Физика твердого тела, 1997, том 39, № 6

Электрон-фононное взаимодействие в сферических многослойных наногетероструктурах

© *Н.В. Ткач*

Черновицкий государственный университет,
274012 Черновцы, Украина

(Поступила в Редакцию 13 января 1997 г.)

В модели поляризующегося континуума для ограниченных объемных и интерфейсных фононов в приближении эффективной массы электрона получен полный гамильтониан электрон-фононной системы в представлении вторичного квантования для сложной сферической наногетероструктуры с произвольным числом полупроводниковых слоев.

На примере экспериментально реализованной системы CdS / HgS / H_2O выполнен расчет энергии основного состояния электрона. Установлена причина немонотонной зависимости от толщины HgS сдвига основного уровня электрона, обусловленного взаимодействием с ограниченными фононами.

Внимание многих исследователей к наногетеросистемам вызвано не только их необычными прикладными возможностями, но и причинами фундаментального характера. Различные физические явления, обусловленные электронами, экситонами, фононами и их взаимодействием, наиболее подробно и широко исследованы в плоских (квазидвумерных) [1–4] и цилиндрических (квазиодномерных) [5–8] квантовых ямах.

Что касается работ по изучению сферических нанокристаллов (нульмерных квантовых точек), то их было значительно меньше. Однако, по-видимому, после появления экспериментальной работы Екимова и Онущенко [9], где были получены и исследованы сферические полупроводниковые нанокристаллы, внедренные в диэлектрическую среду, интерес исследователей к нульмерным системам значительно возрос.

Теория электронного и экситонного спектров в таких системах развивалась в работе Эфросов [10]. В серии работ Ефремова и Покутнего [11–13] разрабатывалась теория взаимодействия заряженных квазичастиц с безынерционной поляризацией сферических гетеросистем, возникающей из-за наличия границ раздела сред. В [14,15] развивалась теория электронного и экситон-фононного взаимодействия в простой гетеросистеме (полупроводниковая наносфера в среде). В модели диэлектрического континуума и в приближении эффективной массы были получены соответствующие гамильтонианы и исследовано взаимодействие квазичастиц как с ограниченными объемными, так и с интерфейсными фононами.

В последние годы появились работы [16,17], в которых и экспериментально, и теоретически исследовались сложные сферические наногетероструктуры с несколькими слоями разных кристаллов. В частности, авторы работы [17] путем ионного замещения создали сферическую систему CdS / HgS / CdS / H_2O и экспериментально исследовали зависимость положения экситонного уровня от толщины слоев. Выполненный ими же теоретический расчет на базе модели прямоугольной сферической квантовой ямы в приближении эффективных масс для электрона и дырки без учета взаимодействия с фононами оказался в удовлетворительном качественном согласии с экспериментом. Возникает вопрос — почему: ведь известно, что взаимодействие различных квазичастиц с фононами в массивных кристаллах и в квантовых ямах [18] может существенно изменять их спектр.

Поскольку общей теории взаимодействия заряженных частиц с поляризационными колебаниями сложных наногетеросистем пока не существует, цель настоящей работы состоит в том, чтобы ее построить.

Полученный гамильтониан позволит, в частности, исследовать перенормировку основного электронного уровня ограниченными продольными *LO*-фононами в системе CdS / HgS / H_2O, а в общем случае он может использоваться для решения различных задач теории электрон- (экситон-) фононного взаимодействия.

1. Спектр и волновые функции электрона

Рассматривается кристаллическая гетеросистема сферической формы. Она состоит из сферического ядра (радиуса r_0) и N слоев с произвольными толщинами ($\Delta_p = r_p - r_{p-1},\ p = 1, \dots, N$), помещенных во внешнюю среду ($\Delta_{N+1} = \infty$). Электрон (дырка) в каждом слое характеризуется своей эффективной массой m_p и потенциальной энергией $-V_p$ (относительно вакуума).

Чтобы найти энергетический спектр электрона в такой системе, удобно ввести массу и потенциал электрона как функции его расстояния от центра

$$m(r) = \sum_{p=0}^{N=1} m_p \sigma(r - r_{p-1}), \quad V(r) = -\sum_{p=0}^{N+1} V_p \sigma(r - r_{p-1}),$$

где

$$\sigma(r - r_p) = \begin{cases} 1, & r_{p-1} \le r \le r_p, \\ 0, & r < r_{p-1},\ r > r_p, \end{cases} \quad r_{-1} = 0,\ r_{N+1} = \infty.$$

Решение уравнения Шредингера $H\Psi(\mathbf{r}) = \mathbf{E}\Psi(\mathbf{r})$ в сферической системе координат имеет вид

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = Y_{lm}(\theta, \varphi) \sum_{p=0}^{N+1} R_{nl}(r) \sigma(r - r_p). \qquad (1)$$

Здесь Y_{lm} — сферические функции Лежандра, а радиальные функции $R_{nl}(r)$ выражаются через сферические функции Бесселя

$$R^p_{nl}(r) = A^p_{nl}\begin{cases} j_l(k^p_{nl}r) \\ h_l^{(+)}(K^p_{nl}r) \end{cases} + B^p_{nl}\begin{cases} n^p_l(k^p_{nl}r), & |E_{nl}| \leqslant V_p, \\ h_l^{(+)}(K^p_{nl}r), & |E_{nl}| \geqslant V_p, \end{cases}$$

$$k^p_l = \sqrt{2m_p(V_p - |E_{nl}|)}\,/\hbar, \quad K^p_{nl} = \sqrt{2m_p(E_{nl} - V_p)}\,/\hbar. \tag{2}$$

Условия непрерывности функций и потоков плотностей вероятности на границах всех сред

$$\begin{cases} R^{(p)}_{nl}(r_p) = R^{(p+1)}_{nl}(r_p), \\ \dfrac{1}{m_p}\dfrac{dR^{(p)}_{nl}(r)}{dr}\Big|_{r=r_p} = \dfrac{1}{m_p}\dfrac{dR^{(p+1)}_{nl}(r)}{dr}\Big|_{r=r_p}, p = 0, 1, 2, \ldots, N, \end{cases} \tag{3}$$

вместе с условием регулярности функций $R^{(p)}_{nl}(r)$ при $r \to 0$ и $r \to \infty$, а также с учетом нормировки определяют спектр E_{nl} и волновые функции.

Вводя квантованную волновую функцию

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}) = \sum_{nlm}\Psi_{nlm}(\mathbf{r})\hat{a}_{nlm}, \tag{4}$$

получаем гамильтониан электронов гетеросистемы в представлении чисел заполнения

$$\hat{H}_l = \sum_{nlm}E_{nl}\hat{a}^+_{nlm}\hat{a}_{nlm}, \tag{5}$$

где энергетический спектр E_{nl} определяется из (3), а операторы $\hat{a}^+_{nlm}$ и $\hat{a}_{nlm}$ удовлетворяют антикоммутационным соотношениям Ферми.

2. Гамильтониан фононов и электрон-фононного взаимодействия в сферической гетеросистеме

Сферическая гетеросистема предполагается состоящей из поляризующих сред с известными величинами диэлектрических проницаемостей ε^∞_p, ε^0_p и энергиями продольных $\Omega_{pL} = \hbar\omega_{pL}$ и поперечных $\Omega_{pT} = \hbar\omega_{pT}$ фононов ($p = 0, 1, 2, \ldots, N+1$).

Пренебрегая эффектами запаздывания электромагнитных волн в модели диэлектрического континуума, фононный спектр можно получить из системы макроскопических уравнений относительно плотности вектора поляризации

$$\begin{cases} \operatorname{rot}\big(\chi^{-1}_p(\omega)\mathbf{P}_p(\mathbf{r})\big) = 0, \\ \operatorname{div}\big(\varepsilon_p(\omega)\chi^{-1}_p(\omega)\mathbf{P}_p(\mathbf{r})\big) = 0, \end{cases} \tag{6}$$

$$\begin{cases} \chi^{-1}_p(\omega)\mathbf{P}_{rp}(\mathbf{r}_p) = \chi^{-1}_{p+1}(\omega)\mathbf{P}_{r\,p+1}(\mathbf{r}_p), \\ \varepsilon_p(\omega)\chi^{-1}_p(\omega)\mathbf{P}_{rp}(\mathbf{r}_p) = \varepsilon_{p+1}(\omega)\chi^{-1}_{p+1}(\omega)\mathbf{P}_{r\,p+1}(\mathbf{r}_p) \end{cases}$$

с граничными условиями для векторов напряженности $\mathbf{E}$ и индукции $\mathbf{D}$ электрического поля

$$\mathbf{E}_{rp}(r_p) = \mathbf{E}_{r\,p+1}(r_p), \quad \mathbf{D}_{\tau p}(r_p) = \mathbf{D}_{\tau\,p+1}(r_p),$$
$$p = 0, 1, 2, \ldots, N. \tag{7}$$

Здесь

$$\chi_p(\omega) = \frac{\varepsilon_p(\omega) - 1}{4\pi}, \quad \varepsilon_p(\omega) = \varepsilon^\infty_p\frac{\omega^2 - \omega^2_{pL}}{\omega^2 - \omega^2_{pT}} \tag{8}$$

— соответственно восприимчивость и диэлектрическая проницаемость среды p, а индексы r и τ обозначают радиальные и тангенциальные составляющие векторов.

Спектр энергий Ω_{Lp}, потенциал поля $\Psi_L(\mathbf{r})$ и вектор плотности поляризации $P_L(\mathbf{r})$ продольных оптических фононов находятся из уравнений (6) при условии, что в среде p

$$\varepsilon_p(\omega) = \varepsilon^\infty_p\frac{\omega^2 - \omega^2_{pL}}{\omega^2 - \omega^2_{pT}} = 0. \tag{9}$$

Из (9) следует, что энергии продольных ограниченных оптических фононов в p-м слое гетеросистемы такие же ($\Omega_{Lp} = \hbar\omega_{Lp}$), как и в соответствующем гомогенном кристалле. В силу сферической симметрии системы в p-м слое $P_L(\mathbf{r})$ и $\Psi_L(\mathbf{r})$ оказываются пропорциональными произведению сферических функций на линейную комбинацию сферических функций Бесселя $j_l(kr)$ и $n_l(kr)$, в которых значения величины k_{s_p} определяются уравнением

$$j_l(k_{s_p}r_{p-1})n_l(k_{s_p}r_p) = j_l(k_{s_p}r_p)n_l(k_{s_p}r_{p-1}). \tag{10}$$

Спектр энергий Ω_I, потенциал $\Psi_I(\mathbf{r})$ и вектор $\mathbf{P}_I$ интерфейсных фононов определяются условиями

$$\varepsilon_p(\omega) \neq 0, \ \varepsilon_\beta(\omega) \neq 0, \ \chi^{-1}_p(\omega) \neq 0, \ \chi^{-1}_\beta(\omega) \neq 0. \tag{11}$$

В этом случае (6) приводит к уравнению $\nabla\psi_I(\mathbf{r}) = 0$, решением которого является функция

$$\psi_I(\mathbf{r}) = \sum_{lmp}Y_{lm}(\vartheta, \varphi)\big(A_{pl}r^l + B_{pl}r^{-l-1}\big)\delta(r - r_p). \tag{12}$$

Граничные условия (7) совместно с условием нормировки определяют коэффициенты A_{pl}, B_{pl} и спектр энергий интерфейсных фононов $\Omega_{Il\gamma} = \hbar\omega_{l\gamma}$. Частоты $\omega_{l\gamma}$ являются корнями уравнения

$$l\delta_N(\omega) + (l+1)\Delta_N(\omega) = 0, \tag{13}$$

в котором $\delta_N(\omega)$ и $\Delta_N(\omega)$ задаются рекуррентными соотношениями

$$\delta_N(\omega) = \delta_{N-1}(\omega) + \frac{l+1}{l}\Delta_{N-1}(\omega) + \left(\frac{r_{N-1}}{r_N}\right)^{2l+1}$$
$$\times\frac{l+1}{l}\big[\delta_{N-1}(\omega) - \Delta_{N-1}(\omega)\big],$$

$$\Delta_N(\omega) = \delta_{N-1}(\omega) + \frac{l+1}{l}\,\Delta_{N-1}(\omega) + \left(\frac{r_{N-1}}{r_N}\right)^{2l+1}$$

$$\times\,\frac{\varepsilon_{N+1}(\omega)}{\varepsilon_N(\omega)}\big[\Delta_{N-1}(\omega) - \delta_{N-1}(\omega)\big], \qquad (14)$$

где $\delta_0 = 0$, $\Delta_0 = \varepsilon_1(\omega)\varepsilon_0^{-1}(\omega)$.

Используя вектор поляризации и сопряженный ему вектор плотности импульса, получаем плотность гамильтониана поля поляризационных колебаний. Затем, согласно правилам перехода к представлению вторичного квантования, получается гамильтониан фононов в представлении чисел их заполнения

$$\hat{H}_{\mathrm{ph}} = \sum_{lm}\Big\{\sum_{\gamma=1}^{\tau}\Omega_{I\gamma l}\,\hat{b}^{+}_{lm\gamma}\,\hat{b}_{lm\gamma} + \sum_{p=0}^{N+1}\sum_{s_p}\Omega_{Lp}\,\hat{b}^{+}_{s_plm}\,\hat{b}_{s_plm}\Big\}, \qquad (15)$$

где энергии интерфейсных $\Omega_{l\gamma}$ и продольных ограниченных Ω_{Lp} фононов определены ранее, а операторы вторичного квантования удовлетворяют бозонным коммутационным соотношениям.

Найденный потенциал поля поляризации позволяет определить плотность гамильтониана электрон-фононного взаимодействия в координатном представлении, а затем и сам гамильтониан этого взаимодействия в представлении чисел заполнения по всем переменным

$$\hat{H}_{\mathrm{int}} = \sum_{lm\lambda}\sum_{\substack{n_1l_1m_1\\ n_2l_2m_2}}\big(Y_{lm}\big)^{l_2m_2}_{l_1m_1}\big(F_{l\lambda}\big)^{l_2m_2}_{l_1m_1}\hat{a}^{+}_{n_1l_1m_1}\hat{a}_{n_2l_2m_2}\big(\hat{b}_{lm\lambda} + \hat{b}^{+}_{lm\lambda}\big). \qquad (16)$$

Фигурирующий здесь интеграл

$$\big(Y_{lm}\big)^{l_2m_2}_{l_1m_1} = \int\limits_0^{\pi}\sin\theta\,d\theta\int\limits_0^{2\pi}d\varphi\,Y^{*}_{l_1m_1}(\theta,\varphi)Y_{lm}(\theta,\varphi)Y_{l_2m_2}(\theta,\varphi) \qquad (17)$$

выражается через так называемые $3j$-символы Вигнера, приводимые в учебниках по квантовой механике [18,19].

Радиальные функции связи электрона с продольными оптическими ограниченными фононами имеют вид

$$\big(F_{l\lambda=p,s_p}\big)^{n_2l_2}_{n_1l_1} = \left[\frac{4\pi e^2\Omega_{Lp}}{r_p}\Big(\frac{1}{\varepsilon_{p\infty}} - \frac{1}{\varepsilon_{p0}}\Big)\right]^{1/2}$$

$$\times\int\limits_{r_{p-1}}^{r_p}dr\,R^{(p)^*}_{n_1l_1}(r)R^{(p)}_{n_2l_2}(r)r^2$$

$$\times\,\frac{\big[n_l(k^e_{s_p}r_p)j_l(k^e_{s_p}r) - j_l(k^e_{s_p}r_p)n_l(k^e_{s_p}r)\big]}{\sqrt{\begin{array}{c}1 - (k^e_{s_p}r_{p-1})^3(k^e_{s_p}r_p)\big[n_l(k^e_{s_p}r_p)j_{l+1}(k^e_{s_p}r_{p-1}) -\\ - j_l(k^e_{s_p}r_p)n_{l+1}(k^e_{s_p}r_{p-1})\big]^2\end{array}}}. \qquad (18)$$

Радиальные функции связи электрона с интерфейсными фононами следующие:

$$\big(F_{l\gamma}\big)^{n_2l_2}_{n_1l_1} = \left[\frac{2\pi e^2\Omega_{l\gamma}}{r_0^2C_{\gamma l}}r_0^2C_{\gamma l}\right]^{1/2}\sum_{p=1}^{N+1}\int\limits_{r_{p-1}}^{r_p}r_2dr R^{(p)^*}_{n_1l_1}(r)R^{(p)}_{n_2l_2}(r)$$

$$\times\left[X_p(l\gamma)\Big(\frac{r}{r_0}\Big)^l + Y_p(l\gamma)\Big(\frac{r_0}{r}\Big)^{l+1}\right], \qquad (19)$$

где величины $X_p(l\gamma)$, $Y_p(l\gamma)$ определяются рекуррентными соотношениями

$$X_p = \frac{l}{2l+1}\frac{\chi_p}{\chi_{p-1}}\left[X_{p-1}\Big(\frac{l+1}{l} + \frac{\varepsilon_{p-1}}{\varepsilon_p}\Big)\right.$$

$$\left. + Y_{p-1}\Big(\frac{r_0}{r_{p-1}}\Big)^{2l+1}\frac{l+1}{l}\Big(1 - \frac{\varepsilon_{p-1}}{\varepsilon_p}\Big)\right],$$

$$Y_p = \frac{l}{2l+1}\frac{\chi_p}{\chi_{p-1}}\left[\Big(\frac{r_{p-1}}{r_0}\Big)^{2l+1}X_{p-1}\Big(1 - \frac{\varepsilon_{p-1}}{\varepsilon_p}\Big)\right.$$

$$\left. + Y_{p-1}\Big(1 + \frac{l+1}{l}\frac{\varepsilon_{p-1}}{\varepsilon_p}\Big)\right],\quad 0 \leqslant p \leqslant N+1,$$

$$X_0 = 1,\quad Y_0 = 0,\quad X_{N+1} = 0, \qquad (20)$$

а коэффициент нормировки

$$C_{\gamma l} = \sum_{p=0}^{N}\left[l\big(X_p^2(l\gamma) - Y_p^2(l\gamma)\big)\Big(\frac{r_p}{r_0}\Big)^{2l+1}\right.$$

$$\left. + (l+1)\big(Y^2_{p+1}(l\gamma) - Y_p^2(l\gamma)\big)\Big(\frac{r_0}{r}\Big)^{2l+1}\right]. \qquad (21)$$

Таким образом, найден полный гамильтониан

$$\hat{H} = \hat{H}_e + \hat{H}_{\mathrm{ph}} + \hat{H}_{\mathrm{int}} \qquad (22)$$

электрон-фононной системы в представлении чисел заполнения для сферической многослойной наногетероструктуры. В частных случаях для простой гетеросистемы (сфера в среде) гамильтониан (22) совпадает с выражением из [14], а для спектров электронов и фононов в трехслойной системе — с выражениями из [16,17,20]. В общем виде гамильтониан (22) позволяет исследовать разные вопросы теории электрон-фононного взаимодействия в разнообразных сферических гетероструктурах с произвольным числом слоев.

3. Перенормировка фононами основного состояния электрона в гетеросистеме CdS / HgS / H_2O

Развитая в предыдущих разделах теория применима для исследования перенормировки фононами основного состояния электрона в трехслойной сферической гетеросистеме CdS / HgS / H_2O, которая была получена и

Таблица 1. Параметры компонент трехслойной сферической гетеросистемы $CdS/HgS/H_2O$

Кристалл	p	$m_e(m_0)$	$m_h(m_0)$	a, Å	E_g, eV	V_e, eV	V_h, eV	Ω_L, eV	ε_0	ε_∞
CdS	(0)	0.2	0.7	5.818	2.5	3.8	6.3	57.2	9.1	5.5
β-HgS	(1)	0.036	0.044	5.851	0.5	5.0	5.5	27.8	18.2	11.36
H_2O	(2)	1	∞	—	—	1.15	∞	—	1.78	1.78

изучалась в [17]. Компоненты системы характеризуются материальными параметрами, приведенными в табл. 1.

Ограничиваясь учетом только основного уровня, гамильтониан электрон-фононной системы в этой задаче можно представить в виде

$$H = E_0\hat{a}^+\hat{a} + \sum_{p=0}^{1}\sum_{s_p=-\infty}^{\infty}\Omega_{Lp}\left(\hat{b}^+_{ps_p}\hat{b}_{ps_p} + \frac{1}{2}\right)$$

$$+ \sum_{p=0}^{1}\sum_{s_p=-\infty}^{\infty}\Phi_p(s_p)\hat{a}^+\hat{a}(\hat{b}_{ps_p} + \hat{b}^+_{ps_p}). \quad (23)$$

Здесь E_0 — энергия основного уровня электрона, которая находится из системы уравнений (3). Энергии ограниченных продольных фононов известны (табл. 1). Поскольку в состоянии $l = 0$ электрон не взаимодействует с интерфейсными фононами, в гамильтониане (23) соответствующие члены не фигурируют. Функции связи электрона с LO-фононами, согласно (17), (18), имеют вид

$$\Phi_p(s_p) = \sqrt{\frac{e^2}{r_p}\left(\frac{1}{\varepsilon_{\infty p}} - \frac{1}{\varepsilon_{0p}}\right)\Omega_{Lp}}$$

$$\times \int\limits_{r_{p-1}}^{r_p}\sin\left(\pi s_p\frac{r_p - r}{r_p - r_{p-1}}\right)R^p_{00}(r)^2 r dr. \quad (24)$$

В изучаемой задаче внешняя среда гетеросистемы является диэлектриком (H_2O), поэтому $\varepsilon_{2\infty} = \varepsilon_{20}$ и, следовательно, $\Phi_2(s_2) \equiv 0$.

Согласно общей теории [18], гамильтониан (23) диагонализируется путем перехода от операторов $\hat{b}_{ps_p}$, $\hat{a}$ к новым операторам $\hat{B}_{ps_p}$, $\hat{A}$ унитарным преобразованием

$$\hat{S} = \exp\left\{\hat{A}^+\hat{A}\sum_{ps_p}\left[\Phi^*_p(s_p)\hat{B}^+_{ps_p} - \Phi_p(s_p)\hat{B}_{ps_p}\right]\right\}. \quad (25)$$

В результате получается следующее выражение для величны перенормированной энергии основного уровня электрона:

$$E = E_0 + \Delta_0 + \Delta_l$$

$$= E_0 - \sum_{s_0=-\infty}^{\infty}\frac{|\Phi_0(s_0)|^2}{\Omega_{s_0}} - \sum_{s_1=-\infty}\frac{|\Phi_1(s_1)|^2}{\Omega_{s1}}, \quad (26)$$

где Δ_0 и Δ_1 — парциальные сдвиги уровня за счет взаимодействия электрона с LO-фононами нулевой и первой сред.

Дальнейшие расчеты выполнены на ЭВМ с параметрами системы, указанными в табл. 1. Результаты расчетов приведены в табл. 2, в которой указаны значения энергетических параметров основного состояния электрона в зависимости от числа (n) элементарных ячеек, укладывающихся вдоль радиального направления слоя HgS. В соответствии с экспериментом [17] радиус внутренней наносферы $r_0 = 4a_{\mathrm{CdS}}$. В табл. 2 приведены величины энергии основного состояния электрона относительно дна зоны проводимости массивного CdS без учета фононов E_0 и с учетом фононов E, парциальные сдвиги энергии основного состояния за счет взаимодействия с ограниченными LO-фононами CdS (Δ_0) и HgS (Δ_1), а также полный сдвиг Δ.

Из табл. 2 видно, что в соответствии с результатами работы [17] с увеличением толщины квантовой ямы (n) энергия E_0 быстро уменьшается (электрон "скатывается" в яму). При этом сдвиг Δ_0 по модулю также резко уменьшается, а $|\Delta_1|$ — увеличивается. В результате зависимость сдвига полного уровня Δ от n имеет немонотонный характер. Характер установленных зависимостей понятен из физических соображений. Действительно, если $n = 0$, то электрон находится в наносфере CdS и взаимодействует только с LO-фононами CdS, поэтому Δ_0 имеет максимум, а $|\Delta_1| = 0$. С увеличением n максимум плотности вероятности нахождения электрона постепенно смещается из области CdS в квантовую яму HgS, поэтому $|\Delta_0|$ уменьшается, а $|\Delta_1|$ — увеличивается. При малых значениях n электрон находится главным образом в переходной области между обоими нанокристаллами, где он слабо взаимодействует с ограниченными объемными LO-фононами, а в состояниях с $l = 0$ вообще не взаимодействует с интерфейсными фононами. Поэтому при малых значениях n и $|\Delta_0|$, и $|\Delta_1|$ имеют несущественные значения. С дальнейшим увеличением n, когда

Таблица 2. Расчетные значения энергетических параметров основного состояния электрона в гетеросистеме $CdS/HgS/H_2O$

n	E_0, eV	$-\Delta_0$, meV	$-\Delta_1$, meV	$-\Delta$, meV	E, eV
0	1.408	17.53	0	17.53	1.390
1	0.893	0.201	0.063	0.264	0.892
2	0.537	0.035	0.366	0.401	0.536
3	0.373	0.015	0.974	0.989	0.372
4	0.282	0.009	2.04	2.05	0.281
5	0.224	0.006	3.76	3.77	0.222
6	0.184	0.005	6.52	6.53	0.181
7	0.155	0.004	10.83	10.83	0.151

электрон в основном находится уже ближе к середине квантовой ямы HgS, его взаимодействие с LO-фононами HgS становится все существеннее, и, следовательно, полный сдвиг Δ главным образом обусловлен именно этими фононами.

Однако при еще бо́льших значениях n разность энергий первого возбужденного и основного уровней уменьшается, поэтому условие ($|\Delta| \ll E_1 - E_0$) применимости гамильтониана (23), не учитывающего межуровневое взаимодействие через фононы, выполняется плохо. По этой причине расчет Δ для исследуемой гетеросистемы выполнялся до значения $n = 10$, при котором $|\Delta|/(E_1 - E_0) = 0.17$. Исследование системы с большими значениями n требует использования полного гамильтониана (22), а также применения более универсальных методов, например метода функций Грина, что выходит за пределы настоящей работы.

В заключение отметим, что развитый в настоящей работе формализм и полученный гамильтониан электрон-фононной системы для произвольного числа сферических квантовых ям позволяют исследовать различные задачи о поведении спектра конкретных наногетеросистем.

Список литературы

[1] N. Mori, T. Ando. Phys. Rev. **B40** , *9*, 6175 (1989).
[2] L. Wendler, B. Harwig. J. Phys.: Cond. Matter. **3**, 9907 (1991).
[3] P. Sotirelis, P. von Allmen, K. Hess. Phys. Rev. **B47**, *19*, 12744 (1993).
[4] J.M. Rorison. Phys. Rev. **B48**, *7*, 4643 (1994).
[5] G.D. Senders, C.J. Stanton. Phys. Rev. **B48**, 15, 11067 (1993).
[6] G.Q. Hai, F.M. Peeters, J.T. Devreese, L. Wendler. Phys. Rev. **B48**, *16* 12016 (1994).
[7] X.F. Wang, X.L. Lei. Phys. Rev. **B49**, *7*, 4780 (1994).
[8] J.M. Rorison. Phys. Rev. **B50**, *11*, 8008 (1994).
[9] А.И. Екимов, А.А. Онущенко. ФТП **16**, *7*, 1215 (1982).
[10] Ал.Л. Эфрос, А.Л. Эфрос. ФТП **16**, *7*, 1209 (1982).
[11] Н.А. Ефремов, С.И. Покутний. ФТТ **32**, *10*, 2921 (1990).
[12] С.И. Покутний. ФТТ **34**, *8*, 2386 (1992).
[13] S.I. Pokutnyi. Phys. Lett. **A203**, *388* (1995).
[14] M.C. Klein, F. Hache, D. Ricard, C. Flytzanis. Phys. Rev. **B42**, *17*, 11123 (1990).
[15] P.A. Knipp, T.J. Reinecke. Phys. Rev. **B48**, *24*, 1837 (1993).
[16] J.W. Haus, H.S. Zhou, I. Honma, H. Komiyama. Phys. Rev. **B47**, *3*, 1359 (1993).
[17] D. Shooss, A. Hews, A. Eychmüller, H. Weller. Phys. Rev. **B49**, *24*, 17072 (1994).
[18] А.С. Давыдов. Теория твердого теал. Наука, М. (1976). С. 639.
[19] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Квантовая механика. Физматгиз. М. (1963). С. 702.
[20] Н.В. Ткач. ФТТ **36**, *11*, 3222 (1994).