

# ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР И ВРЕМЯ ЖИЗНИ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА В ОТКРЫТЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧКАХ В ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

Г. Г. Зегря\*, Д. М. Самосват\*\*

Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук  
194021, Санкт-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 5 ноября 2008 г.

В рамках формализма  $S$ -матрицы рассеяния выполнен аналитический расчет спектра квазистационарных состояний носителей заряда в открытой квантовой точке. Получены аналитические выражения для поправки второго порядка теории возмущений к энергии и полуширине квазистационарного уровня электрона. Выполнен численный расчет сдвигов уровней энергии электрона для открытой квантовой точки в присутствии внешнего электрического поля. В рамках эффекта Штарка исследовано поведение поправок к полуширине уровня в зависимости от энергии уровня и толщины барьерного слоя. Показано, что существует критическое положение уровня энергии  $E_{cr}$ , при котором поправка к полуширине  $\delta\Gamma$  меняет знак. В квазиклассическом приближении для открытых квантовых ям найдены аналитические выражения для поправки второго порядка к энергии в присутствии внешнего электрического поля. Показано, что в этом случае поправка к полуширине  $\delta\Gamma$  также меняет свой знак при переходе через критическую энергию  $E_{cr}$ . В качестве примера выполнен расчет сдвигов уровней энергии открытой квантовой точки в присутствии электрического поля модельной белковой молекулы, находящейся вблизи квантовой точки.

PACS: 87.15.A-, 87.50.C-, 73.63.-b, 73.63.Kv

## 1. ВВЕДЕНИЕ

За последние 15 лет полупроводниковые квантовые точки эффективно используются в опто- и наноэлектронике [1]. Современные технологии позволяют изготавливать разные виды квантовых точек как изолированных [2] (такие квантовые точки носят название открытых из-за возможности электрону протуннелировать сквозь барьер в свободное пространство), так и в полупроводниковой матрице другого материала. Изолированные полупроводниковые квантовые точки (открытые квантовые точки), как показано в ряде экспериментальных работ [3–5], находят более эффективное применение в биологии и медицине. В первую очередь, открытые квантовые точки используются для получения изображения и идентификации живых клеток в естественных условиях.

Показано [3, 4], что открытые квантовые точки обладают более высоким квантовым выходом из-

лучения, чем флуоресцентные хромофоры, оптической активностью в длинноволновой области спектра и значительно большей фотохимической стабильностью. Таким образом, указанные спектральные свойства открытых квантовых точек являются весьма перспективными для исследований в биологии и медицине. В работе [6] был предложен новый метод диагностики аминокислот с помощью квантовых точек. Речь идет о влиянии взаимодействия аминокислот с квантовыми точками на энергетический спектр квантовых точек. Такое взаимодействие влияет на спектр излучательной рекомбинации электронов и дырок, локализованных в квантовой точке. Биологические объекты по-разному влияют на энергетический спектр электронов и дырок в квантовых точках в силу различного распределения поля вокруг них.

В настоящей работе речь пойдет только о сдвигах уровней энергии электрона вследствие воздействия внешнего электрического поля на открытые квантовые точки. Туннелированием электрона между

\*E-mail: zegrya@theory.ioffe.ru

\*\*E-mail: samosvat@yandex.ru

открытыми квантовыми точками и биологическим объектом мы будем пренебрегать. Следовательно, по изменению спектра излучательной рекомбинации открытых квантовых точек можно идентифицировать биологический объект.

Открытые квантовые точки — наноразмерные объекты, покрытые тонким слоем другого материала. Спектр электронов и дырок в них существенно зависит от таких параметров как радиус  $r_0$  и толщина покрывающего слоя  $\Delta$ . Поскольку носители заряда могут протуннелировать сквозь барьер конечной ширины  $\Delta$ , их время жизни во внутренней области квантовых точек конечно и состояния квазистационарны; время жизни электрона зависит от  $r_0$  и  $\Delta$ .

В настоящей работе спектр электронных состояний в открытых квантовых точках сферической формы вычисляется в рамках формализма  $S$ -матрицы рассеяния. Мы получим аналитическое выражение для полуширины уровня энергии электрона при всех значениях углового момента  $l$ . В случае  $l = 0$  данное выражение совпадает с известным выражением для полуширины уровня [7, 8]. Отметим, что аналитическое выражение для полуширины уровня энергии для открытых квантовых точек для случая  $l \neq 0$  ранее не рассматривалось. Трудность при решении задачи о поведении квазистационарных состояний в электрическом поле состоит в том, что теория возмущений для квазистационарных уровней недостаточно развита. Данная теория рассматривалась в работах [9–11]. В работе Зельдовича [10] получен результат только для первого порядка теории возмущений по потенциалу. Однако этим методом нельзя получить формулы теории возмущений для поправок к энергии выше первой. В работе [10] для получения поправок используется уравнение для логарифмической производной волновой функции. В этом случае такой метод допускает использование только одного уравнения. Однако для получения второй поправки к энергии необходимо использовать два уравнения для различных значений энергии.

В настоящей работе будут получены аналитические выражения для поправки второго порядка теории возмущений. Мы пользуемся аналогией между квазистационарными и стационарными состояниями. Квазистационарные состояния аналогичны стационарным при рассмотрении структуры волновых функций и матричных элементов переходов между уровнями. Эта аналогия не касается уровней энергии квазистационарного состояния, имеющего конечную полуширину. Аналогия с матричными элементами позволяет получить поправки второго и

высших порядков теории возмущений для энергии квазистационарных состояний по аналогии со стационарными. Насколько нам известно, такой подход ранее не рассматривался.

Квазиклассический подход [9, 12] позволяет получать аналитические выражения для поправок к положению и полуширине квазистационарного уровня для открытой квантовой ямы (ОКЯ). В этом случае используется модифицированное правило квантования Бора–Зоммерфельда для случая открытых систем [12]. Волновая функция внутри системы сшивается с расходящейся волной снаружи. В настоящей работе будет получено аналитическое выражение для сдвига квазистационарного уровня в открытой квантовой яме во втором порядке теории возмущений. Для его получения используется варьирование модифицированного правила квантования Бора–Зоммерфельда. Результаты для квантовых ям переносятся на случай квантовых точек. Также будет проведено сравнение результатов для случая открытой квантовой ямы с точным расчетом для открытых квантовых точек. Будет показано, что качественный анализ поведения сдвигов квазистационарных уровней в квантовых точках находится в согласии со случаем открытых квантовых ям.

## 2. ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР И ВОЛНОВЫЕ ФУНКЦИИ ЭЛЕКТРОНОВ В ОТКРЫТЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧКАХ

Рассмотрим сферическую квантовую точку, покрытую тонким слоем другого материала (рис. 1). Волновые функции электронов и дырок подчиняются уравнению Шредингера. В силу сферической симметрии задачи оно допускает разделение переменных:  $\psi_l(\mathbf{r}) = R_l(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$ . Для радиальной части волновой функции уравнение Шредингера принимает вид

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} R + k^2 R = 0$$

в области 1, 3 (см. рис. 1),

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} R - \kappa^2 R = 0$$

в области 2,

(1)

где  $k = (2m_0E)^{1/2}/\hbar$  и  $\kappa = (2m_1(U_0 - E))^{1/2}/\hbar$ . Здесь  $U_0$  — высота барьера. Решение уравнений (1) известно и представляет собой сферические функции Бесселя. В областях 1, 3 (рис. 1) это функции первого рода  $R \propto j_l(kr)$ . В области 2 (рис. 1) это

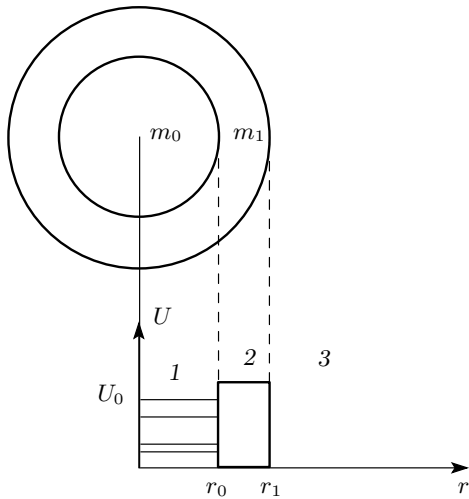


Рис. 1. Схематическое изображение открытой квантовой точки и вид потенциальной энергии электрона как функции радиуса

функции второго рода  $R \propto i_l(kr)$  и  $R \propto k_l(kr)$ , связанные с функциями Ханкеля первого и второго вида ( $h_l^{(1)}(ix)$  и  $h_l^{(2)}(ix)$ ) мнимого аргумента. Сферические функции связаны с цилиндрическими следующими соотношениями:

$$f_l(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} F_{l+1/2}(x), \quad (2)$$

где  $f$  — любая сферическая функция, а  $F$  — соответствующая ей цилиндрическая.

Поскольку существует отличная от нуля вероятность носителей заряда протуннелировать через барьер, уровни энергии в открытой квантовой точке не являются стационарными и имеют конечную ширину. Таким образом, данную задачу следует решать в рамках формализма  $S$ -матрицы рассеяния. В рамках данного формализма процесс рассеяния описывается амплитудой рассеяния ( $S$ -матрицей). Согласно общей теории рассеяния [7],  $S$ -матрица строится следующим образом. Снаружи (на бесконечности) от рассеивающей системы имеются две сферические волны: налетающая  $R(r) \propto h_l^{(2)}(kr)$  и рассеянная  $R(r) \propto h_l^{(1)}(kr)$ . Амплитуда рассеянной волны ( $S_l$ ) имеет полюс в точке резонанса, который соответствует энергетическому спектру состояний.

В случае квазистационарных состояний  $S$ -матрица имеет полюс при комплексных значениях энергии в нижней полуплоскости:  $E = E_r - i\Gamma$ , где  $E_r$  — положение резонанса, а  $\Gamma$  — его полуширина, соответствующая времени жизни электрона в этом состоянии. При рассмотрении спектра носителей заряда

в открытой квантовой точке будем частично следовать работе [8]. Однако, в отличие от [8], получим аналитическое выражение для спектра (т. е. уровней энергии и их полуширин) при произвольном квантовом числе  $l$  (где  $l$  — угловой момент).

Ниже будем рассматривать случай простых энергетических зон с квадратичным законом дисперсии. Отметим, что поскольку в задаче речь идет о небольших импульсах и энергиях электронов, влияние непараболичности спектра несущественно и им можно пренебречь.

Для решения задачи необходимо написать граничные условия для волновых функций носителей заряда. Граничные условия для волновых функций электронов имеют вид:

$$\begin{aligned} R^< &= R^>, \\ \frac{1}{m^<} \frac{dR^<}{dr} &= \frac{1}{m^>} \frac{dR^>}{dr}. \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь индексы «<» и «>» означают величины, взятые с одной и другой стороны границы. Используя граничные условия (3), получим следующую систему уравнений [8]:

$$\begin{aligned} A_1 \left( h_l^{(1)}(kr_0) + h_l^{(2)}(kr_0) \right) &= \\ &= A_2 h_l^{(1)}(ikr_0) + A_3 h_l^{(2)}(ikr_0), \\ A_1 \frac{1}{m_0} \frac{d}{dr} \left( h_l^{(1)}(kr) + h_l^{(2)}(kr) \right) \Big|_{r=r_0} &= \\ = \frac{1}{m_1} \frac{d}{dr} \left( A_2 h_l^{(1)}(ikr) + A_3 h_l^{(2)}(ikr) \right) \Big|_{r=r_0}, & \quad (4) \\ A_2 h_l^{(1)}(ikr_1) + A_3 h_l^{(2)}(ikr_1) &= \\ = h_l^{(2)}(kr_1) - S_l h_l^{(1)}(kr_1), \\ \frac{1}{m_1} \frac{d}{dr} \left( A_2 h_l^{(1)}(ikr) + A_3 h_l^{(2)}(ikr) \right) \Big|_{r=r_1} &= \\ = \frac{1}{m_1} \frac{d}{dr} \left( h_l^{(2)}(kr) - S_l h_l^{(1)}(kr) \right) \Big|_{r=r_1}. \end{aligned}$$

Здесь радиальная часть волновой функции во внешнем пространстве ( $r > r_1$ ) имеет вид сходящейся волны  $h_l^{(2)}(kr)$  и расходящейся  $h_l^{(1)}(kr)$  с амплитудой  $S_l$ . Нормировку можно выбрать произвольно (например на  $\delta$ -функцию). Решение системы уравнений (4) приводит к следующему результату для  $S$ -матрицы:

$$S_l = \frac{\hat{A} h_l^{(2)}(kr)}{\hat{A} h_l^{(1)}(kr)}, \quad (5)$$

где

$$\hat{A} = \left[ \left( \frac{d}{dr} \Big|_{r=r_1} (h_l^{(1)}(i\kappa r)) \frac{d}{dr} \Big|_{r=r_0} (h_l^{(2)}(i\kappa r)) - \frac{d}{dr} \Big|_{r=r_1} (h_l^{(2)}(i\kappa r)) \frac{d}{dr} \Big|_{r=r_0} (h_l^{(1)}(i\kappa r)) \right) \times \right. \\ \times \left( h_l^{(1)}(\kappa r_0) + h_l^{(2)}(\kappa r_0) \right) m_0^2 - \\ - \left( h_l^{(1)}(\kappa r_0) + h_l^{(2)}(\kappa r_0) \right) \times \\ \times \left( h_l^{(1)}(i\kappa r_1) \frac{d}{dr} \Big|_{r=r_0} (h_l^{(2)}(i\kappa r)) - \right. \\ \left. - (h_l^{(2)}(i\kappa r_1) \frac{d}{dr} \Big|_{r=r_0} (h_l^{(1)}(i\kappa r)) \right) \frac{d}{dr} \Big|_{r=r_1} - \\ - \frac{d}{dr} \Big|_{r=r_0} \left( h_l^{(1)}(\kappa r) + h_l^{(2)}(\kappa r) \right) \times \\ \times \left( \frac{d}{dr} \Big|_{r=r_1} (h_l^{(2)}(i\kappa r)) (h_l^{(1)}(i\kappa r_0)) - \right. \\ \left. - \frac{d}{dr} \Big|_{r=r_1} (h_l^{(1)}(i\kappa r)) (h_l^{(2)}(i\kappa r_0)) \right) m_0 m_1 + \\ + \frac{d}{dr} \Big|_{r=r_0} \left( h_l^{(1)}(\kappa r) + h_l^{(2)}(\kappa r) \right) \times \\ \times \left( h_l^{(1)}(i\kappa r_1) h_l^{(2)}(i\kappa r_0) - h_l^{(2)}(i\kappa r_1) h_l^{(1)}(i\kappa r_0) \right) \times \\ \left. \times m_1^2 \frac{d}{dr} \Big|_{r=r_1} \right]. \quad (6)$$

Далее, можно вычислить энергетический спектр квазистационарных состояний; для этого ищем положение полюса элементов матрицы рассеяния  $S_l$ . Условие квазистационарности выполняется в случае, когда полуширина уровня мала ( $\Gamma \ll E_r$ ). В этом случае выполнено также условие  $\kappa\Delta \gg 1$ . Это означает, что вероятность частице протуннелировать сквозь барьер мала. Тогда выполнено и условие  $\kappa r_1 \gg 1$ . В этом случае можно использовать асимптотические выражения для сферических функций Ханкеля первого и второго вида для получения аналитического выражения для энергии. Эти функции имеют следующий вид:

$$h_l^{(1)}(x) \sim \frac{1}{x} (-i)^{l+1} \exp(ix), \\ h_l^{(2)}(x) \sim \frac{1}{x} i^{l+1} \exp(-ix). \quad (7)$$

Здесь функции Ханкеля  $h_l^{(1)}(\kappa r)$  и  $h_l^{(2)}(\kappa r)$  — расходящиеся и сходящиеся сферические волны.

Найдем полюс  $S_l$  и покажем, что в пределе  $r_1 \rightarrow \infty$  полюс матрицы рассеяния  $S_l$  дает в результате дисперсионное соотношение для истинного стационарного состояния в квантовой точке, что соответствует случаю обычных (закрытых) квантовых точек. В данном предельном случае ( $\Delta \rightarrow \infty$ ) выпишем выражение для полюса матрицы рассеяния  $S_l$

(для удобства пишем только знаменатель). Мы отбрасываем все члены, которые при таком предельном переходе обращаются в нуль. Имеем:

$$\frac{\hat{A} h_l^{(1)}(\kappa r)}{h_l^{(2)}(i\kappa r)} \approx \frac{1}{h_l^{(2)}(i\kappa r)} \times \\ \times \left[ \left( -\frac{d}{dr} \Big|_{r=r_0} h_l^{(1)}(i\kappa r) \kappa j_l(\kappa r_0) 2m_0^2 - \right. \right. \\ \left. - \left( 2j_l(\kappa r_0) \left( -\frac{d}{dr} \Big|_{r=r_0} h_l^{(1)}(i\kappa r) \right) \frac{d}{dr} \Big|_{r=r_1} - \right. \right. \\ \left. - 2 \frac{dj_l(\kappa r)}{dr} \Big|_{r=r_0} \left( \frac{dh_l^{(2)}(i\kappa r)}{dr} \Big|_{r=r_1} \right) \right) m_0 m_1 + \\ \left. + 2 \frac{dj_l(\kappa r)}{dr} \Big|_{r=r_0} \left( -h_l^{(1)}(i\kappa r_0) \right) \times \right. \\ \left. \times m_1^2 \frac{d}{dr} \Big|_{r=r_1} \right] h_l^{(1)}(\kappa r). \quad (8)$$

Выражение (8) можно упростить в результате чего получим

$$j_l(\kappa r_0) \left( \frac{d}{dr} \Big|_{r=r_0} (h_l^{(1)}(i\kappa r)) (-\kappa m_0^2 + i\kappa m_0 m_1) \right) + \\ + \frac{dj_l(\kappa r)}{dr} \Big|_{r=r_0} \left( h_l^{(1)}(i\kappa r_0) (\kappa m_0 m_1 - i\kappa m_1^2) \right) = 0. \quad (9)$$

Отсюда в итоге получаем дисперсионное соотношение для закрытых квантовых точек:

$$\frac{1}{m_1} \frac{d}{dr} \Big|_{r=r_0} (k_l(\kappa r)) = \\ = \frac{1}{m_0} k_l(\kappa r_0) \frac{d}{dr} \Big|_{r=r_0} (j_l(\kappa r)). \quad (10)$$

Теперь рассмотрим случай конечной толщины барьера и найдем полуширину резонансного уровня. Поскольку выполняется условие квазистационарности ( $\Gamma \ll E$ ), можно разложить в ряд выражение для полюса  $S$ -матрицы (5) ( $\hat{A} h_l^{(1)}(\kappa r_1) = 0$ ) вокруг энергии для стационарного состояния  $E_{nl}$ .

### 2.1. Аналитическое выражение для энергии и ширины квазистационарного уровня электрона для произвольного углового момента $l$

Для дальнейшего рассмотрения будем считать эффективные массы в областях (1) и (2) равными:  $m_0 = m_1 = m$ . Распишем теперь выражение для полюса:

$$\begin{aligned} \hat{A}h_l(1)(kr_1) \left[ \left( -\kappa h_l^{(1)}(i\kappa r_1) \frac{d}{dr} \Big|_{r=r_0} h_l^{(2)}(i\kappa r) - \right. \right. \\ \left. \left. - \kappa h_l^{(2)}(i\kappa r_1) \frac{d}{dr} \Big|_{r=r_0} h_l^{(1)}(i\kappa r) \right) j_l(kr_0) h_l^{(1)}(kr_1) - \right. \\ \left. - j_l(kr_0) \left( h_l^{(1)}(i\kappa r_1) \frac{d}{dr} \Big|_{r=r_0} h_l^{(2)}(i\kappa r) - \right. \right. \\ \left. \left. - h_l^{(2)}(i\kappa r_1) \frac{d}{dr} \Big|_{r=r_0} h_l^{(1)}(i\kappa r) \right) \frac{dh_l^{(1)}(kr)}{dr} \Big|_{r=r_1} + \right. \\ \left. + \frac{dj_l(kr)}{dr} \Big|_{r=r_0} \left( \kappa h_l^{(1)}(i\kappa r_0) h_l^{(2)}(i\kappa r_1) + \right. \right. \\ \left. \left. + \kappa h_l^{(2)}(i\kappa r_0) h_l^{(1)}(i\kappa r_1) \right) + \frac{dj_l(kr)}{dr} \Big|_{r=r_0} \times \right. \\ \left. \times \left( h_l^{(1)}(i\kappa r_1) h_l^{(2)}(i\kappa r_0) - h_l^{(2)}(i\kappa r_1) h_l^{(1)}(i\kappa r_0) \right) \times \right. \\ \left. \times \frac{dh_l^{(1)}(kr)}{dr} \Big|_{r=r_1} \right]. \quad (11) \end{aligned}$$

В это выражение входит конструкция следующего вида:

$$F = j_l(kr_0) \frac{d}{dr} \Big|_{r=r_0} (k_l(\kappa r)) - k_l(\kappa r_0) \frac{d}{dr} \Big|_{r=r_0} (j_l(kr)). \quad (12)$$

Данная конструкция связана с дисперсионным соотношением для закрытых квантовых точек таким образом, что когда точно выполнено условие  $k = k_{nl}$ , то  $F = 0$ . Здесь  $k_{nl}$  определяется как соответствующий корень дисперсионного уравнения для закрытых квантовых точек. Это позволяет для случая квазистационарных состояний разложить выражение (11) в ряд по степеням  $(k - k_{nl})$ . Тогда в результате получим следующее разложение:

$$F = G(k - k_{nl}), \quad (13)$$

где

$$G = \frac{\kappa_0^2 r_0}{\kappa} k_{l+1}(\kappa r_0) j_{l-1}(kr_0). \quad (14)$$

Здесь  $\kappa_0 = (2mU_0/\hbar^2)^{1/2}$ ;  $j_l(x)$ ,  $k_l(x)$  — сферические функции Бесселя. С учетом формул (11) и (14) получаем окончательное выражение для комплексного волнового вектора в точке полюса:

$$k = k_{nl} + \frac{2}{G\pi} \exp(-2\kappa r_1) \frac{\kappa + ik}{\kappa - ik} \times \left( i_l(\kappa r_0) \frac{d}{dr} \Big|_{r=r_0} j_l(kr) - j_l(kr_0) \frac{d}{dr} \Big|_{r=r_0} i_l(\kappa r) \right). \quad (15)$$

Переходим от волновых векторов к энергиям ( $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ ). Получаем

$$\begin{aligned} E_r \approx E_{nl}, \\ \Gamma_{nl} = G^{-1} \exp(-2\kappa r_1) \frac{16\kappa}{\pi\kappa_0^2} \times \\ \times \left( i_l(\kappa r_0) \frac{d}{dr} \Big|_{r=r_0} j_l(kr) - \right. \\ \left. - j_l(kr_0) \frac{d}{dr} \Big|_{r=r_0} i_l(\kappa r) \right) E_{nl}. \quad (16) \end{aligned}$$

Здесь  $E_{nl}$  — положение уровня энергии в закрытых квантовых точках. В случае открытых квантовых точек вещественная часть энергии почти не изменится, поскольку  $\Gamma \ll E_r$ , что соответствует условию квазистационарности уровня.

Теперь проанализируем полученный результат. Видно, что полуширина уровня резко зависит от толщины барьера, поскольку время жизни в квазистационарном состоянии связано с вероятностью туннелирования через барьер. Далее, полуширина уровня пропорциональна энергии уровня размерного квантования. Если рассматривать полуширину квазиклассически, то понятно, что чем выше скорость движения частицы в открытой квантовой точке (которая связана с  $E_{nl}$ ), тем раньше частица протуннелирует через барьер. Известный частный случай формулы (16) — это случай  $l = 0$  [7, 8]. В этом случае, используя явные выражения для сферических функций Бесселя при  $l = 0$ , вместо формулы (16) получим

$$G = \left( \frac{\kappa_0^2 r_0}{\kappa} \frac{\exp(-\kappa r_0)}{(\kappa r_0)^2} (1 + \kappa r_0) \frac{\cos(kr_0)}{kr_0} - 2\kappa r_0 \sin(kr_0) \frac{\exp(-\kappa r_0)}{\kappa r_0} \right) \frac{\pi}{2}, \quad (17)$$

$$\begin{aligned} \Gamma_{nl} = G^{-1} \exp(-2\kappa r_1) \frac{16\kappa}{\pi\kappa_0^2} \times \\ \times \left( \frac{\exp(\kappa r_0)}{\kappa r_0} \frac{kr_0 \cos(kr_0) - \sin(kr_0)}{(kr_0)^2} k - \right. \\ \left. - \kappa \frac{\exp(\kappa r_0)(\kappa r_0 - 1)}{(\kappa r_0)^2} \frac{\sin(kr_0)}{kr_0} \right) E_{nl}, \quad (18) \end{aligned}$$

$$E_r \approx E_{nl}. \quad (19)$$

Подставляя выражение (17) в (18) и упрощая, получаем окончательное выражение для  $\Gamma_n$ :

$$\Gamma_n = 16E_n \exp(-2\kappa\Delta) \frac{k\kappa^3}{\kappa_0^4(1 + \kappa r_0)}. \quad (20)$$

Полученное выражение для ширины квазистационарного уровня полностью совпадает с известным из [7, 8].

### 3. ЭФФЕКТ ШТАРКА В ОТКРЫТЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧКАХ

Теперь перейдем к рассмотрению эффекта Штарка в открытых квантовых точках. Для обычных (закрытых) квантовых точек этот эффект изучен достаточно хорошо [13, 14]. Задача о модификации спектра носителей заряда в открытых квантовых точках в электрическом поле является на настоящее время не решенной. Решение такой задачи представляет некоторые трудности в связи с недостаточной развитостью теории возмущений для квазистационарных состояний. В связи с экспоненциальным ростом гамовской волновой функции (данная функция регулярна в нуле и соответствует условию излучения на бесконечности) для квазистационарных состояний возникает проблема расходящихся интегралов на бесконечности. Такая функция регулярна в нуле, а на бесконечности имеет экспоненциальный рост в силу комплексности волнового вектора. В первом порядке теории возмущений эта расходимость устраняется регуляризацией на  $\exp(-\alpha r^2)$  и введением нормировки [7]:

$$E^{(1)} = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{\int_0^\infty \xi_{k_0}^2 V \exp(-\alpha r^2) dr}{\int_0^\infty \xi_{k_0}^2 \exp(-\alpha r^2) dr}. \quad (21)$$

В работе [10] рассматривается обобщение на трехмерный случай выражения (21) для поправки первого порядка к энергии. Следующие поправки те-

ории возмущений для энергии квазистационарных состояний не рассматривались. Ясно, что структура формул ряда теории возмущений для поправок к энергии квазистационарных состояний должна оставаться одинаковой. В таких формулах также должна присутствовать регуляризация интегралов на  $\exp(-\alpha r^2)$  и нормировка как в (21). В Приложении к работе [11] рассматривается глубокая аналогия между квазистационарными и стационарными состояниями. Поэтому вполне естественно сопоставить с формулой для обычной теории возмущений формулу для теории возмущений квазистационарных уровней (с сохранением общей структуры). Оказывается, что по сравнению с обычной теорией возмущений в матричных элементах появляется отличие — вводится эффективная нормировка для квазистационарных состояний, а также модифицируется интеграл от радиальных частей волновой функции. Теперь, пользуясь этой аналогией, перепишем формулу для сдвига уровня энергии открытых квантовых точек во втором порядке теории возмущений в виде

$$E^{(2)} = \sum_m \frac{V_{nm} V_{mn}}{E_n - E_m}. \quad (22)$$

Здесь, в отличие от обычной формулы теории возмущений,  $E_n$  и  $E_m$  — комплексные уровни энергии, пробегающие все квазистационарные состояния. Матричный элемент в формуле (22) запишется с учетом сохранения структуры ряда теории возмущений, как было отмечено выше. Также матричный элемент  $V_{nm}$  переходит в предельное выражение для матричного элемента для эффекта Штарка в закрытых квантовых точках при стремлении толщины барьера к бесконечности. В результате получаем

$$V_{nm} = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{\int_0^\infty dr r^2 d\Omega \exp(-\alpha r^2) R_1(r) R_2(r) Y_{l_1 m_1}(\theta, \phi) Y_{l_2 m_2}^*(\theta, \phi) V(\mathbf{r})}{\left( \int_0^\infty dr r^2 \exp(-\alpha r^2) R_1^2(r) \right)^{1/2} \left( \int_0^\infty dr r^2 \exp(-\alpha r^2) R_2^2(r) \right)^{1/2}}. \quad (23)$$

Строгий вывод поправок теории возмущений для квазистационарных состояний дан в Приложении.

Качественное поведение квазистационарных уровней энергии в электрическом поле показано на рис. 2. В этом случае, нижние уровни уменьшают свою полуширину с ростом напряженности внешне-

го электрического поля, а верхние — увеличивают. Объяснение такого поведения уровней будет дано ниже. В результате численных расчетов по формуле (22) получен сдвиг энергии квазистационарного состояния и изменение его полуширины во внешнем

электрическом поле (рис. 3, 4). При расчете по формуле (22) важно обратить внимание на то, что в очень сильных электрических полях нужно модифицировать данную формулу и включать в рассмотрение непрерывный спектр энергий, лежащий выше высоты барьера  $U_0$ . Это связано с тем, что само электрическое поле создает искажение потенциала квантовой точки, которое изменяет полуширину уровня. В слабых электрических полях ( $E \sim 10^5$  В/см) это не существенно, поскольку основной масштаб задается исходным потенциалом гетероструктуры  $\Delta = r_1 - r_0$  ( $l_{field} \gg \Delta$ ). Здесь  $l_{field}$  — характерный масштаб, связанный с искривлением зонной диаграммы и положением уровня энергии и имеющий вид

$$l_{field} = \varepsilon E_{level} / eE, \quad (24)$$

где  $E_{level}$  — положение уровня энергии электрона,  $\varepsilon$  — диэлектрическая проницаемость.

На рис. 3, 4 отмечены низший и высший квазистационарные уровни энергии. Полуширина квазистационарного уровня на рис. 3, 4 отмечена конечной полосой. Для случая, когда  $\Gamma \ll E_r$ , вещественная часть сдвига по энергии почти в точности совпадает со сдвигом для закрытых квантовых точек. Это соответствует условию квазистационарности уровня. В случае  $\Delta \rightarrow \infty$  сдвиг уровня полностью совпадает со своим стационарным значением. Для нижних энергетических уровней полуширина уменьшается при увеличении напряженности внешнего электрического поля (рис. 3). Это вполне просто понять следующим образом. Поскольку теория возмущений во втором порядке дает отталкивание энергетических уровней, пропорциональное  $1/\Delta E$ , где  $\Delta E$  — разность энергий уровней, то в силу этого нижний уровень «сплюсчивается» за счет того, что квазистационарные состояния имеют конечную полуширину, а это означает, что величина расталкивания зависит от энергии. Это верно для не слишком высоких энергетических уровней. Для более высоких (близких к  $U_0$ ) энергетических уровней начинает играть роль эффект увеличения туннельной прозрачности и, следовательно, полуширина уровня растет с ростом величины электрического поля (рис. 4).

Таким образом, для открытой квантовой точки существуют две области: область энергий  $E \ll U_0$ , где полуширина уровня уменьшается с ростом напряженности электрического поля, и область энергий  $E \lesssim U_0$ , где полуширина уровня растет с ростом поля. Таким образом, существует критическая энергия  $E_{cr}$ , при которой поправка к полуширине уровня в электрическом поле обращается в нуль (рис. 5).

Квазиклассический анализ поведения сдвигов уровней энергии и полуширин проведем на примере открытой квантовой ямы. При рассмотрении задачи во внешнем электрическом поле имеется аналогия между двумя случаями: (открытых квантовых ям и точек). Дело в том, что само возмущение (электрическое поле) одномерно. Поэтому для квазиклассического анализа вместо квантовой точки можно взять квантовую яму, поскольку это не будет существенно влиять на качественное поведение уровней энергии.

### 3.1. Квазиклассический подход для случая открытых квантовых ям во внешнем электрическом поле

Теперь перейдем к рассмотрению квазиклассического подхода к исследованию спектра электронов в открытых квантовых системах. Данный подход позволит проанализировать поведение полуширины уровня энергии как функции его положения по энергии и толщины барьера на примере открытой квантовой ямы. Следует отметить, что квазиклассический подход разработан только для одномерного случая. Для трехмерного случая квазиклассический подход справедлив только для ограниченного набора частных случаев [15]. Однако подход, изложенный в работе [15], не пригоден для рассмотрения спектра в открытых квантовых точках. Дело в том, что в работе [15] рассматривается только асимптотика квазиклассической волновой функции и не рассматриваются правила квантования энергии.

В настоящем разделе мы рассмотрим сначала случай открытой квантовой ямы. На его примере получим результат для поправки второго порядка теории возмущений к энергии уровня. Потом обобщим полученные результаты на случай открытых квантовых точек в электрическом поле.

Выше было показано, что существует критическая энергия ( $E_{cr}$ ), при которой поправка к полуширине уровня обращается в нуль (рис. 5). Мы рассмотрим открытую квантовую яму в электрическом поле и покажем, что поведение полуширин для квазистационарных состояний не отличается от поведения для случая открытых квантовых точек. Теория возмущений в квазиклассическом приближении (только для первого порядка) для таких систем была развита в работе [9]. В ней рассматривается потенциал, имеющий две точки поворота. В этом случае достаточно рассмотреть только первый порядок теории возмущений. В случае открытой квантовой ямы мы имеем четыре точки поворота. В случае приложения

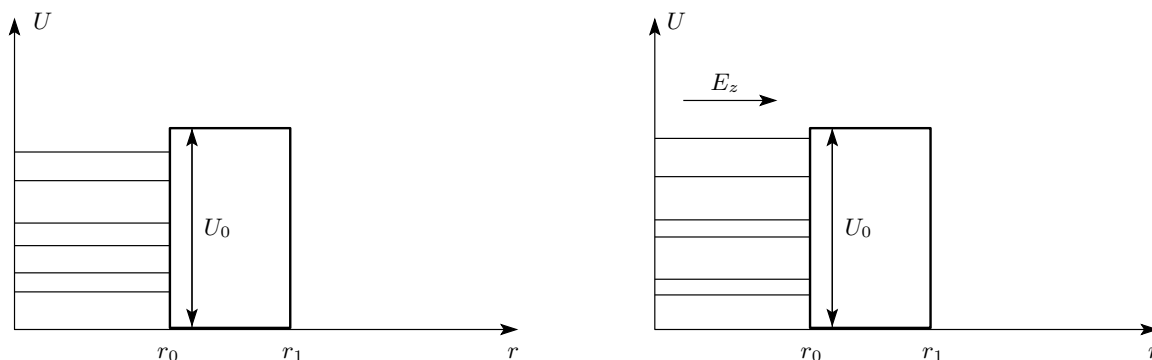


Рис. 2. Поведение квазистационарных уровней при эффекте Штарка

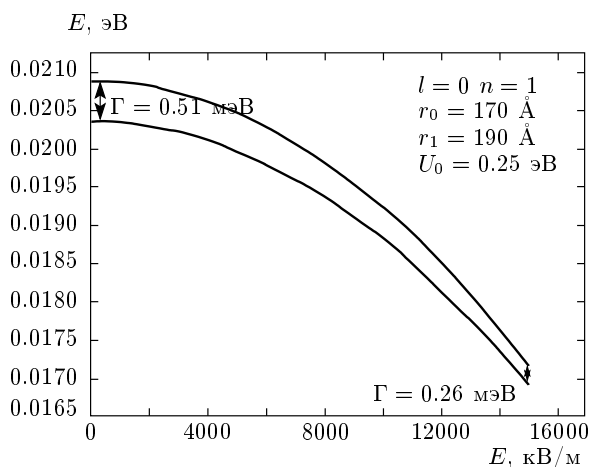


Рис. 3. Поведение низшего уровня и его полуширины (отмечена конечной полосой) под влиянием электрического поля при эффекте Штарка

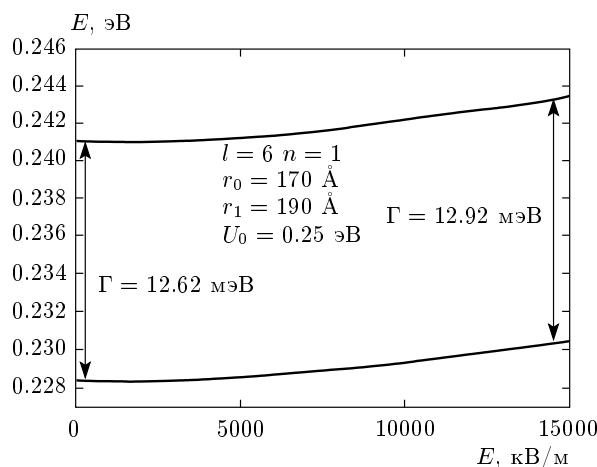


Рис. 4. Поведение высшего уровня и его полуширины (отмечена конечной полосой) под влиянием электрического поля при эффекте Штарка

к такому потенциалу нечетного возмущения (электрическое поле) вклады от каждой из областей в первом порядке сокращаются и нужно использовать второй порядок теории возмущений.

Квазиклассический подход состоит в том, чтобы рассматривать правило квантования Бора–Зоммерфельда, модифицированное к случаю открытых систем (т. е. для квазистационарных состояний). Рассматривается потенциал, с вершиной барьера в точке  $x = x_m$  (рис. 6). Вблизи нее используется параболическое приближение. Уравнение Шредингера в таком случае имеет точное решение:

$$\psi(x) = \text{const } D_v (2^{1/2} e^{-i\pi/4} \rho), \quad (25)$$

$$v = -(1/2 + ia),$$

где  $\rho \propto (x - x_m)$ . Данная волновая функция удовлетворяет условию излучения на бесконечности и

сшивание ее с квазиклассической волновой функцией дает правила квантования [12]:

$$\int_{x_0}^{x_1} k(x) dx = \left(N + \frac{1}{2}\right) \pi, \quad (26)$$

$$N = n - \frac{1}{2\pi} \phi(a), \quad a = \frac{1}{\pi} \int_{x_1}^{x_2} \kappa(x) dx.$$

Параметр  $a$  характеризует туннельную прозрачность барьера.

Теперь применим этот подход к вычислению второй поправки теории возмущений к энергии. Для этого варьируем правило квантования (26) с точностью до второго порядка теории возмущений по потенциалу. В этом случае

$$k(x) = \frac{1}{\hbar^2} [2m(E + \delta E - U(x) - \delta U(x))]^{1/2},$$



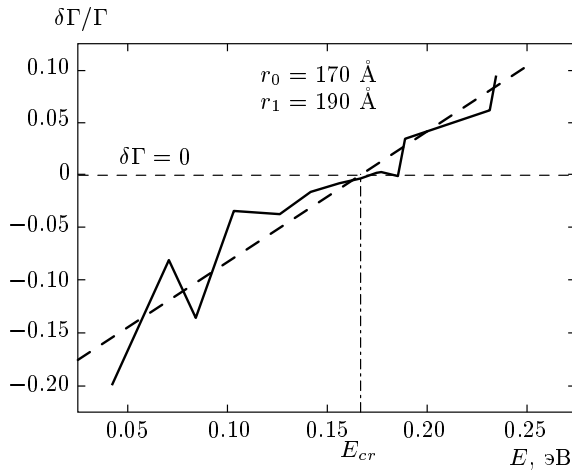


Рис. 5. Зависимость величины  $\delta\Gamma/\Gamma$  от положения уровня. Показана критическая энергия и уровень  $\delta\Gamma = 0$

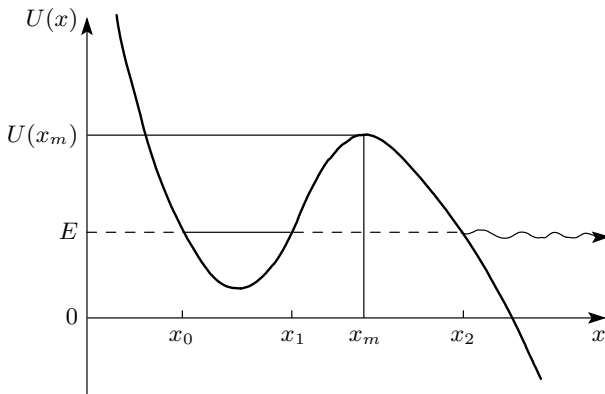


Рис. 6. Ход потенциала для задачи теории возмущений в квазиклассическом приближении (взято из работы [12])

$$\kappa(x) = \frac{1}{\hbar^2} [2m(U(x) + \delta U(x) - E - \delta E)]^{1/2}.$$

Тогда имеем

$$\begin{aligned} \Delta k(x) &= k_0(x) \left( \frac{\beta - \gamma}{2} - \frac{(\beta - \gamma)^2}{8} \right), \\ \Delta \kappa(x) &= \kappa_0(x) \left( \frac{\beta - \gamma}{2} - \frac{(\beta - \gamma)^2}{8} \right), \end{aligned} \quad (27)$$

где  $\beta = \delta E / (E - U)$  и  $\gamma = \delta U / (E - U)$ .

Далее, рассмотрим второй порядок теории возмущений для класса нечетных возмущений (к которому принадлежит возмущение  $V = eEx$ ) в случае открытой квантовой ямы. Для нечетных возмущений первый порядок равен нулю. Поэтому для таких возмущений это существенно упростит конеч-

ное выражение для поправки к энергии. Раскладываем модифицированное правило квантования Бора–Зоммерфельда (26) в ряд по параметрам  $\beta$  и  $\gamma$  до второго порядка. Тогда получим:

$$\begin{aligned} &\int_{x_0}^{x_1} dx k_0(x) \left\{ \frac{\beta}{2} - \frac{(\beta - \gamma)^2}{8} \right\} = \\ &= \pi \left( \chi(a) \frac{1}{\pi} \int_{x_1}^{x_2} dx \kappa_0(x) \left\{ \frac{\beta}{2} - \frac{(\beta - \gamma)^2}{8} \right\} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\eta(a)}{2\pi^2} \left( \int_{x_1}^{x_2} dx \kappa_0 \frac{\beta}{2} \right)^2 \right), \quad (28) \end{aligned}$$

где  $\eta(a) = \chi'(a)$ . Здесь

$$\begin{aligned} \chi(a) &= \frac{1}{2i} \ln \left( \frac{\Gamma(1/2 + ia)}{\Gamma(1/2 - ia)} (1 + \exp(-2\pi a)) \right) + \\ &\quad + a(1 - \ln(a)); \end{aligned}$$

это выражение взято из работы [9]. Производная в этих выражениях берется по  $a$ . Члены в формуле (28) порядка  $\beta^2$  и порядка  $\beta\gamma$  не дают вклада в конечное выражение, поскольку являются порядком по возмущению выше второго. Таким образом, выражая из формулы (28)  $\delta E$  получим поправку второго порядка к энергии в квазиклассическом приближении. В результате имеем

$$\begin{aligned} \delta E &= \left( - \int_{x_0}^{x_1} dx (\delta U)^2 \frac{1}{4k_0} \frac{2m}{\hbar^2 k_0^2} + \right. \\ &\quad \left. + \chi(a) \int_{x_1}^{x_2} dx (\delta U)^2 \frac{1}{4\kappa_0} \frac{2m}{\hbar^2 \kappa_0^2} \right) \times \\ &\quad \times \left( \int_{x_0}^{x_1} \frac{dx}{k_0(x)} + \chi(a) \int_{x_1}^{x_2} \frac{dx}{\kappa_0(x)} \right)^{-1}. \quad (29) \end{aligned}$$

Согласно численным расчетам (как показано выше), в открытой квантовой точке имеется критическое значение энергии уровня, при котором поправка к полуширине уровня меняет свой знак проходя через нуль. В квазиклассическом подходе можно найти аналитическое выражение для поправки к полуширине и определить условие смены ее знака. Выясним условие смены знака поправки к полуширине уровня, рассмотрев мнимую часть  $\delta E$ . Рассмотрим два предельных случая, которые позволят проанализировать поведение поправки к полуширине.

В первом случае энергия невелика. Это значит, что  $a \gg 1$  ( $\kappa\Delta \gg 1$ ). Имеем:

$$\delta\Gamma = \left( \frac{\exp(-2\pi a)}{2} \int_{x_1}^{x_2} dx (\delta U)^2 \frac{1}{4\kappa_0} \frac{2m}{\hbar^2 \kappa_0^2} \right) \times \\ \times \left( \int_{x_0}^{x_1} \frac{dx}{k_0} \right)^{-1} + \\ + \left( \exp(-2\pi a)/2 \int_{x_1}^{x_2} \frac{dx}{\kappa_0} (\delta U)^2 \frac{1}{4k_0} \frac{2m}{\hbar^2 k_0^2} dx \right) \times \\ \times \left( \int_{x_0}^{x_1} \frac{dx}{k_0} \right)^{-2}. \quad (30)$$

Видно, что поправка к полуширине уровня пропорциональна  $\exp(-2\pi a)$  (толстый барьер) и имеет один знак во всех случаях, когда  $a \gg 1$ . Это соответствует численному результату согласно (22) и качественному анализу.

Чтобы проанализировать смену знака поправки к полуширине при переходе энергии уровня через критическую, анализируем случай энергий близких к высоте барьера  $U_0$ . Большие энергии соответствуют случаю  $a \ll 1$ . Тогда разложим  $\chi(a)$  в ряд по  $a$ . Зависимость поправки к полуширине от  $a$  приобретает следующий характер:

$$\delta\Gamma \sim (\pi a - \ln 2). \quad (31)$$

В результате  $\delta\Gamma$  обращается в нуль при выполнении равенства

$$a(E_{cr}) = \frac{\ln 2}{\pi}, \\ E_{cr} = U_0 - \frac{\hbar^2 a^2}{2m\Delta^2}. \quad (32)$$

Таким образом, в рамках квазиклассического подхода показано, что в эффекте Штарка для открытых квантовых ям имеются две области, разделенные критической энергией  $E_{cr}$ . В области малых энергий ( $E < E_{cr}$ ) полуширина уровня уменьшается с ростом электрического поля, а в области высоких энергий ( $E > E_{cr}$ ) полуширина увеличивается с ростом поля. Результат наличия критической энергии вполне естествен, поскольку  $a$  характеризует «меру» туннельной прозрачности барьера. Эти результаты для открытых квантовых ям переносятся на случай открытых квантовых точек и соответствуют численному расчету для последних. Для открытых квантовых точек константа  $a(E_{cr})$  отлична от случая открытых квантовых ям в силу различия в геометрии

(отметим, что в данном случае константа  $a(E_{cr})$  различна также и для разных значений орбитального момента  $l$ ).

### 3.2. Расчет сдвигов уровней энергии электрона в открытых квантовых точках под действием поля белковой молекулы

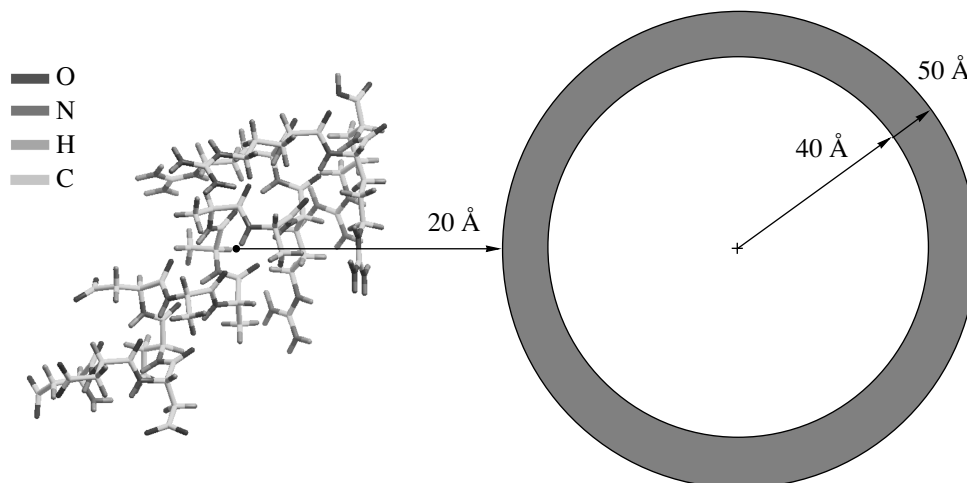
Полученные результаты для сдвигов квазистационарных состояний применим для определения сдвига уровней энергии в открытой квантовой точке, взаимодействующей с белковой молекулой (рис. 7). В основе белка лежит полимер-полипептидная цепь, состоящая из аминокислотных остатков; это было установлено Э. Фишером в начале XX века. Пространственная структура белка может быть очень сложной [16]: имеется вторичная ( $\alpha$ -спираль и  $\beta$ -тяж), третичная (белковая глобула), четвертичная (суперглобула). Соответственно, распределение зарядов в пространственной конфигурации белка определяет внешнее электрическое поле, создаваемое молекулой.

В качестве открытой квантовой точки выбрана точка со следующими параметрами:

$$r_0 = 40 \text{ \AA}, \quad r_1 = 50 \text{ \AA}, \quad U_0 = 0.25 \text{ эВ}. \quad (33)$$

Поскольку электрическое поле от белковой молекулы уже не будет однородным в области открытой квантовой точки, поправка к энергии будет ненулевой уже в первом порядке по теории возмущений. Потенциал, создаваемый белковой молекулой, был рассчитан с использованием программы ICM [17]. Программа имеет в своем составе методы определения энергий и конфигураций сложных белковых молекул с минимальной энергией. При этом данная программа позволяет определять электростатическую энергию различными методами. Нами был взят метод на основе точного решения уравнения Пуассона. Также возможно использование приближенного метода, основанного на применении формулы Борна [18]. В этом методе молекула разбивается на набор сферических областей и используется метод изображений.

Далее определяется потенциал от всей белковой молекулы в различных точках, соответствующих нашей открытой квантовой точке. Данный потенциал использовался для расчетов сдвигов уровней энергии по теории возмущений. Поскольку вся система находится в воде с диэлектрической проницаемостью  $\epsilon = 78.5$ , метод изображений применялся для определения истинного потенциала, действующего в области квантовой точки. В результате сдвиг



**Рис. 7.** Модельная белковая молекула, взаимодействующая с открытой квантовой точкой. На расстоянии  $20 \text{ \AA}$  от ее центра расположена открытая квантовая точка (для наглядности не соблюдено соотношение размеров открытой квантовой точки и белковой молекулы). Система координат связана с геометрическим центром молекулы таким образом, что  $\sum_i \mathbf{r}_i = 0$ , где  $\mathbf{r}_i$  пробегает все радиус-векторы до  $i$ -го атома в молекуле в системе, связанной с ее центром

основного состояния открытой квантовой точки, взаимодействующей с белковой молекулой, составил  $\Delta E = -68 \text{ мэВ}$ . Такие сдвиги энергии могут быть экспериментально обнаружены. Данный результат позволяет сделать вывод о возможности идентификации и определения типа биологических молекул в водном растворе с помощью открытых квантовых точек.

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В рамках формализма  $S$ -матрицы рассеяния выполнен аналитический расчет энергий квазистационарных состояний носителей заряда в открытой квантовой точке. Показано, что результаты для энергии и полуширины уровня открытой квантовой точки совпадают с частным случаем углового момента  $l = 0$  [8]. Получены результаты для поправки второго порядка теории возмущений к энергии и полуширине уровня квазистационарного состояния открытой квантовой точки. Выполнен численный расчет сдвигов уровней энергии для открытой квантовой точки под влиянием электрического поля. Исследовано поведение поправок к полуширине уровня в зависимости от энергии уровня и толщины барьерного слоя. Показано, что существует критическое положение уровня энергии ( $E_{cr}$ ), при котором поправка к полуширине меняет знак. В квазиклассическом приближении найдены аналитические выражения для поправки второго порядка к энергии уровня открытой квантовой ямы. Показано, что в этом случае поправка к полу-

ширине также меняет свой знак при переходе через критическую энергию  $E_{cr}$ . Рассчитан сдвиг уровня энергии открытой квантовой точки под действием поля модельной белковой молекулы, находящейся вблизи квантовой точки.

В заключение хотим поблагодарить М. Г. Петухова за полезные обсуждения биологических расчетов.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (гранты №№ 07-07-00283-а, 08-02-01337-а).

#### ПРИЛОЖЕНИЕ

##### Вывод поправок теории возмущений для случая квазистационарных состояний

Получим результат для поправки второго порядка теории возмущений к энергии уровня. Мы будем считать потенциал  $V(\mathbf{r})$  сферически симметричным. Для квазистационарных состояний волновая функция расходуется на бесконечности экспоненциально за счет комплексной энергии (поскольку  $\psi \propto \exp(ikr)$ , а  $k = k_r - ik_i$ ). В этом случае понятие ортогональности волновых функций уже не применимо. Однако можно воспользоваться приемом регуляризации (так же, как и в случае первого порядка теории возмущений). В этом случае можно ввести новый аналог ортогональности для квазистационарных состояний. Уравнение Шредингера для квазистационарных состояний имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\phi'' + U(r)\phi = (E - i\Gamma)\phi. \quad (\text{П.1})$$

Выпишем уравнения для двух квазистационарных уровней:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\phi_1'' + U(r)\phi_1 &= (E_1 - i\Gamma_1)\phi_1 \exp(-\alpha r^2), \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\phi_2'' + U(r)\phi_2 &= (E_2 - i\Gamma_2)\phi_2 \exp(-\alpha r^2). \end{aligned} \quad (\text{П.2})$$

Здесь  $\phi(r) = rR(r)$ ,  $R(r)$  — радиальная часть волновой функции,  $U(r)$  — наш сферический потенциал с добавкой центробежной части. После домножения первого уравнения на  $\phi_2 \exp(-\alpha r^2)$ , второго на  $\phi_1 \exp(-\alpha r^2)$  и интегрирования, вычтем одно уравнение из другого и получим

$$\begin{aligned} ((E_2 - i\Gamma_2) - (E_1 - i\Gamma_1)) \int_0^\infty dr \phi_1 \phi_2 \exp(-\alpha r^2) &= \\ = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \int_0^\infty dr \phi_1'' \phi_2 \exp(-\alpha r^2) - \int_0^\infty dr \phi_2'' \phi_1 \exp(-\alpha r^2) \right). \end{aligned} \quad (\text{П.3})$$

Интегрируя два раза по частям, получим

$$\begin{aligned} ((E_2 - i\Gamma_2) - (E_1 - i\Gamma_1)) \int_0^\infty dr \phi_1 \phi_2 \exp(-\alpha r^2) &= \\ = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \phi_1' \phi_2 \exp(-\alpha r^2) \Big|_0^\infty - \phi_2' \phi_1 \exp(-\alpha r^2) \Big|_0^\infty - \int_0^\infty \phi_1' (\phi_2 \exp(-\alpha r^2))' dr + \int_0^\infty \phi_2' (\phi_1 \exp(-\alpha r^2))' dr \right). \end{aligned} \quad (\text{П.4})$$

Первые два слагаемых обращаются в нуль на бесконечности за счет  $\exp(-\alpha r^2)$ . Проинтегрировав еще раз, получим

$$\begin{aligned} ((E_2 - i\Gamma_2) - (E_1 - i\Gamma_1)) \int_0^\infty dr \phi_1 \phi_2 \exp(-\alpha r^2) &= \\ = -\frac{\hbar^2}{2m} \phi_1 \phi_2 \exp(-\alpha r^2) (4\alpha^2 r^2 - 2\alpha). \end{aligned} \quad (\text{П.5})$$

Теперь устремим  $\alpha \rightarrow 0$ . В этом случае последний интеграл стремится к нулю. Удобно будет для дальнейшего отнормировать волновые функции следующим образом:

$$\phi_{norm}(r) = \frac{\phi(r)}{\left( \lim_{\alpha \rightarrow 0} \int_0^\infty dr \phi(r)^2 \exp(-\alpha r^2) \right)^{1/2}}. \quad (\text{П.6})$$

Такая нормировка соответствует интегралу (аналог ортогональности для квазистационарных состояний)

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} \int_0^\infty dr \phi_n(r) \phi_m(r) \exp(-\alpha r^2) = \delta_{nm}. \quad (\text{П.7})$$

Дальше используем уже нормированные волновые функции.

Теперь уже нетрудно получить результат для второго порядка теории возмущений. Далее следуем стандартному выводу для теории возмущений [19]. Волновая функция электрона разлагается по волновым функциям квазистационарных состояний:

$$\psi = \sum_i \psi_i^{(0)}. \quad (\text{П.8})$$

Подставим  $\psi$  в уравнение Шредингера:

$$\sum_m c_m (E_m^{(0)} + \hat{V}) \psi_m^{(0)} = \sum_m E \psi_m^{(0)}. \quad (\text{П.9})$$

Умножив равенство на  $R_n(r) Y_{lm}^*(\theta, \phi)$  и проинтегрировав, получаем

$$(E - E_k^0) c_k = \sum_m V_{nm} c_m. \quad (\text{П.10})$$

Отметим, что в формулах (П.9) и (П.10) энергии уже комплексные. Матричный элемент имеет вид

$$\begin{aligned} V_{nm} &= \int_0^\infty dr r^2 d\Omega R_n(r) R_m(r) V(\mathbf{r}) \times \\ &\times Y_{l_n m_n}(\theta, \phi) Y_{l_m m_m}^*(\theta, \phi). \end{aligned} \quad (\text{П.11})$$

Теперь мы ищем поправки к энергиям и волновым функциям в виде ряда по возмущению. После этого легко находим первую поправку к энергии квазистационарного уровня:

$$E_n^{(1)} = V_{nn}. \quad (\text{П.12})$$

Для поправки второго порядка получим

$$E_n^{(2)} = \sum_m' \frac{V_{nm} V_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}. \quad (\text{П.13})$$

Отметим, что энергии в формуле (П.13) комплексны (и пробегают все квазистационарные значения энергии) в отличие от стандартной формулы. Также для квазистационарных состояний матричный элемент уже не является эрмитовым и  $V_{nm} \neq V_{mn}^*$ . Таким образом, получаемая поправка имеет вид

$$E_n^{(2)} = E_r^{(2)} - i\Gamma_i^{(2)}. \quad (\text{П.14})$$

## ЛИТЕРАТУРА

1. Л. В. Асрян, Р. А. Сурис, ФТП **38**, 3 (2004).
2. *Biological Nanostructures and Applications of Nanostructures in Biology Electrical, Mechanical, and Optical Properties*, ed. by M. A. Strosio, M. Dutta, Kluwer Academic, Plenum Publishers, New York (2004).
3. C. W. Warren Chan and Shuming Nie, *Science* **281**, 2016 (1998).
4. X. Michalet, F. F. Pihaud, L. A. Bentolila, J. M. Tsay, S. Doose, J. J. Li, G. Sundaresan, A. M. Wu, S. S. Gambhir, and S. Weiss, *Science* **307**, 538 (2005).
5. Xiaohu Gao, Yuan Yuan Cui, Richard M. Levenson, Leland W. K. Chung, Shuming Nie, *Nature Biotechnology* **22**, 969 (2004).
6. Г. Г. Зегря, Письма в ЖТФ **32**, 75 (2006).
7. А. И. Базь, Я. Б. Зельдович, А. М. Переломов, *Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике*, Наука, Москва (1971).
8. Н. В. Ткач, Ю. А. Сетти, Г. Г. Зегря, Письма в ЖТФ **33**, 70 (2007).
9. В. С. Попов, В. Д. Мур, Письма в ЖЭТФ **60**, 64 (1994).
10. Я. Б. Зельдович, ЖЭТФ **39**, 776 (1960).
11. А. И. Базь, Приложение IX в книге Э. Ч. Титчмарша, *Разложения по собственным функциям, связанные с дифференциальными уравнениями второго порядка*, Изд-во иностр. лит., Москва (1961), с. 533.
12. В. Д. Мур, В. С. Попов, Письма в ЖЭТФ **51**, 499 (1990).
13. G. W. Wen, J. Y. Lin, and H. X. Jiang, *Phys. Rev. B* **52**, 5913 (1995).
14. S. I. Pokutnyi, L. Jacak, J. Misiewicz, W. Salejda, and G. G. Zegrya, *J. Appl. Phys.* **96**, 1115 (2004).
15. Б. И. Шкловский, А. Л. Эфрос, *Электронные свойства легированных полупроводников*, Наука, Москва (1979).
16. А. В. Финкельштейн, О. Б. Птицин, *Физика белка*, Книжный дом «Университет», Москва (2002).
17. R. Abagyan and M. Totrov, *J. Mol. Biol.* **235**, 983 (1994).
18. М. Борн, Э. Вольф, *Основы оптики*, Наука, Москва (1973).
19. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика*, Физматлит, Москва (2001).