

# БЕЗЫЗЛУЧАТЕЛЬНЫЙ РЕЗОНАНСНЫЙ ПЕРЕНОС ЭНЕРГИИ МЕЖДУ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫМИ КВАНТОВЫМИ ТОЧКАМИ

*Д. М. Самосват\**, *О. П. Чикалова-Лузина*, *Г. Г. Зегря\*\**

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

Поступила в редакцию 27 мая 2014 г.

Выполнен микроскопический анализ механизмов безызлучательного переноса энергии в системе двух полупроводниковых квантовых точек, обусловленного кулоновским взаимодействием электронов донора и акцептора. Скорость переноса энергии вычислена для квантовых точек на основе соединений  $A_3B_5$  в рамках модели Кейна. Проанализированы условия, при которых возможен перенос энергии от донора к акцептору. Установлено, что подмешивание  $p$ -состояний валентной зоны к  $s$ -состояниям зоны проводимости приводит к появлению дополнительных вкладов в матричный элемент переноса энергии. Показано, что дополнительные вклады играют существенную роль в процессе переноса при расстояниях между квантовыми точками как близких к контактному, так и значительно больших. Выполнен анализ влияния обменного взаимодействия на механизм переноса энергии и показано, что для количественного описания процесса переноса вклад обменного взаимодействия должен приниматься во внимание при расстояниях между квантовыми точками близких к контактному.

DOI: 10.7868/S0044451015070081

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Перенос энергии электронного возбуждения между квантовыми системами представляет одну из важных фундаментальных задач современной физики [1]. Суть явления состоит в том, что энергия электронного возбуждения донора энергии (атома, молекулы, полупроводниковой квантовой точки или квантовой ямы) передается акцептору энергии. Разделяют следующие механизмы переноса энергии: хорошо известный излучательный механизм — когда донор излучает фотон, а акцептор его затем поглощает (см., например, [2]); безызлучательный механизм — когда энергия передается от донора к акцептору одноступенчатым механизмом, в отличие от излучательного переноса энергии [3, 4]; механизм переноса электрона — когда возбужденный электрон донора энергии передается акцептору [5]. Два последних механизма осуществляют тушение люминесценции донора, однако первый из них приводит

к сенсibilизированной флюоресценции акцептора, а второй — к образованию положительно заряженного донора и отрицательно заряженного акцептора (в случае молекул — пары ионов). Эти механизмы фундаментально различны: безызлучательный перенос энергии происходит благодаря кулоновскому взаимодействию электронов донора и акцептора энергии, перенос электрона определяется только перекрытием волновых функций соответствующих состояний донора и акцептора. Явление безызлучательного переноса энергии впервые наблюдалось в 1923 г. в экспериментах по сенсibilизированной флюоресценции атомов в газовой фазе [6]. Позднее подобные эксперименты были выполнены для паров молекул [7], для жидких растворов красителей [8–10], для твердых растворов органических молекул [11]. Параллельно множество исследований выявило роль безызлучательного переноса энергии в биологических системах (в частности, в фотосинтезе) [12] (см. также ссылки в [13]). Впоследствии метод, основанный на переносе энергии между молекулами органических красителей, нашел широкое применение в биологических и медицинских экспериментах (см., например, [14, 15]).

\*E-mail: samosvat@yandex.ru

\*\*E-mail: zegrya@theory.ioffe.ru

В системах, включающих полупроводниковые квантовые точки (КТ), безызлучательный перенос энергии впервые наблюдался в 1996 году [16] и в последующие годы стал интенсивно исследоваться как экспериментально [17], так и теоретически [18–21]. Интерес вызван прежде всего тем, что использование квантовых точек расширило возможности био- и медицинских экспериментов, как *in vivo*, так и *in vitro*, благодаря их уникальным оптическим свойствам (узкие спектры люминесценции, возможность изменять спектральные характеристики за счет изменения размера квантовой точки ввиду квантово-размерного эффекта) [22]. Наряду с оптическими характеристиками, фотостабильность и химическая стабильность выгодно отличают квантовые точки от органических красителей, традиционно применяемых в этой области исследований. В литературе обсуждается возможность технических приложений механизма безызлучательного переноса энергии между квантовыми точками для создания быстродействующих квантовых компьютеров [23, 24], полупроводниковых лазеров на квантовых точках [25, 26], солнечных элементов [27], что также стимулирует изучение этого физического процесса.

Первое квантовомеханическое описание безызлучательного резонансного переноса энергии было разработано Ферстером для молекулярных систем [3]. Он предположил, что перенос энергии происходит преимущественно в результате диполь-дипольных взаимодействий молекул. Затем теория была расширена Декстером путем включения диполь-квадрупольного и обменного взаимодействий [4]. Выполненные впоследствии теоретические рассуждения и экспериментальные исследования позволяют считать явление переноса энергии между молекулами в настоящее время изученным достаточно. В последнее время теория Ферстера, однако, применяется и для интерпретации данных экспериментов по переносу энергии между квантовыми точками, что представляется не вполне обоснованным [22].

Теория безызлучательного резонансного переноса энергии в системах, включающих полупроводниковые квантовые структуры, разработана пока недостаточно и является предметом современных исследований. В работе [28] впервые был рассмотрен безызлучательный резонансный перенос энергии в гибридной наноструктуре, состоящей из полупроводниковой квантовой ямы и слоя органического акцептора. Анализ, выполненный с использованием приближения эффективной массы для описания экситона Ванье–Мотта в полупроводниковой квантовой яме и макроскопического электродинами-

ческого описания органической среды, показал высокую эффективность безызлучательного переноса энергии экситона к органической молекуле с возможным последующим излучением света. Авторы предсказали возможность использования таких гибридных структур для оптической накачки органических источников излучения. Затем с использованием того же теоретического подхода был выполнен анализ механизма безызлучательного резонансного переноса энергии от полупроводниковой квантовой точки к органической матрице [29]. Было показано, что в рамках этого механизма возможна передача значительной части энергии от квантовой точки к окружающим ее оптически активным органическим молекулам. Авторы данной работы отметили, что при электрической накачке квантовой точки этот эффект проявляется ярче, чем при оптической накачке. В работах [30–33] теория переноса энергии в гибридных наноструктурах получила дальнейшее развитие.

Механизм безызлучательного переноса энергии между квантовыми точками исследовался с использованием различных теоретических подходов: метода сильной связи [18], метода полуэмпирического псевдопотенциала [19], простой модели эффективной массы [20, 21]. В работах [18, 19] показано, что диполь-дипольная аппроксимация кулоновского взаимодействия электронов квантовой точки-донора и квантовой точки-акцептора дает адекватное описание безызлучательного переноса энергии в случае прямозонных полупроводников, а зависимость скорости переноса  $W$  от расстояния между квантовыми точками  $d$  описывается простым законом  $W \propto 1/d^6$ . Вклады более высоких мультиполей пренебрежимо малы вплоть до контактных расстояний между донором и акцептором. Для непрямозонных полупроводников мультипольные члены более существенны, однако диполь-дипольные вклады остаются доминирующими. Авторами работы [20] было получено, что диполь-дипольный вклад в скорость переноса энергии, как правило, больше диполь-квадрупольного вклада, однако для количественного описания диполь-квадрупольный вклад, зависящий от расстояния между квантовыми точками как  $1/d^8$ , должен приниматься во внимание для малых расстояний, сравнимых с размерами квантовых точек. В работе [21] было показано, что диполь-дипольное приближение справедливо для описания переноса энергии при дипольно-разрешенных переходах в доноре и акцепторе для всех расстояний между квантовыми точками вплоть до расстояний близких к контактным. Также было показано, что скорость пере-

носа энергии от донора к акцептору, соответствующая дипольно-запрещенным переходам в акцепторе, также играет существенную роль и при расстояниях близких к контактным вклад его может достигать 25 % в сравнении с вкладом переноса при дипольно-разрешенном переходе. Авторы работы [21] при исследовании переноса энергии между квантовыми точками пренебрегли обменным взаимодействием, считая его несущественным. Таким образом, имеются определенное соответствие результатов этих работ [18–21] для больших расстояний между донором и акцептором и значительное расхождение при малых расстояниях.

В настоящей работе предложена микроскопическая теория механизма безызлучательного резонансного переноса энергии между сферическими квантовыми точками на основе полупроводников  $A_3B_5$ . Используемые ранее модели не позволяют учитывать реальный спектр полупроводников  $A_3B_5$  и ряд новых эффектов, им обусловленных. Мы используем модель Кейна как наиболее адекватно описывающую реальный спектр полупроводников  $A_3B_5$  [34, 35]. При учете подмешивания состояний валентной зоны к состояниям зоны проводимости в полном матричном элементе кулоновского взаимодействия появляются дополнительные слагаемые. Мы в рамках модели Кейна получили выражения для матричного элемента переноса энергии, обусловленного прямым кулоновским взаимодействием электронов донора и акцептора, и также их обменным взаимодействием. Определены вклады в матричный элемент кулоновского взаимодействия за счет подмешивания  $p$ -состояний валентной зоны к  $s$ -состояниям зоны проводимости. Найдены правила отбора, определяющие дипольно-разрешенные и дипольно-запрещенные переходы в доноре и акцепторе, при которых матричный элемент переноса энергии отличен от нуля. Показано, что учет реальной зонной структуры полупроводников приводит к расширению класса дипольно-разрешенных и дипольно-запрещенных переходов, активных в переносе энергии. Для всех вкладов найдена зависимость скорости переноса энергии от расстояния между донором и акцептором. Показано, что при расстояниях близких к контактным становится важным вклад обменного взаимодействия электронов донора и акцептора.

В работе рассматривается система двух сферических квантовых точек, расположенных на конечном расстоянии  $d$  друга от друга (рис. 1). Предполагается, что квантовые точки изготовлены из одного и того же материала и помещены в матрицу

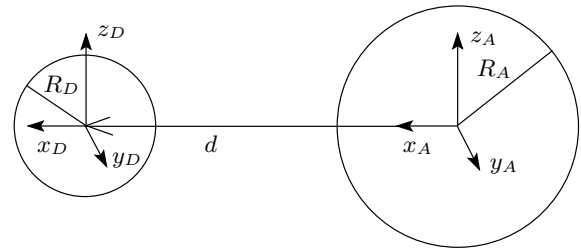


Рис. 1. Схема двух квантовых точек: донора с радиусом  $R_D$  и акцептора с радиусом  $R_A$

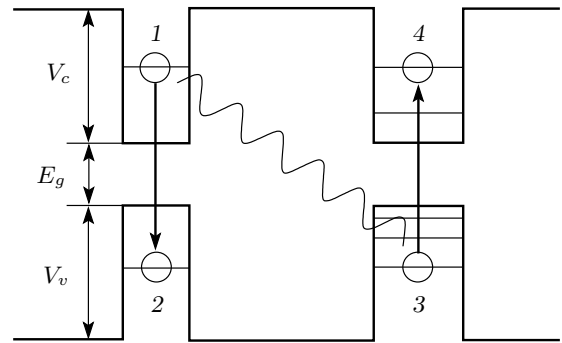


Рис. 2. Схематическое изображение процесса безызлучательного резонансного переноса энергии. Показано начальное состояние системы (электроны 1 и 3) и конечное (электроны 2 и 4)

из другого материала, создающего потенциальные барьеры конечной высоты для электронов ( $V_{cD}$  и  $V_{cA}$ ) и для дырок ( $V_{vD}$  и  $V_{vA}$ ). Индексы  $D$  и  $A$  соответствуют квантовой точке-донору и квантовой точке-акцептору энергии. В процессе безызлучательного переноса энергии возбужденный электрон донора (1 на рис. 2) рекомбинирует с дыркой (2 на рис. 2), при этом энергия возбуждения передается электрону валентной зоны акцептора и в акцепторе возникает электрон-дырочная пара (3 и 4 на рис. 2). Электрон-фононное взаимодействие в этой работе не включено в рассмотрение, поскольку рассматривается только резонансный процесс. Также заметим, что процесс безызлучательного переноса энергии аналогичен рассмотренному нами ранее процессу оже-рекомбинации в квантовой точке [36]. Однако в отличие от оже-рекомбинации, когда взаимодействующие электроны локализованы в пределах одной квантовой точки, перенос энергии происходит в результате взаимодействия электронов, локализованных в разных квантовых точках — доноре и акцепторе энергии.

## 2. ВОЛНОВЫЕ ФУНКЦИИ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА

Мы рассматриваем резонансный перенос энергии между сферическими квантовыми точками на основе полупроводников  $A_3B_5$ . Зонная структура таких полупроводников хорошо описывается в рамках модели Кейна [35]. Волновые функции носителей зарядов могут быть записаны как

$$\psi = \psi_s |s\rangle + \psi |p\rangle, \quad (1)$$

где  $|s\rangle$  и  $|p\rangle$  — блоховские функции  $s$ - и  $p$ -типа. Функции  $s$ -типа описывают состояние в зоне проводимости,  $p$ -типа описывают состояние валентной зоны;  $\psi_s$  и  $\psi$  — огибающие функции. Уравнения Кейна для огибающих функций имеют вид [36]

$$\begin{aligned} (E_g + \delta - E)\psi_s - i\hbar\gamma\nabla \cdot \psi &= 0, \\ -E\psi - i\hbar\gamma\nabla\psi_s + \frac{\hbar^2}{2m}(\gamma_1 + 4\gamma_2)\nabla(\nabla \cdot \psi) - \\ - \frac{\hbar^2}{2m}(\gamma_1 - 2\gamma_2)\nabla \times (\nabla \times \psi) + i\delta\sigma \times \psi &= 0, \end{aligned} \quad (2)$$

где  $\sigma$  — матрицы Паули,  $\delta = \Delta_{so}/3$  ( $\Delta_{so}$  — константа спин-орбитального взаимодействия),  $\gamma$  — кейновский матричный элемент, имеющий размерность скорости и связанный с матричным элементом оператора импульса между состояниями зоны проводимости и валентной зоны [37],  $\gamma_1, \gamma_2$  — обобщенные параметры Латтинжера,  $m$  — масса свободного электрона. Ниже, для простоты, мы рассматриваем случай, когда константа спин-орбитального взаимодействия  $\Delta_{so} = 0$ . Позднее обсудим влияние спин-орбитального взаимодействия на процесс переноса энергии. Решения уравнений Кейна в сферической системе координат были получены в работе [36]. Для огибающих функций электронов внутри КТ имеем

$$\begin{aligned} \psi_s &= A j_j(k_c r) Y_{jm}(\theta, \phi), \\ \psi &= -\frac{i\hbar\gamma}{E_c + E_g} A k_c \left( \sqrt{\frac{j+1}{2j+1}} j_{j+1}(k_c r) \times \right. \\ &\times \mathbf{Y}_{jm}^{j+1}(\theta, \phi) + \left. \sqrt{\frac{j}{2j+1}} j_{j-1}(k_c r) \mathbf{Y}_{jm}^{j-1}(\theta, \phi) \right). \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь  $Y_{jm}(\theta, \phi)$  — сферические функции,  $\mathbf{Y}_{jm}^{j+1}(\theta, \phi)$  и  $\mathbf{Y}_{jm}^{j-1}(\theta, \phi)$  — векторные сферические гармоники,  $j$  и  $m$  — значения полного углового момента и его проекции на ось  $z$ , соответственно,  $j_j(k_c r)$  — сферическая функция Бесселя,  $E_g$  — ширина запрещенной зоны,  $E_c$  — энергия электронов, отсчитываемая от дна зоны проводимости,  $k$  — волновое число для электронов,  $A$  — нормировочная константа.

В работе [36] также были получены волновые функции электронов под барьером. В трехзонной модели Кейна состояния тяжелых дырок двукратно вырождены, так как спин-отщепленная зона сливается с зоной тяжелых дырок. Отвечающие тяжелым дыркам волновые функции имеют различные поляризации, которые определяются поляризациями шаровых векторов и не имеют компоненты  $\psi_s$ :

$$\begin{aligned} \psi_{h1} &= A_1 j_j(k_h r) \mathbf{Y}_{jm}^j(\theta, \phi), \\ \psi_{h2} &= A_2 \left( \sqrt{\frac{j}{2j+1}} j_{j+1}(k_h r) \mathbf{Y}_{jm}^{j+1}(\theta, \phi) - \right. \\ &\left. - \sqrt{\frac{j+1}{2j+1}} j_{j-1}(k_h r) \mathbf{Y}_{jm}^{j-1}(\theta, \phi) \right), \end{aligned} \quad (4)$$

где  $k_h$  — волновое число для дырки,  $A_1, A_2$  — нормировочные константы. Волновые функции тяжелых дырок под барьером также были получены в работе [36].

Главное квантовое число  $n_c$  и  $n_h$  в модели Кейна вводится как  $n$ -й корень дисперсионного соотношения соответственно для электронов и дырок. Выпишем эти дисперсионные соотношения, которые были получены в работе [36]. Для электронов это дисперсионное соотношение имеет вид

$$\begin{aligned} j_j(kR) \left[ \kappa \tilde{Z} \left( \frac{j k_j(\kappa R)}{\kappa R} - k_{j+1}(\kappa R) \right) \right] = \\ = k_j(\kappa R) \left[ kZ \left( \frac{j j_j(kR)}{kR} - j_{j+1}(kR) \right) \right], \end{aligned} \quad (5)$$

где  $Z = 1/(\mathcal{E} + E_g)$  — слева от барьера и  $\tilde{Z} = 1/(\mathcal{E} + E_g + V_v)$  — справа от барьера. Волновое число  $k$  имеет вид

$$k^2 = \frac{\mathcal{E}(\mathcal{E} + E_g)}{\hbar^2 \gamma^2}. \quad (6)$$

Выражение для  $\kappa$  имеет вид

$$\kappa^2 = \frac{(V_c - \mathcal{E})(\mathcal{E} + E_g + V_v)}{\hbar^2 \gamma^2}. \quad (7)$$

Аналогично, для дырок дисперсионное соотношение имеет вид

$$\begin{aligned} j_j(k_h R) \frac{\kappa_h}{k_h} \left[ j \left( \frac{(j+1) k_{j+1}(\kappa_h R)}{\kappa_h R} - k_{j+2}(\kappa_h R) \right) + \right. \\ \left. + (j+1) \left( \frac{(j-1) k_{j-1}(\kappa_h R)}{\kappa_h R} - k_j(\kappa_h R) \right) \right] = \\ = k_j(\kappa_h R) \frac{k_h}{\kappa_h} \left[ j \left( \frac{(j+1) j_{j+1}(k_h R)}{k_h R} - j_{j+2}(k_h R) \right) - \right. \\ \left. - (j+1) \left( \frac{(j-1) j_{j-1}(k_h R)}{k_h R} - j_j(k_h R) \right) \right]. \end{aligned} \quad (8)$$

Волновое число для дырок равно

$$k_h^2 = -2m_h E_h / \hbar^2. \quad (9)$$

Уравнения (5) и (8) совместно с законами дисперсии для электронов и дырок [36] определяют уровни размерного квантования электронов и дырок в КТ.

### 3. МАТРИЧНЫЙ ЭЛЕМЕНТ КУЛОНОВСКОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Для вычисления скорости безызлучательного переноса энергии между двумя квантовыми точками необходимо найти матричный элемент кулоновского взаимодействия электронов донора и акцептора для перехода системы из начального состояния в конечное (см. рис. 2). В начальном состоянии в доноре имеется электрон-дырочная пара, а электрон акцептора находится в валентной зоне, в конечном состоянии системы электрон-дырочная пара в акцепторе, а электрон донора — в валентной зоне. Таким образом, матричный элемент кулоновского взаимодействия имеет вид

$$M_{if} = \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \int d^3 r_1 d^3 r_2 \psi_f^*(\xi_1, \xi_2) \times \frac{e^2}{\varepsilon |\mathbf{d} + \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \psi_i(\xi_1, \xi_2), \quad (10)$$

где  $\varepsilon$  — статическая диэлектрическая проницаемость,  $\xi_i = (\mathbf{r}_i, \sigma_i)$ . Здесь  $\sigma$  — спиновые переменные;  $\mathbf{r}_1$  и  $\mathbf{r}_2$  — координаты носителей заряда соответственно в доноре и акцепторе. Начальным и конечным состояниям системы отвечают антисимметризованные произведения:

$$\begin{aligned} \psi_i(\xi_1, \xi_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{cD}(\mathbf{r}_1) \chi_{cD}(\sigma_1) \psi_{hA}(\mathbf{r}_2) \times \\ &\times \chi_{hA}(\sigma_2) - \psi_{cD}(\mathbf{r}_2) \chi_{cD}(\sigma_2) \psi_{hA}(\mathbf{r}_1) \chi_{hA}(\sigma_1)), \quad (11) \\ \psi_f(\xi_1, \xi_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{hD}(\mathbf{r}_1) \chi_{hD}(\sigma_1) \psi_{cA}(\mathbf{r}_2) \times \\ &\times \chi_{cA}(\sigma_2) - \psi_{hD}(\mathbf{r}_2) \chi_{hD}(\sigma_2) \psi_{cA}(\mathbf{r}_1) \chi_{cA}(\sigma_1)), \end{aligned}$$

где  $\chi(\sigma)$  — спиновые волновые функции,  $\psi_{cD}(\mathbf{r}_1)$  — координатные волновые функции электрона и  $\psi_{hD}(\mathbf{r}_1)$  — координатные волновые функции дырок в доноре (аналогично для акцептора). В результате матричный элемент кулоновского взаимодействия разделяется на два вклада: прямой кулоновский матричный элемент  $M_{Coul}$  и обменный матричный элемент  $M_{ex}$ :

$$M_{if} = M_{Coul} - M_{ex}, \quad (12)$$

где прямой кулоновский матричный элемент имеет вид

$$M_{Coul} = \int d^3 r_1 d^3 r_2 \psi_{cD}(\mathbf{r}_1) \psi_{hD}^*(\mathbf{r}_1) \frac{e^2}{\varepsilon |\mathbf{d} + \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \times \psi_{cA}^*(\mathbf{r}_2) \psi_{hA}(\mathbf{r}_2) \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \chi_{hD}^*(\sigma_1) \chi_{cA}^*(\sigma_2) \times \chi_{cD}(\sigma_1) \chi_{hA}(\sigma_2), \quad (13)$$

обменный матричный элемент равен

$$M_{ex} = \int d^3 r_1 d^3 r_2 \psi_{cD}(\mathbf{r}_1) \psi_{cA}^*(\mathbf{r}_1) \frac{e^2}{\varepsilon |\mathbf{d} + \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \times \psi_{hD}^*(\mathbf{r}_2) \psi_{hA}(\mathbf{r}_2) \sum_{\sigma_2, \sigma_1} \chi_{hD}^*(\sigma_2) \chi_{cA}^*(\sigma_1) \times \chi_{cD}(\sigma_1) \chi_{hA}(\sigma_2). \quad (14)$$

Из выражения (13) следует, что прямой кулоновский матричный элемент не равен нулю, если  $\chi_{cD} = \chi_{hD}$  и  $\chi_{cA} = \chi_{hA}$ , т.е. если переходы как в доноре, так и в акцепторе происходят с сохранением спина. Для обменного матричного элемента (14) спиновые правила отбора другие: он не равен нулю, если  $\chi_{cD} = \chi_{cA}$  и  $\chi_{hD} = \chi_{hA}$ . Однако при этом не является необходимым, чтобы  $\chi_c(D, A) = \chi_h(D, A)$ , так что спины для донора и акцептора могут изменяться одновременно при сохранении полного спина системы.

#### 3.1. Матричный элемент прямого кулоновского взаимодействия

Для вычисления матричного элемента прямого кулоновского взаимодействия удобно использовать фурье-представление для потенциальной энергии:

$$\frac{e^2}{\varepsilon |\mathbf{d} + \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \frac{1}{\varepsilon 2\pi^2} \int d^3 q \frac{1}{q^2} \exp(i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{d} + \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)). \quad (15)$$

Тогда матричный элемент (13) принимает вид

$$M_{Coul} = \frac{1}{\varepsilon 2\pi^2} \int d^3 q \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{d}) \frac{1}{q^2} I_D(q) I_A^*(q), \quad (16)$$

где

$$\begin{aligned} I_D(\mathbf{q}) &= \int d^3 r_1 \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_1) \psi_{cD}(\mathbf{r}_1) \psi_{hD}^*(\mathbf{r}_1), \\ I_A(\mathbf{q}) &= \int d^3 r_2 \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_2) \psi_{cA}(\mathbf{r}_2) \psi_{hA}^*(\mathbf{r}_2). \end{aligned} \quad (17)$$

Выражения  $I_D$  и  $I_A$  играют роль интегралов перекрытия электронных и дырочных состояний соответственно донора и акцептора. Для электронов и

тяжелых дырок в доноре волновые функции, согласно (1), (3) и (4) могут быть записаны как

$$\begin{aligned}\psi_{cD}(\mathbf{r}_1) &= \psi_{cSD}(\mathbf{r}_1) |s\rangle + \psi_{cD}(\mathbf{r}_1) |\mathbf{p}\rangle, \\ \psi_{hD}(\mathbf{r}_1) &= \psi_{hD}(\mathbf{r}_1) |\mathbf{p}\rangle.\end{aligned}\quad (18)$$

Поскольку в нашей модели ( $\Delta_{so} = 0$ ) существуют две тяжелые дырки разной поляризации, под  $\psi_h$  следует понимать соответствующие волновые функции тяжелых дырок  $\psi_{h1}$  и  $\psi_{h2}$ . При учете (18) интеграл перекрытия  $I_D(\mathbf{q})$  принимает вид

$$\begin{aligned}I_D(\mathbf{q}) &= \int d^3\mathbf{r}_1 \langle \mathbf{p} | \psi_{hD}^*(\mathbf{r}_1) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_1) \times \\ &\times (\psi_{cSD}(\mathbf{r}_1) |s\rangle + \psi_{cD}(\mathbf{r}_1) |\mathbf{p}\rangle) = I_{D1} + I_{D2},\end{aligned}\quad (19)$$

где

$$\begin{aligned}I_{D1}(\mathbf{q}) &= \int d^3\mathbf{r}_1 \langle \mathbf{p} | \psi_{hD}^*(\mathbf{r}_1) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_1) \times \\ &\times (\psi_{cSD}(\mathbf{r}_1) |s\rangle)\end{aligned}\quad (20)$$

и

$$\begin{aligned}I_{D2}(\mathbf{q}) &= \int d^3\mathbf{r}_1 \langle \mathbf{p} | \psi_{hD}^*(\mathbf{r}_1) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_1) \times \\ &\times (\psi_{cD}(\mathbf{r}_1) |\mathbf{p}\rangle).\end{aligned}\quad (21)$$

Важно отметить, что  $I_{D1}$  — интеграл перекрытия без подмешивания состояний, а  $I_{D2}$  — интеграл перекрытия, учитывающий подмешивания состояний валентной зоны к состояниям зоны проводимости. Аналогично может быть представлен интеграл перекрытия для акцептора  $I_A$ :

$$\begin{aligned}I_A(\mathbf{q}) &= \int d^3\mathbf{r}_2 \langle \mathbf{p} | \psi_{hA}^*(\mathbf{r}_2) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_2) \times \\ &\times (\psi_{cSA}(\mathbf{r}_2) |s\rangle + \psi_{cA}(\mathbf{r}_2) |\mathbf{p}\rangle) = I_{A1} + I_{A2}.\end{aligned}\quad (22)$$

Тогда матричный элемент (16) может быть записан как

$$\begin{aligned}M_{Coul} &= \frac{4\pi e^2}{\varepsilon} \int \frac{d^3q}{q^2(2\pi)^3} (I_{D1}I_{A1}^* + I_{D2}I_{A1}^* + \\ &+ I_{D1}I_{A2}^* + I_{D2}I_{A2}^*) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{d}).\end{aligned}\quad (23)$$

Первое слагаемое в выражении (23), пропорциональное произведению  $I_{D1}I_{A1}$ , представляет собой вклад в матричный элемент, соответствующий волновым функциям без учета подмешивания. При учете двух поляризаций тяжелых дырок эта часть матричного элемента (пропорциональная  $I_{D1}I_{A1}$ ) разбивается на два вклада,  $M_{Coul}^{(1)}$  и  $M_{Coul}^{(2)}$ . Последнее слагаемое в уравнении (23), пропорциональное  $I_{D2}I_{A2}$ ,

представляет вклад подмешивания  $s$ - и  $p$ -состояний  $M_{ad}^{(1)}$ . Второе и третье слагаемые в формуле (23),  $M_{ad}^{(2)} \propto I_{D2}I_{A1}$  и  $M_{ad}^{(3)} \propto I_{D1}I_{A2}$ , являются перекрестными членами.

Чтобы вычислить эти интегралы перекрытия, разделим интегрирование по быстроосциллирующей блоховской составляющей и интегрирование по медленноменяющейся огибающей волновой функции кристалла. Введем обозначение  $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_{k1} + \mathbf{r}_{D1}$ . Здесь  $\mathbf{r}_{k1}$  — радиус-вектор  $k$ -й элементарной ячейки, а  $\mathbf{r}_{D1}$  — радиус-вектор электрона внутри элементарной ячейки донора. Также введем объем одной элементарной ячейки  $V_0$ . Считаем, что плавная огибающая часть волновой функции медленно меняется на масштабах одной элементарной ячейки кристалла. При этом искомые интегралы могут быть представлены как

$$\begin{aligned}I_{D1}(\mathbf{q}) &= V_0 \sum_k \psi_{hD}^*(\mathbf{r}_{k1}) \psi_{cSD}(\mathbf{r}_{k1}) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_{k1}) \times \\ &\times \frac{1}{V_0} \int d^3r_{\alpha1} \langle \mathbf{p} | \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_{\alpha1}) |s\rangle\end{aligned}\quad (24)$$

и

$$\begin{aligned}I_{D2} &= V_0 \sum_k \psi_{hD}^*(\mathbf{r}_{k1}) \psi_{cD}(\mathbf{r}_{k1}) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_{k1}) \times \\ &\times \frac{1}{V_0} \int d^3r_{\alpha1} \langle \mathbf{p} | \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_{\alpha1}) |\mathbf{p}\rangle.\end{aligned}\quad (25)$$

Аналогичные выражения получаются и для акцептора:

$$\begin{aligned}I_{A1}(\mathbf{q}) &= V_0 \sum_k \psi_{hA}^*(\mathbf{r}_{k1}) \psi_{cSA}(\mathbf{r}_{k1}) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_{k1}) \times \\ &\times \frac{1}{V_0} \int d^3r_{\alpha1} \langle \mathbf{p} | \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_{\alpha1}) |s\rangle\end{aligned}\quad (26)$$

и

$$\begin{aligned}I_{A2} &= V_0 \sum_k \psi_{hA}^*(\mathbf{r}_{k1}) \psi_{cA}(\mathbf{r}_{k1}) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_{k1}) \times \\ &\times \frac{1}{V_0} \int d^3r_{\alpha1} \langle \mathbf{p} | \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_{\alpha1}) |\mathbf{p}\rangle.\end{aligned}\quad (27)$$

Далее используем длинноволновое приближение  $qa \ll 1$  ( $a$  — постоянная решетки полупроводника) и разложение  $\exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_{\alpha1})$  в ряд Тейлора, ограничиваясь первыми двумя членами  $\exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_{\alpha1}) \approx 1 + i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_{\alpha1})$ .

Рассмотрим выражение (24) для интеграла  $I_{D1}$ , не учитывающего подмешивания. Здесь ненулевой вклад в интеграл по объему элементарной ячейки

дает второй член разложения  $i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_{\alpha_1}$ . Заменяя суммирование по элементарным ячейкам интегрированием по объему КТ, для  $I_{D1}$  получим

$$I_{D1} \approx \int d^3\mathbf{r}_1 \psi_{hD}^*(\mathbf{r}_1) \psi_{cSD}(\mathbf{r}_1) \times \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_1) \langle \mathbf{p} | i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_\alpha | s \rangle. \quad (28)$$

Интеграл  $I_{D1}$  пропорционален матричному элементу оператора координаты  $\langle \mathbf{p} | \mathbf{r}_\alpha | s \rangle$ , который можно выразить через параметры полупроводника [37]:

$$\langle s | z | Z \rangle = P/E_g. \quad (29)$$

Здесь  $Z$  — компонента блоховской функции  $p$ -типа для валентной зоны, которая преобразуется как соответствующая координата, величина  $P = \hbar\gamma$  — параметр Кейна. Следует отметить, что в нашем рассмотрении не учитывается взаимная ориентация дипольных моментов переходов в доноре и в акцепторе, поскольку координатные оси в доноре и акцепторе полагаются параллельными. (Проведение усреднения по углам приводит к множителю  $2/3$  в матричном элементе.) В итоге интеграл  $I_{D1}$  принимает вид

$$I_{D1} = i \frac{P}{E_g} \int d^3r_1 (\mathbf{q} \cdot \psi_{hD}^*(\mathbf{r}_1)) \psi_{cSD}(\mathbf{r}_1) \times \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_1). \quad (30)$$

Рассмотрим выражение (25) для интеграла перекрытия  $I_{D2}(q)$ , связанного с подмешиванием  $p$ -состояний валентной зоны к  $s$ -состояниям зоны проводимости в (3). В разложении  $\exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_\alpha)$  в ряд Тейлора можно ограничиться первым членом. Тогда для  $I_{D2}$  можно получить следующее выражение:

$$I_{D2} = \int d^3r_1 \psi_{hD}^*(\mathbf{r}_1) \psi_{cD}(\mathbf{r}_1) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_1). \quad (31)$$

Здесь учтено, что  $\langle \mathbf{p} | \mathbf{p} \rangle = 1$ .

Переходим к вычислению интеграла  $I_{D1}$ , не включающего подмешивания. Для вычисления скалярного произведения в выражении (30) удобно воспользоваться его представлением в циклических координатах [38]:

$$\mathbf{q} \cdot \psi_{hD}^* = \sum_{\mu} q_{\mu} (\psi_{hD}^*)^{\mu}. \quad (32)$$

Ковариантные циклические координаты вектора  $\mathbf{q}$  могут быть представлены в виде

$$q_{\mu} = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} q Y_{1\mu}(\Omega_q), \quad (33)$$

где  $Y_{1\mu}(\Omega_q)$  — сферические функции. Для векторных сферических гармоник их ковариантные координаты представляются в виде [38]

$$(\mathbf{Y}_{jm}^l(\Omega))_{\mu} = C_{l,m+\mu,1,-\mu}^{jm} Y_{l,m+\mu}(\Omega) (-1)^{\mu}. \quad (34)$$

Здесь  $C_{l,m+\mu,1,-\mu}^{jm}$  — коэффициенты Клебша–Гордана.

Поскольку состояния тяжелых дырок двукратно вырождены (см. формулы (4)), вклад в скорость переноса дают два матричных элемента, соответствующих волновым функциям различной поляризации  $\psi_{h1}$  и  $\psi_{h2}$ , и мы их обозначим как  $M_{Coul}^{(1)}$  и  $M_{Coul}^{(2)}$ . Рассмотрим матричный элемент  $M_{Coul}^{(1)}$ , определяемый волновой функцией  $\psi_{h1}$ . Плоская волна в выражении (28) может быть представлена в виде разложения по сферическим функциям [38]:

$$\exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_1) = 4\pi \sum_{l_1=0}^{\infty} \sum_{m_1=-l_1}^{l_1} i^{l_1} j_{l_1}(qr_1) Y_{l_1 m_1}^*(\Omega_q) Y_{l_1 m_1}(\Omega_1). \quad (35)$$

В результате получим интеграл по углу  $\Omega_1$ , от трех сферических функций, который легко вычисляется [38]:

$$\int d\Omega_1 Y_{l_1 m_1}(\Omega_1) Y_{j_{cD} m_{cD}}(\Omega_1) Y_{j_{hD} m_{hD} + \mu_1}^*(\Omega_1) = \sqrt{\frac{(2l_1+1)(2j_{cD}+1)}{4\pi(2j_{hD}+1)}} \times C_{l_1,0,j_{cD},0}^{j_{hD},0} C_{l_1,m_1,j_{cD},m_{cD}}^{j_{hD},m_{hD}+\mu_1}. \quad (36)$$

Сферическая симметрия КТ позволяет устранить зависимость  $I_{D1}$  от угловых координат вектора  $\mathbf{q}$  [21]. В дальнейшем мы примем направление вектора  $\mathbf{q} \parallel \mathbf{d}$  и в (32) остается только слагаемое с  $\mu_1 = 0$  и  $\mu_2 = 0$  (учитывается только направление вдоль оси  $z$ ). Аналогичные преобразования могут быть выполнены для  $I_{A1}$ . Учитывая (32)–(36) и аналогичные выражения для акцептора, можно представить матричный элемент в следующем виде:

$$\begin{aligned}
M_{Coul}^{(1)} &= \frac{2}{\pi} \frac{e^2}{\varepsilon} \left( \frac{P}{E_g} \right)^2 A_{cD} A_{hD1} A_{cA} A_{hA1} \times \\
&\quad \times \int_0^{R_D} r_1^2 dr_1 \int_0^{R_A} r_2^2 dr_2 \times \\
&\quad \times \frac{1}{3} \sum_{l_1, l_2=0}^{\infty} (j_{j_{cD}}(k_{cD} r_1) j_{j_{hD}}(k_{hD} r_1)) \times \\
&\quad \times (j_{j_{cA}}(k_{cA} r_2) j_{j_{hA}}(k_{hA} r_2)) \times \\
&\quad \times \sqrt{\frac{2j_{cD}+1}{2j_{hD}+1}} \sqrt{\frac{2j_{cA}+1}{2j_{hA}+1}} C_{j_{hD}, m_{hD}, 1, 0}^{j_{hD}, m_{hD}} C_{j_{hA}, m_{hA}, 1, 0}^{j_{hA}, m_{hA}} \times \\
&\quad \times (2l_1+1)(2l_2+1) i^{l_1-l_2} C_{l_1, 0, j_{cD}, 0}^{j_{hD}, 0} C_{l_1, 0, j_{cD}, m_{cD}}^{j_{hD}, m_{hD}} \times \\
&\quad \times C_{l_2, 0, j_{cA}, 0}^{j_{hA}, 0} C_{l_2, 0, j_{cA}, m_{cA}}^{j_{hA}, m_{hA}} I(q), \quad (37)
\end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
I(q) &= \int dq q^2 d\Omega_q j_{l_1}(qr_1) j_{l_2}(qr_2) \times \\
&\quad \times \exp(iqd \cos(\theta_q)) (Y_{10}(\Omega_q))^2. \quad (38)
\end{aligned}$$

Здесь  $R_D$  и  $R_A$  — радиусы квантовых точек соответственно донора и акцептора,  $A_{cD}$  и  $A_{hD1}$  — нормировочные константы соответственно для волновых функций электронов и дырок донора (аналогично для акцептора),  $k_{cD}$  и  $k_{hD}$  — волновые числа для электронов и дырок донора, соответственно (аналогично для акцептора). Отметим, что в матричном элементе можно ограничиться интегрированием по области квантовой точки, так как волновая функция тяжелых дырок быстро затухает под барьером. Далее сформулируем правила отбора для матричного элемента  $M_{Coul}^{(1)}$ :

$$\begin{aligned}
m_{cA} &= m_{hA}, \\
m_{cD} &= m_{hD}, \\
l_1 + j_{cD} + j_{hD} &— \text{четное}, \\
l_2 + j_{cA} + j_{hA} &— \text{четное}, \\
|l_1 - j_{cD}| &\leq j_{hD} \leq l_1 + j_{cD}, \\
|l_2 - j_{cA}| &\leq j_{hA} \leq l_2 + j_{cA}.
\end{aligned} \quad (39)$$

Правила отбора (39) следуют из свойств симметрии коэффициентов Клебша–Гордана в выражении (37). Для интегрирования по  $q$  в (38) воспользуемся следующим разложением плоской волны:

$$\begin{aligned}
\exp(iqd \cos \theta_q) &= \\
&= \sqrt{4\pi} \sum_{l=0}^{\infty} i^l j_l(qd) \sqrt{2l+1} Y_{l0}(\Omega_q). \quad (40)
\end{aligned}$$

Произведение двух сферических функций выражается как [38]

$$\begin{aligned}
(Y_{10}(\Omega_q))^2 &= \\
&= \sum_{LM} \sqrt{\frac{9}{4\pi(2L+1)}} C_{1010}^{L0} C_{1010}^{LM} Y_{LM}(\Omega_q). \quad (41)
\end{aligned}$$

В силу свойств симметрии коэффициентов Клебша–Гордана в выражении (41) отличны от нуля только коэффициенты, для которых  $L = 0, 2$ . В этом случае  $l = L = 0, 2$ . Таким образом, интеграл (38) может быть представлен в виде

$$I(q) = \frac{1}{d^3} (I_0 - 2I_2), \quad (42)$$

где

$$I_l = \int_0^{\infty} t^2 dt j_l(t) j_{l_1}(tr_1/d) j_{l_2}(tr_2/d); \quad (43)$$

$l$  принимает два значения: 0 и 2. Интеграл (43) может быть выражен через гипергеометрическую функцию Аппеля  $F_4(a, b, c, d; x, y)$  [40]:

$$\begin{aligned}
I_l &= \pi^{\frac{3}{2}} \frac{1}{2} \left( \frac{r_1}{d} \right)^{l_1} \left( \frac{r_2}{d} \right)^{l_2} \times \\
&\quad \times \left[ \frac{\Gamma\left(\frac{l_1+l_2+l+3}{2}\right)}{\Gamma\left(l_1+\frac{3}{2}\right) \Gamma\left(l_2+\frac{3}{2}\right) \Gamma\left(\frac{l-(l_1+l_2)}{2}\right)} \times \right. \\
&\quad \times F_4\left(\frac{l_1+l_2-l+2}{2}, \frac{l_1+l_2+l+3}{2}; \right. \\
&\quad \left. \left. l_1+\frac{3}{2}, l_2+\frac{3}{2}; \left(\frac{r_1}{d}\right)^2, \left(\frac{r_2}{d}\right)^2 \right) \right], \quad (44)
\end{aligned}$$

где  $\Gamma(x)$  — гамма-функция. Вычисленный интеграл входит в выражение для матричного элемента (37). Из свойств  $\Gamma$ -функции следует, что матричный элемент  $M_{Coul}^{(1)}$  отличен от нуля, если выполняется одно из условий:

$$\begin{aligned}
1) \quad l_1 = l_2 = 0, \\
2) \quad l_1 + l_2 — \text{нечетное}.
\end{aligned} \quad (45)$$

Подставляя выражение (42) в (37), получаем следующее выражение для матричного элемента:



$$\begin{aligned}
 M_{Coul}^{(1)} &= \frac{2}{\pi} \frac{e^2}{\varepsilon d^3} \left( \frac{P}{E_g} \right)^2 A_{cD} A_{hD1} A_{cA} A_{hA1} \times \\
 &\quad \times \int_0^{R_D} r_1^2 dr_1 \int_0^{R_A} r_2^2 dr_2 \times \\
 &\quad \times \frac{1}{3} \sum_{l_1, l_2=0}^{\infty} (j_{j_{cD}}(k_{cD} r_1) j_{j_{hD}}(k_{hD} r_1)) \times \\
 &\quad \times (j_{j_{cA}}(k_{cA} r_2) j_{j_{hA}}(k_{hA} r_2)) \times \\
 &\quad \times \sqrt{\frac{2j_{cD}+1}{2j_{hD}+1}} \sqrt{\frac{2j_{cA}+1}{2j_{hA}+1}} C_{l_1,0,j_{cD},0}^{j_{hD},m_{hD}} C_{l_1,0,j_{cD},m_{cD}}^{j_{hA},m_{hA}} \times \\
 &\quad \times (2l_1+1)(2l_2+1) i^{l_1-l_2} C_{l_1,0,j_{cD},0}^{j_{hD},0} C_{l_1,0,j_{cD},m_{cD}}^{j_{hD},m_{hD}} \times \\
 &\quad \times C_{l_2,0,j_{cA},0}^{j_{hA},0} C_{l_2,0,j_{cA},m_{cA}}^{j_{hA},m_{hA}} (I_0 - 2I_2). \quad (46)
 \end{aligned}$$

В том случае, когда  $l_1 = l_2 = 0$ ,

$$\begin{aligned}
 I_0 &= 0, \\
 I_2 &= \pi^{3/2} \frac{1}{2} \frac{\Gamma(5/2)}{\Gamma(3/2)\Gamma(3/2)\Gamma(1)} = \frac{3\pi}{2}. \quad (47)
 \end{aligned}$$

Выполняя интегрирование по  $r_1$  и по  $r_2$ , получаем

$$\begin{aligned}
 M_{Coul}^{(1)} &= \frac{e^2}{\varepsilon d^3} \left( \frac{P}{E_g} \right)^2 A_{cD} A_{hD1} A_{cA} A_{hA1} \times \\
 &\quad \times (k_{hD} j_{j_{hD}-1}(k_{hD} R_D) j_{j_{cD}}(k_{cD} R_D) - \\
 &\quad - k_{cD} j_{j_{hD}}(k_{hD} R_D) j_{j_{cD}-1}(k_{cD} R_D)) \frac{R_D^2}{k_{cD}^2 - k_{hD}^2} \times \\
 &\quad \times (k_{hA} j_{j_{hA}-1}(k_{hA} R_A) j_{j_{cA}}(k_{cA} R_A) - \\
 &\quad - k_{cA} j_{j_{hA}}(k_{hA} R_A) j_{j_{cA}-1}(k_{cA} R_A)) \frac{R_A^2}{k_{cD}^2 - k_{hD}^2} \times \\
 &\quad \times C_{j_{hD},m_{hD},1,0}^{j_{hD},m_{hD}} C_{j_{hA},m_{hA},1,0}^{j_{hA},m_{hA}} \times \\
 &\quad \times \delta_{j_{cD},j_{hD}} \delta_{m_{cD},m_{hD}} \delta_{j_{cA},j_{hA}} \delta_{m_{cA},m_{hA}}. \quad (48)
 \end{aligned}$$

Из правил отбора (39) следует, что при  $l_1 = l_2 = 0$  матричный элемент отличен от нуля, если переходы, как в доноре, так и в акцепторе вовлекают состояния дырок и электронов с равными угловыми моментами  $j_{cD} = j_{hD}$  и  $j_{cA} = j_{hA}$ , т. е. если переходы дипольно-разрешенные. Этим значениям  $l_1$  и  $l_2$  соответствует зависимость матричного элемента переноса энергии от расстояния между донором и акцептором вида  $M_{Coul}^{(1)} \propto 1/d^3$ , как это следует из выражений (44) и (46). При нечетном  $l_1 + l_2$  суммы угловых моментов состояний, вовлеченных в переход,  $j_{cD} + j_{hD}$  и  $j_{cA} + j_{hA}$  должны иметь противоположную четность. Минимальные возможные значения  $l_1$  и  $l_2$  — соответственно 0 и 1. При этом условия, налагаемые на допустимые значения угловых моментов в (39), имеют вид  $j_{cD} = j_{hD}$  и  $|1 - j_{cA}| \leq j_{hA} \leq 1 + j_{cA}$ .

В акцепторе, согласно этому, вклад в матричный элемент кулоновского взаимодействия могут давать только дипольно-запрещенные переходы. В этих случаях  $M_{Coul}^{(1)}$  зависит от расстояния между донором и акцептором как  $1/d^4$ . Для того чтобы матричный элемент был отличен от нуля, соотношение радиусов донора и акцептора  $R_D$  и  $R_A$  должно быть всегда таким, при котором энергия перехода в доноре равна энергии перехода в акцепторе. Очевидно, что в случае квантовых точек с  $R_D = R_A$  в резонанс попадают переходы между уровнями с совпадающими значениями угловых моментов, как дырок, так и электронов для обеих квантовых точек.

Рассмотрим теперь матричный элемент  $M_{Coul}^{(2)}$  с волновой функцией тяжелой дырки второй поляризации  $\psi_{h2}$ . Вычисление данного матричного элемента может быть выполнено аналогично вычислению  $M_{Coul}^{(1)}$ . Полученное выражение для  $M_{Coul}^{(2)}$  имеет вид

$$\begin{aligned}
 M_{Coul}^{(2)} &= \frac{e^2}{\varepsilon d^3} \frac{2}{3\pi} \left( \frac{P}{E_g} \right)^2 A_{cD} A_{hD2} A_{cA} A_{hA2} \times \\
 &\quad \times \int_0^{R_D} \int_0^{R_A} dr_1 r_1^2 dr_2 r_2^2 \times \\
 &\quad \times \sum_{l_1, l_2=0}^{\infty} \left( j_{j_{cD}}(k_{cD} r_1) \left( \sqrt{\frac{j_{hD}}{2j_{hD}+1}} j_{j_{hD}+1}(k_{hD} r_1) \times \right. \right. \\
 &\quad \times C_{j_{hD}+1,m_{hD},1,0}^{j_{hD},m_{hD}} \sqrt{\frac{2j_{cD}+1}{2j_{hD}+3}} C_{l_1,0,j_{cD},0}^{j_{hD}+1,0} C_{l_1,0,j_{cD},m_{cD}}^{j_{hD}+1,m_{hD}} - \\
 &\quad - \sqrt{\frac{j_{hD}+1}{2j_{hD}+1}} j_{j_{hD}-1}(k_{hD} r_1) C_{j_{hD}-1,m_{hD},1,0}^{j_{hD},m_{hD}} \times \\
 &\quad \times \left. \left. \sqrt{\frac{2j_{cD}+1}{2j_{hD}-1}} C_{l_1,0,j_{cD},0}^{j_{hD}-1,0} C_{l_1,0,j_{cD},m_{cD}}^{j_{hD}-1,m_{hD}} \right) \right) \times \\
 &\quad \times \left( j_{j_{cA}}(k_{cA} r_2) \left( \sqrt{\frac{j_{hA}}{2j_{hA}+1}} j_{j_{hA}+1}(k_{hA} r_2) \times \right. \right. \\
 &\quad \times C_{j_{hA}+1,m_{hA},1,0}^{j_{hA},m_{hA}} \sqrt{\frac{2j_{cA}+1}{2j_{hA}+3}} C_{l_2,0,j_{cA},0}^{j_{hA}+1,0} C_{l_2,0,j_{cA},m_{cA}}^{j_{hA}+1,m_{hA}} - \\
 &\quad - \sqrt{\frac{j_{hA}+1}{2j_{hA}+1}} j_{j_{hA}-1}(k_{hA} r_2) C_{j_{hA}-1,m_{hA},1,0}^{j_{hA},m_{hA}} \times \\
 &\quad \times \left. \left. \sqrt{\frac{2j_{cA}+1}{2j_{hA}-1}} C_{l_2,0,j_{cA},0}^{j_{hA}-1,0} C_{l_2,0,j_{cA},m_{cA}}^{j_{hA}-1,m_{hA}} \right) \right) \times \\
 &\quad \times i^{l_1-l_2} (2l_1+1)(2l_2+1) (I_0 - 2I_2), \quad (49)
 \end{aligned}$$

где  $I_0$  и  $I_2$  представлены выражением (44). Из свойств  $\Gamma$ -функции в (44) следует, что  $M_{Coul}^{(2)} \neq 0$  при

$$\begin{aligned} l_1 + l_2 &= 0, \\ l_1 + l_2 &\text{ — нечетное.} \end{aligned} \quad (50)$$

Из свойств симметрии коэффициентов Клебша–Гордана следуют правила отбора для матричного элемента кулоновского взаимодействия  $M_{Coul}^{(2)}$ :

$$\begin{aligned} m_{cA} &= m_{hA}, \\ m_{cD} &= m_{hD}, \\ l_1 + j_{cD} + j_{hD} &\text{ — нечетное,} \\ l_2 + j_{cA} + j_{hA} &\text{ — нечетное,} \\ |l_1 - j_{cD}| &\leq j_{hD} \pm 1 \leq l_1 + j_{cD}, \\ |l_2 - j_{cA}| &\leq j_{hA} \pm 1 \leq l_2 + j_{cA}, \\ j_{hD}, j_{hA} &\geq 1. \end{aligned} \quad (51)$$

В случае  $l_1 + l_2 = 0$  выражение (49) упрощается и приобретает следующий вид:

$$\begin{aligned} M_{Coul}^{(2)} &= \frac{e^2}{\varepsilon d^3} \left( \frac{P}{E_g} \right)^2 A_{cD} A_{hD} A_{cA} A_{hA} \times \\ &\times \int_0^{R_D} r_1^2 dr_1 \int_0^{R_A} r_2^2 dr_2 \times \\ &\times \left( j_{cD}(k_{cD} r_1) \left( \sqrt{\frac{j_{hD}}{2j_{hD} + 1}} j_{j_{hD} + 1}(k_{hD} r_1) \times \right. \right. \\ &\times C_{j_{hD} + 1, m_{hD}, 1, 0}^{j_{hD}, m_{hD}} \delta_{j_{cD}, j_{hD} + 1} \delta_{m_{cD}, m_{hD}} - \\ &\left. \left. - \sqrt{\frac{j_{hD} + 1}{2j_{hD} + 1}} j_{j_{hD} - 1}(k_{hD} r_1) \times \right. \right. \\ &\left. \left. \times C_{j_{hD} - 1, m_{hD}, 1, 0}^{j_{hD}, m_{hD}} \delta_{j_{cD}, j_{hD} - 1} \delta_{m_{cD}, m_{hD}} \right) \right) \times \\ &\times \left( j_{cA}(k_{cA} r_2) \left( \sqrt{\frac{j_{hA}}{2j_{hA} + 1}} j_{j_{hA} + 1}(k_{hA} r_2) \times \right. \right. \\ &\times C_{j_{hA} + 1, m_{hA}, 1, 0}^{j_{hA}, m_{hA}} \delta_{j_{cA}, j_{hA} + 1} \delta_{m_{cA}, m_{hA}} - \\ &\left. \left. - \sqrt{\frac{j_{hA} + 1}{2j_{hA} + 1}} j_{j_{hA} - 1}(k_{hA} r_2) \times \right. \right. \\ &\left. \left. \times C_{j_{hA} - 1, m_{hA}, 1, 0}^{j_{hA}, m_{hA}} \delta_{j_{cA}, j_{hA} - 1} \delta_{m_{cA}, m_{hA}} \right) \right). \quad (52) \end{aligned}$$

Заметим, что интегралы в выражении (52) для матричного элемента также могут быть вычислены точно аналогично случаю  $M_{Coul}^{(1)}$ .

Из правил отбора (51) следует, что при  $l_1 = l_2 = 0$  матричный элемент отличен от нуля только для дипольно-запрещенных переходов в доноре и акцепторе, удовлетворяющих условиям  $j_{cD} = j_{hD} \pm 1$  и  $j_{cA} = j_{hA} \pm 1$ . Из выражений (49) и (44) следует,

что при этом матричный элемент  $M_{Coul}^{(2)}$  зависит от расстояния между донором и акцептором как  $1/d^3$ . Когда  $l_1 + l_2$  — нечетное число с минимальными возможными значениями  $l_1 = 0$  и  $l_2 = 1$ , матричный элемент отличен от нуля для дипольно-запрещенных переходов в доноре, удовлетворяющих условию  $j_{cD} = j_{hD} \pm 1$ ; на переходы в акцепторе налагаются ограничения:  $j_{cA} + j_{hA}$  — четное число и  $|1 - j_{cA}| \leq j_{hA} \pm 1 \leq 1 + j_{cA}$ . Матричный элемент  $M_{Coul}^{(2)}$  в этих случаях зависит от расстояния  $d$  как  $1/d^4$ . Как уже отмечалось, для того чтобы матричный элемент был отличен от нуля, соотношение значений  $R_D$  и  $R_A$  должно обеспечивать выполнение условия резонанса для соответствующих переходов. В случае квантовых точек с  $R_D = R_A$  в резонанс попадают переходы между уровнями с совпадающими значениями угловых моментов, как дырок, так и электронов для обеих квантовых точек.

### 3.2. Матричный элемент прямого кулоновского взаимодействия с учетом подмешивания $s$ - и $p$ -состояний

До сих пор при вычислении матричных элементов кулоновского взаимодействия мы не учитывали подмешивания  $p$ -состояний к  $s$ -состояниям зоны проводимости. Как было показано, при учете подмешивания в выражении для матричного элемента (23) появляются дополнительные слагаемые, включающие следующие интегралы перекрытия:

$$I_{D2} = \int d^3 r_1 \psi_{hD}^*(\mathbf{r}_1) \psi_{cD}(\mathbf{r}_1) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_1) \quad (53)$$

и

$$I_{A2} = \int d^3 r_2 \psi_{hA}^*(\mathbf{r}_2) \psi_{cA}(\mathbf{r}_2) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_2). \quad (54)$$

Вычисление этих интегралов выполнено подобно вычислению интегралов перекрытия  $I_{D1}$  и  $I_{A1}$ : использовались переход к циклическим координатам для шаровых векторов и разложение плоских волн по сферическим функциям. Учет подмешивания вносит дополнительный вклад в матричный элемент, который имеет вид

$$\begin{aligned} M_{ad}^{(1)} &= \frac{4\pi e^2}{\varepsilon} \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{1}{q^2} I_{D2}(q) I_{A2}^*(q) = \\ &= 2\sqrt{\pi} \frac{e^2}{\varepsilon d} \left( \frac{P}{E_g} \right)^2 A_{cD} A_{hD}^* A_{cA}^* A_{hA} k^2 I_{ad}^{(1)}, \quad (55) \end{aligned}$$

где  $I_{ad}^{(1)}$  определено в Приложении А. Правила отбора для этого вклада с учетом формулы (94) из Приложения А имеют вид

$$\begin{aligned}
 & l_1 + l_2 - \text{нечетное}, \\
 & j_{hD} + j_{cD} + l_1 - \text{нечетное}, \\
 & j_{hA} + j_{cA} + l_2 - \text{нечетное}, \\
 & |j_{cD} + 1 - l_1| \leq j_{hD} \leq j_{cD} + 1 + l_1, \\
 & |j_{cA} + 1 - l_2| \leq j_{hA} \leq j_{cA} + 1 + l_2, \\
 & |j_{cD} - 1 - l_1| \leq j_{hD} \leq j_{cD} - 1 + l_1, \\
 & j_{cD} \geq 1, \\
 & |j_{cA} - 1 - l_2| \leq j_{hA} \leq j_{cA} - 1 + l_2, \\
 & j_{cA} \geq 1, \\
 & m_{cD} = m_{cA}, \\
 & m_{hD} = m_{hA}.
 \end{aligned} \tag{56}$$

Из выражений (56) следует, что минимальные возможные значения  $l_1$  и  $l_2$ , при которых матричный элемент  $M_{ad}^{(1)}$  отличен от нуля, это  $l_1 = 1, l_2 = 2$  (или  $l_1 = 2, l_2 = 1$ ). Это определяет противоположную четность сумм  $j_{cD} + j_{hD}$  и  $j_{cA} + j_{hA}$ . Неравенства в (56) налагают дополнительные ограничения на допустимые значения угловых моментов донорных и акцепторных состояний, которые могут давать вклад в перенос энергии. Зависимость матричного элемента от расстояния между квантовыми точками имеет вид  $M_{Coul}^{(2)} \propto 1/d^4$ . Этот вклад подмешивания состояний отличен от нуля только при радиусах  $R_D \neq R_A$  и их соотношениях, обеспечивающих выполнение условия резонанса для соответствующих переходов.

Перекрестное слагаемое в матричном элементе (23) пропорционально произведению интегралов перекрытия  $I_{D2}$  и  $I_{A1}$  и имеет вид

$$M_{ad}^{(2)} = \frac{4e^2}{\pi^{3/2}\epsilon d^2} A_{cD} A_{hD}^* A_{cA}^* A_{hA} \times \left(\frac{P}{E_g}\right)^2 k_{cD} I_{ad}^{(2)}, \tag{57}$$

где  $I_{ad}^{(2)}$  приведено в Приложении А (95). Правила отбора для этого вклада, определяемые выражением (95), имеют вид

$$\begin{aligned}
 & l_1 > 0, \\
 & l_1 + l_2 - \text{нечетное}, \\
 & j_{hD} + j_{cD} + l_1 - \text{нечетное}, \\
 & j_{hA} + j_{cA} + l_2 - \text{четное}, \\
 & |j_{cD} + 1 - l_1| \leq j_{hD} \leq j_{cD} + 1 + l_1, \\
 & |j_{cA} - l_2| \leq j_{hA} \leq j_{cA} + 1 + l_2, \\
 & |j_{cD} - 1 - l_1| \leq j_{hD} \leq |j_{cD} - 1 + l_1|, \\
 & m_{cA} = m_{hA}, \\
 & m_{cD} = m_{hD}.
 \end{aligned} \tag{58}$$

Перекрестный матричный элемент  $M_{ad}^{(2)} \neq 0$  при минимальных возможных значениях  $l_1 = 1$  и  $l_2 = 0$ . При этом согласно правилам отбора (58) суммы угловых моментов электронов и дырок как в доноре, так и в акцепторе, должны быть четными числами. Дополнительные условия для значений угловых моментов донорных и акцепторных состояний, которые могут давать вклад в перенос энергии, определяются неравенствами в (58). При  $l_1 = 1$  и  $l_2 = 0$  из этих неравенств следует, что в переносе энергии могут участвовать только дипольно-разрешенные переходы и в доноре, и в акцепторе. Зависимость матричного элемента от расстояния между квантовыми точками, как это следует из выражения (95), имеет вид  $M_{ad}^{(2)} \propto 1/d^3$ . При больших значениях  $l_1$  и  $l_2$ , удовлетворяющих условию  $l_1 + l_2 - \text{нечетное}$  число,  $M_{ad}^{(2)}$  убывает с расстоянием как  $1/d^5$  или быстрее.

### 3.3. Матричный элемент обменного взаимодействия

В предыдущих параграфах рассматривался процесс безызлучательного переноса энергии между квантовыми точками без учета обменного взаимодействия. Однако для малых расстояний между донором и акцептором энергии должен быть также учтен вклад обменного взаимодействия, который определяется только пространственным перекрытием волновых функций электронов донора и акцептора. Вследствие этого обменное взаимодействие допускает перенос энергии для всех разрешенных и запрещенных переходов в доноре и акцепторе. При малых расстояниях между донором и акцептором скорость переноса по обменному механизму может быть значительной в сравнении со скоростью переноса по прямому кулоновскому механизму. Когда прямой кулоновский перенос запрещен правилами отбора, роль обменного механизма становится определяющей. В работе [4] показано, что обменный вклад в скорость переноса энергии для типичной пары примесей, расположенной в соседних ячейках кристалла NaCl, составляет  $10^{10}-10^{11} \text{ с}^{-1}$ , тогда как для кулоновского вклада получена величина  $10^{12}-10^{13} \text{ с}^{-1}$ .

Поскольку в нашем случае явно выделена ось, соединяющая центры двух квантовых точек, решать задачу удобно в цилиндрической системе координат. Для вычисления обменного матричного элемента (14) следует перейти к координатам, отсчитываемым от одного центра, например, от центра квантовой точки-акцептора. При этом координатная часть матричного элемента приобретает вид

$$M_{ex} = \int d^3r'_1 \int d^3r_2 \psi_{csD}(\mathbf{r}'_1 - \mathbf{d}) \psi_{csA}^*(\mathbf{r}'_1) \times \\ \times \frac{e^2}{\varepsilon |\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}_2|} \psi_{hD}^*(\mathbf{r}_2 - \mathbf{d}) \psi_{hA}(\mathbf{r}_2). \quad (59)$$

Рассматривая вклад обменного взаимодействия в перенос энергии, мы ограничились вычислением матричного элемента  $M_{ex}$  с первым членом волновой функции электронов  $\psi_s |s\rangle$  и с волновой функцией тяжелых дырок  $\psi_h |p\rangle$ , т. е. здесь  $\psi_h |p\rangle = \psi_{h1} |p\rangle$ .

Чтобы упростить вычисления, для сферических функций и шаровых векторов в волновых функциях электронов и дырок были приняты их значения при  $\theta_1 = 0$  и  $\theta_2 = 0$ ,  $\theta'_1 = \pi$  и  $\theta'_2 = \pi$ , определяемые угловыми моментами и их проекциями:

$$Y_{jm}(0, \phi) = \delta_{m0} \sqrt{\frac{2j+1}{4\pi}}, \\ Y_{jm}(\pi, \phi) = (-1)^j \delta_{m0} \sqrt{\frac{2j+1}{4\pi}}, \\ \mathbf{Y}_{jm}^j(0, \phi) = \begin{cases} -m \sqrt{\frac{2j+1}{8\pi}} e_m, & \text{если } m = \pm 1, \\ 0 & \text{в остальных случаях,} \end{cases} \quad (60) \\ \mathbf{Y}_{jm}^j(\pi, \phi) = (-1)^j \mathbf{Y}_{jm}^j(0, \phi).$$

Следует отметить, что такое приближение позволило вести расчет не для всех значений проекций углового момента на ось  $z$ . Допустимыми являются значения  $m_{cD} = m_{cA} = 0$  и  $m_{hD} = m_{hA} = \pm 1$ . При других значениях проекций угловых моментов необходимо более точное рассмотрение зависимостей  $Y_{jm}(\theta, \phi)$  и  $\mathbf{Y}_{jm}^j(\theta, \phi)$ . Радиальные части волновых функций электронов донора для трех областей (для области донора, под барьером и для области акцептора) могут быть записаны как

$$\phi_{csD}(d - z'_1) = A_{cD} j_{j_{cD}}(k_{cD}(d - z'_1)), \\ d - R_D \leq z'_1 \leq d, \\ \phi_{csD}(d - z'_1) = B_{cD} k_{j_{cD}}(\kappa_{cD}(d - z'_1)), \\ R_A \leq z'_1 \leq d - R_D, \quad (61) \\ \phi_{csD}(d - z'_1) = C_{cD} j_{j_{cD}}(k_{cD}(d - z'_1)), \\ 0 \leq z'_1 \leq R_A.$$

Граничные условия для этих функций имеют вид

$$A_{cD} j_{j_{cD}}(k_{cD} R_D) = B_{cD} k_{j_{cD}}(\kappa_{cD} R_D), \\ B_{cD} k_{j_{cD}}(\kappa_{cD}(d - R_A)) = C_{cD} j_{j_{cD}}(k_{cD}(d - R_A)). \quad (62)$$

Аналогично могут быть представлены радиальные части волновых функций электронов акцептора, а также дырок донора и акцептора и граничные условия для этих функций.

Для рассматриваемой системы кулоновский потенциал в цилиндрической системе координат представляется выражением

$$\frac{e^2}{\varepsilon r} = \frac{e^2}{\varepsilon \sqrt{p^2 + z^2}}, \quad (63)$$

где  $r = |\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}_2|$ ,  $z = z'_1 - z_2$ ,  $p^2 = \rho_1^2 + \rho_2^2 - 2\rho_1\rho_2 \times \cos(\varphi_1 - \varphi_2)$ . Далее может быть использована интегральная формула

$$\frac{1}{\sqrt{p^2 + z^2}} = \int_0^\infty e^{-q|z|} J_0(qp) dq. \quad (64)$$

Здесь  $J_0(qp)$  — функция Бесселя нулевого значка. Теперь матричный элемент (59) приобретает вид

$$M_{ex} \approx \frac{e^2}{\varepsilon} S \int \rho_1 d\rho_1 d\varphi_1 dz'_1 \int \rho_2 d\rho_2 d\varphi_2 dz_2 \times \\ \times \int_0^\infty dq \phi_{cD}(d - z'_1) \phi_{csA}^*(z'_1) \exp(-q|z'_1 - z_2|) \times \\ \times J_0(qp) \phi_{hD}^*(d - z_2) \phi_{hA}(z_2), \quad (65)$$

где

$$S = (-1)^{j_{cD} + j_{hD} + m_{hD} + 1} \delta_{m_{cD}, 0} \sqrt{\frac{2j_{cD} + 1}{4\pi}} \times \\ \times \delta_{m_{cA}, 0} \sqrt{\frac{2j_{cD} + 1}{4\pi}} (\delta_{m_{hD}, 1} + \delta_{m_{hD}, -1}) \times \\ \times \sqrt{\frac{2j_{hD} + 1}{8\pi}} \sqrt{\frac{2j_{hA} + 1}{8\pi}} \delta_{m_{hD}, m_{hA}}. \quad (66)$$

Использование теоремы сложения Графа [40] позволяет представить  $J_0(qp)$  как

$$J_0(qp) = \sum_{n=-\infty}^\infty J_n(q\rho_1) J_n(q\rho_2) e^{in(\varphi_1 - \varphi_2)}, \quad (67)$$

где переменные  $\rho_1$ ,  $\rho_2$ ,  $\varphi_1$ ,  $\varphi_2$  разделяются. Подставляя (67) в (65), получаем матричный элемент в виде

$$M_{ex} \approx \frac{e^2}{\varepsilon} 4\pi^2 S \int \rho_1 d\rho_1 dz'_1 \int \rho_2 d\rho_2 dz_2 \times \\ \times \int_0^\infty dq \phi_{csD}(d - z'_1) \phi_{csA}^*(z'_1) \exp(-q|z'_1 - z_2|) \times \\ \times J_0(q\rho_1) J_0(q\rho_2) \phi_{hD}^*(d - z_2) \phi_{hA}(z_2), \quad (68)$$

так как все интегралы по  $\varphi_1$  и  $\varphi_2$  равны нулю при всех  $n$ , кроме  $n = 0$ . Область интегрирования по  $\rho$  следует ограничить значениями  $\rho_{max}$ , для которых

справедливо выбранное приближение для функций  $Y_{jm}(\theta, \phi)$  и  $\mathbf{Y}_{jm}^j$ , т. е. должно выполняться условие  $\rho_{max} \ll d$ . Для вычисления интегралов по  $\rho$  в (68) воспользуемся следующим представлением [40]:

$$\int_0^{\rho_{max}} \rho_{1(2)} J_0(q\rho_{1(2)}) d\rho_{1(2)} = \frac{\rho_{max}}{q} J_1(q\rho_{max}). \quad (69)$$

Тогда для обменного матричного элемента  $M_{ex}$  получаем

$$M_{ex} \approx \frac{e^2}{\varepsilon} 4\pi^2 S \rho_{max}^2 \int_0^\infty \frac{dq}{q^2} J_1^2(q\rho_{max}) \times \\ \times \int dz'_1 \int dz_2 \phi_{csD}(d - z'_1) \phi_{csA}^*(z'_1) \times \\ \times e^{-q|z'_1 - z_2|} \phi_{hD}^*(d - z_2) \phi_{hA}(z_2). \quad (70)$$

В формуле (70) можно выполнить интегрирование по  $q$  [39]:

$$\int_0^\infty \frac{dq}{q^2} J_1^2(q\rho_{max}) \exp(-q|z'_1 - z_2|) = \\ = \rho_{max} \left\{ \frac{4}{3\pi} (\eta^2 + 1)^{1/2} \left[ \eta^2 K \left( (\eta^2 + 1)^{-1/2} \right) + \right. \right. \\ \left. \left. + (1 - \eta^2) E \left( (\eta^2 + 1)^{-1/2} \right) \right] - \eta \right\}. \quad (71)$$

Здесь  $\eta = |z'_1 - z_2|/(2\rho_{max})$ ,  $K(\xi)$ ,  $E(\xi)$  — полные эллиптические интегралы первого и второго рода. Введем следующие величины:

$$P(\eta_{1(2)}^2) = \rho_{max} \left\{ \frac{4}{3\pi} (\eta_{1(2)}^2 + 1)^{1/2} \times \right. \\ \times \left[ \eta_{1(2)}^2 K \left( (\eta_{1(2)}^2 + 1)^{-1/2} \right) + \right. \\ \left. \left. + (1 - \eta_{1(2)}^2) E \left( (\eta_{1(2)}^2 + 1)^{-1/2} \right) \right] \right\}, \quad (72)$$

где  $\eta_1 = (z'_1 - z_2)/(2\rho_{max})$  при  $z'_1 > z_2$  и  $\eta_2 = (z_2 - z'_1)/(2\rho_{max})$  при  $z'_1 < z_2$ . Теперь выражение для матричного элемента (70) может быть переписано в виде

$$M_{ex} \approx \frac{e^2}{\varepsilon} 4\pi^2 S \rho_{max}^3 \left[ \int_0^{R_A} \phi_{csD}^*(d - z'_1) \phi_{csA}(z'_1) dz'_1 + \right. \\ \left. + \int_{R_A}^{d-R_D} \phi_{csD}(d - z'_1) \phi_{csA}^*(z'_1) dz'_1 + \right. \\ \left. + \int_{d-R_D}^d \phi_{csD}(d - z'_1) \phi_{csA}^*(z'_1) dz'_1 \right] \times \\ \times \left[ \int_0^{z'_1} \phi_{hD}^*(d - z_2) \phi_{hA}(z_2) (P(\eta_1^2) - \eta_1) dz_2 + \right. \\ \left. + \int_{z'_1}^d \phi_{hD}^*(d - z_2) \phi_{hA}(z_2) (P(\eta_2^2) - \eta_2) dz_2 \right]. \quad (73)$$

Тогда матричный элемент может быть представлен в виде

$$M_{ex} \approx \frac{e^2}{\varepsilon} 4\pi^2 S \rho_{max}^3 [J_1 + J_2 + J_3]. \quad (74)$$

Выражения для  $J_1$ ,  $J_3$  и  $J_2$  содержат вклады, отвечающие интегрированию по области акцептора, донора, а также по области между донором и акцептором и приведены в Приложении В. Для расстояний между квантовыми точками близких к контактному можно полагать вклад последней области малым по сравнению с вкладами областей квантовых точек. Для частного случая одинаковых квантовых точек в силу симметрии системы численное значение  $J_3$  равно численному значению  $J_1$ . Тогда для расстояний близких к контактному матричный элемент может быть записан как

$$M_{ex} \approx \frac{e^2}{\varepsilon} 4\pi^2 S \rho_{max}^3 2J_1. \quad (75)$$

Анализ показывает, что  $J_1$  (Приложение В, формула (101)) зависит от расстояния  $d$  между донором и акцептором энергии как

$$J_1 \propto (kd)^{-2} \exp(-\kappa(d - 2R)). \quad (76)$$

Это выражение для  $J_1$  получено для значений полного углового момента  $j_{cD} = j_{hD} = 1$  и  $j_{cA} = j_{hA} = 1$ . Для переходов между уровнями с другими значениями полных угловых моментов зависимость  $J_1$  от расстояния  $d$  будет иметь такой же вид. В результате зависимость матричного элемента обменного взаимодействия от расстояния  $d$  определяется выражениями (75) и (101) (см. Приложение В). В итоге, матричный элемент обменного взаимодействия как функция расстояния  $d$  изменяется по закону

$$M_{ex} \propto \frac{e^2}{\epsilon} 4\pi^2 S \rho_{max}^3 (kd)^{-2} \exp(-\kappa(d - 2R)). \quad (77)$$

Здесь мы выделяем только зависимость матричного элемента от расстояния  $d$  между квантовыми точками, так как она является основной характеристикой процесса переноса энергии.

#### 4. СКОРОСТЬ РЕЗОНАНСНОГО ПЕРЕНОСА ЭНЕРГИИ

Теперь перейдем к рассмотрению вопроса о вычислении скорости безызлучательного резонансного переноса энергии между квантовыми точками. Мы рассматриваем перенос энергии от квантовой точки-донора ( $D$ ) к квантовой точке-акцептору ( $A$ ).

В дальнейшем мы интересуемся процессом переноса энергии в системе, когда передача энергии от квантовой точки-донора к квантовой точке-акцептору носит необратимый характер и связана с процессами релаксации возбужденных состояний. Для описания процессов переноса энергии в квантовомеханической системе с диссипацией удобно использовать формализм матрицы плотности, который дает возможность феноменологически учесть как релаксационные процессы внутри системы, так и взаимодействие квантовой системы с ее окружением [1, 41]. Уравнение для матрицы плотности  $\hat{\rho}$  в нашем случае имеет следующий вид [1, 49]:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \rho_{jj}}{\partial t} &= [M_c, \rho]_{jj} + \frac{i\hbar}{T_1} (\rho_{jj}^e - \rho_{jj}), \\ i\hbar \frac{\partial \rho_{ij}}{\partial t} &= (E_i - E_j) \rho_{ij} + [M_c, \rho]_{ij} - \frac{i\hbar}{T_2} \rho_{ij}. \end{aligned} \quad (78)$$

Здесь  $M_c$  — матричный элемент кулоновского взаимодействия между КТ,  $\rho_{ii}$  — диагональные элементы матрицы плотности,  $\rho_{ij}$  — недиагональные элементы,  $\rho_{jj}^e$  — равновесное значение диагонального элемента матрицы плотности,  $T_1$  — «продольное» время релаксации диагональных элементов матрицы плотности (это время излучательных и безызлучательных переходов между уровнями, определяющими населенность состояний),  $T_2$  — «поперечное» время, которое характеризует релаксацию недиагональных элементов матрицы плотности,  $E_i - E_j$  — разность энергий между начальным и возбужденным состояниями.

Рассмотрим матрицу плотности для следующих состояний (донора и акцептора):

$$|1\rangle = \psi'_D \psi_A, \quad |2\rangle = \psi_D \psi'_A, \quad |3\rangle = \psi_D \psi_A. \quad (79)$$

Здесь штрих относится к возбужденному состоянию соответственно донора и акцептора. Состояние  $|3\rangle$ ,

когда обе квантовые точки находятся в основном состоянии (не возбуждены), необходимо для сохранения нормировки:  $\rho_{11} + \rho_{22} + \rho_{33} = 1$ . В нашем случае (комнатная температура) ширина запрещенной зоны квантовой точки-донора и квантовой точки-акцептора  $E_g^{D,A} \gg k_B T$  ( $k_B$  — постоянная Больцмана,  $T$  — абсолютная температура). Тогда очевидно, что равновесные значения диагональных элементов матрицы плотности равны:  $\rho_{11}^e = \rho_{22}^e = 0$ ,  $\rho_{33}^e = 1$ . В результате из (78) получаем систему уравнений для элементов матрицы плотности [1]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_{11}}{\partial t} &= \frac{1}{i\hbar} ((M_c)_{12} \rho_{21} - (M_c)_{21} \rho_{12}) - \frac{\rho_{11}}{\tau_D}, \\ \frac{\partial \rho_{22}}{\partial t} &= \frac{1}{i\hbar} ((M_c)_{21} \rho_{12} - (M_c)_{12} \rho_{21}) - \frac{\rho_{22}}{\tau_A}, \\ \frac{\partial \rho_{12}}{\partial t} &= \frac{1}{i\hbar} (M_c)_{12} (\rho_{22} - \rho_{11}) - \frac{\rho_{12}}{T_2} + \frac{\Delta E}{i\hbar} \rho_{12}, \\ \frac{\partial \rho_{21}}{\partial t} &= \frac{1}{i\hbar} (M_c)_{21} (\rho_{11} - \rho_{22}) - \frac{\rho_{21}}{T_2} - \frac{\Delta E}{i\hbar} \rho_{21}. \end{aligned} \quad (80)$$

Здесь  $\Delta E = E_g^A - E_g^D$  (расстройка резонанса),  $\tau_D$  и  $\tau_A$  — продольное время релаксации для донора и акцептора, время поперечной релаксации для двух взаимодействующих квантовых точек ( $D$  и  $A$ ) связано с полуширинами уровней в доноре и акцепторе  $\Gamma_D$  и  $\Gamma_A$  следующим образом:

$$\frac{2}{T_2} = \frac{\Gamma_D}{\hbar} + \frac{\Gamma_A}{\hbar}.$$

Проанализируем систему уравнений (80), следуя работе [1]. Во-первых, общее решение системы (80) имеет характер затухающих осцилляций. Во-вторых, возбужденный донор может «сбросить» энергию (т. е. релаксировать с характерным временем  $\tau_l$ ) благодаря двум процессам: излучательной рекомбинации  $1/\tau_D$  или переноса энергии к акцептору, т. е.

$$\frac{1}{\tau_l} \equiv \left[ \int_0^\infty \rho_{11}(t) dt \right]^{-1} = \frac{1}{\tau_D} + \overline{W}, \quad (81)$$

где  $\overline{W}$  можно рассматривать как обобщенную вероятность переноса энергии от донора к акцептору. Далее, решим систему уравнений (80) методом, предложенным в работе [50]; для этого проведем преобразование Лапласа над компонентами матрицы плотности:

$$\begin{aligned} f_{ij}(s) = \mathcal{L}(\rho_{ij}) &= \int_0^\infty \exp(-st) \rho_{ij}(t) dt, \\ \int_0^\infty \exp(-st) \frac{\partial \rho_{ij}}{\partial t} dt &= s f_{ij}(s) - \rho_{ij}(0). \end{aligned} \quad (82)$$

В результате преобразований Лапласа система уравнений (80) принимает вид

$$\begin{aligned}
 s f_{11} - \rho_{11}(0) &= \frac{1}{i\hbar} ((M_c)_{12} f_{21} - (M_c)_{21} f_{12}) - \frac{f_{11}}{\tau_D}, \\
 s f_{22} - \rho_{22}(0) &= \frac{1}{i\hbar} ((M_c)_{21} f_{12} - (M_c)_{12} f_{21}) - \frac{f_{22}}{\tau_A}, \\
 s f_{12} - \rho_{12}(0) &= \frac{1}{i\hbar} (M_c)_{12} (f_{22} - f_{11}) - \frac{f_{12}}{T_2} + \\
 &\quad + \frac{\Delta E}{i\hbar} f_{12}, \\
 s f_{21} - \rho_{21}(0) &= \frac{1}{i\hbar} (M_c)_{21} (f_{11} - f_{22}) - \frac{f_{21}}{T_2} - \\
 &\quad - \frac{\Delta E}{i\hbar} f_{21}.
 \end{aligned} \tag{83}$$

Следует заметить, что согласно (81) и (82) можно представить обобщенную вероятность в виде

$$\overline{W} = -\frac{1}{\tau_D} + f_{11}^{-1}(0), \tag{84}$$

где

$$f_{11}^{-1}(0) = \int_0^{\infty} \rho_{11}(t) dt. \tag{85}$$

Полагая в (83)  $s = 0$ , учитывая начальные условия  $\rho_{11}(0) = 1$  и  $\rho_{ij}(0) = 0$  при  $i \neq 1$  или  $j \neq 1$ , получаем следующее решение:

$$\begin{aligned}
 f_{11}^{-1}(0) &= \left[ \int_0^{\infty} \rho_{11}(t) dt \right]^{-1} = \\
 &= \frac{1}{\tau_D} + \frac{2|(M_c)_{12}|^2 T_2 / \hbar^2}{1 + \left( \frac{T_2 \Delta E}{\hbar} \right)^2 + \frac{2|(M_c)_{12}|^2 T_2 \tau_A}{\hbar^2}}.
 \end{aligned} \tag{86}$$

В результате, для обобщенной вероятности переноса  $\overline{W}$  получаем

$$\overline{W} = \frac{2|(M_c)_{12}|^2 T_2 / \hbar^2}{1 + \left( \frac{T_2 \Delta E}{\hbar} \right)^2 + \frac{2|(M_c)_{12}|^2 T_2 \tau_A}{\hbar^2}}. \tag{87}$$

Для анализа полученного решения и выяснения физического смысла рассмотрим ряд конкретных случаев [1].

Случай малого расстояния между квантовыми точками, когда взаимодействие между ними велико, так что

$$|M_c| \gg \frac{\hbar}{\tau_D}, \frac{\hbar}{\tau_A}, \frac{\hbar}{T_2}. \tag{88}$$

В этом случае решение (80) для  $\rho_{11}$  (при  $\Delta E = 0$ ) осциллирует с частотой  $\Omega = 2|M_c|/\hbar$ ; в системе происходит «перекачка» энергии от донора к акцептору и обратно. В этом предельном случае обобщенная вероятность  $\overline{W}$  стремится к  $1/\tau_A$ , т. е. скорость переноса энергии определяется скоростью перехода акцептора из возбужденного состояния в основное (см. рис. 3). Результаты расчета для  $\Omega$  для разных случаев представлены в табл. 1, 2.

Зависимость обобщенной вероятности переноса энергии  $\overline{W}$  (рассчитанная по формуле (87)) от расстояния между КТ представлена на рис. 3 для двух значений  $\tau_A$ . Чем больше значение времени жизни акцептора, тем больше расстояние между КТ, при котором происходит насыщение обобщенной вероятности  $\overline{W}$ .

При слабом взаимодействии между КТ, когда

$$\frac{2|M_c|^2}{\hbar^2} T_2 \tau_A \ll 1,$$

согласно формуле (87) получаем

$$\overline{W} = W = \frac{2|(M_c)_{12}|^2 T_2 / \hbar^2}{1 + (T_2 \Delta E / \hbar)^2}. \tag{89}$$

В этом случае перенос энергии от донора к акцептору является необратимым процессом и величина  $W$  соответствует истинной скорости переноса энергии в единицу времени. Следует отметить, что выражение (89) может быть получено в рамках обычной теории возмущений. Выражение (89) может быть переписано в виде

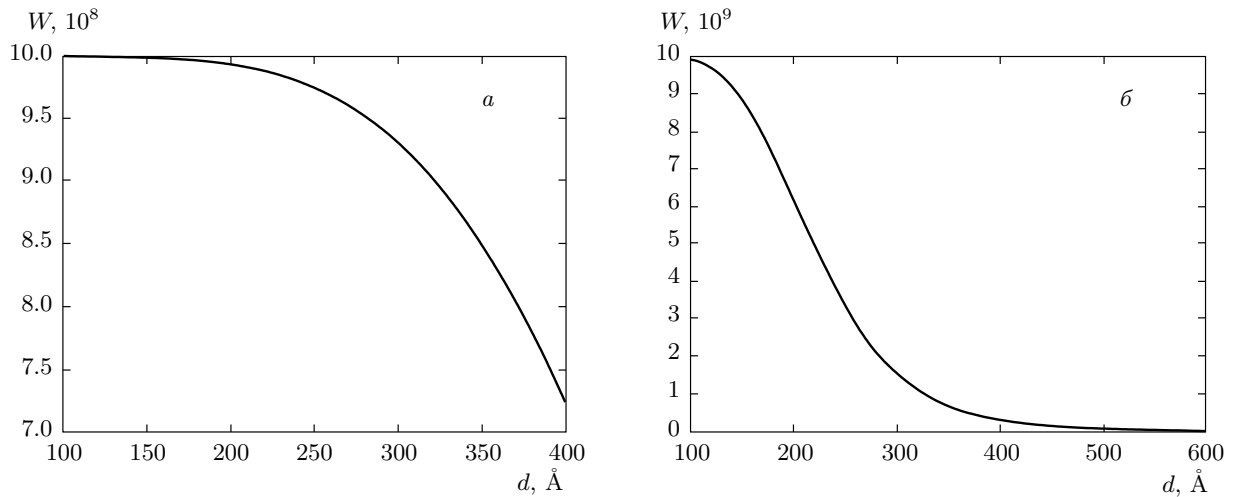
$$W = \frac{2\pi}{\hbar} |(M_c)_{12}|^2 \rho_f, \tag{90}$$

где

$$\rho_f = \frac{1}{\pi} \frac{T_2 / \hbar}{1 + \frac{(T_2 \Delta E)^2}{\hbar^2}}. \tag{91}$$

Выше мы вычислили матричные элементы кулоновского взаимодействия, соответствующие двум поляризациям тяжелых дырок ( $M_{Coul}^{(1)}$  (37) и  $M_{Coul}^{(2)}$  (49)), матричные элементы, связанные с подмешиванием состояний валентной зоны к состояниям зоны проводимости ( $M_{ad}^{(1)}$  (55),  $M_{ad}^{(2)}$  (57),  $M_{ad}^{(3)}$ ), а также обменный матричный элемент  $M_{ex}$  (75). Соответственно этому их вклады в скорость переноса энергии принимают вид

$$W_{D \rightarrow A}^{(\alpha)} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\alpha} |(M_c)_{12}^{(\alpha)}|^2 \rho_f, \tag{92}$$



**Рис. 3.** Зависимость скорости безызлучательного резонансного переноса энергии от расстояния между квантовыми точками. Вычисление выполнено для перехода в доноре и акцепторе с квантовыми числами  $n_c = n_h = 1$  для волновой функции тяжелой дырки второй поляризации для основного перехода  $\psi_{h2}$ . Для расчета принимались следующие параметры  $R_D = R_A = 3$  нм,  $V_c = V_v = 0.52$  эВ,  $E_g = 0.38$  эВ,  $m_c = 0.03m_0$ ,  $m_h = 0.5m_0$ ,  $\tau_A = 10^{-9}$  с (а),  $\tau_A = 10^{-10}$  с (б);  $M_{Coul}^{(2)}$  вычислен для значений углового момента и его проекции (0,0), (1,0)

**Таблица 1.** Частота  $\Omega$ , вычисленная с матричным элементом  $M_{Coul}^{(1)}$  в предельном случае малых расстояний. Для расчета используются следующие параметры:  $R_D = R_A = 3$  нм,  $d = 16$  нм,  $V_c = V_v = 0.52$  эВ,  $E_g = 0.38$  эВ,  $m_c = 0.03m_0$ ,  $m_h = 0.5m_0$

Квантовые числа		Частота $\Omega$ , с <sup>-1</sup>
$(n_{cD}, j_{cD}, m_{cD}), (n_{hD}, j_{hD}, m_{hD})$	$(n_{cA}, j_{cA}, m_{cA}), (n_{hA}, j_{hA}, m_{hA})$	
$(1,1,1), (1,1,1)$	$(1,1,1), (1,1,1)$	$1.268 \cdot 10^{11}$
$(1,1,1), (2,1,1)$	$(1,1,1), (2,1,1)$	$2.022 \cdot 10^{10}$

**Таблица 2.** Частота  $\Omega$ , вычисленная с матричным элементом  $M_{Coul}^{(2)}$  в предельном случае малых расстояний. Для расчета используются следующие параметры:  $R_D = R_A = 3$  нм,  $d = 16$  нм,  $V_c = V_v = 0.52$  эВ,  $E_g = 0.38$  эВ,  $m_c = 0.03m_0$ ,  $m_h = 0.5m_0$

Квантовые числа		Частота $\Omega$ , с <sup>-1</sup>
$(n_{cD}, j_{cD}, m_{cD}), (n_{hD}, j_{hD}, m_{hD})$	$(n_{cA}, j_{cA}, m_{cA}), (n_{hA}, j_{hA}, m_{hA})$	
$(1,0,0), (1,1,0)$	$(1,0,0), (1,1,0)$	$1.773 \cdot 10^{10}$
$(1,1,1), (1,2,1)$	$(1,1,1), (1,2,1)$	$5.932 \cdot 10^9$
$(1,1,0), (1,2,0)$	$(1,1,0), (1,2,0)$	$7.909 \cdot 10^9$
$(1,0,0), (2,1,0)$	$(1,0,0), (2,1,0)$	$2.514 \cdot 10^9$

где  $(M_c)_{12}^{(\alpha)}$  обозначает один из перечисленных матричных элементов для перехода системы из состояния 1 в состояние 2. Переходы, участвующие в переносе энергии, определены соответствующими правилами отбора. Поскольку все эти вклады независимы,

полная скорость переноса энергии от квантовой точки-донора к квантовой точке-акцептору представляется выражением

$$W_{D \rightarrow A} = \sum_{\alpha} W_{D \rightarrow A}^{\alpha}. \tag{93}$$



**Таблица 3.** Скорость безызлучательного переноса энергии, вычисленная с матричным элементом  $M_{Coul}^{(1)}$ . Для расчета используются следующие параметры:  $R_D = R_A = 3$  нм,  $d = 48$  нм,  $V_c = V_v = 0.52$  эВ,  $E_g = 0.38$  эВ,  $m_c = 0.03m_0$ ,  $m_h = 0.5m_0$

Квантовые числа		Скорость $W$ , $c^{-1}$
$(n_{cD}, j_{cD}, m_{cD}), (n_{hD}, j_{hD}, m_{hD})$	$(n_{cA}, j_{cA}, m_{cA}), (n_{hA}, j_{hA}, m_{hA})$	
(1,1,1), (1,1,1)	(1,1,1), (1,1,1)	$1.385 \cdot 10^9$
(1,1,1), (2,1,1)	(1,1,1), (2,1,1)	$3.526 \cdot 10^7$

**Таблица 4.** Скорость безызлучательного переноса энергии, вычисленная с матричным элементом  $M_{Coul}^{(2)}$ . Для расчета используются следующие параметры:  $R_D = R_A = 3$  нм,  $d = 48$  нм,  $V_c = V_v = 0.52$  эВ,  $E_g = 0.38$  эВ,  $m_c = 0.03m_0$ ,  $m_h = 0.5m_0$

Квантовые числа		Скорость $W$ , $c^{-1}$
$(n_{cD}, j_{cD}, m_{cD}), (n_{hD}, j_{hD}, m_{hD})$	$(n_{cA}, j_{cA}, m_{cA}), (n_{hA}, j_{hA}, m_{hA})$	
(1,0,0), (1,1,0)	(1,0,0), (1,1,0)	$4.632 \cdot 10^8$
(1,1,1), (1,2,1)	(1,1,1), (1,2,1)	$3.032 \cdot 10^6$
(1,1,0), (1,2,0)	(1,1,0), (1,2,0)	$5.390 \cdot 10^6$
(1,0,0), (2,1,0)	(1,0,0), (2,1,0)	$5.447 \cdot 10^5$

В численных расчетах для времени жизни электрона в основном состоянии зоны проводимости мы приняли значение  $\tau_{DA} = 10^{-9}$  с [44]. Экспериментальные значения этой величины приводятся в ряде работ. В работе [45] получено значение времени жизни  $\tau = 882$  пс. Это близко к значению времени жизни излучательной рекомбинации  $\tau = 0.7$  нс, полученному в работе [46]. Время жизни электрона в возбужденном состоянии зоны проводимости меньше вследствие внутрizonной релаксации. Для возбужденных состояний было принято значение  $\tau = 10^{-11}$  с [21].

Результаты численных расчетов в скорости переноса энергии, согласно (92), представлены в табл. 3, 4. Расчеты были выполнены для квантовых точек InAs в матрице GaAs с  $R_D = R_A = 3$  нм при  $V_c = V_v = 0.52$  эВ,  $E_g = 0.38$  эВ,  $m_c = 0.03m_0$ ,  $m_h = 0.5m_0$  и  $\tau = 10^{-9}$  с для основного состояния и  $\tau = 10^{-11}$  с для возбужденных уровней.

Кроме того, рассмотрим еще один предельный случай, когда время релаксации в доноре много больше времени релаксации в акцепторе ( $\tau_D \gg \tau_A$ ). Тогда теория возмущений (92) становится применимой. В этом случае перенос энергии также является необратимым процессом. Для этого необходимо

условие совпадения резонансов переходов в доноре и акцепторе с разными квантовыми числами. Такой расчет был проделан и для  $R_d = 3$  нм было получено ненулевое значение скорости переноса при  $R_a = 4.36$  нм. В этом случае квантовые числа приняли следующие значения:  $n_{cd} = 1, l_{cd} = 0, m_{cd} = 0, n_{hd} = 1, l_{hd} = 1, m_{hd} = 0$ ; и для акцептора  $n_{ca} = 1, l_{ca} = 0, m_{ca} = 0, n_{ha} = 2, l_{ha} = 1, m_{ha} = 0$ . Для этих квантовых чисел и для наших параметров было получено  $W_{Coul}^{(2)} = 7.050 \cdot 10^9$  с. В этом случае вероятность переноса  $W \ll 1/\tau_A$ , но  $W \gg 1/\tau_D$ . Таким образом, теория возмущений становится применимой и мы достигаем высокой эффективности процесса переноса энергии.

Отметим, что все матричные элементы в нашей работе были найдены на основании модели Кейна, не учитывающей спин-орбитального взаимодействия. В работах [34, 36] было показано, что включение в модель Кейна спин-орбитального взаимодействия приводит к умножению скорости оже-рекомбинации на функцию  $F(\Delta_{so}/E_g)$ , где  $\Delta_{so}$  — константа спин-орбитального взаимодействия. Вычисления показали, что при любых соотношениях между  $\Delta_{so}$  и  $E_g$  функция  $F(\Delta_{so}/E_g)$  меняется мало, имея максимальное значение  $F(\Delta_{so}/E_g) = 1$

и минимальное  $F(\Delta_{so}/E_g) = 0.9$ . Поскольку скорость переноса энергии определяется матричными элементами подобными тем, что определяют скорость оже-рекомбинации, такой же множитель должен появиться в выражении для скорости переноса энергии при включении в уравнения Кейна спин-орбитального взаимодействия.

## 5. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

В рамках модели Кейна выполнен микроскопический анализ механизмов безызлучательного переноса энергии между полупроводниковыми квантовыми точками на основе узкозонных соединений  $A_3B_5$ . Дополнительные вклады в скорость переноса энергии, отсутствующие в простой модели эффективной массы [20, 21] и других моделях зонной структуры [18, 19], обусловлены подмешиванием  $p$ -состояний валентной зоны к  $s$ -состояниям зоны проводимости. Найдены аналитические выражения для всех вкладов в матричный элемент кулоновского взаимодействия для системы двух сферических квантовых точек, изготовленных из одного и того же полупроводникового материала  $A_3B_5$  и помещенных в матрицу из другого полупроводникового материала. Согласно полученным правилам отбора в процесс переноса энергии могут быть вовлечены как дипольно-разрешенные, так и дипольно-запрещенные переходы в доноре и акцепторе. Для всех вкладов получены зависимости матричного элемента от расстояния  $d$  между центрами квантовых точек, что является основной характеристикой процесса переноса энергии.

Детально рассмотрены переходы в доноре и акцепторе, вклады которых в скорость переноса энергии убывают с расстоянием  $d$  не быстрее, чем  $1/d^8$ , для системы двух квантовых точек с равными радиусами  $R_D = R_A$ . Матричные элементы переноса энергии, вычисленные с волновой функцией тяжелых дырок  $\psi_{h1}$  и с волновой функцией электронов  $s$ -симметрии (без учета подмешивания), а также с учетом подмешивания  $p$ -симметрии в волновой функции донора (акцептора), определяют дипольно-разрешенные и дипольно-запрещенные переходы в доноре и акцепторе, вклады которых в скорость переноса энергии  $W_{Coul}^{(1)}$ ,  $W_{ad}^{(2)}$  и  $W_{ad}^{(3)}$  имеют зависимость от расстояния  $d$  вида  $1/d^6$ . Вклад в скорость переноса энергии, определяемый волновой функцией тяжелых дырок  $\psi_{h2}$  и волновой функцией электронов  $s$ -симметрии,  $W_{Coul}^{(2)}$ , в случае  $R_D = R_A$  отличен от нуля только для дипольно-запрещенных пере-

ходов. Для него скорость переноса пропорциональна  $1/d^6$ . Для квантовых точек при  $R_D \neq R_A$  возможен перенос энергии, вовлекающий дипольно-запрещенные состояния, с зависимостью скорости переноса от  $d$  вида  $1/d^8$ . Вклад, определяемый подмешиванием  $p$ -состояний валентной зоны к  $s$ -состояниям зоны проводимости как для донора, так и для акцептора,  $W_{ad}^{(1)}$ , согласно правилам отбора может быть отличен от нуля только тогда, когда радиусы донора и акцептора различны. Скорость переноса в этом случае зависит от расстояния как  $1/d^8$ . Получено, что наибольший вклад в скорость переноса энергии вносят основные переходы в доноре и акцепторе. На рис. 3 представлена зависимость скорости прямого кулоновского вклада, вычисленного с волновой функцией  $\psi_{h2}$ . Расчет проводился по общей формуле за рамками приближения теории возмущений, для двух времен релаксации в акцепторе  $\tau_A = 10^{-9}$  с и  $\tau_A = 10^{-10}$  с. Следует отметить, что практически важными являются вклады, для которых скорость переноса энергии превышает скорость релаксации возбужденного состояния электрона в доноре. Выполнен численный расчет вероятности переноса энергии между квантовыми точками разных размеров. Наряду с вкладом в матричный элемент от прямого кулоновского переноса энергии между квантовыми точками, был вычислен вклад от механизма обменного переноса. Получено аналитическое выражение для матричного элемента обменного взаимодействия между квантовыми точками одинакового радиуса  $R_D = R_A$  с волновой функцией тяжелых дырок  $\psi_{h1}$  и волновой функцией электронов, не учитывающей подмешивание  $s$ - и  $p$ -состояний. Показано, что для обменного взаимодействия скорость переноса энергии зависит от расстояния  $d$  между центрами КТ по степенному закону  $1/d^4$  при малых расстояниях и приобретает экспоненциальный характер с увеличением  $d$ . Следовательно, для количественного описания процесса безызлучательного переноса энергии обменный вклад должен приниматься во внимание.

## 6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе в рамках модели Кейна выполнен микроскопический анализ механизмов переноса энергии между сферическими квантовыми точками (донором и акцептором). Показано, что учет подмешивания  $p$ -состояний к  $s$ -состояниям зоны проводимости приводит к дополнительным вкладом в скорость

переноса энергии в сравнении с теми, которые были получены при использовании других теоретических подходов [18–21]. Получены выражения для матричных элементов переноса энергии вследствие прямого кулоновского взаимодействия электронов донора и акцептора как для дипольно-разрешенных, так и для дипольно-запрещенных межзонных переходов в доноре и акцепторе. Численные расчеты были выполнены для донора и акцептора как с равными радиусами, так и с разными. Показано, что наибольшим вкладом в скорость переноса энергии является вклад основного перехода в доноре и акцепторе. В работе выполнен также анализ скорости переноса энергии вследствие обменного взаимодействия электронов донора и акцептора. Численный расчет показал, что при малых расстояниях между донором и акцептором вклад обменного взаимодействия в скорость переноса энергии того же порядка, что наибольший вклад подмешивания состояний. Следовательно, он тоже должен приниматься во внимание при количественном описании процесса переноса энергии.

Безызлучательный перенос энергии между донором и акцептором энергии, конъюгированными с биомолекулами, широко используется в медицинских и биологических экспериментах. Применение полупроводниковых квантовых точек в качестве как донора, так и акцептора увеличило возможности экспериментов [22]. Высокая чувствительность скорости переноса к изменению расстояния между донором и акцептором энергии позволяет детектировать образование комплексов антиген-антитело, энзим-субстрат, гибридизацию ДНК, а также изучать структуру и динамику биомолекул, где необходимы измерения малых расстояний в пределах одной молекулы [22, 52–54]. Данные таких исследований имеют большое значение для диагностики и терапии ряда заболеваний, в том числе онкологических [55], см. также литературу в работе [22]. Развитие адекватной теории переноса энергии, учитывающей как прямое кулоновское взаимодействие электронов донора и акцептора, так и их обменное взаимодействие, необходимо для корректной интерпретации экспериментальных данных.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (грант № 14-02-01223) и в рамках программы поддержки ведущих научных школ (НШ-5062.2014.2).

### ПРИЛОЖЕНИЕ А

Интеграл в выражении  $M_{ad}^{(1)}$  (55) имеет вид

$$\begin{aligned}
 I_{ad}^{(1)} = & \frac{1}{\sqrt{(2j_{cD}+1)(2j_{hD}+1)}} \frac{1}{\sqrt{(2j_{cA}+1)(2j_{hA}+1)}} \times \\
 & \times \sum_{l_1=0}^{\infty} \sum_{l_2=0}^{\infty} \frac{\Gamma\left(\frac{l_1+l_2+1}{2}\right)}{\Gamma\left(l_1+\frac{3}{2}\right)\Gamma\left(l_2+\frac{3}{2}\right)\Gamma\left(1-\frac{l_1+l_2}{2}\right)} \times \\
 & \times \int_0^{R_D} r_1^2 dr_1 \sum_{\mu_1=-1}^1 (i)^{l_1} (2l_1+1) \times \\
 & \times \left\{ \sqrt{(j_{cD}+1)(2j_{cD}+3)} j_{j_{cD}+1}(k_{cD}r_1) j_{j_{hD}}(k_{hD}r_1) \times \right. \\
 & \times C_{j_{cD}+1, m_{cD}+\mu_1, 1, -\mu_1}^{j_{cD}, m_{cD}} C_{j_{hD}, -m_{hD}-\mu_1, 1, \mu_1}^{j_{hD}, -m_{hD}} \times \\
 & \times C_{j_{cD}+1, 0, l_1, 0}^{j_{hD}, 0} C_{j_{cD}+1, m_{cD}+\mu_1, l_1, 0}^{j_{hD}, m_{hD}+\mu_1} + \\
 & \left. + \sqrt{j_{cD}(2j_{cD}-1)} j_{j_{cD}-1}(k_{cD}r_1) j_{j_{hD}}(k_{hD}r_1) \right\} \times \\
 & \times \int_0^{R_A} r_2^2 dr_2 \sum_{\mu_2=-1}^1 (-i)^{l_2} (2l_2+1) \times \\
 & \times \left\{ \sqrt{(j_{cA}+1)(2j_{cA}+3)} j_{j_{cA}+1}(k_{cA}r_2) j_{j_{hA}}(k_{hA}r_2) \times \right. \\
 & \times C_{j_{cA}+1, m_{cA}+\mu_2, 1, -\mu_2}^{j_{cA}, m_{cA}} C_{j_{hA}, -m_{hA}-\mu_2, 1, \mu_2}^{j_{hA}, -m_{hA}} \times \\
 & \times C_{j_{cA}+1, 0, l_2, 0}^{j_{hA}, 0} C_{j_{cA}+1, m_{cA}+\mu_2, l_2, 0}^{j_{hA}, m_{hA}+\mu_2} + \\
 & \left. + \sqrt{j_{cA}(2j_{cA}-1)} j_{j_{cA}-1}(k_{cA}r_2) j_{j_{hA}}(k_{hA}r_2) \times \right. \\
 & \times C_{j_{cA}-1, m_{cA}+\mu_2, 1, -\mu_2}^{j_{cA}, m_{cA}} C_{j_{hA}, -m_{hA}-\mu_2, 1, \mu_2}^{j_{hA}, -m_{hA}} \times \\
 & \left. \times C_{j_{cA}-1, 0, l_2, 0}^{j_{hA}, 0} C_{j_{cA}-1, m_{cA}+\mu_2, l_2, 0}^{j_{hA}, m_{hA}+\mu_2} \right\} \times \\
 & \times \left(\frac{r_1}{d}\right)^{l_1} \left(\frac{r_2}{d}\right)^{l_2} F_4\left(\frac{l_1+l_2}{2}, \frac{l_1+l_2+1}{2}; \right. \\
 & \left. l_1+\frac{3}{2}, l_2+\frac{3}{2}; \left(\frac{r_1}{d}\right)^2, \left(\frac{r_2}{d}\right)^2\right). \quad (94)
 \end{aligned}$$

Интеграл, связанный с перекрестным членом, имеет вид

$$\begin{aligned}
 I_{ad}^{(2)} = & i \sqrt{\frac{2j_{cA} + 1}{2j_{hA} + 1}} \frac{1}{\sqrt{(2j_{cD} + 1)(2j_{hD} + 1)}} \times \\
 & \times \int_0^{R_D} dr_1 r_1^2 \sum_{\mu=-1}^1 \sum_{l_1=1}^{\infty} (i)^{l_1} (2l_1 + 1) \times \\
 & \times \left\{ \sqrt{(j_{cD} + 1)(2j_{cD} + 3)} j_{j_{cD} + 1}(k_{cD} r_1) j_{j_{hD}}(k_{hD} r_1) \times \right. \\
 & \times C_{j_{cD} + 1, m_{cD} + \mu, 1, -\mu}^{j_{cD}, m_{cD}} C_{j_{hD}, -m_{hD} - \mu, 1, \mu}^{j_{hD}, -m_{hD}} \times \\
 & \times C_{j_{cD} + 1, 0, l_1, 0}^{j_{hD}, 0} C_{j_{cD} + 1, m_{cD} + \mu, l_1, 0}^{j_{hD}, m_{hD} + \mu} + \\
 & + \sqrt{j_{cD}(2j_{cD} - 1)} j_{j_{cD} - 1}(k_{cD} r_1) j_{j_{hD}}(k_{hD} r_1) \times \\
 & \times C_{j_{cD} - 1, m_{cD} + \mu, 1, -\mu}^{j_{cD}, m_{cD}} C_{j_{hD}, -m_{hD} - \mu, 1, \mu}^{j_{hD}, -m_{hD}} \times \\
 & \left. \times C_{j_{cD} - 1, 0, l_1, 0}^{j_{hD}, 0} C_{j_{cD} - 1, m_{cD} + \mu, l_1, 0}^{j_{hD}, m_{hD} + \mu} \right\} \times \\
 & \times \int_0^{R_A} dr_2 r_2^2 j_{j_{hA}}(k_{hA} r_2) j_{j_{cA}}(k_{cA} r_2) \times \\
 & \times \sum_{l_2=0}^{\infty} (-i)^{l_2} (2l_2 + 1) C_{j_{hA}, -m_{hA}, 1, 0}^{j_{hA}, -m_{hA}} C_{j_{cA}, 0, l_2, 0}^{j_{cA}, 0} \times \\
 & \times C_{j_{cA}, m_{cA}, l_2, 0}^{j_{hA}, m_{hA}} \left( \frac{r_1}{d} \right)^{l_1} \left( \frac{r_2}{d} \right)^{l_2} \times \\
 & \times \frac{\Gamma\left(\frac{l_1 + l_2 + 3}{2}\right)}{\Gamma\left(l_1 + \frac{3}{2}\right) \Gamma\left(l_2 + \frac{3}{2}\right) \Gamma\left(1 - \frac{l_1 + l_2}{2}\right)} \times \\
 & \times F_4\left(\frac{l_1 + l_2}{2}, \frac{l_1 + l_2 + 3}{2}; l_1 + \frac{3}{2}, \right. \\
 & \left. l_2 + \frac{3}{2}; \left(\frac{r_1}{d}\right)^2, \left(\frac{r_2}{d}\right)^2\right). \quad (95)
 \end{aligned}$$

**ПРИЛОЖЕНИЕ В**

Интеграл перекрытия имеет вид

$$\begin{aligned}
 J_1 = & \int_0^{R_A} \phi_{csD}(d - z'_1) \phi_{csA}^*(z'_1) dz'_1 \times \\
 & \times \left[ \int_0^{z'_1} \phi_{hD}(d - z_2) \phi_{hA}(z_2) P_1(\eta_1) dz_2 + \right. \\
 & + \int_{z'_1}^{R_A} \phi_{hD}^*(d - z_2) \phi_{hA}(z_2) P_2(\eta_2) dz_2 + \\
 & + \int_{R_A}^{d - R_D} \phi_{hD}^*(d - z_2) \phi_{hA}(z_2) P_2(\eta_2) dz_2 + \\
 & \left. + \int_{d - R_D}^d \phi_{hD}^*(d - z_2) \phi_{hA}(z_2) P_2(\eta_2) dz_2 \right]. \quad (96)
 \end{aligned}$$

Подобные выражения могут быть выписаны для  $J_2$  и  $J_3$ . В радиальных частях волновых функций (62) перейдем к цилиндрическим функциям, полагая в дальнейшем  $k_{hD} = k_{hA} = k$ , и введем новые переменные интегрирования  $y = kz_2$  и  $x = kz'_1$ . В результате получим следующее выражение для  $J_1$ :

$$\begin{aligned}
 J_1 = & A_{cD} A_{cA}^* A_{hD}^* A_{hA} \left( \frac{\pi}{2k} \right)^2 \times \\
 & \times \frac{J_{j_{cD} + 1/2}(kR_D)}{J_{j_{cD} + 1/2}(k(d - R_A))} \frac{K_{j_{cD} + 1/2}(\kappa(d - R_A))}{K_{j_{cD} + 1/2}(\kappa R_D)} \times \\
 & \times \int_0^{kR_A} \frac{1}{\sqrt{x(kd - x)}} J_{j_{cD} + 1/2}(kd - x) J_{j_{cA} + 1/2}(x) dx \times \\
 & \times \left\{ \frac{J_{j_{cD} + 1/2}(kR_D)}{J_{j_{cD} + 1/2}(k(d - R_A))} \frac{K_{j_{cD} + 1/2}(\kappa(d - R_A))}{K_{j_{cD} + 1/2}(\kappa R_D)} \times \right. \\
 & \times \left[ \int_0^x \frac{1}{\sqrt{y(kd - y)}} J_{j_{hD} + 1/2}(kd - y) J_{j_{hA} + 1/2}(y) \times \right. \\
 & \quad \times \left( P(\eta_1^2) - \frac{x - y}{2k\rho_{max}} \right) dy + \\
 & + \int_x^{kR_A} \frac{1}{\sqrt{y(kd - y)}} J_{j_{hD} + 1/2}(kd - y) J_{j_{hA} + 1/2}(y) \times \\
 & \quad \times \left( P(\eta_2^2) - \frac{y - x}{2k\rho_{max}} \right) dy \left. \right] + \\
 & + \frac{J_{j_{hA} + 1/2}(kR_A)}{J_{j_{hA} + 1/2}(k(d - y))} \frac{K_{j_{hA} + 1/2}(\kappa_{hA}(d - R_D))}{K_{j_{hA} + 1/2}(\kappa_{hA} R_A)} \times
 \end{aligned}$$

$$\times \int_{k(d-R_D)}^{kd} \frac{1}{\sqrt{y(kd-y)}} J_{j_{hD}+1/2}(kd-y) J_{j_{hA}+1/2}(y) \times \left( P(\eta_2^2) - \frac{y-x}{2k\rho_{max}} \right) dy \} \quad (97)$$

Учет граничных условий приводит это выражение к виду

$$J_1 = A_{cD} A_{cA}^* A_{hD}^* A_{hA} \left( \frac{\pi}{2k} \right)^2 \frac{J_{j_{cD}+1/2}(kR_D)}{J_{j_{cD}+1/2}(k(d-R_A))} \times \exp(-\kappa_{cD}(d-R_A-R_D)) \sqrt{\frac{R_D}{d-R_A}} \times \int_0^{kR_A} \frac{1}{\sqrt{x(kd-x)}} J_{j_{cD}+1/2}(kd-x) J_{j_{cA}+1/2}(x) dx \times \left\{ \frac{J_{j_{hD}+1/2}(kR_D)}{J_{j_{hD}+1/2}(k(d-R_A))} \exp(-\kappa_{hD}(d-R_A-R_D)) \times \sqrt{\frac{R_D}{d-R_A}} \left[ \int_0^x \frac{1}{\sqrt{y(kd-y)}} J_{j_{hD}+1/2}(kd-y) \times J_{j_{hA}+1/2}(y) \left( P(\eta_1^2) - \frac{x-y}{2k\rho_{max}} \right) dy + \int_x^{kR_A} \frac{1}{\sqrt{y(kd-y)}} J_{j_{hD}+1/2}(kd-y) J_{j_{hA}+1/2}(y) \times \left( P(\eta_2^2) - \frac{y-x}{2k\rho_{max}} \right) dy \right] + \frac{J_{j_{hA}+1/2}(kR_A)}{J_{j_{hA}+1/2}(k(d-R_D))} \times \exp(-\kappa_{hA}(d-R_A-R_D)) \sqrt{\frac{R_A}{d-R_D}} \times \int_{k(d-R_D)}^{kd} \frac{1}{\sqrt{y(kd-y)}} J_{j_{hD}+1/2}(kd-y) J_{j_{hA}+1/2}(y) \times \left( P(\eta_2^2) - \frac{y-x}{2k\rho_{max}} \right) dy \right\} \quad (98)$$

Величина  $J_1$  может быть рассмотрена для переходов в доноре и акцепторе между уровнями с определенными значениями полных угловых моментов. Рассмотрим переходы, соответствующие  $j_{cD} = j_{hD} = 1$  и  $j_{cA} = j_{hA} = 1$ . Для этого подставим в  $J_1$  явные выражения для функций Бесселя:

$$J_{3/2}(kd-y) = \sqrt{\frac{2}{\pi(kd-y)}} \times \left( \frac{\sin(kd-y)}{kd-y} - \cos(kd-y) \right), \quad (99)$$

$$J_{3/2}(y) = \sqrt{\frac{2}{\pi y}} \left( \frac{\sin(y)}{y} - \cos(y) \right).$$

Тогда получим

$$J_1 = A_{cD} A_{cA}^* A_{hD}^* A_{hA} \frac{\pi}{2} \frac{1}{k^2} \frac{J_{3/2}(kR)}{J_{3/2}(k(d-R))} \times \exp(-\kappa_{cD}(d-2R)) \sqrt{\frac{R}{d-R}} \times \int_0^{kR} \frac{1}{x(kd-x)} \left( \frac{\sin(kd-x)}{kd-x} - \cos(kd-x) \right) \times \left( \frac{\sin(x)}{x} - \cos(x) \right) dx \times \left\{ \frac{J_{3/2}(kR)}{J_{3/2}(k(d-R))} \exp(-\kappa_{hD}(d-2R)) \sqrt{\frac{R}{d-R}} \times \left[ \int_0^x \frac{1}{y(kd-y)} \left( \frac{\sin(kd-y)}{kd-y} - \cos(kd-y) \right) \times \left( \frac{\sin y}{y} - \cos y \right) \left( P(\eta_1^2) - \frac{x-y}{2k\rho_{max}} \right) dy + \int_x^{kR} \frac{1}{y(kd-y)} \left( \frac{\sin(kd-y)}{kd-y} - \cos(kd-y) \right) \times \left( \frac{\sin y}{y} - \cos y \right) \left( P(\eta_2^2) - \frac{y-x}{2k\rho_{max}} \right) dy \right] + \frac{J_{3/2}(kR)}{J_{3/2}(k(d-R))} \exp(-\kappa_{hA}(d-2R)) \frac{R}{d-R} \times \int_{k(d-R)}^d \frac{1}{y(kd-y)} \left( \frac{\sin(kd-y)}{kd-y} - \cos(kd-y) \right) \times \left( \frac{\sin y}{y} - \cos y \right) \left( P(\eta_2^2) - \frac{y-x}{2k\rho_{max}} \right) dy \right\} \quad (100)$$

В интегралы в  $J_1$  входит функция  $(kd-y)^{-1}$ . Вынося множитель  $kd$  за скобки и разлагая в степенной сходящийся ряд дробь

$$\left( 1 - \frac{y}{kd} \right)^{-1} = \sum_{n=0}^{\infty} \left( \frac{y}{kd} \right)^n,$$

получим

$$\begin{aligned}
J_1 = & A_{cD} A_{cA}^* A_{hD}^* A_{hA} \frac{\pi}{2} \frac{1}{k^2} \frac{J_{3/2}(kR)}{J_{3/2}(k(d-R))} \times \\
& \times \exp(-\kappa_{cD}(d-2R)) \sqrt{\frac{R}{d-R}} \frac{1}{(kd)^2} \times \\
& \times \int_0^{kR} \frac{1}{x} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{x}{kd}\right)^n \left(\frac{\sin(kd-x)}{kd-x} - \cos(kd-x)\right) \times \\
& \times \left(\frac{\sin x}{x} - \cos x\right) dx \times \\
& \times \left\{ \frac{J_{3/2}(kR)}{J_{3/2}(k(d-R))} \exp(-\kappa_{hD}(d-2R)) \sqrt{\frac{R}{d-R}} \times \right. \\
& \times \left[ \int_0^x \frac{1}{y} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{y}{kd}\right)^n \left(\frac{\sin(kd-y)}{kd-y} - \cos(kd-y)\right) \times \right. \\
& \times \left(\frac{\sin y}{y} - \cos y\right) \left(P(\eta_1^2) - \frac{x-y}{2k\rho_{max}}\right) dy + \\
& + \int_x^{kR} \frac{1}{y} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{y}{kd}\right)^n \left(\frac{\sin(kd-y)}{kd-y} - \cos(kd-y)\right) \times \\
& \times \left(\frac{\sin y}{y} - \cos y\right) \left(P(\eta_2^2) - \frac{y-x}{2k\rho_{max}}\right) dy \left. \right] + \\
& + \frac{J_{3/2}(kR)}{J_{3/2}(k(d-R))} \exp(-\kappa_{hA}(d-2R)) \frac{R}{d-R} \times \\
& \times \int_{k(d-R)}^d \frac{1}{y} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{y}{kd}\right)^n \left(\frac{\sin(kd-y)}{kd-y} - \cos(kd-y)\right) \times \\
& \times \left(\frac{\sin y}{y} - \cos y\right) \left(P(\eta_2^2) - \frac{y-x}{2k\rho_{max}}\right) dy \left. \right\}. \quad (101)
\end{aligned}$$

Вычисления показывают, что функции  $P(\eta_1^2)$  и  $P(\eta_2^2)$  принимают практически постоянные значения в областях изменения аргументов. Получившиеся интегралы берутся в виде сходящихся рядов по степеням  $(kd)^{-n}$ .

## ЛИТЕРАТУРА

1. В. М. Агранович, М. Д. Галанин, *Перенос энергии электронного возбуждения в конденсированных средах*, Наука, Москва (1978).
2. D. Basko, G. C. La Rossa, F. Bassani, and V. M. Agranovich, *Eur. Phys. J. B* **8**, 353 (1999).
3. Th. Forster, *Ann. Phys.* **437**, 55 (1948).
4. D. L. Dexter, *J. Chem. Phys.* **21**, 836 (1953).
5. R. S. Mulliken, *J. Amer. Chem. Soc.* **72**, 600 (1950).
6. G. Cario and J. Frank, *Z. Physik* **17**, 202 (1923).
7. А. Н. Теренин, А. В. Карякин, *Изв. АН СССР, сер. физ.* **15**, 550 (1951).
8. J. Perrin and C. R. Choucroun, *Hebd. Acad. Sci. Seances* **189**, 1213 (1929).
9. Th. Forster, *Z. Electrochem.* **53**, 93 (1949).
10. М. Д. Галанин, В. Л. Левшин, *ЖЭТФ* **21**, 121 (1951).
11. А. Н. Теренин, В. Л. Ермолаев, *ДАН СССР* **85**, 547 (1952).
12. R. Emerson and W. Arnold, *J. Gen. Physiol.* **16**, 191 (1932).
13. G. D. Scholes, *Ann. Rev. Phys. Chem.* **54**, 57 (2003).
14. Т. На, Th. Enderle, D. F. Ogletree, D. S. Chemla, P. R. Selvin, and S. Weiss, *Proc. Nat. Acad. Sci. USA, Biophysics* **93**, 6264 (1996).
15. M. Wen-Pin Kao, Li-Ling Yang, J. Chih-Kai Lin, Tsong-Shin Lim, W. Fann, and R. P.-Y. Chen, *Bioconjugate Chem.* **19**, 1124 (2008).
16. C. R. Kagan, C. B. Murray, M. Nirmal, and M. J. Bawendi, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 1517 (1996).
17. A. R. Clapp, I. L. Medinz, and H. Mattoussi, *Chem. Phys. Chem.* **7**, 47 (2006).
18. C. Delerue and G. Allan, *Phys. Rev. B* **75**, 195311 (2007).
19. C. Curutchet, A. Franceschetti, A. Zunger et al., *J. Phys. Chem. C* **112**, 13336 (2008).
20. R. Baer and E. Rabani, *J. Chem. Phys.* **128**, 184710 (2008).
21. S. Yu. Kruchinin, A. V. Fedorov, A. N. Baranov, S. Petrova, and K. Berwick, *Phys. Rev. B* **78**, 125311 (2008).
22. V. F. Franso and N. Chaniotakis, *Semiconductors Quantum Dots in Chemical Sensors and Biosensors* **9**, 7266 (2009).
23. G. D. Scholes and D. L. Andrews, *Phys. Rev. B* **72**, 125331 (2005).
24. B. W. Lovett, J. H. Reina, A. Nazir, and A. D. Breggs, *Phys. Rev. B* **68**, 205319 (2003).
25. S. Noda, *Science* **314**, 260 (2006).
26. R. Heitz, I. Mukhamedov, J. Zeng, P. Chen, A. Madhukar, and D. Bimberg, *Superlattices Microstruct.* **25**, 97 (1999).

27. M. Law, J. M. Luther, O. Song, B. R. Hughes, C. L. Perkins, and A. J. Nozik, *J. Amer. Chem. Soc.* **130**, 5974 (2008).
28. V. M. Agranovich, G. C. La Rossa, and F. Bassani, *Письма в ЖЭТФ* **66**, 714 (1997).
29. В. М. Агранович, Д. М. Баско, *Письма в ЖЭТФ* **69**, 232 (1999).
30. D. Basko, G. C. La Rossa, F. Bassani, and V. M. Agranovich, *Eur. Phys. J. B* **8**, 353 (1999).
31. D. M. Basko, V. M. Agranovich, F. Bassani, and G. C. La Rossa, *Eur. Phys. J. B* **13**, 653 (2000).
32. V. M. Agranovich, Yu. N. Gardstein, and M. Litinskaya, *J. Chem. Rev.* **111**, 5179 (2011).
33. V. M. Agranovich, D. M. Basko, and G. C. La Rossa, *Phys. Rev. B* **86**, 165204 (2012).
34. Г. Г. Зегря, А. С. Полковников, *ЖЭТФ* **113**, 1491 (1998).
35. E. O. Kane, *J. Phys. Chem. Sol.* **1**, 249 (1957).
36. Д. М. Самосват, Г. Г. Зегря, *ЖЭТФ* **131**, 1090 (2007).
37. А. И. Ансельм, *Введение в теорию полупроводников*, Наука, Москва (1978).
38. Д. А. Варшалович, А. Н. Москалев, В. К. Херсонский, *Квантовая теория углового момента*, Наука, Москва (1975).
39. А. П. Прудников, Ю. А. Брычков, О. И. Маричев, *Интегралы и ряды. Т. 3. Специальные функции. Дополнительные главы*, Наука, Москва (2003).
40. Г. Бейтмен, А. Эрдейи, *Высшие трансцендентные функции*, Т. 1, пер. Н. Я. Виленкина, Наука, Москва (1973).
41. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика (нерелятивистская теория)*, Наука, Москва (2001).
42. М. Борн, *Атомная физика*, Мир, Москва (1967).
43. А. И. Базь, А. Б. Зельдович, А. М. Переломов, *Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике*, Наука, Москва (1966).
44. Д. М. Самосват, В. П. Евтихийев, А. С. Школьник, Г. Г. Зегря, *ФТП* **47**, 24 (2013).
45. G. Wang, S. Fafard, D. Leonard, J. E. Bowers, J. L. Merz, and P. M. Petroff, *Appl. Phys. Lett.* **64**, 2815 (1994).
46. Л. В. Асрян, Р. А. Сурис, *ФТП* **38**, 1 (2004).
47. В. Л. Ермолаев, Е. Н. Бодунов, Е. Б. Свешникова, Т. А. Шахвердов, *Безызлучательный перенос энергии электронного возбуждения*, Наука, Ленинград (1977).
48. Е. Н. Бодунов, В. Л. Шехтман, *ФТТ* **12**, 2809 (1970).
49. Р. Пантел, Г. Путхоф, *Основы квантовой электроники*, Мир, Москва (1972).
50. В. П. Конышев, А. И. Бурштейн, *Теор. и эксп. химия* **4**, 192 (1968).
51. Е. Б. Догонкин, Г. Г. Зегря, А. С. Полковников, *ЖЭТФ* **117**, 429 (2000).
52. Yabing Li, Qiang Ma, Xinyan Wang, and Xingguang Su, *Luminescence* **22**, 60 (2006).
53. Xin-Yan Wang, Qiang Ma, Ya-Bing Li, Bing Li, Xing-Guang Su, and Qin-Han Jin, *Canadian J. Anal. Sci. Spectr.* **50**, 141 (2005).
54. U. Schobel, H. J. Egelhaaf, A. Brecht, D. Oelkrug, and G. Gauglitz, *Bioconjugate Chem.* **10**, 1107 (1999).
55. Tian-Cai Liu, Hai-Li Zhang, and Jian-Hao Wang, *Anal. Bioanal. Chem.* **391**, 2819 (2008).