер зависимости интенсивности рекомбинационного излучения от напряженно-

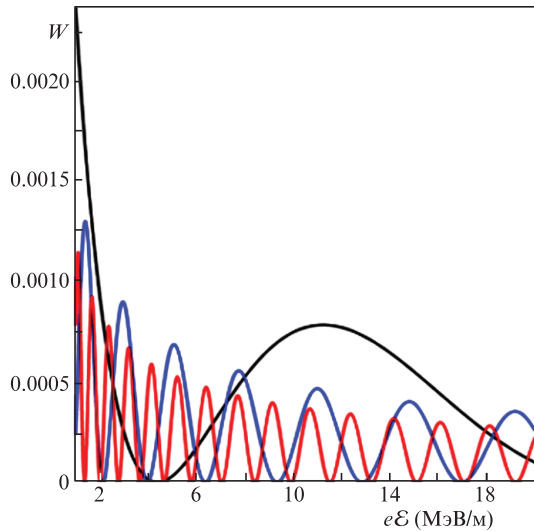


Рис.2. Зависимости сечения однофотонной рекомбинации электрона и дырки в основном состоянии от напряженности поля для квантовой нити из CdSe длиной 10 (черная кривая), 30 (синяя кривая) и 50 нм (красная кривая). Расчет проведен согласно (9). Данные об эффективных массах квазичастиц взяты из работы [15].

сти поля, о которой шла речь в разд.2 (рис.2). Энергия рекомбинационного фотона, напротив, монотонно растет с ростом напряженности, как видно из (7).

Для сравнения с экспериментальными данными работ [4–6] рассчитаем в явном виде зависимость сечения рекомбинации от напряженности поля (в эВ/м) для нитей из CdSe. Результаты расчетов приведены на рис.2. Как уже отмечалось, в этих работах исследовались не совсем квантовые нити (узкозонные 1D гетероструктуры в широкозонной матрице), а уединенные нанотрубки в растворе. Поэтому в выражении (8) для суммарной кинетической энергии электрона и дырки, движущихся навстречу друг другу, нет слагаемого $\Delta E_c - |E_{iq}^e|$, связанного с потенциальной ямой для электрона, и соответствующего слагаемого $\Delta E_v - |E_{iq}^h|$ для дырки. Тогда совокупная кинетическая энергия частиц связана только с работой электрического поля $e\mathcal{E}L$. Энергия теплового движения при комнатной температуре ~ 0.03 эВ на этом фоне пренебрежимо мала. В результате соотношение (6) значительно упрощается:

$$W_{ev}^{00}(e\mathcal{E}) = f(0)(e\mathcal{E})^{-1/3} Ai^2\left(-L\left(\frac{2\mu}{\hbar^2}e\mathcal{E}\right)^{1/3}\right), \quad (9)$$

где $f(0)$ – слабо зависящая от поля функция. Данные об эффективных массах частиц взяты из [15].

Из рис.2 легко видеть, что вероятность рекомбинации, а следовательно, и пропорциональная ей интенсивность рекомбинационного излучения сильно осциллируют с ростом поля, причем частота этих осцилляций растет с ростом длины нити. Экспериментальные зависимости (см., напр., рис.4 в работе [5]), естественно, сильно сглажены, но общая тенденция тем не менее просматривается. Вырывание электронов из ловушек, связанных с поверхностными дефектами, могло бы сыграть некоторую роль в этом сглаживании за счет уменьшения длины пробега носителей. Учесть этот фактор в соотношении (9) можно, заменив $L \rightarrow L - x$ и усреднив по координатам ловушек x . Но главную роль в описываемом эффекте, несомненно, играет само влияние электрического поля.

5. Квазиклассическое описание процесса рекомбинации и эффект локализации источников излучения

Следующий шаг в понимании механизма рекомбинации в квантовой нити дает переход к квазиклассической картине. В выражении (2) движение электрона вдоль нити в сильном электрическом поле описывает функция $Ai(-\bar{z})$. Оценивая ее методом стационарной фазы, получаем

$$Ai(-\bar{z}) \approx \frac{(2m_e^*)^{2/3}}{\hbar^{1/3}} (e\mathcal{E})^{1/6} p(z)^{-1/2} \exp\left[\frac{i}{\hbar} \int_0^z dz p(z)^{1/2} - \frac{i\pi}{4}\right],$$

где

$$p(z) = [2m_e^*(\Delta E_c - |E_{iq}^e| + e\mathcal{E}z)]^{1/2}. \quad (10)$$

Легко видеть, что это типичное квазиклассическое описание частицы, движущейся в поле с растущим квазиимпульсом $p(z)$. Ситуация с дыркой аналогичная, с поправкой на начальную кинетическую энергию и направление движения:

$$p'(z) = [2m_h^*(\Delta E_v - |E_{iq}^h| + e\mathcal{E}(L - z))]^{1/2}. \quad (11)$$

Импульс рекомбинационного фотона $\hbar\omega/c$ ничтожно мал по сравнению с квазиимпульсами рекомбинирующих квазичастиц. Поэтому однофотонная рекомбинация (напомним, наиболее вероятный с позиций теории возмущения процесс) локализуется в точке, где эти квазиимпульсы компенсируют друг друга. Точнее, процесс однофотонной рекомбинации в нити локализуется в окрестности двух очень близких точек. Только в этих точках $z_{1,2}$ выполняются дисперсионные соотношения для излучаемого фотона. Координаты их легко рассчитать с помощью (10) и (11):

$$z_{1,2} = \frac{\mu}{m_e^*} L + \frac{\mu}{e\mathcal{E}} \left(\frac{\Delta E_v - |E_{00}^h|}{m_e^*} - \frac{\Delta E_c - |E_{00}^e|}{m_h^*} \right) \pm \frac{\hbar\omega}{c} \frac{(2\mu T)^{1/2}}{e\mathcal{E}(m_e^* + m_h^*)}. \quad (12)$$

В точке z_1 квазиимпульс электрона чуть превышает квазиимпульс дырки, так что излучаемый фотон – в силу закона сохранения импульса – движется вдоль нити против поля, т. е. в направлении движения электрона. В точке z_2 , естественно, картина обратная (рис.1). Положения этих точек, как следует из выражения (12), в первую очередь, определяются соотношением эффективных масс квазичастиц, а во-вторую, – потенциальными ямами на гетерограницах. Последнее слагаемое в (12) много меньше остальных и определяет фактически только расстояние между z_1 и z_2 .

В изучаемых нанотрубках селенида кадмия потенциальные ямы на гетерограницах отсутствуют. Поэтому второе слагаемое в (12) роли не играет. Место локализации излучения определяется, таким образом, только первым членом. Ввиду того, что $m_e^* = 0.13m$, а $m_h^* = 0.45m$ [15], получаем $\mu = 0.10m$, так что $z_{1,2} \approx 0.77L$. Другими словами, излучение должно локализоваться вблизи положительного электрода (см., напр., рис.5 в работе [4]). Маловероятно, что рассеянные по поверхности дефекты

могут существенно повлиять на этот факт. Однако они, несомненно, могут усложнить картину как раз за счет неопределенности начального положения вырванных из ловушек электронов, особенно по мере роста температуры в процессе рекомбинации.

6. Заключение

Таким образом, оба важнейших эффекта рекомбинационного излучения квантовых нитей во внешнем электрическом поле – модуляцию интенсивности (intensity modulation) и пространственную модуляцию (spatial modulation), обнаруженные в экспериментах [4–6], – естественным образом объясняет само влияние электрического поля на движение свободных носителей заряда и на эффект рекомбинации. Первый эффект, если коротко, связан с тем, что вероятность рекомбинации содержит квадраты функций Эйри, сильно осциллирующие с ростом напряженности поля. Второй эффект обусловлен требованием выполнения дисперсионных соотношений (фактически законом сохранения энергии – импульса) для излучаемого в результате рекомбинации фотона. На наш взгляд, очевидно, что влияние поверхностных дефектов-ловушек, из которых электрическое поле вырывает электроны (эффект Пула–Френкеля), играет в этом процессе лишь вспомогательную роль, а главный результат проведенного исследования состоит в том, что процесс однофотонной рекомбинации в квантовых нитях с продольным электрическим полем способен генерировать мощное, близкое к монохроматическому и направленное излучение, частота которого управляется полем.

Разумеется, реальная картина в эксперименте будет много сложнее описанной выше. Кроме пар в основном состоянии, рекомбинацию которых мы рассмотрели, могут рекомбинировать и квазичастицы в возбужденном состоянии с ненулевыми квантовыми числами поперечного движения. Это приведет к излучению фотонов под различными углами к оси нити. Кроме однофотонной, возможны двух- и трехфотонная рекомбинации и ожерекомбинация [7], также нарушающие монохроматичность и направленность излучения. Хотя вероятность их на два порядка меньше однофотонной, но и «правила отбора» для них гораздо менее жесткие. Очевидно, что безызлучательная рекомбинация, также сопровождающая процесс, приведет к повышению температуры, что тоже способствует «размыванию» области локализации излучения. В том же направлении работают дополнительные свободные заряды, вырванные из поверхност-

ных ловушек. Наконец, мы совсем не рассматривали случай переменного поля. Очевидно, что модуляция поля во времени приведет к индуцированному колебательному движению точек локализации излучения и переменной интенсивности процессов рекомбинации. Важным подтверждением нашей модели является тот факт, что эффект локализации пропадает при превышении некоторой пороговой частоты внешнего поля. Ясно, что в этом случае квазичастицам просто не хватает времени цикла, чтобы «достаточно разогнаться» навстречу друг другу в электрическом поле, а именно это в первую очередь и обуславливает как монохроматичность излучения, так и эффект его локализации в квантовой нити.

Авторы выражают благодарность аспиранту кафедры физики СТАНКИНа Исламу Демильханову за помощь в работе.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (договор № 23-29-00559).

1. Kapon E. et al. *Proc. IEEE*, **80** (3), 398 (1992). DOI: 10.1109/5.135356.
2. Arai S., Maruyama T. *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.* (2009). DOI: 10.1109/JSTQE.2008.2010872.
3. Ансельм А.И. *Введение в теорию полупроводников* (М.: Наука, 1978, гл. VII) [Anselm A.I. *Introduction to Semiconductor Theory* (Moscow: Science Publ., 1978, ch.VII)].
4. Vietmeyer F., McDonald M.P., Kuno M. *J. Phys. Chem. C*, **116** (23), 12379 (2012); <https://doi.org/10.1021/jp3010162>.
5. Protasenko V., Gordeev S., Kuno M. *J. Am. Chem. Soc.*, **129** (43), 13160 (2007); <http://doi.org/10.1021/ja073642w>.
6. Vietmeyer F., Tchelidze T., Tsou V., Janko B., Kuno M. *ACS Nano*, **6** (10), 9133 (2012); <http://doi.org/10.1021/nn3033997>.
7. Догонкин Е.Б., Зегря Г.Г., Полковников А.С. *ЖЭТФ*, **117** (2), 429 (2000) [*JETP*, **90** (2), 378 (2000)].
8. Сурис Р.А. *ФТП*, **20** (11), 2008 (1986).
9. Мандель А.М., Ошурко В.Б., Соломахо Г.И., Соломахо К.Г. *Радиотехника и электроника*, **63** (3), 268 (2018). DOI: 10.7868/S0033849418030087.
10. Мандель А.М., Ошурко В.Б., Веселко С.Г., Соломахо К.Г., Шарц А.А. *Успехи современной радиоэлектроники*, № 8, 18 (2019). DOI: 10.18127/j20700784-201907-08.
11. Мандель А.М., Ошурко В.Б., Першин С.М., Веселко С.Г., Карпова Е.Е., Шарц А.А., Аристархов А.А. *Кр. сообщ. физ. ФИАН*, № 10, 11 (2020). DOI: 10.3103/S1068335620100073.
12. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. *Квантовая механика. Нерелятивистская теория* (М.: Наука, 1974).
13. Мандель А.М., Ошурко В.Б., Соломахо Г.И., Соломахо К.Г., Веретин В.С. *Успехи современной радиоэлектроники*, № 8, 18 (2015).
14. Mandel A.I., Grigoryev S.N., Loskutov A.I., Oshurko V.S., Solomakho G.I. *J. Comput. Theor. Nanosci.*, **12** (10), 3036 (2015); <http://dx.doi.org/10.1166/jctn.2015.4078>.
15. <https://xumuk.ru/encyklopedia/1779.html>.