

УДК 548.4

©1995

ИССЛЕДОВАНИЕ ИНТЕРФЕЙСНЫХ ПОЛЯРОННЫХ СОСТОЯНИЙ ПРОСТОЙ ГЕТЕРОСТРУКТУРЫ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

В.И.Бойчук, И.В.Билынский

Дрогобычский государственный педагогический институт им. И.Франко
(Поступила в Редакцию 1 апреля 1993 г.
В окончательной редакции 12 июля 1994 г.)

Методом функций Грина исследовано интерфейсное поляронное состояние электрон-фононной системы простой гетероструктуры полупроводников. Изучены зависимости энергии, эффективной массы интерфейсного полярона и среднего числа фононов поляронного состояния от расстояния электрона до интерфейса и от величины константы электрон-фононного взаимодействия. Для определения пределов применимости рассматриваемых приближений для массового оператора электрона указанные величины вычислены также вариационным методом Ли-Лоу-Пайнса.

Исследования приповерхностных (интерфейсных) состояний электронов и фононов простых, двойных гетероструктур и сверхрешеток проведено в различных работах [1-6]. Получены условия существования поверхностного полярона, определялась зависимость величины и анизотропии эффективной массы полярона от выбора поверхностного потенциала электрона, изучались свойства интерфейсных минизон и т.д. В упомянутых работах использовались различные методы расчета, применявшиеся в аналогичных задачах для бесконечных кристаллов: методы Ли-Лоу-Пайнса, теории возмущений и функций Грина. При использовании последнего метода, как правило, ограничиваются только однофононным приближением [5], которое эквивалентно второму порядку теории возмущений и накладывает сильное ограничение на величину констант электрон-фононного взаимодействия.

Из общей теории поляронов известно [7], что в случае промежуточных констант электрон-фононного взаимодействия g наилучшие результаты для энергии, эффективной массы полярона можно получить вариационным методом Ли-Лоу-Пайнса [8]. Метод функций Грина для таких значений g традиционно считается не столь эффективным, так как задача сводится к решению интегрального уравнения для массового оператора (МО) электронов, которое к тому же не является точным, так как оно получено при отбрасывании всех диаграмм с пересечениями фононных линий. Сравнение результатов, полученных методом функций Грина и другими методами (например, методом Ли-Лоу-Пайнса), показывает, что, вообще говоря, диаграммами с пересечениями пренебрегать нельзя [7].

Проблема учета диаграмм с пересечениями возникает также при исследовании припороговых состояний электрон-фононной системы [9], где метод функций Грина, по существу, является единственным эффективным методом.

Развитый в [10] метод расчета функций Грина произвольных квазичастиц дает возможность в принципе решить эту проблему. Полученный в этой работе МО представляет собой бесконечную интегральную цепную дробь, в которой учтены все диаграммы.

В данной работе на основе метода [10] изучаются интерфейсные состояния электрона, взаимодействующего с интерфейсными и полугораниченными объемными оптическими фононами. Получены зависимости энергии, эффективной массы интерфейсного полярона и среднего числа фононов поляронного состояния от расстояния электрона до интерфейса и от величины константы электрон-фононного взаимодействия. Кроме того, для определения пределов применимости рассматриваемых приближений для МО электронов указанные величины вычислены вариационным методом Ли-Лоу-Пайнса.

1. Постановка задачи. Общие формулы

Рассматривается система двух полугораниченных полупроводников, образующих простую гетероструктуру. Начало системы координат выбирается на границе раздела полупроводников (на интерфейсе), а ось OZ системы перпендикулярна к интерфейсу. Электрон поверхностного состояния находится в полупространстве $z \geq 0$ и взаимодействует с интерфейсными и полугораниченными оптическими фононами. Как следует из [11,12], гамильтониан электрон-фононной системы в представлении вторичного квантования по фононным переменным можно записать в виде

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_e + \mathcal{H}_{\text{int}}^S + \mathcal{H}_{\text{int}}^V, \quad (1)$$

где

$$\mathcal{H}_e = \theta(z)p^2/2m, \quad \theta(z) = \begin{cases} 1, & z \geq 0, \\ 0, & z < 0, \end{cases}$$

$$\mathcal{H}_{\text{int}}^S = \sum_{\mathbf{q}_S} \left(\frac{2\pi\omega_S e^2}{S q_S} \right)^{1/2} \left(\frac{1}{\beta_1^{-1}(\omega_S) + \beta_2^{-1}(\omega_S)} \right)^{1/2} e^{i\mathbf{q}_S \mathbf{R}} \times \\ \times e^{-q_S |z|} (b_S(\mathbf{q}_S) + b^+(-\mathbf{q}_S)), \quad (2)$$

$$\mathcal{H}_{\text{int}}^V = \sum_{\mathbf{q}_V, q_z > 0} \left(\frac{2\pi\omega_{LV} e^2}{V} \right)^{1/2} \left(\frac{1}{\varepsilon_{\infty l}} - \frac{1}{\varepsilon_{0l}} \right)^{1/2} \frac{2}{(q_V^2 + q_z^2)^{1/2}} e^{i\mathbf{q}_V \mathbf{R}} H_l(z) \times \\ \times \sin(q_z z) (b_V(\mathbf{q}_V) + b^+(-\mathbf{q}_V)), \quad (3)$$

где

$$\beta_l(\omega) = \left(\frac{1}{\varepsilon_{\infty l}} - \frac{1}{\varepsilon_{0l}} \right) \frac{\omega_{Ll}^2}{\omega^2} \left(\frac{\omega^2 - \omega_{Tl}^2}{\omega_{Ll}^2 - \omega_{Tl}^2} \right), \quad l = 1, 2, \quad (4)$$

$$H_l(z) = \begin{cases} 1, & z \geq 0 \quad (l = 1), \\ 0, & z < 0 \quad (l = 2), \end{cases} \quad (5)$$

$\omega_{Ll}, \omega_{Tl}, \varepsilon_{\infty l}, \varepsilon_{0l}$ — энергия продольного и поперечного оптического фонона, высокочастотная и низкочастотная диэлектрические проницаемости среды l соответственно, ω_S — энергия интерфейсного оптического фонона, S — площадь основной области интерфейса, V — объем основной области полупроводника, где находится электрон, q — двумерный параллельный к интерфейсу волновой вектор. Волновая функция электрона выбирается в виде функции Фанга-Ховарда [13]

$$\varphi(\mathbf{R}, z) = (b^3/2S)^{1/2} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} z e^{-bz/2}, \quad z \geq 0, \quad (6)$$

где b — параметр, определяющий наиболее вероятное расстояние электрона к интерфейсу. С учетом (6) операторы (2) и (3) в представлении вторичного квантования по электронным переменным определяются следующими выражениями:

$$\mathcal{H}_{\text{int}}^S = \sum_{\mathbf{q}_S} \varphi_S(\mathbf{q}_S) a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{k}} [b_S(\mathbf{q}) + b_S^+(-\mathbf{q}_S)], \quad (7)$$

$$\mathcal{H}_{\text{int}}^V = \sum_{\mathbf{q}_V, q_z > 0} \varphi_V(\mathbf{q}_V, q_z) a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_V}^+ a_{\mathbf{k}} [b(\mathbf{q}_V) + b^+(-\mathbf{q}_V)], \quad (8)$$

где

$$\varphi_S(\mathbf{q}_S) = \left(\frac{2\pi\omega_S e^2}{S q_S} \right)^{1/2} \left(\frac{1}{\beta_1^{-1}(\omega_S) + \beta_2^{-1}(\omega_S)} \right)^{1/2} \frac{1}{(1 + q_S/b)^3},$$

$$\varphi_V(\mathbf{q}_V, q_z) = \left(\frac{2\pi\omega_{Ll} e^2}{V} \right)^{1/2} \left(\frac{1}{\varepsilon_{\infty l}} - \frac{1}{\varepsilon_{0l}} \right)^{1/2} \frac{2b^3 q_z}{(q_V^2 + q_z^2)^{1/2}} \frac{3b^2 - q_z^2}{(b^2 + q_z^2)^3}. \quad (9)$$

МО электронов, взаимодействующих с фононами, в n -фононном приближении $M^{(n)}(\mathbf{k}, \omega)$ представляется интегральной цепной дробью [10,14,15]

$$M^{(n)}(\mathbf{k}, \omega) = \sum_{\mathbf{q}} \frac{|\varphi(\mathbf{q})|^2}{\omega' - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \omega(\mathbf{q}) - M_n(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \omega)}, \quad (10)$$

$$\omega' = \omega + i\eta, \quad \eta \rightarrow 0, \quad n = 1, 2, \dots$$

Различные приближения для МО отличаются друг от друга только выражением для M_n в знаменателе. К примеру, в однофононном приближении $M_1(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \omega) = 0$, в двухфононном

$$M_2(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \omega) = \sum_{\mathbf{q}_1} \frac{|\varphi(\mathbf{q}_1)|^2}{(\omega' - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}-\mathbf{q}_1} - 2\omega(\mathbf{q}))} \left(1 + \frac{(\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \omega(\mathbf{q}))}{(\omega' - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}_1} - \omega(\mathbf{q}_1))} \right) \quad (11)$$

и т.д.

На языке диаграмм МО в одно-, двух- и трехфононном приближении имеет вид

$$M^{(1)}(k, \omega) = \text{---} \overset{\text{---}}{\text{---}} \text{---} \quad (12)$$

$$M^{(2)}(k, \omega) = M^{(1)}(k, \omega) +$$

$$+ \dots \quad (13)$$

$$M^{(3)}(k, \omega) = M^{(2)}(k, \omega) +$$

$$+ \dots \quad (14)$$

Как видно из формул (12)–(14), однофононное приближение для МО совпадает со вторым порядком теории возмущений. При $n \geq 2$ в $M^{(n)}$ имеются не только члены теории возмущений (первые три диаграммы в выражении для $M^{(2)}$), но и бесконечное число всевозможных диаграмм (как с пересечениями фононных линий, так и без них) с m -фононными линиями ($m \leq n$) над каждой электронной.

Закон дисперсии электронов будем считать квадратичным, а оптические фононы бездисперсионными. Тогда для дальнейших расчетов удобно перейти к безразмерным величинам

$$Q = aq/\pi, \quad \xi'_S = (\omega' - \varepsilon_0)/\omega_S, \quad \xi'_V = (\omega' - \varepsilon_0)/\omega_L, \quad K = ak/\pi,$$

$$p = \pi^2 \hbar^2 / 2ma^2 \omega_{S,L}, \quad \alpha = \pi/ab, \quad M(\xi) = \omega_L^{-1} M(\omega). \quad (15)$$

Безразмерный МО имеет вид

$$M(K, \xi) = M_S(K, \xi) + M_V(K, \xi), \quad (16)$$

$$M_S^{(2)}(K, \xi) = (gp_S^{1/2}/2\pi) \int_0^1 dQ \int_0^{2\pi} d\varphi \times$$

$$\times \frac{(1 + \alpha Q)^{-6}}{\xi'_S - 1 - p(Q^2 + K^2 - 2KQ \cos \varphi) - M_{2S}(K, \xi)}, \quad (17)$$

$$\mathcal{M}_V^2(K, \xi) = (K_0/2\pi) \int_0^1 dQ \int_0^{2\pi} d\varphi \times \\ \times \frac{Qf(Q)}{\xi'_V - 1 - p(Q^2 + K^2 - 2KQ \cos \varphi) - \mathcal{M}_{2V}(K, \xi)}, \quad (18)$$

где

$$\mathcal{M}_{2S}(K, \xi) = \frac{g\sqrt{pS}}{2\pi} \int_0^1 dQ_1 \int_0^{2\pi} d\varphi_1 \times \\ \times \left(1 + \frac{\xi - 1 - p[Q^2 + K^2 - 2KQ \cos \varphi]}{\xi' - 1 - p[Q^2 + K^2 - 2KQ \cos \varphi_1]} \right) \times \\ \times \frac{(1 + \alpha Q_1)^{-6}}{\xi'^{-2-p} [Q^2 + K^2 - 2KQ \cos \varphi_1 + Q^2 + K^2 - 2KQ_1 \cos \varphi_1 + 2QQ_1 \cos(\varphi - \varphi_1)]}, \quad (19)$$

$$g = \frac{e^2}{\hbar} \left(\frac{2m}{\omega_S} \right)^{1/2} \left(\frac{1}{\beta_1^{-1}(\omega_S) + \beta_2^{-1}(\omega_S)} \right) \quad (20)$$

— константа электрон-фононной связи для интерфейсных фононов,

$$f(Q) = [a/\pi]^7 \int_0^1 dQ_z \frac{Q_z^2(Q_z^2 - 3/\alpha^2)^2}{(Q_z^2 + Q^2)(Q_z^2 + 1/\alpha^2)^6}, \quad (21)$$

$$K_0 = \frac{g}{a} \left(\frac{1}{2m\omega_S} \right)^{1/2} \left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_0} \right)^{1/2} (\beta_1^{-1}(\omega_S) + \beta_2^{-1}(\omega_S)), \quad (22)$$

$$\mathcal{M}_{2V}(K, \xi) = \frac{K_0}{2\pi} \int_0^1 dQ_1 \int_0^{2\pi} d\varphi_1 \left(1 + \frac{\xi - 1 - p[Q^2 + K^2 - 2KQ \cos \varphi]}{\xi' - 1 - p[Q^2 + K^2 - 2KQ \cos \varphi_1]} \right) \times \\ \times \frac{Q_1 f(Q_1)}{\xi'^{-2-p} [Q^2 + K^2 - 2KQ \cos \varphi_1 + Q^2 + K^2 - 2KQ_1 \cos \varphi_1 + 2QQ_1 \cos(\varphi - \varphi_1)]}. \quad (23)$$

Как видно из (22), величина K_0 пропорциональна константе g . Для простоты анализа в дальнейшем все расчеты проведены относительно константы g , которая ниже именуется константой электрон-фононной связи.

2. Численные расчеты. Обсуждение полученных результатов

Конкретные вычисления $\mathcal{M}(K, \xi)$ проведены в одно- и двухфононном приближении для гетероструктуры типа GaAs/AlAs ($\omega_S = 36.4$ meV, $\omega_L = 36.2$ meV, $p_S = 501.1$, $g = 0.03$), а также для моделей гетероструктур с различными значениями константы g ($0.03 \leq g \leq 1$). Расчеты проведены также при различных значениях параметра α , который, согласно (6), (15), пропорционален наиболее вероятному расстоянию от электрона до интерфейса. На основе проведенных вычислений определяется энергия, эффективная масса интерфейсного полярона, а также среднее число фононов в поляронном состоянии.

Как известно [16], энергия электрон-фононной системы определяется как решение дисперсионного уравнения

$$\xi - pK^2 - \text{Re} \mathcal{M}(K, \xi) = 0. \quad (24)$$

Для определения энергии полярона основного состояния ξ_{p0} в уравнении (24) необходимо положить $K = 0$ и учесть, что в этой области спектра $\text{Im} \mathcal{M} = 0$, поэтому $\text{Re} \mathcal{M}(K, \xi) = \mathcal{M}(K, \xi)$. Среднее число фононов в состоянии с энергией ξ_{p0} представляется формулой [9]

$$\langle \nu \rangle = - \left[\frac{\partial \mathcal{M}(0, \xi)}{\partial \xi} \right]_{\xi=\xi_{p0}} / \left(1 - \left[\frac{\partial \mathcal{M}(0, \xi)}{\partial \xi} \right]_{\xi=\xi_{p0}} \right), \quad (25)$$

а отношение эффективной массы полярона m_p к массе электрона в кристалле без фононов m можно представить в виде

$$m_p/m = 2p / \left[\frac{\partial^2 \mathcal{M}(K, \xi)}{\partial K^2} \right]_{K=0}. \quad (26)$$

Интересно сравнить значения ξ_{p0} , $\langle \nu \rangle$, m_p/m , полученные с помощью методов функций Грина и Ли-Лоу-Пайнса. С этой целью усредним гамильтониан (1) на волновой функции (6) и подвергнем его последовательно каноническим преобразованиям

$$S = \exp(ik\mathbf{R}) \exp \left(-i\mathbf{R} \sum_{\mathbf{q}_S} \mathbf{q}_S b_S^+(\mathbf{q}_S) b_S(\mathbf{q}_S) - i\mathbf{R} \sum_{\mathbf{q}_V} \mathbf{q}_V b_V^+(\mathbf{q}_V) b_V(\mathbf{q}_V) \right),$$

$$U = \exp \left(\sum_{\mathbf{q}_S} b^+(\mathbf{q}_S) f(\mathbf{q}_S) - b(\mathbf{q}_S) f^*(\mathbf{q}_S) \right) \exp \times$$

$$\times \left(\sum_{\mathbf{q}_V} b^+(\mathbf{q}_V) f(\mathbf{q}_V) - b(\mathbf{q}_V) f^*(\mathbf{q}_V) \right), \quad (27)$$

где функции $f(\mathbf{q}_S)$, $f^*(\mathbf{q}_S)$, $f(\mathbf{q}_V)$, $f^*(\mathbf{q}_V)$ в соответствии с методом определяются из минимума функционала энергии электрон-фононной

$$F(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \sum_{\mathbf{q}_S} \left[\varphi_S(\mathbf{q}_S) f(\mathbf{q}_S) + \varphi_S^*(\mathbf{q}_S) f^*(\mathbf{q}_S) \right] +$$

$$+ \sum_{\mathbf{q}_V} \left[\varphi_V(\mathbf{q}_V) f(\mathbf{q}_V) + \varphi_V^*(\mathbf{q}_V) f^*(\mathbf{q}_V) \right] + \frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \sum_{\mathbf{q}_S} |f(\mathbf{q}_S)|^2 \mathbf{q}_S + \sum_{\mathbf{q}_V} |f(\mathbf{q}_V)|^2 \mathbf{q}_V \right\} +$$

$$+ \sum_{\mathbf{q}_V} |f(\mathbf{q}_V)|^2 \left\{ \omega_V - \frac{\mathbf{q}_V \mathbf{k}}{m} \hbar^2 + \frac{\hbar^2 q_V^2}{2m} \right\} + \sum_{\mathbf{q}_S} |f(\mathbf{q}_S)|^2 \left\{ \omega_S - \frac{\mathbf{q}_S \mathbf{k}}{m} \hbar^2 + \frac{\hbar^2 q_S^2}{2m} \right\}. \quad (28)$$

В результате минимизации выражения (28) получаем формулу для энергии полярона

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} (1 - \eta^2) - \sum_{\mathbf{q}_S} \frac{|\varphi_S(\mathbf{q}_S)|^2}{\left\{ \omega_S - \frac{\mathbf{q}_S \mathbf{k}}{m} \hbar^2 (1 - \eta) + \frac{\hbar^2 q_S^2}{2m} \right\}} -$$

$$- \sum_{\mathbf{q}_V} \frac{|\varphi_V(\mathbf{q}_V)|^2}{\left\{ \omega_V - \frac{\mathbf{q}_V \mathbf{k}}{m} \hbar^2 (1 - \eta) + \frac{\hbar^2 q_V^2}{2m} \right\}}, \quad (29)$$

где параметр η является решением следующего уравнения

$$\eta \mathbf{k} = \sum_{\mathbf{q}_S} \frac{|\varphi_S(\mathbf{q}_S)|^2 \mathbf{q}_S}{\left\{ \omega_S - \frac{\mathbf{q}_S \mathbf{k}}{m} \hbar^2 (1 - \eta) + \frac{\hbar^2 q_S^2}{2m} \right\}^2} + \sum_{\mathbf{q}_V} \frac{|\varphi_V(\mathbf{q}_V)|^2 \mathbf{q}_V}{\left\{ \omega_V - \frac{\mathbf{q}_V \mathbf{k}}{m} \hbar^2 (1 - \eta) + \frac{\hbar^2 q_V^2}{2m} \right\}^2}. \quad (30)$$

Тогда $\langle \nu \rangle$ представляется выражением

$$\langle \nu \rangle = \sum_{\mathbf{q}_S} \frac{|\varphi_S(\mathbf{q}_S)|^2}{\left\{ \omega_S - \frac{\mathbf{q}_S \mathbf{k}}{m} \hbar^2 (1 - \eta) + \frac{\hbar^2 q_S^2}{2m} \right\}^2} + \sum_{\mathbf{q}_V} \frac{|\varphi_V(\mathbf{q}_V)|^2}{\left\{ \omega_V - \frac{\mathbf{q}_V \mathbf{k}}{m} \hbar^2 (1 - \eta) + \frac{\hbar^2 q_V^2}{2m} \right\}^2}, \quad (31)$$

а эффективная масса полярона определяется формулой

$$m_p/m = 2p / \left[\frac{\partial^2 (E/\omega_S)}{\partial K^2} \right] \Big|_{K=0}. \quad (32)$$

Анализ формул (29), (31), (32) показывает (рис. 1, 2, 3), что увеличение константы электрон-фононного взаимодействия ведет к понижению энергетического уровня интерфейсного полярона, увеличению его эффективной массы и среднего числа фононов. Видно, что для всех рассматриваемых α и g двухфононное приближение $M = M^{(2)}$ дает существенно большее, чем однофононное $M = M^{(1)}$, совпадение с методом Ли-Лоу-Пайнса. Увеличение расстояния до интерфейса (увеличение α) ведет к эффективному ослаблению электрон-фононного взаимодействия, так как при этом уменьшаются все физические параметры

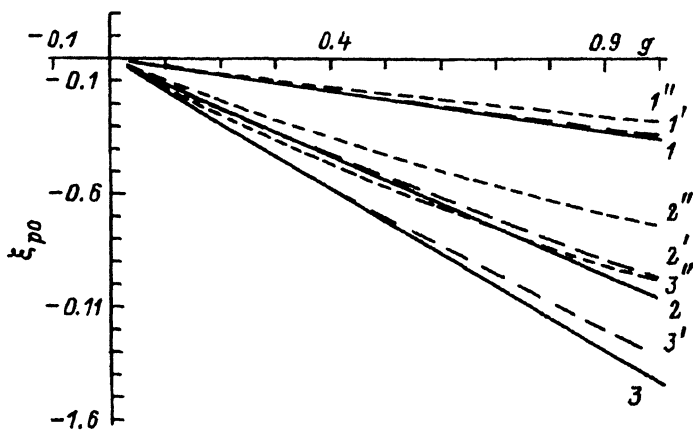


Рис. 1. Зависимость энергии интерфейсного полярона ξ_{p0} от величины константы электрон-фононного взаимодействия g при различных значениях α по методу Ли-Лоу-Пайнса (1, 1', 1''), в однофононном приближении для МО (3, 3', 3''), в двухфононном приближении для МО (2, 2', 2'').
 $\alpha = 0.1$ (1, 2, 3), 1 (1', 2', 3'), 10 (1'', 2'', 3'').

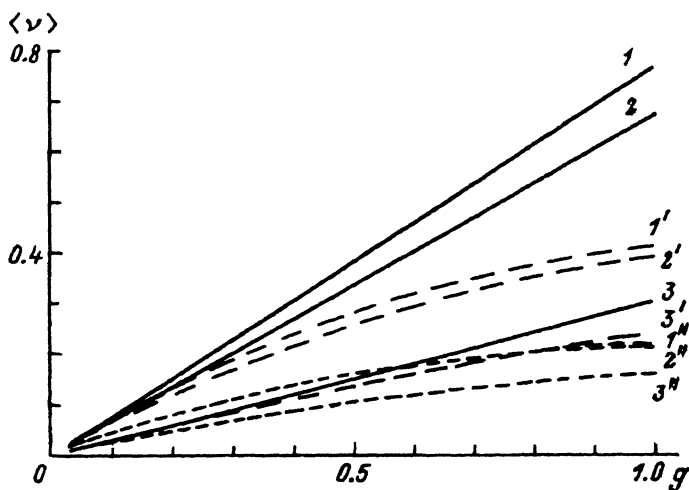


Рис. 2. Зависимость среднего числа фононов $\langle \nu \rangle$ от величины g и α . Обозначения те же, что и на рис. 1.

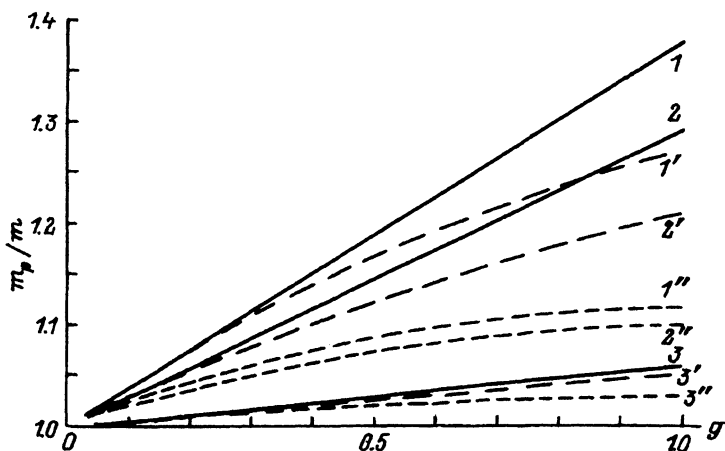


Рис. 3. Зависимость m_p/m от величины g и α .
 Обозначения те же, что и на рис. 1.

($|\xi_{p0}|$, m_p/m , $\langle \nu \rangle$) и соответственно уменьшается разница между численными значениями физических величин, полученных различными методами. В частности, для энергии полярона однофоновое приближение дает удовлетворительные результаты при $g \leq 0.3$, если $\alpha = 10$, но если $\alpha = 0.1$, то метод функций Грина дает те же результаты для ξ_{p0} , что и метод Ли-Лоу-Пайнса только при $g \leq 0.05$. Это объясняется тем, что в области малых α ($\alpha \leq 10$) основной вклад в значения ξ_{p0} , m_p/m , $\langle \nu \rangle$ дает электрон-фононное взаимодействие с интерфейсными фононами, влияние которых уменьшается при увеличении α .

Различные величины характеризуются разной чувствительностью к методу расчета. Наибольшее отличие между значениями, полученными разными методами, имеем для $\langle \nu \rangle$ (рис. 3), а наименьшее — для ξ_{p0} (рис. 1). Так, для энергии ξ_{p0} удовлетворительное совпадение результатов, полученных методом функций Грина и методом Ли-Лоу-Пайнса, при $\alpha = 10$ наблюдается во всей рассматриваемой области $g \leq 1$ в двухфоновом приближении и только при $g \leq 0.3$ в однофоновом приближении. Эффективные массы в методе функций Грина и в методе Ли-Лоу-Пайнса для того же значения α совпадают уже при $g \leq 0.6$ ($M = M^{(2)}$) и $g \leq 0.2$ ($M = M^{(1)}$), а среднее число фононов — соответственно при $g \leq 0.4$ ($M = M^{(2)}$) и $g \leq 0.1$ ($M = M^{(1)}$). Уменьшение α еще больше сужает эти области, и возникает необходимость уточнять расчет МО, используя высшие фононные приближения.

Интересно сравнить результаты, полученные в двухфоновом приближении, где учтены все диаграммы с одной и двумя фононными линиями на каждой электронной (как с пересечениями, так и без пересечений), с расчетами, в которых не учтены диаграммы с пересечениями МО в последнем случае также представляется формулой (10), но в знаменатель вместо $M_2(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \omega)$ из формулы (12) необходимо подставить

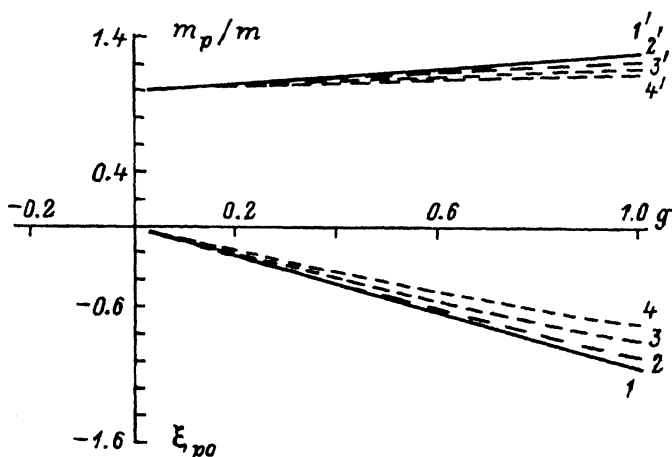


Рис. 4. Зависимость ξ_{p0} и m_p/m от величины константы электрон-фононного взаимодействия g при $\alpha = 1$ по методу Ли-Лоу-Пайнса (1, 1'), в однофононном приближении для МО (4, 4'), в двухфононном приближении для МО (2, 2'), двухфононном приближении (с использованием формулы (33)) для МО (3, 3').

выражение

$$\tilde{M}_2(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \omega) = \sum_{\mathbf{q}_1} \frac{|\varphi(\mathbf{q}_1)|^2}{(\omega' - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}-\mathbf{q}_1} - 2\omega(\mathbf{q}))}. \quad (33)$$

Результаты такого расчета представлены на рис. 4, где дана зависимость ξ_{p0} и m_p/m от g при $\alpha = 1$. Видно, что для всех значений g значения $|\xi_{p0}|$, m_p/m , полученные с учетом (33) меньше, чем для точного двухфононного МО. Аналогичная разница между точным и приближенным значениями получается и для $\langle \nu \rangle$. Видно, что учет диаграмм с пересечениями важен не только в области пороговых состояний [9], но также и при исследовании основного состояния электрон-фононной системы.

Проведенные расчеты показали, что предложенный в [10] метод суммирования диаграмм открывает новые возможности для эффективного применения метода функций Грина при исследовании основного состояния электрон-фононных систем, и в частности при исследовании интерфейсных поляронных состояний.

Если основное поляронное состояние может быть изучено как методом функций Грина, так и методом Ли-Лоу-Пайнса, то более высокоэнергетические состояния исследуются только методом функций Грина [9,17,18]. Расчеты показывают, что МО в виде (10) с не меньшим успехом можно использовать для изучения пороговых состояний электрон-фононной системы простой гетероструктуры полупроводников. Эти вопросы будут рассмотрены в следующей работе.

Список литературы

- [1] Берил С.И., Покатилов Е.П. // ФТТ. 1981. Т. 23. № 4. С. 1180-1181.
- [2] Hong Sun, Shi-Wei Gu // Phys. Rev. B. 1989. V. 40. N 17. P. 11576-11584.
- [3] Martin Th., Bruinsma R. // Phys. Rev. B. 1989. V. 40. N 12. P. 8290-8298.
- [4] Тиходеев С.Г. // ЖЭТФ. 1991. Т. 99. № 6. С. 1871-1880.
- [5] Jalabert R., Des Sarma S. // Phys. Rev. B. 1989. V. 40. N 14. P. 9723-9737.
- [6] Hai G.Q., Peeters F.M., Devreese J.T. // Phys. Rev. B. 1993. V. 48. N 7. P. 4666-4674.
- [7] Поляроны // Под ред. Ю.А. Фирсова. М.: Наука, 1975. 424 с.
- [8] Lee T.O., Low F.E., Pines D. // Phys. Rev. 1953. V. 90. N 2. P. 297-306.
- [9] Левинсон И.Б., Рашба Э.И. // УФН. 1973. Т. 111. № 4. С. 683-718.
- [10] Ткач М.В. // ТМФ. 1984. Т. 61. № 3. С. 400-407.
- [11] Брыксин В.В., Фирсов Ю.А. // ФТТ. 1971. Т. 12. С. 496-501.
- [12] Mori N., Ando T. // Phys. Rev. B. 1989. V. 40. N 9. P. 6175-6188.
- [13] Fang F.F., Howard W.E. // Phys. Rev. Lett. 1966. V. 16. P. 797-806.
- [14] Ткач М.В., Валь О.Д., Жаркой В.П. // УФЖ. 1991. Т. 36. № 6. С. 868-871.
- [15] Ткач М.В., Лопушанская Н.В., Валь О.Д. // Изв. вузов. Физика. 1986. Т. 29. № 10. С. 93-98.
- [16] Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Статистическая физика. Ч. 2. М.: Наука, 1978. 448 с.
- [17] Ткач Н.В., Валь А.Д., Жаркой В.П. // ФТТ. 1992. Т. 34. № 11. С. 3543-3548.
- [18] Билынский И.В., Бойчук В.И., Ткач Н.В. // УФЖ. 1993. Т. 38. № 7. С. 1057-1062.