ЖУРНАЛ ФІЗИЧНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ
т. 1, № 4 (1997) с. 528–534

JOURNAL OF PHYSICAL STUDIES
v. 1, No 4 (1997) p. 528–534

ДОСЛІДЖЕННЯ ЕКСИТОН–ФОНОННОЇ ВЗАЄМОДІЇ В СФЕРИЧНИХ НАНОГЕТЕРОСИСТЕМАХ МЕТОДОМ БЕЗМЕЖНОГО РОЗГАЛУЖЕНОГО ІНТЕҐРАЛЬНОГО ДРОБУ

М. Ткач
Чернівецький державний університет, Україна, UA–274012, Чернівці, вул. Коцюбинського, 2
(Отримано 25 серпня 1996)

Методом безмежного розгалуженого інтеґрального дробу для розрахунку функцій Ґріна вивчено екситон–фононну взаємодію у складній сферичній наногетероструктурі. Отримано точний аналітичний вираз для масового оператора квазічастинок, що взаємодіють з усіма вітками фононів системи. Визначено причини нелінійної залежности від товщини шару β-HgS для зсуву основного рівня енергії екситона внаслідок взаємодії з поляризаційними фононами у сферичній наногетеросистемі CdS/β-HgS/H_2O.

Ключові слова: екситон, фонон, взаємодія, наногетероструктура, функція Ґріна, масовий оператор, розгалужений інтеґральний дріб.

PACS number(s): 63.20.Ls

I. ВСТУП

Перспективи застосування напівпровідникових гетеросистем у наноелектроніці, лазерній техніці та інших галузях є потужним стимулом до вивчення фізичних явищ у них. Експериментально і теоретично найбільш досліджені квазідвовимірні плоскі наногетероструктури [1, 2] та квазіодновимірні (квантові дроти) [3, 4].

Вивченню сферичних квантових точок присвячено менше праць. Хоча спектр електронів, дірок та екситонів вивчали для таких систем і експериментально [5], і теоретично [5–8]. В переважній більшості теоретичних праць взаємодію електронів з поляризаційними фононами не враховували. Для простої наногетеросистеми, яка складається з напівпровідникової кульки в діелектричному середовищі, була розвинута теорія електрон–фононної взаємодії в наближенні ефективної маси для електрона з використанням моделі діелектричного континууму поляризаційних фононів. Для складних гетеросистем з кількома різними шарами подібна теорія не розроблена, хоча останні реалізовані експериментально [10].

Нашою метою є вивчення екситон–фононної взаємодії в складній сферичній гетеросистемі CdS/β-HgS/H_2O та розробка методу безмежних розгалужених інтеґральних дробів як математичного апарату для розрахунку функцій Ґріна квазічастинок у складних гетеросистемах. Визначимо величину перенормування фононами енергії основного стану екситона у досліджуваній наногетеросистемі.

II. ГАМІЛЬТОНІЯН ЕКСИТОН–ФОНОННОЇ ВЗАЄМОДІЇ У СФЕРИЧНІЙ НАНОГЕТЕРОСИСТЕМІ CdS/β-HgS/H_2O

Розглянемо сферичну наногетеросистему CdS/β-HgS/H_2O, яка характеризується параметрами, наведеними в таблиці. Енергія E і хвильова функція $\phi(r_l, r_h)$ екситона в основному стані у наближенні ефективних мас для електрона m_l і дірки m_h розраховані в праці [10]. Спектр і вектори поляризації обмежених оптичних та інтерфейсних фононів у моделі діелектричного континууму отримані для такої системи в [11].

Враховуючи відомий з [11] потенціял поля поляризацій, яке взаємодіє з екситонним електроном і діркою, та переводячи гамільтоніян екситон–фононної взаємодії в зображення вторинного квантування за всіма змінними, одержимо повний гамільтоніян у вигляді

$$H = H_{ex} + H_{ph} + H_{int}. \tag{2.1}$$

Гамільтоніян екситонів в основному стані

$$H_{ex} = E\hat{a}^{+}\hat{a} \tag{2.2}$$

з енергією

$$\begin{aligned} E = {} & E^{e}_{ls} + E^{h}_{ls} \\ & - \left\langle \psi^{e}_{ls}\psi^{h}_{ls} \left| \frac{e^2}{\varepsilon|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} \right| \psi^{h}_{ls}\psi^{e}_{ls} \right\rangle + E_g, \end{aligned} \tag{2.3}$$

де E_g — ширина забороненої зони β-HgS; E^{e}_{ls}, E^{h}_{ls} — енергії основних рівнів електрона і дірки, відраховані від дна зони провідности і верху валентної зони, відповідно; $\hat{a}^{+}, \hat{a}$ — оператори породження і знищення екситонного збудження бозонного типу.

Оскільки в s-станах заряджені частинки не взаємодіють з інтерфейсними фононами [9], то в $\hat{H}_{ph}$ враховані лише обмежені LO-фонони, і тому згідно з [11]

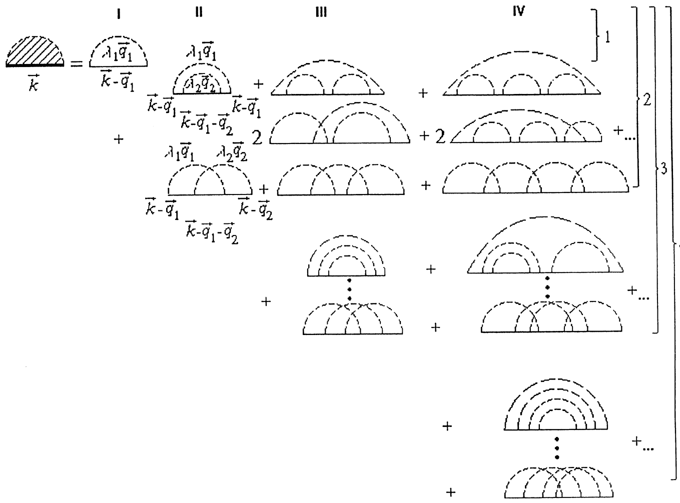

Рис. 1. Діяграмне зображення повного масового оператора квазічастинки.

Кристал	p	m_e, m_0	m_h, m_0	a,Å	E_g, еВ	V_e, еВ	V_h, еВ	Ω_L, меВ	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

Таблиця.

$$\hat{H}_{ph} = \sum_{\lambda=0}^{1} \sum_{p=-\infty}^{\infty} \Omega_\lambda \left(\hat{b}^+_{\lambda p} \hat{b}_{\lambda p} + \frac{1}{2} \right), \tag{2.4}$$

де Ω_0 і Ω_1 — енергії обмежених оптичних фононів CdS і β-HgS відповідно; $\hat{b}^+_{\lambda p}, \hat{b}_{\lambda p}$ — оператори породження і знищення фононів у p-стані λ-го середовища.

Гамільтоніян екситон–фононної взаємодії

$$\hat{H}_{int} = \sum_{\lambda=0}^{1} \sum_{p=-\infty}^{\infty} \phi_\lambda(p) \hat{a}^+ \hat{a} (\hat{b}^+_{\lambda p} + \hat{b}_{\lambda p}) \tag{2.5}$$

містить функції зв'язку, явний вигляд яких залежить від співвідношень між енергіями основного стану електрона (дірки) і різниці потенціялів цих частинок у CdS та β-HgS. У випадку, коли $0 \le E^e_{ls} \le U^e_1 - U^e_0$, $0 \le E^h_{ls} \le U^h_0 - U^h_1$, функція зв'язку екситона з LO-фононами CdS має вигляд

$$\phi_0(p) = \sqrt{\frac{e^2 \Omega_{LO}}{R_0} \left(\frac{1}{\varepsilon_{\infty 0}} - \frac{1}{\varepsilon_{00}} \right)} \int_0^1 \frac{\sin(\pi p \rho)}{\pi p \rho} \left(\frac{sh^2(k^e_0 R_0 \rho}{\sqrt{C_e}} - \frac{sh^2(k^h_0 R_0 \rho}{\sqrt{C_h}} \right) d\rho, \tag{2.6}$$

а функція зв'язку з LO-фононами β-HgS —

$$\phi_1(p) = \sqrt{\frac{e^2 \Omega_{L1}}{R_0} \left(\frac{1}{\varepsilon_{\infty 1}} - \frac{1}{\varepsilon_{01}} \right) \delta} \int_0^1 \frac{\sin(\pi p \rho)}{\pi p \rho} \left(\frac{f^2(k^e_1 R_0 \rho}{\sqrt{C_e}} - \frac{f^2(k^h_1 R_0 \rho}{\sqrt{C_h}} \right) d\rho, \tag{2.7}$$

де $\delta = \frac{R_1 - R_0}{R_0}$,

$$f(k_1^e R_0 \rho) = (k_1^e R_0)^{-1}\{\alpha_e \sin[k_1^e R_0(1+\delta\rho] + \beta_e \cos[k_1^e R_0(1+\delta\rho]\}, \tag{2.8}$$

$$\alpha_e = sh(k_0^e R_0)[\cos(k_1^e R_0) + k_1^e R_0 \sin(k_1^e R_0)] + \frac{m_1}{m_0}\cos(k_1^e R_0)[k_0^e R_0 ch(k_0^e R_0) - sh(k_0^e R_0)], \tag{2.9}$$

$$\beta_e = sh(k_0^e R_0)[k_1^e R_0 \cos(k_1^e R_0) - \sin(k_1^e R_0)] + \frac{m_1}{m_0}\sin(k_1^e R_0)[sh(k_0^e R_0) - k_0^e R_0 ch(k_0^e R_0)]. \tag{2.10}$$

Константа нормування

$$C_e = \frac{sh(2k_0^e R_0)}{2k_0^e R_0} - 1 + \frac{\gamma_1^2(k_1^e R_1)}{(k_1^e R_0)^2(k_2^e R_0)} + \frac{\gamma_1^2(k_1^e R_1) + [\gamma_1(k_1^e R_1) + k_1^e R_1 \gamma_2(k_1^e R_1)]^2}{(k_1^e R_0)^2(k_1^e R_0)} -$$
$$\frac{\gamma_1^2(k_1^e R_0) + [\gamma_1(k_1^e R_0) + k_1^e R_0 \gamma_2(k_1^e R_0)]^2}{(k_1^e R_1)^2} + \frac{\gamma_1(k_1^e R_0)[\gamma_1(k_1^e R_0) + k_1^e R_0 \gamma_2(k_1^e R_0)]}{(k_1^e R_0)^4} -$$
$$\frac{\gamma_1(k_1^e R_1) + [\gamma_1(k_1^e R_1) + k_1^e R_1 \gamma_2(k_1^e R_1)]}{(k_1^e R_0)^3(k_1^e R_1)}, \tag{2.11}$$

де

$$\gamma_1(k_1^e R_0) = \alpha_e \sin(k_1^e R_0) + \beta_e \cos(k_1^e R_0), \tag{2.12}$$

$$\gamma_2(k_1^e R_0) = \beta_e \sin(k_1^e R_0) - \alpha_e \cos(k_1^e R_0), \tag{2.13}$$

$$k_0^e = \sqrt{\frac{2m_0^e(E^e - U_0^e)}{\hbar^2}}, \quad k_1^e = \sqrt{\frac{2m_1^e(E^e - U_1^e)}{\hbar^2}}. \tag{2.14}$$

В області енергій, де $U_1^{e,h} - U_0^{e,h} \leq E_{1,\rho}^{e,h}$, у формулах (2.6)–(2.13) потрібно зробити заміну $k_0 \to ik_0$, а в області $|E_{e,h}| \leq |U_2^{e,h}|$ — заміни $k_0 \to ik_0$, $k_2 \to ik_2$.

Оскільки зовнішнім середовищем гетеросистеми є діелектрик H_2O, то в ньому $\varepsilon_{\infty 2} = \varepsilon_{02}$, звідси $\phi_2(p) = 0$, тобто екситон не взаємодіє з поздовжніми фононами середовища.

Отже, повний гамільтоніян екситон–фононної системи визначений, що дає змогу розрахувати перенормування поляризаційними коливаннями енергії екситона.

III. ЗОБРАЖЕННЯ КВАЗІЧАСТИНКОВОЇ ФУНКЦІЇ ҐРІНА У ВИГЛЯДІ БЕЗМЕЖНОГО РОЗГАЛУЖЕНОГО ІНТЕҐРАЛЬНОГО ДРОБУ

Спектр екситон–фононної системи, що його описує гамільтоніян (2.1), можна визначити методом функцій Ґріна. Для цього розглянемо більш загальний гамільтоніян, який описує систему безспінових квазічастинок, які взаємодіють з фононами при дуже низьких температурах ($T = 0$ K). Гамільтоніян такої системи у зображенні чисел заповнення типовий [12–13]:

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{bfk} a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} + \sum_{\lambda,\mathbf{q},\mathbf{k}} \phi_\lambda(\mathbf{q}) a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+ a a_{\mathbf{k}} (b_{\mathbf{q}\lambda} + b_{-\mathbf{q}\lambda}^+)$$
$$+ \sum_{\lambda\mathbf{q}} \Omega_{\lambda\mathbf{q}} (b_{\mathbf{q}\lambda}^+ b_{\mathbf{q}\lambda} + 1/2), \tag{3.1}$$

де $E_{\mathbf{k}}$ — закон дисперсії квазічастинок; $a_{\mathbf{k}}^+$ і $a_{\mathbf{k}}$ — оператори породження і знищення, які задовольняють комутаційні чи антикомутаційні співвідношення залежно від статистики квазічастинок (ферміони чи бозони); $\Omega_{\lambda\mathbf{q}}$ — закон дисперсії фононів гілки λ з квазіімпульсом $\mathbf{q}$; $b_{\mathbf{q}\lambda}^+$ і $b_{\mathbf{q}\lambda}$ — оператори бозонного типу; $\phi_\lambda(\mathbf{q})$ — функція зв'язку квазічастинок з фононами ($\lambda = 1, 2, \ldots, \tau$).

Для виявлення спектра квазічастинок, перенормованого взаємодією, необхідно визначити Фур'є–зображення повної ФҐ $G(\mathbf{k}, \omega')$. Його визначає рівняння Дайсона ($\hbar = 1$)

$$G(\mathbf{k}, \omega') = \{\omega' - \varepsilon_{bfk} - M(\mathbf{k}, \omega')\}^{-1} \tag{3.2}$$

через повний масовий оператор (МО) як сукупність усіх незвідних діяграм Фейнмана. Для того, щоб отримати зображення МО у вигляді безмежного розгалуженого інтеґрального дробу, як і у [14], малюємо всі діяграми МО не просто у послідовності збільшення кількости вершин, а згрупуємо їх згідно з двома важливими ознаками (рис. 1): римські цифри зверху задають порядок степеня квадрата модуля функцій зв'язку, арабські цифри праворуч — максимальну кількість фононних ліній, які проходять над однією з квазічастинкових (суцільних) ліній у діяграмах названої групи. Арабська цифра n одночасно задає максимальну кількість віртуальних фононів, що беруть участь у процесах взаємодії, яку описує згаданий клас діяграм.

Згідно з правилами зіставлення діяграм з аналітичними виразами у техніці Пайнса [15] (де вже виконано інтеґрування за всіма проміжними частотами), діяграма, що враховує лише однофононний процес, дає

$$... = M_1^{(1)}(\mathbf{k},\omega') = \sum_{\lambda_1 \mathbf{q}_1} \frac{|\phi_{\lambda_1}(\mathbf{q}_1)|^2}{\omega' - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}_1} - \Omega\lambda_1\mathbf{q}_1}; \tag{3.3}$$

діяграми класу (II), що описують двофононні процеси першого порядку за квадратом модуля функцій зв'язку,

$$... = \sum_{\substack{\lambda_1 \mathbf{q}_1 \\ \lambda_2 \mathbf{q}_2}} \frac{|\phi_{\lambda_1}(\mathbf{q}_1)|^2 |\phi_{\lambda_2}()|^2}{(\omega' - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}_1} - \Omega_{\lambda_1\mathbf{q}_1})(\omega' - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_2} - \Omega_{\lambda_1\mathbf{q}_1} - \Omega_{\lambda_2\mathbf{q}_2})} \left[\frac{1}{\omega' - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}_1} - \Omega_{\lambda_1\mathbf{q}_1}} + \frac{1}{\omega' - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}_2} - \Omega_{\lambda_1\mathbf{q}_2}}\right].$$

Аналізуючи увесь клас діяграм (II) (рис. 1), переконаємося (використовуючи розклад у ряд геометричної прогресії), що всю безмежну сукупність діяграм, яка враховує одно- і двофононні процеси, можна отримати шляхом перенормування енергетичного знаменника однофононного МО. Тобто двофононний МО $M_1^{(2)}(\mathbf{k},\omega')$ задають діяграми класу (II) (рис. 1), яким відповідає аналітичний вираз

$$M_1^{(2)}(\mathbf{k},\omega') = \sum_{\lambda_1 \mathbf{q}_1} \frac{|\phi_{\lambda_1}(\mathbf{q}_1)|^2 A_1}{\omega' - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}_1} - \Omega_{\lambda_1\mathbf{q}_1} - M_1^{(2)}(\mathbf{k},\omega')}, \tag{3.4}$$

$$M_2^{(1)}(\mathbf{k},\omega') = \sum_{\lambda_2 \mathbf{q}_2} \frac{|\phi_{\lambda_2}(\mathbf{q}_2)|^2 A_2(\mathbf{k};\omega';\lambda_1;\mathbf{q}_1;\lambda_2;\mathbf{q}_2)}{\omega' - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_2} - \Omega_{\lambda_1\mathbf{q}_1} - \Omega_{\lambda_1\mathbf{q}_2}}; \tag{3.5}$$

$$A_1 = 1, \quad A_2(\mathbf{k};\omega';\lambda_1;\mathbf{q}_1;\lambda_2;\mathbf{q}_2) = 1 + \frac{\omega' - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}_1} - \Omega_{\lambda_1\mathbf{q}_1}}{\omega' - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}_2} - \Omega_{\lambda_2\mathbf{q}_2}}. \tag{3.6}$$

Процедура перенормування є універсальною і справедливою у будь-якому порядку n. Застосувавши її, отримують точне зображення МО у вигляді безмежного розгалуженого інтеґрального гіллястого (оскільки суми за хвильовими векторами розглядають як відповідні інтеґрали) дробу

$$M_1^{(2)}(\mathbf{k},\omega') = \sum_{\lambda_1 \mathbf{q}_1} \frac{|\phi_{\lambda_1}(\mathbf{q}_1)|^2 A_1}{\left[\omega' - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}_1} - \Omega_{\lambda_1\mathbf{q}_1} \begin{array}{l} - \sum_{\lambda_2\mathbf{q}_2} \frac{|\phi_{\lambda_2}(\mathbf{q}_2)|^2 A_2(\mathbf{k};\omega';\lambda_1;\mathbf{q}_1;\lambda_2;\mathbf{q}_2)}{\omega' - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_2} - \Omega_{\lambda_1\mathbf{q}_1} - \Omega_{\lambda_1\mathbf{q}_2} - \ldots -} \\ - \sum_{\lambda_n\mathbf{q}_n} \frac{|\phi_{\lambda_n}(\mathbf{q}_n)|^2 A_n(\mathbf{k};\omega';\lambda_1;\mathbf{q}_1;\lambda_2;\mathbf{q}_2;\ldots;\lambda_n;\mathbf{q}_n)}{\omega' - \varepsilon_{\mathbf{k}-\sum_{l=1}^{n}\mathbf{q}_l} - \sum_{l=1}^{n}\Omega_{\lambda_l\mathbf{q}_l} - \ldots} \end{array}\right]}. \tag{3.7}$$

Коефіцієнт A_n визначається виразом

$$\begin{aligned} & A_n(\mathbf{k};\omega';\lambda_1;\mathbf{q}_1;\lambda_2;\mathbf{q}_2;\ldots;\lambda_n;\mathbf{q}_n) = 1 \\ & + \sum_{s=1}^{n-1} \prod_{p=1}^{s} \frac{\omega' - \varepsilon_{\mathbf{k}-\sum_{l=1}^{n-p}\mathbf{q}_l} - \sum_{l=1}^{n-p}\Omega_{\lambda_l\mathbf{q}_l}}{\omega' - \varepsilon_{\mathbf{k}-\sum_{l=1}^{n}\mathbf{q}_l + \sum_{l=1}^{p}\mathbf{q}_{n+p(s+l)}} - \sum_{l=1}^{n}\Omega_{\lambda_l\mathbf{q}_l} + \sum_{l=1}^{p}\Omega_{\lambda_{n+p-(s+l)}\mathbf{q}_{n+p-(s+l)}}}. \end{aligned} \tag{3.8}$$

У випадку, коли фононна система має лише одну гілку коливань ($\lambda = 1$), МО (3.7) і коефіцієнти A_n (3.8), як і повинно бути, збігаються з відповідними виразами праці [7], визначеними для такої моделі.

Отже, формули (3.2), (3.7), (3.8), по суті, є точним розв'язком задачі про визначення аналітичного виразу для Фур'є–зображення повної ФҐ системи квазічастинок, що взаємодіють з фононами, які описує гамільтоніян (3.1). У цьому випадку $G(k,\omega')$ відшукано у вигляді БРІД з аналітично визначеними гілками довільного n-го порядку. Якщо ж фононна система має лише одну гілку ($\lambda = 1$), то БРІД вироджується у безмежний інтеґральний ланцюговий дріб [14]. Характерна особливість зображення (3.7) та, що в гілках довільного n-го порядку функції зв'язку є лише у вигляді $|\phi_\lambda(\mathbf{q})|^2$, а не в степенях довільних високих порядків, як у традиційних рядах Фейнманівської техніки.

Однотипність структури МО (3.7) дає змогу порівняно просто скласти алґоритм його розрахунку на ЕОМ, якщо задані закони дисперсії квазічастинок ($E_\mathbf{k}$), фононів ($\Omega_{\lambda\mathbf{q}}$) і функцій їхнього зв'язку ($\phi_\lambda(\mathbf{q})$). Під час таких розрахунків повного МО потрібно обривати гілки дробу такого порядку (n), який забезпечує достатню точність. Зрозуміло, що чим більша взаємодія $|\phi_\lambda(\mathbf{q})|^2$, тим більший порядок n потрібно враховувати. Однак, навіть у випадках, коли енергія взаємодії значно перевищує найбільшу з енергій фононних гілок, потрібно врахувати порівняно невелику кількість n фононних процесів, щоб отримати результат з доброю точністю.

IV. ПЕРЕНОРМУВАННЯ ПОЛЯРИЗАЦІЙНИМИ ФОНОНАМИ ОСНОВНОГО ЕКСИТОННОГО СТАНУ В CdS/β-HgS/H_2O

Розвинутий у попередньому параграфі метод розрахунку функції Ґріна застосовний до гамільтоніяна (2.1). В цього випадку $\varepsilon_\mathbf{k} = E, \Omega_{\lambda\mathbf{q}} = \Omega_\lambda$, сума за $\mathbf{q}$ переходить у суму за p, тому, оскільки в масовому операторі (3.7) сума за $q \to p$ стосується лише функцій зв'язку, доцільно ввести позначення $\Phi_\lambda^2 = \sum_{p=-\infty}^{\infty} |\phi_\lambda(p)^2$ і безрозмірний параметр $a_\lambda = \Phi_\lambda/\Omega_\lambda$, який характеризує енергію взаємодії екситона з оптичними фононами середовища λ в одиницях енергії цього фонона.

Хоча для такої моделі відоме точне інтеґральне Фур'є–зображення ФҐ [15]

$$G(\omega') = \frac{\exp(-\sum_\lambda a_\lambda^2)}{2\pi i} \times \int dt e^{i\left(\omega'-\varepsilon-\sum_{\lambda=1}^{\tau} a_\lambda^2\Omega_\lambda\right)t+\sum_{\lambda=1}^{\tau} a_\lambda^2 \exp(-i\Omega_\lambda t)}, \tag{4.1}$$

однак прямої можливости отримати з нього точний спектр системи нема. Лише за додаткової умови, що оператор кількости квазічастинок дорівнює своєму квадрату, можливе унітарне перетворення [12], яке визначає перенормований енергетичний спектр системи

$$\varepsilon_{\lambda_1,\dots,\lambda_n} = \varepsilon - \sum_{\lambda=1}^{\tau} a_\lambda^2\Omega_\lambda + \sum_{l=1}^{n} \Omega_{\lambda l}, \tag{4.2}$$

$$(n = 0, 1, 2, \dots, \infty).$$

Як бачимо, у цьому спектрі є основний стан, що відповідає наявности в системі квазічастинки з перенормованою енергією $E^{(0)} = E - \sum_{\lambda=1}^{\tau} a_\lambda^2\Omega_\lambda$, і безмежна кількість збуджених станів системи, що відповідають енергіям системи, коли в ній існує квазічастинка разом з одним із фононів гілки λ ($E_\lambda^{(1)} = E^{(0)} + \Omega_\lambda$), з двома фононами ($E_{\lambda_1,\lambda_2} = E^{(0)} + \Omega_{\lambda_1} + \Omega_{\lambda_2}$) і т.д.

Спектр розглянутої системи без будь-яких додаткових обмежень визначають методом БРІД. У цьому випадку, оскільки сума за $\mathbf{q}$ стосується лише функції зв'язку і не стосується енергії квазічастинок та фононів, розгалужений інтеґральний дріб для МО (3.7) вироджується у простий розгалужений (не інтеґральний). Вводячи зручні безрозмірні величини: енергії фононів $\tilde{\Omega}_\lambda = \Omega_\lambda/\Omega$, частоту $\xi = (\omega - E)/\Omega$, повний МО $m(\xi) = M_1(\omega)/\Omega$ виражений в одиницях мінімальної енергії фононів $\Omega = \min\Omega_\lambda$, з (3.7) отримують

$$m(\xi) = \sum_{\lambda_1=1}^{\tau} \frac{a_{\lambda_1}^2}{\xi - \tilde{\Omega}_{\lambda_1} - \sum_{\lambda_2=1}^{\tau} \frac{a_{\lambda_2}^2 A_2(\xi,\lambda_1,\lambda_2)}{\xi - \tilde{\Omega}_{\lambda_1} - \tilde{\Omega}_{\lambda_2} - \dots - \sum_{\lambda_n=1}^{\tau} \frac{a_{\lambda_n}^2 A_n(\xi,\lambda_1,\dots,\lambda_n)}{\xi - \sum_{l=1}^{n} \Omega_{\lambda_l} - \dots}}}, \tag{4.3}$$

де

$$A_n(\xi, \lambda_1, \dots, \lambda_n) = 1 + \sum_{s=1}^{n-1} \prod_{p=1}^{s} \frac{\xi - \sum_{l=1}^{n-p} \tilde{\Omega}_{\lambda_l}}{\xi - \sum_{l=1}^{n} \tilde{\Omega}_{\lambda_l} + \xi - \sum_{l=1}^{p} \tilde{\Omega}_{n+p-(s+l)}}. \tag{4.4}$$

Дисперсійне рівняння

$$\xi = m(\xi) \tag{4.5}$$

визначає енергетичний спектр системи.

Ми тут не будемо цікавитися збудженими ("зв'язаними") станами електрон–фононної системи в CdS/β-HgS/H_2O, а обмежимося лише розрахунком перенормованої енергії основного стану екситона.

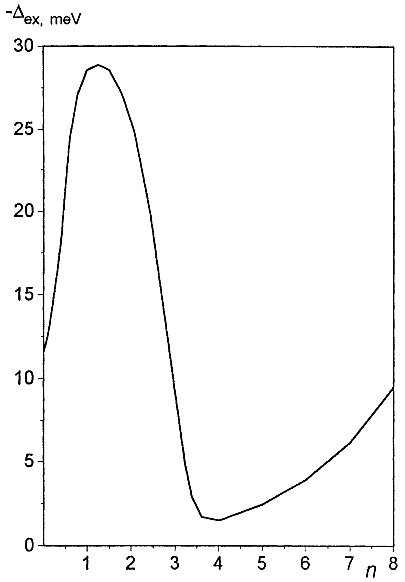

Рис. 2. Залежність зсуву основного екситонного рівня від кількости моношарів β-HgS при $R_0 = 4a_{\mathrm{CdS}}$.

Конкретні розрахунки виконували за допомогою ЕОМ з параметрами системи, наведеними в таблиці. Залежність зсуву екситонного рівня від товщини шару β-HgS (n — товщина шару в одиницях $a_{\mathrm{H_gS}}$) фіксованого значення радіуса внутрішнього нанокристала CdS показана на рис. 2.

З рис. 2 видно, що залежність Δ_{ex} від n є складною нелінійною функцією, хоча її поведінка зрозуміла з фізичних міркувань. Потрібно зауважити, що взаємодія екситона з поляризаційними коливаннями пропорційна величині $\varepsilon_\infty^{-1} - \varepsilon_0^{-1}$, яка для CdS становить 0.072, а для β-HgS — 0.033. Отже, при $n = 0$, коли нанокристал CdS міститься у воді (шару β-HgS нема), екситон перебуває у сферичній потенціяльній ямі CdS і внаслідок взаємодії з поляризаційними коливаннями цього кристала змінює енергію основного стану на $\sim 11 me\mathrm{V}$, що слабко залежить від величини R_0.

Якщо у гетеросистемі додати один шар β-HgS(n=1), то виникає ще одна (глибша) потенціяльна яма, в яку переміщається електрон (унаслідок більшої середньої ефективної маси), а дірка ще головно перебуває в CdS. Внаслідок цього середня відстань між електроном і діркою збільшується, вони слабше взаємокомпенсують свої поляризаційні поля і тому Δ_{ex} збільшується. З подальшим збільшенням n (2–3) уже і дірка наближається до межі поділу CdS і β-HgS, а тому значення створеної нею поляризації гетеросистеми зменшується, отже, і Δ_{ex} зменшується. При $n \geq 4$ і електрон, і дірка перебувають в основному в глибшій ямі β-HgS, причому внаслідок малих розмірів ями радіяльна відстань між ними мала, тому поляризаційні поля майже взаємокомпенсуються і при $n \sim 4; 5$ Δ_{ex} мінімальне. Подальше збільшення n розширює яму β-HgS, що дає змогу електронові віддалитись від дірки, а отже, послаблює взаємокомпенсацію поляризаційних полів, що відповідно приводить до збільшення Δ_{ex}.

Нарешті зауважимо, що при $n \geq 7$ значення зсуву Δ_{ex} наближається до $E_{1e,h} - E_{0e,h}$ і тому використана модель, яка не враховує міжрівневу взаємодію через фонони, не є застосовною.

[1] N. Mori, T. Ando, Phys. Rev. B **40**, 6175 (1989).
[2] L. Wendler, B. Harwig, J. Phys.: Cond. Matt. **3**, 9907 (1991).
[3] G. Q. Hai, F. M. Peeters, J. T. Devreese, L. Wendler, Phys. Rev. B **48**, 1216 (1994).
[4] X. F. Wang, X. .L. Lei, Phys. Rev. B **49**, 4780 (1994).
[5] А. И. Екимов, А. А. Онущенко, Физ. техн. полупр. **16**, 1215 (1982).
[6] Ал. Л. Эфрос, А. Л. Эфрос, Физ. техн. полупр. **16**, 1209 (1982).
[7] Н. А. Ефремов, С. И. Покутний, Физ. твёрд. тела **32**, 2921 (1990).
[8] S. I. Pokutnyi, Phys. Lett. A **203**, 388 (1995).
[9] M. C. Klein, F. Hache, D. Ricard, C. Flytzanis, Phys. Rev. B **42**, 11123 (1990).
[10] D. Shooss, A. News, A. Eychmüller, H. Weller, Phys. Rev. B **49**, 17072 (1994).
[11] Н. В. Ткач, Физ. твёрд. тела **36**, 3222 (1994).
[12] А. С. Давыдов, *Теория твердого тела* (Наука, Москва, 1976).
[13] А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. М. Дзялошинский, *Метод квантовой теории поля в статистической физике* (Физматгиз, Москва, 1962).
[14] Н. В. Ткач, Теор. мат. физ. **61**, 400 (1984).
[15] В. М. Агранович, *Теория экситонов* (Наука, Москва, 1968).

INVESTIGATION OF THE EXCITON–PHONON INTERACTION IN NANOHETEROSYSTEMS BY П THE INFINITE BRANCHING INTEGRAL FRACTION METHOD

M. Tkach

Chernivtsi State University, 2 Kotsyubynskii Str., Chernivtsi, UA–274012, Ukraine

The exciton–phonon interaction in the complicated spherical nanoheterosystem is studied within the method of the infinite branching integral fraction for the calculation of Green functions. The exact analytic expression for the mass operator of quasiparticles interacting with all phonon modes of the system is obtained. The reasons of the non-linear dependence of the exciton basic energy level shift due to the interaction with the polarizational phonons in the spherical $CdS/\beta\text{-}HgS/H_2O$ nanoheterosystem on the β-HgS core thickness are established.