

ЧЕРНІВЕЦЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
ІМЕНІ ЮРІЯ ФЕДЬКОВИЧА  
МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

Кваліфікаційна наукова праця  
на правах рукопису

**Гутів Василь Володимирович**


УДК 530.145.81:538.915-022.532

**ДИСЕРТАЦІЯ**  
**ТЕОРІЯ ПЕРЕНОРМОВАНОГО СПЕКТРУ БАГАТОЗОННИХ**  
**КВАЗІЧАСТИНОК ВЗАЄМОДІЮЧИХ З**  
**ПОЛЯРИЗАЦІЙНИМИ ФОНОНАМИ**

**104 «Фізика та астрономія»**

**10 «Природничі науки»**

Подається на здобуття наукового ступеня доктора філософії

Дисертація містить результати власних досліджень. Використання ідей, результатів і текстів інших авторів мають посилання на відповідне джерело  В.В. Гутів

Науковий керівник: **Ткач Микола Васильович**, доктор фіз.-мат. наук,  
професор

Чернівці – 2023

## АНОТАЦІЯ

Гутів В. В. Теорія перенормованого спектру багатозонних квазічастинок взаємодіючих з поляризаційними фононами. – Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора філософії за спеціальністю 104 – Фізика та астрономія. – Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича МОН України, Чернівці, 2023.

Дисертаційна робота присвячена побудові теорії функціонування й оптимізації параметрів активного елемента широкосмугового нанофотодетектора далекого інфрачервоного діапазону з новим потенціальним рельєфом. Зосереджено увагу на створенні на основі давидівської моделі системи теорії перенормування спектрів багаторівневої квазічастинки взаємодіючої з одномодовими фононами, й однорівневої квазічастинки взаємодіючої з багаторівневими фононами з урахуванням багатофононних процесів у досліджуваних багаточарових наносистемах.

**У вступі** обґрунтований вибір теми й актуальність роботи, сформульована мета, основні задачі, об'єкт та предмет дослідження, вказана наукова новизна і практична цінність отриманих результатів, представлено інформацію про особистий внесок здобувача, апробацію роботи, її структуру та обсяг.

**У першому розділі** здійснений короткий огляд і аналіз наукової літератури стосовно ідей, фізичних принципів та методів покращення параметрів функціонуючих наноприладів – квантовоямних інфрачервоних фотодетекторів та квантових каскадних детекторів фотопровідного й фотovoltaїчного типів. Проаналізовано використані різноманітні експериментальні способи покращення робочих параметрів нанодетекторів у всіх вікнах атмосферної прозорості інфрачервоного діапазону. Які успішно випробовувалися у шарах квантових ям, дротин і кілець.

Відмічено існування нормально функціонуючих квантових каскадних детекторів зі «спотвореними» або й «обірваними», так званими «фононними» драбинками їх екстракторів, що, згідно зі стандартними уявленнями, не могло б відбуватися. Поки що ця парадоксальна ситуація не знайшла однозначного теоретичного обґрунтування й тому було висловлене припущення про те, що відсутні енергетичні рівні в драбинках можуть бути заміщені наявними в системі рівнями зв'язаних станів квазічастинок (електронів) з фононами, тобто електрон-фононними сателітами. Зроблено висновок, оскільки в непертурбуваних підходах (теорія збурень, метод матриці густини, варіаційний метод, і тп.) ефективно врахувати багатофотонні процеси неможливо, то потрібно застосувати модифіковані підходи сучасної квантової теорії поля.

**Другий розділ** присвячений створенню квантової теорії спектральних параметрів і сил осциляторів квантових переходів електронів при їх фононсупровідному тунелюванні крізь каскади активної області широкосмугового нанофотодетектора далекого ІЧ-діапазону. Щоб забезпечити достатню ширину смуги поглинання фотодетектора й уникнути появи значного темнового струму, запропоновано новий просторовий дизайн його основної області, який створює односторонній рух електронів без прикладання зовнішнього постійного електричного поля.

Отже, активна область нанодетектора містить  $N$  однакових каскадів, кожен з яких складається з однієї безструктурної квантової ями і двох груп квантових ям з внутрішньою структурою. Висоти потенціальних бар'єрів ( $U$ ) і півширини ( $d$ ) та інверсовані потенціали ( $\pm V$ ) внутрішніх ям і бар'єрів порівняно малі.

У моделі координатнозалежної ефективної маси електрона з потенціальним рельєфом описаних вище каскадів активної області розв'язано стаціонарне рівняння Шредінгера для кожної окремої квантової ями. З урахуванням граничних умов на хвильові функції, та потоків ймовірностей їх густин разом з умовами нормування знаходяться точні розв'язки хвильових

функцій, енергетичний спектр та сили осциляторів квантових переходів з основного на збуджений рівень кожної квантової ями.

На основі розвиненої теорії виконаний розрахунок спектральних параметрів каскадів ШКЯ та здійснено їх оптимізацію залежно від величин потенціалів  $U$  і  $V$  та геометричних розмірів  $D$  і  $d$ . Як складові елементи каскаду вивчалися ШКЯ  $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  з малими внутрішніми бар'єрами  $\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}$  та з малими внутрішніми ямами  $\text{Ga}_y\text{In}_{1-y}\text{As}$ . Такий вибір сполук зумовлений тим, що в них близькі розміри елементарних комірок, це забезпечує каскад від утворення шкідливих напружень, які збільшують темновий струм детектора, а також добре відомі прості лінійні співвідношення між концентраціями ( $x$ ,  $y$ ) складових елементів та енергетичними параметрами ( $U, V$ ) й ефективними масами електрона ( $m$ ) в усіх трьох областях ШКЯ.

Наукову новизну висновків, що їх вдалося зробити в другому розділі роботи на базі отриманих результатів, розкривають такі положення:

- уперше запропоновано новий просторовий дизайн каскаду широкосмугового квантовоямного нанофотодетектора далекого інфрачервоного діапазону. Його каскади складаються з ізотропних матеріалів квантових ям і бар'єрів з близькими розмірами елементарних комірок. На відміну від анізотропних матеріалів на межах квантових ям і бар'єрів практично не виникають напруги, які суттєво погіршують роботу наноприладів через збільшення темнового струму;

- активна область нанофотодетектора вперше складається з каскадів глибоких і широких квантових ям з інверсованою структурою внутрішніх малих квантових ям і бар'єрів. Варіації їхніх розмірів і величин потенціалів дозволяє значно збільшити сили осциляторів квантових переходів електронів під дією поля. Це сприяє зростанню відношення ширини до довжини хвилі смуги поглинання електромагнітного поля далекого інфрачервоного діапазону ( $\eta \approx 37.54\% \div 44.21\%$  при  $\lambda \approx 10\text{мкм} \div 25\text{мкм}$ ).

**Третій розділ** присвячений розробці методу послідовного виділення й парціального підсумовування мультиплікативних діаграм масового оператора

в теорії перенормування вироджених і невироджених спектрів багаторівневих квазічастинок взаємодіючих з багатьма однодовими фононами.

Перенормований електронний спектр системи, до якої входить довільна кількість ( $\tau$ ) багаторівневих квазічастинок, що взаємодіють з однодовими поляризаційними фононами й описується гамільтоніаном фреліхівського типу, розраховується методом діаграмної техніки Фейнмана в теорії функцій Гріна. При  $T=0K$  для фур'є-образа квазічастинкових функцій Гріна  $G_{\mu\mu'}^{(\omega)}$  ( $\mu, \mu'=1,2,\dots,\tau$ ) утворюються  $\tau^2$  рівнянь, які пов'язують ці функції з повним матричним масовим оператором системи  $M_{\mu\mu'}^{(\omega)}$ . Систему рівнянь розв'язано точно й отримано узагальнене рівняння Дайсона, яке встановлює аналітичний зв'язок між функцією  $G_{\mu}(\omega) \equiv G_{\mu\mu}(\omega)$ , всіма елементами  $M_{\mu\mu'}^{(\omega)}$ .

Для того, щоб одержати перенормований спектр системи в широкому діапазоні енергій, який містить і головні, і сателітні стани, в масовому операторі необхідно враховувати діаграми дуже великих порядків і за степенями функцій зв'язку, і за кількістю фононних енергій. Це можна буде виконати в підході парціального підсумовування мультиплікативних діаграм. Однак через багаторівневість вихідного спектру квазічастинок у всіх вищих порядках складових масового оператора наявні й мультиплікативні, і немультіплікативні діаграми. У зв'язку з цим був запропонований метод поступового й послідовного виділення з усіх немультіплікативних діаграм фіксованого порядку суми всіх мультиплікативних діаграм менших порядків з наступним парціальним підсумовуванням нових безмежних рядів мультиплікативних діаграм.

Застосування розвиненого методу до задачі про взаємодію багаторівневих частинок з виродженими й невиродженими станами з численними однодовими фононами дозволило отримати перенормовані спектри систем з головним і сателітним станами та встановити їх властивості коректно, уникнувши відомої «проблеми знаку» в масовому операторі.

Наукова новизна висновків, отриманих у цьому розділі, полягає у тому що:

- уперше запропоновано узагальнення діаграмної техніки Феймана для розрахунку масового оператора функції Гріна багаторівневої квазічастинки, взаємодіючої з одномодовими поляризаційними фононами. Розроблено новий метод ефективного врахування багатофононних процесів шляхом виділення мультиплікативних з немультіплікативних діаграм масового оператора з наступним парціальним їх підсумовуванням;

- уперше показано, що напрацьований метод узагальненої діаграмної техніки є доречним для систем і з виродженням, і з невиродженням енергетичними спектрами багаторівневих квазічастинок, взаємодіючих з довільним числом поляризаційних фононів при  $T=0K$ . Запропонований підхід ефективно враховує багатофононні процеси, долаючи відому «проблему знака» у квантовій теорії поля.

**У четвертому розділі** на основі гамільтоніана Фроліха в моделі Давидова вузькозонної квазічастинки, взаємодіючої з численними поляризаційними фононами довільної кількості ( $\tau$ ) мод при  $T=0K$ , вперше розвинена послідовна квантова теорія перенормованого спектра й середніх (ефективних) чисел фононів у всіх станах системи.

За допомогою точного розрахунку фур'є-образа запізнюючої функції Гріна квазічастинки вперше отримані аналітичні вирази для перенормованого спектра та ефективних (середніх) чисел фононів у всіх станах системи з довільним числом ( $\tau$ ) фононних мод. Розраховано й детально проаналізовано перенормовані спектри й ефективні (середні) числа фононів у всіх станах одно-, дво- і три- модових систем.

Наукова новизна висновків, отриманих у цьому розділі, полягає в тому, що:

- вперше показано, що, незалежно від констант взаємодії ( $\alpha_\lambda$ ) і від співвідношень між величинами енергій усіх фононних мод, перенормовані спектри квазічастинок стаціонарні (незатухаючі) і дискретні, причому

основний і перший сателітні рівні не вироджені, а решта сателітної частини спектра суттєво залежить від співвідношень між енергіями фононних мод. Якщо енергії всіх мод кратні найменшій, то спектр еквідистантний і вироджений. Якщо хоча б одна з мод не кратна до іншої, а інші кратні між собою, то спектр не еквідистантний і частково вироджений. Якщо відношення мод є ірраціональними числами, то спектр не вироджений і не еквідистантний;

- вперше виконаний точний розрахунок і аналіз середніх чисел фононів у сателітних станах виявив, що, незалежно від  $\tau$ ,  $\alpha_\lambda$  і  $\Omega_\lambda$ , всі вони є сильно зв'язаними фононподібними комплексами. Лише в основному стані при збільшенні  $\alpha_\lambda$  квазічастинка змінює свої властивості від майже квазічастинкових з малою фононною «шубою» через гібридний комплекс аж до сильно зв'язаного фононподібного комплексу;

- для системи однорівневих квазічастинок взаємодіючих з довільним числом мод поляризаційних фононів у моделі Давидова вперше точно розраховано перенормований спектр і, на відміну від результатів відомої раніше наближеної теорії, де отримано не фізичне затухання спектра при  $T=0\text{K}$ , тепер чітко показано, що він залишається незатухаючим і дискретним з основним та з виродженими й невиродженими сателітними станами.

На прикладі одно-, дво- і тримодових систем з феноменологічним затуханням при  $T=0\text{K}$  вперше отримано і проаналізовано частотну залежність функцій фопми смуги поглинання та її спектральних параметрів у широкому діапазоні енергій, який містить головні й відповідні їм сателітні піки фононних повторень.

### **Практичне значення отриманих результатів.**

Запропонований у роботі новий дизайн активної області нанодетектора може бути застосований для експериментального створення й дослідження оптимізованого широкосмугового нанофотодетектора далекого інфрачервоного діапазону, який може працювати у вікні атмосферної прозорості.

Запропоновані й узагальнені методи діаграмної техніки можуть бути модифіковані для розрахунку масових операторів фур'є-образів функцій Гріна багатозонних квазічастинок взаємодіючих з багатомодовими фононами з урахуванням багатофононних процесів при довільних температурах.

**Ключові слова:** квазічастинка; фонон; сила осцилятора; енергетичний (електронний) спектр і хвильова функція; резонансно-тунельна структура; рівняння Шредінгера; функція Гріна; координатнозалежна ефективна маса; енергетичні рівні квантової системи; квантовий каскадний детектор (прилад); електричне і магнітне поля; метод функцій густини; наноструктура (система); квантові ями, точки і кільця.

## ABSTRACT

Hutiv V.V. Theory of the renormalized spectrum of multiband quasiparticles interacting with polarization phonons. - Qualifying scientific project on manuscript rights.

Thesis on search for the Doctor of Philosophy degree in specialty 104 – Physics and Astronomy. - Yuriy Fedkovych Chernivtsi National University, Ministry of Education and Science of Ukraine, Chernivtsi, 2023.

Thesis is devoted to the development of the theory of functioning and optimization of the parameters of the active element of the broadband nano photodetector of the far infrared range with a new potential profile. As well as the creation, based on the Davydov's model, of the theory of renormalization of the spectra of a multilevel quasiparticle interacting with single-mode phonons and a single-level quasiparticle interacting with multilevel phonons, taking into account multiphonon processes in the studied multilayer nanostructures.

**The introduction** substantiates the choice of the topic and the relevance of the research, formulates the goal, main tasks, object and subject of the research,



indicates the scientific novelty and practical value of the obtained results, it presents information about the personal contribution of the recipient and approval of the work, its structure and scope.

**In the first Section**, a brief review and analysis of the scientific literature on ideas, physical principles and methods of improving the parameters of functioning nano devices - quantum well infrared photodetectors and quantum cascade detectors of photoconductive and photovoltaic types is performed. Various experimental methods used to improve the operating parameters of nano detectors in all windows of atmospheric transparency of the infrared range are analyzed. Which have been successfully tested in layers of quantum wells, wires and rings. The existence of normally functioning quantum cascade detectors with «distorted» or «broken» so-called «phonon» ladders of their extractors was noted, which, according to standard concepts, could not happen. So far, this paradoxical situation has not found a unique theoretical justification, and therefore it was suggested that the missing energy levels in the ladders can be replaced by the existing levels of the bound states of quasiparticles (electrons) with phonons, i.e. electron-phonon satellites, existing in the system. It is concluded that since it is impossible to effectively take into account multiphoton processes in non-perturbative approaches (perturbation theory, density matrix method, variational method, etc.), it is necessary to apply modified approaches of modern quantum field theory.

**The second Section** is devoted to the creation of a quantum theory of spectral parameters and oscillator strengths of quantum transitions of electrons during their phonon-assisted tunneling through the cascades of the active region of a broadband nano photodetector in the far-IR range. In order to ensure a sufficient width of the absorption band of the photodetector and to avoid the appearance of a significant dark current, such a new geometrical design of its main region is proposed, which creates a one-way current of electrons without applying an external constant electric field.

Therefore, the active region of the nano detector contains  $N$  identical cascades, each of which contains one structureless quantum well and two groups of quantum

wells with an inner structure. The heights of potential barriers ( $U$ ), half-widths ( $d$ ) and inverted potentials ( $\pm V$ ) of inner wells and barriers are relatively small.

In the model of the position-dependent effective mass of the electron with the just described potential profile of the active region cascades, the stationary Schrödinger equation is solved for each quantum well separately. Taking into account the boundary conditions for the wave functions and their probabilities of current densities together with the normalization conditions, the exact solutions for the wave functions, energy spectrum and oscillator strengths of the quantum transitions for the ground and excited levels of each quantum well are obtained.

At the basis of the developed theory, the spectral parameters of the wide QW cascades were calculated out and their optimization was carried out depending on the values of the potentials  $U$  and  $V$  and the geometric dimensions  $D$  and  $d$ . As components of the cascade, GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  wide QWs with small inner barriers  $\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}$  and with small inner wells  $\text{Ga}_y\text{In}_{1-y}\text{As}$  were studied. This choice of compounds is caused by the fact that they have close sizes of elementary cells, which protects the cascade from the formation of harmful voltages that increase the dark current of the detector, as well as the well-known simple linear relationships between the concentrations ( $x, y$ ) of the constituent elements, the energy parameters ( $U, V$ ) and the effective masses of the electron ( $m$ ) in all three regions of the wide QW.

The scientific novelty of the conclusions of the results obtained in this Section is the following:

- For the first time, a new geometrical design of the cascade of a broadband quantum well nano photodetector operating in the far infrared range is proposed. Its cascades consist of isotropic materials of quantum wells and barriers with close dimensions of elementary cells. In contrast to anisotropic materials, there are almost no voltages on the boundaries of quantum wells and barriers, which significantly impair the nano device functioning due to an increase of the dark current.

- The active region of the nano photodetector, for the first time, consists of cascades of deep and wide quantum wells with an inverted structure of inner small quantum wells and barriers. The variation of their sizes and magnitudes of potentials

makes it possible to significantly increase the oscillator strength of quantum transitions of electrons under the action of the field, which helps to increase the ratio of the width to the wavelength of the absorption band of the far-infrared electromagnetic field ( $\eta \approx 37.54\% \div 44.21\%$  at  $\lambda \approx 10 \mu m \div 25 \mu m$ ).

**The third Section** is devoted to the development of the method of sequential selection and partial summing of multiplicative diagrams of the mass operator in the theory of renormalization of degenerate and nondegenerate spectra of multilevel quasiparticles interacting with many single-mode phonons.

The renormalized spectrum of the system, which consists of an arbitrary number ( $\tau$ ) of multilevel quasiparticles interacting with single-mode polarization phonons, described by a Fröhlich-type Hamiltonian, is calculated using the method of the Feynman diagram technique in the theory of Green's functions. At T=0K for the Fourier image of quasiparticle Green's functions  $G_{\mu\mu'}^{(\omega)}$  ( $\mu, \mu' = 1, 2, \dots, \tau$ ) are formed  $\tau^2$  equations that relate these functions to the complete matrix mass operator of the system  $M_{\mu\mu'}^{(\omega)}$ . The system of equations is solved exactly and the generalized Dyson equation is obtained, which establishes an analytical relationship between the function  $G_{\mu}(\omega) \equiv G_{\mu\mu}(\omega)$  and all elements  $M_{\mu\mu'}^{(\omega)}$ .

In order to obtain the renormalized spectrum of the system in a wide range of energies, which contains both the main and satellite states, in the mass operator it is necessary to take into account diagrams of very large orders both in terms of powers of the binding functions and in terms of the numbers of phonon energies. This can be done in the approach of partial summing of multiplicative diagrams. However, due to the multilevel nature of the original spectrum of quasiparticles, both multiplicative and non-multiplicative diagrams are present in all higher orders of the components of the mass operator. Therefore, a method was proposed for gradually and sequentially extracting from all non-multiplicative diagrams of a fixed order the sum of all multiplicative diagrams of lower orders followed by partial summing of new infinite series of multiplicative diagrams.

The application of the developed method to the problem of the interaction of multilevel particles with degenerate and nondegenerate states with numerous single-mode phonons made it possible to obtain renormalized spectra of the systems with main and satellite states and to establish their properties correctly, avoiding the well-known «problem of sign» in the mass operator.

The scientific novelty of the conclusions obtained in this Section is the following:

- For the first time, a generalization of the Feynman diagram technique was proposed for the calculation of mass operator of the Green's function of a multilevel quasiparticle interacting with single-mode polarization phonons. A new method of effective consideration of multi phonon processes has been developed by extracting multiplicative diagrams from non-multiplicative ones, followed by their partial summing.

- It is shown, for the first time, that the developed new method of the generalized diagram technique is valid for the mass operator and valid for systems with both degenerate and non-degenerate energy spectra of multilevel quasiparticles interacting with an arbitrary number of polarization phonons at  $T=0K$ . The proposed approach effectively takes into account multi phonon processes, overcoming the well-known "problem of sign" in quantum field theory.

**In the fourth Section**, based on the Fröhlich Hamiltonian in the Davydov's model of a narrow-band quasiparticle interacting with a sufficient number of arbitrary ( $\tau$ ) polarization phonon modes at  $T=0K$ , a consistent quantum theory of the renormalized spectrum and average (effective) numbers of phonons in all states of the system was developed for the first time.

Analytical expressions of the renormalized spectrum and the effective (average) numbers of phonons in all states of the system with an arbitrary number ( $\tau$ ) of phonon modes were obtained for the first time by accurate calculation of the Fourier image of the retarded Green's function of a quasiparticle. The renormalized spectra and effective (average) numbers of phonons in all states of one-, two-, and three-mode systems were calculated and analyzed in detail.

The scientific novelty of the conclusions on the results obtained in this Section is the following:

- It is shown, for the first time, that regardless of the coupling constants ( $\alpha_\lambda$ ) and the ratios between the energies of all phonon modes, the renormalized spectra of quasiparticles are stationary (non-damping) and discrete. The main and first satellite levels are not degenerate while the rest of the satellite part of the spectrum significantly depends on the ratios between the energies of the phonon modes. If the energies of all modes are multiples of the smallest, then the spectrum is equidistant and degenerate. If at least one of the modes is not a multiple of the other, and the others are multiples of each other, then the spectrum is not equidistant and partially degenerate. If the mode ratios are irrational numbers, then the spectrum is neither degenerate nor equidistant.

- For the first time, an accurate calculation and analysis of the average numbers of phonons in satellite states revealed that all of them are strongly coupled phonon-like complexes, regardless of  $\tau$ ,  $\alpha_\lambda$  and  $\Omega_\lambda$ . Only for the ground state, if  $\alpha_\lambda$  increases, the quasiparticle changes its properties from almost quasiparticle's with a small phonon «coat», through a hybrid complex, to a strongly bound phonon-like complex.

- For a system of single-level quasiparticles interacting with an arbitrary number of modes of polarization phonons in Davydov's model, the renormalized spectrum was accurately calculated for the first time. Unlike the results of the previously known approximate theory, where non-physical decay of the spectrum at  $T=0K$  was obtained, it is now clearly shown that it remains non-decaying and discrete with the main state and degenerate and non-degenerate satellite states.

Using the example of one-, two-, and three-mode systems with phenomenological decay at  $T=0K$ , the frequency dependence of the absorption band form-function and its spectral parameters in a wide energy range, which contains the main and corresponding satellite peaks of phonon repeats, was obtained and analyzed for the first time.

### **Practical significance of the obtained results.**

The proposed new geometrical design of nano detector can be applied to the experimental design and research of an optimized broadband far-infrared photodetector that can operate in the atmospheric transparency window.

The proposed and generalized methods of the diagrams technique can be modified in order to calculate the mass operators of the Fourier images of Green's functions of multiband quasiparticles interacting with multimode phonons, taking into account multi phonon processes at arbitrary temperatures.

**Keywords:** quasiparticle; phonon; oscillator strength; energy (electronic) spectrum and wave function; resonance-tunnel structure; Schrödinger's equation; Green's function; coordinate-dependent effective mass; energy levels of a quantum system; quantum cascade detector (device); electric and magnetic fields; method of density functions; nanostructure (system); quantum wells, dots and rings.

### **Публікації, що відображають основні наукові та практичні результати дисертації:**

1. Tkach M., Seti J., Pytiuk O., Voitsekhivska O., Gutiv V. Spectrum of localized three-level quasiparticle resonantly interacting with polarization phonons at cryogenic temperature. *Applied Nanoscience*. 2019. Vol. 10, no. 8. P. 2581–2591.

2. Tkach M.V., Seti Ju.O., Voitsekhivska O.M., Gutiv V.V. Method of successive separation and summing of multiplicative diagrams of mass operator for the multi-level quasiparticle interacting with polarization phonons. *Condensed Matter Physics*. 2019. Vol. 22, no. 3. P. 33703.

3. Tkach M., Seti J., Voitsekhivska O., Gutiv V., Vereshko E. Properties of renormalized spectrum of interacting with polarization phonons localized quasiparticle with degenerated excited state. *Molecular Crystals and Liquid Crystals*. 2020. Vol. 701, no. 1. P. 48–58.

4. Tkach M.V., Seti J.O., Voitsekhivska O.M., Hutiv V.V. Renormalized spectrum of quasiparticle in limited number of states, strongly interacting with two-

mode polarization phonons at  $T=0$  K. *Condensed Matter Physics*. 2021. Vol. 24, no. 1. P. 13705.

5. Tkach M., Seti J., Voitsekhivska O., Hutiv V. Renormalized Spectrum of Quasiparticle in Two States, Strongly Interacting with Multi-Mode Polarization Phonons at  $T=0$  K. *International Journal of Theoretical Physics*. 2022. Vol. 61, no. 29. P. 1–16.

6. Tkach M.V., Seti J.O., Voitsekhivska O.M., Hutiv V.V. Spectrum of Localized Quasi-Particle Interacting with Three-Mode Phonons. *Springer Proceedings in Physics*. 8th International Conference on Nanotechnology and Nanomaterials, NANO 2020. Lviv 26–29 August 2020. Vol. 264, P. 83–94.

### **Наукові праці апробаційного характеру**

7. Tkach M.V., Seti Ju.O., Hutiv V.V., Voitsekhivska O.M. Spectrum of localized quasiparticle renormalized due to the interaction with three-mode phonons. The International research and practice conference «*Nanotechnology and nanomaterials*» (NANO-2020): Abstract Book of participants of the International research and practice conference (Lviv, 26–29 August 2020) / Edited by Dr. Olena Fesenko. Kyiv: LLC «Computer-publishing, information center», 2020. P. 474.

8. Tkach M.V., Hutiv V.V., Voitsekhivska O.M., Seti Ju.O. Properties of renormalized spectra of localized quasiparticles interacting with single- and two-mode background modes in the Davydov model at  $T = 0$ K. The International research and practice conference «*Nanotechnology and nanomaterials*» (NANO-2021): Abstract Book of participants of International research and practice conference (Lviv, 25 – 27 August 2021) / Edited by Dr. Olena Fesenko. Kyiv: LLC «Computer-publishing, information center», 2021. P. 418.

9. Tkach M.V., Hutiv V.V., Voitsekhivska O.M., Seti Ju.O. Renormalized spectrum of localized quasiparticles interacting with single- and two-mode phonons at  $T \neq 0$  K in Davydov's model. *XVIII International Freik Conference Physics and Technology of Thin Films and Nanosystems*. Materials. / Ed. by Prof. V.V. Prokopiv. Ivano-Frankivsk: Publisher Vasyl Stefanyk Precarpathian National University, 2021. P. 54.

10. Ткач М.В., Сеті Ю.О., Войцехівська О.М., Гутів В.В. Роль багатофононних процесів у квантово-каскадних детекторах з порушеними «фононними драбинками» екстракторів. 9-та Міжнародна науково-технічна конференція «Сенсорна електроніка та мікросистемні технології» (СЕМСТ-9): матеріали Міжнар. наук.-техн. конф Одеса, 20–24 вересня 2021. Одеса, 2021. С. 65–66.

11. Tkach M.V., Hutiv V.V., Seti Ju.O., Voitsekhivska O.M. Quantum theory of energy parameters of a two-well nanosystem as the main working element of a broadband photodetector of the far IR range. The International research and practice conference «*Nanotechnology and nanomaterials*» (NANO-2022): Abstract Book of participants of the International research and practice conference (Lviv, 25–27 August 2022) / Edited by Dr. Olena Fesenko. Kyiv: LLC APF POLYGRAPH SERVICE, 2022. P. 445.



## ЗМІСТ

<b>ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ.....</b>	<b>20</b>
<b>ВСТУП .....</b>	<b>21</b>
<b>РОЗДІЛ 1. Нанопотодетектори</b>	
1.1. Фотопровідні квантовоямні інфрачервоні фотодетектори (ФП-КЯІФ) на основі ізотропних сполук.....	29
1.2. Фотовольтаїчні квантовоямні інфрачервоні фотодетектори (ФВ-КЯІФ) на основі ізотропних та анізотропних сполук.....	37
1.3. Фотопровідні квантові каскадні детектори (ФП-ККД) на основі ізотропних сполук.....	45
<b>РОЗДІЛ 2. Спектральні властивості широкопугового нанопотодетектора далекого інфрачервоного діапазону з новим дизайном активної області</b>	
2.1. Вступ. Нанодетектори ІЧ-діапазону .....	54
2.2. Енергетичний спектр і хвильові функції електрона в каскаді квантових ям зі складним потенціальним рельєфом.....	56
2.3. Сили осциляторів квантових переходів. Оптимізація параметрів квантовоямних каскадів широкопугових фотодетекторів далекого ІЧ-діапазону.....	65
Висновки до розділу 2.....	74
<b>РОЗДІЛ 3. Метод парціального підсумовування діаграм масового оператора в теорії перенормування вироджених і невироджених спектрів багаторівневих квазічастинок взаємодіючих з багатьма одномодовими фононами.</b>	
3.1. Складності в розвитку теорії фізичних процесів у мультишарових структурах наноприладів та проблеми математичного апарату квантової теорії поля.....	76
3.2. Гамільтоніан системи. Масовий оператор багаторівневої квазічастинкової функції Гріна.....	79

3.3. Метод послідовного парціального підсумовування діаграм МО.....	84
3.4. Властивості перенормованого енергетичного спектра дворівневої системи при $T=0$ К з урахуванням вищих послідовних наближень масового оператора.....	93
3.5. Властивості перенормованого взаємодією з фононами енергетичного спектра локалізованої трирівневої квазічастинки зі збудженими резонансними рівнями.....	98
3.6. Властивості перенормованих взаємодією з фононами спектрів локалізованих дворівневих квазічастинок з невиродженим і двічі виродженими рівнями збуджених станів.....	102
Висновки до розділу 3.....	107
<b>РОЗДІЛ 4. Теорія перенормування спектра локалізованої квазічастинки взаємодіючої з багатомодовими поляризаційними фононами при кріогенній температурі в моделі Давидова.</b>	
4.1. Вступ. Розвиток і проблеми теорії взаємодії квазічастинок з фононами в широкому діапазоні енергій, що містить зв'язані стани в околах порогів випромінювання фононів.....	110
4.2. Гамільтоніан і функція Гріна квазічастинки взаємодіючої з двомодовими фононами. Перенормований енергетичний спектр і середні числа фононів у всіх станах системи.....	112
4.3. Гамільтоніан і функції Гріна квазічастинки взаємодіючої з багатомодовими фононами. Ефективні (середні) числа фононів у стаціонарних станах.....	120
4.4. Властивості перенормованих енергетичних спектрів та середніх чисел фононів у всіх станах систем з різною кількістю фононних мод.....	126
4.5. Властивості перенормованих спектрів локалізованих квазічастинок взаємодіючих з одно- і дво- і тримодовими фононами в давидівській моделі з феноменологічним затуханням при $T=0$ .....	135
Висновки до розділу 4.....	148

<b>ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ ТА ВИСНОВКИ.....</b>	<b>151</b>
<b>СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ .....</b>	<b>156</b>
<b>ДОДАТКИ .....</b>	<b>175</b>

**ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ**

КЯІФ – квантовоямний інфрачервоний фотодетектор.

ФП-КЯІФ – фотопровідний квантовоямний інфрачервоний фотодетектор.

ФВ-КЯІФ – фотовольтаїчний квантовоямний інфрачервоний фотодетектор.

ККЛ – квантовий каскадний лазер.

ККД – квантовий каскадний детектор.

МО – масовий оператор.

ІЧ – інфрачервоний.

АО – активна область.

МКП – міжпідзонний квантовий перехід.

ШКЯ – широка квантова яма.

РФП – решітка фокальної площини.

## ВСТУП

### Обговорення вибору теми дослідження

Вивчення фізичних явищ і процесів у різних системах щоразу менших розмірів зумовлене не лише академічним інтересом науковців до пізнання законів природи. Не менш важливу роль відіграє і прагматична проблема мініатюризування розмірів з метою економії енергетичних витрат і зменшення екологічних проблем. У цьому зв'язку задачі електроніки, які спочатку науковці розв'язували на основі фізики масивних напівпровідників, внаслідок поступового мініатюризування привели до мікроелектронних приладів. З виробничої й комерційної точок зору, це був позитивний революційний перехід, хоча він продовжував базуватися на процесах, які відбуваються у тримірних напівпровідникових мікроприладах.

Однак подальший перехід від мікро- до нанорозмірних складових елементів електронних приладів відбувся вже з кардинальною зміною самих фізичних основ їх функціонування. Базовими стали напівпровідникові низькорозмірні наногетеросистеми, у яких головну роль відіграє виникле просторове квантування електронних спектрів та поява нових гілок фононів (обмежених, напівобмежених, інтерфейсних та інших).

Унаслідок інтенсивного дослідження фізики наногетеросистем незабаром з'явилися унікальні наноприлади: квантовоямні інфрачервоні фотодетектори, квантові каскадні детектори та лазери. Ці наноприлади володіють очевидними перевагами: вони компактні, споживають мало енергії, працюють у широкому інтервалі температур, охоплюючи весь інфрачервоний спектр електромагнітного поля в усіх вікнах атмосферної прозорості.

За досить тривалий час не лише дослідження, а й промислового виробництва нанодетекторів, виникла потреба оптимізації їх параметрів, а також накопичилися певні парадокси, розуміння яких потребує створення детальної й послідовної квантової теорії міжпідзонних переходів з фононсупровідним тунелюванням електронів під дією електромагнітного поля інфрачервоного діапазону. Створення такої теорії є актуальним завданням, яке

можна розв'язати за допомогою методів сучасної квантової теорії поля. У цьому аспекті навіть розвинений загальний підхід діаграмної техніки Фейнмана в методі функцій Гріна, при застосуванні до задач перенормування енергетичного спектра багатозонних квазічастинок взаємодією з багатомодовими фонами поляризаційного типу, вимагає суттєвої модифікації структури масового оператора для коректного врахування багатофононних процесів.

**Мета роботи спрямована на:** а) побудову квантової теорії спектральних параметрів і сил осциляторів квантових переходів електрона в активній області широкопasmового нанофотодетектора далекого інфрачервоного діапазону з новим дизайном потенціального рельєфу; б) узагальнення методу парціального підсумовування діаграм масового оператора в теорії перенормування вироджених і невироджених спектрів багаторівневих квазічастинок взаємодіючих з багатьма одномодовими фонами; в) модифікацію теорії перенормування спектра локалізованої квазічастинки взаємодіючої з багатомодовими поляризаційними фонами в моделі Давидова.

**Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами.**

Обраний напрям дослідження відповідає програмі наукової тематики кафедри теоретичної фізики та комп'ютерного моделювання Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича «Дослідження спектрів квазічастинок, перенормованих взаємодіями з електромагнітними та квантованими полями в низькорозмірних та 3d системах із метою оптимізації параметрів наноприладів» (номер Держреєстрації 0116U004083) та «Квантова теорія фізичних явищ і процесів у низьковимірних системах різної симетрії як основних елементів сучасних наноприладів» (номер Держреєстрації 0121U109823).

У межах цієї тематики в дисертації за допомогою методів теоретичної фізики досліджено спектральні параметри широкопasmового нанодетектора далекого інфрачервоного діапазону; перенормовані енергетичні спектри

багаторівневих локалізованих квазічастинок взаємодіючих з одномодовими поляризаційними фононами, та перенормований спектр однорівневої квазічастинки взаємодіючої з багатомодовими поляризаційними фононами в моделі Давидова.

### **Завдання, які виконувалися згідно з поставленою метою**

1. У моделі широкосмугового нанофотодетектора як наногетеросистеми зі складним потенціальним рельєфом і просторовозалежною ефективною масою електрона розв'язано рівняння Шредінгера. Розраховано енергетичний спектр, хвильові функції та сили осциляторів квантових переходів між основним і збудженими станами квазічастинки.

2. Оптимізовано просторовий дизайн каскадів активної області таким асиметричним розташуванням квантових ям і бар'єрів, при якому виникає односторонній резонансно-транспортний рух електрона без прикладання зміщуючого електричного поля. Це забезпечує великий відсоток (~40%) відношення ширини до довжини хвилі спектральної смуги нанофотодетектора.

3. Узагальнено діаграмну техніку Фейнмана для функцій Гріна багаторівневої квазічастинки взаємодіючої з одномодовими поляризаційними фононами шляхом послідовного виділення мультиплікативних діаграм з немультіплікативних діаграм МО з їх наступним парціальним підсумовуванням, яке ефективно враховує багатофононні процеси, уникаючи відомої «проблеми знаку».

4. Розраховано й досліджено перенормовані взаємодією з одномодовими фононами вироджені й невироджені спектри дво- і трирівневих квазічастинок у широкому інтервалі енергій, який містить головні й зв'язані з фононами комплекси сателітних станів.

5. Точним унітарним діагоналізовано гамільтоніан Давидова, який описує однорівневу квазічастинку, що взаємодіє з довільним числом фононних гілок. Із застосуванням полінома Ньютона внаслідок точного розрахунку отримано фур'є-образ квазічастинкової функції Гріна.

6. Використовуючи аналітичний вираз фур'є-образу функцій Гріна розраховано перенормований енергетичний спектр і середні (ефективні) числа фононів у головному й сателітних зв'язаних станах системи. Розрахована й досліджена залежність від констант взаємодії енергетичного спектра та ефективних чисел фононів у всіх станах системи.

**Об'єкт дослідження** – взаємодіючі з електромагнітним полем і оптичними фононами квазічастинки (електрони, домішки та ін.).

**Предмет дослідження** – електронний спектр у каскадах нанофотодетекторів. Перенормовані взаємодією з одномодовими фононами спектри багаторівневих квазічастинок та спектри однорівневих квазічастинок взаємодіючих з багатомодовими фононами в широкому інтервалі енергій, який містить фононні сателіти.

**Методи дослідження, що забезпечують достовірність отриманих результатів та висновків.**

Основним методом розрахунку енергетичного спектру, хвильових функцій та сил осциляторів квантових переходів електронів у каскадах широкосмугових нанофотодетекторів є розв'язування стаціонарного рівняння Шредінгера в моделі просторовозалежної ефективної маси зі складним потенціальним рельєфом.

Модифікований метод діаграмної техніки Фейнмана для функцій Гріна багаторівневих квазічастинок, які взаємодіють з одномодовими поляризаційними фононами, було застосовано для розрахунків і дослідження перенормованого енергетичного спектра системи з урахуванням багатфононних процесів у масовому операторі, отриманих внаслідок парціального підсумовування послідовно виділених мультиплікативних діаграм.

За допомогою методу унітарного перетворення здійснено діагоналізацію гамільтоніана Давидова. Гамільтоніан описує однорівневу квазічастинку, що взаємодіє з багатомодовими поляризаційними фононами. Завдяки застосуванню рівняння Дайсона, виконано розрахунок і аналіз



перенормованого спектра системи в широкому інтервалі енергій з урахуванням зв'язаних з фононами сателітних станів.

**Наукова новизна** одержаних результатів полягає в тому, що:

1. Вперше запропоновано новий просторовий дизайн каскаду ширококутового квантовомного нанофотодетектора далекого інфрачервоного діапазону. Його каскади складаються з ізотропних матеріалів квантових ям і бар'єрів з близькими розмірами елементарних комірок. На відміну від анізотропних матеріалів на межах квантових ям і бар'єрів практично не виникають напруги, які суттєво погіршують роботу наноприлада через збільшення темнового струму.

2. Активна область нанофотодетектора вперше складається з каскадів глибоких і широких квантових ям з інверсованою структурою внутрішніх малих квантових ям і бар'єрів. Варіація їх розмірів і величин потенціалів дозволяє значно збільшити сили осциляторів квантових переходів електронів під дією поля, що сприяє збільшенню відношення ширини до довжини хвилі смуги поглинання електромагнітного поля далекого інфрачервоного діапазону ( $\eta \approx 37.54\% \div 44.21\%$  при  $\lambda \approx 10\text{мкм} \div 25\text{мкм}$ ).

3. Вперше запропоновано узагальнення діаграмної техніки Феймана для розрахунку масового оператора функції Гріна багаторівневої квазічастинки взаємодіючої з одномодовими поляризаційними фононами. Розроблено новий метод ефективного врахування багатофононних процесів шляхом виділення мультиплікативних з немультіплікативних діаграм масового оператора з наступним парціальним їх підсумовуванням.

4. Вперше показано, що напрацьований метод узагальненої діаграмної техніки є доречним для систем і з виродженням, і з невиродженням енергетичними спектрами багаторівневих квазічастинок взаємодіючих з довільним числом поляризаційних фононів при  $T=0\text{К}$ . Запропонований підхід ефективно враховує багатофононні процеси, долаючи відому «проблему знака» у квантовій теорії поля.

5. Для системи однорівневих квазічастинок взаємодіючих з довільним числом мод поляризаційних фононів у моделі Давидова вперше точно розраховано перенормований спектр і показано, що при  $T=0\text{K}$  він залишається незатухаючим і дискретним з виродженими й невиродженими сателітними станами.

6. Вперше виконаний аналіз середнього (ефективного) числа фононів у основному й сателітних станах показав, що, незалежно від кількості фононних гілок, величин їх енергій та констант зв'язку, всі сателітні стани є сильно зв'язаними фононоподібними комплексами. Лише в основному стані при збільшенні констант зв'язку середнє число фононів може змінювати свої властивості від майже квазічастинкових з малою фононною «шубою», проходячи через стадію гібридного комплексу, аж до сильнозв'язаного фононоподібного комплексу.

#### **Практичне значення отриманих результатів.**

Запропонований у роботі новий дизайн активної області нанодетектора може бути застосований для експериментального створення й дослідження оптимізованого ширококутового нанофотодетектора далекого інфрачервоного діапазону, який може працювати у вікні атмосферної прозорості.

Запропоновані узгоджені методи діаграмної техніки можуть бути модифіковані для розрахунку масових операторів фур'є-образів функцій Гріна багатозонних квазічастинок взаємодіючих з багатомодовими фононами при довільних температурах.

**Особистий внесок здобувача.** У роботі [1] дисертант самостійно виконував комп'ютерний розрахунок перенормованого спектра трирівневої квазічастинки взаємодіючою з одномодовими поляризаційними фононами. У роботі [2] брав активну участь в обговоренні алгоритму і його застосування при послідовному виділенні мультиплікативних діаграм масового оператора і їх парціального підсумовування. Самостійно виконав розрахунки перенормованого невиродженого спектра трирівневої квазічастинки залежно

від констант взаємодії з фононами. У роботах [3, 4] взяв активну участь у всіх етапах дослідження перенормованого спектру дворівневої квазічастинки з виродженим збудженим рівнем із одномодовими поляризаційними фононами. У роботах [5-6] здобувач брав активну участь в обговоренні постановки задач та їх розв'язування. Разом з колегами виконував аналітичні розрахунки масового оператора. Самостійно розраховував середні числа фононів у основних і сателітних станах квазічастинки взаємодіючої з кількома модовими фононами. Здійснював аналіз отриманих результатів та готував матеріали для публікації робіт. У роботі [11] розв'язав рівняння Шредінгера для електрона в активній області ширококутового нанофотодетектора далекого інфрачервоного діапазону. Виконав оптимізацію параметрів наноприлада. Брав активну участь у підготовці матеріалів для всіх конференцій, а за результатами робіт [7, 8, 11] доповідав особисто.

**Публікації.** У дисертації викладено наукові результати, що були опубліковані в 11 роботах, із яких 6 статей – у фахових виданнях [1–6] та 5 – у тезах доповідей на міжнародних конференціях [7–11].

**Апробація матеріалів дисертації.**

1. 8th International research and practice conference «Nanotechnology And Nanomaterials» (NANO–2020), 26–29 August, 2020, Lviv, Ukraine.
2. 9th International Conference «Nanotechnologies and Nanomaterials» (NANO–2021), 25–27 August, 2021, Lviv, Ukraine.
3. XVIII International Freik Conference Physics and Technology of Thin Films and Nanosystems. Materials, 11–16 October, 2021, Ivano-Frankivsk, Ukraine.
4. 9-та Міжнародна науково-технічна конференція «Сенсорна електроніка та мікросистемні технології» (СЕМСТ–9), 20–24 вересня, 2021, Одеса, Україна.
5. 10th International research and practice conference «Nanotechnology And Nanomaterials» (NANO–2022), 25–27 August, 2022, Lviv, Ukraine.

### **Структура та обсяг дисертації.**

Дисертаційне дослідження складається з анотацій двома мовами, списку опублікованих праць автора, переліку умовних позначень, вступу, чотирьох розділів, висновків, списку використаних джерел (194 позиції) і Додатку (список публікацій здобувачки за темою дисертації).

Загальний обсяг роботи –176 сторінок, робота містить 7 таблиць та 18 рисунків.

## РОЗДІЛ 1. Нанофотодетектори

### 1.1. Фотопровідні квантовоямні інфрачервоні фотодетектори (ФП-КЯІФ) на основі ізотропних сполук

У цьому розділі подано огляд робіт, у яких представлено дослідження різних моделей наногетеросистем та напрацьовано основи фізичних принципів, що забезпечують успішне функціонування та оптимізацію параметрів квантових інфрачервоних детекторів (КЯІФ) та квантових каскадних детекторів (ККД), які працюють у інфрачервоному діапазоні електромагнітного поля.

Першими експериментальними нанодетекторами були так звані КЯІФи. За фізичним принципом функціонування їх поділяють на два типи: фотопровідні (ФП) з потенціалом зміщення електричним полем та фотовольтаїчні (ФВ) – без зміщення. Їх робота базується на фотоemisії електронів з квантових ям із наступним спрямованим надбар'єрним рухом, а також спрямованим резонансно-тунельним транспортом уздовж мультишарової наноструктури детектора.

Хоча фізика наносистем розвивається вже декілька десятиліть, однак достатньо глибокої і послідовної теорії фізичних процесів у мультишарових наногетеросистемах, як основних складових наноприладів взагалі і нанодетекторів зокрема, поки що не існує. Це зумовлено як складнощами адекватного вибору фізичних моделей реальних наносистем, так і математичними проблемами, що виникають при створенні коректної теорії взаємодії багатозонних квазічастинок (електронів) з багатомодовими квантованими полями (фононами). Враховуючи ці обставини, а також те, що вирішальну роль для успішного функціонування КЯІФів чи ККД відіграє співвідношення між величинами корисного робочого та шкідливого темного струмів, розробники цих приладів керуються надійними загальнофізичними принципами й логічними міркуваннями, які визначають режим роботи нанодетектора. Основні з них такі: а) тунелювання між квантовими ямами робить незначний внесок у темновий струм; б) густина

електронів у кожній ямі залишається постійною; в) сильно легований емітер служить ідеально інжектуючим контактом; г) обидва зв'язані стани, включаючи й основний, і верхній кінцевий стан, який знаходиться в резонансі або дуже близько до вершини квантової ями, обмежені квантовою ямою. Припущення (а) потребує того, щоб бар'єри були достатньо товстими. Припущення (б) є хорошим наближенням, але втрачає точність, особливо при великих напругах зміщення, що доводять експерименти [1]. Припущення (в) важливе для КЯІФ з великою кількістю квантових ям, що відповідає експериментальним результатам [2]. Ефект контактів стає важливим для КЯІФ з невеликою кількістю квантових ям, як це відображає моделювання, запропоноване в роботі [3]. Для створення й оптимізації хороших параметрів детекторів потрібна умова (г).

Фізичний режим темного струму в типовому та стандартному фотопровідному КЯІФ спричиняється потоком електронів над бар'єрами, а також емісією та захопленням електронів у ямах.

При кінцевих температурах електрони не тільки зв'язуються в ямі, але також розподіляються за межами ями та поверх бар'єрів. Енергетична область для електронів, що вносять вклад у темновий струм, знаходиться зліва від вершини квантової ями.

У надбар'єрних областях струм тече тривимірним (3D), а його щільність позначаємо як  $j_{3D}$  і дорівнює щільності темного струму  $j_d$ . Поблизу кожної ями емісія електронів з неї ( $j_e$ ) сприяє темновому струму. Цей струм, який має тенденцію до зниження густини електронів у ямі, повинен бути врівноважений захопленням електронів у яму в стаціонарному стані ( $j_c = j_e$ ). Оскільки темновий струм однаковий по всій структурі, то  $j_{3D}$  і  $j_e$  (або  $j_c$ ) пов'язані. Якщо позначати  $p_c$  ймовірність захоплення електрона, що проходить через яму з енергією, більшою за висоту бар'єру, то повинна виконуватися рівність  $j_c = p_c j_{3D}$ , а сума захоплених і незахоплених частинок повинна дорівнювати струму в області бар'єру:  $j_{3D} = j_c + (1 - p_c)j_{3D}$ . За

допомогою цієї фізичної картини можна змодельовати темновий струм  $j_d$  шляхом обчислення безпосередньо  $j_{3D}$  або  $j_e$ , і в кінцевому результаті  $j_d = j_e / p_c$ .

Далі коротко розглядаються різні моделі врахування темного струму. У першому підході тривимірною моделюванням дрейфу електронів механізмом переносу вперше була представлена у відомій статті Кейна та ін. [4]. Тривимірну щільність там обчислюють шляхом розгляду бар'єрів як об'ємних напівпровідників. Ефектами зонної структури надгратки нехтують, що виправдано, оскільки бар'єри товсті (набагато товщі, ніж ями), а результуючі мінізонні проміжки надгратки менші за теплову енергію  $k_B T$  при робочих температурах пристрою. Єдиний двовимірний ефект квантової ями використовуємо для оцінки енергії Фермі  $E_f$ . Як розширення цієї моделі і її вдосконалення, Мен і Пен [5] та Чу й інші [6] запропонували модель, яка включає різні температури носіїв або рівнів Фермі для 3D-бар'єрних електронів і 2D-електронів ями. Мен і Пен застосували емпіричний вираз, що пов'язує температуру гарячих електронів на бар'єрі з температурою електронів двовимірної ями та прикладеним електричним полем, тоді як Чу й інші розраховували 3D-бар'єрний рівень Фермі електронів, збалансувавши швидкість виходу тунелюванням та швидкість захоплення через електрон-фононне розсіювання. Як приклад, цю модель було застосовано до набору з трьох КЯІФ р-типу [7], де кілька зв'язаних станів (включаючи стани важких і легких дірок) обмежені в ямі.

Другий підхід – модель захоплення викидів [8]. Цю модель використовували Левін та ін. [9]. Її також застосовували в роботах [8, 10-12]. Однак у праці [9] не йшлося про процес захоплення електронів, щоб збалансувати витік носіїв заряду. Ендрю та Міллер [10] включили ефект зарядового зображення. У своїй статті Кінч і Ярвіс [13] сформулювали модель, оцінюючи 2D електрони, розподілені над бар'єрами, але вони не аналізували процес їх уловлювання або захоплення.

Самоузгоджена дрейфово-дифузійна модель, розроблена Єршовим та ін. [14], розраховує характеристики КЯІФ шляхом самоузгодженого розв'язування трьох рівнянь: рівняння Пуассона, рівняння неперервності для електронів у бар'єрах і рівняння їх швидкості у квантових ямах.

Тібаудеу та ін. [15] представили самоузгоджену модель захоплення викидів – це числова модель, яка розширює просту модель уловлювання викидів, запропоновану раніше. Модель враховує неоднорідність електричного поля самоузгоджено визначеним законом Гаусса. Автори отримали краще узгодження з експериментами, ніж проста модель.

Йованович та ін. [16] побудували квантовомеханічну модель, враховуючи всі процеси розсіювання, включаючи випромінювання та захоплення. Результати моделі добре узгоджуються з експериментом.

Келлек та ін. [17, 18] також виконали таке моделювання, аналізуючи вплив властивостей матеріалу на характеристики пристрою. Моделювання методом Монте-Карло дало можливість встановити розподіл гарячих електронів у верхній частині бар'єрів, що сприяє оптимізації параметрів КЯІФ.

Важливою характеристикою для КЯІФів є коефіцієнт фотопровідності. Оскільки всі ці шляхи темного струму залишаються незмінними, то, коли на детектор потрапляє ІЧ-випромінювання, відбувається пряма фотоemisія електронів з ями, що, звичайно, сприяє спостережуваному фотоструму в колекторі. Посилення фотопровідності є результатом інжекції додаткового струму від контакту, необхідного для балансування втрати електронів з ям через фотоemisію. Обсяг додаткового впорскування має бути достатньо великим, щоб його частка, захоплена в яму, дорівнювала прямому струму фотоemisії. З іншого боку, частка додаткового інжектваного струму, яка досягає колекторного контакту, фактично не відрізняється від прямого фотовипромінюваного струму і тому робить внесок у спостережуваний фотострум. Загальний фотострум складається з внесків від прямої фотоemisії та інжекції додаткового струму. Ця фізична картина була представлена лише в контексті простих фізичних міркувань [19].



Незалежність підсилення фотопровідності від кількості квантових ям (N) у КЯІФ була показана в експериментальних роботах [9, 20-23]. Дані в [20] були отримані на зразках із порівнюваними за величинами параметрами, за винятком кількості ям (N) у КЯІФах.

Час міжпідзонної релаксації – це дуже важлива характеристика КЯІФа. Експериментально його вивчав Татам та інші. [24]. Вони спрогнозували верхню межу приблизно 500 фс, а Байєр та інші [25] дійшли висновку, що цей час дорівнює приблизно 1 пс для процесу релаксації із зв'язаного стану. Фейст та інші [26] зробили висновок, що час релаксації трохи менший ніж 1 пс. Андерссон [27] виконав розрахунки  $\tau_c$  у КЯІФі й дав величину  $\tau_c = 5.5$  пс для типової структури.

Час міжпідзонної релаксації прямо пов'язаний з чутливістю детектора. Як експерименти [28], так і розрахунки [29] були здійснені для отримання оптимальної конструкції квантової ями з метою максимізації чутливості. Було показано, що оптимум має місце, коли збуджений стан знаходиться в близькому резонансі з вершиною бар'єру.

Як уже було сказано раніше, на продуктивність детектора також впливає шум детектора. Фотопровідник має кілька джерел шуму: шум  $1/f$ , шум Джонсона, шум темного струму та фотонний шум (шум, пов'язаний зі струмом, індукованим падаючими фотонами). Для GaAs КЯІФ експерименти показують, що шум  $1/f$  рідко обмежує продуктивність детектора. Шум Джонсона легко обчислити, якщо відома вольт-амперна характеристика (ВАХ) пристрою і його внесок зазвичай невеликий у фотопровідному КЯІФ [30]. Внесок шуму темного струму та фотонного шуму зазвичай обмежує кінцеву продуктивність цього детектора. Враховуючи механізм транспортування, шум темного струму за своєю природою є генераційно-рекомбінаційним. Експерименти [30–32] показали, що одним з найважливіших джерел фотонного шуму є фонові фотони, поглинені детектором. Саме цей шум зазвичай визначає робочу температуру детектора.

Двома найважливішими характеристиками ІЧ-детектора є детективність ( $D$ ) і фонові температура спалаху ( $T_{bl}$ ).  $D$  – відношення сигналу на одиницю падаючої потужності до шуму, відповідним чином нормоване за площею детектора та смугою електромагнітного вимірювання. Відповідні шумові внески походять від: 1) самого детектора (тобто темного струму) і 2) флуктуацій фотоструму, зумолених фоновими фотонами, що падають на детектор. Режим спалаху визначається домінуючим шумом, спричиненим фоновими фотонами. Для досягнення максимальної чутливості завжди бажано працювати з детектором в умовах спалаху.

Спалах залежить від умови, за якої фотострум, спричинений фоном, дорівнює темновому струмові. (Ця умова еквівалентна ситуації, коли шум фонового фотона дорівнює шуму темного струму.) Для операцій на рівні температур менших або рівних  $T_{bl}$ , детектор вважається у стані спалаху.

Розробка оптимального фотопровідного КЯІФ передбачає вибір наступних параметрів: ширина ями  $L_w$ , висота бар'єру (частка  $Al$  х, у випадку ями  $GaAs$  та бар'єру  $AlGaAs$ ), ширина бар'єру  $L_b$ , легування ями зі щільністю  $N_D$ , кількість ям  $N$ .

Як було зазначено вище, оптимальна форма ями – це та, у якій перший збуджений стан перебуває в резонансі з верхньою частиною бар'єру. Враховуючи це правило проектування, ширина ями та висота бар'єру фіксуються після вибору бажаної довжини хвилі виявлення (пікова довжина хвилі  $\lambda_p$ ). Пікова довжина хвилі виявлення  $\lambda_p$  відповідає різниці енергій між першим збудженим і основним станами. Висота бар'єру  $V_b$  визначається часткою  $Al$  у сполучі  $Al_xGa_{1-x}As$ .

Наступним параметром є легування. Для визначення обмеженої детектором детекторної здатності щільність легування має бути такою, щоб енергія Фермі становила  $E_f = 2k_B T$ , де  $T$  – бажана робоча температура. З іншого боку, щоб максималізувати температуру спалаху, потрібно мати

$E_f = k_B T$ . Щільність легування пов'язана з енергією Фермі як  $N_D = (m / \pi \hbar^2) E_f$ .

Параметр ширини бар'єру  $L_b$  поки що вибраний інтуїтивно. Повідомлялося лише про дуже обмежені експерименти з вивчення бар'єрів. Загалом ширина бар'єру має бути достатньо великою, щоб тунельний струм між ямами пригнічувався; це означає, що слід використовувати товсті бар'єри. Однак існує критичне значення, за яким будь-яке подальше збільшення  $L_b$  не приводить до зниження темного струму при тому самому прикладеному полі. До того ж практичні проблеми щодо зростання молекулярно променевої епітаксії (МПЕ) означають, що чим товщій загальний шар епіляції, тим нижча якість матеріалу. Крім того, якщо ширину бар'єру зменшувати, то можна виростити більше повторів для більшого поглинання при заданій загальній товщині епіляру. У літературі [31] ширина бар'єру в діапазоні 30–50 нм здається достатньою для КЯІФ, що працюють у середньому інфрачервоному діапазоні (3–12 мкм). Дослідження КЯІФ для однієї конкретної довжини хвилі (~9 мкм) було проведено Сімом та ін. [33], які знайшли критичне значення бар'єру в діапазоні 20–30 нм, що залежить від робочої температури та FOV.

Терагерцова (ТГц) наука й технологія останнім часом привертають велику увагу [34, 35]. Область ТГц у загальних рисах визначається як діапазон частот від 0,1 до 10 ТГц (довжини хвилі від 30 до 3000 мкм або енергії від 0,41 до 41 меВ). Частоти ТГц потрапляють частково в далекий ІЧ, а частково в міліметрово-субміліметровий діапазон електромагнітних хвиль.

Раніше було проведено багато експериментів, що демонструють можливість застосування і підтверджують розглянуту концепцію [34–36].

Використовуючи ті самі правила проектування, що були проаналізовані раніше, можливості КЯІФ були розширені до ТГц частот [37, 38]. Високе поглинання оптичними фононами GaAs робить область 34–36 меВ (34–36 мкм або 8–9 ТГц) недоступною. Діапазон частот ТГц 1–8 ТГц покривається КЯІФ з низькими частками алюмінію від 0,8 до 5,4%. Для досягнення найвищої

чутливості, обмеженої темновим струмом, якщо дотримуватися правила  $E_f = 2k_B T$ , щільність стане дуже низькою для низьких температур (80 K), що робить поглинання низьким. Якщо потрібне високе поглинання, слід використовувати більше легування, що означатиме дещо нижчу робочу температуру. Оскільки для цих самих терагерцових детекторів щільність легування зазвичай низька, то багаточастинкові ефекти приводять до невеликих поправок на енергію. Однак, оскільки енергії переходу також малі, то потрібно враховувати ефекти багатьох тіл. Точні значення залежать від густини легування, але можуть складати значну частку енергії переходу.

Для більшості застосувань для виявлення слабких сигналів бажано працювати з детектором в умовах спалаху. У деяких випадках із сильним джерелом, таким як ТГц КЯІФ, вимоги інші. Тут, доки темновий струм нижчий за фотострум сигналу, досягається виявлення з обмеженням фотонного шуму. У такому випадку робочу температуру детектора можна підвищити.

На цей час уже відомі різні підходи до поліпшення параметрів ширококутових фотодетекторів. Серед них – належний вибір матеріалів ям і бар'єрів, продуманий і послідовно застосований температурний режим їх вирощування при добре розрахованому дизайні потенціального рельєфу наносистем [39-41].

Станом на початок двотисячних років експериментальні КЯІФри на основі подвійних і потрійних сполук GaAs/AlGaAs; InGaAs/AlInAs; GaInAs/AlAsSb детектували електромагнітне поле від середнього до далекого ІЧ-діапазону. При цьому ті з них, які працювали на середніх довжинах хвиль, досягли «комерційної зрілості», оскільки практично застосовувалися як у цивільних, так і у військових цілях. Однак через обмеження величини зміщення зон провідності такі нанодетектори не можуть досягнути ближнього ІЧ-діапазону в актуальному вікні (1,3 мкм-1,55 мкм), яке використовують для волоконно-оптичного зв'язку. Це виявилось одним з головних чинників, який спонукав Сузукі зі співробітниками [42, 43] вперше звернути увагу на нітридні сполуки, які невдовзі [44–47] стали базовими анізотропними елементами

наноприладів ІЧ-діапазону (КЯІФ, ККД, ККЛ), що їх активно досліджують і застосовують до сьогодні.

На відміну від ізотропних арсенідних матеріальних систем з кубічними елементарними комірками, існують нітридні сполуки (GaN/AlN, GaN/AlGaIn; AlInN/GaInN) з анізотропними гексагональними елементарними комірками. Вони володіють внутрішнім поляризаційним електричним полем, маючи велике СВО ( $\sim 2$  eV) та поздовжні оптичні фонони великої енергії ( $\sim 90$  meV). Ці властивості нітридних систем дали можливість детекторам на їх основі освоїти два крайні піддіапазони ІЧ-спектру, які принципово недоступні арсенідним сполукам, – близький ( $1\mu\text{m}$ – $3\mu\text{m}$ ) та дуже далекий (терагерцовий) у діапазоні частот близьких до оптичних фононів. Нітридні сполуки, як складові активних елементів КЯІФ, ККД та ККЛ мають суттєвий недолік – для них характерна велика неузгодженість між розмірами елементарних комірок контактуючих шарів квантових ям і бар'єрів. Вона приводить до значної густини дефектів та тріщин, сильно погіршуючи основні робочі параметри наноприладів. Щоб позбавитися цього впливу, застосовують, зокрема, належний дизайн і підбір таких контактуючих матеріалів, які, маючи протилежні напрямки деформації ґраток, дають досить малу результуючу величину деформації. Застосувався також підхід, при якому, замість квантових ям, у надґратках АО використовувалися квантові точки (КТ) (наприклад, GaN/AlN) [48–50], що збільшувало чутливість детекторів у десятки разів.

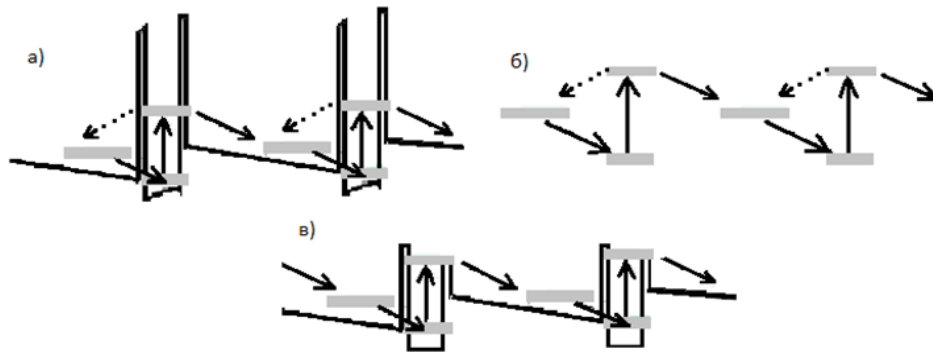
## **1.2. Фотовольтаїчні квантовоямні інфрачервоні фотодетектори (ФВ-КЯІФ) на основі ізотропних та анізотропних сполук**

У більшості досліджень КЯІФ увагу науковців привертає механізм фотопровідного виявлення, про що йшлося в попередньому параграфі. Суть цього механізму полягає в тому, що фотозбуджені носії виходять з області квантової ями під дією зовнішнього електричного поля. Інший клас структур КЯІФ утворюють пристрої з вбудованою інверсійною асиметрією, яка діє як внутрішнє поле, такі прилади можуть працювати без зовнішньої напруги зміщення, тобто у фотоелектричному режимі. На перший погляд, ця концепція

має перевагу зникаючого темного струму, так що відсутній шум генерації-рекомбінації. Однак фотострум цих фотоелектричних КЯІФ має набагато менше підсилення в порівнянні з фотопровідними КЯІФ. Як буде розглянуто далі, знижений фотострум і знижений рівень шуму приводять до подібних детективностей для оптимізованих фотопровідних і фотоелектричних КЯІФів. Тому фотопровідні КЯІФ є кращими для застосувань у приладах, які вимагають високої чутливості, наприклад, для датчиків, що працюють у діапазоні 3–5 мкм. Фотоелектричні КЯІФ є кращими в тих випадках коли час інтеграції обмежений ємністю накопичувача схеми зчитування. У цьому випадку переваги фотоелектричного КЯІФа впливають із того, що: 1) конденсатор не навантажується темновим струмом і 2) шум, пов'язаний із зібраним фотозарядом, надзвичайно малий.

Ранні концепції пристроїв для фотоелектричних КЯІФ-подібних структур були використані в роботі [51], яка розглядає міжмінізонне поглинання в суперґратці з прилеглим бар'єрним шаром. У той час як рух електронів у нижній мінізоні блокується бар'єром, електрони, збуджені у верхню мінізону, отримують достатньо енергії, щоб подолати бар'єр, таким чином створюючи фотострум уже без зовнішньої напруги зміщення. Гуссен та ін. [52] повідомили про інший підхід, у якому на ємність пристрою впливають носії, випромінювані у виснажений шар, розташований між квантовою ямою n-типу та металізованою поверхнею.

Хоча ці підходи базувалися на одній єдиній області поглинання, величезні фотоелектричні сигнали спостерігалися в періодичних подвійних бар'єрних структурах з квантовою ямою  $GaAs / AlAs / AlGaAs$ , що детектують випромінювання в діапазоні 3–5 мкм [55]. У роботі [53] дослідники покращили асиметрично леговану двобар'єрну квантову яму (рисунок 1.1 а). В роботі систематично змінювали положення спайку легуючої домішки, що привело до сильного впливу на фотоелектричні властивості. Було показано, що «вбудована напруга» цих детекторів приблизно така ж велика, як зовнішнє зміщення, необхідне для компенсації вбудованого поля в шарах  $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ .



**Рисунок 1.1.** Асиметрично легована двобар'єрна квантова яма [53] а), загальна конфігурація піддіпазону для фотоелектричного детектування б) та модуляційно легована однобар'єрна квантова яма [54] в).

Модуляційно леговану однобар'єрну квантову яму було розглянуто в роботі [55] (рисунок 1.1в). У дослідженні [56] завдяки генеруванню вбудованого поля за допомогою цифрово градуйованого надграткового бар'єру, а не модуляційного легування, був успішно досягнутий фотоелектричний ефект. Однак цей детектор показав обмежену детективність через темнові струми, викликані залишковим витоком носіїв у резонансні стани бар'єру. Такий підхід був дещо вдосконалений у роботі [57].

Подібна детективність, як для фотопровідних КЯІФ, була досягнута для фотоелектричного детектування за допомогою концепції «чотиризонного» КЯІФ [58, 59]. Тут кожен період активної області КЯІФ розділений на чотири зони, які можна оптимізувати незалежно.

Механізм електронного транспорту в ФВ-КЯІФ виглядає так. У зоні збудження (1) носії оптично збуджуються і переходять у квазіконтинуум над смугою дрейфової зони (2). Фотострум виникає без зовнішньої напруги зміщення, якщо збуджені носії релаксують у зону захоплення (3). Нарешті вони тунелюють крізь бар'єр зони тунелювання (4) і потрапляють у зону збудження (1), яка сусідня з правого боку до КЯ. Цей процес тунелювання має бути досить швидким, щоб запобігти повторному випромінюванню захоплених носіїв у вихідну яму (1). Зона тунелювання (4) запобігає зворотньому рухові фотозбуджених носіїв у бік розташованої зліва зони збудження (1).

Для ефективної реалізації цього транспортного механізму необхідно виконати кілька вимог. Тунельний бар'єр (4) повинен демонструвати низьку ймовірність тунелювання при високих енергіях, щоб час захоплення у вузьку праву КЯ (3) був коротшим, ніж час виходу тунелюванням у ліву (3) КЯ. Водночас постійна часу для тунелювання має бути меншою, ніж для термоелектронного перевипромінювання з вузької КЯ назад у широку КЯ. Вимоги щодо високої ймовірності виходу, високого рівня поглинання та придушення тунелювання через широкий бар'єр аналогічні до фотопровідних КЯІФ. Це розділення між широкою КЯ (зоною випромінювання) та високоенергетичною частиною зони тунелювання необхідне для досягнення спектрально вузької смуги поглинання та високого пікового поглинання.

До чотиризонних структур КЯІФ, було застосовано ще кілька модифікацій і варіацій параметрів, що більш детально описано в роботі [60].

Відповідну шумову модель для чотиризонного КЯІФ вперше застосував Бек [61]. Його модель розглядає випадок високої ймовірності захоплення  $p_c \approx 1$  (або еквівалентно низький рівень шуму  $g_{noise}$ ). Модель була отримана за допомогою стохастичних міркувань з урахуванням, що висока ймовірність захоплення не обов'язково пов'язана з низькою ймовірністю виходу електрона. Це саме випадок чотиризонного КЯІФ. Вираз шумового струму, отриманий у цій моделі, визначається як

$$i_n^2 = 4eg_{noise} I_{dark} \left(1 - \frac{p_c}{2}\right) \Delta f, \quad (1.1)$$

де  $I_{dark}$  – темновий струм, а  $\Delta f$  – смуга поглинання. Для випадку  $p_c \approx 1$  цей вираз дорівнює виразу дробового шуму  $N$  послідовно з'єднаних фотодіодів.

Приріст шуму в цій моделі визначається як  $g_{noise} = 1/(Np_c)$ , що в поєднанні з (1.1) дає

$$g_{noise} = \frac{i_n^2}{4eI_{dark}\Delta f} + \frac{1}{2N}. \quad (1.2)$$

Припускаючи, що ймовірність захоплення дорівнює одиниці, нижня межа посилення визначається як  $1/N = 0.05$  для  $N = 20$  періодів.



КЯІФ з низьким рівнем шуму демонструють такі ж властивості детектування, як і звичайні. Оскільки ці детекторні властивості обмежені темновим струмом, а не фоновим фотострумом, то покращення за рахунок придушення рекомбінаційного шуму не помітне. Фактично, КЯІФи з низьким рівнем шуму були вирощені з набагато більшою щільністю носіїв, ніж звичайні КЯІФ ( $4 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$  і  $1 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$  на КВ відповідно), і це привело до зменшення енергії активації. Крім того, спектральна ширина смуги чутливості в КЯІФ з низьким рівнем шуму зазвичай на 10–20% більша, ніж у звичайних КЯІФ, так що пікова здатність детектування відповідно знижується. Однак, на відміну від темнових детективностей, придушення рекомбінаційного шуму справді має значний вплив на фонову-обмежену детективність.

На КЯІФ з низьким рівнем шуму були проведені вимірювання з роздільною здатністю за часом, щоб отримати подальше розуміння транспортного механізму. Експеримент проводили з використанням ІЧ лазера з тривалістю імпульсів  $< 200$  фс. Ці імпульси генерувалися змішуванням різницевої частоти сигнального і холостого пучків оптичного параметричного генератора, накачуваного титано-сапфіровим лазером із синхронізацією мод з частотою повторення 76 МГц [62]. Міжпідзонний фотострум вимірювали за допомогою семплерного осцилографа за методикою [63].

Механізм темнового струму малошумного КЯІФ зі зміщенням дуже схожий на фотопровідну структуру. Насправді струм термоелектронної емісії визначають зони випромінювання та дрейфу, які відіграють, по суті, ті ж самі ролі, що й КЯ та термоелектронний бар'єр, відповідно, фотопровідного КЯІФа.

Поки повторне випромінювання електронів із зони захоплення є незначним щодо тунелювання через зону тунелювання, основним ефектом цих двох зон є збільшення ймовірності захоплення  $p_c$  і зменшення виграшу.

З цих причин механізм темнового струму по суті узгоджується з випадком фотопровідного КЯІФа, розглянутого в параграфі 1. Однак слід мати на увазі, що умова  $p_c \approx 1 - p_e$  не виконується для малошумних КЯІФів. Отже,

міжпідзонне поглинання зумовлене тими самими фізичними законами й тому є порівняним для обох типів детекторів.

Оскільки, незважаючи на велику ймовірність захоплення  $p_c$ , ймовірність виходу  $p_e$  фотозбуджених носіїв із зони поглинання поля (1) може бути високою, то квантова ефективність детектування також залишається високою. Таким чином, співвідношення сигнал/шум у КЯІФ з низьким рівнем шуму залишається високим, навіть незважаючи на те, що сигнальний і темновий струми значно зменшені порівняно з фотопровідним детектором.

Більшість наявних застосувань для ІЧ-детекторів пов'язані з отриманням зображень за допомогою двовимірних решіток фокальної площини (РФП). Для 2D-матриці потрібне поле, яке нормально падає на пластину, тому для викривлення світла потрібно використовувати інші засоби, ніж щойно обговорювані. Решітка була використана Гайтмоном [64] для збудження МПП в інверсійних шарах Si, і їх використання було запропоноване на початку досліджень КЯІФ [65]. Двовимірні решітки були змодельовані та систематично перевірені в ряді досліджень, які дають досить високі показники поглинання в пристроях великої площі [66–70]. Решітки, які в основному використовували, виготовлялися шляхом їх витравлювання на додатковому шарі, вирощеному над верхнім контактним шаром. Вони мали форму або витравлених ям, або жолобів, які залишають невитравлені нерівності, що після випаровування золота створювало майже ідеальне відбивання. У стандартному РФП освітлення відбувається через тильну сторону підкладки. Також досліджувалися металеві решітки (які не потребують додаткового шару) [71]. Крім того, були вивчені біперіодичні решітки [71, 72], які підходять для дводіапазонних або двоколірних КЯІФ.

Для випадку витравлених решітокпрості вказівки щодо проектування є такими: період решітки  $d$  має приблизно дорівнювати довжині хвилі всередині матеріалу, тобто  $d = \lambda / n_r$ , де  $\lambda$  – це довжина хвилі, яка має бути

виявлена, а  $n_r$  – показник заломлення. Це максимізує кут дифракції та приведе до великого поглинання. На практиці  $\lambda$  потрібно вибирати так, щоб вона була близькою до граничної довжини хвилі. Глибина травлення  $h$  має становити приблизно одну чверть внутрішньої довжини хвилі, тобто  $h = \lambda / 4n_r$ . Площі витравлених і невитравлених областей повинні бути рівними. Останні дві умови при найпростішому розгляді усувають пряме відбиття (дифракцію нульового порядку) через деструктивну інтерференцію. Характеристики решітки потрібно вибирати так, щоб максимізувати дифракцію на поперечній магнітній складовій поля. Нарешті, коли видаляють підкладку або вирощують під КЯІФ шар оболонки з низьким індексом, завдяки відображенню можливий додатковий прохід через МКЯ.

Андерссон і Лундквіст [70] повідомили про систематичне дослідження решіток, витравлених у формі траншей. Їхні результати узгоджуються з наведеними вище загальними рекомендаціями. Дослідники виявили, що решітка квадратної форми має тенденцію сприяти дифракції магнітно поляризованого світла. Вони також встановили, що трохи глибше травлення покращує детективність. Діапазон значень у їхніх розрахунках відповідає  $h/(\lambda/n_r) \approx 0.25 - 0.28$ ; це становить 10% зміни глибини травлення (зручне значення в допуску виготовлення). Крім того, Андерссон і Лундквіст передбачили, що довжина країв витравлених квадратів має бути в діапазоні  $d_{etch}/d \approx 0.55 - 0.63$ . Для рівних протравлених і непротравлених ділянок (коефіцієнт заповнення 50%) очікується  $d_{etch}/d \approx 1/\sqrt{2} = 0.707$ . В експериментальному тесті коефіцієнт заповнення ямкових решіток виявився у досить хорошому узгодженні з умовою  $d_{etch}/d \approx 1/\sqrt{2}$  [72].

Проблема решітки є дуже складною, і багато ефектів вищого порядку відіграють важливу роль, а в деяких випадках, головну. Одним з таких прикладів є ефект ближнього поля [72]. Цей ефект був добре використаний у двох випадках. Боїс та ін. [73] максимізували поглинання ближнього поля в структурі КЯІФ із двома пакетами та використовували верхній стек як

активний детектор, а нижній – як еталон для зменшення темного струму. Це служить для ефективного «знімання» темного струму в РФП. В іншому випадку решітки (ямки/дірки) витравлюються безпосередньо в активних шарах КЯІФ, роблячи повний зв'язок з ближнім полем [74].

Навіть 1D ґратки не є простими за наявності МПП і вільного поглинання носіїв як у МКЯ, так і в контактних шарах. Дюпон [75] змоделював цей випадок і виявив дуже нетривіальну залежність міжпідзонного поглинання від параметрів ґратки. Наприклад, глибина травлення, близька до однієї восьмої внутрішньої довжини хвилі, а не до однієї четвертої, давала найвище поглинання.

Простою ідеєю є ідея випадкових «ґраток» [76–80], згідно з нею, падаюче світло розсіюється решіткою у випадковому напрямку, у більшості випадків під кутом, більшим за кут повного внутрішнього відбивання, так що світло потрапляє в піксель детектора. Під час кожного проходу через МКЯ частка ІЧ-випромінювання поглинається, що зрештою приводить до високого або майже 100% поглинання.

Альтернативна методика була досліджена Чої та ін. [81], включає виготовлення V-подібних канавок з нахилом майже 45°. Процес базується на швидкості анізотропного вологого хімічного травлення в *GaAs*.

Крім детектування та робочої температури, довжина хвилі відсікання є ще одним показником інфрачервоних фотодетекторів. Маніпулювання довжиною хвилі відсікання і пригнічення темного струму є однією з останніх тенденцій у розвитку інфрачервоного детектування. Як уже було зазначено раніше, найпоширенішим методом є зміна параметрів структури матеріалу. В останні роки були продемонстровані оптичні методи маніпуляції довжиною хвилі зрізу за допомогою плазмонних мікрорезонаторів (ПМР-КЯІФ) на рівні комірок без змін електронних станів детектора. У роботі [82] цей метод використовувався для маніпуляції довжиною хвилі у діапазоні 14.3–16,3  $\mu\text{m}$ .

### 1.3. Фотопровідні квантові каскадні детектори (ФП-ККД) на основі ізотропних сполук

Квантовий каскадний детектор (ККД) – це фотодетектор з кількома квантовими ямами, що працює при низькому або нульовому зміщенні. Він має нульовий темновий струм, що виникає при напрузі 0В, а також високу фотоелектричну фотовідповідь, оскільки ККД не потребує прикладеного поля для покращення збору електронів. ККД були протестовані на різних довжинах хвиль, від коротких (1,5 мкм) до ТГц, через весь інфрачервоний спектр (середні та довгі довжини хвиль). Теорія переносу в ККД досить добре розроблена й забезпечує такий розрахунок струму та шуму в ККД певних смуг ІЧ діапазону, який досить добре узгоджується з експериментами.

Квантово-каскадні детектори спочатку створювалися як фотоелектричні детектори, тобто для роботи без зміщення. До їхнього складу входить кілька ідентичних періодів, які містять одну активну (леговану) яму та декількох екстракторних зв'язаних ям. Коли електрони піддаються гарячому збудженню фотонами, далі вони тунелюють від однієї активної ями до наступної що забезпечується випромінюванням фононів через каскад рівнів. Отже, ККД є хорошою фотоелектричною альтернативою КЯІФ.

У моделі ефективної маси електрона фізичний процес у каскаді виглядає так. Перша КЯ кожного періоду є n-легованою, так що її перший енергетичний рівень  $E_1$  зайнятий електроном. Уся структура каскадів вбудована між двома контактними шарами  $GaAs$ , легovanого  $Si$ . Поглинання фотона  $\hbar\omega$  спонукає електрон перейти з першого рівня основного стану  $E_1$  на перший збуджений рівень  $E_2$ . Великі матричні елементи між  $E_2$  і нижчими енергетичними рівнями дозволяють електрону переходити до правих квантових ям, тунелюючи крізь екстрактор з релаксацією енергії через народження поздовжніх оптичних фононів, потрапляючи нарешті до основного рівня наступного каскаду. Для хорошої чутливості детектора необхідна ефективна електронна дифузія всередині каскаду, наноструктура діє як фотоелектричний інфрачервоний детектор, що забезпечує сигнал виявлення при нульовому

зміщенні. Для підвищення детективності прилада його активна область містить досить багато ( $N$ ) однакових каскадів.

Важливими параметрами ККД є чутливість, детективність та ймовірність захоплення електрона. Чутливість детектора  $R$  визначається відношенням вихідного струму детектора  $I_S$  до одиниці потужності вхідного сигналу  $P_S$

$$R = \frac{I_S}{P_S} = \frac{e}{h\nu} \eta g_p = \frac{\lambda e}{hc} \eta g_p; \quad g_p = \frac{p_e}{N p_c}, \quad (1.3)$$

де  $\nu = c/\lambda$  – частота сигналу,  $\lambda$  – довжина хвилі сигналу,  $c$  – швидкість світла у вакуумі,  $e$  – елементарний заряд,  $h$  – постійна Планка,  $\eta$  – ефективність поглинання,  $g_p$  – коефіцієнт підсилення фотоприймача;  $p_e$  – ймовірність виходу збудженого електрона в активну КЯ,  $p_c$  – ймовірність його захоплення в основний стан активної КЯ для електрона, що рухається вниз по каскаду ККД, а  $N$  – кількість активних періодів КЯ в ККД. Таким чином, оптимізація чутливості  $R$  досягається завдяки ефективності поглинання та підсиленню фотодетектора.

Для ККД ефективність поглинання  $\eta$  зв'язана з двовимірним коефіцієнтом поглинання  $\alpha_{2D}$  активної квантової ями ККД

$$\eta = 1 - e^{-N\alpha_{2D}} \approx N\alpha_{2D}, \quad (N_{QW}\alpha_{2D} \ll 1). \quad (1.4)$$

Тут  $\alpha_{2D}$  обчислюється із золотого правила Фермі

$$\alpha_{2D} = \frac{n_s e^2 \hbar}{2\varepsilon_0 c n m^*} f_{12} \frac{\Gamma}{(E_2 - E_1 - \hbar\omega)^2 + \Gamma^2}, \quad f_{12} = \frac{2m^* \omega_{12}}{\hbar} \left| \langle \phi_1 | z | \phi_2 \rangle \right|^2, \quad (1.5)$$

де  $n_s$  – двовимірний щільність легування активної КЯ,  $n$  – показник заломлення ККД, а  $m^*$  – ефективна маса електрона в КЯ,  $f_{12}$  – сила осцилятора між двома найнижчими станами з хвильовими функціями в активній КЯ.  $\phi_1$  і  $\phi_2$  – хвильові функції, а  $\Gamma$  – півширина на половині лоренцового піку форми поглинання міжпідзонного переходу. Якщо  $N\alpha_{2D} \ll 1$ , ефективність

поглинання та чутливість зростають лінійно з кількістю періодів і щільністю легування. Однак, оскільки коефіцієнт підсилення детектора обернено пропорційний кількості періодів, поточна чутливість, принаймні в першому наближенні, не залежить від кількості періодів.

Ще одним поширеним показником для фотоприймачів є детективність  $D^* = R_p / i_n \sqrt{A \Delta f}$ , яка є відношенням між піковою чутливістю  $R_p$  і середнім струмом шуму  $i_n$ , нормованим на площу детектора  $A$  і ширину смуги поглинання  $\Delta f$ . Одиницею цього струму є Джонс. Для ККД при температурах вищих від так званої фонові обмеженої інфрачервоної температури продуктивності  $T_{Bl}$ ,  $i_n = i_n^J$  і  $D^* = D_J^*$  з домінуванням шуму Джонсона; при температурах нижче  $T_{Bl}$ ,  $i_n = i_n^{Bl}$  і  $D^* = D_{Bl}^*$  переважають фотонні шуми через фонове випромінювання чорного тіла. Беручи до уваги ці різні факти, отримується детективність для ККД

$$D_J^* = R_p \sqrt{\frac{AR_0}{4k_B T}}; \quad D_{BLIP}^* = \frac{R_p}{\sqrt{2q^2 g_p \int g_p \eta(v') \frac{d\Phi_{BC}(v')}{dv'} dv'}}, \quad (1.6)$$

де  $R_0$  – диференціальний опір пристрою при величинах напруги, (близьких до 0В),  $T$  – температура пристрою.

Квантово-механічне правило відбору по поляризації [83] стверджує, що лише електричний компонент електромагнітного поля, перпендикулярний до шарів КЯ, здійснює міжпідзонні переходи. Таким чином, геометрія зразка пристрою ККЖ повинна гарантувати, що напрямок внутрішнього поширення світла не є перпендикулярним до поверхні зразка. Є три основних геометрій пристроїв ККД: багатопрохідний  $45^\circ$  хвилевід, конфігурація кута Брюстера (для решітки  $InGaAs/InAlAs$ , узгодженої з  $InP$ ) та дифракційна ґратка. Кожна з цих геометрій має свої переваги та недоліки. Найчастіше використовується багатопрохідний клиноподібний хвилевід. Він має помірні вимоги до обробки й дозволяє отримати надійні та відтворювальні

характеристики досліджуваного зразка. Найбільша його перевага – це відсутність чутливості до різних довжин хвиль, але у випадку поляризованого світла він пропускає тільки половину вхідного випромінювання. Геометрія Брюстера потребує найменшої обробки, але має низьку ефективність поглинання. Тому його використовують тільки у випадку зразків з сильним поглинанням. Дифракційна решітка має найкраще поглинання й дозволяє використовувати детекторні масиви, але вона вимагає складної підготовки. Залежно від бажаної довжини хвилі поглинання визначають глибину травлення та період дифракційної решітки. Цю геометрію використовують у завершених пристроях, які вже виробляють масово.

Зазвичай об'єкти випромінюють інфрачервоне електромагнітне поле в широкому діапазоні довжин хвиль, але інтерес представляє лише певна область спектру, оскільки датчики зазвичай призначені лише для збору випромінювання в певній смузі пропускання. У результаті інфрачервоний діапазон часто розділяється на менші під діапазони і, залежно від сфери застосування, існує кілька схем поділу. Зазвичай використовують схему поділу смуг на основі відповідності між робочими частотами детекторів і частотами атмосферного пропускання, на яких виникають максимуми в інфрачервоних областях, їх називають атмосферними вікнами.

- Близький інфрачервоний діапазон від 0.7 до 3.0 мікрметра (кінець видимого світла людським оком до початку першого атмосферного вікна).
- Середньохвильове інфрачервоне випромінювання з довжиною від 3 до 5 мікрметрів (перше близьке атмосферне вікно).
- Довгохвильове інфрачервоне випромінювання з довжиною від 8 до 14 мікрметрів (друге далеке атмосферне вікно).
- Дуже довгохвильове інфрачервоне випромінювання з довжиною від 14 до приблизно 30 мікрметрів.
- Терагерцове випромінювання з довжиною від 30 до 80 мікрметрів (третє атмосферне вікно).



Далі коротко подаємо аналіз робіт, в яких увага дослідників була зосереджена на тому чи іншому діапазоні або конкретному пристрої з фіксованою довжиною хвилі. Такі праці згруповані по довжині хвилі від близького ІЧ-діапазону до терагерцового.

У роботі [84] продемонстровано двоколірний квантовий каскадний детектор на основі  $GaN$ . Цей фотодетектор працює одночасно на пікових довжинах хвилі 1,7 і 1 мкм при кімнатній температурі без зовнішньої напруги. Ці піки відповідають міжпідзонному поглинанню при переходах з першого у другий та з першого у третій стан активної квантової ями  $GaN$ . Екстрактор був розроблений для забезпечення ефективного перенесення електронів з обох збуджених станів до наступного каскаду. Виявлена довжина хвилі 1 мкм є найкоротшим значенням, яке було досягнуте міжпідзонним напівпровідниковим детектором.

Сакр та інші [85] продемонстрували квантовий каскадний детектор  $GaN / Al(Ga)N$ , що працював при кімнатній температурі з піковою довжиною хвилі виявлення 1.5 мкм. Це на той час було найкоротшим значенням, що його коли-небудь реєстрували для такого пристрою в будь-якій матеріальній системі. Спектральний діапазон виявлення охоплював довжини хвиль від 1,37 до 1,57 мкм. Відкалібрована пікова чутливість для поляризованого світла становила приблизно 15 В/Вт при кімнатній температурі.

В одній з наступних робіт Сакр та ін. [86] повідомили про надшвидкі хвилеводні квантові каскадні детектори  $GaN / AlGaN$  з піковою довжиною хвилі виявлення 1,55 мкм. Пристрої меза розміром  $7 \times 7$  та  $10 \times 10$  мкм<sup>2</sup> були виготовлені з лініями доступу з узгодженим радіочастотним імпедансом. Дослідники зафіксували значне підвищення чутливості освітлення хвилеводної грані по відношенню до освітлення верхньої поверхні. Чутливість при кімнатній температурі оцінили як вищу за  $9,5 \pm 2$  і  $7,8 \pm 2$  мА/Вт, тоді як частотна характеристика становила 42 і 37,4 ГГц для пристроїв  $7 \times 7$  і  $10 \times 10$  мкм<sup>2</sup> відповідно.

З цією ж довжиною хвилі працював Варді з колегами [87]. Вони продемонстрували високошвидкісну роботу квантових каскадних детекторів  $GaN/AlGaN$  при кімнатній температурі. Пристрої оброблялися як квадратні мези з копланарними лініями доступу  $50 \Omega$ . Вимірювання частотної характеристики проводилися при освітленні модульованим лазерним діодом, що випромінює на  $\lambda=1,55 \mu\text{м}$ . Для  $17 \times 17 \mu\text{м}^2$  ( $25 \times 25 \mu\text{м}^2$ ) детекторів гранична частота становить  $11,4 \text{ ГГц}$  ( $6,5 \text{ ГГц}$ ). Аналіз параметрів підтвердив, що частота зрізу є зовнішнім обмеженням і що швидкість пристрою може бути збільшена додатково шляхом зменшення розміру пристрою.

У роботі [88] представлено решітку ККД на основі  $InAs/AlAs_{0.16}Sb_{0.84}$ , узгоджену з підкладкою  $InAs$ . ККД має пік спектрального відгуку при  $2,7 \text{ мкм}$  ( $0,459 \text{ еВ}$ ), в центрі смуги поглинання  $\text{CO}_2$ . Для забезпечення освітлення реалізована решітка. ККД має пікову чутливість при кімнатній температурі  $5,63 \text{ мА/Вт}$  і пікову питому детективність  $1,14 \times 10^8$  Джонса.

Жаллівет та інші [89] вивчали пристрій з піком, близьким до  $3 \text{ мкм}$ . Вони повідомили про першу демонстрацію ККД на основі  $m$ -площинних гетероструктур  $ZnO/ZnMgO$ . Зразки були вирощені методом молекулярно-променевої епітаксії на  $m$ -площині підкладок  $ZnO$ . Спектроскопія міжпідзонного поглинання з використанням інфрачервоного спектрометра з перетворенням Фур'є показує, що магнітнополяризоване поглинання має пік при довжині хвилі  $3 \text{ мкм}$ . Пристрої ККД були оброблені у формі  $260$  квадратних мез розміром від  $10 \times 10 \text{ мкм}^2$  до  $100 \times 100 \text{ мкм}^2$ . Особливу увагу було приділено пасивації грані мези. Спектроскопія фотоструму  $100 \times 100 \text{ мкм}^2$  ККД була виконана під освітленням верхньої поверхні під кутом падіння Брюстера. Резонанс фотоструму має пік на довжині хвилі  $2,8 \text{ мкм}$ , тобто трохи зміщений у фіолетову сторону відносно піку міжпідзонного поглинання. Фотострум зберігається до  $320 \text{ К}$ . Пікова чутливість при  $77 \text{ К}$  була відкалібрована на рівні  $0,15 \text{ мА/Вт}$  за цих умов освітлення. Автори повідомляють, що цей детектор можна вдосконалити, покращивши дизайн, вирощування, виготовлення та умови освітлення.

Досить широкий діапазон довжин хвиль було охоплено в роботі [90]. Автори повідомили про квантовий каскадний детектор  $GaN/AlN$ , який працює в розширеному спектральному діапазоні від середньої інфрачервоної до видимої довжин хвиль. Це широкосмугове виявлення досягалося завдяки конструкції активних квантових ям, що підтримують п'ять міжпідзонних переходів. Фотодетектор демонструє широкий сигнал від 4,1 мкм до 0.55 мкм. Фотострум зберігається до кімнатної температури. Відкалібрована чутливість при 77 К під час опромінення через поліровану грань під кутом  $45^\circ$  становить 7 мкА/Вт на довжині хвилі 0.633 мкм і досягає піку при 14 мкА/Вт на довжині хвилі 0.72 мкм.

У наступній роботі Ванг та ін. [91] продемонстрували квантовий каскадний детектор  $InGaAs/InAlAs$  на основі  $InP$  з компенсацією деформацій, вирощений методом молекулярно-променевої епітаксії з твердого джерела. Пристрій працює при 4,3 мкм до кімнатної температури (300 К) з чутливістю 1,27 мА/Вт і обмеженою виявленням шуму Джонсона  $1,02 \times 10^7$  см $\cdot$ Гц $^{1/2}$ /Вт. При 80 К чутливість і виявлення становлять 14,55 мА/Вт і  $1,26 \times 10^{10}$  см $\cdot$ Гц $^{1/2}$ /Вт. Відповідно до діапазону відгуку цей детектор дуже підходить для виявлення парникових газів. З цією ж довжиною хвилі працювали і ККД, представлені у роботах [92, 93].

Канг та ін. в [94] продемонстрували середньохвильовий ІЧ детектор на основі  $InP$  з піковою довжиною хвилі відгуку 4,7 мкм і піковою довжиною хвилі випромінювання 1,19 мкм. Система підвищеного перетворення виявлення з обмеженням темного струму досягає  $1,1 \times 10^{11}$  Джонса при 78 К зі зміщенням 1,3 В, а умова продуктивності інфрачервоного випромінювання з обмеженням фону досягається при 107 К з виявленням  $1,2 \times 10^{10}$  Джонса.

У роботі Танга та ін. [95] було запропоновано новий фотодетектор  $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$  із потрійною квантовою ямою, що працює на довжині хвилі 5 мкм. Фотодетектор розроблено за умови подвійного резонансу для досягнення короткого часу тунелювання та великої ймовірності виходу електронів. Розраховано межі оптичних фононних мод та знайдено швидкості

фонон супровідних переходів електрона. Імовірність виходу електрона досягає 0,8 у запропонованому фотодетекторі, що у два рази і більше вища, ніж у традиційних пристроях з фонон супровідним тунелюванням. Порівняно з інфрачервоними фотодетекторами КЯ шумовий струм фотодетектора можна значно зменшити ( $>10^{13}$  разів при 77 К і  $>4000$  разів при 300 К).

У роботі Гофстера та ін. [96] запропоновано квантовий каскадний детектор 5,35 мкм, що працює при кімнатній температурі. Він був протестований на високих частотах за допомогою експерименту з оптичним гетеродином. Для генерації сигналу використовувалися два одномодових квантових каскадних лазери безперервної хвилі з розподіленням зворотним зв'язком. Максимальна частота, на якій можна було виявити отриманий мікрохвильовий сигнал, становила 23 ГГц. Поведінка відсікання пристроєм була змодельована простою схемою  $RLC$  і показала чудову узгодженість з експериментальними даними.

У статті Сена та ін. [97] демонструється довгохвильовий інфрачервоний субмоношаровий квантово-каскадний фотодетектор з квантовими точками  $InAs/GaAs$  (СМШ КТ-ККД), що вирощені на підкладці  $GaAs$ . Вимірювання фотолюмінесценції, що залежить від температури та збудження, використовувалося для дослідження оптичних властивостей активної області з квантовими точками, які виявляють енергетично гібридні основні стани між квантовою точкою  $InAs$  і квантовою ямою  $InGaAs$  через можливе перемішування атомів  $In$  і  $Ga$  під час процесу вирощування. Пристрій охоплює спектральний діапазон від 6,5 до 9 мкм. При 77 К пікова чутливість 7,5 мА/Вт виявлена при 8,3 мкм (0 В) і отримано добуток диференціального опору на площу нульового зсуву ( $R_0A$ )  $9008 \Omega \cdot \text{cm}^2$ . Обмежене білим шумом виявлення становить  $6,5 \times 10^9 \text{ cm} \cdot \text{Гц}^{1/2}/\text{Вт}$ . Ці результати показують, що СМШ КТ-ККД є сильним конкурентом для довгохвильових ІЧ- детекторів.

Кун Лі та ін. у роботі [98] продемонстрували квантовий каскадний детектор зі зв'язаними подвійними ямами, які виявляють високу пікову чутливість  $166 \text{ mA W}^{-1}$  для детектування 8,2 мкм при 80 К. Сполучена

конструкція подвійної ями забезпечує підвищену ефективність поглинання. Крім того, включення в екстрактор ще однієї з'єднаної структури з подвійними ямами підвищує ефективність вилучення. Обидва чинники сприяють високій продуктивності пристрою.

Маршік та інші [99] представляють новий підхід до пом'якшення обмеження продуктивності на довгих хвилях шляхом порівняння подібних одно- та багатоперіодних ККД для оптимізації їх чутливості та шумової поведінки. Їхні ребристі ККД  $InGaAs/InAlAs/InP$  розроблені для роботи при  $\lambda = 9,124$  мкм. Моделювання оптичних хвилеводів підтримує точні оптичні характеристики. Детальний аналіз пристрою показує, що чутливість до кімнатної температури становить 111 мА/Вт для 15-періодного пристрою та 411 мА/Вт для одноперіодного пристрою.

У роботі Конга та ін. [100] продемонстрований 10,7 мкм квантовий каскадний детектор на основі сполук  $InGaAs/InAlAs/InP$ , узгоджених по решітці. Цей детектор описано з точки зору чутливості, резистентності та детективності. Пристрій добре працює в атмосферному вікні 8–14 мкм до 140 К і демонструє пікову реакцію 14,4 мА/Вт при 78 К.

Цай та ін. [101] повідомляють про два фотоелектричні квантові каскадні детектори  $nGaAs/InAlAs$  на основі  $InP$ , які працюють на пікових довжинах хвиль 18 мкм і 19 мкм, використовуючи різні електронні транспортні механізми. Для транспортування електронів використовуються поздовжні сходи оптичного видалення фононів у поєднанні з енергетичними мінісходинками, що пригнічують струм витоку та забезпечують високий опір пристрою. Загалом цей квантовий дизайн приводить до пікової чутливості 2,34 мА/Вт при 15 К на довжині хвилі 18 мкм.

Щодо терагерцових нанодетекторів, то потрібно зазначити, що в їх дослідженні відбуваються інтенсивні й успішні експерименти з уведенням у шари квантових ям квантових точок, дротин і кілець.

## РОЗДІЛ 2.

### Спектральні властивості широкосмугового нанофотодетектора далекого інфрачервоного діапазону з новим дизайном активної області

#### 2.1. Вступ. Нанодетектори ІЧ діапазону

Вивчення та застосування ізотропних наноструктур ( $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ;  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{Al}_y\text{In}_{1-y}\text{As}$ ;  $\text{GaInAs}/\text{AlAsSb}$ ) у якості активних областей (АО) детекторів електромагнітного поля ІЧ діапазону, що почалося ще в 1980–1990 рр., інтенсивно триває до цього часу. Фізичною основою функціонування АО наноприладів є електронні зв'язані стани, які внаслідок просторового квантування виникають у мультиквантових ямах (МКЯ). Саме міжпідзонні квантові переходи (МКП) електронів з поглинанням чи випромінюванням електромагнітного поля забезпечують можливість успішного функціонування таких наноприладів, як: квантовоямні інфрачервоні фотодетектори (КЯІФ), квантові каскадні детектори (ККД) та лазери (ККД) інфрачервоного діапазону.

Початкові теоретичні й експериментальні роботи [102–107] встановили головні засади фізики утримування, квантових переходів та тунелювання електронів між мультиквантовими ямами. Це стало основою для експериментального створення перших фотопровідних (ФП) [108–111] та фотовольтаїчних (ФВ) [11–115] квантовоямних інфрачервоних фотодетекторів (КЯІФ), що базувалися на ізотропних наноструктурах.

Головна відмінність між ФП та ФВ КЯІФів полягає в тому [116], що внаслідок різниці в дизайнах активних областей ФП-КЯІФ працюють лише за наявності постійного електричного поля (зміщення), яке сприяє вириванню електронів зі збуджених станів квантових ям і їх односторонньому рухові в системі, а в ФВ-КЯІФ електрони здійснюють односторонній резонансно-тунельний транспорт за рахунок асиметричної структури МКЯ навіть при нульовому зміщенні.

Постійною альтернативою до функціонуючих КЯІФ виявилися ККД, які від перших років їх створення [56, 57, 96] до тепер конкурують за основними робочими параметрами. Переваги, недоліки і проблеми, пов'язані з цим типом

нанодетекторів, детально висвітлені й проаналізовані в оглядових роботах [39, 117–120].

Й арсенідні [117], і нітридні [118] каскади ККД в основному складаються з однієї (двох) активних ям (АЯ) та мультиквантових ям (МКЯ) екстрактора. У моделі ефективної електронної маси в каскадах ККД відбуваються такі процеси. Внаслідок того, що електрон поглинає фотонну енергію у легованій АЯ, він здійснює квантовий перехід з основного в збуджений рівень цієї ж ями, з якої резонансно-тунельним переходом з деякою (малою) ймовірністю потрапляє безпосередньо на такий же рівень АЯ наступного каскаду, а також, релаксуючи в екстракторі з послідовним випроміненням оптичного фонуна, східцями «фононної драбинки» зі значною ймовірністю потрапляє на основний рівень АЯ того ж наступного каскаду.

Хоча за станом на теперішній час обидва типи нанодетекторів (КЯІФ і ККД) на арсенідній і нітридній основах освоїли весь ІЧ-діапазон, однак необхідність покращення їх робочих параметрів (детективності, чутливості) при різних температурних режимах залишається актуальною й постійно перебуває в центрі уваги дослідників. Інтенсивній модифікації і вдосконаленню піддаються нанофотодетектори як нітридні (полярні, напівполярні та неполярні) [41, 119, 120], так і арсенідні [121-124]. У цих та інших роботах досліджено різні матеріали активних елементів та підкладок. Замість шарів квантових ям, вводилися надгратки квантових точок або дисків, впроваджувалися нанодроти (НД), а також застосовувалися різні дизайни активних областей.

Інтенсивний розвиток сучасних нанотехнологій у цивільних та військових видах діяльності (управління, екологія, наука, космос, навігація та ін.) потребують застосування нанофотодетекторів (КЯІФ, ККД), які успішно працюють у всьому ІЧ-діапазоні. Щодо фотодетекторів далекого й дуже далекого ІЧ піддіапазонів, то для результативного функціонування у відповідному вікні атмосферної прозорості вони повинні характеризуватися достатньою величиною відносної ширини ( $\eta = \Delta\lambda / \lambda$ ) спектральної смуги

поглинання електромагнітного поля. Це не проста задача для експериментальної реалізації, зокрема в діапазоні терагерцових частот, де фотонні енергії близькі до енергій оптичних фононів арсенідних ( $\sim 30$  meV) та нітридних ( $\sim 90$  meV) сполук. Тепер уже відомі різні підходи до поліпшення параметрів ширококутових фотодетекторів. Серед них – належний вибір матеріалів ям і бар'єрів АО, продуманий і послідовно застосований температурний режим їх вирощування при добре розрахованому дизайні потенціального рельєфу наносистем [41, 125, 126].

У цій роботі пропонуємо квантову теорію електронного спектра та сил осцилятора квантового переходу в новій моделі ширококутового нанодетектора далекого ІЧ-діапазону з дизайном активної області, яка містить каскади різних квантових ям із складним потенціальним рельєфом. Оскільки в пропонованій моделі АО відсутня «фононна драбинка» й потенціал зміщення, то в такому фотодетекторі не виникатиме темновий струм, а отже струм відгуку повинен зрости суттєво.

У дисертаційному дослідженні розвиваємо квантову теорію спектральних параметрів і сил осциляторів квантових переходів у активній області, яка містить каскади широких квантових ям зі складним потенціальним рельєфом.

Запропонований новий просторовий дизайн каскада з таким розрахованим асиметричним розташуванням шарів ям і бар'єрів, при якому без прикладеного зміщення виникають значні величини сил осциляторів і здійснюється односторонній резонансно-тунельний транспорт електронів. Це дозволяє забезпечити успішне функціонування ширококутового фотодетектора в далекому ІЧ-діапазоні.

## **2.2. Енергетичний спектр і хвильові функції електрона в каскаді квантових ям зі складним потенціальним рельєфом**

Щоб максимально уникнути проблеми виникнення значного темнового струму внаслідок прикладання робочої напруги зміщення до АО ширококутового нанодетектора далекого ІЧ діапазону, будемо розглядати

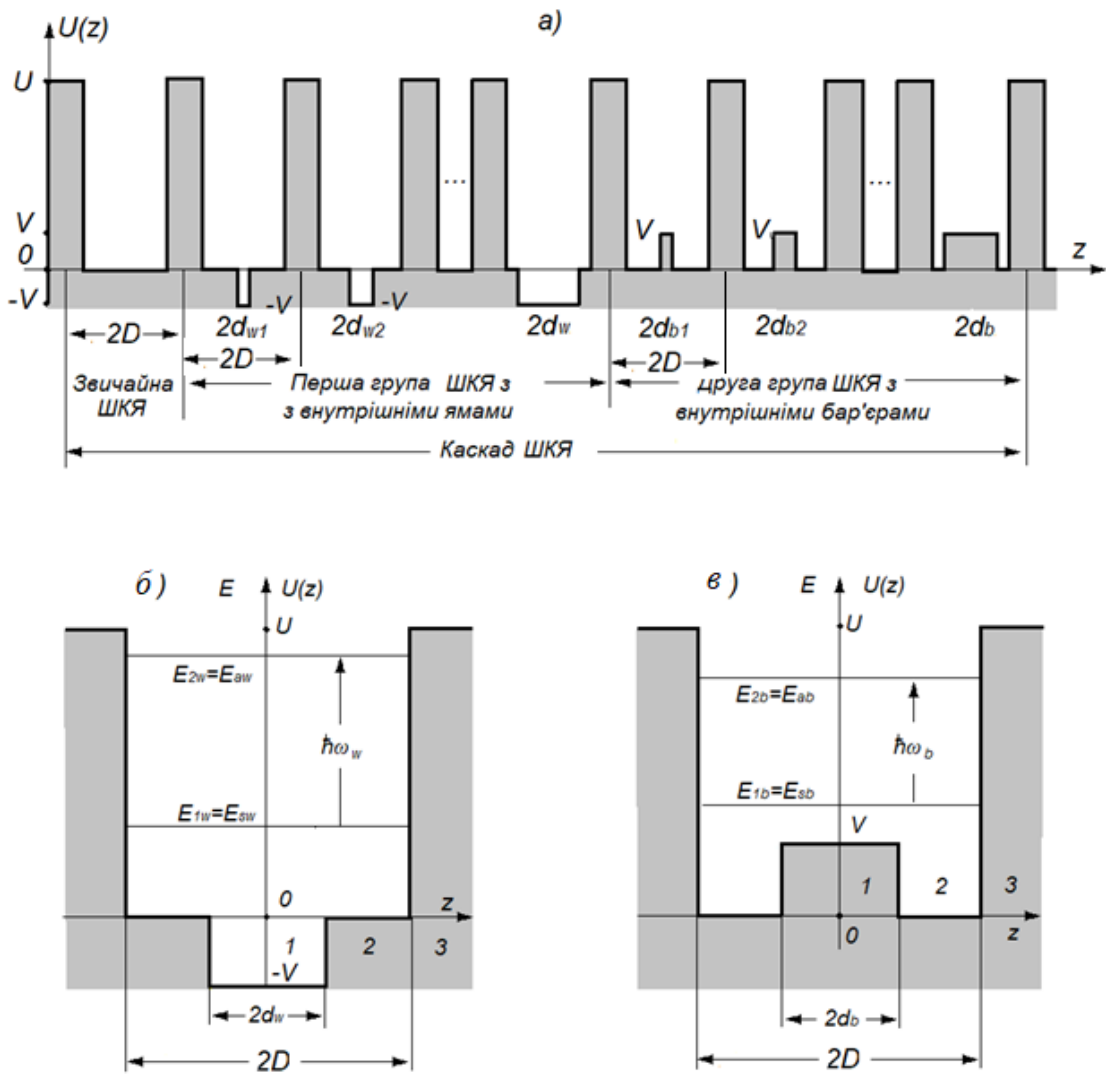


такий дизайн його каскадів, який не потребує зміщення, і, наскільки нам відомо, ще не був предметом вивчення.

Отже, АО нанодетектора містить  $N$  однакових каскадів, кожен з яких, зі свого боку, містить одну звичайну безструктурну широку квантову яму (ШКЯ) та дві групи ШКЯ з однаковими висотами потенціальних бар'єрів ( $U$ ) і півширинами широких ям ( $D$ ). Щодо розміру товщин ( $L$ ) між'ямних бар'єрів, то з метою уникнення в подальшій теорії надто громіздких аналітичних, а передусім числових комп'ютерних розрахунків, розглянемо модель, у якій знехтуємо незначним впливом сусідніх широких КЯ одна на одну, вважаючи, що вони розташовані на достатньо далекій відстані ( $L$ ) між собою (за експериментальними оцінками [110]  $L \geq 50$  нм).

Зауважимо також, що застосована модель дозволила розрахувати й дослідити властивості спектра всього окремого каскаду, як суперпозицію незалежних спектрів трьох типів окремих ШКЯ (з внутрішніми бар'єрами і ямами та без них).

На рис. 2.1 подаємо схеми потенціальних рельєфів каскаду (а) та першої (б) і другої (в) груп ШКЯ. Параметри  $U$  і  $D$  підбираються так, щоб у слабо зв'язаних між собою ШКЯ містилося лише по два енергетичні рівні:  $E_s^{(\pm)}$  – енергії основних (симетричних станів),  $E_a^{(\pm)}$  – перших збуджених (антисиметричних станів). Це забезпечує вибір  $U$  і  $D$  складових елементів ШКЯ. Щодо параметрів  $V$ ,  $d_{n-}$ ,  $d_{n+}$ , то їх підбираємо згідно з розвиненою далі теорією, так, щоб забезпечити резонансно-тунельний транспорт збуджених електронів лише в одну сторону каскаду (для конкретності зліва направо), оптимізуючи при цьому параметри смуг поглинання електромагнітного поля.



**Рисунок 2.1** Схеми потенціальних профілів. а) Окремий каскад слабо зв'язаних ШКЯ з однаковими ширинами ( $2D$ ), що складаються зі звичайної та двох груп ШКЯ, перша з яких містить лише внутрішні ями, а друга – лише внутрішні бар'єри. б) Окрема ШКЯ з внутрішньою КЯ. в) Окрема ШКЯ з внутрішнім КБ.

Щоб з'ясувати, за яких умов і при яких параметрах наносистеми можливе функціонування описаного каскаду широкосмугового фотодетектора, спочатку будемо квантову теорію енергетичного спектра, хвильових функцій та сил осциляторів квантових переходів електрона під дією електромагнітного поля ІЧ-діапазону. Із рис. 2.1. видно, що потенціальний рельєф містить одну ШКЯ без внутрішньої структури та дві групи з внутрішньою структурою. Перша з них містить  $(n_w^-)$  внутрішніх

потенціальних ям з потенціалами  $(-V)$  і півширинами  $(d_{n^-})$  та ефективними масами електрона  $m^{(-)} = m_{1w}$ . Друга група містить  $(n_b^+)$  внутрішніх потенціальних бар'єрів  $(V)$  із півширинами  $(d_{n^+})$  та ефективними масами  $m^{(+)} = m_{1b}$ .

Спрощуючи прості але громіздкі розрахунки, знехтуємо несуттєвим впливом різних ШКЯ між собою для фіксованої півширини  $d$  уведемо компактні позначення

$$U^{(\pm)}(z) = \begin{cases} \pm V \\ 0 \\ U \end{cases}; \quad m^{(\pm)}(z) = \begin{cases} m_1^{(\pm)} = m_1 \binom{b}{w} & 0 \leq |z| \leq d \quad (1) \\ m_2^{(\pm)} = m_w & d \leq |z| \leq D \quad (2) \\ m_3^{(\pm)} = m_b & D \leq |z| \leq \infty \quad (3). \end{cases} \quad (2.1)$$

Числові величини потенціалів  $(U, V)$ , ефективні маси електрона в середовищах ям  $(m_w, m_{1w})$  та бар'єрів  $(m_b, m_{1b})$ , а також півширини широких КЯ  $(D)$  та мілких внутрішніх ям  $(d_{n^-})$  і малих бар'єрів  $(d_{n^+})$  будуть конкретизовані вибором складових елементів ШКЯ після розв'язання двох незалежних рівнянь Шредінгера

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)^{(\pm)}} \frac{\partial}{\partial z} + U^{(\pm)}(z) \right\} \Psi^{(\pm)}(z) = E^{(\pm)} \Psi^{(\pm)}(z). \quad (2.2)$$

При цьому далі враховуємо просторову симетрію ШКЯ всіх трьох типів (рис. 2.1 а, б, в), а також для успішного функціонування детектора забезпечуємо фізичну вимогу, щоб у підбар'єрній області енергій  $(V \leq E^{\pm} \leq U)$  у кожному з ШКЯ вміщалися лише два енергетичні рівні:  $(E_1^{(\pm)} = E_s^{(\pm)})$ , що відповідають симетричним  $|s\rangle$  основним станам, та  $(E_2^{\pm} = E_a^{\pm})$ , що відповідають антисиметричним  $|a\rangle$  збудженим станам. При цьому енергетичні рівні антисиметричних станів повинні розташовуватися поблизу підвершинами кожної ШКЯ для того, щоб електрон міг легко тунелювати з цього

стану попередньої ШКЯ в наступну, створюючи струм в АО. Отже, повинна виконуватися умова

$$\Delta E_{U2} = U - E_2 \ll U. \quad (2.3)$$

Розглянемо спочатку рівняння (2.2) для ШКЯ з внутрішнім бар'єром довільної фіксованої півширини  $d$  в актуальній області енергій  $V \leq E_{s,a}^{(+)} \leq U$ . Тоді в області  $0 \leq z \leq \infty$ , згідно з квантовою механікою, розв'язками рівнянь (2.2), в яких уже врахована вимога збігу функцій на межах першого з другим та другого з третім середовищами, для непарного основного стану є симетрична (s) хвильова функція

$$\psi_s^{(+)}(0 \leq z \leq \infty) = \begin{cases} A_{s1}^{(+)} \cos(k_1 z); & 0 \leq z \leq d \\ A_{s1}^{(+)} \cos(k_1 d) \frac{\sin[k_2(D-z)]}{\sin[k_2(D-d)]} + A_{s3}^{(+)} e^{-\gamma D} \frac{\sin[k_2(d-z)]}{\sin[k_2(d-D)]}; & d \leq z \leq D \\ A_{s3}^{(+)} e^{-\gamma z}; & D \leq z \leq \infty, \end{cases} \quad (2.4)$$

а для парного збудженого стану – антисиметрична (a) хвильова функція

$$\psi_a^{(+)}(0 \leq z \leq \infty) = \begin{cases} A_{a1}^{(+)} \sin(k_1 z); & 0 \leq z \leq d \\ A_{a1}^{(+)} \sin(k_1 d) \frac{\sin[k_2(D-z)]}{\sin[k_2(D-d)]} + A_{a3}^{(+)} e^{-\gamma D} \frac{\sin[k_2(d-z)]}{\sin[k_2(d-D)]}; & d \leq z \leq D \\ A_{a3}^{(+)} e^{-\gamma z}; & D \leq z \leq \infty, \end{cases} \quad (2.5)$$

де

$$\begin{aligned} k_1 &= \hbar^{-1} \sqrt{2m_b(E_{s,a}^{(+)} - V)}; & k_2 &= \hbar^{-1} \sqrt{2m_w E_{s,a}^{(+)}}, \\ \gamma &= \hbar^{-1} \sqrt{2m_b(U - E_{s,a}^{(+)})}; \end{aligned} \quad (2.6)$$

З умов неперервності хвильових функцій (2.4), (2.5) і їх потоків густин ймовірностей на гетеромежах системи

$$\left\{ \begin{array}{l} \psi_{s,a}^{(+)}(z = d - 0) = \psi_{s,a}^{(+)}(d + 0); \quad \left. \frac{1}{m_b} \frac{d\psi_{s,a}^{(+)}(z)}{dz} \right|_{z=d-0} = \left. \frac{1}{m_w} \frac{d\psi_{s,a}^{(+)}(z)}{dz} \right|_{z=d+0} \\ \psi_{s,a}^{(+)}(z = D - 0) = \psi_{s,a}^{(+)}(D + 0); \quad \left. \frac{1}{m_w} \frac{d\psi_{s,a}^{(+)}(z)}{dz} \right|_{z=D-0} = \left. \frac{1}{m_b} \frac{d\psi_{s,a}^{(+)}(z)}{dz} \right|_{z=D+0} \end{array} \right. \quad (2.7)$$

отримуємо дві незалежні системи: по два лінійних однорідних рівняння, з яких для енергій  $E_s^{(+)}$  основного й усіх непарних (симетричних) станів отримуємо перше дисперсійне рівняння

$$\cos^2(k_2\Delta) \left[ 1 + \frac{\gamma m_w}{k_2 m_b} \operatorname{tg}(k_2\Delta) \right] \left[ 1 - \frac{k_1 m_w}{k_2 m_b} \operatorname{tg}(k_1 d) \operatorname{tg}(k_2\Delta) \right] = 1, \quad (2.8)$$

а для енергій  $E_a^{(+)}$  всіх збуджених непарних (антисиметричних) станів – друге дисперсійне рівняння

$$\cos^2(k_2\Delta) \left[ 1 + \frac{\gamma m_w}{k_2 m_b} \operatorname{tg}(k_2\Delta) \right] \left[ 1 + \frac{k_1 m_w}{k_2 m_b} \operatorname{ctg}(k_1 d) \operatorname{tg}(k_2\Delta) \right] = 1, \quad (2.9)$$

де

$$\Delta = D - d. \quad (2.10)$$

Умови неперервності (2.7) разом з умовами нормування

$$2 \int_0^{\infty} |\Psi_{s,a}^{(+)}(z)|^2 dz = 1 \quad (2.11)$$

однозначно визначають усі коефіцієнти  $A^+$ , а отже й нормовані хвильові функції електрона в ШКЯ з малим внутрішнім бар'єром. У компактній формі ці функції можна подати в такому аналітичному вигляді

$$\psi_s^{(+)}(z) = \frac{1}{N_s^{(+)}} \begin{cases} \cos(k_1 z); & 0 \leq z \leq d \\ \frac{\cos(k_1 d) \sin[k_2(D-z)] + B_s^{(+)} \sin[k_2(z-d)]}{\sin[k_2\Delta]}; & d \leq z \leq D \\ B_s^{(+)} \exp[-\gamma(z-D)]; & D \leq z \leq \infty, \end{cases} \quad (2.12)$$

$$\psi_a^{(+)}(z) = \frac{1}{N_a^{(+)}} \begin{cases} \sin(k_1 z); & 0 \leq z \leq d \\ \frac{\sin(k_1 d) \sin[k_2(D-z)] + B_a^{(+)} \sin[k_2(z-d)]}{\sin[k_2 \Delta]}; & d \leq z \leq D \\ B_a^{(+)} \exp[-\gamma(z-D)]; & D \leq z \leq \infty. \end{cases} \quad (2.13)$$

Тут

$$N_s^{(+)} = \sqrt{2} \left[ \frac{2dk_1 + \sin(2dk_1)}{4k_1} + \frac{(B_s^{(+)})^2}{2\gamma} + \frac{1}{4k_2 \sin^2(k_2 \Delta)} \times \right. \\ \left. \times \left\{ [(B_s^{(+)})^2 + \cos^2(k_1 d)] [2k_2 \Delta - \sin(2k_2 \Delta)] + \right. \right. \\ \left. \left. + 4B_s^{(+)} \cos(k_1 d) [\sin(k_2 \Delta) - k_2 \Delta \cos(k_2 \Delta)] \right\}^{1/2}, \quad (2.14)$$

$$N_a^{(+)} = \sqrt{2} \left[ \frac{2dk_1 - \sin(2dk_1)}{4k_1} + \frac{(B_a^{(+)})^2}{2\gamma} + \frac{1}{4k_2 \sin^2(k_2 \Delta)} \times \right. \\ \left. \times \left\{ [(B_a^{(+)})^2 + \sin^2(k_1 d)] [2k_2 \Delta - \sin(2k_2 \Delta)] + \right. \right. \\ \left. \left. + 4B_a^{(+)} \sin(k_1 d) [\sin(k_2 \Delta) - k_2 \Delta \cos(k_2 \Delta)] \right\}^{1/2} \quad (2.15)$$

- нормувальні коефіцієнти, а функції  $B_{s,a}^{(+)}$  мають такий аналітичний вигляд

$$B_s^{(+)} = \cos(k_1 d) \cos(k_2 \Delta) - \frac{k_1 m_w}{k_2 m_b} \sin(k_1 d) \sin(k_2 \Delta), \quad (2.16)$$

$$B_a^{(+)} = \sin(k_1 d) \cos(k_2 \Delta) + \frac{k_1 m_w}{k_2 m_b} \cos(k_1 d) \sin(k_2 \Delta). \quad (2.17)$$

Розв'язуючи аналогічним способом рівняння Шредінгера (2.2) для ШКЯ з внутрішньою ямою в області енергій  $0 \leq E_{s,a}^{(-)} \leq U$ , отримуємо два незалежні рівняння

$$\cos^2(k_2 \Delta) \left[ \frac{\gamma m_w}{k_2 m_b} \operatorname{tg}(k_2 \Delta) + 1 \right] \left[ \left[ 1 - \frac{k_{1w}}{k_2} \operatorname{tg}(k_2 \Delta) \operatorname{tg}(k_{1w} d) \right] \right] = 1, \quad (2.18)$$

$$\cos^2(k_2 \Delta) \left[ \frac{\gamma m_w}{k_2 m_b} \operatorname{tg}(k_2 \Delta) - 1 \right] \left[ \left[ 1 + \frac{k_{1w}}{k_2} \operatorname{tg}(k_2 \Delta) \operatorname{tg}(k_{1w} d) \right] \right] = 1, \quad (2.19)$$

для визначення  $E_s^{(-)}$  й  $E_a^{(-)}$  в симетричних і антисиметричних станах відповідно. Зауважимо, що тут  $k_{1w} = \hbar^{-1} \sqrt{2m_w(E^{(-)} + V)}$ , а величини  $k_2$  і  $\gamma$  ті

ж самі, що й у формулах (2.6). Здійснивши у формулах (2.18) і (2.19) граничний перехід  $V \rightarrow 0$ ,  $d \rightarrow 0$  отримуємо два рівняння для енергій основного (s) і першого збудженого (a) станів звичайної ШКЯ

$$\cos^2(k_2 D) \left[ \frac{\gamma m_w}{k_2 m_b} \operatorname{tg}(k_2 D) \pm 1 \right] = 1; \quad \begin{cases} s \\ a. \end{cases} \quad (2.20)$$

Подібно до аналітичних розрахунків хвильових функцій, виконаних для ШКЯ з внутрішнім бар'єром, отримуємо точні вирази для хвильових функцій електрона у звичайній та в ШКЯ з внутрішньою ямою. Вони не складні, але не наведені через намір уникнути громіздких аналітичних виразів.

Запишемо хвильові функції для парних (s) станів системи з квантовою ямою:

$$\psi_s^{(-)}(0 \leq z \leq \infty) = \begin{cases} A_{s1}^{(-)} \cos(k_1 z); & 0 \leq z \leq d \\ A_{s2}^{(-)} \cos(k_2 z) + B_{s2}^{(-)} \sin(k_2 z); & d \leq z \leq D \\ A_{s3}^{(-)} e^{-\gamma z}; & D \leq z \leq \infty, \end{cases} \quad (2.21)$$

Подібно подаємо й хвильові функції для непарних (a) станів:

$$\psi_a^{(-)}(0 \leq z \leq \infty) = \begin{cases} A_{a1}^{(-)} \sin(k_1 z); & 0 \leq z \leq d \\ A_{s2}^{(-)} \cos(k_1 z) + B_{a2}^{(-)} \sin(k_1 z); & d \leq z \leq D \\ A_{a3}^{(-)} e^{-\gamma z}; & D \leq z \leq \infty, \end{cases} \quad (2.22)$$

де

$$\begin{aligned} k_{1w} &= \hbar^{-1} \sqrt{2m_w(E^{(-)} + V)}; & k_2 &= \hbar^{-1} \sqrt{2m_w E_{s,a}^{(-)}}; \\ \gamma &= \hbar^{-1} \sqrt{2m_b(U - E_{s,a}^{(-)})}; \end{aligned} \quad (2.23)$$

Використовуючи умови неперервності хвильових функцій та потоків густин ймовірностей хвильових функцій, отримуємо систему рівнянь:

$$\left\{ \begin{array}{l} \psi_{s,a}^{(-)}(z = d - 0) = \psi_{s,a}^{(-)}(d + 0); \quad \left. \frac{d\psi_{s,a}^{(-)}(z)}{dz} \right|_{z=d-0} = \left. \frac{d\psi_{s,a}^{(-)}(z)}{dz} \right|_{z=d+0} \\ \psi_{s,a}^{(-)}(z = D - 0) = \psi_{s,a}^{(-)}(D + 0); \quad \left. \frac{d\psi_{s,a}^{(-)}(z)}{m_w dz} \right|_{z=D-0} = \left. \frac{d\psi_{s,a}^{(-)}(z)}{m_b dz} \right|_{z=D+0} \end{array} \right. \quad (2.24)$$

Звідси для хвильових функцій симетричних станів (2.21) отримуємо систему лінійних алгебраїчних рівнянь,

$$\left. \begin{array}{l} A_{s1}^{(-)} \cos(k_1 a_1) = A_{s2}^{(-)} \cos(k_2 a_1) + B_{s2}^{(-)} \sin(k_2 a_1) \\ -k_1 A_{s1}^{(-)} \sin(k_1 a_1) = -k_2 A_{s2}^{(-)} \sin(k_2 a_1) + k_2 B_{s2}^{(-)} \cos(k_2 a_1) \\ A_{s2}^{(-)} \cos(k_2 a_2) + B_{s2}^{(-)} \sin(k_2 a_2) = A_{s3}^{(-)} e^{-\gamma a_2} \\ \frac{k_2}{m_w} A_{s2}^{(-)} \sin(k_2 a_2) + \frac{k_2}{m_w} B_{s2}^{(-)} \cos(k_2 a_2) = -\frac{\gamma}{m_b} A_{s3}^{(-)} e^{-\gamma a_2} \end{array} \right\}, \quad (2.25)$$

нетривіальний розв'язок якої забезпечується умовою

$$\left| \begin{array}{cccc} \cos(k_1 a_1) & -\cos(k_2 a_1) & -\sin(k_2 a_1) & 0 \\ -k_1 \sin(k_1 a_1) & k_2 \sin(k_2 a_1) & -k_2 \cos(k_2 a_1) & 0 \\ 0 & \cos(k_2 a_2) & \sin(k_2 a_2) & -e^{-\gamma a_2} \\ 0 & -\frac{k_2}{m_w} \sin(k_2 a_2) & \frac{k_2}{m_w} \cos(k_2 a_2) & \frac{\gamma}{m_b} e^{-\gamma a_2} \end{array} \right| = 0, \quad (2.26)$$

що визначає дисперсійне рівняння для s-станів

$$\operatorname{tg}(\Delta k_2) = \frac{\frac{m_w}{m_b} \frac{\gamma}{k_1} \cos(a_1 k_1) - \sin(a_1 k_1)}{\frac{k_2}{k_1} \cos(a_1 k_1) + \frac{m_w}{m_b} \frac{\gamma}{k_2} \sin(a_1 k_1)}. \quad (2.27)$$

Рівняння (2.27) дає можливість виконати числові розрахунки енергій симетричних станів системи ШКЯ з внутрішнім бар'єром.

Підставляючи хвильові функції для асиметричних станів (2.22) у граничні умови (2.24), отримаємо нову систему лінійних алгебраїчних рівнянь:



$$\left. \begin{aligned} A_{a_1}^{(-)} \sin(k_1 a_1) &= A_{a_2}^{(-)} \cos(k_2 a_1) + B_{a_2}^{(-)} \sin(k_2 a_1) \\ k_1 A_{a_1}^{(-)} \cos(k_1 a_1) &= -k_2 A_{a_2}^{(-)} \sin(k_2 a_1) + k_2 B_{a_2}^{(-)} \cos(k_2 a_1) \\ A_{a_2}^{(-)} \cos(k_2 a_2) + B_{a_2}^{(-)} \sin(k_2 a_2) &= A_{a_3}^{(-)} e^{-\gamma a_2} \\ \frac{k_2}{m_w} A_{a_2}^{(-)} \sin(k_2 a_2) + \frac{k_2}{m_w} B_{a_2}^{(-)} \cos(k_2 a_2) &= -\frac{\gamma}{m_b} A_{a_3}^{(-)} e^{-\gamma a_2} \end{aligned} \right\}, \quad (2.28)$$

з визначником:

$$\begin{vmatrix} \sin(k_1 a_1) & -\cos(k_2 a_1) & -\sin(k_2 a_1) & 0 \\ k_1 \cos(k_1 a_1) & k_2 \sin(k_2 a_1) & -k_2 \cos(k_2 a_1) & 0 \\ 0 & \cos(k_2 a_1) & \sin(k_2 a_2) & -e^{-\gamma a_2} \\ 0 & -\frac{k_2}{m_w} \sin(k_2 a_1) & \frac{k_2}{m_w} \cos(k_2 a_1) & \frac{\gamma}{m_b} e^{-\gamma a_2} \end{vmatrix} = 0, \quad (2.29)$$

який визначає дисперсійне рівняння для енергій симетричних а-станів

$$\operatorname{tg}(\Delta k_2) = \frac{\sin(a_1 k_1) + \frac{m_b}{m_w} \frac{k_1}{\gamma} \cos(a_1 k_1)}{\frac{m_b}{m_w} \frac{k_2}{\gamma} \sin(a_1 k_1) - \frac{k_1}{k_2} \cos(a_1 k_1)} \quad (2.30)$$

Рівняння (2.30) й отримане раніше рівняння (2.27) дають можливість розрахувати всі енергетичні рівні для системи ШКЯ з внутрішнім бар'єром.

### 2.3. Сили осциляторів квантових переходів. Оптимізація параметрів квантовоямних каскадів широкосмугових фотодетекторів далекого ІЧ-діапазону

Для успішного функціонування широкосмугового фотодетектора далекого ІЧ-діапазону кожен каскад повинен мати таке просторове розташування всіх трьох типів ШКЯ, щоб положення їх енергетичних рівнів і сил осциляторів квантових переходів відповідали трьом основним умовам. По-перше, як уже було зазначено, для достатнього тунельного транспорту електронів між ШКЯ каскаду потрібно, щоб виконувалася умова (2.3), тобто, щоб найвищий рівень енергії зв'язаного збудженого стану ШКЯ був розташований достатньо близько до її вершини. По-друге, тунельний

транспорт електронів у каскаді повинен відбуватися лише в одну сторону, тому необхідне виконання умови

$$\Delta E_{2,n^{(\pm)}} = E_{2,n^{(\pm)}} - E_{2,n^{(\pm)}+1} \ll E_{2,n^{(\pm)}} \quad (n^{(\pm)} = 1,2,3,\dots), \quad (2.31)$$

тобто, щоб різниця енергій збуджених станів кожної попередньої й наступної ШКЯ була позитивна й не велика. Нарешті, щоб коефіцієнт поглинання електромагнітного поля був достатньо великим у потрібному діапазоні енергій, а він пропорційний силі осцилятора квантового переходу ( $f_{sa}$ ), то потрібно, щоб виконувалася достатня умова

$$f_{sa} \geq 0,5 \quad (2.32)$$

у всьому діапазоні детектованої енергії.

Розвинена у попередньому параграфі теорія дозволяє визначити енергетичні рівні й хвильові функції, необхідні для розрахунку й оптимізації просторового дизайну каскада ШКЯ. Однак відомий аналітичний вираз для сили осцилятора квантового переходу між станами  $\psi_s$  і  $\psi_a$  з енергіями  $E_s$  і  $E_a$

$$f_{sa} = \frac{2m_0}{\hbar^2} (E_a - E_s) |\langle \psi_s(z) | z | \psi_a(z) \rangle|^2 \quad (2.33)$$

справедливий лише для вільного електрона з просторово постійною масою  $m_0$ . Тому у випадку досліджуваного каскаду ШКЯ з просторово залежною масою  $m(z)$  формулу (2.33) потрібно узагальнити так, щоб при цьому не порушилася ортонормованість хвильових функцій обох станів  $(\psi_s^{(\pm)}(z), \psi_a^{(\pm)}(z))$ , знайдених у попередньому параграфі як точні розв'язки рівнянь Шредінгера (2.2) з ермітовим гамільтоніаном електрона з різними ефективними масами в різних просторових областях відповідних ШКЯ з внутрішніми бар'єрами чи ямами.

З фізичних міркувань зрозуміло, що, задовільняючи щойно описану головну вимогу, узагальнення формули (2.33) на випадок ШКЯ можна

здійснити шляхом уведення замість маси  $m_0$  скорельовану по окремій ШКЯ ефективну масу

$$m^{(\pm)} = m_0 \mu^{(\pm)}, \quad (2.34)$$

де  $\mu^{(\pm)}$  – знерозмірена скорельована маса електрона, яка враховує як ймовірність його знаходження ( $P_{\ell=1,2,3}^{(\pm)}$ ) в кожній з трьох областей відповідної ШКЯ, так і симетрію по обох станах, між якими відбувається квантовий перехід

$$\mu^{(\pm)} = P_1^{(\pm)} m_1^{(\pm)} + P_2^{(\pm)} m_2^{(\pm)} + P_3^{(\pm)} m_3^{(\pm)}. \quad (2.35)$$

Тут  $m_\ell^{(\pm)}$  – знерозмірена (в одиницях  $m_0$ ) ефективна маса електрона в  $\ell$ -му середовищі з внутрішніми бар'єром (+) чи ямою (-), а  $P_\ell^{(\pm)}$  – усереднена за обома станами ймовірність знаходження електрона в  $\ell$ -му середовищі ШКЯ

$$\begin{aligned} P_1^{(\pm)} &= \int_0^d \left( \left| \psi_{1s}^{(\pm)}(z) \right|^2 + \left| \psi_{1a}^{(\pm)}(z) \right|^2 \right) dz, \\ P_2^{(\pm)} &= \int_d^D \left( \left| \psi_{2s}^{(\pm)}(z) \right|^2 + \left| \psi_{2a}^{(\pm)}(z) \right|^2 \right) dz, \\ P_3^{(\pm)} &= \int_D^\infty \left( \left| \psi_{3s}^{(\pm)}(z) \right|^2 + \left| \psi_{3a}^{(\pm)}(z) \right|^2 \right) dz. \end{aligned} \quad (2.36)$$

Отже, сила осцилятора квантового переходу ( $f_{sa}^\pm$ ) електрона з просторово залежною ефективною масою в ШКЯ набуває зручного для розрахунку аналітичного виразу

$$f_{sa}^\pm = \frac{E_a^{(\pm)} - E_s^{(\pm)}}{Ry} \frac{\mu^{(\pm)}}{a_B^2} \left| \langle \psi_s^{(\pm)}(z) | z | \psi_a^{(\pm)}(z) \rangle \right|^2, \quad (2.37)$$

де для зручності введені енергія Рідберга ( $Ry = \hbar^2 / 2m_0 a_B^2$ ) та  $a_B$  – радіус Бора.

На основі розвиненої теорії виконаний розрахунок спектральних параметрів каскадів ШКЯ та здійснена їх оптимізація залежно від величин потенціалів  $U$  і  $V$  та геометричних розмірів  $D$  і  $d$ . Як складові елементи каскаду проаналізовано ШКЯ  $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  з малими внутрішніми бар'єрами  $\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}$  та з малими внутрішніми ямами  $\text{Ga}_y\text{In}_{1-y}\text{As}$ . Такий вибір сполук зумовлений тим, що в них близькі розміри елементарних комірок. Це забезпечує каскад від утворення небажаних напружень. Для них також добре відомі прості лінійні співвідношення між концентраціями ( $x, y$ ) складових елементів та енергетичними параметрами ( $U, V$ ) й ефективними масами електрона ( $m$ ) у всіх трьох областях ШКЯ

$$U = 1.1x_{Al}(eV), \quad V_b = 1.1x_{Al}(eV); \quad |V_w| = 0.85y_{Ga}(eV);$$

$$m_{Ga\ As}^w = 0.067; \quad m_{Al_xGa_{1-x}As}^b = 0.067 + 0.83x_{Al}; \quad (2.38)$$

$$m_{Ga_yIn_{1-y}As}^w = 0.22 + 0.045y_{Ga}.$$

Для успішного функціонування широкопasmового фотодетектора в його каскадах потрібно створити таке просторове розташування ШКЯ з різних за величинами півширин ( $d$ ) внутрішніх бар'єрів і ям, яке б забезпечувало всі три умови (2.3), (2.31), (2.32) щодо енергетичних параметрів ( $E_a^{(\pm)}, \hbar\omega^{(\pm)}$ ) та сил осциляторів ( $f_{sa}^{\pm}$ ) при фіксованих величинах  $U, V, D$ . Приклад розрахованих величин ( $E_a^{(\pm)}, \hbar\omega^{(\pm)}, f_{sa}^{(\pm)}$ ) п'ятнадцяти ШКЯ (з різними розмірами  $d$ ), як можливих елементів окремого каскаду фотодетектора, наведено в таб. 2.1. Зокрема, розрахунок величин потенціалів  $U, V_b, |V_w|$  виконаний за формулою (2.38) при концентраціях ( $x, y$ ) елементів, зазначених у підписі до таблиці 2.1. На основі цих концентрацій визначено й відповідні ефективні маси в усіх областях ШКЯ. З таблиці 2.1 видно, що ширина діапазону деяких пікових енергій електромагнітного поля, поглинутого каскадом послідовно розташованими ШКЯ обох груп з однаковими  $U, V, D$ , обмежена розмірами внутрішніх ям чи бар'єрів  $d_{n^{(\pm)}} \leq D/2$ . Це пов'язано з

невиконанням умов (2.31) та (2.32) при наближенні знизу  $d_{n^{(\pm)}}$  до  $D/2$  для ШКЯ з внутрішніми ямами, та з внутрішніми бар'єрами відповідно. У таблиці 2.1 виділені параметри тих ШКЯ, які не відповідають потрібним вимогам (2.31, 2.32) і тому не включені у структуру каскаду. Отже, наведений приклад засвідчує, що у функціонуючому каскаді повинні міститися лише десять ШКЯ, розташовані так, як показано на рисунку 2.1. Спочатку розташовуємо п'ять ШКЯ з півширинами внутрішніх ям, які зростають у межах  $0 \text{ nm} \leq d^- \leq 1 \text{ nm}$ , а потім п'ять ШКЯ з півширинами внутрішніх бар'єрів, які зростають у межах  $0,25 \text{ nm} \leq d^+ \leq 1,25 \text{ nm}$ . Потрібно зазначити, що, як показує розрахунок і аналіз, якщо розміри півширин ( $d^\pm$ ) внутрішніх ям і бар'єрів збільшуючись перевищують величину  $D/2$ , то енергії ( $E_a^{(\pm)}$ ) відповідних збуджених станів ШКЯ починають лише збільшуватися. Унаслідок цього в системі може виникати зворотнє тунелювання електрона, тому такі ШКЯ не повинні включатися в каскад.

Таблиця 2.1

Залежності спектральних параметрів ( $E_{a,s}^{(\pm)}$ ,  $\hbar\omega^{(\pm)}$ ) та сил осциляторів квантових переходів ( $f_{sa}^\pm$ ) від півширин ( $d^{(\pm)}$ ) внутрішніх ям і бар'єрів при  $U = 160 \text{ meV}$ ,  $V = 40 \text{ meV}$ ,  $D = 3.5 \text{ nm}$ .  $d^{(\pm)}, (\text{nm})$

$d^{(\pm)}, (\text{nm})$	0	0.25	0.5	0.75	1	1.25	1.5	1.75
$E_a^+ (\text{meV})$	150.25	148.88	147.62	146.63	146.01	145.82	<b>146.07</b>	<b>146.75</b>
$E_s^+ (\text{meV})$	44.24	47.62	50.88	54.02	57.06	59.98	62.77	65.41
$\hbar\omega^+ (\text{meV})$	106.01	101.26	96.74	92.61	88.95	85.84	83.3	81.34
$f_{sa}^+$	0.739	0.742	0.728	0.698	0.658	0.616	0.579	0.552
$E_a^- (\text{meV})$	150.25	150.24	150.17	149.97	149.64	148.99	148.26	146.9
$E_s^- (\text{meV})$	44.24	40.73	37.37	33.62	30.56	26.89	24.32	20.96
$\hbar\omega^- (\text{meV})$	106.01	109.51	112.8	116.35	119.08	122.1	123.94	125.94
$f_{sa}^-$	0.739	0.696	0.639	0.58	0.52	<b>0.476</b>	<b>0.442</b>	<b>0.434</b>

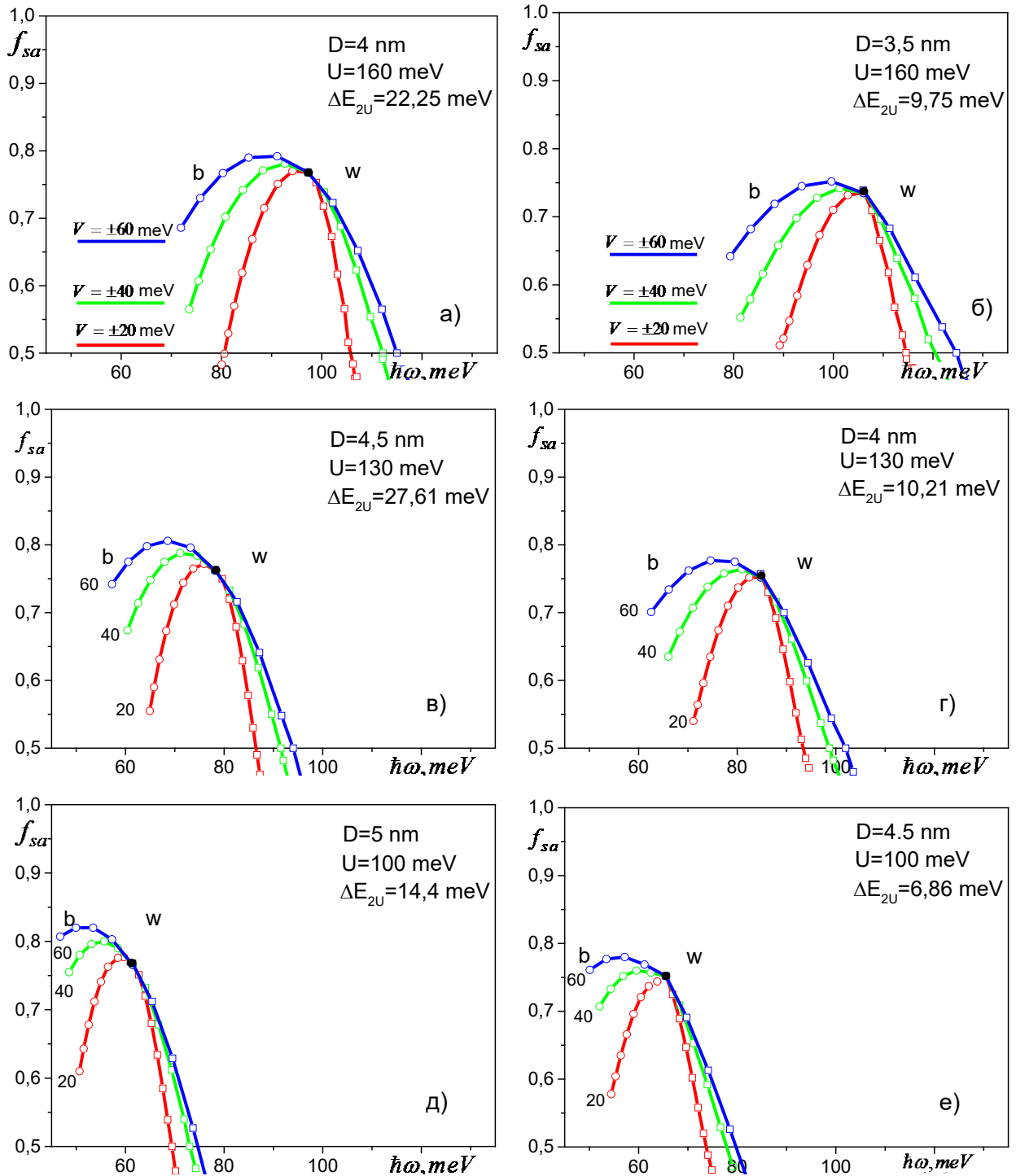
Приклади вибору енергетичних величин ( $U$ ,  $V$ ) та геометричних ( $D$ ,  $d$ ) параметрів груп ШКЯ, які входять у оптимізовані каскади широкопasmових

фотодетекторів електромагнітного поля, що можуть працювати у трьох різних інтервалах частот далекого ІЧ діапазону (наведені на рисунку. 2.2 і в таблиці 2.2).

На панелях рис. 2.2 подано результати розрахованих залежностей сил осциляторів квантових переходів  $f_{sa}$  від енергії поля  $\hbar\omega$  при трьох значеннях потенціалів ( $U=160\text{meV}$ ,  $130\text{meV}$ ,  $100\text{meV}$ ) ШКЯ, які в основному визначають інтервали частот ( $\omega$ ) чи довжини хвиль ( $\lambda$ ), що детектуються відповідними каскадами. Для кращої візуалізації величини  $f_{sa}$  розраховані при  $V=\text{const}$  позначені крапками, що з'єднані між собою лініями. При цьому темні крапки відповідають силам осциляторів, що сформовані безструктурними ШКЯ, а світлі крапки (b) та (w) відповідають силам осциляторів, що сформовані групами ШКЯ з внутрішніми бар'єрами та ямами. На панелях цього рисунка приведено залежності  $f_{sa}$  від  $\hbar\omega$  при трьох вказаних величинах ( $U=160\text{meV}$ ,  $130\text{meV}$ ,  $100\text{meV}$ ), при трьох значеннях потенціалів ( $V=20\text{meV}$ ,  $40\text{meV}$ ,  $60\text{meV}$ ) внутрішніх ям і бар'єрів, а також при двох розмірах півширин  $D$  відповідних ШКЯ, щоб проілюструвати, який з двох каскадів з однаковими потенціалами  $U$  та  $V$ , але різними розмірами  $D$ , (потрібні коми) є оптимальнішими з міркувань вибору кращих параметрів функціонуючого фотодетектора. Також на панелях рисунка для ясності аналізу вказано цифрові величини  $\Delta E_{U2} = U - E_a(V = 0)$  усіх шістьох каскадів.

У таблиці 2.2 наведено потрібні для аналізу розраховані числові величини, які безпосередньо характеризують оптичні параметри смуг поглинання поля дев'ятьма (три значення  $V$  при трьох значеннях  $U$ ) парами каскадів ШКЯ. Це середня довжина  $\lambda = (\lambda_{\min} + \lambda_{\max})/2$  й ширина  $\Delta\lambda = \lambda_{\max} - \lambda_{\min}$  смуги поглинання каскадом та їх відношення ( $\eta\%$ ), а також середнє значення сил осциляторів  $\bar{f}_{sa} = (\max \ell)^{-1} \sum_{\ell=1}^{\max \ell} [f_{sa}^{(+)}(d_{\ell}^{(+)}) + f_{sa}^{(-)}(d_{\ell}^{(-)})]$  цього ж каскаду ШКЯ. Наведено також величини ширини зон збуджених

енергетичних рівнів  $\Delta E_2 = E_2^{(-)}(d=0) - E_2^{(+)}(d_{\max})$ , оскільки в сумі з  $\Delta E_{U2}$  вони, як видно з таблиці 2.2, трохи збільшують величини потенціальних бар'єрів над збудженими рівнями, внаслідок чого погіршується тунелювання всередині й між каскадами детектора.



**Рисунок 2.2** Залежності сил осциляторів ( $f_{sa}$ ) від енергії поля ( $\hbar\omega$ ) при різних енергетичних ( $U, V$ ) та геометричних ( $D, d^-, d^+$ ) параметрах (вказаних на панелях і таблиці 1) деяких оптимальних каскадів ШКЯ.

Аналіз рисунка 2.2 і таблиці 2.2 засвідчує такі особливості. З рисунка. 2.2 видно, що при всіх величинах  $U$  і  $V_b, V_w$  низькочастотна частина смуг поглинання довільним каскадом формується групою ШКЯ з внутрішніми бар'єрами, а високочастотна – безструктурною та групою ШКЯ з внутрішніми ямами.

**Таблиця 2.2.**

Залежності оптичних характеристик ( $\lambda, \Delta\lambda, \eta\%$ ) та сил осциляторів ( $f_{sa}$ ) від енергетичних та геометричних параметрів оптимізованих каскадів ШКЯ активних елементів широкосмугових фотодетекторів далекого ІЧ – діапазону.

	$V(meV)$	$\hbar\omega_{\min}(meV)$	$\hbar\omega_{\max}(meV)$	$\Delta E_2(meV)$	$\lambda(\mu m)$	$\Delta\lambda(\mu m)$	$\eta, \%$	$\bar{f}_{sa}$
$U = 160meV$ $\Delta E_{2U} = 22.25meV$ $D = 4nm$ $d_w = 1.0nm$ $d_b = 1.0nm$	20	80.55	105.30	5.94	13.60	3.63	26.69	0.639
	40	73.65	109.72	4.83	13.84	4.24	30.64	0.684
	60	71.93	112.02	4.16	13.53	5.72	42.28	0.698
$U = 160meV$ $\Delta E_{2U} = 9.75meV$ $D = 3.5nm$ $d_w = 0.75nm$ $d_b = 1.0nm$	20	89.24	114.6	4.95	12.41	3.03	24.42	0.607
	40	81.34	119.08	4.43	12.45	4.04	32.45	0.662
	60	79.3	121.89	3.82	12.52	4.70	37.54	0.684
$U = 130meV$ $\Delta E_{2U} = 27.61meV$ $D = 4.5nm$ $d_w = 0.75nm$ $d_b = 1.25nm$	20	64.93	85.86	3.32	16.8	4.64	27.62	0.678
	40	60.39	89.62	2.52	17.22	6.71	38.97	0.708
	60	57.26	91.66	2.04	17.62	8.04	46.20	0.732
$U = 130meV$ $\Delta E_{2U} = 10.21meV$ $D = 4nm$ $d_w = 0.75nm$ $d_b = 1.0nm$	20	71.12	92.98	2.77	15.41	4.10	26.61	0.646
	40	68.32	96.94	2.46	15.5	5.27	34.0	0.691
	60	66.11	99.09	2.10	15.61	6.25	40.04	0.709
$U = 100meV$ $\Delta E_{2U} = 14.4meV$ $D = 5nm$ $d_w = 0.75nm$ $d_b = 1.0nm$	20	52.52	68.55	1.77	20.89	5.53	26.47	0.706
	40	50.70	71.88	1.33	20.89	6.22	29.78	0.722
	60	46.75	73.69	1.13	21.68	9.65	44.51	0.736
$U = 100meV$ $\Delta E_{2U} = 6.86meV$ $D = 4.5nm$	20	54.43	72.07	1.36	20.03	5.59	27.91	0.668
	40	52.07	76.62	1.21	20.03	7.64	38.14	0.710
	60	50.08	78.51	1.03	20.31	8.98	44.21	0.721



$d_w = 0.75nm$								
$d_b = 1.0nm$								

При цьому зменшення величини потенціалу  $U$  при всіх фіксованих значеннях  $V_b = |V_w|$  і  $D$  суттєво зміщує смуги поглинання лише в область менших енергій, тобто в область більших довжин хвиль (таблиця 2.2). З рисунка 2.2, а особливо з таблиці 2.2, видно, що збільшення величини  $V$  при різних фіксованих  $U$  і  $D$  суттєво не впливає на положення ( $\lambda$ ) смуги у спектрі, однак значно збільшує її ширину ( $\Delta\lambda$ ) та трохи збільшує середнє значення сил осциляторів  $f_{sa}$ , тобто покращує робочі параметри детектора.

Важливо зазначити, що за фіксованих величин потенціалів  $U$  і  $V_b, V_w$  інтервали змін півширин  $D$  КЯ, в яких каскади детектора можуть функціонувати оптимально, є досить вузькими. Адже розрахунки показують, що збільшення півширини  $D$  за верхню межу робочого інтервалу хоча й приводить до позитивного зростання  $\bar{f}_{sa}$ , однак при цьому значно збільшується величина  $\Delta E_{U2}$ , що погіршує або й практично припиняє тунелювання електронів, а отже й роботу детектора. Зменшення ж півширини  $D$  за межі робочого інтервалу діє навпаки, тобто позитивно зменшує величину  $\Delta E_{U2}$ , однак настільки зменшує середню силу осциляторів  $\bar{f}_{sa}$ , що квантові переходи, зменшуючись, також можуть припинити роботу детектора. Це добре видно з таблиці 2.3, де для прикладу наведено розраховані параметри  $\bar{f}_{sa}$  і  $\Delta E_{U2}$  для каскадів ШКЯ з  $U=160meV$ ,  $V_b = |V_w|=60meV$  при чотирьох значеннях півширин ( $D$ ) квантових ям.

**Таблиця 2.3.**

Залежності від  $D$  параметрів каскадів ШКЯ з  $U=160meV$ ,  $V=60meV$ .

$D(nm)$	3.0	3.5	4.0	4.5
$\Delta E_{sa} (meV)$	0.1	9.75	22.25	40.72
$\bar{f}_{sa}$	0.35	0.684	0.698	0.72

Схожі залежності притаманні й для каскадів ШКЯ з  $U=130\text{meV}$  і  $100\text{meV}$ . Отже, аналіз рисунка 2.2 і таблиці 2.2 засвідчує, що серед усіх досліджуваних каскадів широкопasmових фотодетекторів є такі три, параметри яких виділені тонуванням у таблиці 2.2. Разом вони охоплюють актуальний для наукових і прикладних досліджень широкий інтервал довжин хвиль ( $\lambda \approx 10\mu\text{m} \div 25\mu\text{m}$ ) далекого ІЧ діапазону, володіючи важливими для цих наноприладів великими відношеннями ширин до довжин хвиль ( $\eta \approx 37,54\% - 44,21\%$ ).

## Висновки до розділу 2

Розроблена квантова теорія спектральних параметрів широкопasmових фотодетекторів далекого інфрачервоного діапазону ( $10\mu\text{m} - 25\mu\text{m}$ ), які можуть успішно функціонувати на основі каскадів квантових ям зі складним потенціальним профілем без прикладання постійного зовнішнього електричного поля.

Запропоновано новий просторовий дизайн ШКЯ каскадів детектора, який забезпечує одностороннє тунелювання електронів по всіх його каскадах. Для цього ШКЯ розташовуємо в каскаді так: спочатку проста ШКЯ, потім група ШКЯ з мілкими ямами, розміри ширин яких послідовно збільшуються, а далі група ШКЯ з малими бар'єрами й ширинами, що також послідовно збільшуються. При такому дизайні каскаду величини перших збуджених рівнів у кожній наступній ШКЯ з більшою товщиною внутрішніх ям чи бар'єрів повільно зменшуються, а величини основних рівнів – швидко збільшуються. Унаслідок цього ефекту каскад ШКЯ фотодетектора охоплює значний інтервал далекого ІЧ-діапазону шкали електромагнітного спектра.

Ще однією перевагою запропонованого дизайну каскаду є те, що його квантові ями й бар'єри можуть бути ізотропними матеріалами з близькими розмірами елементарних комірок, що, на відміну від анізотропних матеріалів, позбавляє складові елементи від утворення дислокацій, які суттєво погіршують функціонування детекторів.

На прикладі каскадів з ізотропними складовими квантових ям ( $GaAs$ ,  $Ga_yIn_{1-y}As$ ) і бар'єрів ( $Al_xGa_{1-x}As$ ,  $Al_yGa_{1-y}As$ ) показано, що належний вибір концентрацій ( $x$ ,  $y$ ), а отже величин потенціалів ( $U$ ,  $V_b$ ,  $V_w$ ) та варіація їх розмірів ( $D$ ,  $d$ ), забезпечує як значні сили осциляторів квантових переходів у широких інтервалах довжин хвиль, так і достатні величини тунельного транспорту електронів по всіх каскадах. Отже, запропонований дизайн каскадів ШКЯ зі складним потенціальним рельєфом дозволяє забезпечити успішне функціонування широкосмугових фотодетекторів далекого ІЧ-діапазону.

### РОЗДІЛ 3.

#### **Метод парціального підсумовування діаграм масового оператора в теорії перенормування вироджених і невироджених спектрів багаторівневих квазічастинок взаємодіючих з багатьма одномодовими фононами**

#### **3.1. Складності в розвитку теорії фізичних процесів у мультишарових структурах наноприладів та проблеми математичного апарату квантової теорії поля**

Останнім часом нові фізичні явища у 3D та особливо низьковимірних наноструктурах, пов'язані з ефектами просторового квантування, значною мірою стимулювали інтенсивний розвиток нових теоретичних підходів до вивчення взаємодії квазічастинок (електронів, дірок, екситонів) з різними типами фононів. Усі ці різноманітні взаємодії відіграють важливу роль у формуванні та в температурній еволюції перенормованих спектрів у спостережуваних фізичних явищах.

Загалом протягом останніх двох десятиліть були детально розроблені нові потужні та перспективні методи розрахунку спектрів квазічастинок, перенормованих за рахунок взаємодії з фононами в поляронних моделях (Феймана, Голштейна, Су-Шріфера-Хегера), які мають різні просторові виміри. Прогрес у вирішенні поляронних задач досягнутий завдяки використанню сучасних аналітичних та аналітико-числових методів: точної діагоналізації (ТД) [127], сучасного варіаційного методу (ВМ) [128, 129], динамічної теорії середнього поля (ДТСП) [130], групи перенормування матриці щільності (ГПМЩ) [131, 132], квантового Монте-Карло (КМК) [133–135], діаграмного Монте-Карло (ДМК) [136–140], жирного діаграмного Монте-Карло (ЖДМК) [141–144], апроксимації середнього імпульсу (СІ) [145–149].

Результати, представлені в роботах, де використовувалися ці непертурбаційні методи, виявилися такими, що добре корелюють з різними

моделями структур у яких взаємодія між квазічастинками та фононами важлива в широкому діапазоні їх зв'язку (від слабкого до сильного). У більшості робіт зазвичай розглянуто однозонні моделі для квазічастинок. Проте останнім часом виявлено системи квазічастинок з більш складним спектром [148, 149]. Виникнення інтересу до багаторівневих (багатозонних) квазічастинок, що взаємодіють з фононами, зумовлене бурхливим розвитком фізики наногетероструктур, для яких енергетичний спектр навіть невзаємодіючих квазічастинок є багаторівневим (багатозонним) завдяки ефекту просторового квантування.

Теорія перенормованого енергетичного спектру багатозонних квазічастинок, що взаємодіють з різними фононними модами (обмеженими, інтерфейсними, розповсюджуваними та іншими) [150–153] в наногетероструктурах є цікавою не тільки теоретично, але й має суттєве практичне значення. Хоча багатощарові наноструктури тривалий час використовують як компоненти унікальних сучасних пристроїв (квіпсів (КЯІФів), квантових каскадних лазерів (ККЛ) і детекторів (ККД)), що працюють в актуальному інфрачервоному діапазоні електромагнітних хвиль, послідовна теорія фізичних явищ, які в них відбуваються, ще зовсім неповна.

Добре відомо [154–157], що фонони відіграють важливу позитивну роль у ККД, що функціонують у середньому та далекому ІЧ-діапазоні, оскільки їхні екстрактори працюють у межах так званої повної «фононної драбини». Квантові ями і бар'єри екстракторів мають склад і дизайн таких розмірів, які забезпечують необхідну кількість еквідистантних електронних енергетичних рівнів (з відстанню в одну фононну енергію), що створюють цю «драбину».

Тунелюючий крізь екстрактор електрон здійснює послідовні безвипромінювальні однофононні квантові переходи з верхнього рівня активної області каскаду точно на нижній (основний) рівень активної області наступного каскаду через цю «драбину», що забезпечує успішну роботу ККД.

Описаний механізм дії екстрактора в рамках повної «фононної драбини», який релаксує електронну енергію між активними областями

сусідніх каскадів, не є єдиним. Нещодавно виявилася парадоксальна ситуація: каскади нововироблених і успішно діючих ККД ближнього ІЧ-діапазону [84, 86, 158, 159] функціонують на екстракторах з розірваною «фононною драбиною», де відсутня майже половина нижніх енергетичних рівнів. Детальний огляд і аналіз експериментальних робіт показує, що в деяких ККД, які працюють в інших діапазонах [160, 170], екстрактори, хоча й були недосконалими щодо еквідистантної відстані між рівнями, однак нормально забезпечували роботу приладу.

Незважаючи на виявлені експериментальні парадокси та інші потреби практичної нанофізики, теорія фонон-супровідного тунелювання крізь наногетеросистеми тривалий період розвивалася на основі максимально спрощених моделей в однофононному наближенні [134–136, 145–149]. Та вже за два останні десятиліття з'явилася серія робіт, у яких були розвинені нові потужні методи квантової теорії поля [137–143] для врахування багатофононних процесів у формуванні перенормованих взаємодією спектрів квазічастинок у системах з високотемпературною надпровідністю та у низькорозмірних наногетеросистемах. Тепер ці методи поширюються на мало досліджені, але актуальні багатозонні (багаторівневі) системи квазічастинок взаємодіючих з фононами [142, 143].

Було встановлено, що в теорії електрон-фононної взаємодії навіть при застосуванні універсальної діаграмної техніки Фейнмана у тих випадках, коли необхідно суттєво враховувати багатофононні процеси, наприклад, під час дослідження збуджених гібридних станів системи виникають труднощі, пов'язані зі своєрідним проявом «проблеми знака» [150, 154, 156]. Суть її в тому, що в діаграмній техніці Фейнмана розклад повного масового оператора (МО) квазічастинкової функції Гріна за всіма степенями функцій (чи констант) зв'язку містить знакозмінні, а в загальному випадку комплексні доданки. Ця обставина зобумовлює математичну структуру рядів масового оператора і приводить до того, що для надійного визначення спектра квазічастинок, що взаємодіють з фононами, у такій широкій області енергій, яка містить збуджені

комплекси зв'язаних станів при розрахунку МО недостатньо обмежитися скінченним, хоч і великим числом, перших діаграм, а обов'язково потрібно здійснювати парціальне підсумовування безмежної кількості якщо не всіх, то хоча б основних груп діаграм МО.

Для найпростішої моделі екстрактора з розірваною «фононною драбиною», створеною двома енергетичними рівнями квазічастинки та їх фононними супутниками, у роботах [172, 173] розроблено теорію енергетичного спектра дворівневої локалізованої квазічастинки, що взаємодіє з поляризаційними фононами при  $T=0$  К. За допомогою модифікованого методу діаграмної техніки Фейнмана-Пайнса було показано, що в першому наближенні перенормованого масового оператора (де повністю враховуються лише всі мультиплікативні діаграми) супутникові мінісмуги справді наявні в спектрі.

Далі в цьому розділі розвиваємо узагальнену теорію спектра багаторівневої квазічастинки, перенормованого за рахунок взаємодії з фононами, враховуючи не лише основні мультиплікативні діаграми в масовому операторі, але й діаграми, які послідовно відокремлюються від його не- мультиплікативного блоку. Для тієї ж моделі, що й у [172, 173], буде показано, що перенормований спектр системи, окрім відомих, має не менш важливі нові властивості.

### 3.2. Гамільтоніан системи. Масовий оператор багаторівневої квазічастинкової функції Гріна

Для розрахунку перенормованого спектра системи, яка складається з багаторівневої локалізованої квазічастинки, що взаємодіє з одномодовими поляризаційними фононами, використовуємо гамільтоніан Фреліха, як у [171–173]

$$\hat{H} = \sum_{\mu=1}^{\tau} E_{\mu} a_{\mu}^{+} a_{\mu} + \sum_{\bar{q}} \Omega(\bar{q}) (b_{\bar{q}}^{+} b_{\bar{q}} + \frac{1}{2}) + \sum_q \sum_{\mu_1, \mu_2=1}^{\tau} \varphi_{\mu_1 \mu_2} a_{\mu_1}^{+} a_{\mu_2} (b_{\bar{q}} + b_{-\bar{q}}^{+}) \quad (3.1)$$

Тут  $E_{\mu=1,\dots,\tau}$  – енергетичні рівні незв’язаної квазічастинки. Оскільки енергія оптичного фону зазвичай слабо залежить від його квазіімпульсу ( $\vec{q}$ ), далі покладаємо  $\Omega(\vec{q}) = \Omega$ , нехтуючи дисперсією. Константи зв’язку ( $\varphi_{\mu_1\mu_2}$ ), які описують взаємодію квазічастинок з фононами, вважаються відомими параметрами та характеризують або внутрішньорівневу взаємодію при  $\mu_1 = \mu_2$ , або міжрівневу при  $\mu_1 \neq \mu_2$ .

Зазначимо, що гамільтоніан типу (3.1) може описувати широкий спектр 3D-моделей (наприклад, домішкових центрів) і просторово обмежених 1D- або 2D-моделей низьковимірних структур, які містять багаторівневі локалізовані квазічастинки, що взаємодіють з обмеженими або інтерфейсними фононами.

Перенормований внаслідок взаємодії енергетичний спектр системи при кріогенній температурі (формально  $T = 0\text{K}$ ) отримано в рамках методу діаграмної техніки Фейнмана-Пайнса [173–175] для фур’є-образу квазічастинкової функції Гріна  $G_{\mu\mu'}(\omega)$ . Використовуючи підхід, запропонований у роботах [172, 173], та модифікувавши його для випадку взаємодії квазічастинки (з довільною кількістю ( $\tau$ ) рівнів) з фононами. З урахуванням гамільтоніана (3.1) функції Гріна  $G_{\mu\mu'}(\omega)$  задовольняють систему  $\tau^2$  рівнянь Дайсона

$$G_{\mu\mu'}(\omega) = (\omega - E_{\mu} + i\eta)^{-1} [\delta_{\mu\mu'} + \sum_{\mu_1=1}^{\tau} M_{\mu\mu_1}(\omega) G_{\mu_1\mu'}(\omega)], \quad (3.2)$$

$$\mu, \mu' = 1, 2, \dots, \tau; \quad (\eta \rightarrow 0),$$

де  $M_{\mu\mu'}$  – матриця повного МО і  $E_{\mu=2,\dots,\tau} = E_1 + \Delta E_{\mu=2,\dots,\tau}$ . Цю систему зручно розв’язувати в безрозмірних функціях, змінних і константах:

$$\begin{aligned} g_{\mu}(\xi) = g_{\mu\mu}(\xi) &= \Omega G_{\mu\mu}, & m_{\mu}(\xi) &= M_{\mu\mu} \Omega^{-1}, & m_{\mu\mu}(\xi) &= M_{\mu\mu} \Omega^{-1}, \\ \xi_{\mu_1} &= (\omega - E_{\mu_1}) \Omega^{-1}, & \xi &= (\omega - E_1) \Omega^{-1}, & & (3.3) \\ \alpha_{\mu_1\mu_2} &= \varphi_{\mu_1\mu_2} \Omega^{-1}, & \delta_{\mu=2,\dots,\tau} &= \Delta E_{\mu=2,\dots,\tau} \Omega^{-1}. \end{aligned}$$



Система  $\tau^2$  безрозмірних рівнянь, отримана з (3.2), є громіздкою й тому складною (для великих чисел  $\tau$ ), але розв'язується точно. Для безрозмірної функції Гріна  $\mu$ -го рівня ( $g_\mu(\xi) = g_{\mu\mu}(\xi)$ ) розв'язок визначається рівнянням Дайсона (при  $\hbar = 1$ )

$$g_\mu(\xi) = \{\xi_\mu - m_\mu(\xi)\}^{-1} \quad (3.4)$$

з повним МО  $m_\mu(\xi)$ , який можна записати у формі

$$m_\mu(\xi) = m_{\mu\mu}(\xi) + m_{\mu\mu}^{g(\tau)}(\xi), \quad (3.5)$$

де  $m_{\mu\mu}$  – діагональна складова, яка описує всю внутрішньорівневу взаємодію квазічастинки з фононами, але без урахування недіагональних елементів матриці  $g_{\mu\mu'}(\xi)$ . Компоненти  $m_{\mu\mu}^g$ , створені недіагональними елементами  $g_{\mu\mu'}(\xi)$ , визначаються точно. Вони мають, хоч і громіздку, але досить ясну аналітичну структуру, яка залежить від числа рівнів  $\tau$ . Так, для дворівневої ( $\tau = 2$ ) системи ( $\mu = 1, 2$ ) діагональні елементи задаються простими формулами

$$m_{11}^{g(2)}(\xi) = \frac{m_{12}(\xi)m_{21}(\xi)}{\xi_2 - m_{22}(\xi)}, \quad m_{22}^{g(2)}(\xi) = \frac{m_{21}(\xi)m_{12}(\xi)}{\xi_1 - m_{11}(\xi)}. \quad (3.6)$$

які можна записати компактніше, увівши доцільне позначення

$$\zeta_\mu = \xi_\mu - m_{\mu\mu}(\xi). \quad (\mu = 1, 2). \quad (3.7)$$

Тепер для дворівневої системи отримуємо

$$m_{11}^{g(2)} = m_{12}m_{21}\zeta_2^{-1}, \quad m_{22}^{g(2)} = m_{21}m_{12}\zeta_1^{-1}, \quad (3.8)$$

Для тривірневої ( $\tau = 3$ ) системи (не виписуючи для компактності аргумент  $(\xi)$ ) маємо такі три матричні елементи МО:  $m_{\mu\mu}^{g(3)}$  (тут  $\mu = 1, 2, 3$ )

$$\begin{aligned} m_{11}^{g(3)} &= (m_{12}^2\zeta_3 + m_{13}^2\zeta_2 + 2m_{12}m_{23}m_{31})(\zeta_2\zeta_3 - m_{23}m_{32})^{-1}, \\ m_{22}^{g(3)} &= (m_{23}^2\zeta_1 + m_{21}^2\zeta_3 + 2m_{23}m_{31}m_{12})(\zeta_3\zeta_1 - m_{31}m_{23})^{-1}, \\ m_{33}^{g(3)} &= (m_{31}^2\zeta_2 + m_{32}^2\zeta_1 + 2m_{31}m_{12}m_{23})(\zeta_3\zeta_2 - m_{12}m_{21})^{-1}. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Як видно з попередніх формул (3.7) і (3.8), матричні елементи  $m_{\mu\mu}^{g(\tau)}$  отримуємо з  $m_{11}^{g(3)}$  циклічними перестановками індексів  $\mu = 1, 2, \dots, \tau$ , тому далі запишемо лише  $m_{11}^{g(4)}$  для системи з чотирма рівнями ( $\tau=4$ )

$$\begin{aligned}
m_{11}^{g(4)} = & \{m_{12}^2(\zeta_3\zeta_4 - m_{34}^2) + m_{13}^2(\zeta_2\zeta_4 - m_{24}^2) + m_{14}^2(\zeta_2\zeta_3 - m_{23}^2) + \\
& + 2[m_{12}m_{13}(m_{23}\zeta_4 + m_{24}m_{34}) + m_{12}m_{14}(m_{24}\zeta_3 + m_{23}m_{43}) + \\
& + m_{13}m_{14}(m_{34}\zeta_2 + m_{32}m_{42})]\} \times \\
& \times (\zeta_2\zeta_3\zeta_4 - m_{23}^2\zeta_4 - m_{34}^2\zeta_2 - m_{42}^2\zeta_3 - 2m_{23}m_{34}m_{42})^{-1},
\end{aligned} \tag{3.10}$$

та лише матричний елемент  $m_{11}^{g(\tau)}$  для системи з  $\tau=5$

$$\begin{aligned}
m_{11}^{g(5)} = & \{m_{12}^2(\zeta_3\zeta_4\zeta_5 - m_{34}^2\zeta_5 - m_{45}^2\zeta_3 - m_{53}^2\zeta_4 - 2m_{34}m_{45}m_{53}) + \\
& + m_{13}^2(\zeta_2\zeta_4\zeta_5 - m_{24}^2\zeta_5 - m_{45}^2\zeta_2 - m_{52}^2\zeta_4 - 2m_{24}m_{45}m_{52}) + \\
& + m_{14}^2(\zeta_2\zeta_3\zeta_5 - m_{23}^2\zeta_5 - m_{35}^2\zeta_2 - m_{52}^2\zeta_3 - 2m_{23}m_{35}m_{52}) + \\
& + m_{15}^2(\zeta_2\zeta_3\zeta_4 - m_{23}^2\zeta_4 - m_{34}^2\zeta_2 - m_{42}^2\zeta_3 - 2m_{23}m_{34}m_{42}) + \\
& + 2m_{12}m_{13}[m_{23}(\zeta_4\zeta_5 - m_{45}^2) + m_{24}m_{34}\zeta_5 + m_{25}m_{35}\zeta_4 + m_{45}(m_{25}m_{34} + m_{24}m_{35})] + \\
& + 2m_{12}m_{14}[m_{24}(\zeta_3\zeta_5 - m_{35}^2) + m_{23}m_{43}\zeta_5 + m_{25}m_{45}\zeta_3 + m_{35}(m_{25}m_{43} + m_{23}m_{45})] + \\
& + 2m_{12}m_{15}[m_{25}(\zeta_3\zeta_4 - m_{34}^2) + m_{23}m_{53}\zeta_4 + m_{24}m_{54}\zeta_3 + m_{34}(m_{24}m_{53} + m_{23}m_{54})] + \\
& + 2m_{13}m_{14}[m_{34}(\zeta_2\zeta_5 - m_{25}^2) + m_{32}m_{42}\zeta_5 + m_{35}m_{45}\zeta_2 + m_{25}(m_{35}m_{42} + m_{32}m_{45})] + \\
& + 2m_{13}m_{15}[m_{35}(\zeta_2\zeta_4 - m_{24}^2) + m_{32}m_{52}\zeta_4 + m_{34}m_{54}\zeta_2 + m_{24}(m_{34}m_{52} + m_{32}m_{54})] + \\
& + 2m_{14}m_{15}[m_{45}(\zeta_2\zeta_3 - m_{23}^2) + m_{42}m_{52}\zeta_3 + m_{43}m_{53}\zeta_2 + m_{23}(m_{43}m_{52} + m_{42}m_{53})]\} \times \\
& \times \{\zeta_2\zeta_3\zeta_4\zeta_5 - m_{23}^2\zeta_4\zeta_5 - m_{24}^2\zeta_3\zeta_5 - m_{25}^2\zeta_3\zeta_4 - m_{34}^2\zeta_2\zeta_5 - m_{35}^2\zeta_2\zeta_4 - m_{45}^2\zeta_2\zeta_3 - \\
& 2[m_{23}m_{34}(m_{24}\zeta_5 + m_{25}m_{45}) + m_{24}m_{45}(m_{25}\zeta_3 + m_{23}m_{53}) + m_{25}m_{53} \times \\
& \times (m_{32}\zeta_4 + m_{24}m_{34}) + m_{34}m_{45}m_{53}\zeta_2] + m_{23}^2m_{45}^2 + m_{24}^2m_{53}^2 + m_{25}^2m_{34}^2\}^{-1}.
\end{aligned} \tag{3.11}$$

Матрицю повного МО визначаємо правилами діаграмної техніки Фейнмана-Пайнса, які узагальнені на випадок багаторівневих систем. Через те, що енергії квазічастинок і фононів не мають дисперсії, еквівалентні діаграми з перетинами фононних ліній та без них відповідають тотожним аналітичним виразам, наприклад:

$$\begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \end{array} \xrightarrow[1]{\mu} \xrightarrow[2]{\mu_1} \xrightarrow[1]{\mu_2} \xrightarrow[\mu']{\mu_3} \equiv \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \end{array} \xrightarrow[1]{\mu} \xrightarrow[2]{\mu_1} \xrightarrow[1]{\mu_2} \xrightarrow[\mu']{\mu_3} \quad (3.12)$$

Таким чином, на відміну від класичного однозонного гамільтоніана Фреліха [173, 175], де енергія невзаємодіючої квазічастинки є функцією квазіімпульсу, безрозмірний МО  $m_{\mu\mu'}$  отримуємо в компактнішому діаграмному зображенні, яке містить лише всі нееквівалентні діаграми без перетину фононних ліній. Кількість еквівалентних діаграм цього типу визначається цілими числами перед відповідним класом діаграм і має такий діаграмний вигляд:

$$\begin{aligned} m_{\mu\mu'}(\xi) = & \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \end{array} \xrightarrow[\mu]{\mu_1} \xrightarrow[\mu']{\mu'} = \left[ \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \end{array} \xrightarrow[1]{\mu_1} \xrightarrow[\mu']{\mu'} \right] + \\ & + 2! \left[ \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \end{array} \xrightarrow[1]{\mu} \xrightarrow[2]{\mu_1} \xrightarrow[1]{\mu_2} \xrightarrow[\mu']{\mu_3} + 2 \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \end{array} \xrightarrow[1]{\mu} \xrightarrow[2]{\mu_1} \xrightarrow[2]{\mu_2} \xrightarrow[1]{\mu_3} \xrightarrow[1]{\mu_4} \xrightarrow[\mu']{\mu_5} + 2^2 \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \end{array} \xrightarrow[1]{\mu} \xrightarrow[2]{\mu_1} \xrightarrow[1]{\mu_2} \xrightarrow[2]{\mu_3} \xrightarrow[1]{\mu_4} \xrightarrow[2]{\mu_5} \xrightarrow[1]{\mu_6} \xrightarrow[1]{\mu_7} \xrightarrow[\mu']{\mu_8} + 2^3 \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \end{array} \xrightarrow[1]{\mu} \xrightarrow[2]{\mu_1} \xrightarrow[1]{\mu_2} \xrightarrow[2]{\mu_3} \xrightarrow[1]{\mu_4} \xrightarrow[2]{\mu_5} \xrightarrow[1]{\mu_6} \xrightarrow[2]{\mu_7} \xrightarrow[1]{\mu_8} \xrightarrow[1]{\mu_9} \xrightarrow[\mu']{\mu_{10}} + \dots \right] \\ & + 3! \left[ \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \end{array} \xrightarrow[1]{\mu} \xrightarrow[2]{\mu_1} \xrightarrow[3]{\mu_2} \xrightarrow[2]{\mu_3} \xrightarrow[1]{\mu_4} \xrightarrow[\mu']{\mu_5} + 2^2 \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \end{array} \xrightarrow[1]{\mu} \xrightarrow[2]{\mu_1} \xrightarrow[1]{\mu_2} \xrightarrow[3]{\mu_3} \xrightarrow[2]{\mu_4} \xrightarrow[1]{\mu_5} \xrightarrow[1]{\mu_6} \xrightarrow[\mu']{\mu_7} + 2^2 \cdot 3 \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \end{array} \xrightarrow[1]{\mu} \xrightarrow[2]{\mu_1} \xrightarrow[1]{\mu_2} \xrightarrow[3]{\mu_3} \xrightarrow[2]{\mu_4} \xrightarrow[1]{\mu_5} \xrightarrow[2]{\mu_6} \xrightarrow[1]{\mu_7} \xrightarrow[2]{\mu_8} \xrightarrow[1]{\mu_9} \xrightarrow[\mu']{\mu_{10}} + \dots \right. \\ & \left. + 3 \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \end{array} \xrightarrow[1]{\mu} \xrightarrow[2]{\mu_1} \xrightarrow[3]{\mu_2} \xrightarrow[2]{\mu_3} \xrightarrow[3]{\mu_4} \xrightarrow[2]{\mu_5} \xrightarrow[1]{\mu_6} \xrightarrow[\mu']{\mu_7} + 3^2 \cdot 2 \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \end{array} \xrightarrow[1]{\mu} \xrightarrow[2]{\mu_1} \xrightarrow[3]{\mu_2} \xrightarrow[2]{\mu_3} \xrightarrow[1]{\mu_4} \xrightarrow[2]{\mu_5} \xrightarrow[3]{\mu_6} \xrightarrow[2]{\mu_7} \xrightarrow[1]{\mu_8} \xrightarrow[\mu']{\mu_9} + \dots \right. \\ & \left. + 3^2 \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \end{array} \xrightarrow[1]{\mu} \xrightarrow[2]{\mu_1} \xrightarrow[3]{\mu_2} \xrightarrow[2]{\mu_3} \xrightarrow[3]{\mu_4} \xrightarrow[2]{\mu_5} \xrightarrow[3]{\mu_6} \xrightarrow[2]{\mu_7} \xrightarrow[1]{\mu_8} \xrightarrow[\mu']{\mu_9} + \dots \right] \\ & + 4! \left[ \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \end{array} \xrightarrow[1]{\mu} \xrightarrow[2]{\mu_1} \xrightarrow[3]{\mu_2} \xrightarrow[4]{\mu_3} \xrightarrow[3]{\mu_4} \xrightarrow[2]{\mu_5} \xrightarrow[1]{\mu_6} \xrightarrow[\mu']{\mu_7} + 2^2 \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \end{array} \xrightarrow[1]{\mu} \xrightarrow[2]{\mu_1} \xrightarrow[3]{\mu_2} \xrightarrow[2]{\mu_3} \xrightarrow[4]{\mu_4} \xrightarrow[3]{\mu_5} \xrightarrow[2]{\mu_6} \xrightarrow[1]{\mu_7} \xrightarrow[\mu']{\mu_8} \xrightarrow[\mu']{\mu_9} + \dots \right] \\ & + \dots \quad (3.13) \end{aligned}$$

Усі діаграми МО в довільному р-му порядку за степенем пар констант зв'язку, які збігаються з кількістю фононних ліній на відповідній діаграмі, однозначно обчислює комп'ютерна програма. Далі буде відображено, що для

встановлення точних правил парціального підсумовування нескінченних рядів діаграм довільних класів цілком достатньо врахувати всі перші 128 нееквівалентних діаграм до восьмого порядку включно.

Аналітичний вираз для довільної діаграми отримуємо як суму за всіма внутрішніми індексами  $(\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_N)$ , крім зовнішніх  $(\mu, \mu')$ , добутків усіх вершин і суцільних ліній.

$$\frac{\text{---} \overset{\text{---}}{\curvearrowright} \text{---}}{\mu_l \mu_{l+1}} \equiv \frac{\text{---} \overset{\text{---}}{\curvearrowright} \text{---}}{\mu_l \mu_{l+1}} = \alpha_{\mu_l \mu_{l+1}}; \quad \text{---} \overset{p}{\text{---}} = (\xi_{\mu_l} - p)^{-1}, \quad (3.14)$$

де  $p$  – кількість штрихових (фононних) ліній, розташованих над суцільною (квазічастинковою) лінією з індексом  $\mu_l$ . Наприклад, перші два компоненти  $m_{\mu\mu'}$  мають такі діаграмні та аналітичні форми:

$$m_{\mu\mu'}^{(1)}(\xi) = \frac{\text{---} \overset{1}{\text{---}} \text{---}}{\mu \mu_1 \mu'} = \sum_{\mu_1=1}^{\tau} \frac{\alpha_{\mu\mu_1} \alpha_{\mu_1\mu'}}{\xi_{\mu_1} - 1}, \quad (3.15)$$

$$m_{\mu\mu'}^{(2)}(\xi) = \frac{\text{---} \overset{1}{\text{---}} \overset{2}{\text{---}} \overset{1}{\text{---}} \text{---}}{\mu \mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu'} = \sum_{\mu_1, \mu_2, \mu_3=1}^{\tau} \frac{\alpha_{\mu\mu_1} \alpha_{\mu_1\mu_2} \alpha_{\mu_2\mu_3} \alpha_{\mu_3\mu'}}{(\xi_{\mu_1} - 1)(\xi_{\mu_2} - 2)(\xi_{\mu_3} - 1)}. \quad (3.16)$$

Розрахунок перенормованого спектра системи в широкому діапазоні енергій вимагає, щоб у ньому містився не тільки основний рівень, але й рівні збуджених станів, які виникають в околах порогів випромінювання фононів. Таким чином, повний МО (3.13) необхідно представити у вигляді, який ефективно враховує як міжрівневу взаємодію, так і багатофононні процеси. Однак класична форма представлення МО (3.13) не відповідає другій умові, зокрема, через так звану «проблему знака». Для її вирішення необхідно здійснити послідовне парціальне підсумовування нескінченних рядів діаграм у повному МО.

### 3.3. Метод послідовного парціального підсумовування діаграм МО

Для виконання парціального підсумовування діаграм у повному МО  $m_{\mu\mu'}$  зручно згрупувати їх у класи, які записані у прямих дужках МО (3.13).

Зрозуміло, що р-й клас перенормованих діаграм (крім першого) разом із множителем  $p!$  містить нескінченну кількість тільки тих діаграм (разом з числовими множниками), довільні блоки яких, зі свого боку містять не більше  $p$  штрихових ліній над будь-якою з суцільних. Цей клас діаграм далі називаємо перенормованим р-фононним МО і позначаємо як  $m_{\mu\mu'}^{[p]}$ . Варто зазначити, що, як видно з (3.13), тільки однофононна діаграма (3.15) у своєму першому класі часткових р-фононних діаграм є єдиною  $m_{\mu\mu'}^{[1]} = m_{\mu\mu'}^{(1)}$ , оскільки всі інші класи перенормованого МО ( $m_{\mu\mu'}^{[p \geq 2]}$ ) задані відповідними нескінченними рядами діаграм. Так перенормований двофононний МО має вигляд безмежного діаграмного ряду

$$m_{\mu\mu'}^{[2]}(\xi) = 2! \left[ \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \overbrace{\mu \mu_1 \mu_2 \mu_3}^{1 \ 2 \ 1} \mu' \\ \text{---} \end{array} + 2 \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \overbrace{\mu \mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4 \mu_5}^{(1) \ (2) \ 1 \ (2) \ 1} \mu' \\ \text{---} \end{array} + 2^2 \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \overbrace{\mu \mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4 \mu_5 \mu_6 \mu_7}^{(1) \ (2) \ 1 \ (2) \ 1 \ (2) \ 1} \mu' \\ \text{---} \end{array} + \dots \right] \quad (3.17)$$

Парціальний трьохфононний МО має вигляд безмежного діаграмного ряду

$$m_{\mu\mu'}^{[3]}(\xi) = +3! \left[ \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \overbrace{\mu \mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4 \mu_5}^{1 \ 2 \ (3) \ 2 \ 1} \mu' \\ \text{---} \end{array} + 2^2 \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \overbrace{\mu \mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4 \mu_5 \mu_6 \mu_7}^{(1) \ (2) \ 1 \ (2) \ (3) \ 2 \ 1} \mu' \\ \text{---} \end{array} + 2^2 \cdot 3 \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \overbrace{\mu \mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4 \mu_6 \mu_5 \mu_7 \mu_8 \mu_9}^{(1) \ (2) \ 1 \ (2) \ (3) \ 2 \ 1 \ (2) \ 1} \mu' \\ \text{---} \end{array} + \dots \\ + 3 \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \overbrace{\mu \mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4 \mu_5 \mu_6 \mu_7}^{1 \ 2 \ (3) \ 2 \ (3) \ 2 \ 1} \mu' \\ \text{---} \end{array} + 3^2 \cdot 2 \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \overbrace{\mu \mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4 \mu_5 \mu_6 \mu_7 \mu_8 \mu_9}^{(1) \ (2) \ (3) \ 2 \ 1 \ (2) \ (3) \ 2 \ 1} \mu' \\ \text{---} \end{array} + \dots \\ + 3^2 \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \overbrace{\mu \mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4 \mu_5 \mu_6 \mu_8 \mu_7 \mu_9}^{(1) \ (2) \ (3) \ 2 \ (3) \ 2 \ (3) \ 2 \ 1} \mu' \\ \text{---} \end{array} + \dots \end{array} \right] \quad (3.18)$$

Тепер повний МО  $m_{\mu\mu'}$  можна записати як суму парціальних МО  $m_{\mu\mu'}^{[p]}$ , всіх порядків

$$m_{\mu\mu'}(\xi) = \sum_{p=1}^{\infty} m_{\mu\mu'}^{[p]}(\xi). \quad (3.19)$$

Оскільки в кожній діаграмі МО аналітичні внески її елементів підсумовуємо за всіма індексами  $\mu_\ell$ , жоден з них у загальному вигляді не є мультиплікативним. Однак аналітичні вирази показують, що кожна діаграма може бути виражена як сума двох складових: мультиплікативної ( $m$ ) і немультіплікативної ( $nm$ ). Для цього в будь-якій діаграмі, в якій підсумовування виконується за всіма внутрішніми індексами (наприклад,  $\mu_1, \mu_2, \mu_3$  на першій діаграмі (3.17)), потрібно виділяти мультиплікативну складову з певними співпадаючими індексами (наприклад,  $\mu_1, \mu_2$ , при  $\mu_3 = \mu_1$ ), де підсумовування виконується тільки за індексами  $\mu_1, \mu_2$ , а в немультіплікативній складовій з індексами ( $\mu_1, \mu_2, \mu_3 \neq \mu_1$ ), сумування виконується за всіма цими індексами. У цьому підході неперенормований МО другого порядку за кількістю фононних ліній можна подати в таких діаграмних та аналітичних формах

$$\begin{aligned}
 m_{\mu\mu'}^{[2]}(\xi) &= \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \mu \quad \mu_1 \quad \mu_2 \quad \mu_3 \quad \mu' \end{array} = m_{\mu\mu'}^{(2,m)}(\xi) + m_{\mu\mu'}^{(2,nm)}(\xi) = \\
 &= \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \mu \quad \mu_1 \quad \mu_2 \quad \mu_1 \quad \mu' \end{array} + \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \mu \quad \mu_1 \quad \mu_2 \quad \mu_3 \neq \mu_1 \quad \mu' \end{array} = \quad (3.20) \\
 &= \sum_{\mu_1=1}^{\tau} \frac{\alpha_{\mu\mu_1} m_{\mu_1\mu_1}^{(1)} (\xi-1) \alpha_{\mu_1\mu'}}{(\xi_{\mu_1}-1)^2} + \sum_{\mu_1=1}^{\tau} \frac{\alpha_{\mu\mu_1}}{\xi_{\mu_1}-1} \sum_{\mu_3 \neq \mu_1}^{\tau} \frac{m_{\mu_1\mu_3}^{(1)} (\xi-1) \alpha_{\mu_3\mu'}}{\xi_{\mu_3}-1}.
 \end{aligned}$$

Масовий оператор третього порядку  $m_{\mu\mu'}^{[3]}(\xi)$  можна подати так:

$$\begin{aligned}
 m_{\mu\mu'}^{[3]}(\xi) &= \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \mu \quad \mu_1 \quad \mu_2 \quad \mu_3 \quad \mu_4 \quad \mu_5 \quad \mu' \end{array} = m_{\mu\mu'}^{(3,m)}(\xi) + m_{\mu\mu'}^{(3,nm)}(\xi) = \\
 &= \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \mu \quad \mu_1 \quad \mu_2 \quad \mu_3 \quad \mu_2 \quad \mu_1 \quad \mu' \end{array} + \left[ \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \mu \quad \mu_1 \quad \mu_2 \quad \mu_3 \quad \mu_2 \quad \mu_5 \neq \mu_1 \quad \mu' \end{array} + \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \mu \quad \mu_1 \quad \mu_2 \quad \mu_3 \quad \mu_4 \neq \mu_2 \quad \mu_5 \quad \mu' \end{array} \right] = \\
 &= \sum_{\mu_1, \mu_2=1}^{\tau} \frac{\alpha_{\mu\mu_1} \alpha_{\mu_1\mu_2} m_{\mu_2\mu_2}^{(1)} (\xi-2) \alpha_{\mu_2\mu_1} \alpha_{\mu_1\mu'}}{(\xi_{\mu_1}-1)^2 (\xi_{\mu_2}-2)^2} +
 \end{aligned}$$

$$\left[ \sum_{\substack{\mu_1, \mu_2, \\ \mu_5 \neq \mu_1}}^{\tau} \frac{\alpha_{\mu\mu_1} \alpha_{\mu_1\mu_2} m_{\mu_2\mu_2}^{(1)} (\xi - 2) \alpha_{\mu_2\mu_5} \alpha_{\mu_5\mu'}}{(\xi_{\mu_1} - 1)(\xi_{\mu_2} - 2)^2 (\xi_{\mu_5} - 1)} + \right. \\ \left. + \sum_{\substack{\mu_1, \mu_2, \mu_5, \\ \mu_4 \neq \mu_2}}^{\tau} \frac{\alpha_{\mu\mu_1} \alpha_{\mu_1\mu_2} m_{\mu_2\mu_2}^{(1)} (\xi - 2) \alpha_{\mu_4\mu_5} \alpha_{\mu_5\mu'}}{(\xi_{\mu_1} - 1)(\xi_{\mu_2} - 2)(\xi_{\mu_4} - 2)(\xi_{\mu_5} - 1)} \right]. \quad (3.21)$$

Розділивши в повному МО (3.19) всі діаграми всіх порядків на  $m$ - і  $nm$ -класи і враховуючи, що однофононний МО  $m_{\mu\mu'}^{(1)}(\xi)$  належить до  $m$ -класу діаграм, повний МО (3.19) можна записати у вигляді суми двох складових

$$m_{\mu\mu'}^{(1)}(\xi) = m_{\mu\mu'}^{1,m}(\xi) + m_{\mu\mu'}^{2,nm}(\xi) = \sum_{p=1}^{\infty} m_{\mu\mu'}^{p,[m]}(\xi) + \sum_{p=2}^{\infty} m_{\mu\mu'}^{p,[nm]}(\xi). \quad (3.22)$$

Перший компонент МО ( $m_{\mu\mu'}^{1,m}(\xi)$ ) містить однофононну діаграму, перенормовану всіма  $m$ -діаграмами всіх порядків, а другий ( $m_{\mu\mu'}^{2,nm}(\xi)$ ) – решту  $nm$ -діаграм усіх порядків, починаючи з другого, у яких далі слід послідовно виділяти інші класи  $m$ - і  $nm$ -діаграми вищих порядків за степенями констант зв'язку (фононних ліній). Мультиплікативна структура всіх доданків у МО  $m_{\mu\mu'}^{1,m}(\xi)$  дає можливість виконати повне точне парціальне підсумовування. Для дворівневої ( $\tau=2$ ) системи така процедура була виконана в роботах [172, 173], а узагальнення на випадок довільної кількості рівнів ( $\tau$ ) здійснюємо так.

Повне парціальне підсумовування всіх діаграм МО  $m_{\mu\mu'}^{1,[m]}(\xi)$  виконуємо шляхом послідовного перенормування енергетичних знаменників його складових нижчого порядку внесками усіх  $m$ -діаграм наступного вищого порядку.

Користуючись мультиплікативною структурою і правилами звичайної діаграмної техніки, перший етап перенормування МО  $m_{\mu\mu'}^{1,m}(\xi)$  усіма лише двофононними  $m$  діаграмами виконуємо так:

$$\begin{aligned}
& m_{\mu\mu'}^{[1,m]}(\xi) + m_{\mu\mu'}^{[2,m]}(\xi) = \\
& \begin{array}{c} \text{Diagram 1: } \mu \xrightarrow{\text{dashed arc } 2} \mu' \\ \text{Diagram 2: } \mu \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu' \\ \text{Diagram 3: } \mu \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_1 \xrightarrow{\text{dashed arc } 2} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu' \\ \text{Diagram 4: } \mu \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_1 \xrightarrow{\text{dashed arc } 2} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_1 \xrightarrow{\text{dashed arc } 2} \mu' \\ \text{Diagram 5: } \mu \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_1 \xrightarrow{\text{dashed arc } 2} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu' \end{array} + \dots = \\
& = \begin{array}{c} \text{Diagram 6: } \mu \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu' \\ \text{Diagram 7: } \mu \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_1 \xrightarrow{\text{dashed arc } 2} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu' \\ \text{Diagram 8: } \mu \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_1 \xrightarrow{\text{dashed arc } 2} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu' \end{array} \left[ 1 + \left( 2 \cdot \frac{1}{\mu_1} \xrightarrow{\text{dashed arc } 2} \mu_2 \right)^1 + \left( 2 \cdot \frac{1}{\mu_1} \xrightarrow{\text{dashed arc } 2} \mu_2 \right)^2 + \dots \right] = \\
& = \begin{array}{c} \text{Diagram 9: } \mu \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu' \\ \text{Diagram 10: } \mu \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_1 \xrightarrow{\text{dashed arc } 2} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu' \end{array} \left\{ 1 - 2 \cdot \frac{1}{\mu_1} \xrightarrow{\text{dashed arc } 2} \mu_2 \right\}^{-1} = \sum_{\mu_1=1}^{\tau} \frac{\alpha_{\mu\mu_1} \alpha_{\mu_1\mu'}}{\xi_{\mu_1} - 1 - 2 \sum_{\mu_2=1}^{\tau} \frac{\alpha_{\mu_1\mu_2} \alpha_{\mu_2\mu_1}}{\xi_{\mu_2} - 2}}. \quad (3.23)
\end{aligned}$$

На наступному (другому) етапі перенормування, у кожній з безмежного ряду  $m$ -діаграм (3.23), потрібно здійснити перенормування відповідним безмежним рядом трифононних діаграм. Так перший доданок двофононних  $m$ -діаграм перенормуємо безмежним рядом трьохфононних  $m$ -діаграм:

$$\begin{aligned}
& 2 \cdot \begin{array}{c} \text{Diagram 11: } \mu \xrightarrow{\text{dashed arc } 3} \mu' \\ \text{Diagram 12: } \mu \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_1 \xrightarrow{\text{dashed arc } 2} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu' \\ \text{Diagram 13: } \mu \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_1 \xrightarrow{\text{dashed arc } 2} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_1 \xrightarrow{\text{dashed arc } 2} \mu' \\ \text{Diagram 14: } \mu \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_1 \xrightarrow{\text{dashed arc } 2} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu' \end{array} = 2 \cdot \begin{array}{c} \text{Diagram 15: } \mu \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_1 \xrightarrow{\text{dashed arc } 2} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu' \\ \text{Diagram 16: } \mu \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_1 \xrightarrow{\text{dashed arc } 2} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu' \end{array} \left[ 1 + \left( 3 \cdot \frac{2}{\mu_2} \xrightarrow{\text{dashed arc } 3} \mu_3 \right)^1 + \left( 3 \cdot \frac{2}{\mu_2} \xrightarrow{\text{dashed arc } 3} \mu_3 \right)^2 + \dots \right] = \\
& = 2 \cdot \begin{array}{c} \text{Diagram 17: } \mu \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_1 \xrightarrow{\text{dashed arc } 2} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu' \\ \text{Diagram 18: } \mu \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_1 \xrightarrow{\text{dashed arc } 2} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu' \end{array} \left\{ 1 - 3 \cdot \frac{2}{\mu_2} \xrightarrow{\text{dashed arc } 3} \mu_3 \right\}^{-1} \\
& = \sum_{\mu_1=1}^{\tau} \frac{\alpha_{\mu\mu_1} \alpha_{\mu_1\mu'}}{\xi_{\mu_1} - 1} \left[ \frac{2}{\xi_{\mu_1} - 1} \sum_{\mu_2=1}^{\tau} \frac{\alpha_{\mu_1\mu_2} \alpha_{\mu_2\mu_1}}{\xi_{\mu_2} - 2 - 3 \sum_{\mu_3=1}^{\tau} \frac{\alpha_{\mu_2\mu_3} \alpha_{\mu_3\mu_2}}{\xi_{\mu_3} - 3}} \right]. \quad (3.24)
\end{aligned}$$

Другий доданок двофононних  $m$ -діаграм перенормуємо наступним безмежним рядом трифононних  $m$ -діаграм

$$\begin{aligned}
& 2^2 \cdot \begin{array}{c} \text{Diagram 19: } \mu \xrightarrow{\text{dashed arc } 3} \mu_1 \xrightarrow{\text{dashed arc } 3} \mu' \\ \text{Diagram 20: } \mu \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_1 \xrightarrow{\text{dashed arc } 2} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu' \\ \text{Diagram 21: } \mu \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_1 \xrightarrow{\text{dashed arc } 2} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu' \\ \text{Diagram 22: } \mu \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_1 \xrightarrow{\text{dashed arc } 2} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu' \end{array} = 2^2 \left[ \begin{array}{c} \text{Diagram 23: } \mu \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_1 \xrightarrow{\text{dashed arc } 2} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu' \\ \text{Diagram 24: } \mu \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_1 \xrightarrow{\text{dashed arc } 2} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu' \\ \text{Diagram 25: } \mu \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_1 \xrightarrow{\text{dashed arc } 2} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu' \end{array} + 2 \cdot 3 \cdot \begin{array}{c} \text{Diagram 26: } \mu \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_1 \xrightarrow{\text{dashed arc } 2} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu' \\ \text{Diagram 27: } \mu \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_1 \xrightarrow{\text{dashed arc } 2} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu' \end{array} + 3^3 \cdot \begin{array}{c} \text{Diagram 28: } \mu \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_1 \xrightarrow{\text{dashed arc } 2} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu' \\ \text{Diagram 29: } \mu \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_1 \xrightarrow{\text{dashed arc } 2} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu' \end{array} + \dots \right] = \\
& = 2^2 \cdot \begin{array}{c} \text{Diagram 30: } \mu \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_1 \xrightarrow{\text{dashed arc } 2} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu' \\ \text{Diagram 31: } \mu \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_1 \xrightarrow{\text{dashed arc } 2} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu' \end{array} \left[ 1 + 2 \cdot \left( 3 \cdot \frac{2}{\mu_2} \xrightarrow{\text{dashed arc } 3} \mu_3 \right)^1 + 3 \cdot \left( 3 \cdot \frac{2}{\mu_2} \xrightarrow{\text{dashed arc } 3} \mu_3 \right)^2 + \dots \right] = \\
& = 2^2 \cdot \begin{array}{c} \text{Diagram 32: } \mu \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_1 \xrightarrow{\text{dashed arc } 2} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu' \\ \text{Diagram 33: } \mu \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_1 \xrightarrow{\text{dashed arc } 2} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu_2 \xrightarrow{\text{dashed arc } 1} \mu' \end{array} \left\{ 1 - 3 \cdot \frac{2}{\mu_2} \xrightarrow{\text{dashed arc } 3} \mu_3 \right\}^{-2} \quad (3.25)
\end{aligned}$$



$$= 3 \sum_{\mu_1=1}^{\tau} \frac{\alpha_{\mu\mu_1} \alpha_{\mu_1\mu'}}{\xi^{\mu_1} - 1} \left[ \frac{2}{\xi^{\mu_1} - 1} \sum_{\mu_2=1}^{\tau} \frac{\alpha_{\mu_1\mu_2} \alpha_{\mu_2\mu_1}}{\xi^{\mu_2} - 2} - 3 \sum_{\mu_3=1}^{\tau} \frac{\alpha_{\mu_2\mu_3} \alpha_{\mu_3\mu_2}}{\xi^{\mu_3} - 3} \right]^2.$$

Подібним способом перенормуємо всі дво- і трифононні мультиплікативні діаграми так, що з урахуванням однофононного МО отримуємо

$$\begin{aligned} m_{\mu\mu'}^{[1,m]}(\xi) + m_{\mu\mu'}^{[2,m]}(\xi) + m_{\mu\mu'}^{[3,m]}(\xi) &= \text{diagram 1} + 2 \cdot \text{diagram 2} + \\ &+ 2^2 \cdot \text{diagram 3} + 2^3 \cdot \text{diagram 4} + \dots = \text{diagram 5} \cdot \left\{ 1 - 2 \cdot \frac{1}{\xi^{\mu_1} - 2} \cdot \frac{1}{\xi^{\mu_2} - 3} \right\}^{-1} \\ &= \sum_{\mu_1=1}^{\tau} \frac{\alpha_{\mu\mu_1} \alpha_{\mu_1\mu'}}{\xi^{\mu_1} - 1 - 2 \sum_{\mu_2=1}^{\tau} \frac{\alpha_{\mu_1\mu_2} \alpha_{\mu_2\mu_1}}{\xi^{\mu_2} - 2} - 3 \sum_{\mu_3=1}^{\tau} \frac{\alpha_{\mu_2\mu_3} \alpha_{\mu_3\mu_2}}{\xi^{\mu_3} - 3}}. \end{aligned} \quad (3.26)$$

У результаті перенормованій усіма  $m$ -діаграмами МО в першому наближенні  $m_{\mu\mu'}^{1,m}(\xi)$  отримуємо у вигляді нескінченного розгалуженого ланцюгового дробу

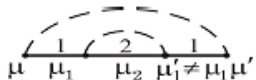
$$m_{\mu\mu'}^{1,m}(\xi) =: \text{diagram 6} = \sum_{\mu_1=1}^{\tau} \frac{\alpha_{\mu\mu_1} \alpha_{\mu_1\mu'}}{\xi^{\mu_1} - 1 - \dots - \sum_{\mu_2=1}^{\tau} \frac{2\alpha_{\mu_1\mu_2} \alpha_{\mu_2\mu_1}}{\xi^{\mu_2} - 2} - \dots - \sum_{\mu_p=1}^{\tau} \frac{p\alpha_{\mu_{p-1}\mu_p} \alpha_{\mu_p\mu_{p-1}}}{\xi^{\mu_p} - p} - \dots}. \quad (3.27)$$

Для подальших розрахунків останній вираз доцільно представити у вигляді тотожного функціонального рівняння

$$m_{\mu\mu'}^{1,m}(\xi) = \sum_{\mu_1=1}^{\tau} \frac{\alpha_{\mu\mu_1} \alpha_{\mu_1\mu'}}{\xi^{\mu_1} - 1 - m_{\mu_1\mu_1}^{2,m}(\xi)}. \quad (3.28)$$

Отже, для довільного  $p = 1, 2, \dots, \infty$  справедливе співвідношення:

$$m_{\mu_{p-1}\mu'_{p-1}}^{p,m}(\xi) = \sum_{\mu_p=1}^{\tau} \frac{p\alpha_{\mu_{p-1}\mu_p} \alpha_{\mu_p\mu'_{p-1}}}{\xi^{\mu_p} - p - m_{\mu_p\mu_p}^{p+1,m}(\xi)}. \quad (3.29)$$

Наступним етапом перенормування повного МО ( $m_{\mu\mu'}(\xi)$ ) є виділення з усієї нескінченної кількості  $m$ -діаграм  $m_{\mu\mu'}^{2,nm}(\xi)$  усіх  $m$ -діаграм, починаючи з двофоновної,  які не були враховані в  $m_{\mu\mu'}^{1,m}(\xi)$  та перенормовані за рахунок усіх багатогофонних процесів двофоновного МО  $m_{\mu\mu'}^{2,[m]}(\xi)$ . Тоді всі інші діаграми з  $m_{\mu\mu'}^{2,[nm]}(\xi)$ , які не були враховані в  $m_{\mu\mu'}^{1,m}(\xi)$  та  $m_{\mu\mu'}^{2,[m]}(\xi)$ , починаючи з трифоновних, створюють немультіплікативний МО  $m_{\mu\mu'}^{3,[nm]}$ . Перенормований  $m_{\mu\mu'}^{2,[m]}(\xi)$  підсумовуємо так само, як  $m_{\mu\mu'}^{1,m}(\xi)$ . Тобто, відокремлюючи від  $m_{\mu\mu'}^{2,nm}(\xi)$  лише нескінченні ряди  $m$ -діаграм, які містять не більше трьох фононних ліній над однією квазічастинковою,

$$\begin{aligned} m_{\mu\mu'}^{2,[m]}(\xi) = & 2 \left[ \text{Diagram 1} + 3^1 \text{Diagram 2} + 3^2 \text{Diagram 3} + \dots \right] + \\ & + 2^2 \left[ \text{Diagram 4} + 2 \cdot 3 \text{Diagram 5} + 3^3 \text{Diagram 6} + \dots \right] + \\ & + 2^3 \left[ \text{Diagram 7} + 3^2 \text{Diagram 8} + \right. \\ & \left. + 2 \cdot 3^3 \text{Diagram 9} + \dots \right] + \dots \end{aligned} \quad (3.30)$$

і здійснюючи їх точне парціальне підсумовування за правилами діаграмної техніки, отримуємо аналітичний вираз

$$m_{\mu\mu'}^{2,[m]}(\xi) = \sum_{\substack{\mu_1, \mu_2, \\ \mu'_1 \neq \mu_1}}^{\tau} \frac{2\alpha_{\mu\mu_1} \alpha_{\mu_1\mu_2} \alpha_{\mu_2\mu'_1} \alpha_{\mu'_1\mu'}}{(\xi_{\mu_1} - 1)(\xi_{\mu'_1} - 1)[\xi_{\mu_2} - 2 - m_{\mu_2\mu_2}^{3,[m]}(\xi)]} \times$$

$$\times \sum_{s=0}^{\infty} \left[ \sum_{\mu'_2}^{\tau} \frac{2\alpha_{\mu_1\mu'_2} \alpha_{\mu'_2\mu_1}}{(\xi_{\mu_1} - 1)(\xi_{\mu_2} - 2) \left[ 1 - \frac{m_{\mu_2\mu_2}^{3,m}(\xi)}{(\xi_{\mu_2} - 2)} \right]} \right]^s, \quad (3.31)$$

повністю перенормований за рахунок багатофонових процесів двофонових МО  $m_{\mu\mu'}^{2,[m]}(\xi)$  (у другому наближенні) визначаємо так:

$$m_{\mu\mu'}^{2,[m]}(\xi) = 2 \frac{\text{Diagram 1}}{\mu \mu_1 \mu_2 \mu'_1 \neq \mu_1 \mu'_1} \left[ 1 - 2 \frac{\text{Diagram 2}}{\mu_1 \mu'_2} - 3 \frac{\text{Diagram 3}}{\mu_2 \mu_3} \right]^{-1} =$$

$$= \sum_{\mu_1, \mu_2, \mu'_1 \neq \mu_1}^{\tau} \frac{2\alpha_{\mu\mu_1} \alpha_{\mu_1\mu_2} \alpha_{\mu_2\mu'_1} \alpha_{\mu'_1\mu'}}{(\xi_{\mu_1} - 1)(\xi_{\mu_2} - 2)(\xi_{\mu'_1} - 1) \left[ 1 - \frac{2m_{\mu_1\mu_1}^{(1)}(\xi - 1)}{\xi_{\mu_1} - 1} - \frac{m_{\mu_2\mu_2}^{3,m}(\xi)}{\xi_{\mu_2} - 2} \right]}. \quad (3.32)$$

Так само отримуємо кінцеві діаграмні та аналітичні вирази для повністю перенормованого за рахунок багатофонових процесів трифонових МО  $m_{\mu\mu'}^{3,[m]}(\xi)$  (у третьому наближенні)

$$m_{\mu\mu'}^{3,[m]}(\xi) = 2^2 \frac{\text{Diagram 4}}{\mu \mu_1 \mu_2 \mu'_1 \neq \mu_1 \mu'_2 \mu''_1} \mu'_1 \left[ 1 - 2 \frac{\text{Diagram 5}}{\mu_1 \mu''_2} - 3 \frac{\text{Diagram 6}}{\mu'_2 \mu_3} \right]^{-2} +$$

$$+ 2 \cdot 3 \frac{\text{Diagram 7}}{\mu \mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu'_2 \neq \mu_2 \mu'_1 \mu'_1} \left[ 1 - 2 \frac{\text{Diagram 8}}{\mu_1 \mu''_2} \right]^{-2} \left[ 1 - 4 \frac{\text{Diagram 9}}{\mu_3 \mu_4} \right]^{-1} =$$

$$= 2^2 \sum_{\substack{\mu_1, \mu_2, \mu'_2, \\ \mu_1'', \mu'_1 \neq \mu_1}}^{\tau} \frac{2\alpha_{\mu\mu_1} \alpha_{\mu_1\mu_2} \alpha_{\mu_2\mu'_1} \alpha_{\mu'_1\mu'_2} \alpha_{\mu'_2\mu''_1} \alpha_{\mu''_1\mu'}}{(\xi_{\mu_1} - 1)(\xi_{\mu_2} - 2)(\xi_{\mu'_1} - 1)(\xi_{\mu'_2} - 2)(\xi_{\mu''_1} - 1)} \times$$

$$\times \left[ 1 - \frac{2m_{\mu_1\mu_1}^{(1)}(\xi - 1)}{\xi_{\mu_1} - 1} - \frac{m_{\mu'_2\mu'_2}^{3,m}(\xi)}{\xi_{\mu'_2} - 2} \right] +$$

$$\begin{aligned}
& +2 \cdot 3 \sum_{\substack{\mu_1, \mu_2, \mu_3 \\ \mu_1', \mu_2' \neq \mu_2}}^{\tau} \frac{2\alpha_{\mu\mu_1} \alpha_{\mu_1\mu_2} \alpha_{\mu_2\mu_3} \alpha_{\mu_3\mu_2'} \alpha_{\mu_2'\mu_1'} \alpha_{\mu_1'\mu'}}{(\xi_{\mu_1} - 1)(\xi_{\mu_2} - 2)(\xi_{\mu_3} - 1)(\xi_{\mu_2'} - 2)(\xi_{\mu_1'} - 1)} \times \\
& \times \left[ 1 - \frac{2m_{\mu_1'\mu_1}^{(1)}(\xi - 1)}{\xi_{\mu_1'} - 1} \right]^{-2} \left[ 1 - m_{\mu_3\mu_3}^{4,m}(\xi) \right]^{-1}.
\end{aligned} \tag{3.33}$$

Аналогічна циклічна процедура послідовного відокремлення  $m$ -діаграм від  $nm$ -діаграм з наступним їх підсумовуванням запропонованим способом цілком застосовна в усіх вищих порядках МО. Зрозуміло, що з кожним наступним циклом кількість термів  $m_{\mu\mu'}^{s,[m]}(\xi)$ , перенормованих  $m$ -діаграмами, і, отже, їх внесок у  $m_{\mu\mu'}(\xi)$  буде більшим, а кількість термів  $m_{\mu\mu'}^{s,nm}(\xi)$ , створених  $nm$ -діаграмами, та їхній внесок – меншим.

У граничному випадку нескінченної кількості циклів ( $s \rightarrow \infty$ ),  $m_{\mu\mu'}^{s,nm}(\xi) \rightarrow 0$ , залишається лише сума всіх доданків  $m_{\mu\mu'}^{s,[m]}(\xi)$ , створена всіма  $m$ -діаграмами. Отже, тепер повний МО можна представити у формі

$$m_{\mu\mu'}(\xi) = \lim_{s_{\max} \rightarrow \infty} \sum_{s=1}^{s_{\max}} (m_{\mu\mu'}^{s,[m]}(\xi) + m_{\mu\mu'}^{s,nm}(\xi)) = \sum_{s=1}^{\infty} m_{\mu\mu'}^{s,[m]}(\xi), \tag{3.34}$$

де для однозначного розуміння цієї формули використано позначення  $m_{\mu\mu'}^{s=1,[m]}(\xi) = m_{\mu\mu'}^{1,m}(\xi)$ .

Алгоритм послідовного відокремлення  $m$ -діаграм від  $nm$ -діаграм з їх парціальним підсумовуванням цілком зрозумілий, складність лише в тому, що зі збільшенням кількості доданків аналітичні вирази  $m_{\mu\mu'}^{s,[nm]}(\xi)$  стають громіздкими. Тому при практичному використанні МО (3.34) для розрахунку перенормованого спектра системи потрібно враховувати таку кількість доданків у  $m_{\mu\mu'}^{s,[nm]}(\xi)$ , яка забезпечує достатню збіжність до отриманого спектра.

У попередніх роботах [172, 173] науковці досліджували лише перше наближення ( $m_{\mu\mu'}^{1,m}(\xi)$ ) повного МО, що виявило тільки деякі властивості перенормованого спектру дворівневої локалізованої квазічастинки, що взаємодіє з фононами, у широкому діапазоні енергій. Тепер використовуємо отриманий МО в третьому наближенні

$$m_{\mu\mu'}^{III}(\xi) = m_{\mu\mu'}^{1,[m]}(\xi) + m_{\mu\mu'}^{2,[m]}(\xi) + m_{\mu\mu'}^{3,[m]}(\xi) \quad (3.35)$$

що дасть можливість з'ясувати деякі нові важливі властивості перенормованого спектра квазічастинки, які не могли бути виявлені в першому (грубому) наближенні.

#### **3.4. Властивості перенормованого енергетичного спектра дворівневої системи при $T=0$ К з урахуванням вищих послідовних наближень масового оператора**

На відміну від робіт [172, 173], у яких досліджено перенормований спектр дворівневої квазічастинки, що взаємодіє з бездисперсійними фононами в межах нульового ( $m^0$ ) і першого ( $m^I$ ) наближень МО, то тепер, використовуючи аналітику, наведену в попередньому розділі, буде враховано МО ще й у другому ( $m^{II}$ ) і третьому ( $m^{III}$ ) наближеннях, які суттєво впливають на деякі властивості енергетичного спектра. Оскільки в обох МО ( $m_1(\xi), m_2(\xi)$ ) відсутні уявні частини, то перенормований енергетичний спектр дворівневої квазічастинки визначається полюсами функцій  $g_1(\xi)$  і  $g_2(\xi)$ , тобто рівнями

$$\xi = m_1(\xi), \quad \xi = \delta + m_2(\xi). \quad (\delta = E_2 - E_1) \quad (3.36)$$

Отже, розв'язки цих рівнянь визначають усі перенормовані рівні енергії як основного, так і сателітних станів системи.

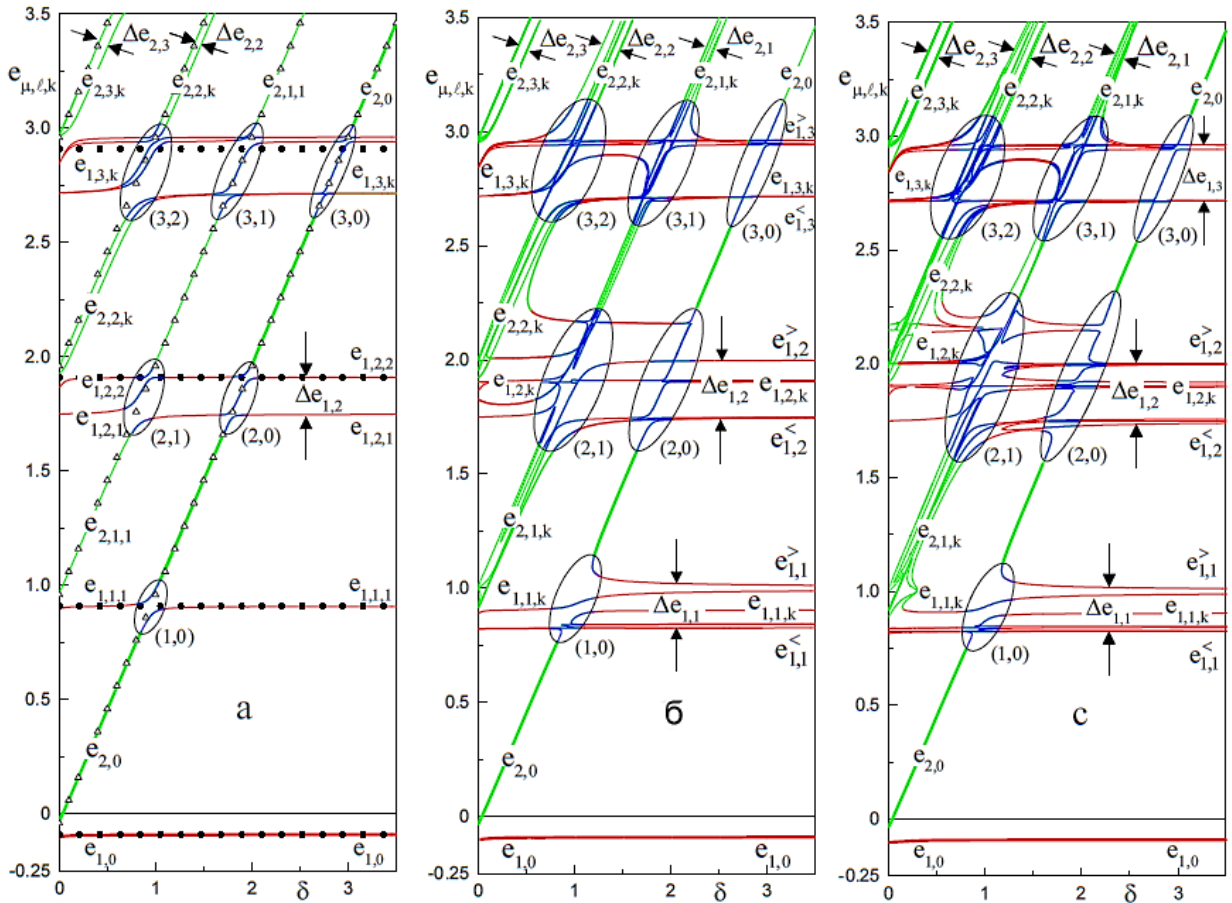
Чисельно розраховується спектр системи, яка характеризується досить малими параметрами внутрішньорівневих ( $\alpha_{11} = 0.3, \alpha_{22} = 0.2$ ) та міжрівневих ( $\alpha_{12} = 0.05$ ) констант зв'язку квазічастинок з фононами. На рисунку 3.1 показано спектр, отриманий у чотирьох послідовних наближеннях для МО, як

функцію енергетичної відстані ( $\delta$ ) між обома рівнями незв'язаної квазічастинки. Ми використовуємо зручні три індексні символи для позначення енергетичних рівнів ( $e_{\mu,l,k}$ ) і двоіндексні символи для позначення ширин відповідних сателітних груп ( $\Delta e_{\mu,l}$ ). Так, у  $e_{\mu,l,k}$ :  $\mu = 1, 2$  – номерує стан невзаємодіючої квазічастинки,  $l$  – номер сателітної групи рівнів, яка фіксує порогову енергію випромінювання, що супроводжується народженням  $l$  фононів,  $k$  – номер рівня в  $l$ -тій групі. Ширина  $\mu l$ -ї групи супутників ( $\Delta e_{\mu,l} = e_{\mu,l}^> - e_{\mu,l}^<$ ) фіксується різницею між верхнім  $e_{\mu,l}^>$  і нижнім  $e_{\mu,l}^<$  рівнями цієї групи. Також зазначимо, що перенормовані енергії першого та другого головних рівнів записуються як  $e_{1,0}$  та  $e_{2,0}$ , а складні групи рівнів у резонансних областях, виділені побічними енергетичними лініями, позначеними двома цифровими індексами  $(l_1, l_2)$ , де  $l_1 = 2, 3, \dots$ ;  $l_2 = 0, 1, \dots$ , нумерують групи супутників першого та другого головних рівнів відповідно.

Розраховані в різних наближеннях рівні енергії  $e_{\mu,l,k}$  для МО представлені на рис. 3.1. Тут на панелях для різних кривих наводимо такі:  $e_{1,l,k}$ , – крапки (а)  $m^0$ ; суцільні червоні (а)  $m^I$ , (б)  $m^{II}$ , (с)  $m^{III}$ ;  $e_{2,l,k}$  – трикутники (а)  $m^0$ ; суцільні зелені (а)  $m^I$ , (б)  $m^{II}$ , (с)  $m^{III}$ . Суцільні блакитні криві в резонансних областях представляють енергетичні рівні комплексів-супутників, які утворюються суперпозицією багатофононних станів, пов'язаних з обома станами невзаємодіючої квазічастинки.

Далі проаналізуємо, як змінюються основні властивості перенормованого спектра, розрахованого в різних послідовних наближеннях МО. На рисунку 3.1, панель (а), можна побачити таку саму залежність спектра від  $\delta$ , що отримана в наближеннях  $m^0$  і  $m^I$  і детально проаналізована в роботі [172]. Результати в цих двох наближеннях досить різні. У нульовому наближенні ( $m^0$ ), де знехтувано міжрівневою взаємодією ( $\alpha_{12} = 0$ ), спектр містить дві нескінченні серії еквідистантних рівнів (відстань однофононна енергія). При збільшенні  $\delta$  ці рівні перетинаються (крім головного  $e_{10}$ ) в усіх

резонансних областях енергій  $(l_1, l_2)$ . Навпаки, в першому наближенні ( $m^I$ ) спостерігаємо антиперетин рівнів у першій резонансній області  $(1,0)$ , тоді як в інших резонансних областях  $(l_1 = 2, 3, \dots; l_2 = 0, 1, \dots)$  є мультиантикросінг. Завдяки цьому в усіх нерезонансних областях видно два перших сателітних рівні ( $e_{1,1,1}$  та  $e_{2,1,1}$ ) і, крім того, смуги сателітних рівнів з шириною  $\Delta e_{\mu, l=2, 3, \dots}$ .



**Рисунок 3.1.** Перенормований спектр як функція  $\delta$  при  $\alpha_{11} = 0.3$ ,  $\alpha_{22} = 0.2$ ,  $\alpha_{12} = 0.05$ .

Порівнюючи панелі (а) та (б) на рисунку 3.1, можна побачити дві якісно нові особливості спектрів, розрахованих у першому ( $m^I$ ) та другому ( $m^{II}$ ) наближеннях МО. У другому наближенні: у всіх резонансних областях  $(l_1, l_2)$  є комплекси сателітних рівнів, які не перетинаються при збільшенні  $\delta$ , але деякі сусідні пари вироджуються і зникають або з'являються. Завдяки масштабу рисунку 3.1 це явище слабо помітне, тому на рисунку 3.2 воно буде показано більш детально, в нерезонансних областях кількість рівнів у всіх

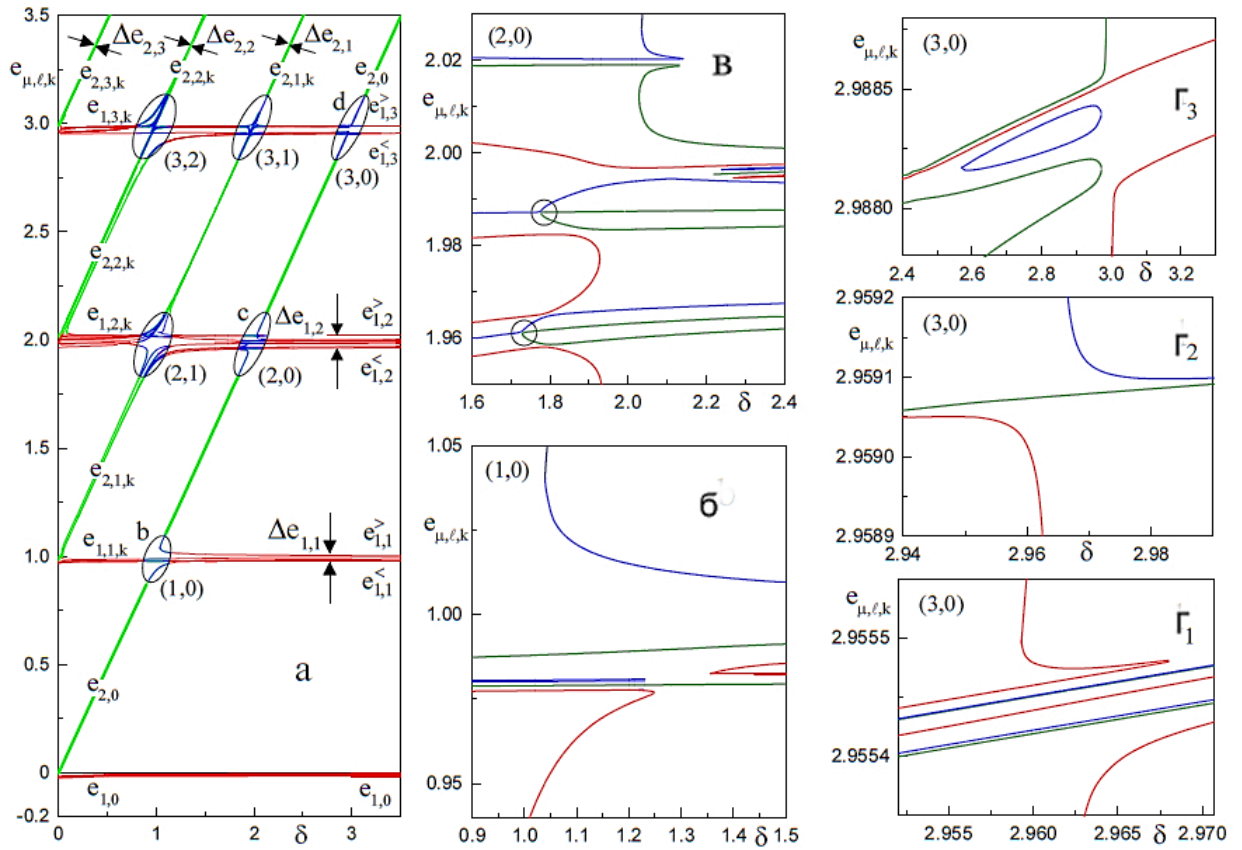
сателітних групах збільшується, а їх ширина стає трохи більшою ( $\Delta e_{\mu,l=2,3,\dots}$ ). Дві перші групи сателітних рівнів з відповідними ширинами ( $\Delta e_{1,1}$ ,  $\Delta e_{2,1}$ ) створюються замість двох перших сателітних рівнів ( $e_{1,1,1}$  та  $e_{2,1,1}$ ).

З панелей (б) і (с) на рисунку 3.1 видно, що при порівнянні другого і третього наближень МО властивості спектрів якісно однакові. Хоча кількість рівнів у сателітних комплексах і групах стає більшою, їх ширина збільшується незначно.

На рисунку 3.2, а показаний спектр, розрахований у третьому наближенні МО для системи з меншими константами внутрішньорівневого зв'язку ( $\alpha_{11} = 0.1$ ,  $\alpha_{22} = 0.08$ ), але при тій самій величині константи міжрівневого зв'язку ( $\alpha_{12} = 0.05$ ) як для системи, наведеної на рисунку 3.1. На рисунку 3.2, а показана така ж поведінка спектра, як на рисунку 3.1 с, але тут, через менші величини  $\alpha_{11}$  і  $\alpha_{22}$ , розміри відповідних сателітних комплексів у резонансних областях менші, як і ширини сателітних смуг у нерезонансних областях.

Наприклад, на панелях (б, в, г), рисунку. 3.2 (у більшому масштабі), показано, що сателітні рівні в комплексах (1,0), (2,0), (3,0), створені завдяки суперпозиції другого головного стану з фононними сателітами першого головного. На цих панелях, замість відповідних синіх ліній на рисунку 3.2 а, для кращої візуалізації лінії пофарбовані в три кольори в послідовності знизу вгору: червоний, зелений, синій і так далі. На панелі (в), рисунку 3.2 у двох колах видно зелену та синю лінії, які візуально ніби торкаються одна одної, хоча насправді вони просто дуже близькі. Решта властивостей енергетичних рівнів у сателітних комплексах типові і їх добре видно на панелях (а, б, в, г).

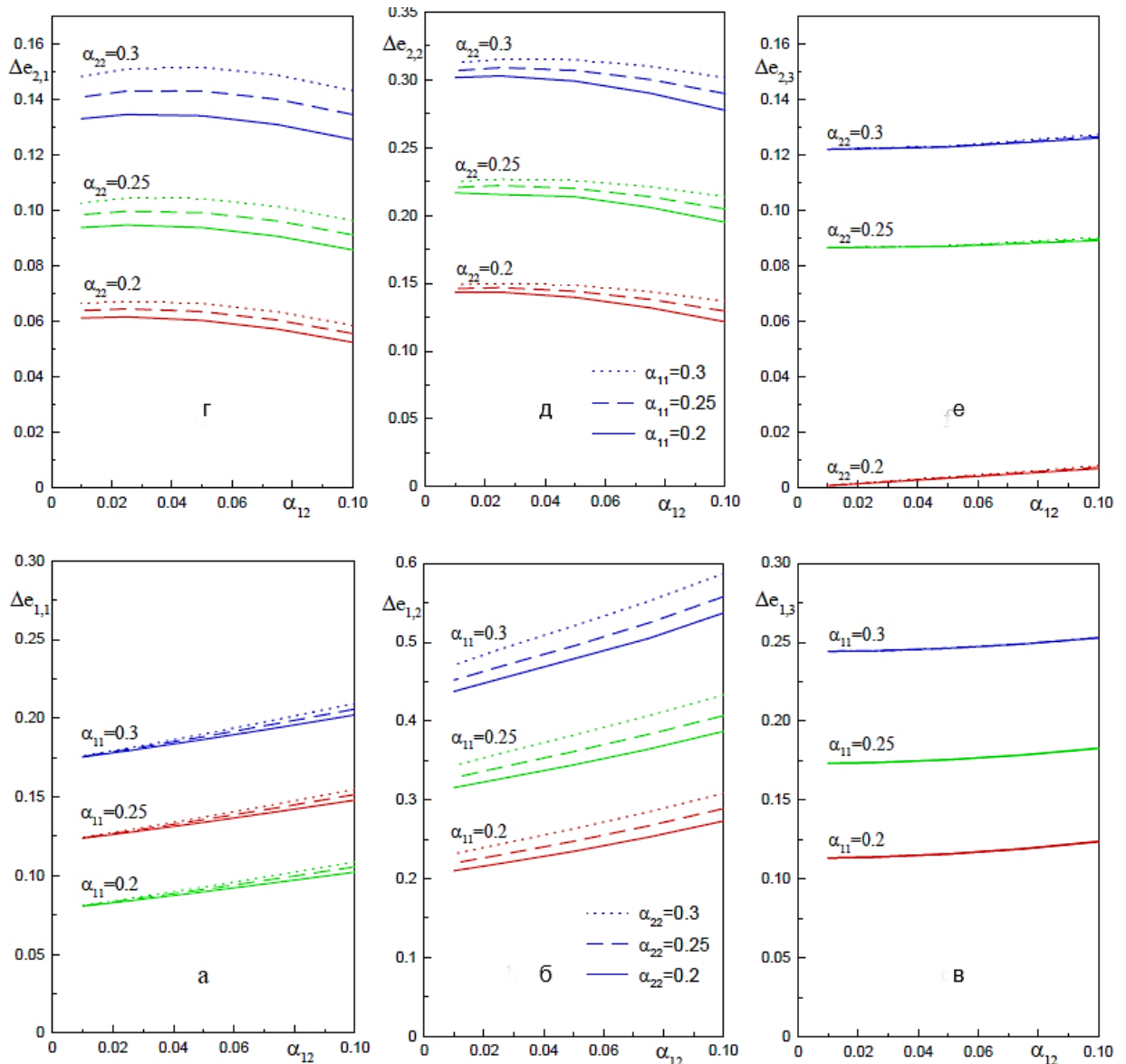




**Рисунок 3.2.** Перенормований спектр як функція  $\delta$  при  $\alpha_{11} = 0.1$ ,  $\alpha_{22} = 0.08$ ,  $\alpha_{12} = 0.05$ , розрахований у третьому наближенні масового оператора  $m^{III}(\xi)$  (а) і більших масштабах трьох резонансних областей  $(1,0)$  б,  $(2,0)$  - в,  $(3,0)$  –  $\Gamma_1$ ,  $\Gamma_2$ ,  $\Gamma_3$ .

Ширини сателітних смуг є важливими параметрами спектра в нерезонансній області енергії, залежними від констант внутрішньо- та міжрівневого зв'язку. Результати їх розрахунків у третьому наближенні МО представлені на рисунку 3.3 із зазначеннями величин  $\alpha_{11}$ ,  $\alpha_{22}$ ,  $\alpha_{12}$  на відповідних панелях. На рисунку показано, що ширини всіх сателітних смуг квазілінійно залежать від величини міжрівневого зв'язку в діапазоні  $0 < \alpha_{12} < 0.1$ . З панелей (а, б, в) видно, що ширини трьох сателітних смуг першого рівня ( $\Delta e_{1, l}$ ) в основному визначаються величиною внутрішньорівневого зв'язку ( $\alpha_{11}$ ) квазічастинки з фононами, при збільшенні  $\alpha_{22}$  або  $\alpha_{12}$  слабко збільшуються ширини  $\Delta e_{1,1}$  і  $\Delta e_{2,1}$ . Ширина  $\Delta e_{1,3}$  майже не залежить від  $\alpha_{22}$  і  $\alpha_{12}$ . Ширини трьох сателітних смуг другого рівня ( $\Delta e_{2, l}$ ),

панелі (г, д, е), в основному визначаються величиною  $\alpha_{22}$ , тоді як  $\alpha_{11}$  і  $\alpha_{12}$  впливають слабо.



**Рисунок 3.3.** Ширини сателітних смуг ( $\Delta e_{\mu,l}$ ) як функції міжрівневої константи зв'язку ( $\alpha_{12}$ ) при різних внутрішньорівневих константах зв'язку ( $\alpha_{11}$ ,  $\alpha_{22}$ ), величини яких вказані на панелях.

### 3.5 Властивості перенормованого взаємодію з фононами енергетичного спектра локалізованої тривірневої квазічастинки зі збудженими резонансними рівнями

У цьому підрозділі на основі розвиненої загальної теорії взаємодії локалізованої багаторівневої квазічастинки з фононами розраховуємо і вивчаємо перенормований спектр тривірневої квазічастинки.

Оскільки в досліджуваній моделі систем енергії квазічастинки й фононів не залежать від їх квазіімпульсів, то уявна частина масового оператора відсутня. Отже, знаходження перенормованого спектра, який визначається полюсами функцій Гріна  $g_\mu(\xi)$ , зводиться до розв'язування рівнянь

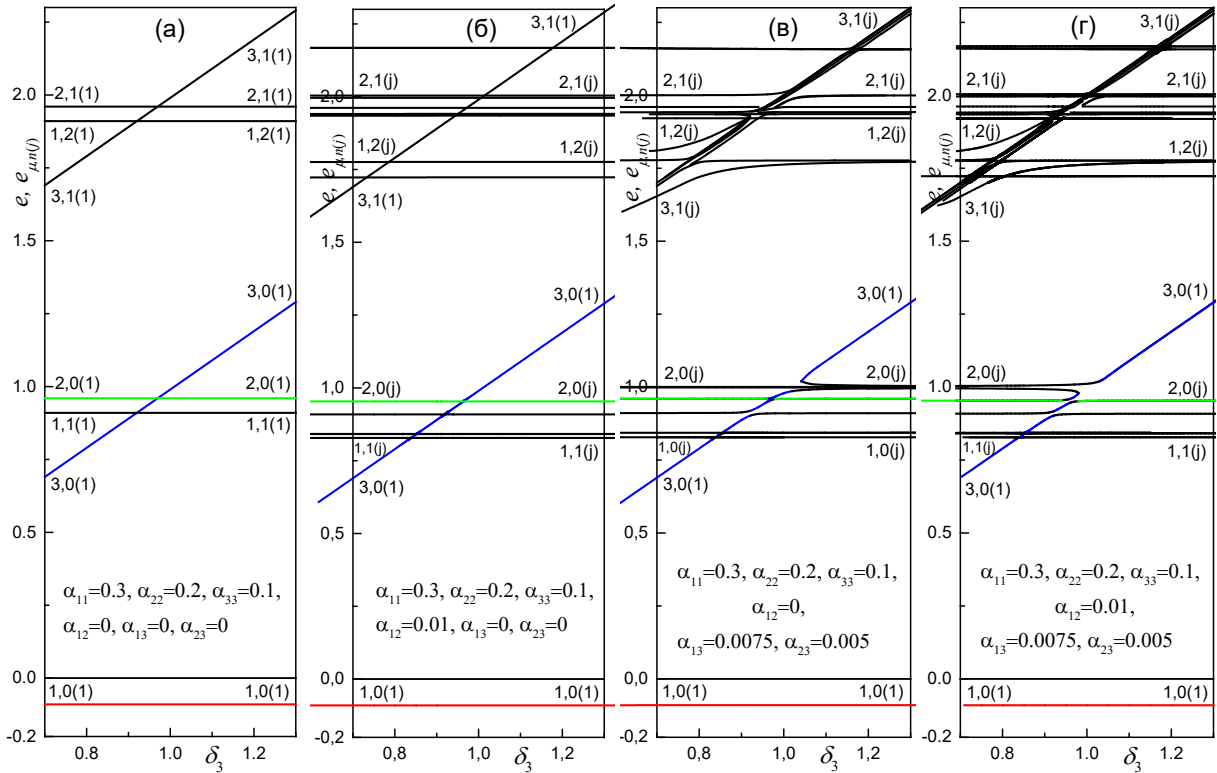
$$\xi = \delta_\mu + m_\mu(\xi), \quad \mu = 1, 2, 3$$

Розрахунок нижньої частини перенормованого спектра виконувався на прикладі резонансних систем, у яких енергетична відстань між основними рівнями й першим збудженим рівнем збігається з енергією фонона ( $E_2 - E_1 = \Omega$ , тобто  $\delta_2 = 1$ ), а відстань між основним і другим збудженими рівнями змінюється в межах прирезонансної області ( $0.7 \leq \delta_3 \leq 1.3$ ). Щоб виявити властивості перенормованого спектра системи зі слабким зв'язком, величини констант внутрішньорівневих взаємодій поклалися фіксованими ( $\alpha_{11} = 0.3; \alpha_{22} = 0.2; \alpha_{33} = 0.1$ ), а величини констант міжрівневих взаємодій були вибрані так, щоб вивчити властивості чотирьох якісно відмінних типів спектрів:

- а) усі константи міжрівневих взаємодій відсутні ( $\alpha_{12} = \alpha_{13} = \alpha_{23} = 0$ ),
- б) відсутня взаємодія першого і другого рівня з третім ( $\alpha_{12} = 0.1; \alpha_{13} = \alpha_{23} = 0$ ),
- в) відсутня взаємодія між першими двома рівнями ( $\alpha_{12} = 0; \alpha_{13} = 0.0075; \alpha_{23} = 0.005$ ),
- г) взаємодії між усіма рівнями відмінні від нуля ( $\alpha_{12} = 0.1; \alpha_{13} = 0.0075; \alpha_{23} = 0.005$ ).

На рисунку 3.4 приведено результати розрахунку залежності нижньої частини перенормованого енергетичного спектра резонансної ( $\delta_2 = 1$ ) системи внаслідок зміни положення третього рівня відносно першого ( $\delta_3$ ) при зазначених раніше фіксованих величинах внутрішньорівневих і різних типах міжрівневих констант, відображених на панелях (а, б, в, г). Як показує аналіз рисунку 3.4 для характеристики перенормованих рівнів (за межами мультикросінгів чи мультиантикросінгів) доцільно ввести позначення

відповідних енергій з трьома індексами ( $e_{\mu n(j)}$ ), які задають енергію  $j$ -го перенормованого рівня в  $n$ -й групі (тобто  $n$ -го порогу народження фононів), що походить від  $\mu$ -го неперенормованого рівня квазічастинки. Щоб не загроможувати рисунок, біля окремих рівнів чи груп рівнів вказані лише відповідні індекси ( $\mu, n(j)$ ).



**Рисунок 3.4.** Еволюція нижньої частини перенормованого енергетичного спектра резонансної системи ( $\delta_2 = 1$ ) залежно від  $\delta_3$  при однакових внутрішньорівневих і різних міжрівневих константах взаємодії, вказаних на панелях (а, б, в, г).

Як видно з панелей рисунку 3.4 еволюція перенормованого спектра резонансної ( $\delta_2 = 1$ ) системи зі зміною  $\delta_3$  у прирезонансній області енергій ( $0.7 \leq \delta_2 \leq 1.3$ ) дуже суттєво залежить від того, які константи міжрівневої взаємодії ( $\alpha_{\mu, \mu' \neq \mu}$ ) відмінні, а які рівні нулю.

З панелі (а) видно, що за відсутності всіх міжрівневих взаємодій ( $a_{12} = a_{13} = a_{23} = 0$ ) перенормований спектр системи містить три незалежні групи еквідистантних спектрів

$$E_{\mu} = e_{\mu} + \delta_{\mu} - \alpha_{\mu\mu}^2 + n_{\mu}, \quad (n_{\mu} = 0, 1, 2, \dots, \infty), \quad (\mu = 1, 2, 3)$$

У кожній з цих груп є «свій» головний рівень ( $n_{\mu} = 0$ ) і безмежна кількість сателітних рівнів, що відповідають зв'язаним станам квазічастинки з відповідним числом ( $n_{\mu} = 0, 1, 2, 3$ ) фононів. Як видно з рисунку 3.4 а, перенормована енергія першого головного стану  $e_{1,0(1)} = -\alpha_{11}^2 = -0.09$  зміщена в низько енергетичну область. В околі енергій ( $E \sim 1$ ), відрахованих від першого незбуреного рівня, тобто біля першого порога народження одного фонона, у прирезонансній області ( $\delta_3 \sim 1$ ), внаслідок різних величин констант внутрішньорівневої взаємодії ( $\alpha_{11} > \alpha_{22}$ ), розташовані перенормовані енергії двох рівнів:  $e_{1,1(1)} = 1 - \alpha_{11}^2 = 0.91$ . Ці енергії відповідають стану системи, у якому квазічастинка з першого стану зв'язана з одним фононом, та  $e_{2,0(1)} = \delta_2 - \alpha_{22}^2 = 0.96$  – що відповідає перенормованій енергії другого головного стану. Як видно з рисунку 3.4а, при зміні енергії третього рівня у прирезонансній області ( $0.7 \leq \delta_3 \leq 1.3$ ,  $\delta_2 = 1$ ) відбуваються два подвійні резонанси з енергією фонона:

1) енергія  $e_{3,0(1)}$  третього головного стану й енергія  $e_{2,0(1)}$  другого головного стану резонують з енергією фонона;

2) енергія  $e_{3,0(1)}$  третього головного стану, та енергія  $e_{1,1(1)}$  першого зв'язаного з фононами стану квазічастинки, яка перебуває в першому головному стані, резонують з енергією фонона.

При цьому зі зміною енергії ( $\delta_3$ ) третього рівня відбуваються його перетини, а не антикросинги, з обома згаданими рівнями. Подібна картина перетинів, а не антикросингів, характерна і для всіх вищих збуджених станів системи, як це видно на панелі (а) в околі ( $\delta_3 = 1$ ;  $E \sim 2$ ).

На рисунку 3.4 б наведено перенормований спектр системи, в якій відсутня взаємодія перших двох рівнів з третім ( $\alpha_{13} = \alpha_{23} = 0$ ), але є взаємодія між ними ( $\alpha_{12} = 0.1$ ). З панелі (б) видно, що міжрівнева взаємодія відмінна від

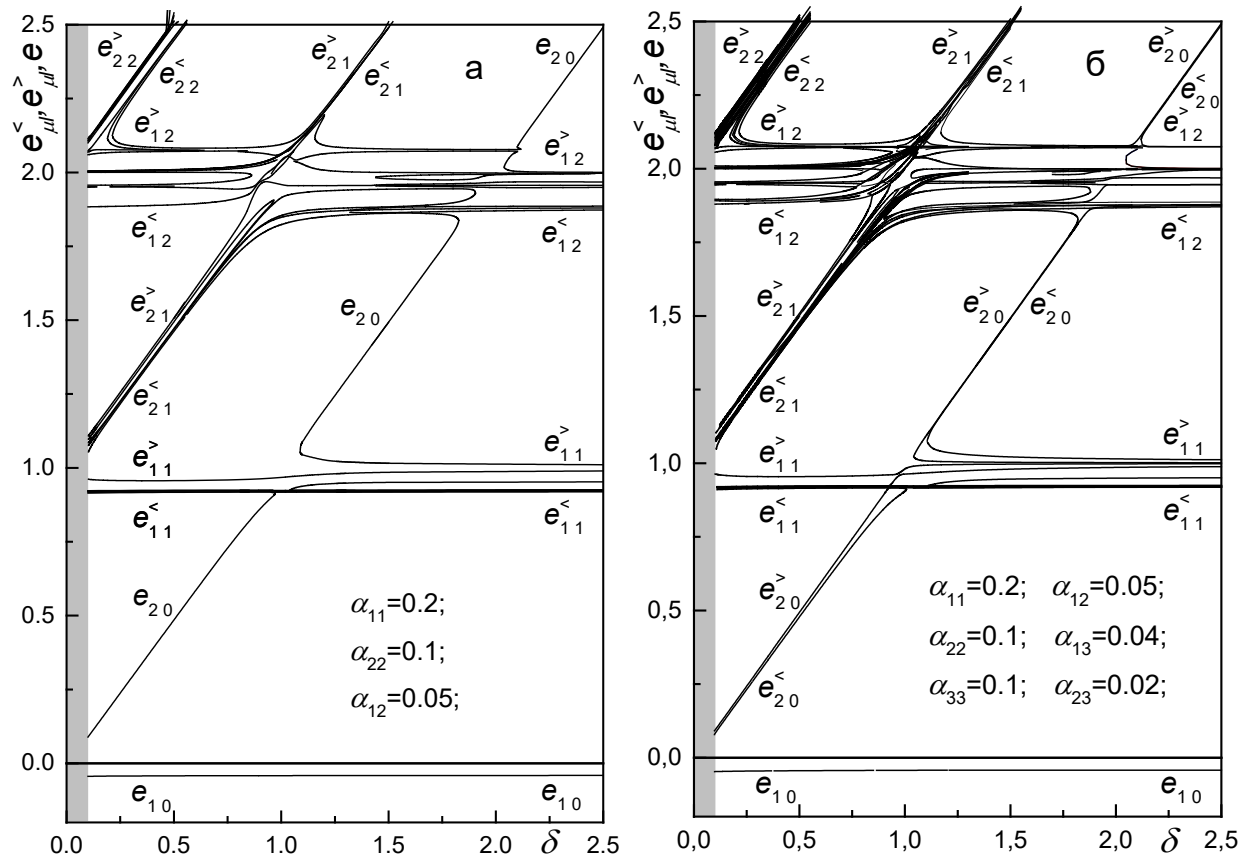
нуля ( $\alpha_{12} \neq 0$ ). Взаємодія між першими двома станами незбуреної квазічастинки привела до додаткового розщеплення через появу груп нових рівнів у обох порогових смугах енергій, зумовлених зв'язаними взаємодією з фононами квазічастинками в першому і другому незбурених станах за участю багатифонних процесів. При цьому в околі другого порога група розщеплених рівнів містить більшу кількість нових рівнів, ніж в околі першого порога. Щодо головного й сателітних рівнів третього стану, то зі зміною  $\delta_3$  вони, як і у випадку (а), лише перетинають головні й сателітні енергетичні рівні перших двох станів, не створюючи з ними жодного антикросингу.

Якісно інша картина і властивості перенормованого спектра виникають у системах, де або відсутня взаємодія лише між двома першими рівнями ( $\alpha_{12} = 0$ ) (рисунок 3.4 в), або існують усі три міжрівневі взаємодії (рисунок 3.4 г). Як видно з панелей (в, г), у таких системах в околі подвійного резонансу ( $\delta_2 = 1, \delta_3 \approx 1$ ) у припорогових областях енергії ( $E \sim 1; 2; \dots$ ) зі зміною  $\delta_3$  виникають складні міжрівневі антикросинги, а також відбувається зближення деяких сусідніх пар енергетичних рівнів до їх злиття й обриву в цих точках. При цьому всі інші рівні зі зміною  $\delta_3$  ніде не перетинаються.

### **3.6 Властивості перенормованих взаємодією з фононами спектрів локалізованих дворівневих квазічастинок з неvirодженим і двічі virодженими рівнями збуджених станів**

Для того, щоб виявити різницю між властивостями перенормованих взаємодією з фононами енергетичних спектрів локалізованих дворівневих квазічастинок з неvirодженим (а) та з двічі virодженим (б) збудженими рівнями, у роботі виконано розрахунок цих спектрів і їх еволюції на основі розвиненої в попередніх параграфах теорії. При цьому взаємодію квазічастинки з поляризаційними фононами визначаєтьсямо такими параметрами: неvirоджена система (а) – внутрішньорівневі взаємодії  $\alpha_{11} = 0.2$ ,  $\alpha_{22} = 0.1$ , міжрівнева взаємодія  $\alpha_{12} = 0.05$ ; двічі virоджена система

(б) – внутрішньорівневі взаємодії  $\alpha_{11} = 0.2$ ,  $\alpha_{22} = \alpha_{33} = 0.1$ , міжрівневі взаємодії  $\alpha_{12} = 0.05$ ,  $\alpha_{13} = 0.04$ ,  $\alpha_{23} = 0.05$ .



**Рисунок 3.5.** Еволюція перенормованих фононами спектрів дворівневих квазічастинок з невиродженням (а) та зі знятим виродженням (б) збуджених станів залежно від величини  $\delta$ . Параметри взаємодії вказані на рисунку.

Розрахунок еволюції спектрів обох систем виконаний з урахуванням залежності енергетичної відстані ( $\delta$ ) між обома рівнями невзаємодіючої з фононами дворівневої квазічастинки в досить широкому інтервалі енергій ( $0.1 \leq \delta \leq 3$ ). Зауважимо, що інтервал міжрівневих енергій ( $0 \leq \delta \leq 0.1$ ) не будемо розглядати з тих міркувань, що зміщення обох незалежних енергетичних рівнів через їх внутрішньорівневу взаємодію з фононами мають величини  $\alpha_{11}^2 = 0.04$ ,  $\alpha_{22}^2 = 0.01$ , які співмірні з величиною  $\delta$  в цьому інтервалі, що може приводити до некоректних результатів. Хоча в реальних системах така ситуація, мабуть, фізично неможлива.

Таблиця 3.1.

Величини перенормованих найбільших ( $e_{\mu l}^>$ ) і найменших ( $e_{\mu l}^<$ ) енергій та ширин ( $\Delta e_{\mu l}$ ) відповідних їм смуг з  $n$  рівнями в резонансних інтервалах (тоновані комірки) та нерезонансних (нетоновані комірки) енергій дворівневої квазічастинки з невиродженим збудженим рівнем. Параметри взаємодій:  $\alpha_{11} = 0.2$ ,  $\alpha_{23} = 0.1$ ,  $\alpha_{12} = 0.05$ .

$\delta$ $e_{\mu l}^>, e_{\mu l}^<$		$\delta=0.5$		$\delta=1$		$\delta=1.5$		$\delta=2$		$\delta=2.5$	
		$n$	$n$	$n$	$n$	$n$	$n$	$n$	$n$		
2.5	$e^>$	2.5113	12			2.5037	4			2.4918	1
	$e^<$	2.4467				2.4898					
	$\Delta e$	0.0645				0.0139					
2	$e^>$	2.0830	14	2.0946	16	2.0795	12	2.0774	12	2.0005	8
	$e^<$	1.8906		1.8233		1.8617		1.8849		1.8856	
	$\Delta e$	0.1924		0.2713		0.2178		0.1925		0.1149	
1.5	$e^>$	1.5067	6			1.49317	1				
	$e^<$	1.4621									
	$\Delta e$	0.0445									
1	$e^>$	0.9569	6	0.9230	6	1.0154	8	1.0129	10	1.0085	10
	$e^<$	0.9174		0.9185		0.9192		0.9196		0.9198	
	$\Delta e$	0.0394		0.0045		0.0962		0.0933		0.0887	
0.5	$e_{20}$	0.4854	1								

Результати розрахованих перенормованих енергетичних спектрів обох систем і їх еволюція залежно від величини  $\delta$  наведені на рисунках 3.5 а, б. Для позначення перенормованих багатофононними процесами енергетичних рівнів системи можна скористатися запровадженими раніше зрозумілими триіндексними позначеннями ( $e_{\mu lk}$ ), де  $\mu$  – індекс рівня невзаємодіючої квазічастинки,  $l$  – номер фононної сателітної смуги,  $k$  – номер рівня в цій смузі. Однак не визначатимемо еволюцію окремих  $k$ -их рівнів, а тому що достатньо обмежитися аналізом еволюції головних рівнів і їх фононних сателітних смуг. Отож тут доцільно ввести простіші перепозначення найнижчого і найвищого енергетичних рівнів у  $\mu l$ -ій смузі:  $e_{\mu l}^< = e_{\mu l \min k}$  та  $e_{\mu l}^> = e_{\mu l \max k}$  і різницю їх енергій  $\Delta e_{\mu l} = e_{\mu l}^> - e_{\mu l}^<$ , яка характеризує ширину  $\mu l$ -ої смуги. Тепер з рисунків 3.5 а, б видно, що еволюції перенормованих багатофононними процесами енергетичних спектрів обох систем (а, б) якісно подібні між собою



Таблиця 3.2.

Величини перенормованих найбільших ( $e_{\mu l}^>$ ) і найменших ( $e_{\mu l}^<$ ) енергій та ширин ( $\Delta e_{\mu l}$ ) відповідних їм смуг з  $n$  рівнями в резонансних (тоновані комірки) та нерезонансних (нетоновані комірки) інтервалах енергій дворівневої квазічастинки зі знятим виродженням збудженого рівня. Параметри взаємодій:  $\alpha_{11} = 0.2$ ,  $\alpha_{22} = \alpha_{33} = 0.1$ ,  $\alpha_{12} = 0.05$ ,  $\alpha_{13} = 0.04$ ,  $\alpha_{23} = 0.03$ .

$e_{\mu l}$	$\delta$	$\delta=0.5$	$n$	$\delta=1$	$n$	$\delta=1.5$	$n$	$\delta=2$	$n$	$\delta=2.5$	$n$
	$e^>$		2.5225	24			2.5073	12			2.4897
$e^<$		2.4444				2.4709				2.4861	
$\Delta e$		0.0780				0.0364				0.0036	
$e^>$		2.0851	26	2.1023	34	2.0817	18	2.0784	18	2.0749	18
$e^<$		1.8839		1.8209		1.8592		1.8671		1.8704	
$\Delta e$		0.2012		0.2814		0.2225		0.2113		0.2045	
$e^>$		1.5097	12			1.4949	2				
$e^<$		1.4617				1.4885					
$\Delta e$		0.048				0.0064					
$e^>$		0.9544	10	0.9795	12	1.0226	16	1.0154	16	1.0123	16
$e^<$		0.9147		0.9027		0.9176		0.9183		0.9188	
$\Delta e$		0.0397		0.0768		0.1050		0.0971		0.0935	
$e^>$		0.4951	2								
$e^<$		0.4756									
$\Delta e$		0.0195									

як розташуванням головних рівнів ( $e_{10}$ ,  $e_{20}$ ), так і їх фононних сателітних груп з ширинами  $\Delta e_{\mu l}$ , сформованих зв'язаними станами квазічастинок з багатьма фонами у порогових областях енергій випромінювання фононів.

(б) спостерігаємо як у резонансних інтервалах енергій ( $\delta \approx 1$ ,  $e \approx 1; 2$ , та  $\delta \approx 2$ ,  $e \approx 2$ ), так і в нерезонансних (поза ними) інтервалах.

Різниця між еволюцією перенормованих невиродженої і виродженої систем, як видно з порівняння панелей а та б рисунку 3.5 і відповідних величин спектральних параметрів, наведених у таблицях 3.1, 3.2, 3.3, така.

У всіх інтервалах нерезонансних енергій головний перенормований збуджений рівень невиродженої системи (а), як і повинно бути з фізичних міркувань, залишається нерозщепленим ( $e_{20}$ ), а у виродженій системі (б) він

Таблиця 3.3.

Величини перенормованих найбільших ( $e_{\mu l}^>$ ) і найменших ( $e_{\mu l}^<$ ) енергій та ширин ( $\Delta e_{\mu l}$ ) відповідних їм смуг з  $n$  рівнями в резонансних (тоновані комірки) та нерезонансних (нетоновані комірки) інтервалах енергій дворівневої квазічастинки зі знятим виродженням збудженого рівня. Параметри взаємодій:  $\alpha_{11} = 0.2$ ,  $\alpha_{22} = \alpha_{33} = 0.1$ ,  $\alpha_{12} = 0.05$ ,  $\alpha_{13} = 0.04$ ,  $\alpha_{23} = 0.02$ ,  $\alpha_{23} = 0.01$ .

$e_{\mu l}$	$\delta$	$\delta=0.5$	$n$	$\delta=1$	$n$	$\delta=1.5$	$n$	$\delta=2$	$n$	$\delta=2.5$	$n$
	$e^>$		2.5217	24			2.5086	12			2.4907
$e^<$		2.4468				2.4748				2.4885	
$\Delta e$		0.0749				0.0338				0.0022	
$e^>$		2.0840	26	2.0996	32	2.0809	18	2.0780	18	2.0750	18
$e^<$		1.8840		1.8218		1.8591		1.8672		1.8705	
$\Delta e$		0.2000		0.2778		0.2218		0.2108		0.2045	
$e^>$		1.5090	12			1.4945	2				
$e^<$		1.4626				1.4909					
$\Delta e$		0.0464				0.0036					
$e^>$		0.9546	10	0.9816	12	1.0215	16	1.0146	16	1.0112	16
$e^<$		0.9147		0.9048		0.9176		0.9183		0.9188	
$\Delta e$		0.0399		0.0768		0.1039		0.0963		0.0924	
$e^>$		0.4936	2								
$e^<$		0.4781									
$\Delta e$		0.0155									
$e^>$		2.5212	24			2.5100	10			2.4921	2
$e^<$		2.4484				2.4783				2.4907	
$\Delta e$		0.0728				0.0317				0.0014	
$e^>$		2.0831	26	2.0969	32	2.0802	18	2.0776	18	2.0750	18
$e^<$		1.8877		1.8224		1.8588		1.8672		1.8705	
$\Delta e$		0.1954		0.2745		0.2214		0.2104		0.2045	
$e^>$		1.5082	12			1.4935	2				
$e^<$		1.4631				1.4915					
$\Delta e$		0.0451				0.002					
$e^>$		0.9547	8	0.9846	10	1.0204	16	1.0139	16	1.0111	16
$e^<$		0.9148		0.9068		0.9177		0.9183		0.9188	
$\Delta e$		0.399		0.0778		0.1027		0.0956		0.0923	
$e^>$		0.4919	2								
$e^<$		0.4803									
$\Delta e$		0.0116									

При цьому якісну подібність еволюцій спектральних параметрів системи (а) і розщепився на два рівні ( $e_{20}^<$ ,  $e_{20}^>$ ). У цих же інтервалах енергії у відповідних сателітних смугах системи (б) і кількість рівнів ( $n$ ), і їх ширини ( $\Delta e_{\mu l}$ ) більші

порівняно з системою (а). Такі ж співвідношення між величинами спектральних параметрів обох систем характерні й для всіх трьох резонансних областей (таблиці 3.1, 3.2, 3.3). Крім цього, у таблицях 3.2 і 3.3 наведено результати розрахунку спектральних параметрів ( $e_{\mu l}^<, e_{\mu l}^>, \Delta e_{\mu l}$ ) залежно від величини  $\alpha_{23}$  міжрівневої взаємодії між обома виродженими рівнями при фіксованих величинах решти параметрів взаємодій у виродженій системі (б). З таблиць 3.2 і 3.3 добре видно, що зі збільшенням  $\alpha_{23}$  величини всіх спектральних параметрів, хоч і досить слабо, але зростають.

### Висновки до розділу 3

Для розрахунку енергетичного спектру багаторівневої квазічастинки, що взаємодіє з поляризаційними фононами, які прийнято описувати гамільтоніаном типу Фроліха при  $T = 0\text{K}$ , узагальнено діаграмну техніку Фейнмана-Пайнса для ефективного перенормування масового оператора завдяки коректному врахуванню багатофононних процесів.

У рамках підходу послідовного виділення нескінченних класів мультиплікативних діаграм з блоків немультіплікативних діаграм МО та їх парціального підсумовування МО остаточно визначаємо сумою неперервних розгалужених дробів з однотипними ланками. Таке представлення ефективно враховує багатофононні процеси та дозволяє уникнути відомої з квантовій теорії поля «проблеми знаку» в діаграмній техніці.

Розраховано перенормований енергетичний спектр у кількох послідовних наближеннях МО на прикладі дво- і тривірневих квазічастинок, які взаємодіють з фононами. Аналіз цих спектрів у різних наближеннях показує, що їх властивості істотно залежать від величин міжрівневих взаємодій.

У нульовому наближенні МО (зі знехтуваною міжрівневою взаємодією) перенормований спектр дворівневих квазічастинок містить дві нескінченні серії рівновіддалених сателітних рівнів, які перетинаються в усіх резонансних областях, коли енергетична відстань між двома рівнями невзаємодіючої

квазічастинки змінюється. У першому й подальших наближеннях для МО, замість двох серій одиночних сателітних рівнів, спостерігаємо комплекси сателітних рівнів у резонансних областях і смуги сателітних рівнів – у нерезонансних областях. У вищих наближеннях кількість рівнів у сателітних комплексах і смугах стає більшою, хоча їх ширина змінюється слабо. При збільшенні  $\delta$  рівні не перетинаються, але деякі сусідні рівні вироджуються (зникають або з'являються), що створює нестабільність спектра. Показано, що ширини сателітних смуг в основному пропорційні величинам констант внутрішнього зв'язку ( $\alpha_{\mu\mu}$ ) тих основних рівнів ( $\mu$ ) невзаємодіючої квазічастинки, з яких вони утворюються внаслідок взаємодії з фононами. Для розмірів сателітних комплексів характерними є обидві ширини тих двох смуг, які утворюють їх шляхом перетину.

Врахована нижня частина перенормованого спектру системи трирівневої локалізованої квазічастинки, що взаємодіє з фононами при  $T=0\text{K}$ . Встановлено, що спектр містить перші дві порогові смуги сателітних рівнів у резонансному випадку (коли різниця між енергіями двох головних станів дорівнює енергії фонона). Показано, що через зміну енергетичної відстані ( $\delta_3$ ) між третім і першим рівнями, у припорогових смугах виникають мультиантиперетини та зближення до злиття деяких пар сателітних рівнів у околі подвійного резонансу ( $\delta_2 = \delta_3 = 1$ ) при будь-яких нерівних нулю константах зв'язку ( $\alpha_{\mu\mu' \neq \mu}$ ). Цей факт може бути причиною нестабільного спектра системи при незначній зміні відстаней між головними енергетичними рівнями.

Узагальнений метод діаграмної техніки Фейнмана-Пайнса при  $T=0\text{K}$  модифіковано для розрахунку перенормованого взаємодією з поляризаційними фононами енергетичного спектра локалізованої квазічастинки з виродженим збудженим рівнем.

Виконано розрахунок перенормованих взаємодією з фононами спектрів дворівневих систем квазічастинок з невиродженим і виродженим збудженим

рівнями та проаналізовані властивості спектральних параметрів цих систем у залежності від різниці енергій між збудженим і основним станом невзаємодіючої квазічастинки.

Встановлено, що перенормовані спектри обох систем достатньо близькі між собою і, крім головних енергетичних рівнів, містять їх фононні сателітні смуги, які зумовлені зв'язаними станами квазічастинок з багатьма фононами в областях порогових енергій їх (фононів) випромінювання.

Показано, що хоча в системі з виродженим збудженим рівнем кількість перенормованих рівнів у всіх сателітних смугах завжди більша ніж у системі з невиродженим збудженим рівнем, однак ширини всіх смуг першої системи лише трохи більші за ширини другої.

Розглядаючи досліджувані системи як найпростіші (грубі) моделі електрон-фононої взаємодії в базових елементах сучасних нанопристроїв (КВІФ, ККД та ККЛ), можна очікувати, що виявлені смуги та комплекси сателітних рівнів (які не були встановлені в попередніх теоретичних роботах) суттєво впливають на їх функціонування. Зокрема, сателітні комплекси та смуги рівнів можуть замінити відсутні «сходинки» розірваної «фононої драбини» або недосконалої повної «фононої драбини» в екстракторах ККД, що працюють в ІЧ-діапазоні.

## РОЗДІЛ 4.

### **Теорія перенормування спектра локалізованої квазічастинки взаємодіючої з багатомодовими поляризаційними фононами при криогенній температурі в моделі Давидова**

#### **4.1. Вступ. Розвиток і проблеми теорії взаємодії квазічастинок з фононами в широкому діапазоні енергій, що містить зв'язані стани в околах порогів випромінювання фононів**

Інтенсивний розвиток фізики наноматеріалів протягом останніх десятиліть виявив нові фізичні властивості низькомірних структур та стимулював створення різних багат шарових наногетероструктур: квантових точок, дротин, кілець, тощо. Це привело не лише до експериментального, а й до практичного створення нових унікальних наноприладів, які широко використовують у медицині, екології, космосі, військових та наукових дослідженнях [156, 170, 176, 177].

З фізичних міркувань, наногетероструктури принципово відрізняються від масивних 3D-структур лише нанорозмірами складових елементів. Однак ефект розмірного квантування, який завжди наявний у наноструктурах, породжує багатозонний спектр квазічастинок (електронів, дірок, екситонів) та багатомодовий спектр поляризаційних фононів [150, 178, 179, 173].

Добре відомо, що для оптимізації робочих параметрів сучасних нанопристроїв, що функціонують в інфрачервоному діапазоні, потрібно глибоко розуміти фізичні процеси в багат шарових наногетероструктурах, які є їх основними елементами. Квантова теорія фотон- і фононсупровідного тунелювання, що розробляємо в цій роботі, дасть ці знання. Основна проблема теоретичного дослідження полягає у складності врахування багатфононних процесів, які по суті перенормовують спектри квазічастинок у такому широкому діапазоні енергій, який містить комплекси зв'язаних станів систем [171, 173, 180]. Виявилось, що це неможливо зробити в рамках методу теорії збурень [175, 180, 181], тому необхідно застосовувати більш потужні непертурбативні підходи.

Перші роботи в теорії порогових явищ, хоч і були виконані методом квантової теорії поля [171, 175, 181], але застосоване в них наближення низького порядку ще не дало можливості отримати переконливу інформацію про вищі сателітні стани. Однак уже в цих працях вдалося увести зрозумілу й корисну класифікацію трьох типів зв'язаних станів квазічастинки з фононами за величинами середніх (ефективних) чисел ( $N$ ) фононів у «шубі» відповідного квазічастинкового стану:  $N < 1/2$  – квазічастинковий,  $N \sim 1/2$  – гібридний,  $N \sim 1$  – сильно зв'язаний (фононоподібний).

Згодом розвинулися сучасні потужні математичні методи, які ефективно враховують багато фононні процеси: варіаційний, діагоналізації малих систем, метод функцій густини, усередненого імпульсу [145–149, 185–189]. Достатньо результативними виявилися діаграмні методи звичайного й скелетонного Монте-Карло [136, 137, 144, 146, 190] в теорії взаємодії однозонних квазічастинок з одномодовими поляризаційними фононами [180, 191].

Інтенсивний розвиток нанофізики сприяв активізації розробки методів квантової теорії поля у фізиці багатозонних (багаторівневих) квазічастинок (електронів, екситонів та ін.) взаємодіючих з квантованими полями (фотонами, фононами). Адже в наноструктурах внаслідок існування поверхонь розділу між окремими матеріалами виникає сильне просторове обмеження, яке спричиняє розмірне квантування, що приводить до багатозонності (багаторівневості) спектрів квазічастинок, а також зумовлює появу нових гілок (мод) фононів (обмежених, інтерфейсних та інших).

Потрібно зазначити, що практичне застосування різних методів квантової теорії поля до задач перенормування енергетичних спектрів квазічастинок взаємодіючих з багатомодовими фононами, наштовхується на деякі типові проблеми. Зокрема, це дуже громіздкі математичні (аналітичні й числові) розрахунки. Щодо числових проблем, то їх розв'язують сучасні кластерні системи високошвидкісних комп'ютерів. А щодо аналітичних проблем, то вони вимагають конструктивних ідей на зразок виділення мультиплікативних діаграм з немультіплікативних для уникнення, так званої,

проблеми «знаку» в масовому операторі функції Гріна. Ще один підхід відображає теорія перенормування спектра двостанової квазічастинки взаємодіючої з бездисперсійними фононами (модель Давидова [180]). Розробники цієї теорії довели, що після діагоналізації гамільтоніана унітарним перетворенням двочасова запізнююча функція Гріна квазічастинки розраховувалася точно в загальному вигляді. Однак фур'є-образ функції Гріна, а отже й перенормований спектр був розрахований точно лише для одномодової системи. Щодо системи з довільним числом мод, то перенормований спектр був розрахований наближено і при  $T \rightarrow 0K$  мав некоректну поведінку, оскільки було зафіксовано скінченну величину затухання, чого не може бути із загальнофізичних міркувань. Адже, згідно з квантовою механікою, взаємодія квазічастинки лише з віртуальними фононами при  $T \rightarrow 0K$  не може спричиняти затухання, щоб при цьому не порушувався закон збереження енергії.

Цікаво, що перенормований спектр локалізованої квазічастинки взаємодіючої з одномодовими бездисперсійними фононами при  $T=0K$ , пізніше був отриманий методом діаграмної техніки Фейнмана [192, 193] та методом усередненого імпульсу [145] в моделі системи без обмежуючих умов і цілком збігався з відповідним спектром, наведеним у [180].

Ці обставини дають підстави сподіватися, що в разі точного розв'язування задачі про перенормований спектр локалізованої квазічастинки з бездисперсійними двомодовими фононами при  $T=0K$  у моделі системи з обмежуючими умовами, буде вироблений математичний підхід до коректного узагальнення теорії на випадок систем з довільним числом фононних мод. Таке з завдання розв'язуємо в цьому розділі.

#### **4.2. Гамільтоніан і функція Гріна квазічастинки взаємодіючої з двомодовими фононами. Перенормований енергетичний спектр і середні числа фононів у всіх станах системи**

Вивчатимемо систему, яка складається з вузькозонної квазічастинки (екситон, домішка і т.д.) взаємодіючу з бездисперсійними двомодовими



поляризаційними фононами при криогенній температурі ( $T=0K$ ). Гамільтоніан такої системи в зображенні чисел заповнення за всіма змінними можна записати у фреліхівській формі [180].

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}} E_{\vec{k}} \hat{A}_{\vec{k}}^+ \hat{A}_{\vec{k}} + \sum_{\lambda=1}^2 \sum_{\vec{q}} \Omega_{\lambda} \hat{B}_{\lambda\vec{q}}^+ \hat{B}_{\lambda\vec{q}} + \sum_{\vec{k}\lambda\vec{q}} \varphi_{\lambda}(\vec{q}) \hat{A}_{\vec{k}}^+ \hat{A}_{\vec{k}} (\hat{B}_{\lambda\vec{q}} + \hat{B}_{\lambda-\vec{q}}^+). \quad (4.1)$$

Тут  $E_{\vec{k}}$  – енергія невзаємодіючої квазічастинки,  $\Omega_{\lambda}$  – енергія  $\lambda$ -ої фононної моди,  $\varphi_{\lambda}(\vec{q})$  – функція зв'язку. Квазічастинкові ( $\hat{A}_{\vec{k}}^+, \hat{A}_{\vec{k}}$ ) і фононні ( $\hat{B}_{\lambda\vec{q}}^+, \hat{B}_{\lambda\vec{q}}$ ) оператори вторинного квантування відповідають бозонним комутаційним співвідношенням. Як і в [180], будемо вивчати систему, у якій виконується умова моделі Давидова

$$\hat{n}^2 = \hat{n} = \sum_{\vec{k}} \hat{A}_{\vec{k}}^+ \hat{A}_{\vec{k}}. \quad (4.2)$$

Вона означає, що власні значення обох цих операторів ( $\hat{n}$  і  $\hat{n}^2$ ) можуть бути або 0 або 1 і трактуються як умови існування (1) чи відсутності (0) «чистого» квазічастинкового стану.

Для розрахунку спектра системи спочатку здійснюємо [180] діагоналізацію гамільтоніана (4.1) внаслідок переходу від операторів  $\hat{A}_{\vec{k}}, \hat{B}_{\lambda\vec{q}}$  до нових  $\hat{a}_{\vec{k}}, \hat{b}_{\lambda\vec{q}}$  за допомогою унітарного оператора

$$S = \exp \left\{ \hat{\sigma} \sum_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}}^+ \right\}, \quad (4.3)$$

де

$$\hat{\sigma} = \sum_{\lambda\vec{q}} \Omega_{\lambda}^{-1} [\varphi_{\lambda}^*(\vec{q}) \hat{b}_{\lambda\vec{q}}^+ - \varphi_{\lambda}(\vec{q}) \hat{b}_{\lambda\vec{q}}]. \quad (4.4)$$

У результаті цього гамільтоніан (4.1) у нових операторах отримує діагональний вигляд

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}} \varepsilon_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}}^+ \hat{a}_{\vec{k}} + \sum_{\lambda=1}^2 \sum_{\vec{q}} \Omega_{\lambda\vec{q}} \hat{b}_{\lambda\vec{q}}^+ \hat{b}_{\lambda\vec{q}}, \quad (4.5)$$

де

$$\varepsilon_{\vec{k}} = E_{\vec{k}} - \sum_{\lambda \vec{q}} \Omega_{\lambda}^{-1} |\varphi_{\lambda}(\vec{q})|^2 \quad (4.6)$$

– енергія нових елементарних збуджень, народжених оператором  $\hat{a}_{\vec{k}}^{\pm}$

Уводячи при  $T=0K$  двочасову загаяну функцію Гріна

$$G(\vec{k}, t) = -i\theta(t) \langle 0 | [\hat{A}_{\vec{k}}^+(t), \hat{A}_{\vec{k}}^-(0)] | 0 \rangle \quad (4.7)$$

з урахуванням (4.5) та зв'язку старих і нових операторів

$$\hat{A}_{\vec{k}}^- = S \hat{a}_{\vec{k}}^- S^+ = \hat{a}_{\vec{k}}^- \exp\{-\sigma\} \quad (4.8)$$

з використанням операторної тотожності Вейля [180], отримуємо точний вираз для функції Гріна, залежної від часу

$$G(\vec{k}, t) = -i\theta(t) \langle 0 | e^{\hat{\sigma}(t)} e^{\hat{\sigma}(0)} | 0 \rangle \exp\left\{-\frac{i\varepsilon_{\vec{k}} t}{\hbar}\right\} = -i\theta(t) \exp\left\{-\frac{i\varepsilon_{\vec{k}} t}{\hbar} + g(t)\right\}. \quad (4.9)$$

Тут

$$g(t) = \sum_{\lambda=1}^2 \alpha_{\lambda} \left\{ \exp\left(-\frac{i\Omega_{\lambda} t}{\hbar}\right) - 1 \right\}, \quad (4.10)$$

де

$$\alpha_{\lambda} = \Omega_{\lambda}^{-2} \sum_{\vec{q}} |\varphi_{\lambda}(\vec{q})|^2 \quad (4.11)$$

– безрозмірний параметр, який характеризує енергію зв'язку квазічастинки з  $\lambda$ -ою модою (гілкою) фононів.

Тепер за означенням можна записати фур'є-образ функції Гріна (4.9) у вигляді

$$G(\vec{k}, \omega + i\eta) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^{\infty} \exp\left\{i(\omega - \hbar^{-1}\varepsilon_{\vec{k}} + i\eta)t + \sum_{\lambda=1}^2 \alpha_{\lambda} \left[ \exp\left(-\frac{i\Omega_{\lambda} t}{\hbar}\right) - 1 \right]\right\} dt. \quad (4.12)$$

Розкладом  $\exp\left[\sum_{\lambda=1}^2 \alpha_{\lambda} \exp(-i\Omega_{\lambda} t/\hbar)\right]$  у експоненційний ряд з

використанням бінома Ньютона [194] інтегрування у (4.12) виконуємо точно й у системі, де  $\hbar = 1$ , отримуємо

$$G(\vec{k}, \omega + i\eta) = e^{-\sum_{\lambda=1}^2 \alpha_{\lambda}} \sum_{p=0}^{\infty} \sum_{l=0}^p \frac{\alpha_1^{p-l} \alpha_2^l}{(p-l)! l! \left[ \omega - E_{\vec{k}} + \sum_{\lambda=1}^2 \alpha_{\lambda} \Omega_{\lambda} - (p-l)\Omega_1 - l\Omega_2 + i\eta \right]}. \quad (4.13)$$

Після зміни порядку підсумовування доданків у (4.13) отримуємо також точне, але більш зручне для фізичного аналізу представлення фур'є-образу функції Гріна

$$G(\vec{k}, \omega + i\eta) = e^{-\sum_{\lambda=1}^2 \alpha_{\lambda}} \left\{ \frac{1}{\omega - E_{\vec{k}} + \sum_{\lambda_1=1}^2 \alpha_{\lambda_1} \Omega_{\lambda_1}} + \sum_{\lambda=1}^{\infty} \sum_{l=1}^p \frac{\alpha_{\lambda}^l}{l_{\lambda}! \left[ \omega - E_{\vec{k}} + \sum_{\lambda_1=1}^2 \alpha_{\lambda_1} \Omega_{\lambda_1} - l_{\lambda} \Omega_{\lambda} + i\eta \right]} + \sum_{l_1, l_2=1}^{\infty} \frac{\alpha_1^{l_1} \alpha_2^{l_2}}{l_1! l_2! \left[ \omega - E_{\vec{k}} + \sum_{\lambda_1=1}^2 \alpha_{\lambda_1} \Omega_{\lambda_1} - l_1 \Omega_1 - l_2 \Omega_2 + i\eta \right]} \right\}. \quad (4.14)$$

Згідно із загальною теорією [175, 181], при  $T=0K$  запізнююча й причинна функції Гріна квазічастинок збігаються між собою, тому полюси  $G(\vec{k}, \omega + i\eta)$  точно визначають енергетичний спектр системи. Отже, з енергетичних знаменників трьох доданків формули (4.14) видно, що перенормований енергетичний спектр досліджуваної моделі можна подати у вигляді одного точного аналітичного виразу

$$E_{l_1, l_2}(\vec{k}) = E_{\vec{k}} - \sum_{\lambda=1}^2 \alpha_{\lambda} \Omega_{\lambda} + l_1 \Omega_1 + l_2 \Omega_2 \quad (l_1, l_2 = 0, 1, 2, \dots, \infty). \quad (4.15)$$

Із (4.15) випливає, що оскільки в системі відсутнє затухання ( $\eta \rightarrow 0$ ), то її спектр є дійсним. У ньому основна перенормована зона (при  $l_1 = l_2 = 0$ )

$$E_{0,0}(\vec{k}) = E_{\vec{k}} - \sum_{\lambda=1}^2 \alpha_{\lambda} \Omega_{\lambda} \quad (4.16)$$

зміщена в низькоенергетичну область відносно основної зони ( $E_{\vec{k}}$ ) невзаємодіючої квазічастинки на величину  $\sum_{\lambda=1}^2 \alpha_{\lambda} \Omega_{\lambda}$ . Крім цього, виникає безмежна кількість дискретних груп сателітних рівнів, які відповідають зв'язаним станам квазічастинки зі всіма можливими комбінаціями різних чисел фононів обох мод. Серед них можна виділити: а) при  $l_2 = 0; l_1 = 1, 2, \dots$  та  $l_1 = 0; l_2 = 1, 2, \dots$  дві безмежні не змішані групи еквідистантних рівнів

$$E_{l_{\lambda}}(\vec{k}) = E_0 - \sum_{\lambda=1}^2 \alpha_{\lambda_1} \Omega_{\lambda_1} + \alpha_{\lambda} \Omega_{\lambda}, \quad (l_{\lambda} = 1, 2, \dots, \infty; \lambda = 1, 2) \quad (4.17)$$

кожній з яких відповідають зв'язані стани квазічастинки з усіма можливими числами енергій кожної з обох окремих фононних мод; б) безмежну кількість змішаних груп сателітних рівнів

$$E_{l_1, l_2 \neq 0}(\vec{k}) = E_{\vec{k}} - \sum_{\lambda=1}^2 \alpha_{\lambda} \Omega_{\lambda} + l_1 \Omega_1 + l_2 \Omega_2 \quad (l_1, l_2 = 1, 2, \dots, \infty) \quad (4.18)$$

зі всіма можливими комбінаціями чисел фононних енергій, що відповідають зв'язаним станам квазічастинки з суперпозицією обох фононних мод. Зазначимо, що при відсутності однієї з мод у системі один із параметрів  $\alpha_{\lambda}$  стає рівним нулю, тому в (4.14) із суми по  $\lambda$  залишається лише один доданок, а суми по  $l_1$  і  $l_2$  – зануляються. Отже, отриманий перенормований спектр, як і повинно бути, збігається з перенормованим спектром одномодової системи [193, 178], а комбіновані зв'язані стани зникають.

Знайдений перенормований спектр системи (4.15) з урахуванням зв'язку фур'є-образу запізнюючої функції Гріна з масовим оператором ( $M(\vec{k}, \omega)$ ) через рівняння Дайсона

$$G(\vec{k}, \omega) = \{\omega - E_{\vec{k}} - M(\vec{k}, \omega)\}^{-1} \quad (4.19)$$

дає можливість визначити ефективні середні числа віртуальних фононів ( $N_{st}$ ) у так званих квазічастинкових фононних «шубах» стаціонарних ( $st$ )

станів системи з енергіями  $E_{st}$ . Як відомо [138, 171], ці числа в загальному випадку визначаються як

$$N_{st} = \left\{ 1 - \left[ M'_{\omega}(\omega = E_{st}) \right]^{-1} \right\}^{-1} \equiv 1 - G^2(\omega = E_{st}) \left\{ G'_{\omega}(\omega = E_{st}) \right\}^{-1} \quad (4.20)$$

і в цій моделі розраховуються точно аналітично. У результаті для середніх чисел фононів основної зони з енергією  $E_{0,0}(\vec{k})$  та двох незмішаних груп  $\lambda = 1, 2$  сателітних рівнів  $E_{l_{\lambda}}(0)$  зв'язаних станів квазічастинки з фононами кожної окремої фононної моди отримується точний аналітичний вираз

$$N(\alpha_1, \alpha_2; l_{\lambda}) = 1 - \alpha_{l_{\lambda}}^{l_{\lambda}} (l_{\lambda}!)^{-1} \exp\{-(\alpha_1 + \alpha_2)\}, \quad (l_{\lambda} = 1, 2, \dots, \infty; \lambda = 1, 2), \quad (4.21)$$

а для середніх чисел фононів змішаних груп сателітних станів з енергіями  $E_{l_1, l_2}(\vec{k})$  відповідно

$$N(\alpha_1, \alpha_2; l_1, l_2) = 1 - \alpha_1^{l_1} \alpha_2^{l_2} (l_1! l_2!)^{-1} \exp\{-(\alpha_1 + \alpha_2)\}, \quad (l_1, l_2 = 1, 2, \dots, \infty), \quad (4.22)$$

де  $l_1$  і  $l_2$  – числа енергій ( $\Omega_1$  і  $\Omega_2$ ) фононних мод, які беруть участь у формуванні відповідних змішаних зв'язаних сателітних станів системи.

З формул (4.21) і (4.22) видно, що при відсутності в системі однієї з фононних мод (наприклад  $\Omega_2 = 0$ ,  $\alpha_2 = 0$ ) середнє число фононів у змішаних групах станів втрачає сенс через їх відсутність, а середнє число фононів з енергією  $\Omega_1$  і константою зв'язку  $\alpha_1$  у основному ( $l_1 = 0$ ) і сателітних ( $l_1 \neq 0$ ) станах системи

$$N(\alpha_1; l_1) = 1 - \alpha_1^{l_1} (l_1!)^{-1} \exp(-\alpha_1) \quad (l_1 = 0, 1, 2, \dots, \infty), \quad (4.23)$$

як і повинно бути в граничному випадку, збігається з результатами, отриманими для одномодової системи при  $T=0\text{K}$  у роботі [193]. Щодо аналізу цих формул у загальному вигляді для довільних станів, то з розрахованих залежностей від  $\alpha_1$  при  $\alpha_2 = \text{const}$  середніх чисел фононів ( $N$ ) у кількох нижніх перенормованих станах системи, наведених на рисунку. 4.1, видно таку специфіку.

В основному стані системи з енергією  $E_{0,0}(\vec{k} = 0)$  (наприклад, при  $\alpha_2 = const \geq 0, l_1, l_2 = 0$ ) середнє число фононів, як функція  $\alpha_1$ , має аналітичний вигляд

$$N(\alpha_1, \alpha_2 = const \geq 0; 0, 0) = 1 - \exp[-(\alpha_1 + \alpha_2)]. \quad (4.24)$$

Отже, зі збільшенням  $\alpha_1$  від 0 до  $\infty$  воно монотонно зростає від мінімальної величини  $N(0, \alpha_2; 0) = 1 - \exp[-\alpha_2]$  до максимальної  $N(\alpha_1 \rightarrow \infty, \alpha_2; 0) \rightarrow 1$ . Це означає, що при малих значеннях величини  $(\alpha_1 + \alpha_2 \ll 1)$  середнє число віртуальних фононів у «шубі» мале ( $N \sim \alpha_1 + \alpha_2$ ), а тому слабо «одягнена» квазічастинка в цьому стані зберігає властивості, близькі до тих, які вона мала до взаємодії з фононами. Зі збільшенням суми обох констант до околу, де  $\alpha_1 + \alpha_2 = \ln 2$ , число  $N(\alpha_1, \alpha_2; 0) = 1/2$ , тому, згідно з класифікацією зв'язаних станів, запровадженою ще в роботі [171], це означає, що в цьому стані система має властивості, характерні для фонон-квазічастинкового комплексу. Якщо ж величина  $(\alpha_1 + \alpha_2)$ , збільшуючись, значно перевищує  $\ln 2$ , то  $N(\alpha_1, \alpha_2; 0)$  прямує до 1, а отже цей зв'язаний стан системи має переважно фононні властивості.

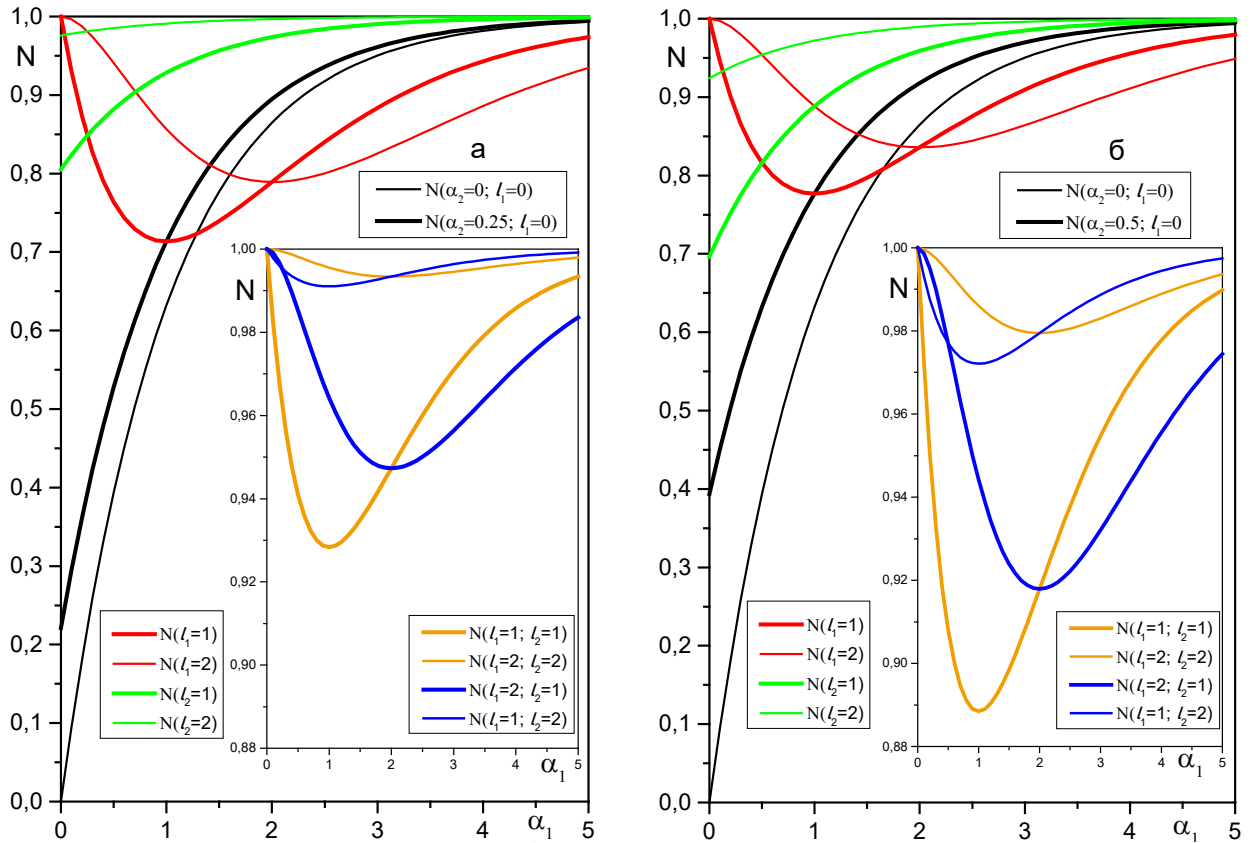
Функціональні залежності середніх чисел фононів  $N$ , від  $\alpha_1$  при  $\alpha_2 = const$  у обох незмішаних групах сателітних рівнів, як видно з (4.21) і з рисунків 4.1 а, б, відрізняються між собою. Це пов'язано з різницею в положенні їх мінімумів у координатах  $(\alpha_1, N)$ . Адже групі рівнів з енергіями  $E_{l_1}(\vec{k} = 0)$  відповідають числа  $N(\alpha_1, \alpha_2 = const, l_1)$ , які мають мінімум при цілих значеннях  $\alpha_1 = l_1 = 1, 2, \dots$  і тому відповідні їм величини мінімумів чисел визначаються формулою

$$\min N(\alpha_1 = l_1, \alpha_2 = const; l_1) = 1 - l_1^{l_1} (l_1!)^{-1} \exp\{-(l_1 + \alpha_2)\}, \quad (l_1 = 1, 2, \dots). \quad (4.25)$$

Групі рівнів з енергіями  $E_{l_2}(\vec{k} = 0)$  відповідають числа  $N(\alpha_1, \alpha_2 = const, l_2)$ , всі мінімуми яких розташовані при  $\alpha_1 = 0$ , а їх величини визначаються формулою

$$\min N(\alpha_1 = 0, \alpha_2 = \text{const}; l_2) = 1 - l_2^{l_2} (l_2!)^{-1} \exp(-\alpha_2), \quad (l_2 = 1, 2, \dots). \quad (4.26)$$

Властивості середніх чисел фононів обох незв'язаних груп сателітних рівнів добре видно з наведених простих формул (4.25), (4.26) та рисунків 4.1 а, б. Головна з них та, що у всіх цих зв'язаних станах квазічастинки з фононами система має властивості настільки ближчі до фононних, наскільки вищий рівень у будь-якій з цих обох сателітних груп.



**Рисунок 4.1.** Залежності середніх чисел фононів  $N$  від  $\alpha_1$  при  $\alpha_2 = 0,25$  (а),  $\alpha_2 = 0,5$  (б) в основних (при  $\alpha_2 = 0$  і  $\alpha_2 \neq 0$ ) і в чотирьох нижніх незмішаних фононних сателітних станах (на основних панелях) та чотирьох змішаних (на вкладках).

Нарешті функціональні залежності середніх чисел фононів від  $\alpha_1$  при  $\alpha_2 = \text{const}$  у всіх змішаних групах сателітних рівнів з енергіями  $E_{l_1, l_2}(\alpha_1, \alpha_2; l_1, l_2)$ , як видно з (4.22) і вставок на рисунках 4.1 а, б, подібні до відповідних груп рівнів з  $E_{l_1}(\vec{k} = 0)$  енергій, тому що їх мінімуми

$$\min N(\alpha_1 = l_1, \alpha_2 = \text{const}; l_1, l_2) = 1 - \frac{l_1^{l_1} \alpha_2^{l_2}}{l_1! l_2!} \exp\{-(\alpha_1 + \alpha_2)\}, \quad (l_2 = 1, 2, \dots) \quad (4.27)$$

також реалізуються, коли  $\alpha_1 = l_1 = 1, 2, \dots$ . З рисунків 4.1 а, б видно, що всі ці стани мають властивості дуже подібні до фононних.

### 4.3. Гамільтоніан і функції Гріна квазічастинки взаємодіючої з багатомодовими фононами. Ефективні (середні) числа фононів у стаціонарних станах

У цій частині узагальнюємо розроблену в попередньому підрозділі теорію взаємодії квазічастинки з двомодовими фононами на випадок системи, яка містить довільне число ( $\tau$ ) фононних мод. Досліджувана система складається з вузькозонної квазічастинки (екситон, електрон тощо), яка досить сильно взаємодіє з бездисперсійними багатомодовими поляризаційними фононами при криогенній температурі (формально  $T = 0\text{K}$ ). Гамільтоніан такої системи в зображенні чисел заповнення за всіма змінними записується у френліхівській формі [180, 191]

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}} E_{\vec{k}} \hat{A}_{\vec{k}}^+ \hat{A}_{\vec{k}} + \sum_{\lambda=1}^{\tau} \sum_{\vec{q}} \Omega_{\lambda} \hat{B}_{\lambda\vec{q}}^+ \hat{B}_{\lambda\vec{q}} + \sum_{\lambda=1}^{\tau} \sum_{\vec{q}} \varphi_{\lambda}(\vec{q}) \hat{A}_{\vec{k}}^+ \hat{A}_{\vec{k}} (\hat{B}_{\lambda\vec{q}} + \hat{B}_{\lambda-\vec{q}}^+). \quad (4.28)$$

Тут  $E_{\vec{k}}$  – енергія невзаємодіючої з фононами вузькозонної квазічастинки,  $\Omega_{\lambda}$  – енергія  $\lambda$ -ї фононної моди ( $\lambda = 1, 2, \dots, \tau$ ),  $\tau$  – число фононних мод,  $\varphi_{\lambda}(\vec{q})$  – функція зв'язку квазічастинки з  $\lambda$ -ю фононною модою. Квазічастинкові  $(\hat{A}_{\vec{k}}^+, \hat{A}_{\vec{k}})$  і фононні  $(\hat{B}_{\lambda\vec{q}}^+, \hat{B}_{\lambda\vec{q}})$  оператори вторинного квантування відповідають бозонним комутаційним співвідношенням. Далі вивчаємо давидівську модель системи, у якій виконується умова

$$\hat{n}^2 = \hat{n} = \sum_{\vec{k}} \hat{A}_{\vec{k}}^+ \hat{A}_{\vec{k}}. \quad (4.29)$$

Вона означає, що власні значення обох цих операторів ( $\hat{n}$  і  $\hat{n}^2$ ) можуть бути або 1, або 0, що трактуємо як умову існування (1) чи відсутності (0) «чистого» квазічастинкового стану.



Для розрахунку перенормованого енергетичного спектра системи спочатку здійснюємо діагоналізацію гамільтоніана (4.28) переходом від операторів  $\hat{A}_{\vec{k}}, \hat{B}_{\lambda\vec{q}}$  до нових  $\hat{a}_{\vec{k}}, \hat{b}_{\lambda\vec{q}}$  за допомогою унітарного оператора

$$S = \exp \left\{ \sum_{\lambda=1}^{\tau} \sum_{\vec{q}, \vec{k}} \Omega_{\lambda}^{-1} [\varphi_{\lambda}^*(\vec{q}) \hat{b}_{\lambda\vec{q}}^+ - \varphi_{\lambda}(\vec{q}) \hat{b}_{\lambda\vec{q}}] \hat{a}_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}}^+ \right\}, \quad (4.30)$$

який містить суму за всіма ( $\tau$ ) гілками фононних мод.

Гамільтоніан (4.28) у нових операторах має діагональний вигляд

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}} \mathcal{E}_{\tau}(\vec{k}) \hat{a}_{\vec{k}}^{\dagger} \hat{a}_{\vec{k}} + \sum_{\lambda=1}^{\tau} \sum_{\vec{q}} \Omega_{\lambda} \hat{b}_{\lambda\vec{q}}^{\dagger} \hat{b}_{\lambda\vec{q}}, \quad (4.31)$$

де

$$\mathcal{E}_{\tau}(\vec{k}) = E_{\vec{k}} - \sum_{\lambda=1}^{\tau} \sum_{\vec{q}} \Omega_{\lambda}^{-1} |\varphi_{\lambda}(\vec{q})|^2 \quad (4.32)$$

– перенормована енергія нових елементарних збуджень, народжених оператором  $\hat{a}_{\vec{k}}^{\dagger}$ .

Далі двочасову загаяну функцію Гріна  $G(\vec{k}, t)$ , яка в цьому випадку збігається з причинною функцією Гріна [171, 175, 180], з використанням операторної тотожності Вейля [180] розраховуємо точно й отримуємо аналітичний вираз

$$G(\vec{k}, t) = -i\theta(t) \exp \left\{ -i\hbar^{-1} \mathcal{E}_{\tau}(\vec{k}) t + g(t) \right\}. \quad (4.33)$$

Тут

$$g(t) = \sum_{\lambda=1}^{\tau} \alpha_{\lambda} \left\{ \exp[-i\hbar^{-1} \Omega_{\lambda} t] - 1 \right\} = -\alpha(\tau) + \sum_{\lambda=1}^{\tau} \alpha_{\lambda} \exp(-i\hbar^{-1} \Omega_{\lambda} t), \quad (4.34)$$

де

$$\alpha(\tau) = \sum_{\lambda=1}^{\tau} \alpha_{\lambda}, \quad \alpha_{\lambda} = \Omega_{\lambda}^{-2} \sum_{\vec{q}} |\varphi(\vec{q})|^2 \quad (4.35)$$

– безрозмірні параметри, які характеризують енергію зв'язку квазічастинки зі всіма  $\tau$  модами й окремою  $\lambda$ -моду фонових зокрема.

Оскільки  $G(\vec{k}, t)$  залежить від числа  $\tau$  фонових мод, то тут і далі у фур'є-образі цієї функції індекс  $\tau$  доцільно позначати явно. Отже, за означенням фур'є-образ загальної функції Гріна (4.33) отримуємо у вигляді

$$\begin{aligned} G_\tau(\vec{k}, \omega + i\eta) &= -\frac{i}{\hbar} \int_0^\infty \exp\left\{i(\omega - \hbar^{-1}\mathcal{E}_\tau(\vec{k}) + i\eta)t - \alpha(\tau) + \sum_{\lambda=1}^{\tau} \alpha_\lambda \exp(-i\hbar^{-1}\Omega_\lambda t)\right\} dt = \\ &= -\frac{i}{\hbar} e^{-\alpha(\tau)} \int_0^\infty \exp\left[i(\omega - \hbar^{-1}\mathcal{E}_\tau(\vec{k}) + i\eta)t\right] \sum_{n_1=0}^\infty \frac{1}{n_1!} \left\{ \sum_{\lambda=1}^{\tau} \alpha_\lambda \exp(-i\hbar^{-1}\Omega_\lambda t) \right\}^{n_1} dt. \end{aligned} \quad (4.36)$$

Застосовуючи до  $\left\{ \sum_{\lambda=1}^{\tau} \alpha_\lambda \exp(-i\hbar^{-1}\Omega_\lambda t) \right\}^{n_1}$  поліномом Ньютона із (4.36),

отримуємо

$$\begin{aligned} G_\tau(\vec{k}, \omega + i\eta) &= -\frac{i}{\hbar} e^{-\alpha(\tau)} \int_0^\infty \exp\left[i(\omega - \hbar^{-1}\mathcal{E}_\tau(\vec{k}) + i\eta)t\right] dt \times \quad (4.37) \\ &\times \sum_{n_1=0}^\infty \sum_{n_2=0}^{n_1} \sum_{n_3=0}^{n_2} \dots \sum_{n_{\tau-1}=0}^{n_{\tau-2}} \sum_{n_\tau=0}^{n_{\tau-1}} \prod_{\lambda=1}^{\tau-1} \frac{[\alpha_\lambda \exp(-i\hbar^{-1}\Omega_\lambda t)]^{n_\lambda - n_{\lambda+1}}}{(n_\lambda - n_{\lambda+1})!} \frac{[\alpha_\tau \exp(-i\hbar^{-1}\Omega_\tau t)]^{n_\tau}}{n_\tau!}. \end{aligned}$$

Інтегрування у формулі (4.37) виконуємо в загальному вигляді і для  $G_\tau(\vec{k}, \omega + i\eta)$  одержуємо точний аналітичний вираз

$$\begin{aligned} G_\tau(\vec{k}, \omega + i\eta) &= e^{-\alpha(\tau)} \sum_{n_1=0}^\infty \sum_{n_2=0}^{n_1} \sum_{n_3=0}^{n_2} \dots \sum_{n_{\tau-1}=0}^{n_{\tau-2}} \sum_{n_\tau=0}^{n_{\tau-1}} \prod_{\lambda=1}^{\tau-1} \frac{\alpha_\lambda^{n_\lambda - n_{\lambda+1}} \alpha_\tau^{n_\tau}}{(n_\lambda - n_{\lambda+1})! n_\tau!} \times \\ &\left\{ \omega + i\eta - \hbar^{-1} \left[ \mathcal{E}_\tau(\vec{k}) + \sum_{\lambda=1}^{\tau-1} (n_{\lambda_1} - n_{\lambda_1+1}) \Omega_{\lambda_1} + n_\tau \Omega_\tau \right] \right\}^{-1}. \end{aligned} \quad (4.38)$$

Отримана формула (4.38) відповідає відомому з квантової теорії поля [175, 186] точному співвідношенню

$$\int_0^{\infty} \text{Im} G_{\tau}(\vec{k}, \omega + i\eta) d\omega = -\pi. \quad (4.39)$$

Насправді, інтегруючи уявну частину виразу (4.38) з використанням тотожності Дірака, отримуєтьсямо

$$\begin{aligned} & \int_0^{\infty} \text{Im} e^{-\alpha(\tau)} \sum_{n_1=0}^{\infty} \sum_{n_2=0}^{n_1} \dots \sum_{n_{\tau-1}=0}^{n_{\tau-2}} \sum_{n_{\tau}=0}^{n_{\tau-1}} \prod_{\lambda=1}^{\tau-1} \frac{\alpha_{\lambda}^{n_{\lambda}-n_{\lambda+1}} \alpha_{\tau}^{n_{\tau}}}{(n_{\lambda}-n_{\lambda+1})! n_{\tau}!} \times \\ & \times \left( -i\pi\delta \left\{ \omega - \hbar^{-1} \left[ \mathcal{E}_{\tau}(\vec{k}) + \sum_{\lambda=1}^{\tau} (n_{\lambda}-n_{\lambda+1})\Omega_{\lambda} + n_{\tau}\Omega_{\tau} \right] \right\} d\omega \right) = \\ & = -\pi e^{-\alpha(\tau)} \sum_{n_1=0}^{\infty} \sum_{n_2=0}^{n_1} \dots \sum_{n_{\tau-1}=0}^{n_{\tau-2}} \sum_{n_{\tau}=0}^{n_{\tau-1}} \prod_{\lambda=1}^{\tau-1} \frac{\alpha_{\lambda}^{n_{\lambda}-n_{\lambda+1}} \alpha_{\tau}^{n_{\tau}}}{(n_{\lambda}-n_{\lambda+1})! n_{\tau}!} = -\pi e^{-\alpha(\tau)} e^{\alpha(\tau)} = -\pi. \end{aligned} \quad (4.40)$$

Щоб одержати точні аналітичні вирази для перенормованого енергетичного спектра системи й середніх чисел фононів у всіх станах системи, за допомогою зміни порядку підсумовування доданків у формулі (4.38), приводимо фур'є-образ  $G_{\tau}(\vec{k}, \omega + i\eta)$  до вигляду

$$\begin{aligned} G_{\tau}(\vec{k}, \omega + i\eta) = e^{-\alpha(\tau)} & \left[ \frac{1}{\omega - \hbar^{-1} \mathcal{E}_{\tau}(\vec{k}) + i\eta} + \sum_{s=1}^{\tau} \left( \sum_{\lambda_1=1}^{\tau+1-s} \sum_{\lambda_2=\lambda_1+1}^{\tau+2-s} \dots \sum_{\lambda_{s-1}=\lambda_{s-2}+1}^{\tau-1} \sum_{\lambda_s=\lambda_{s-1}+1}^{\tau} \times \right. \right. \\ & \left. \left. \times \sum_{n_{\lambda_1}=1}^{\infty} \dots \sum_{n_{\lambda_s}=1}^{\infty} \prod_{\ell=1}^s \frac{\alpha_{\lambda_{\ell}}^{n_{\lambda_{\ell}}} }{n_{\lambda_{\ell}}!} \left\{ \omega + i\eta - \hbar^{-1} \left[ \mathcal{E}_{\tau}(\vec{k}) + \sum_{p=1}^s n_{\lambda_p} \Omega_{\lambda_p} \right] \right\}^{-1} \right) \right]. \end{aligned} \quad (4.41)$$

Згідно із загальною теорією [150, 175 ], при  $T=0\text{K}$  запізнююча й причинна функції Гріна квазічастинок збігаються між собою. Отже, полюси фур'є-образа функції Гріна (4.41) визначають перенормований спектр системи, а оскільки затухання відсутнє ( $\eta \rightarrow 0$ ), то енергетичний спектр досліджуваної моделі є стаціонарним і визначається точними аналітичними виразами

$$\mathcal{E}_{\tau,0}(\vec{k}) \equiv \mathcal{E}_{\tau}(\vec{k}) = E_{\vec{k}} - \sum_{\lambda=1}^{\tau} \alpha_{\lambda} \Omega_{\lambda}, \quad (4.42)$$

$$\mathcal{E}_{\tau,s}(\vec{k}) = \mathcal{E}_{\tau}(\vec{k}) + \sum_{p=1}^s n_{\lambda_p} \Omega_{\lambda_p}; \quad (n_{\lambda_p} = 0,1,2,\dots,\infty) \quad (4.43)$$

де

$$s = 1,2,\dots,\tau; \quad p = 1,2,\dots,s; \quad p \leq \lambda_p \leq \tau + p - s.$$

Звідси видно, що перенормований спектр одномодової системи ( $\tau = s = 1$ )

$$\mathcal{E}_{1,1}(\vec{k}) = \mathcal{E}_1(\vec{k}) + n_1 \Omega_1 = E_{\vec{k}} - \alpha_1 \Omega_1 + n_1 \Omega_1; \quad n_1 = 0,1,\dots,\infty, \quad (4.44)$$

як і повинно бути, цілком збігається зі спектром, який давно й точно знайденим Давидовим, що наведений у роботі [180] для цієї ж моделі. Отже, стаціонарний спектр системи з  $\tau=1$  містить зміщену на величину  $\alpha_1 \Omega_1$  у низькоенергетичну область енергію основної зони ( $\mathcal{E}_1(\vec{k})$ ) та групу нескінченної кількості еквідистантних сателітних енергетичних рівнів ( $n_1 \Omega_1; n_1 = 1,2,\dots,\infty$ ), які відповідають зв'язаним станам квазічастинки з числом  $n_1$  віртуальних фононів.

Щодо перенормованих спектрів систем з довільним числом ( $\tau$ ) фононних мод, то їх властивості будуть детально досліджені в наступному підрозділі. Поки що звернемо увагу на принципову відмінність щойно отриманих точних спектрів систем з  $\tau \geq 2$ , які описуються формулами (4.42), (4.43), від наведених у роботі [180], де вони розраховані наближено. Незалежно від кількості ( $\tau$ ) мод у системі, спектр (4.42), (4.43) є дискретним і незатухаючим, оскільки при  $T=0\text{K}$  квазічастинка взаємодіє лише з віртуальними фононами, які, за законом збереження енергії, не можуть поглинатися у процесах взаємодії й тому не викликають затухання. Цей спектр містить зміщену на величину  $\sum_{\lambda=1}^{\tau} \alpha_{\lambda} \Omega_{\lambda}$  у низькоенергетичну область енергію

основної зони  $\mathcal{E}_{\tau}(\vec{k})$  і число  $R_{\tau} = \sum_{s=0}^{\tau} R_{\tau,s} = \sum_{s=0}^{\tau} \frac{\tau!}{(\tau-s)!s!} = 2^{\tau}$  груп, кожна з яких

містить безмежну кількість дискретних енергетичних рівнів, що відповідають сателітним станам квазічастинки, зв'язаної з різним числом фононів у всіх незмішаних і змішаних підгрупах.

Зауважимо, що в роботі [180] для цієї ж моделі ( $T=0K$ ,  $\tau \geq 2$ ) наведена залежність уявної частини  $G(\vec{k}, \omega)$ , що має форму кривої Гауса з півшириною, яка в наших позначеннях пропорційна ненульовій величині  $\sqrt{\sum_{\lambda=1}^{\tau} \alpha_{\lambda} \Omega_{\lambda}^2}$ . Такий результат не є фізичним, оскільки, як уже було зазначено, закон збереження енергії забороняє процеси з поглинанням віртуальних фононів, які могли б спричинити згасання. Причиною отриманого результату в роботі [180] був наближений розрахунок інтеграла через математично некоректне розширення скінченного інтервалу інтегрування за часовою змінною  $t$  до безмежності без врахування раніше знехтуваних доданків, які містять безмежну кількість степенів  $t$  вище другого.

Відомий зв'язок фур'є-образу запізнюючої функції Гріна з масовим оператором ( $M(\vec{k}, \omega)$ ) через рівняння Дайсона [150, 171, 175, 181]

$$G(\vec{k}, \omega) = \left\{ \omega - \hbar^{-1} (E_{\vec{k}} + M(\vec{k}, \omega)) \right\}^{-1} \quad (4.45)$$

дозволяє визначити середні числа фононів ( $N_{st}$ ) у так званих квазічастинкових фононних «шубах» стаціонарних (st) станів системи з енергіями  $E_{st}$ . Як відомо [171], при  $\vec{k} = 0$  ці числа в загальному випадку визначаються похідною від масового оператора

$$N = \left\{ 1 - \left[ M'_{\omega} (\omega = \hbar^{-1} E_{st}) \right]^{-1} \right\}^{-1} \equiv 1 - G^2 (\omega = \hbar^{-1} E_{st}) \left\{ G'_{\omega} (\omega = \hbar^{-1} E_{st}) \right\}^{-1}. \quad (4.46)$$

У досліджуваній моделі системи з довільним числом ( $\tau$ ) фононних мод середні числа фононів  $N_{\tau,s}$  у стаціонарних станах розраховуємо точно й описуємо простими аналітичними виразами

$$N_{\tau,0} = 1 - e^{-\alpha(\tau)}, \quad N_{\tau,s} = 1 - e^{-\alpha(\tau)} \prod_{p=1}^s \frac{\alpha^{\lambda_p}}{n_{\lambda_p}!}, \quad (4.47)$$

де

$$s = 1, 2, \dots, \tau; \quad p = 1, 2, \dots, s; \quad p \leq \lambda_p \leq \tau + p - s.$$

Отже, отримані формули (4.42) і (4.43) визначають перенормований спектр, а (4.47) - середні числа фононів у всіх станах системи з довільною кількістю фононних мод, що раніше не було предметом досліджень.

#### 4.4. Властивості перенормованих енергетичних спектрів та середніх чисел фононів у всіх станах систем з різною кількістю фононних мод

Користуючись отриманими загальними формулами (4.42), (4.43) та (4.47), далі детально розраховуємо й аналізуємо перенормовані енергетичні спектри й середні числа віртуальних фононів одно-, дво- і тримодових систем, оскільки вони мають деякі якісно нові відмінності. Що ж до систем з числом мод більшим за три, то їх властивості якісно подібні до тримодових, а кількісно відрізняються лише тим, що їх перенормовані спектри містять настільки більше фононних сателітних станів, наскільки більшою є кількість фононних мод ( $\tau$ ) у системі.

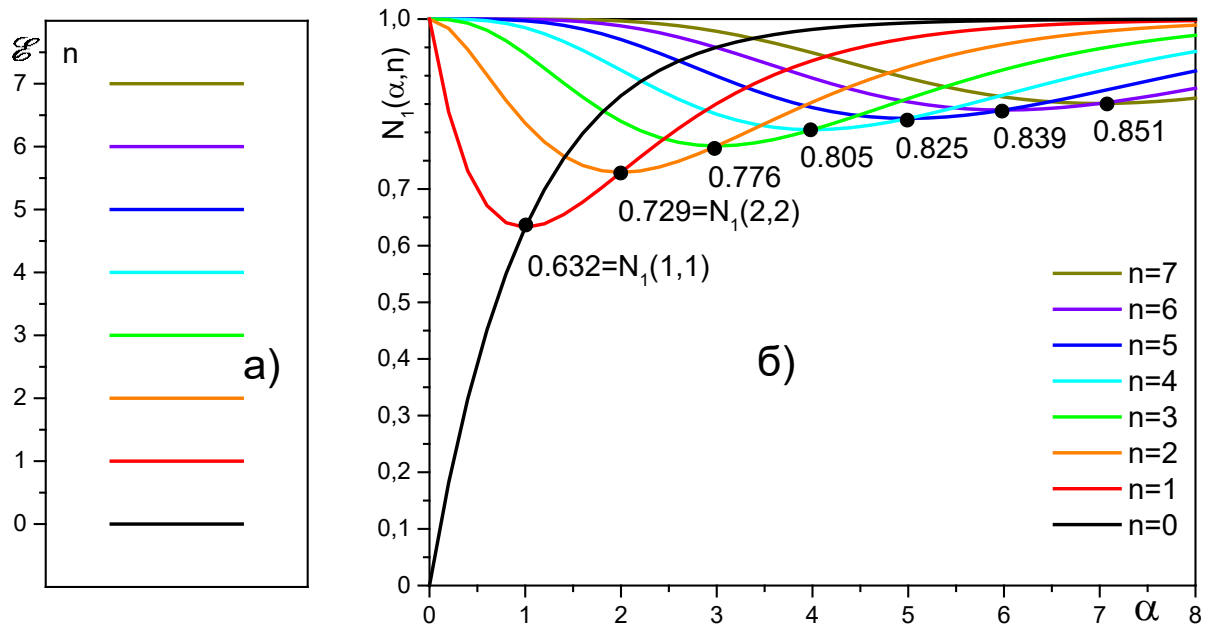
а) *Одномодова система* ( $\tau = 1$ ). Властивості перенормованого енергетичного спектра  $\mathcal{E}_{1,1}(n) \equiv \mathcal{E}_n$  найпростішої одномодової системи визначені в попередньому параграфі елементарним аналітичним виразом (4.42), а середні числа фононів у основному ( $N_1(\alpha, n = 0)$ ) і всіх сателітних ( $N_1(\alpha, n \geq 1)$ ) станах системи, як видно з (4.47), також визначаються просто

$$N_1(\alpha, 0) = 1 - e^{-\alpha}; \quad N_1(\alpha, n) = 1 - \frac{\alpha^n}{n!} e^{-\alpha}; \quad n = 1, 2, \dots, \infty. \quad (4.48)$$

Перенормований енергетичний спектр одномодової системи дискретний, невироджений і еквідистантний.

Приклад розрахованої нижньої частини перенормованого спектра  $\mathcal{E}_n$  та залежності середніх чисел  $N_1(\alpha, n)$  від константи зв'язку  $\alpha$  наводимо на

рисунку 4.2. З аналітичних виразів (4.43), (4.47) та з рисунків 4.2 (а, б) видно цікаву властивість досліджуваної системи: енергетичні відстані між сусідніми рівнями перенормованого спектра збігаються з енергією фонуна ( $\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_{n-1} = \Omega$ ) незалежно від величини  $\alpha$ , а числа  $N_1(\alpha, n)$  не залежать від величини фононної енергії, але залежать лише від  $\alpha$ . При цьому зі збільшенням  $\alpha$  від нуля середнє число фононів  $N_1(\alpha, 0)$  в основному стані монотонно збільшується від 0 до 1, а числа  $N_1(\alpha, n)$  у всіх сателітних станах спочатку зменшуються до  $\min N_1(\alpha = n, n) = 1 - \exp(-n)n^n/n!$ , а далі монотонно збільшуються до 1. Згідно з теорією припорогових явищ [171], залежно від величини середніх чисел віртуальних фононів у поляронних «шубах»  $n$ -их станів системи вони є або майже квазічастинковими (при  $N_1 < 1/2$ ), або комплексами, які поділяються на гібридні (при  $N_1 \sim 1/2$ ) та фононоподібні сильно зв'язані стани квазічастинки (при  $N_1 \sim 1$ ).



**Рисунок 4.2.** Схема нижніх рівнів перенормованого енергетичного спектру ( $\mathcal{E}$  в одиницях  $\Omega$ ) основного ( $n=0$ ) і фононних сателітних станів ( $n=1, 2, 3, \dots$ ) одномодової системи (а) та залежності середніх чисел фононів  $N_1(\alpha, n)$  у цих станах від константи взаємодії  $\alpha$  (б).

Отже, з аналітичних виразів (4.48) і рисунка 4.2 б видно, що оскільки в одномодовій системі для всіх сателітних станів ( $n = 1, 2, \dots, \infty$ ) виконується умова

$$N_1(0 < \alpha < \infty, n = 1, 2, \dots) \geq \min N_1(\alpha, 1) = N_1(1, 1) = 1 - e^{-1} = 0.632, \quad (4.49)$$

тобто  $N_1(\alpha, n = 1, 2, \dots) \sim 1$ , то незалежно від величини  $\alpha$  усі вони є комплексами, що належать до типу сильно зв'язаних станів квазічастинки з відповідною кількістю фононів. Величина  $N_1(1, 1)$  відіграє роль природної нижньої межі інтервалу зміни  $N_1(\alpha, n)$  ( $N_1(1, 1) = 0.632 \leq \min N_1(\alpha, n) \leq 1$ ), у якому перенормовані стани системи належать до типу комплексів квазічастинок сильно зв'язаних з фононами, де домінуючий внесок у величину  $N_1(\alpha, n)$  вносять фонони.

Згідно з класифікацією, запровадженою в роботі [171], у гібридних комплексах внески у величину  $N_1(\alpha, n)$  безфононної й фононної складових порівняні між собою, тому для цих станів природним (симетричним відносно величини  $N_1 = 1/2$ ) є інтервал зміни  $N_1(\alpha, n)$ , що відповідає умові

$$1 - N_1(1, 1) = 0.368 \leq N_1(\alpha, n) \leq N_1(1, 1) = 0.632. \quad (4.50)$$

Нарешті стани, у яких домінує внесок безфононної частини, визначаємо числом  $N_1(\alpha, n)$ , яке знаходиться в інтервалі

$$0 < N_1(\alpha, n) \leq 1 - N_1(1, 1) = 0.368. \quad (4.51)$$

Тепер очевидно, що в одномодовій системі всі сателітні стани мають властивості сильно зв'язаних з фононами комплексів при будь-яких величинах константи зв'язку  $\alpha$ . Що ж до основного перенормованого стану системи, то при  $0 < \alpha < 1 - \ln(e - 1) = 0.459$  він має властивості квазічастинки з незначною фононною «шубою» ( $N_1 < 0.368$ ). При  $0.459 < \alpha < 1$  цей стан є гібридним комплексом зі співмірними внесками безфононної й фононної складових, а при  $1 < \alpha$  він, як і всі сателітні, є сильнозв'язаним фонон-подібним комплексом.



б) *Двомодова система* ( $\tau = 2$ ). Із загальних аналітичних виразів перенормованих спектрів (4.43) і середніх чисел фононів (4.47) систем з довільним числом ( $\tau$ ) мод видно, що порівняно з одномодовою у двомодовій системі з'являються якісно нові властивості, пов'язані з тим, що, крім незмішаних сателітних станів, у системі виникають змішані комплекси, утворені внаслідок взаємодії квазічастинки з усіма різними числами фононів обох мод. Це може приводити або не приводити до часткового виродження сателітної частини спектра.

Згідно з (4.43) і (4.47), частина перенормованого спектра  $\mathcal{E}_{2,1}(n_\lambda)$  і чисел  $N_{2,1}(n_\lambda)$ , що відповідають незмішаним станам системи, визначаємо аналітичними виразами

$$\mathcal{E}_{2,1}(n_\lambda) = \mathcal{E}_2 + n_\lambda \Omega_\lambda; \quad N_{2,1}(n_\lambda) = 1 - \frac{\alpha_\lambda^{n_\lambda}}{n_\lambda!} e^{-\alpha(2)}; \quad n_\lambda = 1, 2, \dots, \infty; \quad \lambda = 1, 2; \quad (4.52)$$

де

$$\mathcal{E}_2 = E_0 - \sum_{\lambda=1}^2 \alpha_\lambda \Omega_\lambda, \quad N_{2,1}(0) = 1 - e^{-\alpha(2)}; \quad \alpha(2) = \alpha_1 + \alpha_2 \quad (4.53)$$

– перенормована енергія й середнє число фононів основного стану.

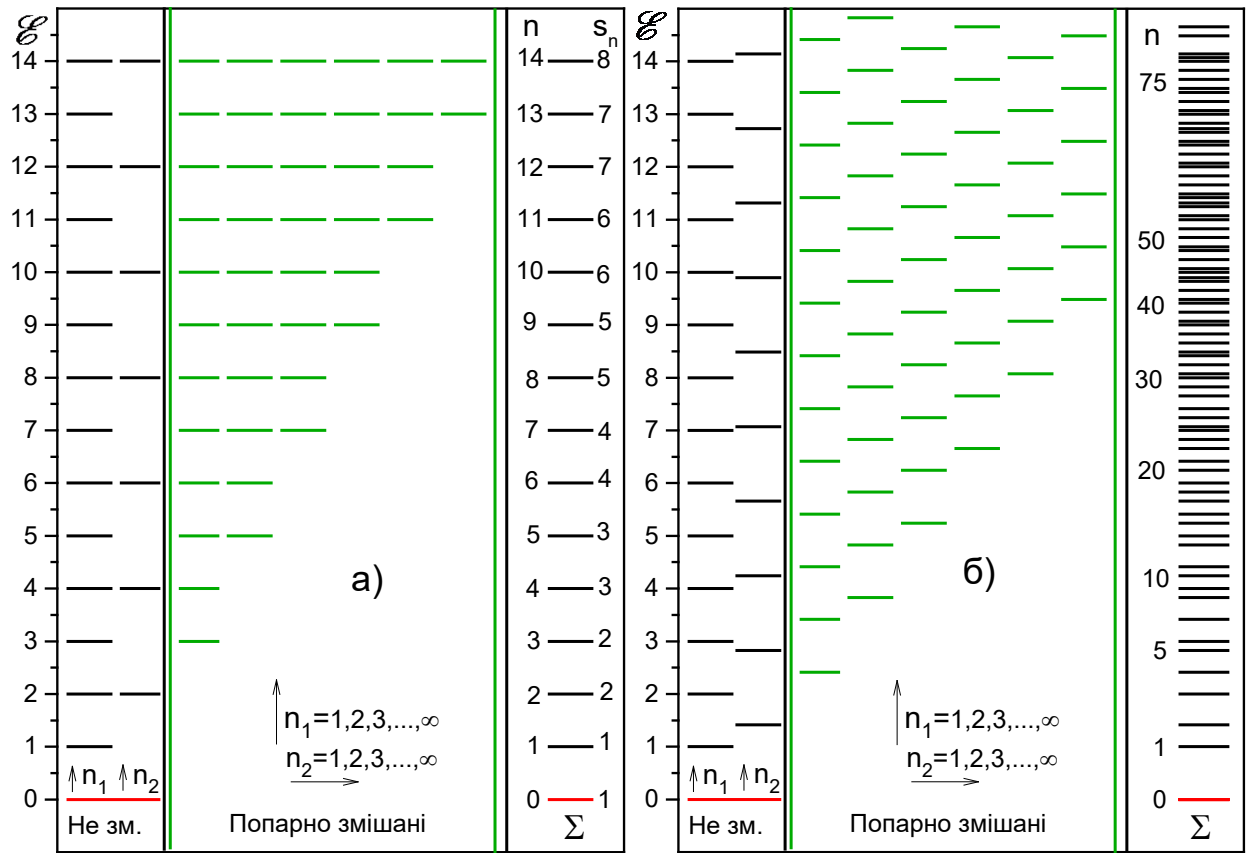
Частина перенормованого спектра  $\mathcal{E}_{2,2}(n_1, n_2)$  і чисел  $N_{2,2}(n_1, n_2)$ , що відповідають подвійно змішаним станам системи визначаємо виразами

$$\mathcal{E}_{2,2}(n_1, n_2) = \mathcal{E}_2 + n_1 \Omega_1 + n_2 \Omega_2; \quad N_{2,2}(n_1, n_2) = 1 - \frac{\alpha_1^{n_1} \alpha_2^{n_2}}{n_1! n_2!} e^{-\alpha(2)}; \quad (4.54)$$

$$n_1, n_2 = 1, 2, \dots, \infty.$$

На рисунках 4.3 і 4.4 наводимо приклади формування парціальними складовими повного перенормованого спектра (рисунки 4.3 а, б) та залежностей середніх чисел фононів (рис. 4.4) від констант взаємодії ( $\alpha_1, \alpha_2$ ) в різних станах двох типів двомодових систем. З аналітичних виразів (4.52) – (4.54) і рисунків 4.3 і 4.4 видно, що незалежно від величин  $\alpha_1$  і  $\alpha_2$ , але залежно від співвідношень між величинами енергій ( $\Omega_1$  і  $\Omega_2$ ) фононних мод, можуть

існувати два типи загальних перенормованих спектрів у частині фононних сателітних станів. Якщо відношення  $P = \Omega_2 / \Omega_1$  є раціональними числами ( $P > 1$ ), то нижня частина сателітного спектра є невиродженою, а кратність виродження ( $s_n$ ) решти станів тим більша, чим більша енергія їх станів. При цьому, якщо  $P$  ціле число, то сателітний спектр залишається еквідистантним (рисунок 4.3 а), а якщо  $P$  не ціле, то повний спектр виявляється частково виродженим, але не еквідистантним. Якщо ж  $P$  ірраціональне, то повний спектр дискретний, цілком невироджений і нееквідистантний (рисунок 4.3 б).



**Рисунок 4.3.** Схема нижніх рівнів перенормованого енергетичного спектра ( $\mathcal{E}$  в одиницях  $\Omega_1$ ) основного ( $n=0$ ) і частково вироджених а), та невироджених б) фононних сателітних станів ( $n_1, n_2 = 1, 2, 3, \dots$ ) двомодової системи. Основний рівень (—); сателітні рівні: незмішані (—), змішані (—);  $\Sigma$  — сумарний спектр,  $n$  — номер рівня в загальному спектрі,  $s_n$  — ступінь виродження;  $n_\lambda$  — номер рівня сформованого  $\lambda$ -ю модою. а)  $\Omega_1 = 1; \Omega_2 = 2$ ; б)  $\Omega_1 = 1; \Omega_2 = \sqrt{2}$ .

Середні числа фононів двомодових систем, як видно з аналітичних виразів (4.52) – (4.54) і рисунка 4.4, не залежать від величин енергій ( $\Omega_1, \Omega_2$ ) обох мод, однак залежать від величин обох констант зв'язку ( $\alpha_1, \alpha_2$ ). При цьому, оскільки умова

$$\min N_{2,s} = 1 - \prod_{\lambda=1}^s \frac{n_{\lambda}^{n_{\lambda}}}{n_{\lambda}!} e^{-(n_1+n_2)} > \min N_{1,1} = 1 - \frac{n_1^{n_1}}{n_1!} e^{-n_1}; \quad (4.55)$$

$$s = 1, 2; \quad n_{\lambda} = 1, 2, \dots, \infty$$

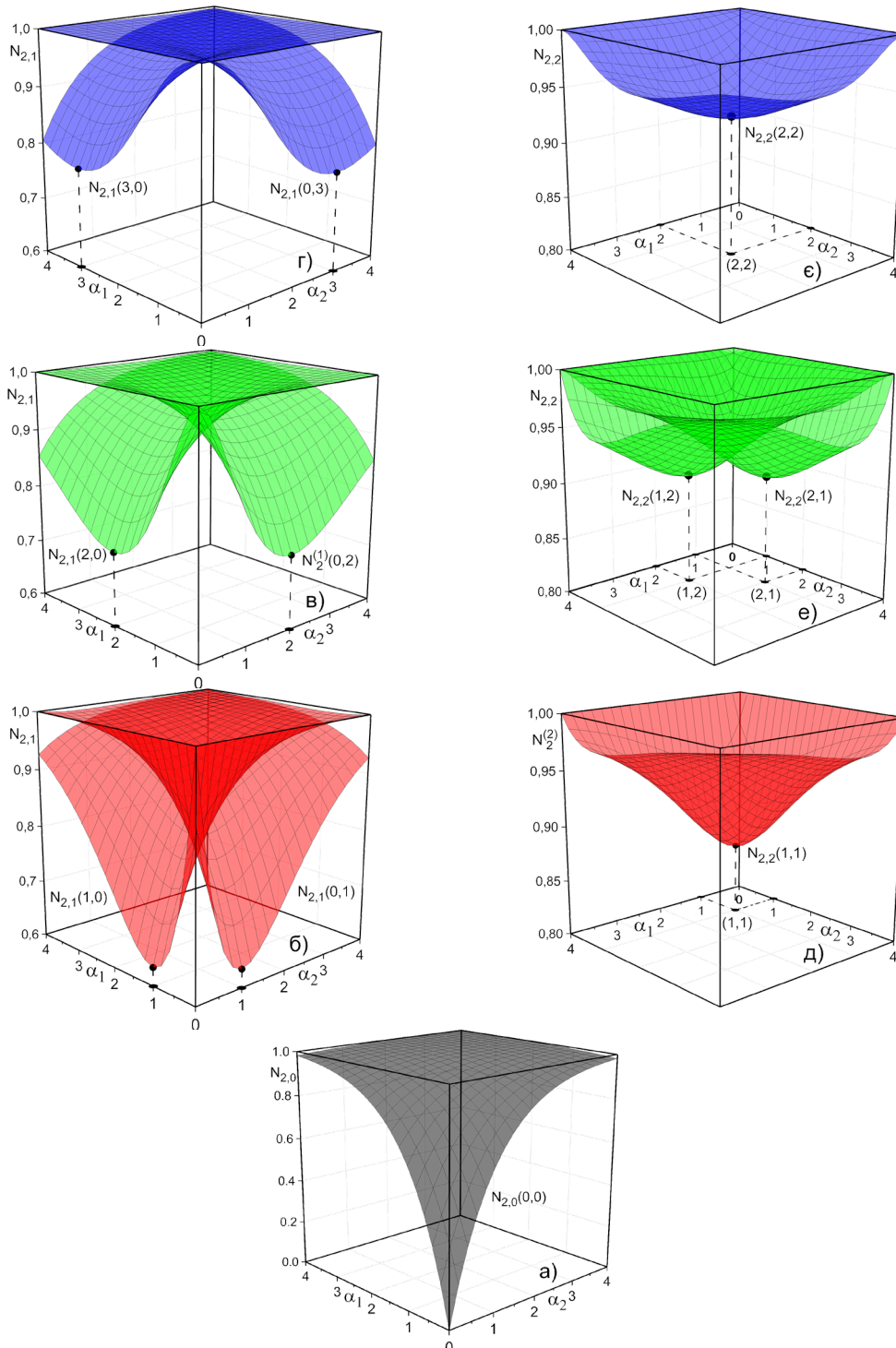
еквівалентна очевидній умові  $n_2^{n_2} < n_2! \exp n_2$ , яка справедлива для всіх чисел ( $n_2 = 1, 2, \dots, \infty$ ), то це означає, що подібно до одномодових не залежно від величин  $\alpha_1$  і  $\alpha_2$  усі сателітні стани двомодових систем є комплексами типу сильно зв'язаних фонон-подібних станів. Що ж до основного стану двомодової системи, то, як добре видно з рисунка 4.3 а, подібно до одномодової системи, при зміні (збільшенні)  $\alpha_1$  і  $\alpha_2$  квазічастинка послідовно змінює свої властивості від майже квазічастинкових, з незначною ( $N_2 < 1/2$ ) фононною «шубою», через гібридний комплекс з  $N_2 \sim 1/2$ , до сильно зв'язаного фононподібного комплексу з  $N_2 \sim 1$ .

в) *Тримодова система* ( $\tau = 3$ ). Властивості багатомодових систем ( $\tau \geq 4$ ) якісно подібні до тримодових, які, як буде видно далі, мало, але все-таки відрізняються від двомодових. Згідно з (4.43) і (4.44), перенормований спектр і середні числа фононів тримодової системи в основному стані визначаються як

$$\mathcal{E}_3 = E_0 - \sum_{\lambda=1}^3 \alpha_{\lambda} \Omega_{\lambda}, \quad N_2(0) = 1 - e^{-\alpha(3)}; \quad \alpha(3) = \sum_{\lambda=1}^3 \alpha_{\lambda}. \quad (4.56)$$

Сателітна частина спектра складається з двох безмежних груп рівнів – незмішаної й змішаної. Зі свого боку незмішана група містить три (за числом мод) підгрупи з безмежною кількістю рівнів, що характеризуються відповідними енергіями й середніми числами фононів

$$\mathcal{E}_{3,1}(n_\lambda) = \mathcal{E}_3 + n_\lambda \Omega_\lambda; \quad N_{3,1}(n_\lambda) = 1 - \frac{\alpha_\lambda^{n_\lambda}}{n_\lambda!} e^{-\alpha(3)}; \quad n_\lambda = 1, 2, \dots, \infty. \quad (4.57)$$



**Рисунок 4.4.** Залежності середніх чисел фононів ( $N_{\tau,s}(n_1, n_2)$ ) від констант зв'язку ( $\alpha_1, \alpha_2$ ) в основному (а) і в нижніх сателітних станах двомодової системи: незмішаних (б, в, г) та змішаних (д, е, е).

Група змішаних сателітних рівнів містить дві підгрупи. Перша з них складається з трьох серій безмежної кількості дискретних еквідистантних

рівнів енергій, яким відповідають попарні змішані стани всіх фононних мод. Для цієї підгрупи енергії  $\mathcal{E}_{3,s}$  і числа  $N_{3,s}$  визначаємо виразами

$$\begin{aligned}\mathcal{E}_{3,s}(n_{\lambda_1}, n_{\lambda_2}) &= \mathcal{E}_3 + n_{\lambda_1} \Omega_{\lambda_1} + n_{\lambda_2} \Omega_{\lambda_2}; \\ N_{3,s}(n_{\lambda_1}, n_{\lambda_2}) &= 1 - \frac{\alpha_{\lambda_1}^{n_{\lambda_1}} \alpha_{\lambda_2}^{n_{\lambda_2}}}{n_{\lambda_1}! n_{\lambda_2}!} e^{-\alpha(3)},\end{aligned}\quad (4.59)$$

де

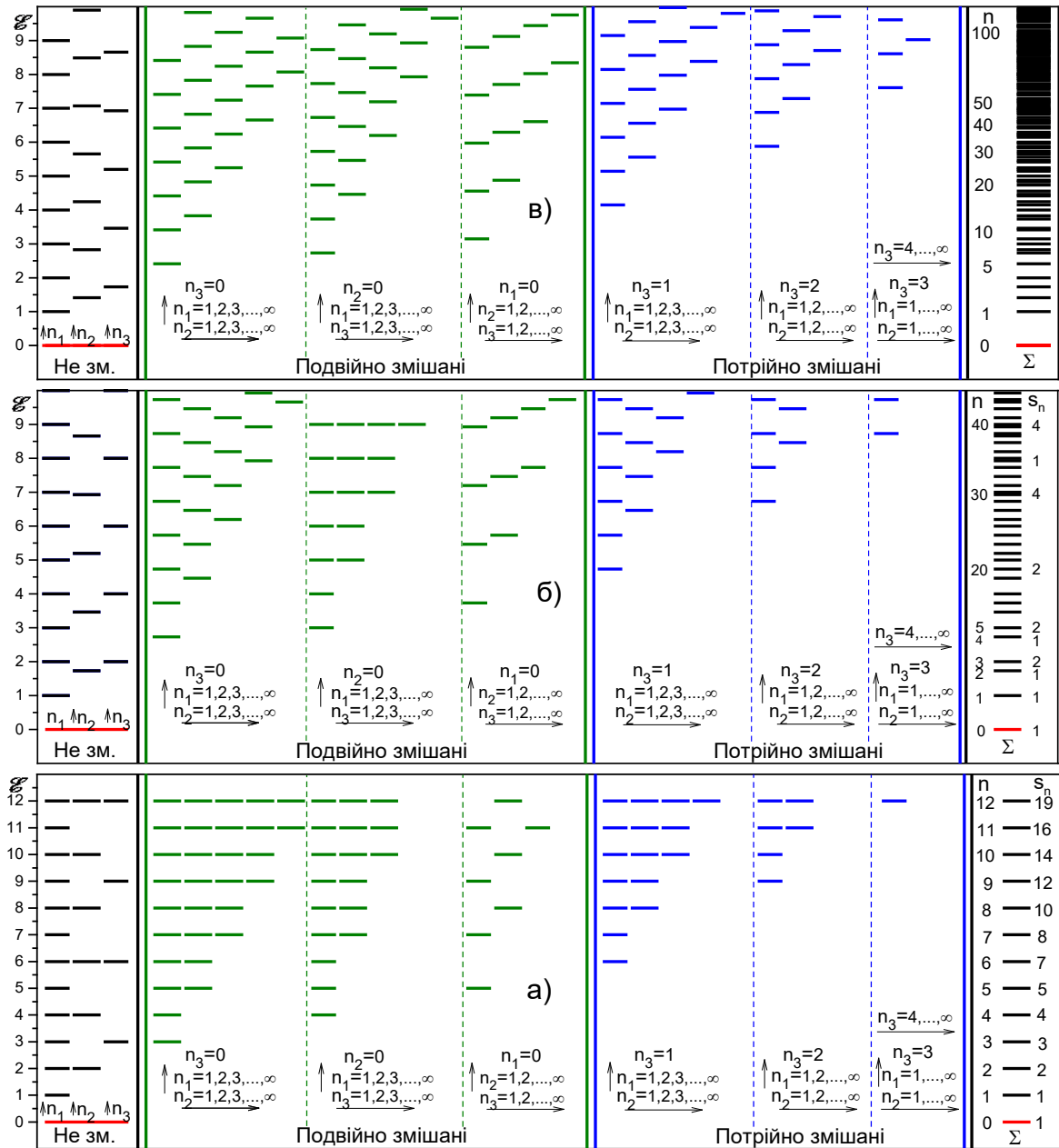
$$s = 1, 2, 3; \quad n_{\lambda_1}, n_{\lambda_2} = 1, 2, \dots, \infty; \quad \lambda_1 = 1, 2 < \lambda_2 = 2, 3. \quad (4.60)$$

Друга підгрупа містить безмежну кількість серій з безмежною кількістю рівнів, яким відповідають потрімно змішані стани фононних мод. Для них енергії  $\mathcal{E}_{3,3}$  і числа  $N_{3,3}$  визначаємо виразами

$$\begin{aligned}\mathcal{E}_{3,3}(n_\lambda) &= \mathcal{E}_3 + \sum_{\lambda=1}^3 n_\lambda \Omega_\lambda; & N_{3,3}(n_\lambda) &= 1 - \prod_{\lambda=1}^3 \frac{\alpha_\lambda^{n_\lambda}}{n_\lambda!} e^{-\alpha(3)}; \\ \alpha(3) &= \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3; & n_\lambda &= 1, 2, \dots, \infty.\end{aligned}\quad (4.61)$$

На рисунку 4.5 наводимо приклад формування повного перенормованого спектра трьох типів тримодових систем. Порівнюючи цей рисунок і формули (4.57) – (4.61) з рисунка 4.3 і формулами (4.52) – (4.54), бачимо, що властивості перенормованих спектрів і середніх чисел фононів тримодових систем відрізняються від двомодових лише тим, що в сателітній частині спектра з'явилася нова підгрупа з безмежною кількістю серій, які містять безмежну кількість рівнів, що відповідають ( $\mathcal{E}_{3,3}$ ) потрімно змішаним станам з середніми числами ( $N_{3,3}$ ) фононів у них.

Аналіз показує, що незалежно від співвідношення між величинами енергій усіх трьох мод, перенормований спектр дискретний, причому основний і перший сателітні рівні не вироджені. Решта сателітної частини спектра суттєво залежить від співвідношень між енергіями всіх трьох мод. Якщо енергії всіх мод кратні найменшій, то спектр еквідистантний і цілком вироджений. Якщо хоча б одна з мод не кратна до іншої, а інші кратні між собою, то спектр не еквідистантний і частково вироджений. Якщо ж



**Рисунок 4.5.** Схема основного й нижніх сателітних рівнів перенормованого енергетичного спектра  $\mathcal{E}$  (в одиницях  $\Omega_1$ ) трьох типів тримодових систем а) основний і перший сателітні рівні не вироджені, а решта – вироджені; б) весь спектр частково вироджений; в) не вироджений. Основний рівень (—), сателітні рівні: не змішані (—), подвійно змішані (—), потрійно змішані (—);  $\Sigma$  – сумарний спектр,  $n$  – номер рівня у загальному спектрі,  $s_n$  – ступінь виродження;  $n_\lambda$  – номер рівня, сформованого  $\lambda$ -ю модою. Знерозмірені параметри систем: а)  $\Omega_1 = 1; \Omega_2 = 2; \Omega_3 = 3$ ; б)  $\Omega_1 = 1; \Omega_2 = \sqrt{3}; \Omega_3 = 2$ ; в)  $\Omega_1 = 1; \Omega_2 = \sqrt{2}; \Omega_3 = \sqrt{3}$ .

відношення мод є ірраціональними числами, то спектр не вироджений і не еквідистантний.

Елементарний аналіз середніх чисел  $N_{\tau,s}$  показує, що в основному стані  $N_{3,0} > N_{2,0} > N_{1,0}$ , а в усіх сателітних станах  $\min N_{3,s} > \min N_{2,s} > N_{1,1}$ . Це означає, що в тримодових, як і в дво- й одномодових системах незалежно від величин  $\alpha_\lambda$  усі сателітні стани є сильно зв'язаними фонон-подібними комплексами, а в основному стані при збільшенні  $\alpha_\lambda$  квазічастинка змінює свої властивості від майже квазічастинкових, через гібридний комплекс, до сильно-зв'язаного фононподібного комплексу.

#### **4.5. Властивості перенормованих спектрів локалізованих квазічастинок взаємодіючих з одно- і дво- і тримодовими фононами в давидівській моделі з феноменологічним затуханням при $T=0K$**

Модифікований у цьому та попередньому підрозділах метод функцій Гріна дав можливість дослідити перенормовані спектри багаторівневих систем квазічастинок взаємодіючих з кількома фононними модами при  $T=0K$  у моделі Давидова без затухання, дозволяє сподіватися на можливість побудови послідовної загальної теорії взаємодії квазічастинок з фононами. Однак ця задача поки що є надто складною навіть з міркувань математичної громіздкості при врахуванні нефононних механізмів розсіювання. Отже, виникає запитання: чи введення феноменологічного затухання зберігає основні властивості перенормованого фононного спектра квазічастинок, виявлених у підході методу функцій Гріна? Відповідь на нього ствердна.

У цьому підрозділі вивчатимемо вплив дисипативних механізмів (врахованих феноменологічним затуханням) на формування властивостей коефіцієнта поглинання електромагнітного поля системою локалізованих квазічастинок, які взаємодіють з одно-, дво- і тримодовими поляризаційними фононами при  $T=0K$  у давидівській моделі системи.

Згідно з теорією Кубо про відгук ізотропної системи на зовнішню дію, коефіцієнт поглинання електромагнітного поля ( $\chi(\tilde{\omega})$ ) пов'язаний з фур'є-

образом запізнюючої функції Гріна квазічастинки ( $G(\tilde{\omega})$ ) співвідношенням [180]

$$\chi(\omega) = \frac{4\pi\hbar\omega_f^2 d^2}{V\omega v_g} I(\omega); \quad I(\omega) = -\text{Im}G(\tilde{\omega}); \quad (\tilde{\omega} = \omega + i\eta), \quad \eta \rightarrow +0. \quad (4.62)$$

Тут  $I(\omega)$  – функція форми смуги поглинання електромагнітного поля,  $\vec{d} = e\vec{r}$  дипольний момент,  $V$  – об’єм елементарної комірки,  $\omega_f$  – частота дипольного переходу,  $\omega$  – частота електромагнітного поля,  $v_g$  – групова швидкість.

Враховуючи плавну частотну залежність коефіцієнта біля  $I(\omega)$  у актуальному інтервалі частот, далі обмежимося дослідженням функції ( $I(\omega)$ ) форми смуги поглинання поля системою, яка складається з локалізованої квазічастинки (екситон, домішка тощо), що взаємодіє з бездисперсійними двомодовими поляризаційними фононами при  $T=0\text{K}$ . Як і в попередніх роботах [178, 180], у давидівській моделі гамільтоніан такої системи (без врахування дисипативних процесів) у зображенні чисел заповнення за всіма змінними можна подати у вигляді

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}} E_0 \hat{A}_{\vec{k}}^+ \hat{A}_{\vec{k}} + \sum_{\lambda=1}^3 \sum_{\vec{q}} \Omega_{\lambda} \left( \hat{B}_{\lambda\vec{q}}^+ \hat{B}_{\lambda\vec{q}} + \frac{1}{2} \right) + \sum_{\vec{k}\lambda\vec{q}} \varphi_{\lambda}(\vec{q}) \hat{A}_{\vec{k}}^+ \hat{A}_{\vec{k}} \left( \hat{B}_{\lambda\vec{q}} + \hat{B}_{\lambda-\vec{q}}^+ \right). \quad (4.63)$$

Тут  $E_0$  – енергія невзаємодіючої квазічастинки,  $\Omega_{\lambda}$  – енергія  $\lambda$ -ої фононної моди,  $\varphi_{\lambda}(\vec{q})$  – функція зв’язку квазічастинки з  $\lambda$ -ою фононною модою.

Квазічастинкові ( $\hat{A}_{\vec{k}}^+, \hat{A}_{\vec{k}}^-$ ) і фононні ( $\hat{B}_{\lambda\vec{q}}^+, \hat{B}_{\lambda\vec{q}}^-$ ) оператори вторинного квантування відповідають бозонним комутаційним співвідношенням.

Як уже відомо, за допомогою унітарного перетворення гамільтоніан (4.63) діагоналізується точно, що дозволяє отримати аналітичний вираз загальної функції Гріна квазічастинки

$$G(t) = -i\theta(t) \exp \left\{ -\frac{i\mathcal{E}t}{\hbar} + \sum_{\lambda=1}^3 \alpha_{\lambda} \left\{ \exp \left( -\frac{i\Omega_{\lambda}t}{\hbar} \right) - 1 \right\} \right\}, \quad (4.64)$$

де



$$\mathcal{E} = E_0 - \sum_{\lambda=1}^3 \alpha_{\lambda} \Omega_{\lambda}; \quad (\alpha_{\lambda} = \Omega_{\lambda}^{-2} \sum_{\bar{q}} |\varphi_{\lambda}(\bar{q})|^2) \quad (4.65)$$

– енергія нових елементарних збуджень, виражена через знерозмірений параметр ( $\alpha_{\lambda}$ ), який характеризує енергію зв'язку квазічастинки з  $\lambda$ -ою модою (гілкою) фононів.

Перехід до фур'є-образа  $G(\omega + i\eta)$  здійснюємо відповідним інтегруванням функції (4.64) з використанням бінома Ньютона. У результаті, уводячи феноменологічне затухання шляхом заміни малої величини ( $\eta \rightarrow +0$ ) на скінченну величину ( $\Gamma > 0$ ), отримуємо шукане і зручне для фізичного аналізу представлення функції  $G(\omega, \Gamma)$ .

$$\begin{aligned} G(\omega, \Gamma) = & \exp\left[-\sum_{\lambda=1}^3 \alpha_{\lambda}\right] \left\{ \frac{1}{\hbar\omega - \mathcal{E} + i\Gamma} + \sum_{\lambda=1}^3 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\alpha_{\lambda}^{n_{\lambda}}}{n_{\lambda}! [\hbar\omega - \mathcal{E} - n_{\lambda}\Omega_{\lambda} + i\Gamma]} + \right. \\ & \sum_{n_1, n_2=1}^{\infty} \frac{\alpha_1^{n_1} \alpha_2^{n_2}}{n_1! n_2! [\hbar\omega - \mathcal{E} - n_1\Omega_1 - n_2\Omega_2 + i\Gamma]} + \sum_{n_1, n_3=1}^{\infty} \frac{\alpha_1^{n_1} \alpha_3^{n_3}}{n_1! n_3! [\hbar\omega - \mathcal{E} - n_1\Omega_1 - n_3\Omega_3 + i\Gamma]} + \\ & + \sum_{n_2, n_3=1}^{\infty} \frac{\alpha_2^{n_2} \alpha_3^{n_3}}{n_2! n_3! [\hbar\omega - \mathcal{E} - n_2\Omega_2 - n_3\Omega_3 + i\Gamma]} + \\ & \left. + \sum_{n_1, n_2, n_3=1}^{\infty} \frac{\alpha_1^{n_1} \alpha_2^{n_2} \alpha_3^{n_3}}{n_1! n_2! n_3! [\hbar\omega - \mathcal{E} - n_1\Omega_1 - n_2\Omega_2 - n_3\Omega_3 + i\Gamma]} \right\}. \quad (4.66) \end{aligned}$$

Отриманий вираз для  $G(\omega, \Gamma)$  дає можливість розрахувати й проаналізувати залежності спектральних параметрів функції  $I(\omega)$  форми смуги поглинання електромагнітного поля від його частоти та енергетичних величин, які характеризують систему. Увівши зручні знеромірені змінні й параметри

$$I(\xi) = \Omega_1 I(\omega); \quad \gamma = \frac{\Gamma}{\Omega_1}; \quad \alpha = \sum_{\lambda=1}^3 \alpha_{\lambda}; \quad P_{\lambda} = \frac{\Omega_{\lambda}}{\Omega_1}; \quad (\lambda = 1, 2, 3), \quad (4.67)$$

функція форми смуги поглинання поля двомодовою системою матиме такий аналітичний вигляд

$$\begin{aligned}
I_3(\alpha_1; \alpha_2; \alpha_3; \xi) = \gamma e^{-\alpha} & \left\{ \frac{1}{\xi^2 + \gamma^2} + \sum_{\lambda=1}^3 \sum_{n_\lambda=1}^{\infty} \frac{\alpha_\lambda^{n_\lambda}}{n_\lambda! [(\xi - n_\lambda P_\lambda)^2 + \gamma^2]} + \right. \\
& \sum_{n_1, n_2=1}^{\infty} \frac{\alpha_1^{n_1} \alpha_2^{n_2}}{n_1! n_2! [(\xi - n_1 - n_2 P_2)^2 + \gamma^2]} + \sum_{n_1, n_3=1}^{\infty} \frac{\alpha_1^{n_1} \alpha_3^{n_3}}{n_1! n_3! [(\xi - n_1 - n_3 P_3)^2 + \gamma^2]} + \\
& + \sum_{n_2, n_3=1}^{\infty} \frac{\alpha_2^{n_2} \alpha_3^{n_3}}{n_2! n_3! [(\xi - n_2 P_2 - n_3 P_3)^2 + \gamma^2]} + \\
& \left. + \sum_{n_1, n_2, n_3=1}^{\infty} \frac{\alpha_1^{n_1} \alpha_2^{n_2} \alpha_3^{n_3}}{n_1! n_2! n_3! [(\xi - n_1 - n_2 P_2 - n_3 P_3)^2 + \gamma^2]} \right\}. \tag{4.68}
\end{aligned}$$

Покладаючи в цій формулі  $\alpha_1 = \alpha, \alpha_2 = 0, P_2 = 0$ , отримуємо вираз для знерозміреної функції форми смуги поглинання поля одномодовою системою

$$I_1(\alpha, \xi) = \gamma e^{-\alpha} \left\{ \frac{1}{\xi^2 + \gamma^2} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\alpha^n}{n! [(\xi - n)^2 + \gamma^2]} \right\}. \tag{4.69}$$

З двох останніх аналітичних виразів видно, що обидві функції ( $I_1(\alpha, \xi), I_2(\alpha_1, \alpha_2, \xi)$ ) є суперпозиціями нескінченної кількості квазілоренцових функцій (піків) з дуже малим затуханням ( $\gamma \ll 1$ ). Квазілоренцові піки характеризуються очевидними спектральними параметрами: висотами ( $h$ ) та півширинами ( $\gamma$ ), які залежать від кількості фононних мод системи. Далі розглянемо властивості функцій  $I_1(\alpha, \xi)$  та  $I_2(\alpha_1, \alpha_2, \xi)$  одно- і двомодової систем.

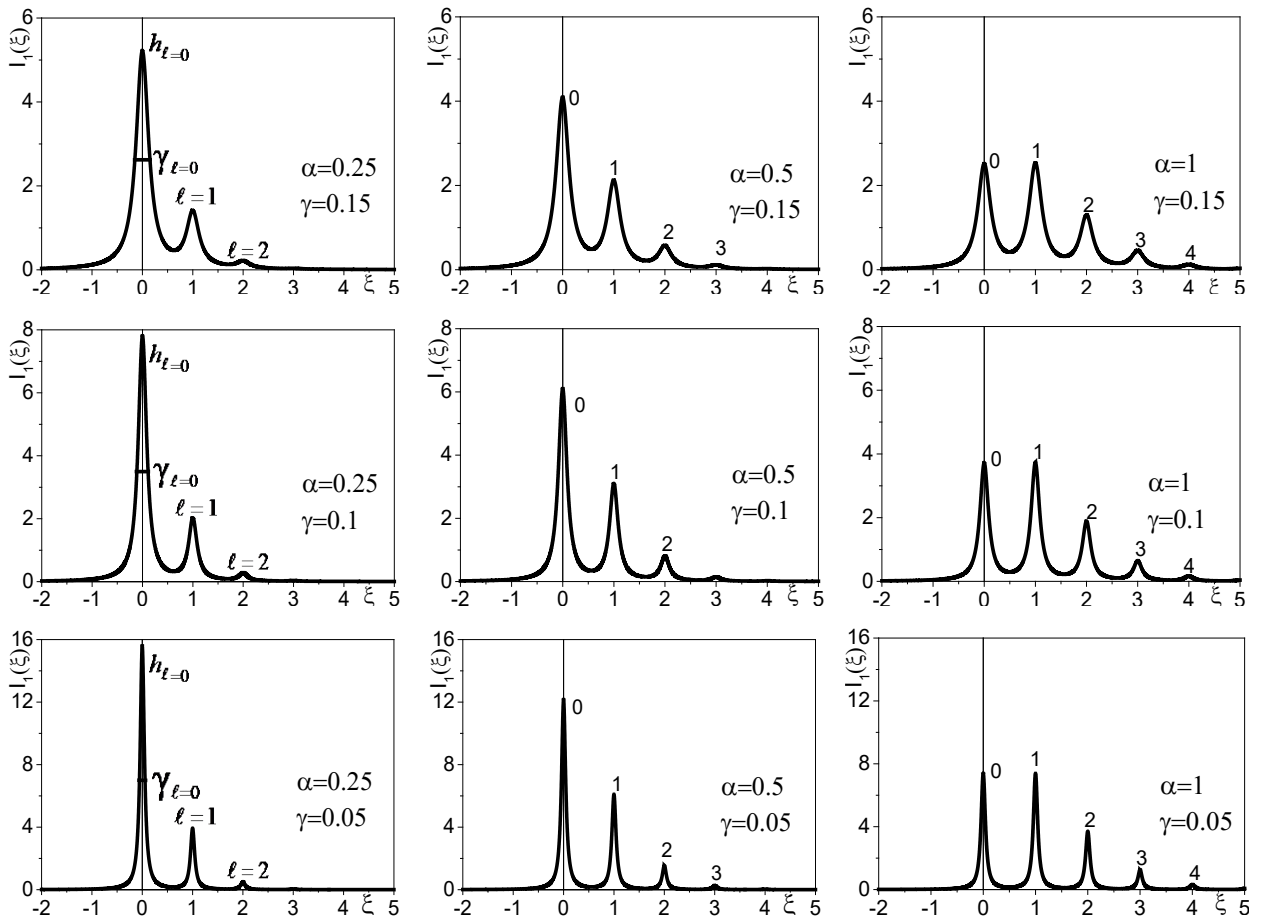
а) Властивості функції  $I_1(\alpha, \xi)$  одномодової системи.

Властивості функції  $I_1(\alpha, \xi)$  добре видно безпосередньо з аналітичного виразу (4.69), а також з рисунків. 4.6 і 4.7, де наводимо результати розрахунків її залежності від знерозміреної частоти ( $\xi$ ) при різних значеннях  $\alpha$  і  $\gamma$ . Функція  $I_1(\alpha, \xi)$  є суперпозицією безмежної кількості квазілоренцових піків, висоти максимумів ( $h_\ell(\alpha)$ ) яких розташовані при  $\xi_\ell = \ell = 0, 1, 2, \dots, \infty$  і визначаються величинами

$$h_\ell(\alpha) = \gamma e^{-\alpha} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{n!} \frac{1}{(\ell - n)^2 + \gamma^2}; \quad \ell = 0, 1, 2, \dots, \infty. \quad (4.70)$$

Внаслідок цього півширина  $\ell$ -го піка ( $\Psi_\ell$ ) знаходяться як різниця ( $\Psi_\ell = \xi_\ell^> - \xi_\ell^<$ ) величин  $\xi_\ell^>$ ,  $\xi_\ell^<$ , які є розв'язками нелінійного рівняння

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{n!} \left\{ \frac{1}{(\xi_\ell^< - n)^2 + \gamma^2} - \frac{1}{2[(\ell - n)^2 + \gamma^2]} \right\} = 0; \quad \ell = 0, 1, 2, \dots, \infty \quad (4.71)$$



**Рисунок 4.6.** Еволюція функції  $I_1(\xi)$  при різних значеннях затушення ( $\gamma=0,05; 0,1; 0,15$ ) при малих константах взаємодії ( $\alpha=0,25; 0,5; 1$ ).

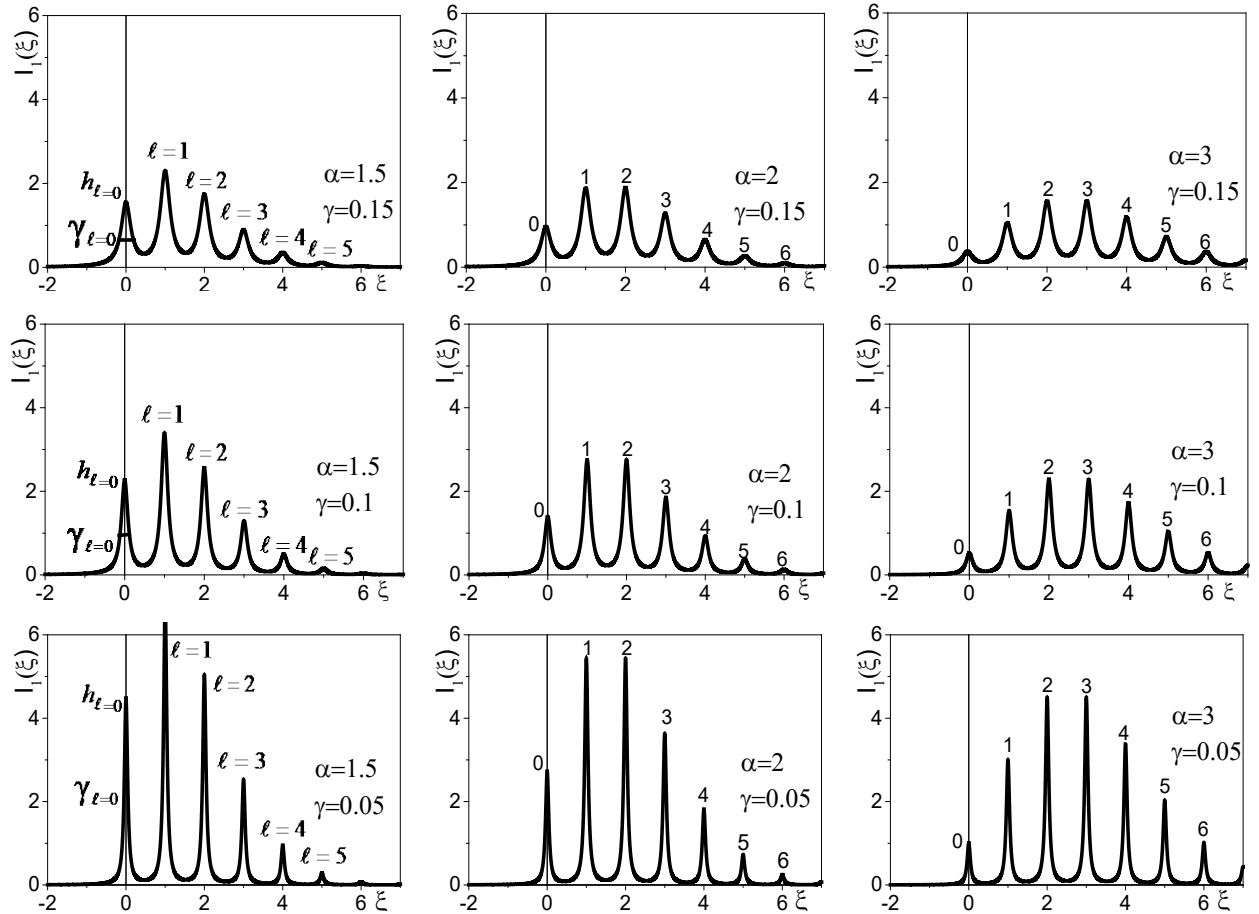
Найнижчий за енергією пік при  $\ell=0$  відповідає основному безфононному стану, а фононні сателітні піки при  $\ell=1,2,\dots$  утворюються зв'язаними станами квазічастинки з одним, двома й рештою фононів (так звані фононні повторення). Максимуми основного й фононних сателітних піків розташовані еквідистантно між собою на відстані однієї фононної енергії, а відношення максимуму  $\ell$ -го піка до основного визначається виразом

$$J_\ell(\alpha, \gamma) = \frac{h_\ell(\alpha, \gamma)}{h_0(\alpha, \gamma)} = \left[ \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{n![n^2 + \gamma^2]} \right]^{-1} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{n![(\ell - n)^2 + \gamma^2]}; \quad \ell = 0, 1, 2, \dots, \infty \quad (4.72)$$

Користуючись малістю  $\gamma$  з рівняння (4.71) у лінійному порядку по  $\alpha$  отримемо простий наближений аналітичний вираз для півширини основного піка

$$\Upsilon_\ell(\alpha, \gamma) = 2\gamma(1 + \alpha\gamma^2) \quad (4.73)$$

При довільних величинах  $\alpha$  і  $\gamma$  спектральні параметри (висоти й півширини) піків отримуємо безпосереднім розрахунком функції форми  $I(\alpha, \xi)$  за формулою (4.69). Приклади наводимо на рисунках 4.6 та 4.7.



**Рисунок 4.7.** Еволюція функції  $I_1(\xi)$  при різних значеннях затухання ( $\gamma = 0,05$ ;  $0,1$ ;  $0,15$ ) при середніх константах взаємодії ( $\alpha = 1,5$ ;  $2$ ;  $3$ ).

Щодо висот  $h_\ell(\alpha)$  піків, то, як видно з формул (4.70) і (4.73) та рисунків. 4.6 і 4.7, їх еволюція складніша, ніж півширини  $\Upsilon_\ell(\alpha)$ . По-перше, висоти

чутливі до змін величин  $\gamma, \alpha$  і  $\ell$ , що особливо добре видно із рисунків 4.6 і 4.7. Зокрема, висота, як параметр функцій, що характеризують основний стан ( $I_{\ell=0}(\alpha, \xi)$ ), зі збільшенням  $\alpha$  в інтервалі ( $0 < \alpha < 1$ ) лише зменшується, тоді як висоти відповідних функцій фононних сателітних станів ( $I_{\ell \neq 0}(\alpha, \xi)$ ) зі збільшенням  $\alpha$  лише збільшуються. При цьому, відповідно до (4.70), зі збільшенням  $\ell$  величини висот  $h_{\ell \geq 1}(\alpha, \xi)$  швидко зменшуються, внаслідок чого піки високоенергетичних сателітних станів «зливаються» з неперервним фоном.

Важливо зазначити, що при  $\alpha = 1$  не лише ширини ( $\Upsilon_{\ell=0} \cong \Upsilon_{\ell=1}$ ), а й висоти ( $h_{\ell=0} \cong h_{\ell=1}$ ) піків основного й першого фононного сателіта (повторення) практично (з точністю  $\leq 1\%$ ) збігаються.

Виявлені властивості функцій  $I_1(\alpha, \xi)$  в інтервалі  $0 \leq \alpha \leq 1$  зумовлюють настільки швидке «занурення» сателітних фононних повторень у неперервний фон, що, крім основного, проявляється лише 3–4 зв'язані стани квазічастинки з фононами (рисунках 4.6, 4.7).

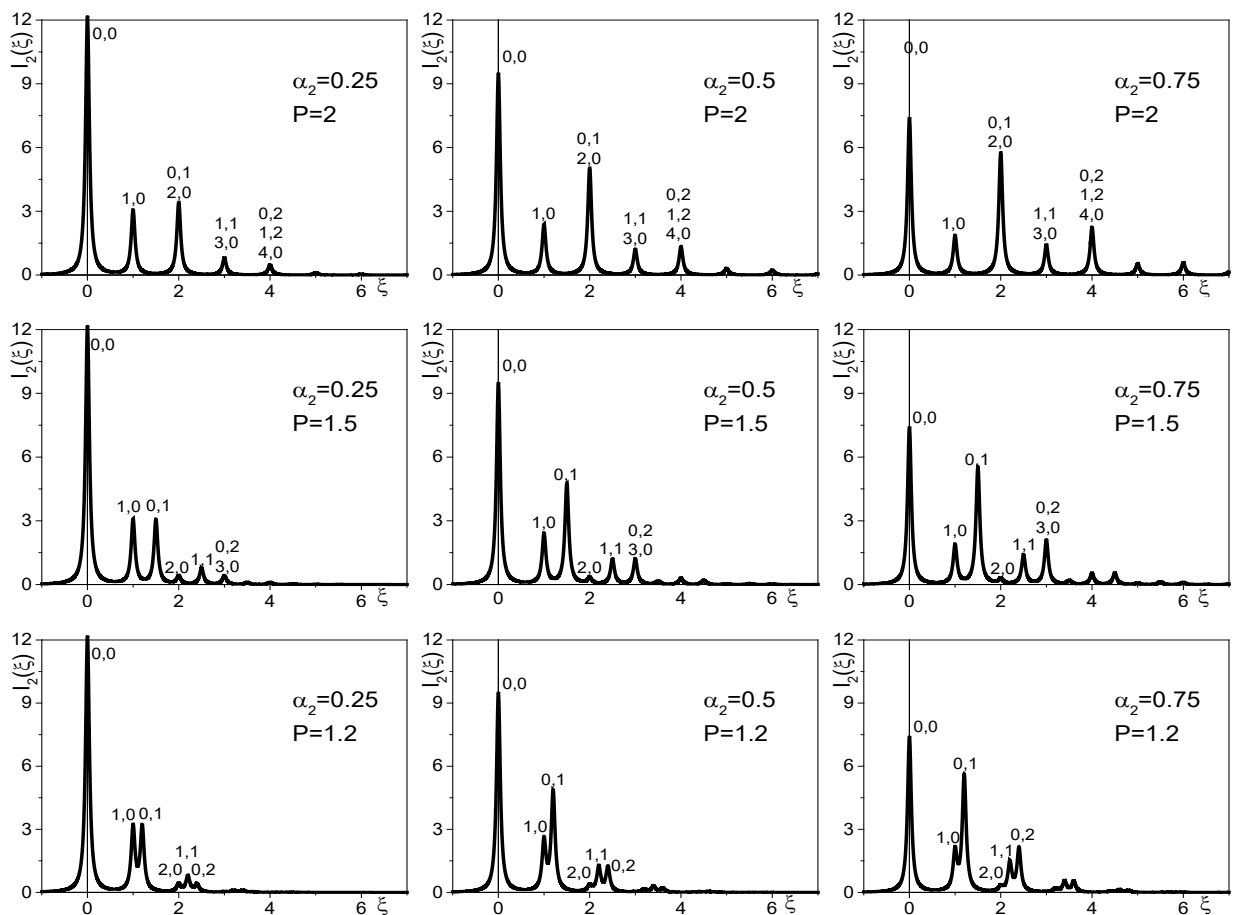
На рисунку 4.6 приведені результати розрахунків функцій  $I_1(\alpha, \xi)$  та її параметрів при середніх величинах констант  $\alpha$  у інтервалі  $1,5 \leq \alpha \leq 3$  при  $\gamma = 0.05$ . З рисунка видно, що в цьому інтервалі зміни  $\alpha$  з'явилися нові властивості функцій  $I_1(\alpha, \xi)$  та їх параметрів.

Виявилось, що після того, як при  $\alpha = 1$  вирівнялися між собою висоти основного й першого фононного повторення ( $I_0 = I_1 = 7.38$ ), подальше збільшення величини  $\alpha$  приводить лише до зменшення висоти цього першого сателітного піка, як і безфононного. Висоти решти фононних сателітів ( $h_{\ell \geq 2}$ ) зі збільшенням  $\alpha$  продовжують зростати доти, поки константа  $\alpha$  сягне величини 2, коли вирівнюються між собою висоти першого і другого фононних піків ( $h_1 = h_2 = 5.44$  при  $\gamma = 0.05$ ). З подальшим збільшенням  $\alpha$  висоти 0,1,2 – піків зменшуються, а решта продовжують зростати. При  $\alpha = 3$  вирівнюються висоти 2-го і 3-го піків, а решти – зростають.

Встановлена властивість приводить до того, що крива, яка огинає максимуми піків поглинання, зі збільшенням  $\alpha$  має максимум у області фононних повторень, який зростає настільки, наскільки більшою є взаємодія ( $\alpha$ ).

б) Властивості функції  $I_2(\alpha_1, \alpha_2, \xi)$  у системі з двомодовими фононами.

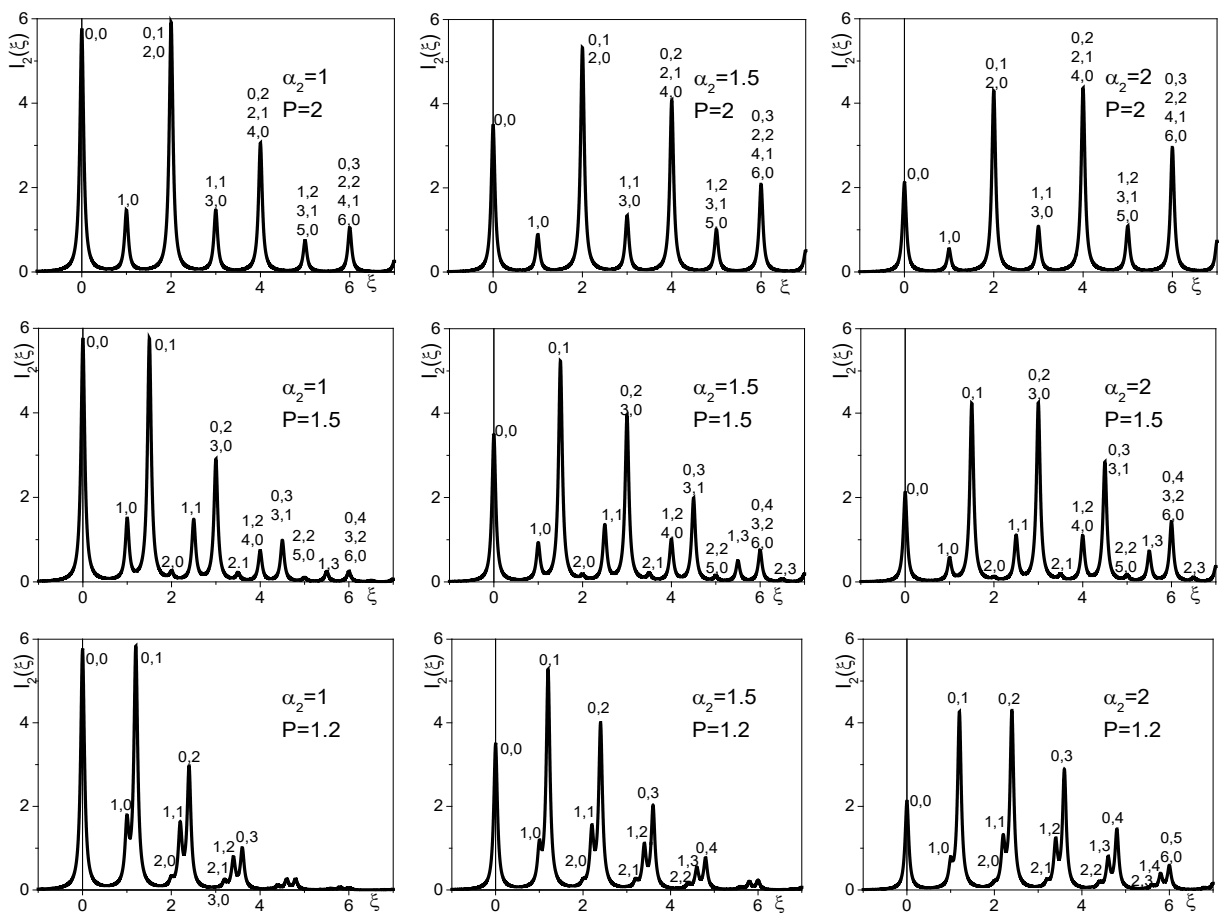
Розрахунок і аналіз властивостей спектральних параметрів двомодових систем виконувався на прикладі найтипівіших фізичних систем, при яких квазічастинка має слабкий зв'язок з однією модою й середній – з другою. Отже, на рисунках 4.8 і 4.9 наводимо результати розрахунку функції форми  $I_2(\alpha_1, \alpha_2, \xi)$  двомодової системи в тій області частот ( $\xi$ ), у якій основні й сателітні фононні піки досить добре ідентифікуються, не «зливаючись» з фоном.



**Рисунок 4.8.** Еволюція функції  $I_2(\alpha_1, \alpha_2, \xi)$  при малих величинах констант взаємодії ( $\alpha_1, \alpha_2$ ) з фононними модами. Тут  $\alpha_1=0,25$ ,  $\gamma=0,05$ .

На відміну від одномодової, у двомодовій системі структура смуг функції  $I_2(\alpha_1, \alpha_2, \xi)$  складніша, оскільки вона формується як зв'язаними станами квазічастинки з фононами окремих мод, так і з їх комбінаціями. У зв'язку з цим функція  $I_2(\alpha_1, \alpha_2, \xi)$  є суперпозицією основного піка (0,0) квазілоренцевого типу з висотою  $h_{0,0}(\alpha_1, \alpha_2)$  і півшириною  $\gamma_{0,0}(\alpha_1, \alpha_2)$  та трьох груп безмежної кількості фононних сателітних піків, сформованих зв'язаними станами квазічастинки з незмішаними фононними модами ( $l_1 \neq 0, l_2 = 0$ ); ( $l_1 = 0, l_2 \neq 0$ ) та змішаними фононними модами ( $l_1 \neq 0, l_2 \neq 0$ ).

З рисунків 4.8 і 4.9 видно, що картина формування смуг поглинання  $I_2(\alpha_1, \alpha_2, \xi)$  суттєво залежить як від співвідношень ( $P_2$ ) між величинами енергій обох фононних мод, так і від величин обох констант взаємодії ( $\alpha_1, \alpha_2$ ).



**Рисунок 4.9.** Еволюція функції  $I_2(\alpha_1, \alpha_2, \xi)$  при малих ( $\alpha_1$ ) та середніх ( $\alpha_2$ ) величинах констант взаємодії з фононними модами. Тут  $\alpha_1=0,25$ ,  $\gamma=0,05$ .

Висота ( $h_{0,0}$ ) і ширина ( $\Upsilon_{0,0}$ ) основного безфонного піка практично не залежать від величини  $P_2$  і зі збільшенням  $\alpha_2$  лише його висота, яка в основному сформована сильнішою взаємодією квазічастинки з другою фонною модою, поступово зменшується.

Піки, що відповідають фонним сателітам окремих незмішаних мод створюють картину структур, які мають ті ж властивості, що були раніше описані для відповідних одномодових структур. При цьому висоти піків, сформованих сильнішою взаємодією з другою модою, значно переважають ті, що сформовані слабшою взаємодією з першою модою ( $h_{0,\ell_2} \gg h_{\ell_1,0}$ ).

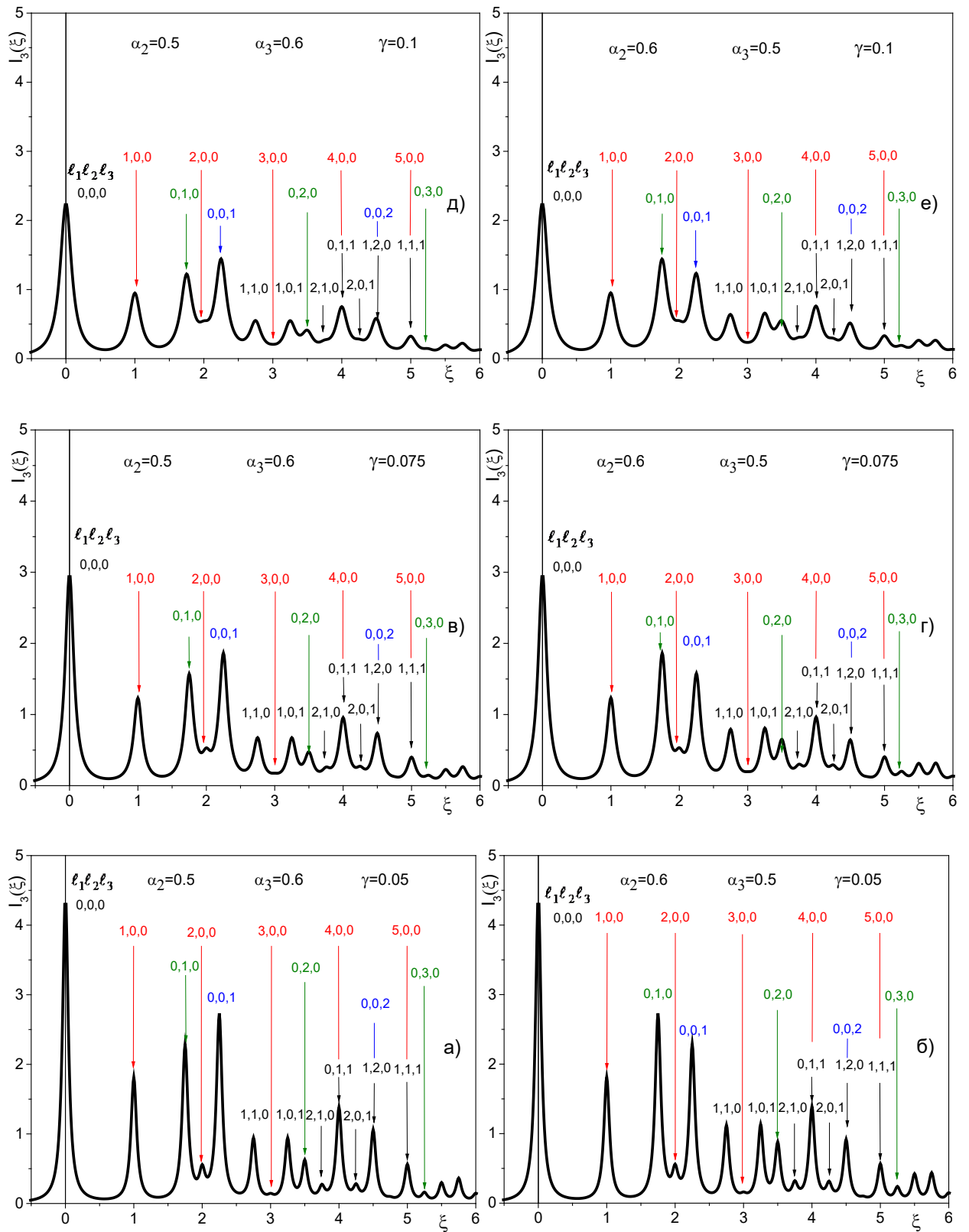
Щодо піків, які відповідають комбінованим частотам сателітних фонних станів, то при  $P_2 = 1,25; 1,5; 1,75$  вони проявляються або у вигляді окремих піків, або на крилах піків, сформованих другою фонною модою із сильнішою взаємодією з квазічастинкою. У випадку кратних частот ( $P_2 = 2$ ), як видно з рисунків 4.8 і 4.9, усі комбіновані піки, утворені взаємодією квазічастинок із суперпозиціями обох фонних мод, виявляються «поглинутими» в піки сателітів обох окремих мод, внаслідок чого спектр виглядає еквідистантним, змінної інтенсивності й затухаючим.

в) Властивості функції  $I_3(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3; \xi)$  у системі з тримодовими фононами.

Як у випадку двомодової так і тримодової систем, розрахунок і аналіз властивостей функцій форми  $I_3(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3; \xi)$  виконувався на прикладі системи з типовими параметрами, вказаними на рисунку 4.10. Область частот ( $\xi$ ), (потрібна кома) у якій основні й сателітні піки добре ідентифікуються, не «зливаючись» з фоном, (потрібні коми) така ж як і в двомодовій системі (рисунки 4.8; 4.9).

З рисунку 4.10 видно, що піки фонних сателітів усіх мод найкраще проявляються при малих величинах затухання ( $\gamma$ ), а зі збільшенням  $\gamma$  вони швидко зникають або в загальному фоні, або в піках вироджених станів.





**Рисунок 4.10.** Еволюція функції  $I_3(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3; \xi)$  при фіксованих величинах  $P_1=1$ ;  $P_2=1.75$ ;  $P_3=2.25$ ;  $\alpha_1 = 0.4$  та різних величинах  $\alpha_2$ ,  $\alpha_3$ ,  $\gamma$ , вказаних на панелях рисунка.

Найкраще відображені властивості нижньої частини спектра на прикладі панелей (а, б) рисунку 4.10 при найменшій величині затухання ( $\gamma = 0.05$ ).

Отже, функції  $I_3(\xi)$  на рисунках 4.10 а і б відрізняються між собою (як і інші дві пари) лише зміною величин ( $\alpha_2 \leftrightarrow \alpha_3$ ) при однакових інших параметрах.

Для наочності і ясності аналізу властивостей функцій  $I_3(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3; \xi)$ , відповідно до рисунків 4.10 (а, б), у таблиці 4.1 наводимо розраховані величини координат ( $\xi_{\ell_1, \ell_2, \ell_3}$ ) і висот ( $h_{\ell_1, \ell_2, \ell_3}$ ) піків функції  $I_3(\xi)$  залежно від фононних гілок ( $\lambda = 1, 2, 3$ ) та номерів основного й сателітних станів ( $\ell_1, \ell_2, \ell_3$ ).

**Таблиця 4.1.**

Залежності координат ( $\xi_{\ell_1, \ell_2, \ell_3}$ ) і висот ( $h_{\ell_1, \ell_2, \ell_3}$ ) піків функції  $I_3(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3; \xi)$  при  $\gamma = 0.05$ ; фіксованих величинах  $P_1=1$ ;  $P_2=1.75$ ;  $P_3=2.25$ ;  $\alpha_1 = 0.4$  та різних величинах  $\alpha_2, \alpha_3, \gamma$ , вказаних на панелях рисунка 4.10.

$\ell_1, \ell_2, \ell_3$		000	100	200	300	400	500
$h_{\ell_1, \ell_2, \ell_3}$	а	4.471	1.813	0.56	0.146	1.385	0.565
	б	4.471	1.8150	0.562	0.161	1.39	0.569
$\xi_{\ell_1, \ell_2, \ell_3}$	а, б	0	1	2	3	4	5
$\ell_1, \ell_2, \ell_3$		010	020	030	001	002	111
$h_{\ell_1, \ell_2, \ell_3}$	а	2.28	0.629	0.164	2.733	1.062	0.565
	б	2.731	0.883	0.241	2.293	0.918	0.569
$\xi_{\ell_1, \ell_2, \ell_3}$	а, б	1.75	3.5	5.25	2.25	4.5	5
$\ell_1, \ell_2, \ell_3$		110	101	210	201	011	120
$h_{\ell_1, \ell_2, \ell_3}$	а	0.946	0.947	0.277	0.285	1.385	1.062
	б	1.124	1.136	0.324	0.317	1.39	0.918
$\xi_{\ell_1, \ell_2, \ell_3}$	а, б	2.75	3.25	3.75	4.25	4	4.5

Із рисунків 4.10 а, б і таблиці 4.1 видно такі властивості функції форми  $I_3(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3; \xi)$ . Її форма зумовлена суперпозицією трьох груп (за числом мод) безмежної кількості перенормованих піків. Піки функції на рисунку 4.10 і їх

параметри в таблиці 4.1 позначені кольоровими групами цифр  $(\ell_1, \ell_2, \ell_3)$ , щоб виділити змішані й незмішані стани, які формують піки.

Першому пікові відповідає основний (безфононний) стан системи  $(000)$ . Далі виділяємо три групи безмежної кількості піків, які формуються незмішаними одномодовими сателітними станами кожної окремої моди, що позначені такими кольорами:  $(\ell_1 00)$  – червоні,  $(0\ell_2 0)$  – зелені,  $(00\ell_3)$  – сині. Усі решта піків формуються змішаними двомодовими  $(\ell_1 \ell_2 0)$ ,  $(\ell_1 0\ell_3)$ ,  $(0\ell_2 \ell_3)$  та тримодовими  $(\ell_1 \ell_2 \ell_3)$  сателітними станами і їх позначаємо чорним кольором. Сателітні піки формуються двома типами станів: а) не вироджені (нетоновані з таблиці 4.1), б) вироджені (тоновані у таблиці 4.1).

Піки функції  $I_3(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3; \xi)$ , сформовані невиродженими станами кожної окремої моди  $(\lambda)$ , зі збільшенням числа  $\ell_\lambda$  лише швидко спадають, а піки, сформовані виродженими станами, змінюються по-різному, оскільки їх величини формуються складовими станів від трьох мод, висоти яких залежать як від величин  $\alpha_\lambda$ , так і від величин  $\Omega_\lambda$ . Загалом зі збільшенням енергій  $(\xi)$  середня інтенсивність піків зменшується. Це зумовлено все меншими впливами на  $I_3(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3; \xi)$  багатофононних процесів через взаємодію квазічастинки з фононами усіх мод.

#### Висновки до розділу 4

На основі моделі Давидова розвинена послідовна квантова теорія перенормованого спектра вузькозонної квазічастинки взаємодіючої з поляризаційними фононами довільної кількості  $(\tau)$  мод при криогенній температурі  $(T=0K)$ .

Точним розрахунком фур'є-образу запізнюючої функції Гріна квазічастинки вперше вдалося отримати аналітичні вирази перенормованого спектра та ефективних (середніх) чисел фононів у всіх станах системи з довільним числом  $(\tau)$  фононних мод. Розраховано й детально проаналізовано перенормовані енергетичні спектри й ефективні (середні) числа фононів у всіх станах одно-, дво- і тримодових систем.

Встановлено, що для одномодової ( $\tau = 1$ ) системи спектр точно збігається з отриманим раніше в роботі [191]. Він стаціонарний, дискретний і еквідистантний, містить основний і безмежну кількість сателітних рівнів. Однак, для систем з довільним числом мод ( $\tau \geq 2$ ) внаслідок наближеного розрахунку функцій Гріна в роботі [191] був отриманий нефізичний результат, тому що спектр виявився затухаючим при  $T=0\text{K}$ . Згідно з квантовою механікою, це неможливо, бо тоді порушується закон збереження енергії у процесах взаємодії квазічастинки з віртуальними фононами. Завдяки точному аналітичному розрахунку тепер показано, що в досліджуваній моделі при  $T=0\text{K}$ , незалежно від кількості ( $\tau$ ) фононних мод, перенормований спектр системи є дискретним і незатухаючим, як і повинно бути у відповідності з фізичними міркуваннями.

Уперше виконаний детальний точний розрахунок і аналіз досліджуваних систем з довільною кількістю фононних мод показав, що незалежно від констант взаємодії ( $\alpha_\lambda$ ) і від співвідношень між величинами енергій усіх фононних мод перенормовані спектри квазічастинок стаціонарні (незатухаючі) і дискретні, причому основний і перший сателітні рівні не вироджені, а решта сателітної частини спектра суттєво залежить від співвідношень між енергіями фононних мод. Якщо енергії всіх мод кратні найменшій, то спектр еквідистантний і вироджений. Якщо хоча б одна з мод не кратна до іншої, а інші кратні між собою, то спектр не еквідистантний і частково вироджений. Якщо відношення мод є ірраціональними числами, то спектр не вироджений і не еквідистантний.

Аналіз середніх чисел фононів у сателітних станах засвідчує, що незалежно від  $\tau$ ,  $\alpha_\lambda$  і  $\Omega_\lambda$  всі вони є сильно зв'язаними фононоподібними комплексами. Лише в основному стані при збільшенні  $\alpha_\lambda$  квазічастинка змінює свої властивості від майже квазічастинкових з малою фононою «щубою», через гібридний комплекс, аж до сильно зв'язаного фононоподібного комплексу.

На основі гамільтоніана фреліхівського типу, який описує локалізовану квазічастинку, що взаємодіє з одно- і двомодовими бездисперсійними фононами в моделі Давидова з феноменологічним затуханням при  $T = 0\text{К}$ , виконано аналітичний розрахунок фур'є-образу запізнюючої функції Гріна. Це дозволило отримати і проаналізувати частотну залежність функції форми смуги поглинання та її спектральних параметрів у широкому діапазоні енергій, який містить і основний, і сателітні піки фононних повторень.

Встановлена структура функцій форми смуг поглинання одно-, дво- і вперше тримодових систем. Показано, що в межах фізично обґрунтованих величин затухання, зумовленого нефононними механізмами при  $T = 0\text{К}$ , структура якісно не змінюється, хоча її еволюція залежить від констант взаємодії квазічастинки з обома фононними модами.

Показано, що в одномодовій системі ширини піків основного й фононних сателітних піків зі збільшенням  $\alpha$  змінюються слабо, а висоти основного піка лише значно зменшуються, тоді як висоти піків фононних повторень поступово збільшуються, а, досявши висоти сусіднього попереднього піка, далі також зменшуються. У найтипівішому інтервалі зміни величин констант взаємодії ( $0 \leq \alpha_\lambda < 1$ ) зменшення висот піків фононних сателітів стрімке, внаслідок чого, крім основного, проявляється лише 3–4 піки зв'язаних станів квазічастинки з фононами. Решта високочастотних зв'язаних станів створюють слабо виражену структуру на неперервному фоні.

Уперше показано, що двомодова система характеризується функцією форми  $I_2(\alpha_1, \alpha_2; \xi)$ , яка є суперпозицією всіх лоренцівських піків обох мод. Перший безфононний пік відповідає основному стану системи. Решта – піки фононних сателітів, що утворені зв'язаними станами квазічастинки зі всіма фононами обох мод.

Уперше розраховано й проаналізовано перенормований фононами спектр трирівневої системи зі скінченним затуханням при  $T=0\text{К}$ . За умови, що константи зв'язку зі всіма модами фононів знаходяться в інтервалі ( $0 < \alpha_\lambda < 1$ ), показано, що функція форми  $I_3(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3; \xi)$  є суперпозицією

лоренцових піків усіх трьох мод. Перший з них (безфононний) відповідає основному стану системи, а решта – піки фононних сателітів, сформованих виродженим і невиродженим зв'язаними станами квазічастинки зі всіма фононами всіх мод.

## Основні результати і висновки

У дисертаційній роботі Розроблена квантова теорія спектральних параметрів і сил осциляторів міжпідзонних квантових переходів у активній області широкосмугових нанофотодетекторів далекого інфрачервоного діапазону ( $10\ \mu\text{m} - 25\ \mu\text{m}$ ). На основі запропонованого нового просторового дизайну активної області, яка містить дві групи каскадів квантових ям з протилежним потенціальним профілем внутрішньої структури, АО може забезпечувати односторонній транспорт електронів без прикладання постійного зовнішнього електричного поля.

На прикладі каскадів АО з добре апробованими матеріалами складових квантових ям ( $GaAs, Ga_yIn_{1-y}As$ ) і бар'єрів ( $Al_xGa_{1-x}As, Al_yGa_{1-y}As$ ) показано, що вибором концентрацій ( $x, y$ ) елементів  $Ga$  та  $Al$  задаються величини потенціалів ( $U, V_b, V_w$ ) ям і бар'єрів, а варіацією розмірів ( $D, d$ ) їх ширин забезпечуються значні сили осциляторів квантових переходів у широкому інтервалі довжин хвиль далекого ІЧ-діапазону. Отже, запропонований новий дизайн каскадів активної області зі складним потенціальним рельєфом дозволяє забезпечити успішне функціонування широкосмугових нанофотодетекторів далекого ІЧ-діапазону електромагнітного поля.

Уперше узагальнено діаграмну техніку Фейнмана-Пайнса для розрахунку перенормованого спектра системи багаторівневих квазічастинок взаємодіючих з поляризаційними фононами, і які описуємо за допомогою гамільтоніану типу Фроліха при  $T = 0\text{K}$ .

У запропонованому підході послідовного виділення та парціального підсумовування нескінченних класів мультиплікативних діаграм з блоків немультіплікативних діаграм масового оператора вдалося знайти таке його представлення, яке ефективно враховує багатофонові процеси та дозволяє уникнути відомої з квантовій теорії поля «проблеми знаку» в діаграмній техніці.

Уперше розраховано і проаналізовано перенормований взаємодією з поляризаційними фононами невироджений спектр локалізованої N-рівневої квазічастинки. Показано, що в моделі без міжрівневої взаємодії перенормований спектр містить N серій з безмежним числом рівновіддалених між собою енергетичних рівнів, які утворені всіма головними і зв'язаними з ними фононами сателітними станами. У системах N-рівневих квазічастинок з невиродженим спектром і з міжрівневою взаємодією з фононами було встановлено, що і в першому, і у вищих наближеннях МО замість N одиночних серій сателітних рівнів спостерігаються комплекси сателітних рівнів у резонансних з енергією фонона областях і смуги сателітних рівнів у нерезонансних областях. У вищих наближеннях МО кількість рівнів у сателітних комплексах і смугах зростає, а їх ширини змінюються слабо, тому вони перетворюються у щільні й вузькі сателітні зони.

Показано також, що через зміну енергетичних відстаней між рівнями у припорогових смугах можуть простежуватися мультиантиперетини та зближення до злиття відповідних пар сателітних рівнів у околах мультирезонансів при будь-яких нерівних нулю константах міжрівневого зв'язку ( $\alpha_{\mu\mu' \neq \mu}$ ). Цей ефект може бути причиною нестабільного перенормованого спектру багаторівневої квазічастинки при незначній зміні енергетичних відстаней між її головними енергетичними рівнями, зумовленими зовнішніми впливами.

Узагальнений метод діаграмної техніки Фейнмана-Пайнса при  $T=0\text{K}$  модифіковано для розрахунку перенормованого взаємодією з поляризаційними фононами енергетичного спектра локалізованої квазічастинки з виродженим збудженим рівнем.

Показано, що хоча в системі з виродженим збудженим рівнем квазічастинки кількість перенормованих рівнів у всіх сателітних смугах завжди більша ніж у системі з невиродженим збудженим рівнем, однак ширини всіх смуг першої системи лише трохи більші за ширини другої.



Вважаючи досліджувані квазічастинки найпростішими (грубими) моделями електрон-фононої взаємодії в базових елементах сучасних наноприладів (КВІФ, ККД та ККЛ), можна очікувати, що встановлені смуги та комплекси сателітних рівнів можуть впливати на їх функціонування. Зокрема, вони можуть частково компенсувати відсутність «сходинок» розірваної «фононої драбини» або недосконалої повної «фононої драбини» в екстракторах ККД, що працюють в ІЧ-діапазоні.

На основі моделі Давидова розвинена послідовна квантова теорія перенормованого спектра вузькозонної (локалізованої) квазічастинки взаємодіючої з поляризаційними фононами довільної кількості ( $\tau$ ) мод при криогенній температурі ( $T=0\text{K}$ ).

За допомогою точного розрахунку фур'є-образу запізнюючої функції Гріна квазічастинки вперше отримані аналітичні вирази перенормованого спектра та ефективних (середніх) чисел фононів у всіх станах системи з довільним числом ( $\tau$ ) фононних мод. Розраховано й детально проаналізовано перенормовані спектри й ефективні (середні) числа фононів у всіх станах одно-, дво- і тримодових систем.

Уперше показано, що незалежно від констант взаємодії ( $\alpha_\lambda$ ) і від співвідношень між величинами енергій усіх фононних мод перенормовані спектри квазічастинок стаціонарні (незатухаючі) і дискретні, причому основний і перший сателітні рівні не вироджені, а решта сателітної частини спектра суттєво залежить від співвідношень між енергіями фононних мод. Якщо енергії всіх мод кратні найменшій, то спектр еквідистантний і вироджений. Якщо хоча б одна з мод не кратна до іншої, а інші кратні між собою, то спектр не еквідистантний і частково вироджений. Якщо відношення мод є ірраціональними числами, то спектр не вироджений і не еквідистантний.

Аналіз середніх чисел фононів у сателітних станах вперше засвідчив, що незалежно від  $\tau$ ,  $\alpha_\lambda$  і  $\Omega_\lambda$  всі вони є сильно зв'язаними фононоподібними комплексами. Лише в основному стані при збільшенні  $\alpha_\lambda$  квазічастинка змінює свої властивості від майже квазічастинкових з малою фононою

«шубою», через гібридний комплекс, аж до сильно зв'язаного фононподібного комплексу.

На прикладі двомодової моделі Давидова з феноменологічним затуханням при  $T = 0\text{K}$ , вперше отримано і проаналізовано частотну залежність функції форми смуги поглинання та її спектральних параметрів у широкому діапазоні енергій, який містить обидва головні й відповідні сателітні піки фононних повторень.

Вставлено, що в двомодовій, як і в одномодовій системі, ширини обох головних і їхніх фононних сателітних піків зі збільшенням  $\alpha_\lambda$  змінюються слабо, а висоти головних піків лише значно зменшуються, тоді як висоти піків фононних повторень спочатку поступово збільшуються, а, досягнувши висоти сусіднього попереднього піка, далі також зменшуються. Зменшення висот піків фононних сателітів стрімке, унаслідок чого, крім головних, проявляються лише 3–4 піки зв'язаних станів квазічастинки з фононами. Решта високочастотних зв'язаних станів створюють слабо виражену структуру на неперервному фоні.

Уперше показано, що двомодова система характеризується функцією форми  $I_2(\alpha_1, \alpha_2; \xi)$ , яка є суперпозицією всіх лоренцівських піків обох мод. Перший безфононний пік відповідає основному стану системи. Решта – піки фононних сателітів, що утворені зв'язаними станами квазічастинки зі всіма фононами обох мод.

Уперше розраховано й проаналізовано перенормований фононами спектр трирівневої системи зі скінченним затуханням при  $T=0\text{K}$ . За умови, що константи зв'язку зі всіма модами фононів знаходяться в інтервалі ( $0 < \alpha_\lambda < 1$ ), показано, що функція форми  $I_3(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3; \xi)$  є суперпозицією лоренцових піків усіх трьох мод. Перший з них (безфононний) відповідає основному стану системи, а решта – піки фононних сателітів, сформованих виродженим і невиродженим зв'язаними станами квазічастинки зі всіма фононами всіх мод.

Показано, що в підході методу функцій Гріна з врахуванням нефононних механізмів взаємодії квазічастинки шляхом уведення феноменологічного затухання при  $T=0K$ , зберігаються основні властивості еволюції параметрів перенормованого спектра системи без затухання. При цьому дельтаподібні піки функції форми переходять у квазілоренцеві піки скінченної висоти й ширини.

**СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ:**

1. Liu H. C., Buchanan M., Wasilewski Z. R., Chu H. Charge non-neutrality in the quantum well region of a GaAs-AlGaAs intersubband 9  $\mu\text{m}$  detector. *Applied physics letters*. 1991. Vol. 58, no 10. P. 1059–1061.
2. Liu H. C., Li L., Buchanan M., Wasilewski Z. R. Effect of the shape of the first barrier on quantum well infrared photodetector performance. *Journal of applied physics*. 1997. Vol. 82, no. 2. P. 889–892.
3. Ershov M., Ryzhii V., Hamaguchi C. Contact and distributed effects in quantum well infrared photodetectors. *Applied physics letters*. 1995. Vol. 67, no. 21. P. 3147–3149.
4. Kane M. J., Millidge S., Emeny M. T., Lee D., Guy D. R. P., Whitehouse C. R. *Whitehouse, in Intersubband Transitions in Quantum Wells*. New York, Plenum, 1992. P. 31–42.
5. Man P., Pan D. S. Comment on «Calculation of resonant absorption and photoresponse measurement in p-type GaAs/AlGaAs quantum wells[Appl. Phys. Lett. 66, 1659 (1995)]». *Applied physics letters*. 1995. Vol. 67, no. 24. P. 3653–3654.
6. Chu C.H., Hung C.I., Wang Y.H., Hounng M.P. Influence of quantum capture and tunneling mechanisms on the dark current of bound-to-continuum quantum-well infrared photodetectors. *IEEE Photonics Technology Letters*. 1997. Vol. 9, no. 9. P. 1262–1264.
7. Liu H. C., Li L., Buchanan M., Wasilewski Z. R., Brown G. J., Szmulowicz F., Hegde S. M. A study of GaAs/AlGaAs p-type quantum well infrared photodetectors with different barrier heights. *Journal of applied physics*. 1998. Vol. 83, no. 1. P. 585–587.
8. Liu H. C., Steele A. G., Buchanan M., Wasilewski Z. R. Dark current in quantum well infrared photodetectors. *Journal of applied physics*. 1993. Vol. 73, no. 4. P. 2029–2031.

9. Levine B. F., Bethea C. G., Hasnain G., Shen V. O., Pelve E., Abbott R. R., Hsieh S. J. High sensitivity low dark current 10  $\mu\text{m}$  GaAs quantum well infrared photodetectors. *Applied physics letters*. 1990. Vol. 56, no. 9. P. 851–853.
10. Andrews S. R., Miller B. A. Experimental and theoretical studies of the performance of quantum-well infrared photodetectors. *Journal of applied physics*. 1990. Vol. 56, no 9. P. 851–853.
11. Xu Y., Shakouri A., Yariv A., Krabach T., Dejewski S. *Direct measurement of doping density and barrier lowering effect with bias in quantum wells*. CALIFORNIA INST OF TECH PASADENA DEPT OF APPLIED PHYSICS, 1995.
12. Coon D. D., Liu H. C. Image force effects in heterostructures and quantum wells. *Superlattices and microstructures*. 1987. Vol. 3, no. 1. P. 95–98.
13. Kinch M. A., Yariv A. Performance limitations of GaAs/AlGaAs infrared superlattices. *Applied physics letters*. 1989. Vol. 55, no. 20. P. 2093–2095.
14. Ershov M., Hamaguchi Ch., Ryzhii V. Device physics and modeling of multiple quantum well infrared photodetectors. *Japanese journal of applied physics*. 1996. Vol. 35, Part 1, no. 2B. P. 1395–1400.
15. Thibaudeau L., Bois P., Duboz J. Y. A self-consistent model for quantum well infrared photodetectors. *Journal of applied physics*. 1996. Vol. 79, no. 1. P. 446–454.
16. Jovanović V. D., Harrison P., Ikonić Z., Indjin D. Physical model of quantum-well infrared photodetectors. *Journal of applied physics*. 2004. Vol. 96, no. 1. P. 269–272.
17. Celtek O. O., Memis S., Bostanci U., Ozer S., Besikci C. Gain and transient photoresponse of quantum well infrared photodetectors: a detailed ensemble Monte Carlo study. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*. 2004. Vol. 24, no. 3-4. P. 318–327.
18. Celtek O. O., Besikci C. Detailed investigation of electron transport, capture and gain in Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As/GaAs quantum well infrared photodetectors. *Semiconductor science and technology*. 2003. Vol. 19, no. 2. P. 183–190.

19. Liu H. C. Photoconductive gain mechanism of quantum-well intersubband infrared detectors. *Applied physics letters*. 1992. Vol. 60, no. 12. P. 1507–1509.
20. Steele A. G., Liu H. C., Buchanan M., Wasilewski Z. R.. Influence of the number of wells in the performance of multiple quantum well intersubband infrared detectors. *Journal of applied physics*. 1992. Vol. 72, no. 3. P. 1062–1064.
21. Kane M. J., Millidge S., Emeny M. T., Lee D., Guy D. R. P., Whitehouse C. R.. Performance trade offs in the quantum well infra-red detector. *Intersubband Transitions in Quantum Wells. NATO ASI Series*. Boston, MA, 1992. P. 31–42.
22. Hasnain G., Levine B. F., Gunapala S., Chand N. Large photoconductive gain in quantum well infrared photodetectors. *Applied physics letters*. 1990. Vol. 57 no. 6. P. 608–610.
23. Gunapala S. D., Levine B. F., Pfeiffer L., West K. Dependence of the performance of GaAs/AlGaAs quantum well infrared photodetectors on doping and bias. *Journal of applied physics*. 1991. Vol. 69. no. 9. P. 6517–6520.
24. Tatham M. C., Ryan J. F., Foxon C. T. Time-resolved Raman measurements of intersubband relaxation in GaAs quantum wells. *Physical review letters*. 1989. Vol. 63. no. 15. P. 1637.
25. Baier J., Bayanov I. M., Plödereder U., Seilmeier A. Biexponential intersubband relaxation in n-modulation-doped quantum-well structures. *Superlattices and microstructures*. 1996. Vol. 19. no. 1. P. 9–16.
26. Faist J., Capasso F., Sirtori C., Sivco D. L., Hutchinson A. L., Chu S. N. G., Cho A. Y. Measurement of the intersubband scattering rate in semiconductor quantum wells by excited state differential absorption spectroscopy. *Applied physics letters*. 1993. Vol. 63. no. 10. P. 1354–1356.
27. Andersson J. Y. Dark current mechanisms and conditions of background radiation limitation of n-doped AlGaAs/GaAs quantum-well infrared detectors. *Journal of applied physics*. 1995. Vol. 78. no. 10. P. 6298-6304.
28. Liu H. C., Buchanan M., Wasilewski Z. R. How good is the polarization selection rule for intersubband transitions?. *Applied Physics Letters*. 1998. Vol. 72. no. 14. P. 1682–1684.

29. Steele A. G., Liu H. C., Buchanan M., Wasilewski Z. R. Importance of the upper state position in the performance of quantum well intersubband infrared detectors. *Applied physics letters*. 1991. Vol. 59. no. 27. P. 3625–3627.
30. Xing B., Liu H. C., Wilson P. H., Buchanan M., Wasilewski Z. R., Simmons J. G. Noise and photoconductive gain in AlGaAs/GaAs quantum well intersubband infrared photodetectors. *Journal of applied physics*. 1994. Vol. 76. no. 3. P. 1889–1894.
31. Levine, B. F. Quantum-well infrared photodetectors. *Journal of applied physics*. 1993. Vol. 74. no. 8. P. R1–R81.
32. Levine B. F., Zussman A., Kuo J. M., De Jong J. 19  $\mu\text{m}$  cutoff long-wavelength GaAs/Al<sub>x</sub>G<sub>1-x</sub>As quantum-well infrared photodetectors. *Journal of applied physics*. 1992. Vol. 71. no. 10. P. 5130–5135.
33. Sim S. K., Liu H. C., Shen A., Gao M., Lee K. F., Buchanan M., Ohno Y., Ohno H. Li E. H. Effect of barrier width on the performance of quantum well infrared photodetector. *Infrared physics & technology*. 2001. Vol. 42. no. 3–5. P. 115–121.
34. Ferguson B., Zhang X. C. Materials for terahertz science and technology. *Nature materials*. 2002. Vol. 1. no. 1. P. 26–33.
35. Siegel P. H. Terahertz technology. *IEEE Transactions on microwave theory and techniques*. 2002. Vol. 50. no. 3. P. 910–928.
36. Nagel M., Haring Bolivar P., Brucherseifer M., Kurz H., Bosserhoff A., Büttner R. Integrated THz technology for label-free genetic diagnostics. *Applied Physics Letters*. 2002. Vol. 80. no. 1. P. 154–156.
37. Liu H. C., Song C. Y., SpringThorpe A. J., Cao J. C. Terahertz quantum-well photodetector. *Applied physics letters*. 2004. Vol. 84. no. 20. P. 4068–4070.
38. Luo H., Liu H. C., Song C. Y., Wasilewski Z. R. Background-limited terahertz quantum-well photodetector. *Applied Physics Letters*. 2005. Vol. 86. no. 23, P. 231103.
39. Gubbin C. R., De Liberato S., Folland T. G. Surface phonon polaritons for infrared optoelectronics. *Journal of Applied Physics*. 2022. Vol. 131 no. 3. P. 030901.

40. Zhou X., Li N., Lu W. Progress in quantum well and quantum cascade infrared photodetectors in SITP. *Chinese Physics B*. 2019. Vol. 28. no. 2. P. 027801.
41. Yang H., Zheng Y., Tang Z., Li N., Zhou X., Chen P., Wang J. MBE growth of high performance very long wavelength InGaAs/GaAs quantum well infrared photodetectors. *Journal of Physics D: Applied Physics*. 2020. Vol. 53. no. 13. P. 135110.
42. Suzuki N., Norio I. Feasibility study on ultrafast nonlinear optical properties of 1.55- $\mu\text{m}$  intersubband transition in AlGaIn/GaN quantum wells. *Japanese journal of applied physics*. 1997. Vol. 36. no. 8A. P. L1006.
43. Suzuki N., Norio I. Electron scattering rates in AlGaIn/GaN quantum wells for 1.55- $\mu\text{m}$  inter-subband transition. *Japanese journal of applied physics*. 1998. Vol. 37. no. 4A. P. L369.
44. Hofstetter D., Schad S. S., Wu H., Schaff W. J., Eastman L. F. GaN/AlN-based quantum-well infrared photodetector for 1.55  $\mu\text{m}$ . *Applied Physics Letters*. 2003. Vol. 83. no. 3. P. 572–574.
45. Hofstetter D., Baumann E., Giorgetta F. R., Graf M., Maier M., Guillot F., Bellet-Amalric E., Monroy E. High-quality AlN/GaN-superlattice structures for the fabrication of narrow-band 1.4  $\mu\text{m}$  photovoltaic intersubband detectors. *Applied physics letters*. 2006. Vol. 88. no. 12. P. 121112.
46. Giorgetta F. R., Baumann E., Guillot F., Monroy E., Hofstetter D. High frequency ( $f = 2.37$  GHz) room temperature operation of 1.55  $\mu\text{m}$  AlN/GaN-based intersubband detector. *Electronics letters*. 2007. Vol. 43. no. 3. P. 185–187.
47. Hofstetter D., Baumann E., Giorgetta F. R., Théron R., Wu H., Schaff W. J., Dawlaty J., A George P., F Eastman L., Rana F., K Kandaswamy P., Leconte S. Monroy E. Photodetectors based on intersubband transitions using III-nitride superlattice structures. *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2009. Vol. 21. no. 17. P. 174208.
48. Moumanis K., Helman A., Fossard F., Tchernycheva M., Lusson A., Julien F. H., Damilano B, Grandjean N., Massies, J. Intraband absorptions in GaN/AlN



- quantum dots in the wavelength range of 1.27–2.4  $\mu\text{m}$ . *Applied physics letters*. 2003. Vol. 82. no. 6. P. 868–870.
49. Tchernycheva M., Nevou L., Doyennette L., Helman A., Colombelli R., Julien F. H., Guillot F., Monroy E., Shibata T., Tanaka M Intraband absorption of doped GaN/ AlN quantum dots at telecommunication wavelengths. *Applied Physics Letters*. 2005. Vol. 87. no. 10. P. 101912.
50. Vardi A., Bahir G., Schacham S. E., Kandaswamy P. K., Monroy E. Photocurrent spectroscopy of bound-to-bound intraband transitions in GaN/AlN quantum dots. *Physical Review B*. 2009. Vol. 80. no. 15. P. 155439.
51. Kastalsky A., Duffield T., Allen S. J., Harbison J. Photovoltaic detection of infrared light in a GaAs/AlGaAs superlattice. *Applied physics letters*. 1988. Vol. 52. no. 16. P. 1320–1322.
52. Goossen K. W., S. A. Lyon. Performance aspects of a quantum-well detector. *Journal of applied physics*. 1988. Vol. 63. no. 10. P. 5149–5153.
53. Schneider H., Larkins E. C., Ralston J. D., Schwarz K., Fuchs F., Koidl P.. Space-charge effects in photovoltaic double barrier quantum well infrared detectors. *Applied physics letters*. 1993. Vol. 63. no. 6. P. 782-784.
54. Schönbein C., Schneider H., Bihlmann G., Schwarz K., Koidl P. A 10  $\mu\text{m}$  GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As intersubband photodetector operating at zero bias voltage. *Applied physics letters*. 1996. Vol. 68. no. 7. P. 973-975.
55. Schneider H., Fuchs F., Dischler B., Ralston J. D., Koidl P. Intersubband absorption and infrared photodetection at 3.5 and 4.2  $\mu\text{m}$  in GaAs quantum wells. *Applied physics letters*. 1991. Vol. 58. no. 20. P. 2234–2236.
56. Gendron L., Carras M., Huynh A., Ortiz V., Koeniguer C., Berger V. Quantum cascade photodetector. *Applied physics letters*. 2004. Vol. 85. no. 14. P. 2824–2826.
57. Gendron L., Koeniguer C., Berger V., Marcadet X. High resistance narrow band quantum cascade photodetectors. *Applied physics letters*. 2005. Vol. 86. no. 12. P. 121116.

58. Schneider H., Schönbein C., Walther M., Schwarz K., Fleissner J., Koidl P. Photovoltaic quantum well infrared photodetectors: The four-zone scheme. *Applied physics letters*. 1997. Vol. 71. no. 2. P. 246–248.
59. Schneider H., Schönbein C., Ehret S., Rehm R., Walther M., Schwarz K. THE FOUR-ZONE QWIP: PHOTOVOLTAIC 8-12  $\mu\text{m}$ . *Proceedings of the Fifth International Symposium on Long Wavelength Infrared Detectors and Arrays: Physics and Applications*. The Electrochemical Society. 1997. Vol. 97. no. 33. P. 180.
60. Liu H. C. Quantum well infrared photodetector physics and novel devices." *Semiconductors and semimetals*. Elsevier. 1999. Vol. 62. P. 129–196.
61. Beck W. A. Photoconductive gain and generation-recombination noise in multiple-quantum-well infrared detectors. *Applied physics letters*. 1993. Vol. 63. no. 26. P. 3589–3591.
62. Ehret, S., Schneider, H. Generation of subpicosecond infrared pulses tunable between 5.2  $\mu\text{m}$  and 18  $\mu\text{m}$  at a repetition rate of 76 MHz. *Applied Physics B: Lasers & Optics*. 1998. Vol. 66. no. 1. P. 27.
63. Ehret S., Schneider H., Fleissner J., Koidl P., Böhm G. Ultrafast intersubband photocurrent response in quantum-well infrared photodetectors. *Applied physics letters*. 1997. Vol. 71. no. 5. P. 641–643.
64. Heitmann D., Kotthaus J. P., Mohr E. G. Plasmon dispersion and intersubband resonance at high wavevectors in Si (100) inversion layers. *Solid State Communications*. 1982. Vol. 44. no. 5. P. 715–718.
65. Goossen K. W., Lyon S. A. Grating enhanced quantum well detector. *Applied physics letters*. 1985. Vol. 47. no. 12. P. 1257–1259.
66. Andersson J. Y., Lundqvist L., Paska Z. F. Quantum efficiency enhancement of AlGaAs/GaAs quantum well infrared detectors using a waveguide with a grating coupler. *Applied physics letters*. 1991. Vol. 58. no. 20. P. 2264–2266.
67. Andersson J. Y., Lundqvist L. Near-unity quantum efficiency of AlGaAs/GaAs quantum well infrared detectors using a waveguide with a doubly periodic grating coupler. *Applied physics letters*. 1991. Vol. 59. no. 7. P. 857–859.

68. Andersson J. Y., L Lundqvist. Grating-coupled quantum-well infrared detectors: Theory and performance. *Journal of applied physics*. 1992. Vol. 71. no.7. P. 3600–3610.
69. Sarusi G., Levine B. F., Pearton S. J., Bandara K. M. S., Leibenguth R. E., Andersson J. Y. Optimization of two dimensional gratings for very long wavelength quantum well infrared photodetectors. *Journal of applied physics*. 1994. Vol. 76. no. 9. P. 4989–4994.
70. Andersson J. Y., Lundqvist L. Grating coupled quantum well infrared detectors. *Long Wavelength Infrared Detectors*. CRC Press, 2020. P. 207–270.
71. Lee C. P., Chang K. H., Tsai K. L. Quantum well infrared photodetectors with bi-periodic grating couplers. *Applied physics letters*. 1992. Vol. 61. no. 20. P. 2437–2439.
72. Dupont E., Byloos M., Oogarah T., Buchanan M., Liu H. C. Optimization of quantum-well infrared detectors integrated with light-emitting diodes. *Infrared physics & technology*. 2005. Vol. 47. no. 1–2. P. 132–143.
73. Bois P., Costard E., Marcadet X., Herniou E. Development of quantum well infrared photodetectors in France. *Infrared physics & technology*. 2001. Vol. 42. no. 3-5. P. 291–300.
74. Schimert T. R., Barnes S. L., Brouns A. J., Case F. C., Mitra P., Claiborne L. T. Enhanced quantum well infrared photodetector with novel multiple quantum well grating structure. *Applied Physics Letters*. 1996. Vol. 68. no. 20. P. 2846–2848.
75. Dupont E. Optimization of lamellar gratings for quantum-well infrared photodetectors. *Journal of Applied Physics*. 2000. Vol. 88. no. 5. P. 2687–2692.
76. Sarusi G., Levine B. F., Pearton S. J., Bandara K. M. S., Leibenguth R. E. Improved performance of quantum well infrared photodetectors using random scattering optical coupling. *Applied physics letters*. 1994. Vol. 64. no. 8. P. 960–962.
77. Xing B., Liu H. C. Simulation of one-dimensional quasi-random gratings for quantum well infrared photodetectors. *Journal of applied physics*. 1996. Vol. 80. no. 2. P. 1214–1218.

78. Borenstain S. I., Arad U., Lyubina I., Segal A., Warschawer Y. Optimized random/ordered grating for an n-type quantum well infrared photodetector. *Applied physics letters*. 1999. Vol. 75. no. 17. P. 2659–2661.
79. Fujii T., Masalkar P., Nishino H., Miyamoto Y. Comparison of performance between QWIPs with different two-dimensional random-grating optical couplers. *Infrared physics & technology*. 2001. Vol. 42. no. 3-5. P. 199–204.
80. Nishino H., Masalkar P., Miyatake T., Matsukura Y., Miyamoto Y., Fujii T. Application of elliptical random optical coupler to large-format QWIP-FPA. *Infrared physics & technology*. 2004. Vol. 45. no. 1. P. 1–7.
81. Choi K. K. *The physics of quantum well infrared photodetectors*. World Scientific: 1997. Vol. 7. P. 420.
82. Zhou Y., Li Z., Zhou X., Zhou J., Zheng Y., Li L., Li N., Chen P., Chen X., Lu W. Cut-off wavelength manipulation of pixel-level plasmonic microcavity for long wavelength infrared detection. *Applied Physics Letters*. 2019. Vol. 114. no. 6. P. 061104.
83. Liu H. C., Buchanan M., Wasilewski Z. R. How good is the polarization selection rule for intersubband transitions?. *Applied Physics Letters*. 1998. Vol. 72. no. 14. P. 1682–1684.
84. Sakr S., Giraud E., Dussaigne A., Tchernycheva M., Grandjean N., Julien F. H. Two-color GaN/AlGaIn quantum cascade detector at short infrared wavelengths of 1 and 1.7  $\mu$  m. *Applied Physics Letters*. 2012. Vol. 100. no. 18. P. 181103.
85. Sakr S., Kotsar Y., Haddadi S., Tchernycheva M., Vivien L., Sarigiannidou I., Isac N., Monroy E., Julien F. H. GaN-based quantum cascade photodetector with 1.5  $\mu$  m peak detection wavelength. *Electronics letters*. 2010. Vol. 46. no. 25. P. 1.
86. Sakr S., Crozat P., Gacemi D., Kotsar Y., Pesach A., Quach P., Isac N., Tchernycheva M., Vivien L., Bahir G., Monroy E., Julien F. H. GaN/AlGaIn waveguide quantum cascade photodetectors at  $\lambda \approx 1.55 \mu$  m with enhanced responsivity and  $\sim 40$  GHz frequency bandwidth. *Applied Physics Letters*. 2013. Vol. 102. no. 1. P. 011135.

87. Vardi A., Kheirodin N., Nevou L., Machhadani H., Vivien L., Crozat P., Tchernycheva M., Colombelli R., Julien F. H., Guillot F., Bougerol C., Monroy E., Schacham S., Bahir G. High-speed operation of GaN/AlGaIn quantum cascade detectors at  $\lambda \approx 1.55 \mu\text{m}$ . *Applied Physics Letters*. 2008. Vol. 93. no. 19. P.193509.
88. Giparakis, Miriam, et al. 2.7  $\mu\text{m}$  quantum cascade detector: Above band gap energy intersubband detection. *Applied Physics Letters*. 2022. Vol. 120. no. 7. P. 071104.
89. Jollivet A., Julien F. H., Hinkov B., Pirotta S., Derelle S., Jaeck J., Tchernycheva M., Colombelli R., Bousseksou A., Hugues M., Le Biavan N., Tamayo-Arriola J., Montes Bajo M., Strasser G., Chauveau J.-M., Hierro A. Short infrared wavelength quantum cascade detectors based on non-polar ZnO/ZnMgO quantum wells. *Oxide-based Materials and Devices X*. SPIE, 2019. Vol. 10919.
90. Quach P., Liu S. F., Jollivet A., Wang D., Cheng J. Y., Isac N., Pirotta S., Bouville D., Sheng S. S., Imran A., Chen L., Li D., Zheng X. T., Wang Y. X., Qin Z. X., Tchernycheva M., Julien F. H., Shen B., Wang X. Q. A GaN/AlN quantum cascade detector with a broad response from the mid-infrared (4.1  $\mu\text{m}$ ) to the visible (550 nm) spectral range. *Applied Physics Letters*. 2020. Vol. 116. no. 17. P. 171102.
91. Wang X., Liu J., Zhai S., Liu F., Wang Z. Room temperature quantum cascade detector operating at 4.3  $\mu\text{m}$ . *Journal of Semiconductors*. 2014. Vol. 35. no. 10. P. 104009.
92. Harrer A., Schwarz B., Schuler S., Reininger P., Wirthmüller A., Detz H., MacFarland D., Zederbauer T., Andrews A. M., Rothermund M., Oppermann H., Schrenk W., Strasser G. 4.3  $\mu\text{m}$  quantum cascade detector in pixel configuration. *Optics express*. 2016. Vol. 24. no. 15. P. 17041–17049.
93. Zhou Y., Zhai S., Wang F., Liu J., Liu F., Liu S., Zhang J., Zhuo N., Wang L., Wang Z. High-speed, room-temperature quantum cascade detectors at 4.3  $\mu\text{m}$ . *AIP Advances*. 2016. Vol. 6. no. 3. P. 035305.
94. Kang J. B., Wang L., Hao Z. B., Wang C., Xie L. L., Wang L., Wang J., Xiong B., Sun C.-Z., Han Y.-J., Li H.-T, Luo Y. An InP-based mid-wave infrared up-

- converter utilizing cascade carrier transportation. *IEEE Photonics Technology Letters*. 2016. Vol. 28. no. 12. P. 1371–1374.
95. Tang C., Lan Y., Dutta M., Strosio M. A., Shi J. AlGaAs/GaAs Triple Quantum Well Photodetector at 5  $\mu\text{m}$  Wavelength—A Simulation Study. *IEEE Journal of Quantum Electronics*. 2016. Vol. 52. no. 11. P. 1–8.
96. Hofstetter D., Graf M., Aellen T., Faist J., Hvozdar L., Blaser S. 23 GHz operation of a room temperature photovoltaic quantum cascade detector at 5.35  $\mu\text{m}$ . *Applied physics letters*. 2006. Vol. 89. no. 6. P. 061119.
97. Shen Z., Deng Z., Zhao X., Huang J., Yao L., Zou X., Cao C., Gong Q., Chen B. Long-wave infrared sub-monolayer quantum dot quantum cascade photodetector. *Journal of Lightwave Technology*. 2020. Vol. 39. no. 5. P. 1489–1496.
98. Li K., Liu S. M., Zhuo N., Liu J. Q., Zhu Y. X., Guo K., Zhai S.-Q, Zhang J.-C., Wang L.-J., Liu F. Q. Quantum cascade detectors with enhanced responsivity using coupled double-well structures. *Applied Physics Express*. 2022. Vol. 15. no. 3. P. 032005.
99. Marschick G., David M., Arigliani E., Opačak N., Schwarz B., Giparakis M., Delga A., Lagree M., Poletti T., Trinite V., Evirgen A., Gerard B., Ramer G., Maulini R., Butet J., Blaser S., Andrews A. M., Strasser G., Hinkov B. High-responsivity operation of quantum cascade detectors at 9  $\mu\text{m}$ . *Optics Express*. 2022. Vol. 30. no. 22. P. 40188–40195.
100. Kong N., Liu J. Q., Li L., Liu F. Q., Wang L. J., Wang Z. G., Lu W. A 10.7  $\mu\text{m}$  InGaAs/InAlAs quantum cascade detector. *Chinese Physics Letters*. 2010. Vol. 27. no. 12. P. 128503.
101. Zhai S. Q., Liu J. Q., Wang X. J., Zhuo N., Liu F. Q., Wang Z. G., Liu X.-H., Li N., Lu, W. 19  $\mu\text{m}$  quantum cascade infrared photodetectors. *Applied Physics Letters*. 2013. Vol. 102. no. 19. P. 191120.
102. Kamgar A., Kneschaurek P., Dorda G., Koch J. F. Resonance spectroscopy of electronic levels in a surface accumulation layer. *Physical Review Letters*. 1974. Vol. 32. no. 22. P. 1251.
103. Esaki L. A new photoconductor. *IBM Tech. Discl. Bull.* 1977. Vol. 20. P. 2456.

104. Ando T., Fowler A. B., Stern F. Electronic properties of two-dimensional systems. *Reviews of Modern Physics*. 1982. Vol. 54. no. 2. P. 437.
105. Chiu L. C., Smith J. S., Margalit S., Yariv A., Cho A. Y. Application of internal photoemission from quantum-well and heterojunction superlattices to infrared photodetectors. *Infrared Physics*. 1983. Vol. 23. no. 2. P. 93–97.
106. Coon D. D., Karunasiri R. P. G. New mode of IR detection using quantum wells. *Applied Physics Letters*. 1984. Vol. 45. no. 6. P. 649–651.
107. Coon D. D., Karunasiri R. P. G., Liu H. C. Fast response quantum well photodetectors. *Journal of applied physics*. 1986. Vol. 60. no. 7. P. 2636–2638.
108. Levine B. F., Choi K. K., Bethea C. G., Walker J., Malik R. J. New 10  $\mu\text{m}$  infrared detector using intersubband absorption in resonant tunneling GaAlAs superlattices. *Applied physics letters*. 1987. Vol. 50. no. 16. P. 1092–1094.
109. Bandara K. M. S. V., Choe J. W., Francombe M. H., Perera A. G. U., Lin Y. F. GaAs/AlGaAs superlattice miniband detector with 14.5  $\mu\text{m}$  peak response. *Applied physics letters*. 1992. Vol. 60. no. 24. P. 3022–3024.
110. Luo H., Liu H. C., Song C. Y., Wasilewski Z. R. Background-limited terahertz quantum-well photodetector. *Applied Physics Letters*. 2005. Vol. 86. no. 23. P. 231103.
111. Gunapala S. D., Bandara S. V., Liu J. K., Hill C. J., Rafol S. B., Mumolo J. M., Trinh J.T., Tidrow M.Z., LeVan P. D. Development of mid-wavelength and long-wavelength megapixel portable QWIP imaging cameras. *Infrared physics & technology*. 2005. Vol. 47. no. 1-2. P. 67–75.
112. Schneider H., Koidl P., Fuchs F., Dischler B., Schwarz K., Ralston J. D. Photovoltaic intersubband detectors for 3-5  $\mu\text{m}$  using GaAs quantum wells sandwiched between AlAs tunnel barriers. *Semiconductor Science and Technology*. 1991. Vol. 6. no. 12C. P. C120.
113. Schneider H., Kheng K., Ramsteiner M., Ralston J. D., Fuchs F., Koidl P. Transport asymmetry and photovoltaic response in (AlGa) As/AlAs/GaAs/(AlGa) As single-barrier quantum-well infrared detectors. *Applied physics letters*. 1992. Vol. 60. no. 12. P. 1471–1473.

114. Schneider H. Optimized performance of quantum well intersubband infrared detectors: Photovoltaic versus photoconductive operation. *Journal of applied physics*. 1993. Vol. 74. no. 7. P. 4789–4791.
115. Schneider H., Schönbein C., Walther M., Schwarz K., Fleissner J., Koidl P. Photovoltaic quantum well infrared photodetectors: The four-zone scheme. *Applied physics letters*. 1997. Vol. 71. no. 2. P. 246–248.
116. Schneider H., Liu H. C. Quantum well infrared photodetectors. Springer Berlin: Heidelberg, 2007. P. 248.
117. Giorgetta F. R., Baumann E., Graf M., Yang Q., Manz C., Kohler K., Beere H. E., Ritchie D. A., Linfield E., Davies A. G., Fedoryshyn Y., Jackel H., Fischer M., Faist J., Hofstetter D. Quantum cascade detectors. *IEEE Journal of Quantum Electronics*. 2009. Vol. 45. no. 8. P. 1039–1052.
118. Beeler M., Trichas E., Monroy E. III-nitride semiconductors for intersubband optoelectronics: a review. *Semiconductor Science and Technology*. 2013. Vol. 28. no. 7. P. 074022.
119. Durmaz H., Nothern D., Brummer G., Moustakas T. D., Paiella R. Terahertz intersubband photodetectors based on semi-polar GaN/AlGa<sub>N</sub> heterostructures. *Applied Physics Letters*. 2016. Vol. 108. no. 20. P. 201102.
120. Mensz P. M., Dror B., Ajay A., Bougerol C., Monroy E., Orenstein M., Bahir G. Design and implementation of bound-to-quasibound GaN/AlGa<sub>N</sub> photovoltaic quantum well infrared photodetectors operating in the short wavelength infrared range at room temperature. *Journal of Applied Physics*. 2019. Vol. 125. no. 17. P. 174505.
121. Huang J., Guo D., Chen W., Deng Z., Bai Y., Wu T., Chen Y., Liu H., Wu J., Chen B. Sub-monolayer quantum dot quantum cascade mid-infrared photodetector. *Applied Physics Letters*. 2017. Vol. 111. no. 25. P. 251104.
122. Huang J., Guo D., Deng Z., Chen W., Liu H., Wu J., Chen, B. Midwave infrared quantum dot quantum cascade photodetector monolithically grown on silicon substrate. *Journal of Lightwave Technology*. 2018. Vol. 36. no. 18. P. 4033–4038.



123. Zhang X., Huang H., Yao X., Li Z., Zhou C., Zhang X., Chen P., Fu L., Zhou X., Wang J., Hu W., Lu W., Zou J., Tan H. H., Jagadish C. Ultrasensitive mid-wavelength infrared photodetection based on a single InAs nanowire. *ACS nano*. 2019. Vol. 13. no. 3. P. 3492–3499.
124. Kim H., Ahn S. Y., Wasilewski Z. Fabrication of grating coupled GaAs/AlGaAs quantum well infrared photodetector on an Si substrate. *Journal of Vacuum Science & Technology B, Nanotechnology and Microelectronics: Materials, Processing, Measurement, and Phenomena*. 2019. Vol. 37. no. 3. P. 031209.
125. Zhou X., Li N., Lu W. Progress in quantum well and quantum cascade infrared photodetectors in SITP. *Chinese Physics B*. 2019. Vol. 28. no. 2. P. 027801.
126. Yang H., Zheng Y., Tang Z., Li N., Zhou X., Chen P., Wang J. MBE growth of high performance very long wavelength InGaAs/GaAs quantum well infrared photodetectors. *Journal of Physics D: Applied Physics*. 2020. Vol. 53. no. 13. P. 135110.
127. Alexandrov A. S., Kabanov V. V., Ray D. K. From electron to small polaron: an exact cluster solution. *Physical Review B*. 1994. Vol. 49. no. 14. P. 9915.
128. Ku L. C., Trugman S. A., Bonča J. Dimensionality effects on the Holstein polaron. *Physical Review B*. 2002. Vol. 65. no. 17. P. 174306.
129. Hirsch J. E., Fradkin E. Effect of quantum fluctuations on the Peierls instability: a Monte Carlo study. *Physical Review Letters*. 1982. Vol. 49. no. 6. P. 402.
130. Ciuchi S., De Pasquale F., Fratini S., Feinberg D. Dynamical mean-field theory of the small polaron. *Physical Review B*. 1997. Vol. 56. no. 8. P. 4494.
131. Zhang C., Jeckelmann E., White S. R. Dynamical properties of the one-dimensional Holstein model. *Physical Review B*. 1999. Vol. 60. no. 20. P. 14092.
132. Kornilovitch P. E., Pike E. R. Polaron effective mass from Monte Carlo simulations. *Physical Review B*. 1997. Vol. 55. no. 14. P. R8634.
133. Spencer P. E., Samson J. H., Kornilovitch P. E., Alexandrov A. S. Effect of electron-phonon interaction range on lattice polaron dynamics: A continuous-time quantum Monte Carlo study. *Physical Review B*. 2005. Vol. 71. no. 18. P. 184310.

134. Hohenadler M., Neuber D., von der Linden W., Wellein G., Loos J., Fehske H. Photoemission spectra of many-polaron systems. *Physical Review B*. 2005. Vol. 71. no. 24. P. 245111.
135. Hague J. P., Kornilovitch P. E., Alexandrov A. S., Samson J. H. Effects of lattice geometry and interaction range on polaron dynamics. *Physical Review B*. 2006. Vol. 73. no. 5. P.054303.
136. Prokof'ev N. V., Svistunov B. V., Tupitsyn I. S. Exact, complete, and universal continuous-time worldline Monte Carlo approach to the statistics of discrete quantum systems. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. 1998. Vol. 87, P. 310–321.
137. Mishchenko A. S., Prokof'ev N. V., Sakamoto A., Svistunov B. V. Diagrammatic quantum Monte Carlo study of the Fröhlich polaron. *Physical Review B*. 2000. Vol. 62. no. 10. P. 6317.
138. Mishchenko A. S., Nagaosa N.. Quasidegenerate self-trapping in one-dimensional charge transfer exciton. *Physical Review Letters*. 2001. Vol. 86. no. 20 P. 4624.
139. Goulko O., Mishchenko A. S., Prokof'ev. N., Svistunov B. Dark continuum in the spectral function of the resonant Fermi polaron. *Physical Review A*. 2016. Vol. 94. no. 5. P.051605.
140. Mishchenko A. S., De Filippis G., Cataudella V., Nagaosa N., Fehske H. Optical signatures of exciton polarons from diagrammatic Monte Carlo. *Physical Review B*. 2018. Vol. 97. no. 4. P. 045141.
141. Prokof'ev N., Svistunov B. Bold diagrammatic Monte Carlo technique: When the sign problem is welcome. *Physical review letters*. 2007. Vol. 99. no. 25. P. 250201.
142. Van Houcke K., Werner F., Kozik E., Prokof'ev N., Svistunov B., Ku M. J. H., Sommer A. T., Cheuk L. W., Schirotzek A., Zwierlein M. W. Feynman diagrams versus Fermi-gas Feynman emulator. *Nature Physics*. 2012. Vol. 8. no. 5. P. 366–370.

143. Kulagin S. A., Prokof'ev N., Starykh O. A., Svistunov B., Varney C. N. Bold diagrammatic Monte Carlo method applied to fermionized frustrated spins. *Physical review letters*. 2013. Vol. 110. no. 7. P. 070601.
144. Mishchenko A. S., Nagaosa N., Prokof'ev N. Diagrammatic Monte Carlo method for many-polaron problems. *Physical Review Letters*. 2014. Vol. 113. no. 16. P.166402.
145. Berciu M. Green's function of a dressed particle. *Physical review letters*. 2006. Vol. 97. no. 3. P. 036402.
146. Marchand D. J. J., De Filippis G., Cataudella V., Berciu M., Nagaosa N., Prokof'Ev N. V., Mishchenko A. S., Stamp P. C. Sharp transition for single polarons in the one-dimensional Su-Schrieffer-Heeger model. *Physical review letters*. 2010. Vol. 105. no. 26. P. 266605.
147. Ebrahimnejad H., Berciu M. Trapping of three-dimensional Holstein polarons by various impurities. *Physical Review B*. 2012. Vol. 85. no. 16. P. 165117.
148. Möller M.M., Berciu M. Discontinuous polaron transition in a two-band model. *Physical Review B*. 2016. Vol. 93. no. 3. P. 035130.
149. Marchand D. J., Stamp P. C., Berciu M. Dual coupling effective band model for polarons. *Physical Review B*. 2017. Vol. 95. no. 3. P. 035117.
150. Stroschio M. A., Dutta M. *Phonons in nanostructures*. Cambridge: Cambridge University Press, 2001. P. 274.
151. Zhu J. G., Ban S. L. Effect of electron-optical phonon interaction on resonant tunneling in coupled quantum wells. *The European Physical Journal B*. 2012. Vol. 85. P. 1–6.
152. Zhang L. Uniform description of polar optical phonon states and their Fröhlich electron-phonon interaction Hamiltonians in multi-layer wurtzite nitride low-dimensional quantum structures. *Superlattices and Microstructures*. 2013. Vol. 53. P. 113–129.
153. Seti J., Tkach M., Voitsekhivska O. Phonon spectrum in multi-layer anisotropic wurtzite-based nano-heterostructures. *Romanian Journal of Physics*. 2018. Vol. 63. P. 607.

154. Hofstetter D., Giorgetta F. R., Baumann E., Yang Q., Manz C., Köhler K. Midinfrared quantum cascade detector with a spectrally broad response. *Applied Physics Letters*. 2008. Vol. 93. no. 22. P. 221106.
155. Lei W., Jagadish C. Lasers and photodetectors for mid-infrared 2–3  $\mu$  m applications. *Journal of Applied Physics*. 2008. Vol. 104. no. 9. P. 11.
156. Giorgetta F. R., Baumann E., Graf M., Yang Q., Manz C., Kohler K., Beere H. E., Ritchie D. A., Linfield E., Davies A. G., Fedoryshyn Y., Jackel H., Fischer M., Faist J., Hofstetter D. Quantum cascade detectors. *IEEE Journal of Quantum Electronics*. 2009. Vol. 45. no. 8. P. 1039–1052.
157. Hofstetter D., Giorgetta F. R., Baumann E., Yang Q., Manz C., Köhler K. Mid-infrared quantum cascade detectors for applications in spectroscopy and pyrometry. *Applied Physics B*. 2010. Vol. 100. P. 313–320.
158. Vardi A., Bahir G., Guillot F., Bougerol C., Monroy E., Schacham S. E., Tchernycheva M., Julien F. H. Near infrared quantum cascade detector in GaN/AlGaIn/AlN heterostructures. *Applied Physics Letters*. 2008. Vol. 92. no. 1. P. 011112.
159. Beeler M., Trichas E., Monroy E. III-nitride semiconductors for intersubband optoelectronics: a review. *Semiconductor Science and Technology*. 2013. Vol. 28. no. 7. P. 074022.
160. Reininger P., Schwarz B., Detz H., MacFarland D., Zederbauer T., Andrews A. M., Schrenk W., Baumgartner O., Kosina H., Strasser G. Diagonal-transition quantum cascade detector. *Applied Physics Letters*. 2014. Vol. 105. no. 9. P. 091108.
170. Reininger P., Zederbauer T., Schwarz B., Detz H., MacFarland D., Andrews A. M., Schrenk W., Strasser G. InAs/AlAsSb based quantum cascade detector. *Applied Physics Letters*. 2015. Vol. 107. no. 8. P. 081107.
171. Levinson I. B., Rashba É. I. Threshold phenomena and bound states in the polaron problem. *Soviet Physics Uspekhi*. 1974. Vol. 16. P. 892.
172. Tkach M. V., Pytiuk O. Y., Voitsekhivska O. M., Seti J. O. Generalized method of Feynman-Pines diagram technique in the theory of energy spectrum of two-level

- quasiparticle renormalized due to multi-phonon processes at cryogenic temperature. *Condensed matter physics*. 2018. Vol. 21. no.4. P. 43703.
173. Tkach M. V., Seti J. O., Voitsekhivska O. M. Diagram technique in the method of Green's functions of quasiparticles interacting with phonons. *Chernivtsi: Chernivtsi National University*, 2019. P. 164.
174. Feynman R. P., Hellwarth R. W., Iddings C. K., Platzman P. M. Mobility of slow electrons in a polar crystal. *Physical Review*. 1962. Vol. 127. P. 1004.
175. Abrikosov A. A., Gorkov L. P., Dzyaloshinski I. E. *Methods of quantum field theory in statistical physics.* / ed. by R.A. Silverman. New York: Dover Publications, 1975. P. 384.
176. Faist J., *Quantum Cascade Lasers*. Oxford: Oxford University Press, 2013. P. 328.
177. Belkin M. A., F. Capasso. New frontiers in quantum cascade lasers: high performance room temperature terahertz sources. *Physica Scripta*. 2015. Vol. 90. no. 11. P. 118002.
178. Tkach M. V., Seti J. O., Voitsekhivska O. M. Quasi-particles in Nano-heterostructures: Quantum Dots, Wires and Layers. Chernivtsi: Books-XXI, 2015. P. 386.
179. Harrison P., Valavanis A. *Quantum wells, wires and dots: theoretical and computational physics of semiconductor nanostructures*. John Wiley & Sons, 2016. P.624
180. Davydov A. S. Theory of a solid body. Moscow: Nauka, 1976. P. 639.
181. Mahan G.D., Many-Particle Physics. New York: Plenum 2000. P. 785.
182. Mishchenko A. S. Diagrammatic Monte Carlo method as applied to the polaron problems. *Physics-Uspekhi*. 2005. Vol. 48. no. 9. P. 887.
183. Mishchenko A. S. Electron–phonon coupling in underdoped high-temperature superconductors. *Physics-Uspekhi*. 2009. Vol. 52. no. 12. P. 1193.
184. Devreese J. T., Alexandrov A. S. Fröhlich polaron and bipolaron: recent developments. *Reports on Progress in Physics*. 2009. Vol. 72. no. 6. P. 066501.

185. Bonča J., Trugman S. A., Batistić I. Holstein polaron." *Physical Review B*. 1999. Vol. 60. P. 1633.
186. De Filippis G., Cataudella V., Ramaglia V. M., Perroni C. A. Static and dynamic polaron features in a coherent-state basis. *Physical Review B*. 2005. Vol. 72. no. 1. P. 014307.
187. Bieniasz K., Berciu M., Oleś A. M. The Green function variational approximation: significance of physical constraints. *Acta Physica Polonica A*. 2016. Vol. 130. P. 659.
188. Covaci L., Berciu M. Holstein polaron: The effect of coupling to multiple-phonon modes. *Europhysics Letters*. 2007. Vol. 80. P. 67001.
189. Kornilovitch P. E. Polaron action for multimode dispersive phonon systems. *Physical Review B*. 2006. Vol. 73. P. 094305.
190. De Filippis G., Cataudella V., Mishchenko A. S., Nagaosa N. Optical conductivity of polarons: Double phonon cloud concept verified by diagrammatic Monte Carlo simulations. *Physical Review B*. 2012. Vol. 85. P. 094302.
191. Agranovich V. M., Theory of excitons. Moscow: Nauka, 1968. P. 465.
192. Tkach N. V. System of exact equations for the mass operator of quasiparticles interacting with phonons. *Theor. Math. Phys.;(United States)*. 1985. Vol. 61. no. 3.
193. Tkach M. V., Seti J. O., Voitsekhivska O. M., Pytiuk O. Y. Properties and temperature evolution of the spectrum of localized quasi-particles interacting with polarization phonons in two models. *Condens. Matter Phys*. 2016. Vol. 19. no. 4. P. 43701.
194. Gradshteyn I.S., Ryzhik I.M., Tables of integrals, sums, series and products. Moscow: Nauka, 1963. P. 1220.

## ДОДАТОК

## СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ЗДОБУВАЧА ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

**Публікації періодичних наукових виданнях, проіндексованих у базах даних Web of Science Core Collection та Scopus:**

1. Tkach M., Seti J., Pytiuk O., Voitsekhivska O., Gutiv V. Spectrum of localized three-level quasiparticle resonantly interacting with polarization phonons at cryogenic temperature. *Applied Nanoscience*. 2019. Vol. 10, no. 8. P. 2581–2591.

2. Tkach M.V., Seti Ju.O., Voitsekhivska O.M., Gutiv V.V. Method of successive separation and summing of multiplicative diagrams of mass operator for the multi-level quasiparticle interacting with polarization phonons. *Condensed Matter Physics*. 2019. Vol. 22, no. 3. P. 33703.

3. Tkach M., Seti J., Voitsekhivska O., Gutiv V., Vereshko E. Properties of renormalized spectrum of interacting with polarization phonons localized quasiparticle with degenerated excited state. *Molecular Crystals and Liquid Crystals*. 2020. Vol. 701, no. 1. P. 48–58.

4. Tkach M.V., Seti J.O., Voitsekhivska O.M., Hutiv V.V. Renormalized spectrum of quasiparticle in limited number of states, strongly interacting with two-mode polarization phonons at  $T=0$  K. *Condensed Matter Physics*. 2021. Vol. 24, no. 1. P. 13705.

5. Tkach M., Seti J., Voitsekhivska O., Hutiv V. Renormalized Spectrum of Quasiparticle in Two States, Strongly Interacting with Multi-Mode Polarization Phonons at  $T=0$  K. *International Journal of Theoretical Physics*. 2022. Vol. 61, no. 29.

6. Tkach M.V., Seti J.O., Voitsekhivska O.M., Hutiv V.V. Spectrum of Localized Quasi-Particle Interacting with Three-Mode Phonons. *Springer Proceedings in Physics*. 8th International Conference on Nanotechnology and Nanomaterials, NANO 2020. Lviv 26-29 August 2020. Vol. 264, P. 83-94.

**Наукові праці, які засвідчують апробацію матеріалів дисертації:**

7. Tkach M.V., Seti Ju.O., Hutiv V.V., Voitsekhivska O.M. Spectrum of localized quasiparticle renormalized due to the interaction with three-mode phonons. The

International research and practice conference «*Nanotechnology and nanomaterials*» (NANO-2020): Abstract Book of participants of the International research and practice conference (Lviv, 26 – 29 August 2020) / Edited by Dr. Olena Fesenko. Kyiv: LLC «Computer-publishing, information center», 2020. P. 474.

8. Tkach M.V., Hutiv V.V., Voitsekhivska O.M., Seti Ju.O. Properties of renormalized spectra of localized quasiparticles interacting with single- and two-mode background modes in the Davydov model at  $T = 0\text{K}$ . The International research and practice conference «*Nanotechnology and nanomaterials*» (NANO-2021): Abstract Book of participants of International research and practice conference (Lviv, 25 – 27 August 2021) / Edited by Dr. Olena Fesenko. Kyiv: LLC «Computer-publishing, information center», 2021. P. 418.

9. Tkach M.V., Hutiv V.V., Voitsekhivska O.M., Seti Ju.O. Renormalized spectrum of localized quasiparticles interacting with single- and two-mode phonons at  $T \neq 0\text{K}$  in Davydov's model. *XVIII International Freik Conference Physics and Technology of Thin Films and Nanosystems. Materials.* / Ed. by Prof. V.V. Prokopiv. Ivano-Frankivsk: Publisher Vasyl Stefanyk Precarpathian National University, 2021. P. 54.

10. Ткач М.В., Сеті Ю.О., Войцехівська О.М., Гутів В.В. Роль багатофонових процесів у квантово-каскадних детекторах з порушеними «фононними драбинками» екстракторів. 9-та Міжнародна науково-технічна конференція «*Сенсорна електроніка та мікросистемні технології*» (СЕМСТ-9): матеріали Міжнар. наук.-техн. конф., Одеса, 20-24 вересня 2021. Одеса, 2021. С. 65-66.

11. Tkach M.V., Hutiv V.V., Seti Ju.O., Voitsekhivska O.M. Quantum theory of energy parameters of a two-well nanosystem as the main working element of a broadband photodetector of the far IR range. The International research and practice conference «*Nanotechnology and nanomaterials*» (NANO-2022): Abstract Book of participants of the International research and practice conference (Lviv, 25–27 August 2022) / Edited by Dr. Olena Fesenko. Kyiv: LLC APF POLYGRAPH SERVICE, 2022. P. 445.