

УДК 537.9, 535.215.1

**МАТРИЧНЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ ГАМИЛЬТОНИАНА
ЭЛЕКТРОН-ФОТОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ
В ОДНОМЕРНОЙ МОДЕЛИ НАНОКРИСТАЛЛА, ОБРАЗОВАННОГО
N ОДИНАКОВЫМИ ДЕЛЬТА-БАРЬЕРАМИ**

Ю.Г. Пейсахович, А.А. Штыгашев*Новосибирский государственный технический университет*

Матричные элементы гамильтониана электрон-фотонного взаимодействия между разными стационарными состояниями квазидискретного зонного спектра электронов входят в выражения, которые описывают частотную зависимость электромагнитных проницаемостей, восприимчивостей и проводимости нанокристаллов, а матричные элементы между состояниями квазидискретного и непрерывного спектра – в выражения для вероятностей и токов фотоэмиссии или дифракции электронов на кристаллах, существенно определяя зависимость этих величин от размеров кристаллов и от силы связи электронов в атомах решетки. В работе получены строгие аналитические выражения матричных элементов гамильтониана взаимодействия электрона с электромагнитной волной для модели кристаллической решетки конечной длины, образованной N одинаковыми δ -барьерами. Эта модель дает достаточно простой зонный спектр энергии электронов: дискретный для состояний ниже вакуумного уровня и непрерывный для состояний выше этого уровня. Метод трансфера матрицы позволяет строго ввести понятие квазиимпульса, но обратное пространство нанокристалла становится существенно неоднородным – стационарным и резонансным состояниям разных разрешенных зон соответствуют разные неэквидистантные точки этого пространства в основной зоне Бриллюэна. Модель приводит к не очень сложным аналитическим выражениям для матричных элементов, которые допускают качественный и числовой анализ в разных важных предельных случаях, и позволяет произвести быстрые числовые расчеты до очень больших N . Выделены вклады областей внутри и вне решетки малого кристалла. В дипольном приближении проведены численные расчеты матричных элементов для переходов между стационарными состояниями разных точек зоны Бриллюэна с энергией ниже вакуумного уровня и по разные стороны от этого уровня. Результаты сильно зависят от силы связи электронов в элементарных ячейках, от длины решетки N , от степени влияния трансляционной и зеркальной симметрии потенциала решетки. Анализируются формирование и степень приближенности правил отбора «закона сохранения квазиимпульса» и «вертикальных» переходов при увеличении длины решетки и связи электронов в элементарных ячейках.

Ключевые слова: амплитуда вероятности перехода, сила осциллятора, решетка дельта-барьеров конечной длины, полином Чебышева второго рода, фотоэмиссия.

DOI: 10.17212/1727-2769-2015-4-7-18

Введение

Для кристаллов малого размера при теоретических расчетах их оптических и фотоэмиссионных характеристик и установлении связи этих характеристик с электронными спектрами кристаллов мы должны применять известные формулы квантово-механической теории возмущений. Такие формулы имеют вид сумм по невозмущенным стационарным состояниям электронов и включают матричные элементы [1–9]

Исследование выполнено в рамках реализации государственного задания Министерства образования и науки РФ, проект № 3.338.2014/К.

$$\tilde{M}_{fi} = \frac{e\hbar}{mc} \langle \psi_f | \mathbf{A}(\mathbf{r}) \nabla | \psi_i \rangle = \frac{e\hbar}{mc} A_0 \langle \psi_f | e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}} \mathbf{n} \nabla | \psi_i \rangle \quad (1)$$

гамильтониана электрон-фотонного взаимодействия $\hat{H} = -(e/mc) \mathbf{A} \hat{\mathbf{p}}$ между одноэлектронными состояниями ψ_i и ψ_f , здесь $\mathbf{A} = A_0 \mathbf{n} e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}}$ – векторный потенциал с амплитудой A_0 и поляризацией \mathbf{n} электромагнитной волны, обладающей волновым вектором \mathbf{k}' , $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla$ – оператор импульса электрона.

В атомах волновые функции электронов локализованы в области размера боровских радиусов. В кристаллах они делокализованы и обычно описываются на языке блоховских волновых функций, квазиимпульсов и зон Бриллюэна. Этот язык широко используется для интерпретации спектральных особенностей оптического поглощения и излучения электромагнитных волн, фотоэмиссии и дифракции электронов кристаллами. При этом часто считают, что матричные элементы (1) отличны от нуля только для переходов между состояниями электрона в решетке, связанными законом сохранения «импульса»:

$$\mathbf{K}_f - \mathbf{K}_i - \mathbf{G} = \pm \mathbf{k}', \quad (2)$$

где \mathbf{K}_i и \mathbf{K}_f – квазиволновые векторы блоховского электрона в начальном и конечном состояниях, \mathbf{G} – произвольный вектор обратной решетки. Для длинноволнового излучения используют дипольное приближение, заменяя в (1) экспоненту $e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}}$ единицей, пренебрегают в (2) величиной \mathbf{k}' и говорят о «вертикальных» (или прямых) переходах $\mathbf{K}_f = \mathbf{K}_i$ в основной зоне Бриллюэна.

В малых кристаллах мы имеем промежуточную ситуацию между атомом и идеальным кристаллом. В кристалле конечного размера строгая трансляционная симметрия и теорема Блоха не выполняются, тем не менее блоховские характеристики состояний продолжают оставаться основой приближенного описания электронных и оптических свойств. Введение этих характеристик обычно не является строгим и вызывает вопросы, связанные с точностью построения квазиблоховских решений, определения квазиимпульса и энергетических зон. Волновые функции на поверхности нанокристалла удовлетворяют конкретным граничным условиям, что определяет дискретный или непрерывный квазизонный характер энергетического спектра электрона, причем с уменьшением размеров кристалла правило отбора (2) выполняется все хуже.

Матричные элементы (1) между разными состояниями квазидискретного зонного спектра входят в выражения, которые описывают частотную зависимость электромагнитных проницаемостей, восприимчивостей и проводимости кристаллов [1–5], а матричные элементы между состояниями квазидискретного и непрерывного спектра – в выражения для вероятностей и токов фотоэмиссии [6–8] или дифракции электронов на кристаллах. При теоретическом описании частотной и энергетической дисперсии этих явлений часто не только применяют правило отбора (2), но и в широком диапазоне частот света и энергий электронов полагают матричные элементы \tilde{M}_{fi} константами, почти не влияющими на форму контура спектральных линий в оптике и на фотоэмиссионные распределения. Мы покажем ниже, что в малых кристаллах такое приближение может быть неоправданным. При этом будем считать, что размер кристалла мал по сравнению с глубиной проникновения электромагнитной волны и длиной квантовой когерентности электро-

нов, т. е. пренебрежем электрон-фоонным, электрон-электронным взаимодействиями и другими процессами неупругого рассеяния электронов.

Матричные элементы (1) пропорциональны силам осцилляторов. Силам осцилляторов и вероятностям электронных переходов в атомах посвящена научная и справочная литература [9]. Для идеального кристалла грубые оценки величины сил осцилляторов сделаны в [1], обсуждение на языке комбинации атомных сферических гармоник имеется в [7]. Однако нам неизвестны работы, в которых производились бы строгие теоретические оценки зависимости матричных элементов \tilde{M}_{fi} от размера кристалла и силы связи электронов в элементарных ячейках. В этой статье мы приведем результаты численно-аналитических исследований этих зависимостей в рамках достаточно простой модели. Обобщение на более сложные модели будет проведено в последующих публикациях.

1. Постановка задачи и модельные волновые функции

Рассмотрим простейшую одномерную модель, описывающую электрон в периодическом поле кристаллической решетки конечной длины, представляющей собой систему из N одинаковых δ -барьеров мощности Ω , расположенных на расстоянии d друг от друга и в области $0 \leq x \leq Nd$ создающих потенциал

$$U(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \Omega \sum_{n=1}^N \delta(x - nd),$$

на левой границе решетки имеется бесконечная потенциальная стенка $U(x) = \infty$ при $x < 0$, а на правой границе прямоугольный барьер $U(x) = U_V$ (вакуумный уровень) при $x \geq Nd$.

Стационарные состояния делятся на два типа: а) состояния с $E < U_V$ локализованы в основном в решетке и имеют дискретный спектр энергии зонной структуры, б) состояния с $E > U_V$ представляют собой волновые функции задачи рассеяния и принадлежат непрерывному спектру энергии. В решетке конечной длины теорема Блоха теряет строгий смысл, но при заданной энергии стационарные волновые функции $\psi(x)$ и их производные $\psi'(x) = d\psi/dx$ можно построить методом трансфер-матрицы (оператора трансляции) [10–11]. В нашей модели при $x = 0$ выполняются граничные условия $\psi(0) = 0$, $\psi'(0) = A_0$, где A_0 – постоянная, подлежащая определению из нормировки. В стационарном состоянии электрона с энергией E его волновая функция внутри n -й ячейки решетки $(n-1)d \leq x \leq nd$ имеет вид суммы прямой и отраженной плоских волн с волновым числом $k = \hbar^{-1} \sqrt{2mE}$:

$$\psi(x) = A_n e^{ik\tilde{x}} + B_n e^{-ik\tilde{x}},$$

где $\tilde{x} = x - (n-1)d$ – координата, отсчитанная от левого края ячейки ($0 \leq \tilde{x} < d$). Парциальные амплитуды A_n и B_n можно связать с нормировочной постоянной

$$\begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} = L^{-1} M^{n-1} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} A_0, \quad L^{-1} = \frac{1}{2ik} \begin{pmatrix} ik & 1 \\ ik & -1 \end{pmatrix}, \quad (3)$$

где $M = M_\Omega M_d$ есть матрица перехода через период решетки, M_Ω – матрица перехода через δ -барьер, а M_d – через промежуток между ними:

$$M_{\Omega} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \Omega & 1 \end{pmatrix}, \quad M_d = \begin{pmatrix} \cos kd & \frac{\sin kd}{k} \\ -k \sin kd & \cos kd \end{pmatrix}.$$

Степень матрицы M^{n-1} с помощью формулы Абеле [11] $M^{n-1} = U_{n-2}(y) \times \times M - U_{n-3}(y)I$ выражается через полиномы Чёбышева второго рода $U_n(y)$ от аргумента

$$y = \frac{1}{2} \text{Sp } M = \cos kd + \frac{\Omega}{2k} \sin kd, \quad \text{Sp } M = M_{11} + M_{22}.$$

Элементы матриц нумеруем двумя индексами снизу. Величина y есть функция энергии $y = y(E)$, значениям $|y| > 1$ соответствуют запрещенные энергетические зоны, либо поверхностные таммовские состояния. Квазиволновое число K определяется соотношением

$$Kd = \pm \arccos y + Gd, \quad (4)$$

где $G = 2\pi l/d$ – произвольный «вектор» одномерной обратной решетки (l – любое целое число), позволяет привести K и спектр к первой зоне Бриллюэна. При $|y| \leq 1$ в полосе пропускания решетки $y = \cos Kd$, так что

$$-2 \leq \frac{\Omega}{2k} \sin kd = \cos Kd - \cos kd \leq 2,$$

$$M_{12} = \frac{1}{k} \sin kd, \quad M_{22} = 2 \cos Kd - \cos kd, \quad M_{11} = \cos kd$$

и полиномы Чёбышева можно записать [11] как $U_n(y) = \sin K(n+1)/\sin Kd$, а уравнение (4) дает закон дисперсии квазиимпульса $E = E(K)$; при этом из (3) имеем

$$A_n = \frac{1}{2ik} (\Phi_+ e^{iKnd} - \Phi_- e^{-iKnd}) \tilde{A}_0,$$

$$B_n = \frac{1}{2ik} (\Phi_+^* e^{-iKnd} - \Phi_-^* e^{iKnd}) \tilde{A}_0,$$

где $\Phi_+ = 1 - e^{-i(k+K)d}$, $\Phi_- = 1 - e^{-i(k-K)d}$, $\tilde{A}_0 = A_0/2i \sin Kd$.

Справа от решетки при $x > Nd$ решения имеют вид:

а) при $E < U_V$

$$\psi(x) = \bar{A}_{N+1} e^{-\kappa(x-Nd)}, \quad \kappa = \hbar^{-1} \sqrt{2m(U_V - E)};$$

б) при $E > U_V$

$$\psi(x) = A_{N+1} e^{ik_0(x-Nd)} + B_{N+1} e^{-ik_0(x-Nd)}, \quad k_0 = \hbar^{-1} \sqrt{2m(E - U_V)}.$$

Из непрерывности $\psi(x)$ и $\psi'(x)$ при $x = Nd$ следует что:

а) при $E < U_V$ амплитуда \bar{A}_{N+1} выражается через \tilde{A}_0 как

$$\bar{A}_{N+1} = 2iM_{12} \sin KNd \tilde{A}_0,$$

а дискретные уровни энергии E являются решениями спектрального уравнения

$$\operatorname{tg} KNd = \frac{\sin Kd}{\cos Kd - (\kappa M_{12} + M_{22})}; \quad (4)$$

б) при $E > U_V$ амплитуды A_{N+1} , B_{N+1} и \tilde{A}_0 тоже взаимно пропорциональны:

$$\begin{aligned} \tilde{A}_0 &= \frac{1}{\gamma} B_{N+1} = -\frac{1}{\gamma^*} A_{N+1}, \quad A_{N+1} = r B_{N+1}, \\ \gamma &= \frac{1}{k_0} \sin K(N-1)d - \left(\frac{1}{k_0} M_{22} - i M_{12} \right) \sin KNd, \end{aligned} \quad (5)$$

где $r = A_{N+1}/B_{N+1} = -\gamma^*/\gamma$ – амплитуда отражения. В задаче о дифракции (рассеянии) электронов кристаллом заданной считается амплитуда $B_{N+1} = 1/\sqrt{L}$ приходящей справа волны, через которую следует выразить амплитуду отраженной волны A_{N+1} и нормировочную амплитуду \tilde{A}_0 , где L – некая нормировочная длина, связанная с плотностью состояний в непрерывном спектре. В задаче о фотоэмиссии [6–8] мы должны считать заданной амплитуду $A_{N+1} = 1/\sqrt{L}$ уходящей вправо волны, через которую следует выразить амплитуду приходящей волны B_{N+1} и амплитуду \tilde{A}_0 .

2. Нормировка в дискретном спектре

При $E < U_V$ волновые функции дискретного спектра нормируем на единицу:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx &= \sum_{n=1}^N \int_{(n-1)d}^{nd} |\psi(x)|^2 dx + \int_{Nd}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = |\tilde{A}_0|^2 \Sigma = 1. \\ \Sigma &= \frac{2}{k^2} \left(\tilde{C} N - S_N \frac{\sin KNd}{\sin Kd} + \frac{1}{\kappa} \sin^2 kd \sin^2 KNd \right), \\ \tilde{C} &= d(1 - \cos kd \cos Kd) + \frac{\sin kd}{k} (\cos Kd - \cos kd), \\ S_N &= \left[d(\cos Kd - \cos kd) + \frac{\sin kd}{k} (1 - \cos kd \cos Kd) \right] \cos KNd. \end{aligned} \quad (6)$$

3. Матричные элементы

Далее будем говорить о величине $M_{fi} = (mc/e\hbar A_0) \tilde{M}_{fi}$, тогда в нашей одномерной модели $\mathbf{n}\nabla = \partial/\partial x$ и

$$M_{fi} = \int_0^{\infty} \psi_f^*(x) e^{ik'x} \psi_i'(x) dx = \sum_{n=1}^N \int_{(n-1)d}^{nd} \psi_f^* e^{ik'x} \psi_i' dx + \int_{Nd}^{\infty} \psi_f^* e^{ik'x} \psi_i' dx.$$

Начальное состояние ψ_i будем считать принадлежащим дискретному спектру $E_i < U_V$. Конечное состояние ψ_f может принадлежать: а) дискретному спектру

$E_f < U_V$, либо б) непрерывному спектру $E_f > U_V$. Для этих двух случаев получаем следующие выражения:

I) при $E_i < E_f < U_V$,

$$M_{fi} = \frac{1}{\sqrt{\Sigma_f \Sigma_i}} (M_N + M_I), \quad (7)$$

II) при $E_i < U_V < E_f$, в задаче о дифракции электронов

$$M_{fi} = \frac{1}{\sqrt{L \Sigma_i}} \frac{1}{\gamma_f^*} (M_N + M_{II}), \quad (8)$$

а в задаче о фотоэмиссии следует заменить γ_f^* на $-\gamma_f$. Индексы i или f обозначают величину, вычисляемую соответственно при $E = E_i$ или $E = E_f$. Вклад, связанный с областью, занимаемой решеткой,

$$M_N = c_-(k') S_-(k') + c_-^*(-k') S_-^*(-k') + c_+(k') S_+(k') + c_+^*(-k') S_+^*(-k').$$

Коэффициенты $c_-(k')$ и $c_+(k')$ есть интегралы перекрытия волновых функций ψ_i и ψ_f внутри элементарной ячейки, они имеют вид суммы четырех слагаемых, образованных комбинациями множителей $\Phi_{\pm i}$, $\Phi_{\pm f}$, $e^{i(k_i \pm k_f + k')d} - 1$ и $(k_i \pm k_f + k')^{-1}$, а через $S_-(k')$ и $S_+(k')$ обозначены когерентные решеточные суммы

$$S_-(k') = e^{-ik'd} \sum_{n=1}^N e^{i(K_i - K_f + k')nd} = e^{i \left[\frac{1}{2} (K_i - K_f + k')(N+1) - k' \right] d} U_{N-1}(y_-(k')),$$

$$S_+(k') = e^{-ik'd} \sum_{n=1}^N e^{i(K_i + K_f + k')nd} = e^{i \left[\frac{1}{2} (K_i + K_f + k')(N+1) - k' \right] d} U_{N-1}(y_+(k')),$$

в которых аргументы полиномов Чёбышева даются выражениями

$$y_-(k') = \cos \frac{1}{2} (K_i - K_f + k')d, \quad y_+(k') = \cos \frac{1}{2} (K_i + K_f + k')d.$$

В пределах каждой полосы $|y| \leq 1$ в приведенной зоне $0 \leq K \leq \pi/d$ полиномы $U_{N-1}(y)$ имеют $N-1$ нулей $y_m^{(N)} = \cos K_m d$, $K_m = m\pi / Nd$, $m = 1, 2, \dots, N-1$; вблизи порогов $K \approx 0$ или $K \approx \pi/d$ при $N \gg 1$ максимумы $|U_{N-1}(y)|$ приблизительно равны,

$$|U_{N-1}(y)| \sim \begin{cases} N, & |y| = 1, \\ N/\Delta v \approx (1-y^2)^{-1/2}, & |y| \approx 1, |y| < 1, \\ 1, & |y| \ll 1, \end{cases}$$

где $\Delta v \sim m \ll N$ или $\Delta v \sim N - m \ll N$, m — номера максимумов $U_{N-1}(y)$. То есть множители S_- и S_+ (у них $K = 0, 5(K_i \pm K_f + k')$) описывают эффект уве-

личения с ростом N матричных элементов на переходах вблизи тех энергий, когда $|y_-| \approx 1$ или $|y_+| \approx 1$, т.е. для состояний, приближенно удовлетворяющих закону «сохранения» (2) в областях ширины $|K_i \pm K_f + k'| \leq (Nd)^{-1}$ («вертикальный» переход в дипольном приближении $k' \approx 0$).

Величины M_I и M_{II} есть вклады областей вне решетки, которые, как и последнее слагаемое в (7), связаны с туннельным проникновением частицы энергии $E < U_V$ в подбарьерную область $x > Nd$:

$$M_I = -\frac{4\kappa_i}{k_f k_i (\kappa_i + \kappa_f - ik')} \sin k_f d \sin k_i d \sin K_f Nd \sin K_i Nd ,$$

$$M_{II} = \frac{2i\kappa_i}{k_i} \left(\frac{\gamma_f}{\kappa_i + i(k_0 - k')} - \frac{\gamma_f^*}{\kappa_i - i(k_0 + k')} \right) \sin k_i d \sin K_i Nd .$$

Они не растут с N и для состояний, приближенно удовлетворяющих «закону сохранения» (2), малы по сравнению с M_N , их вклад убывает с ростом импульса фотона k' , но при малом k' они могут конкурировать с M_N по величине для переходов, далеких от «вертикальных».

4. Обсуждение основных результатов

Формулы (7) и (8) позволяют оценить влияние разных факторов и произвести численные расчеты. Здесь приведем некоторые результаты в дипольном приближении $k' = 0$ для решетки с периодом $d = 0,3$ нм и $U_V = 40$ эВ. Энергия потолка s -й разрешенной зоны $E_{ts} = (\pi\hbar s)^2 / 2md^2 = 4,18s^2$ эВ: ниже уровня U_V уместаются целиком три зоны с дискретным спектром, при энергиях выше U_V спектр непрерывный. Варьировались число узлов решетки N и мощность δ -барьеров Ω . Пропорционально $N \gg 1$ растут факторы M_N (вблизи вертикальных переходов), $|\gamma_f|$ (5) (в резонансах прозрачности) и Σ_f, Σ_i (6), поэтому для переходов между характерными комбинациями точек, лежащих в окрестности середины, дна и потолка нижней и верхней зон имеют место степенные зависимости $|M_{fi}|^2 \sim N^n$, где n – целое или близкое к целому число. Эти закономерности получаются аналитически путем разложения по малому параметру $\Delta K d \approx \pi \Delta v / N \ll 1$, где ΔK и Δv – расстояния участвующих в переходе состояний в K -пространстве и по номеру состояния от середины или края зоны. При $\Omega / k \gg 1$ имеем приближение сильной связи, при $\Omega / k \ll 1$ – слабой связи, при $\Omega = 0$ (модель «пустой» решетки) и $\Omega = \infty$ задача решается аналитически.

А) Переходы между состояниями ниже вакуумного уровня ($E_i < E_f < U_V$).

Межзонные переходы между зонами с номерами разной четности. На рис. 1 приведен пример рассчитанных по формуле (7) значений матричных элементов для межзонных переходов из середины зоны $s_i = 1$ в половину состояний зоны $s_f = 2$ (матричные элементы переходов через один в другую половину состояний зоны чрезвычайно малы, они почти запрещены по пространственной

симметрии). Строго вертикальный переход $K_f = K_i$ тоже почти запрещен, но в полосе $|K_f - K_i| \approx 1/Nd$ имеется несколько больших значений $|M_{fi}|^2$, которые соответствуют почти «вертикальным» переходам. При изменении Ω матричные элементы изменяются немонотонно. При $\Omega = \infty$ энергетические зоны сжимаются в линии, с уменьшением Ω (ослаблением связи электрона) начиная с некоторого порогового значения Ω эффект «вертикального» перехода ослабляется вплоть до полного исчезновения при $\Omega = 0$. Это связано с появлением минимумов огибающей $|M_{fi}|^2$, которые приближаясь к максимумам огибающей $|M_{fi}|^2$, уничтожают их.

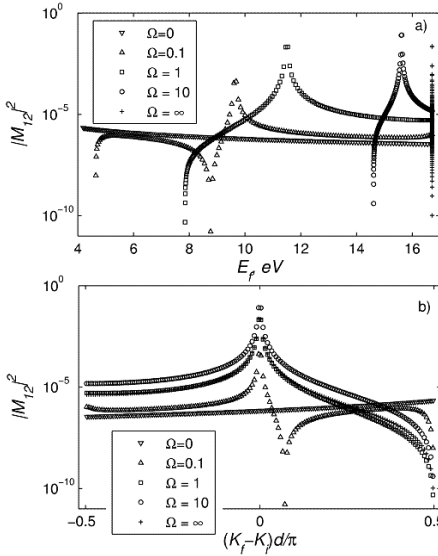


Рис. 1 – Для решетки с $N = 320$, $d = 0,3$ нм, $U_N = 40$ эВ матричные элементы для переходов из состояния $v_i = N/2 = 160$ у середины зоны $s_i = 1$ в состояния зоны $s_f = 2$:

a – $|M_{fi}|^2$ в зависимости от E_f ; б – $|M_{fi}|^2$ в зависимости от $K_f - K_i$. Значения Ω и $|M_{fi}|$ приведены в атомных единицах

Fig. 1 – The matrix elements $|M_{fi}|^2$ for transitions from the state $v_i = N/2 = 160$ near the middle of zone $s_i = 1$ to the states of zone $s_f = 2$ for lattice with $N = 320$, $d = 0,3$ nm, $U_N = 40$ eV:

a – the dependence of $|M_{fi}|^2$ on E_f ; b – the dependence of $|M_{fi}|^2$ on $K_f - K_i$. The values Ω are given in atomic units and values of $|M_{fi}|^2$ – in squared atomic units

Расчеты при $N \gg 1$ выявляют степенную зависимость $|M_{fi}|^2 \sim N^n$, причем для почти вертикальных переходов $n = 0$, для переходов из середины нижней зоны в крайние точки верхней зоны $n = -2$ (так же как из потолка в середину зоны), а для переходов их из дна в середину зоны $n = -4$.

Для межзонных переходов между зонами с номерами одинаковой четности матричные элементы по величине на много порядков меньше (из-за близкой симметрии волновых функций в ячейках), причем они тоже сильно убывают с ростом Ω , а эффект увеличения вблизи «вертикальных» переходов исчезает при приближении к потолку зон. Для внутризонных переходов $|M_{fi}|^2$ не малы и значительно возрастают при $K_f - K_i \rightarrow 0$, причем при малых Ω их максимальные значения близки значениям, характерным для переходов между почти вырожденными зонами, но ростом Ω значения $|M_{fi}|^2$ заметно уменьшаются, т. е. в «пустой» решетке внутризонные матричные элементы самые большие.

Б) Переходы между состоянием ниже вакуумного уровня и состоянием выше вакуумного уровня ($E_i < U_V < E_f$). Для переходов в состояния непрерывного электронного спектра спектр $|M_{fi}|$ непрерывный с $N/2$ узкими минимумами такой же резонансной природы в каждой зоне.

Межзонные переходы между зонами с номерами разной четности. На рис. 2 приведены рассчитанные по формуле (8) с $L=1$ значения $|M_{fi}|^2$ в зависимости от $K_f - K_i$ для межзонных переходов из трех состояний первой

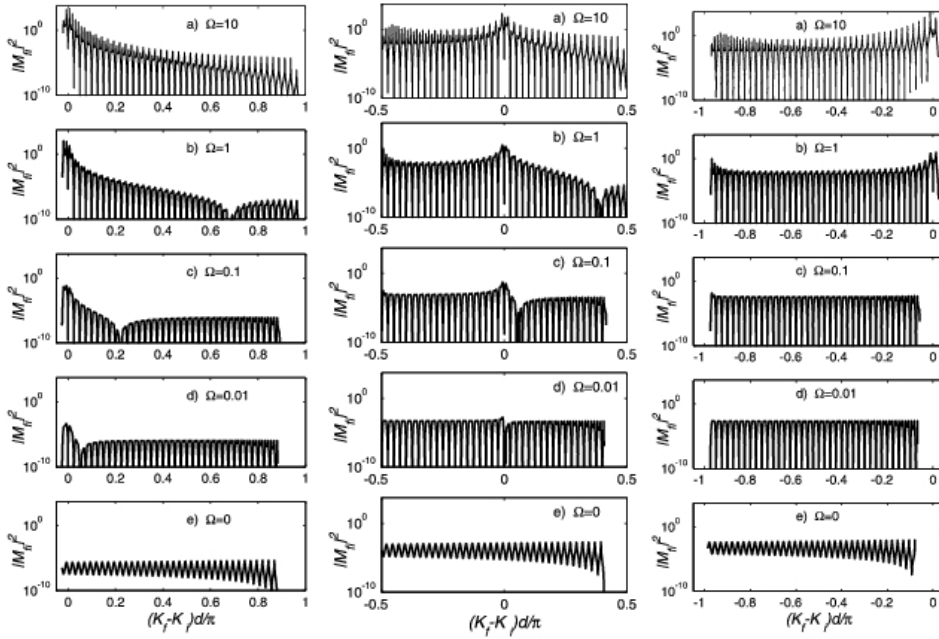


Рис. 2 – Зависимость матричных элементов $|M_{fi}|^2$ от $K_f - K_i$ для переходов из состояния $v_i = 2$ вблизи дна зоны $s_i = 1$ (левый столбец), $v_i = N/2 = 40$ вблизи середины зоны $s_i = 1$ (средний столбец), $v_i = N-1 = 79$ вблизи потолка зоны $s_i = 1$ (правый столбец) в состояния зоны $s_f = 4$ для решетки с $N = 80$, $d = 0,3$ нм, $U_N = 40$ эВ

Fig. 2. – The matrix elements $|M_{fi}|^2$ dependence on $K_f - K_i$ for transitions from state $v_i = 2$ near the bottom of zone $s_i = 1$ (left column), $v_i = N/2 = 40$ near the middle of zone $s_i = 1$ (middle column), $v_i = N-1 = 79$ near the top of zone $s_i = 1$ (right column), to states of zone $s_f = 4$ for lattice with $N = 80$, $d = 0,3$ nm, $U_N = 40$ eV

зоны $s_i = 1$ во все состояния полосы прозрачности $s_f = 4$ решетки. Эти рисунки демонстрируют заметное влияние фактора проникновения в решетку $\gamma_f(K_f)$: с изменением K_f в зоне Бриллюэна он осциллирует в два раза чаще, чем величина M_N и может расщепить максимумы матричного элемента, обеспечивая их увеличение на несколько порядков во всей зоне Бриллюэна при энергиях E_f максимального проникновения падающей волны в решетку. Для почти вертикальных переходов это обеспечивает отличие закономерности возрастания $|M_{fi}|^2$ от размытой δ -функции разности квазиимпульсов, а для сильно невертикальных переходов обеспечивает их конкуренцию с почти вертикальными переходами. Уменьшение параметра связи Ω значительно уменьшает $|M_{fi}|^2$ и

ослабляет эффект «вертикальных» переходов. Для переходов у дна и у середины нижней зоны это происходит за счет сближения максимума и минимума огибающих, а для переходов у потолка нижней зоны – однородным выравниванием по верхней зоне. При $\Omega = 0$ эффект «вертикальных» переходов исчезает.

Для почти вертикальных переходов в середине зоны Бриллюэна матричные элементы растут с ростом N по линейному закону с $n=1$, а для почти вертикальных переходов на ее краях зависимость значительно более крутая: $n=3$ (влияние $\gamma_f(K_f)$). Для невертикальных переходов в середину зоны $|M_{fi}|^2$ убывает с ростом N по степенному закону с $n=-1$ или $n=-3$. Для переходов между зонами с номерами одной четности эти матричные элементы значительно меньше, чем аналогичные матричные элементы переходов из первой зоны $s_i=1$ в ту же полосу прозрачности $s_f=4$ из-за близкой симметрии волновых функций в ячейках зон с номерами одинаковой четности. Однако этот эффект и эффект «вертикальных» переходов заметно слабее, чем при переходах в дискретном спектре.

Заключение

Таким образом, в кристаллах малого размера понятие вертикальности переходов и правила отбора (2) становятся приближенными, их выполнимость уменьшается при ослаблении связи электронов в атомах кристалла. Матричные элементы $|M_{fi}|^2$ могут быть достаточно велики для целой группы переходов вблизи условий (2). Для переходов между зонами ниже вакуумного уровня они не растут с длиной решетки, а для переходов из зон ниже вакуумного уровня в зоны выше этого уровня они растут с длиной решетки. В последнем случае важную роль играет амплитуда проникновения в решетку внешней электронной волны, а матричные элементы растут с длиной решетки сильнее, чем предполагает закон размытой δ -функции разности квазиимпульсов. Для переходов в середине и у порогов зон зависимость матричных элементов от длины решетки разная.

ЛИТЕРАТУРА

1. Phillips J.C. The fundamental optical spectra of solids // Solid State Physics. – 1966. – Vol. 18. – P. 55–164. – doi: 10.1016/S0081-1947(08)60348-3.
2. Fan H.Y. Photon-electron interaction, crystals without fields // Light and Matter Ia / ed. L. Genzel. – Berlin: Springer-Verlag, 1967. – P. 157–233. – (Encyclopedia of physics / ed. S. Flugge; vol. 25/2a).
3. Bassani F., Pastori-Parravicini G. Electronic states and optical transitions in solids. – New York: Pergamon Press, 1975. – 300 p.
4. Fox M. Optical properties of solids. – Oxford: Oxford University Press, 2001.
5. Dressel M., Gruner G. Electrodynamics of solids: optical properties of electrons in matter. – Cambridge: Cambridge University Press, 2003.
6. Hufner S. Photoelectron spectroscopy: principles and applications. – New York: Springer-Verlag, 2010.
7. Solid-state photoemission and related methods: theory and experiment / ed. by W. Schattke, M.A. Van Hove. – Weinheim: Wiley-VCH, 2003. – 515 p.
8. Набутовский В.М., Пейсахович Ю.Г. Особенности в энергетическом распределении фотоэлектронов // ЖЭТФ. – 1976. – Т. 70, вып. 3. – С. 1081–1091.
9. Corliss C.H., Bozman W.R. Experimental transition probabilities for spectral lines of seventy elements. – Washington, D.C.: National Bureau of Standards, 1962. – (NBS monograph; 53).

10. **Peisakhovich Yu.G.** The recurrent algorithm of the rigorous solving 1-dimensional wave equations in multilayered media // *Journal of Physics A: Mathematical and General*. – 1996. – Vol. 29, N 16. – P. 5103–5123.
11. **Пейсахович Ю.Г., Штыгашев А.А.** Одномерная квантовая механика. – Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2007. – 476 с.

**MATRIX ELEMENTS OF THE ELECTRON-PHOTON INTERACTION
HAMILTONIAN IN THE ONE-DIMENSIONAL MODEL
OF THE NANOCRYSTAL FORMED
BY N IDENTICAL DELTA-BARRIERS**

Peisakhovich Yu.G., Shtygashev A.A.

Novosibirsk State Technical University, Novosibirsk, Russian Federation

Matrix elements of the Hamiltonian of electron-photon interaction between the states of the electron quasi-discrete zone spectrum are included in the expressions which describe frequency dispersion of electromagnetic susceptibilities, permeabilities and conductivities of crystals while matrix elements between the states of the quasi-discrete and continuous spectrum are included in the expressions describing probability and photoemission current or inelastic electron and neutron diffraction on crystals. These values greatly depend on crystal sizes and the electron binding force in the lattice atom. Rigorous analytical expressions of matrix elements of the Hamiltonian for the electron-photon interaction in a finite periodic lattice of N identical δ -barriers are deduced in the paper. The transfer matrix method allows us to introduce the concept of quasi-momentum strictly but the nanocrystal reciprocal space becomes essentially inhomogeneous, i.e. stationary and different not equidistant points of this space in the main Brillouin zone correspond to the stationary resonance states in different allowed zones. The model provides a sufficiently simple energy zone spectrum and analytical expressions for the matrix elements which permit making qualitative and numerical analyses in different important limiting cases, in particular, it allows us to realize high-speed computations for very large N . The contributions of the regions inside and outside a small crystal are revealed and compared. Numerical calculations of matrix elements are implemented in the dipole approximation for transitions between two stationary states below the vacuum level and between the state below this level and the state above it. We get significantly different dependencies of matrix elements on the lattice length, on the electron binding force in unit cells, and on the vacuum level in these cases for transitions between different points of the Brillouin zone. We demonstrate the formation of the "vertical transition" selection rule with an increase in the lattice length and in the electron binding force.

Keywords: transition probability amplitude; oscillator strength; finite length delta barrier lattice; Chebyshev second type polynomial; photoemission.

DOI: 10.17212/1727-2769-2015-4-7-18

REFERENCES

1. Phillips J.C. The fundamental optical spectra of solids. *Solid State Physics*, 1966, vol. 18, pp. 55–164. doi: 10.1016/S0081-1947(08)60348-3
2. Fan H.Y. Photon-electron interaction, crystals without fields. *Light and Matter Ia*. Ed. L. Genzel. Berlin, Springer-Verlag, 1967, pp. 157–233.
3. Bassani F., Pastori-Parravicini G. *Electronic states and optical transitions in solids*. New York, Pergamon Press, 1975. 300 p.
4. Fox M. *Optical properties of solids*. Oxford, Oxford University Press, 2001.
5. Dressel M., Gruner G. *Electrodynamics of solids: optical properties of electrons in matter*. Cambridge, Cambridge University Press, 2003.
6. Huffner S. *Photoelectron spectroscopy: principles and applications*. New York, Springer-Verlag, 2010.
7. Schattke W., Van Hove M.A., eds. *Solid-state photoemission and related methods: theory and experiment*. Weinheim, Wiley-VCH, 2003. 515 p.

8. Nabutovskii V.M., Peisakhovich Yu.G. Singularities in the energy distribution of photoelectrons. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 1976, vol. 43, no. 3, pp. 564–569. Translated from *Zhurnal eksperimental'noi i teoreticheskoi fiziki*, 1976, vol. 70, no. 3, pp. 1081–1091.
9. Corliss C.H., Bozman W.R. *Experimental transition probabilities for spectral lines of seventy elements*. NBS monograph. Vol. 53. Washington, D.C., National Bureau of Standards, 1962.
10. Peisakhovich Yu.G. The recurrent algorithm of the rigorous solving 1-dimensional wave equations in multilayered media. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 1996, vol. 29, no. 16, pp. 5103–5123.
11. Peisakhovich Yu.G., Shtygashev A.A. *Odnomernaya kvantovaya mekhanika* [One-dimensional quantum mechanics]. Novosibirsk, NSTU Publ., 2007. 476 p.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ



Пейсахович Юрий Григорьевич – родился в 1947 году, д-р физ.-мат. наук, доцент, профессор кафедры общей физики Новосибирского государственного технического университета. Область научных интересов: физика конденсированного состояния вещества. Опубликовано 72 научные работы. (Адрес: 630073, Россия, Новосибирск, пр. Карла Маркса, 20. Email: peisakhovich@corp.nstu.ru).

Peisakhovich Yuri Grigorievich (b. 1947) – Doctor of Science (Phys.&Math.), Associate Professor, Professor at the Department of General Physics in the Novosibirsk State Technical University. His research interests are currently focused on physics of condensed matter. He is author of 72 scientific papers. (Address: 20, Karl Marx Av., Novosibirsk, 630073, Russian Federation. Email: peisakhovich@corp.nstu.ru).



Штыгашев Александр Анатольевич – родился в 1956 году, д-р физ.-мат. наук, доцент, профессор кафедры общей физики Новосибирского государственного технического университета. Область научных интересов: математическое моделирование распространения волн в пространственно-неоднородных средах, квантовые процессы в структурах пониженной размерности. Опубликовано 55 научных работ. (Адрес: 630073, Россия, Новосибирск, пр. Карла Маркса, 20. Email: shtygashev@corp.nstu.ru).

Shtygashev Alexander Anatolievich (b. 1956) – Doctor of Science (Phys.&Math.), Associate Professor, Professor at the Department of General Physics in the Novosibirsk State Technical University. His research interests are currently focused on mathematical modeling of wave propagation in spatially inhomogeneous media, physics, quantum physics of low-dimensional structures. He is author of 55 scientific papers. (Address: 20, Karl Marx Av., Novosibirsk, 630073, Russian Federation. Email: shtygashev@corp.nstu.ru).

Статья поступила 05 октября 2015 г.

Received October 05, 2015

To Reference:

Peisakhovich Yu.G., Shtygashev A.A. Matrichnye elementy Gamil'toniana elektron-fotonnogo vzaimodeistviya v 1-mernoi modeli nanokristalla, obrazovannogo N odinakovymi del'ta-bar'erami [Matrix elements of the electron-photon interaction Hamiltonian in the one-dimensional model of the nanocrystal formed by N identical delta-barriers]. *Doklady Akademii nauk vysshei shkoly Rossiiskoi Federatsii – Proceedings of the Russian higher school Academy of sciences*, 2015, no. 4 (29), pp. 7–18. doi: