

СПЕКТР И ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЭЛЕКТРОНА С ИНЕРЦИОННОЙ И БЕЗЫНЕРЦИОННОЙ ПОЛЯРИЗАЦИЯМИ В СФЕРИЧЕСКОЙ ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ ГЕТЕРОСИСТЕМЕ

© Н.В.Ткач, В.И.Бойчук, В.А.Головацкий, О.Н.Войцезивская

Черновицкий государственный университет,
274012 Черновцы, Украина
(Поступила в Редакцию 3 июня 1996 г.)

Исследован спектр электрона в полупроводниковой наносфере, внедренной в полупроводниковый кристалл-матрицу. Построена теория перенормировки спектра взаимодействием электрона с инерционной (LO - и SO -фононы) и безынерционной поляризациями. На примере гетеросистем $CuCl/KCl$ и $CuCl/GaAs$ показано, что увеличение радиуса нанокристалла приводит к монотонному в первой системе и немонотонному во второй системе сдвигу всего электронного спектра в длинноволновую область.

Спектр квазичастиц (электроны, экситоны, фононы) в пространственно ограниченных кристаллах кардинально отличается от спектра в массивных кристаллах. Этим обстоятельством, а также возможностями технических применений (опто- и наноэлектроника) стимулируется постоянный интерес к исследованию различных гетеросистем, квантовых ям и сверхрешеток.

Теория спектра квазичастиц в квантовых ямах различной симметрии развита в разной мере. Электрон- и экситон-фононное взаимодействие наиболее детально и глубоко исследовано для плоских гетеросистем [1-5], значительно разработана теория для цилиндрических и трубчатых квантовых ям [6-9]. Теория спектра квазичастиц в сферических нанокристаллах была менее развита. Однако, по-видимому, после экспериментальных работ Екимова и Онущенко [10-12], где исследовался экситонный спектр в сферическом микрокристалле, внедренном в диэлектрическую матрицу, начал повышаться интерес теоретиков к таким гетеросистемам. Первая теоретическая модель, объясняющая часть экспериментальных результатов, была исследована в работе Эфросов [13]. В серии работ Ефремова и Покутного [14-17] была развита теория электронного и экситонного спектров в сферической гетеросистеме с учетом безынерционной поляризации.

Теория электрон-фононного взаимодействия в полупроводниковой наносфере, внедренной в диэлектрическую среду, развивалась в работе [18] на базе модели поляризующегося континуума. В этой работе не

учитывалась безынерционная поляризация, и главное внимание уделялось анализу роли внутриобъемных продольных оптических (LO) и интерфейсных (SO) фононов в перенормировке электронного спектра.

Теория электронного и экситонного спектров в сферической гетеросистеме, состоящей из полупроводниковой наносферы и полупроводниковой матрицы, в которой бы учитывалось взаимодействие квазичастиц с инерционной (LO - и SO -фононы) и безынерционной поляризациями, пока отсутствует. Цель настоящей работы состоит в том, чтобы на базе континуальной модели полупроводниковой сферической гетеросистемы с известным фононным спектром [19] построить общую теорию электронного спектра с учетом инерционной и безынерционной поляризаций.

1. Спектр и волновые функции электрона в наносфере с учетом безынерционной поляризации

Рассмотрим электрон в сферическом полупроводниковом нанокристалле прозрачности ε_1 , который помещен в полупроводниковую среду прозрачности ε_2 . Начало системы координат поместим в центре сферы. Радиус сферы a предполагается достаточно большим, чтобы выполнялось условие применимости континуальной модели. Предполагается также, что электрон не может проникать за пределы сферы, а взаимодействует с безынерционной поляризацией поля самодействия, потенциальная энергия которого найдена в работе [14].

$$V(r) = \begin{cases} \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} \frac{e^2}{2\varepsilon_1 a} \left[\frac{a^2}{a^2 - r^2} + \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1} F(1; \varepsilon; \varepsilon + 1; (r/a)^2) \right], & r < a, \\ \infty, & r = 0, \end{cases} \quad (1)$$

где $\varepsilon = \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}$.

Учитывая сферическую симметрию потенциальной энергии (1), решение стационарного уравнения Шредингера

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V(r) \right\} \Psi = E \Psi$$

ищем в виде [20]

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{r} R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (2)$$

Для радиальной волновой функции получается уравнение

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2 R_{nl}(r)}{dr^2} + \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m^* r^2} + V(r) - E_{nl} \right) R_{nl}(r) = 0, \quad (3)$$

решение которого определяет энергетический спектр E_{nl} электрона в поле безынерционной поляризации сред.

Из уравнения (3) видно, что поскольку n и l независимо принимают произвольные значения ($n = 1, 2, \dots, \infty$, $l = 0, 1, 2, \dots, \infty$), а $m = 0, \pm 1$,

$\pm 2, \dots, \pm l$, лишь уровни с $l = 0$ невырождены, а все остальные уровни $2l + 1$ -кратно вырождены. Уравнение (3) точно не решается, поэтому спектр и волновые функции находятся прямым вариационным методом Ритца.

При выборе класса пробных функций учитываются следующие физические требования. Все радиальные функции должны удовлетворять условиям

$$R_{nl}(r = 0, a) = 0,$$

а так как потенциальная энергия (1) при $a \rightarrow \infty$ имеет кулоновский характер, то $R_{nl}(r, a \rightarrow \infty)$ должны иметь вид собственных функций гамильтониана одномерной водородоподобной системы. Таким образом, имеем

$$R_{nl}(r) = \frac{A_{nl}}{\sqrt{a}} \exp\left(-\frac{\alpha_{nl}}{a} r\right) \sin\left(\frac{\pi}{a} r\right) \sum_{k=0}^{n-1} C_k^{(n)} \left(\frac{r}{a}\right)^k, \quad (4)$$

где $a_e = \frac{\hbar^2 \epsilon_1}{r^2 m^*}$, α_{nl} — вариационный параметр состояния n, l , $C_0^{(n)} \equiv 1, C_{k \neq 1}^{(n)}$ определяются условиями ортогональности волновых функций. Например:

$$C_1^{(2)} = -4\pi \frac{a_e}{a} \left[\frac{4\pi^2 + \alpha^2}{\alpha} + \alpha \frac{4\pi^2 - \alpha^2}{4\pi^2 + \alpha^2} + \frac{4\pi^2}{1 - e^\alpha} \right]^{-1}, \quad (5)$$

где $\alpha = \frac{a}{a_e} (\alpha_{10} + \alpha_{20})$.

Коэффициенты A_{nl} определяются условием нормировки

$$A_{nl} = \left(\int_0^1 d\rho \exp\left(-2\alpha_{nl} \frac{a}{a_e} \rho\right) \sin^2(\pi\rho) \left\{ \sum_{k=0}^{n-1} C_k^n \left(\frac{a}{a_e}\right)^k \rho^k \right\} \right)^{-1/2}. \quad (6)$$

Энергетический спектр электрона (E_{nl}), взаимодействующего с безынерционной поляризацией, определяется минимизацией по параметрам α_{nl} соответствующего функционала

$$E_{nl} = \min \int_0^a R_{nl}(\alpha_{nl}, r) \left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m^* r^2} + V(r) \right) R_{nl}(\alpha_{nl}, r) dr. \quad (7)$$

2. Гамильтониан электрон-фононной системы в представлении вторичного квантования с учетом безынерционной поляризации

Рассмотрим электрон, взаимодействующий с полем безынерционной поляризации и с колебаниями кристаллической решетки и находящийся внутри сферического нанокристалла. Полный гамильтониан такой системы в представлении вторичного квантования по переменным обеих подсистем определяется следующим образом. Используя

систему волновых функций (2) электрона в поле безынерционной поляризации, найденную в предыдущем разделе, и вводя квантованную волновую функцию

$$\hat{\Psi} = \sum_{nlm} \Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) \hat{a}_{nlm}, \quad (8)$$

где \hat{a}_{nlm} — оператор (Ферми) уничтожения электронного состояния (nlm), согласно общей теории, получим

$$\hat{H}_e = \sum_{nlm} E_{nl} \hat{a}_{nlm}^+ \hat{a}_{nlm}. \quad (9)$$

Гамильтониан фононной подсистемы в координатном представлении для континуальной модели полупроводниковой микросферы в полупроводниковой среде получается как частный случай более общей гетеросистемы, исследованной в [19]. Согласно общей теории [20], гамильтониан фононов в представлении чисел заполнения получается путем введения квантовых операторов векторов поляризации

$$\hat{P}_{ml}^\lambda = \left[\frac{\hbar}{2\omega_\lambda(l)} \right]^{1/2} \mathbf{P}_{ml}^\lambda \left(\hat{b}_{m1\lambda} + \hat{b}_{-m1\lambda}^+ \right), \quad (10)$$

где \mathbf{P}_{ml}^λ — векторы поляризации, определенные в [20], $\hat{b}_{m1\lambda}^+$, $\hat{b}_{m1\lambda}$ — бозонные операторы рождения и уничтожения фононов. В результате гамильтониан поляризационных фононов в сферическом нанокристалле имеет вид

$$\hat{H}_{ph} = \sum_{\lambda ml} \Omega_{l\lambda} \left(\hat{b}_{\lambda ml}^+ \hat{b}_{\lambda ml} + \frac{1}{2} \right). \quad (11)$$

Здесь $\Omega_{l\lambda=\pm} = \hbar\omega_{l\lambda=\pm}$ — энергии интерфейсных фононов, определяемые, согласно [19], дисперсионным уравнением

$$\varepsilon_{1\infty} \frac{\omega_{l\pm}^2 - \omega_{L1}^2}{\omega_{L1}^2 - \omega_{T1}^2} = \varepsilon_{2\infty} \frac{\omega_{l\pm}^2 - \omega_{L2}^2}{\omega_{L2}^2 - \omega_{T2}^2}, \quad (12)$$

а $\Omega_{L1} = \hbar\omega_{l\lambda=s}$ — энергия продольного оптического фонона наносферы.

Гамильтониан электрон-фононного взаимодействия определяется зарядом электрона и потенциалом поля инерционной поляризации наносферы, поэтому, согласно [1], имеем

$$\hat{H}_{e-ph} = eX_1^{-1}\varphi(r).$$

Учитывая, что $\mathbf{P}(\mathbf{r}) = \nabla\varphi(\mathbf{r})$, и используя (10), получим гамильтониан электрон-фононного взаимодействия в представлении чисел заполнения фононов и в координатном по электронным переменным представлении в следующем виде:

$$\begin{aligned} H_{e-ph} = & \sum_{lm} \sqrt{\frac{2\pi e^2}{R}} Y_{lm}(\theta, \varphi) \left\{ \sum_{\lambda=\pm} \sqrt{\frac{\hbar\omega_\lambda}{l\beta_1^{-1} + (l+1)\beta_2^{-1}}} \left(\frac{r}{R}\right)^l (\hat{b}_{m1\lambda} + \hat{b}_{-m1\lambda}^+) + \right. \\ & \left. + \sum_s \sqrt{\frac{2\hbar\omega}{(k_s R)^2} \left(\frac{1}{\varepsilon_{\infty 1}} - \frac{1}{\varepsilon_{01}}\right) \frac{j_l(k_s r)}{|j_{l+1}(k_s r)|}} (\hat{b}_{mls} + \hat{b}_{-mls}^+) \right\}, \quad (13) \end{aligned}$$

где, согласно [19], величины k_s определяются нулями сферических функций Бесселя

$$j_l(k_s a) = 0, \quad (14)$$

а величины

$$\beta_\gamma = \left[\frac{1}{\varepsilon_{\infty\gamma}} - \frac{1}{\varepsilon_{0\gamma}} \right] \frac{\omega_{L\gamma}^2}{\omega_{\lambda=\pm}^2} \left[\frac{\omega_{\lambda=\pm}^2 - \omega_{T\gamma}^2}{\omega_{L\gamma}^2 - \omega_{T\gamma}^2} \right]^2, \quad \gamma = 1, 2, \quad (15)$$

те же, что были введены Мори и Андо для модели плоской гетеросистемы в [1].

Окончательное аналитическое выражение для гамильтониана электрон-фононного взаимодействия в представлении вторичного квантования по всем переменным системы получается из (13) с использованием квантованных волновых функций (8). В результате \hat{H}_{e-ph} имеет типичный вид

$$\hat{H}_{e-ph} = \sum_{\substack{n_1 l_1 m_1 \\ n_2 l_2 m_2 \\ \lambda l m}} F \left(\begin{matrix} n_1 l_1 m_1 \\ \lambda l m \\ n_2 l_2 m_2 \end{matrix} \right) \hat{a}_{n_1 l_1 m_1}^+ \hat{a}_{n_2 l_2 m_2} \left(\hat{b}_{m l \lambda} + \hat{b}_{-m l \lambda}^+ \right). \quad (16)$$

Фигурирующие в (16) функции связи определяются выражением

$$F \left(\begin{matrix} n_1 l_1 m_1 \\ \lambda l m \\ n_2 l_2 m_2 \end{matrix} \right) = F \left(\begin{matrix} n_1 l_1 \\ \lambda l \\ n_2 l_2 \end{matrix} \right) (Y_{lm})_{l_2 m_2}^{l_1 m_1}. \quad (17)$$

Здесь

$$F \left(\begin{matrix} n_1 l_1 \\ \lambda(\pm) l \\ n_2 l_2 \end{matrix} \right) = \sqrt{\frac{2\pi e^2 \hbar \omega_\lambda}{a [l\beta_1^{-1} + (l+1)\beta_2^{-1}]}} \int_0^a R_{n_1 l_1}^*(r) \left(\frac{r}{a}\right)^l R_{n_2 l_2}(r) dr, \quad (18)$$

$$F \left(\begin{matrix} n_1 l_1 \\ \lambda l \\ n_2 l_2 \end{matrix} \right) = \sqrt{\frac{4\pi e^2 \hbar \omega_L}{a(k_s a)^2} \left(\frac{1}{\varepsilon_{\infty 1}} - \frac{1}{\varepsilon_{01}} \right)} \int_0^a R_{n_1 l_1}^*(r) \frac{j_l(k_s r)}{|j_{l+1}(k_s a)|} R_{n_2 l_2}(r) dr, \quad (19)$$

а интеграл от произведения трех сферических функций известен [21]

$$\begin{aligned} (Y_{lm})_{l_2 m_2}^{l_1 m_1} &= \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^\pi d\varphi Y_{l_1 m_1}^*(\theta, \varphi) Y_{lm}(\theta, \varphi) Y_{l_2 m_2}(\theta, \varphi) = \\ &= (-1)^{l_{\max} - m_1} i^{l(\pm i)^{l_1 + l_2}} \sqrt{\frac{(2l+1)(2l_1+1)(2l_2+1)}{4\pi}} \times \\ &\quad \times \begin{pmatrix} l_1 & l & l_2 \\ -m_1 & m & m_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & l & l_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{cases} +1, & l_1 \geq l_2, \\ -1, & l_1 \leq l_2, \end{cases} \\ m_1 &= m + m_2, \quad l_1 + l + l_2 = 2N, \quad N = 0, 1, 2, \dots, \infty, \end{aligned}$$

где $\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}$ — 3j-символы Вигнера [21].

Таким образом, в представлении чисел заполнения определен полный гамильтониан электрон-фононной системы в полупроводниковой наносфере, погруженной в полупроводниковую среду

$$\hat{H} = \hat{H}_e + \hat{H}_{ph} + \hat{H}_{e-ph}. \quad (20)$$

Как видно, даже в сравнительно простой модели гамильтониан оказывается весьма сложным.

3. Перенормировка электронного спектра в сферической гетеросистеме

Если радиус микросферы достаточно мал (так, что энергией межуровневого взаимодействия через фононы можно пренебречь по сравнению с разностью энергий между этими уровнями), то гамильтониан (16) упрощается

$$\hat{H}_{e-ph} = \sum_{\nu} \sum_{\substack{\lambda=\pm, s \\ l_1 \leq l}} I_{\nu}(\lambda, 2l_1) \hat{a}_{\nu}^{\dagger} \hat{a}_{\nu} (\hat{b}_{2l_1 \lambda} + \hat{b}_{2l_1 \lambda}^{\dagger}). \quad (21)$$

Здесь введены обозначения

$$\nu = \{n, l, m\}, \quad \hat{a}_{\nu} = \hat{a}_{nlm}, \quad \hat{b}_{2l_1 \lambda} = \hat{b}_{0 2l_1 \lambda},$$

$$I_{\nu}(\lambda, 2l_1) = F \left(\begin{matrix} n & l & m \\ \lambda & 2l_1 & 0 \\ n & l & m \end{matrix} \right) = F \left(\begin{matrix} \lambda & n & l \\ \lambda & n & l \\ n & l & m \end{matrix} \right) Y_{2l}^m, \quad (22)$$

где

$$Y_{lm} = (2N) = \sqrt{\frac{4N+1}{4\pi}} (2l+1)(2N)!^3 \frac{(l+N)!(l+m)!(l-m)![2(l-N)]!}{N!^2(l-N)![2(l+N)+1]!} \times$$

$$\times \frac{(-1)^p}{\sum_p p!(2N-p)!(l+m-p)!(l-2N-m+p)!},$$

$$2N+m-l, \quad 0 \leq p \leq \min\{2N, l+m\}. \quad (23)$$

Теперь гамильтониан (20) диагонализуется, как известно [22], переходом от операторов \hat{a}_{ν} , $\hat{b}_{2l_1 \lambda}$ к новым операторам \hat{A}_{ν} , $\hat{\beta}_{2l_1 \lambda}$ унитарным преобразованием

$$\hat{S} = \exp \left(\hat{\sigma} \sum_{\nu} \hat{A}_{\nu}^{\dagger} \hat{A}_{\nu} \right), \quad (24)$$

где

$$\hat{\sigma} = \sum_{\substack{\lambda=\pm, s \\ l_1 \leq l}} \Omega_{2l_1 \lambda}^{-1} \left\{ I_{\nu}^*(\lambda, 2l_1) \hat{\beta}_{2l_1 \lambda}^{\dagger} - I_{\nu}(\lambda, 2l_1) \hat{\beta}_{2l_1 \lambda} \right\}.$$

В результате полный гамильтониан электрона, взаимодействующего с инерционной и безынерционной поляризациями в гетеросистеме, приобретает вид

$$\hat{H} = \sum_{\nu} E_{\nu} A_{\nu}^{\dagger} A_{\nu} + \sum_{l_1, \lambda = \pm, s} \Omega_{l_1 \lambda} \left(\hat{\beta}_{2l_1 \lambda}^{\dagger} \hat{\beta}_{l_1 \lambda} + \frac{1}{2} \right), \quad (25)$$

где

$$E_{\nu} = E_{nlm} = E_{nl} - \sum_{\substack{\lambda = \pm, s \\ l_1 \leq l}} \frac{|I_{nlm}(2l_1, \lambda)|^2}{\Omega_{2l_1 \lambda}} \quad (26)$$

— перенормированная фононами энергия электрона в состоянии ν . Для анализа и расчетов формулу (26) удобнее представить в эквивалентном виде

$$E_{nlm} = E_{nl} + \Delta_{nlm}^s + \Delta_{nlm}^L. \quad (27)$$

Здесь

$$\begin{aligned} \Delta_{nlm}^s = & -2\pi \frac{e^2}{a} \sum_{l_1=1}^l \left\{ \frac{1}{\left[2l_1 \beta_1^{-1} \left(\omega_{2l_1}^{(+)} \right) \right] + \left[(2l_1 + 1) \beta_2^{-1} \left(\omega_{2l_1}^{(+)} \right) \right]} + \right. \\ & \left. + \frac{1}{\left[2l_1 \beta_1^{-1} \left(\omega_{2l_1}^{(-)} \right) \right] + \left[(2l_1 + 1) \beta_2^{-1} \left(\omega_{2l_1}^{(-)} \right) \right]} \right\} \left[Y_{2l_1}^{m_1} \int_0^a |R_{nl}(r)|^2 (r/a)^{2l_1} dr \right]^2 \end{aligned} \quad (28)$$

— частичный сдвиг nlm -го энергетического уровня за счет взаимодействия с поверхностными фононами,

$$\begin{aligned} \Delta_{nlm}^L = & -4\pi \frac{e^2}{a} \left(\frac{1}{\varepsilon_{\infty 1}} - \frac{1}{\varepsilon_{01}} \right) \sum_{s=1}^{\infty} \sum_{l_1 \leq 0}^l \times \\ & \times \left(\frac{Y_{2l_1}^m}{(k_s a) |j_{2l_1+1}(k_s a)|} \int_0^a |R_{nl}(r)|^2 j_{2l_1}(k_s r) dr \right)^2 \end{aligned} \quad (29)$$

— частичный сдвиг того же энергетического уровня за счет взаимодействия с объемными продольными оптическими фононами.

4. Анализ и обсуждение результатов

Анализ полученных результатов показывает следующее. Электрон, движущийся в ограниченном пространстве внутри кристалла, как и должно быть, обладает дискретным спектром энергий, а его состояния описываются тремя квантовыми числами n, l, m . Энергетический спектр вырожден, причем как в модели бесконечно глубокой сферической потенциальной ямы (БГСЯ), так и в модели с учетом безынерционной поляризации (БП) кратность вырождения одинакова (nl -й

уровень энергии вырожден $2l + 1$ -кратно). Взаимодействие электрона с фононами частично снимает вырождение. Поэтому в модели, учитывающей инерционную и безынерционную поляризации (ИБП), nl -ый уровень вырожден l -кратно. Все уровни с $l = 0$, естественно, невырождены.

Конкретный расчет спектра электрона в наносфере выполнялся для двух моделей гетеросистемы: а) нанокристалл CuCl в матрице KCl (отталкивающий потенциал от границы раздела сред); б) нанокристалл CuCl в матрице GaAs (притягивающий потенциал). В таблице приведены физические параметры кристаллов [23], а также величины интерфейсных фононов, вычисленные по формуле (12).

На рис. 1 приведены графики зависимости четырех энергетических уровней от радиуса наносферы, рассчитанные в моделях БГСПЯ и БП. Как видно из рис. 1, независимо от радиуса наносферы в модели БП все уровни смещены относительно своих положений в модели БГСПЯ в область больших энергий для системы с отталкивающим потенциалом (модель а) и в область меньших энергий для системы с притягивающим потенциалом (модель б). Увеличение радиуса наносферы вызывает смещение всех уровней в область меньших энергий в обеих моделях. В модели БП характер смещений уровней зависит от типа гетеросистемы. В системе типа а из-за отталкивающего потенциала все уровни находятся в области $E > 0$ и с изменением радиуса наносферы смещаются монотонно. В системе типа б с увеличением радиуса уровни смещаются немонотонно. Наиболее низкие из них последовательно смещаются в отрицательную область энергий, достигают минимума, а затем смещаются в сторону больших энергий, выходя на насыщение в области $E < 0$. Немонотонность вполне понятна из физических соображений. Действительно, полная энергия состоит из положительной кинетической, которая спадает как a^{-2} с увеличением радиуса, и из отрицательной потенциальной $\sim a^{-1}$. Конкуренция этих вкладов определяет наличие минимума, а следовательно, и немонотонную зависимость полной энергии от a . Если значения a достаточно большие, то в области $E < 0$ при фиксированном n все серии уровней с различными l и m вырождаются в один. Система n уровней образует квазиводородоподобный спектр, характерный для плоской (при $a \rightarrow \infty$) гетеросистемы. На рис. 1 видны только две серии, соответствующие $n = 1, 2$.

Инерционная поляризация также существенно влияет на спектр электрона. Взаимодействие с фононами кроме расщепления уровней с $l \neq 0$ приводит к их длинноволновому сдвигу, как это видно из рис. 2-4, независимо от типа гетеросистемы. Как уже отмечалось, в состояниях с $l = 0$ электрон взаимодействует только с LO-фононами, а в состояни-

Параметры кристаллов и величины интерфейсных фононов

Кристалл	$m^*(m_0)$	ϵ_0	ϵ_∞	$\Omega_L,$ см ⁻¹	$\Omega_T,$ см ⁻¹	Интерфейс	$\Omega_+,$ см ⁻¹	$\Omega_-,$ см ⁻¹
KCl	-	4.85	2.1	26.33	17.33	KCl-CuCl	26.01	17.32
CuCl	0.5	7.9	3.61	25.64	17.33			
GaAs	0.054	12.88	10.9	36.2	33.3	CuCl-GaAs	35.22	21.03

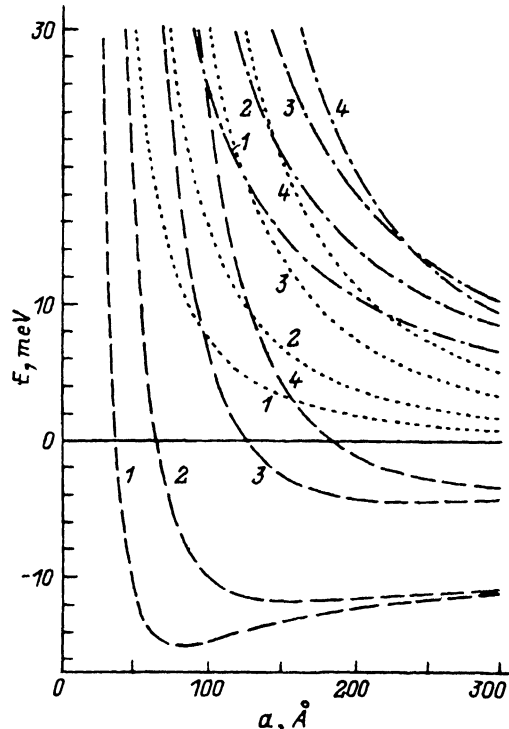


Рис. 1. Зависимость энергий электронов от радиуса наносферы.

Пунктирные линии — модель БГСПЯ, штрихпунктирные — модель БП для CuCl/KCl , штриховые — модель БП для CuCl/GaAs . Кривые 1-4 соответствуют состояниям nl (10, 11, 20, 21).

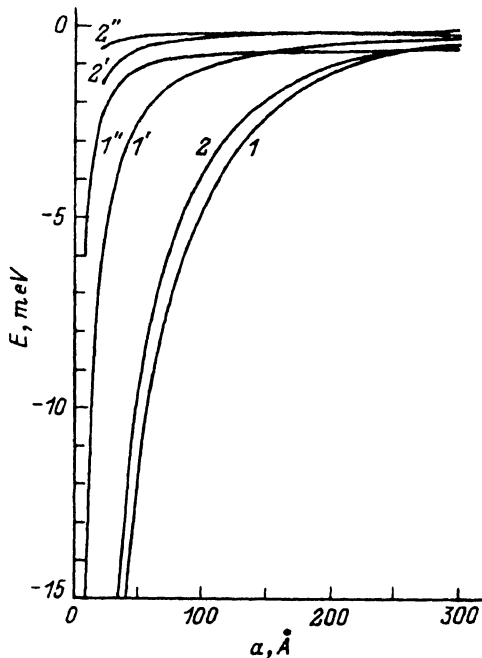


Рис. 2. Зависимость парциальных энергетических сдвигов от радиуса наносферы.

1 — сдвиг Δ_{110}^L , 2 — Δ_{111}^L , 1', 1'' — Δ_{110}^S , 2', 2'' — Δ_{111}^S ; 1', 2' — модель а, 1'', 2'' — модель б.

я с $l \neq 0$ — и с LO -, и с SO -фононами. На рис. 2 видны вклады продольных оптических и интерфейсных фононов в сдвиги соответствующих энергетических уровней электрона. Практически при всех значениях радиуса вклады LO -фононов в 4-5 раз преобладают над вкладами SO -фононов для обоих типов гетеросистем. С увеличением радиуса нанокристаллов абсолютная величина вклада фононов в сдвиги всех уровней уменьшается.

Для удобства анализа на рис. 3, 4 приведены результаты расчета энергетического спектра в моделях БП и ИБП для гетерогенных систем типа а и б соответственно. Из этих рисунков видно, что по отношению к модели БП электрон-фононное взаимодействие не изменяет характера зависимости энергетических уровней от радиуса наносферы, а только перенормирует величины сдвигов. Для исследуемых моделей абсолютные значения парциальных сдвигов за счет взаимодействия электрона с инерционной и безынерционной поляризациями оказались соразмерными. Таким образом, для системы с отталкивающим потенциалом (CuCl/KCl) учет обеих поляризаций привел к результату, близкому (за исключением расщепления) к результатам модели БГСПЯ. Для системы с притягивающим потенциалом (CuCl/GaAs) учет взаимодействия электрона с инерционной и безынерционной по-

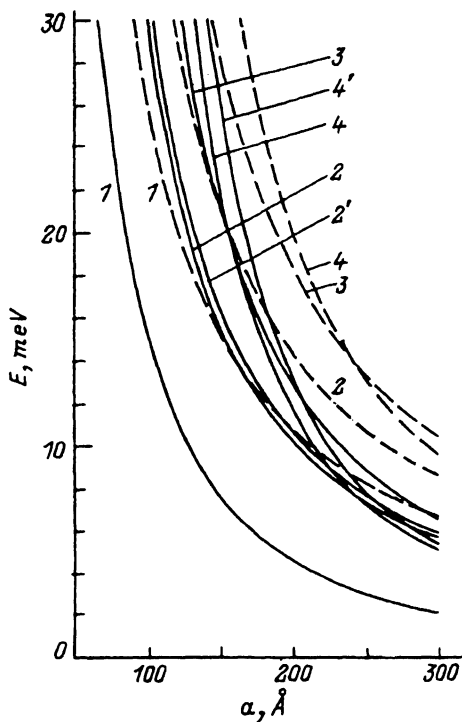


Рис. 3. Зависимость энергий электрона в гетеросистеме CuCl/KCl от радиуса наносферы.

Штриховые линии — модель БП, сплошные — модель ИБП. Кривые 1-4 соответствуют состояниям nl (10, 11, 20, 21), кривые 1, 2, 2', 3, 4, 4' — состояниям nlm (100, 110, 111, 200, 210, 211).

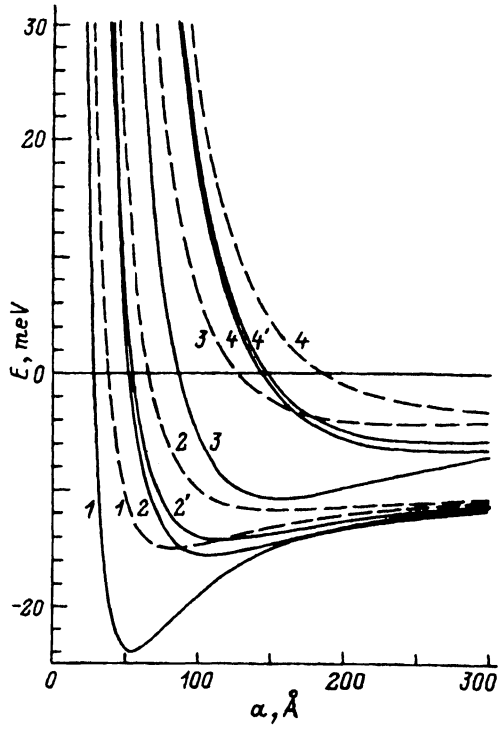


Рис. 4. Зависимость энергий электрона в гетеросистеме CuCl/GaAs от радиуса наносферы.

Штриховые линии — модель БП, сплошные — модель ИБП. Обозначение кривых то же, что и на рис. 3.

ляризациями приводит и к качественному (немонотонность, расщепление), и к количественному (длинноволновой сдвиг уровней на величину порядка фононной энергии) различиям с результатами модели БГСПЯ.

Чтобы показать качественные особенности зависимости энергетических уровней от радиуса нанокристалла; графики на рис. 1-4 приведены в области $0 \leq a \leq 300 \text{ \AA}$. Однако следует иметь в виду, что численные значения достоверны лишь в области $30 \leq a \leq 150 \text{ \AA}$. В области $a \leq 30 \text{ \AA}$ несправедлива континуальная модель кристалла, а в области $a \geq 150 \text{ \AA}$ необходим учет межуровневого взаимодействия через фононы.

Наконец, следует заметить, что в зависимости от соотношения величин диэлектрических проницаемостей и величин фононных энергий наносферы и кристалла-матрицы характер и величины энергетических сдвигов, возможно, имеют черты, которые не проявлялись на конкретно рассчитанных моделях, но информация о них содержится в общей теории.

Список литературы

- [1] N. Mori, T. Ando. Phys. Rev. **B40**, 9, 6175 (1989).
- [2] S Rudin, T.L. Reinecke. Phys. Rev. **B41**, 11, 7713 (1990).
- [3] L. Wendler, B. Hartwig. J. Phys. Cond. Matter 3, 9907 (1991).
- [4] A. Thilagam, Jai Sinhh. Phys. Rev. **B45**, 7, 4636 (1993).
- [5] N.C. Constantinou, B.K. Ridley. Phys. Rev. **B49**, 24, 17065 (1994).
- [6] N.C. Constantinou, B.K. Ridley. Phys. Rev. **B41**, 15, 10662 (1990).
- [7] N.C. Constantinou, B.K. Ridley. Phys. Rev. **B41**, 15, 10627 (1990).
- [8] M. Masale, N.C. Constantinou. Phys. Rev. **B48**, 15, 11128 (1994).
- [9] J.M. Rorison. Phys. Rev. **B50**, 11, 8008 (1994).
- [10] А.И. Екимов, А.А. Онущенко. Письма в ЖЭТФ **34**, 6, 363 (1981).
- [11] А.И. Екимов, А.А. Онущенко. ФТП **16**, 12, 1215 (1982).
- [12] А.И. Екимов, А.А. Онущенко. Письма в ЖЭТФ **40**, 6, 337 (1984).
- [13] Ал.Л. Эфрос, А.Л. Эфрос. ФТП **16**, 12, 1209 (1982).
- [14] Н.А. Ефремов, С.И. Покутный. ФТТ **27**, 1, 48 (1985).
- [15] Н.А. Ефремов, С.И. Покутный. ФТТ **32**, 6, 1637 (1990).
- [16] Н.А. Ефремов, С.И. Покутный. ФТТ **33**, 10, 2845 (1991).
- [17] С.И. Покутный. ФТТ **34**, 8, 2386 (1992).
- [18] M.C. Klein, F. Nache, D. Richard, C. Flytzanis. Phys. Rev. **B42**, 17, 11123 (1990).
- [19] Н.В. Ткач, Е.М. Мищенко. ФТТ **36**, 11, 3222 (1994).
- [20] А.С. Давыдов. Квантовая механика. Физматгиз. М. (1973). 703 с.
- [21] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Квантовая механика. Физматгиз. М. (1963). 702 с.
- [22] А.С. Давыдов. Теория твердого тела. Физматгиз. М. (1973). 703 с.
- [23] Ч. Киттель. Введение в физику твердого тела. Наука. М. (1978). 791 с.