

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МНОГОЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ В КВАНТОВЫХ ЯМАХ

Спектральные характеристики полупроводниковых излучателей в значительной степени определяются эффектами уширения спектральных линий. Современные лазерные структуры достигли высокого совершенства в кристаллографическом отношении. В таких структурах влияние неоднородности, в частности, на спектральное уширение может быть сведено к пренебрежимому уровню. Это облегчило анализ спектров и выявило тот факт, что форма спектра не описывается в рамках обычного подхода, использующего лоренцев форм-фактор для однородного уширения [1, 2]. Детальный анализ контура уширения спектральных линий требует включения в рассмотрение многоэлектронных эффектов. Целью данной работы является построение на основе многоэлектронного уравнения Шредингера математической модели системы взаимодействующих электронов и оценка возможности ее численного анализа.

Рассмотрим систему из M квазидвухмерных электронов в области полупроводникового слоя, ограниченной квадратом со стороной L . При использовании периодических граничных условий базисные одноэлектронные волновые функции можно выбрать в виде

$$\psi^{k_x, k_y}(x, y) = \frac{1}{L} \exp(i(k_x x + k_y y)) u(\bar{k}, x, y), \quad (1)$$

где $k_x = (2\pi/L)n_x$, $k_y = (2\pi/L)n_y$ - волновые векторы вдоль осей x и y ; $n_x, n_y = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm N$ - квантовые числа; $u(\bar{k}, x, y)$ - периодические части функций Блоха; N определяет размерность одноэлектронного базиса: $M = (2N + 1)^2$. В заполненной зоне $N = L/2a$, где для простоты считаем, что элементарная ячейка является квадратом со стороной a . Гамильтониан системы должен включать операторы кинетических энергий и потенциальных энергий взаимодействия электронов с положительными зарядами кристаллической решетки и друг с другом [3]

$$\sum_{i=1}^M \left(\frac{\hbar^2 v^2}{2m_i} \right) + \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^M \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon(\vec{r}_i - \vec{r}_j)} \right) + \sum_{i=1}^M \sum_{r=1}^M \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon(\vec{r}_i - \vec{r}_r)} \right). \quad (2)$$

Здесь m_0 — масса электрона, индекс α нумерует положительные заряды ядер в анализируемой области, а индексы i и j — отрицательные заряды электронов. Для обеспечения периодичности потенциальной части гамильтониана (2), т. е. его неизменности при добавлении к координатам одного электрона любого вектора \vec{r}_i , кратного $\vec{e}_x l$ или $\vec{e}_y l$, где \vec{e}_x, \vec{e}_y — единичные векторы вдоль соответствующих координатных направлений, добавим к гамильтониану энергию взаимодействия M электронов в выделенной области с зарядами в оставшейся бесконечной части кристалла.

$$\sum_i^M \left(-\frac{\hbar^2 \nabla_i^2}{2m_0} \right) + \sum_i \left[\sum_{\alpha}^M \sum_i^M \left(-\frac{e^2}{4\pi\epsilon(\vec{r}_i - \vec{r}_{\alpha} + \vec{r}_i)} \right) + \sum_i^M \sum_{j>i}^M \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon(\vec{r}_i - \vec{r}_j + \vec{r}_i)} \right) \right] \quad (3)$$

Однако при введении суммирования по i потенциальная энергия электронов оказывается бесконечной величиной. Это следует из того, что каждое слагаемое, отличающееся индексом i и дающее вклад в энергию какого-либо электрона с индексом i , включает взаимодействие с одним некомпенсированным положительным зарядом в каждой квадратной ячейке M положительных зарядов кристаллической решетки и $M-1$ отрицательных зарядов электронов. Чтобы исключить расходимость суммирования по i , в каждую ячейку добавим равномерно распределенный отрицательный заряд, создающий потенциал

$$V^-(\vec{r}_i + \vec{r}_i) = -\frac{1}{A} \int_{\delta} \frac{e^2}{4\pi\epsilon(\vec{r}_i - \vec{r} + \vec{r}_i)} d\vec{r}, \quad (4)$$

где интегрирование ведется по площади ячейки $A = L^2$. Таким образом, многочастичный гамильтониан приобретает вид

$$\hat{H} = \sum_i^M \left(-\frac{\hbar^2 \nabla_i^2}{2m_0} \right) + \sum_i \left[\sum_i^M V^-(\vec{r}_i + \vec{r}_i) + \sum_{\alpha}^M \sum_i^M \left(-\frac{e^2}{4\pi\epsilon(\vec{r}_i - \vec{r}_{\alpha} + \vec{r}_i)} \right) + \sum_i^M \sum_{j>i}^M \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon(\vec{r}_i - \vec{r}_j + \vec{r}_i)} \right) \right] \quad (5)$$

Экситонные решения уравнения (5) ищем в виде суперпозиции функций:

$$\Psi_m(r_1, r_2, \dots, r_M) = \frac{1}{\sqrt{M!}} \begin{vmatrix} \varphi_1(r_1) & \varphi_2(r_1) & \dots & \varphi_m(r_1) \\ \varphi_1(r_2) & \varphi_2(r_2) & \dots & \varphi_m(r_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_1(r_M) & \varphi_2(r_M) & \dots & \varphi_m(r_M) \end{vmatrix} \quad (6)$$

Здесь определитель включает все одноэлектронные волновые функции валентной зоны, за исключением одной с индексом m , которая заменена одноэлектронной волновой функцией зоны проводимости. Матричные элементы гамильтониана находятся как

$$H_{mm} = \langle \Psi_m | \hat{H} | \Psi_m \rangle = \int \dots \int \Psi_m^* \hat{H} \Psi_m d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_M. \quad (7)$$

Для диагональных элементов вычисление приводит к выражению

$$\begin{aligned} \hat{H}_{mm} = & \sum_{i=1}^M \int_A \left[\varphi_i^*(\vec{r}) \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m_0} \right) \varphi_i(\vec{r}) \right] d\vec{r} + \sum_{i=1}^M \int \left[\varphi_i^*(\vec{r}) V^-(\vec{r}) \varphi_i(\vec{r}) \right] d\vec{r} - \\ & - \sum_{i=1}^M \sum_{a=1}^M \int \left[\varphi_i^*(\vec{r}) \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon(\vec{r} - \vec{r}_a)} \right) \varphi_i(\vec{r}) \right] d\vec{r} + \\ & + \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^M \int \int \left[\varphi_i^*(\vec{r}_1) \varphi_j^*(\vec{r}_2) \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)} \right) \varphi_i(\vec{r}_1) \varphi_j(\vec{r}_2) \right] d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 - \\ & - \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^M \int \int \left[\varphi_i^*(\vec{r}_1) \varphi_j^*(\vec{r}_2) \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)} \right) \varphi_j(\vec{r}_1) \varphi_i(\vec{r}_2) \right] d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \quad (8) \end{aligned}$$

Здесь, предпоследнее слагаемое описывает энергию кулоновского взаимодействия, а последнее – обменного. Суммирование ведется по всем одноэлектронным состояниям, причем среди них есть только одно (с номером m) из зоны проводимости. Выделим из полученной суммы слагаемые, описывающие взаимодействие электронов в заполненной валентной зоне E_0 . Для этого, во-первых, добавим и вычтем слагаемые, определяющие взаимодействие с отсутствующим состоянием m валентной зоны:

$$\begin{aligned} & \int_A \left[\varphi_m^v(\vec{r}) \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m_0} \right) \varphi_m^v(\vec{r}) \right] d\vec{r} + \int_{\infty} \left[\varphi_m^v(\vec{r}) V^-(\vec{r}) \varphi_m^v(\vec{r}) \right] d\vec{r} - \\ & - \sum_{a=1}^M \int \left[\varphi_m^v(\vec{r}) \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon(\vec{r} - \vec{r}_a)} \right) \varphi_m^v(\vec{r}) \right] d\vec{r} + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_{i \neq j} \iint \varphi_m^*(\vec{r}_i) \varphi_j^*(\vec{r}_j) \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon(\vec{r}_i - \vec{r}_j)} \right) \varphi_m(\vec{r}_i) \varphi_j^*(\vec{r}_j) d\vec{r}_i d\vec{r}_j \\
& - \sum_{i \neq j} \iint \varphi_m^*(\vec{r}_i) \varphi_j^*(\vec{r}_j) \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon(\vec{r}_i - \vec{r}_j)} \right) \varphi_m^*(\vec{r}_i) \varphi_j(\vec{r}_j) d\vec{r}_i d\vec{r}_j \quad (9)
\end{aligned}$$

Во-вторых, выделим из суммы слагаемые, определяющие взаимодействие с состоянием m зоны проводимости

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} \left[\varphi_m^*(\vec{r}) \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m_0} \right) \varphi_m(\vec{r}) \right] d\vec{r} + \int_{\Omega} \left[\varphi_m^*(\vec{r}) V^-(\vec{r}) \varphi_m(\vec{r}) \right] d\vec{r} - \\
& - \sum_{\alpha} \int_{\Omega} \left[\varphi_m^*(\vec{r}) \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon(\vec{r} - \vec{r}_\alpha)} \right) \varphi_m(\vec{r}) \right] d\vec{r} + \\
& + \sum_{i \neq j} \iint \varphi_m^*(\vec{r}_i) \varphi_j^*(\vec{r}_j) \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon(\vec{r}_i - \vec{r}_j)} \right) \varphi_m^*(\vec{r}_i) \varphi_j(\vec{r}_j) d\vec{r}_i d\vec{r}_j - \\
& - \sum_{i \neq j} \iint \varphi_m^*(\vec{r}_i) \varphi_j^*(\vec{r}_j) \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon(\vec{r}_i - \vec{r}_j)} \right) \varphi_m(\vec{r}_j) \varphi_j^*(\vec{r}_i) d\vec{r}_i d\vec{r}_j \quad (10)
\end{aligned}$$

Для упрощения вида диагональных элементов многочастичного гамильтониана будем считать, что одноэлектронные волновые функции находятся путем самосогласованного решения следующего уравнения:

$$\begin{aligned}
\hat{H}^m(\vec{r}) = & -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m_0} + \sum_i V^-(\vec{r} + \vec{r}_i) + \sum_i \sum_{\alpha} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon(\vec{r} - \vec{r}_i + \vec{r}_\alpha)} \right) + \\
& + \sum_{i \neq j} \int_{\Omega} d\vec{r}_j \varphi_j^*(\vec{r}_j) \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon(\vec{r} - \vec{r}_j)} \right) \varphi_j^*(\vec{r}_j) - \\
& - \sum_{i \neq j} \int_{\Omega} d\vec{r}_j \varphi_j^*(\vec{r}_j) \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon(\vec{r} - \vec{r}_j)} \right) \varphi_j^*(\vec{r}) \int_{\Omega} d\vec{r}' \delta(\vec{r}' - \vec{r}_j). \quad (11)
\end{aligned}$$

Для обеспечения взаимной ортогональности различных волновых функций необходимо, чтобы гамильтониан для всех волновых функций был одинаков с точностью до аддитивной постоянной. Поэтому в двух последних суммах выражения (11) по сравнению с выражением (9) опущено исключение слагаемых с индексом m и суммирование ведется по всем состояниям валентной зоны. При расчете волновых

функций валентной зоны слагаемые с $j = m$ в двух последних суммах взаимно уничтожаются, как и требуется выражением (9) для того, чтобы потенциальная энергия кулоновского взаимодействия выбранного электрона была конечной величиной. Этого не происходит, если исконая волновая функция принадлежит зоне проводимости. При этом, согласно уравнению (11), получается, что электрон взаимодействует с M (а не $M - 1$) электронами валентной зоны. Поэтому присутствующий в выражении (10) дополнительный отрицательный потенциал оказывается некомпенсированным и должен быть исключен в гамильтониане для отыскания одноэлектронных волновых функций зоны проводимости.

$$\begin{aligned} \hat{H}^c(\vec{r}) = & -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m_0} + \sum_i \sum_a^M \left(-\frac{e^2}{4\pi\epsilon(\vec{r} - \vec{r}_a + \vec{r}_i)} \right) + \\ & + \sum_i^M \int d\vec{r}_1 \varphi_i^*(\vec{r}_1) \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon(\vec{r} - \vec{r}_1)} \right) \varphi_i(\vec{r}_1) - \\ & - \sum_i^M \int d\vec{r}_2 \varphi_i^*(\vec{r}_2) \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon(\vec{r} - \vec{r}_2)} \right) \varphi_i^*(\vec{r}) \int d\vec{r}' \delta(\vec{r} - \vec{r}_2) \end{aligned} \quad (12)$$

В качестве энергий состояний используем величины, получающиеся из зонной теории в приближении эффективных масс:

$$\hat{H}^v \varphi_m^v = \left(E_m - \frac{\hbar^2 k_m^2}{2m_0} \right) \varphi_m^v, \quad \hat{H}^c \varphi_m^c = \left(E_m + \frac{\hbar^2 k_m^2}{2m_c} \right) \varphi_m^c, \quad (13)$$

где m_c и m_0 - эффективные массы электрона и дырки соответственно

С учетом вышеизложенного, диагональные элементы многочастичного гамильтониана представляются в виде

$$\begin{aligned} \hat{H}_{mm} = & E_m - \left(E_m - \frac{\hbar^2 k_m^2}{2m_0} \right) + \left(E_m + \frac{\hbar^2 k_m^2}{2m_c} \right) - \\ & - \int d\vec{r} \left[\varphi_m^*(\vec{r}) \varphi_m^*(\vec{r}) \varphi_m^c(\vec{r}) \right] d\vec{r} = \\ & + \int \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \varphi_m^*(\vec{r}_1) \varphi_m^*(\vec{r}_2) \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)} \right) \varphi_m^c(\vec{r}_1) \varphi_m^c(\vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 + \\ & + \int \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \varphi_m^*(\vec{r}_1) \varphi_m^*(\vec{r}_2) \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)} \right) \varphi_m^c(\vec{r}_2) \varphi_m^c(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2. \end{aligned} \quad (14)$$

Здесь последние три слагаемые учитывают различие собственного значения уравнения (12) и суммы матричных элементов (10).

Недиагональные матричные элементы для волновых функций (6), отличающихся двумя состояниями, имеют вид

$$H = - \iint \varphi_j^*(\vec{r}) \varphi_i^v(\vec{r}) \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon(\vec{r}_1 - \vec{r})} \right) \varphi_i(\vec{r}) \varphi_j(i, i) d\vec{r} d\vec{r}' + \\ + \iint \varphi_j^*(\vec{r}_1) \varphi_i^v(\vec{r}_2) \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)} \right) \varphi_i(\vec{r}_1) \varphi_j^v(\vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \quad (15)$$

Для расчета интегралов из матричных элементов представим блоховскую часть одноэлектронной волновой функции (1) в виде ряда Фурье:

$$u(\vec{k}, x, y) = \sum_n \sum_{\alpha_1} c_{n, \alpha_1} \exp\left(i \frac{2\pi}{a} (\alpha_1 x + \alpha_1 y)\right) \quad (16)$$

где α_x и α_y — целые числа. Тогда все возникающие при вычислении интегралы будут иметь вид

$$I(\Delta\alpha_1, \Delta\alpha_2, \Delta n_1, \Delta n_2) = \frac{1}{A^2} \iint_{-\infty}^{\infty} \frac{d\vec{r}_1 d\vec{r}_2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \times \\ \times \exp\left(i \frac{2\pi}{a} (\Delta\alpha_{x1} x_1 + \Delta\alpha_{y1} y_1) + i \frac{2\pi}{L} (\Delta n_{x1} x_1 + \Delta n_{y1} y_1)\right) \times \\ \times \exp\left(i \frac{2\pi}{a} (\Delta\alpha_{x2} x_2 + \Delta\alpha_{y2} y_2) + i \frac{2\pi}{L} (\Delta n_{x2} x_2 + \Delta n_{y2} y_2)\right) = \dots \quad (17)$$

После перехода к новой переменной интегрирования $\vec{r}_2 \rightarrow \vec{r}_1 + \vec{r}_2$ двойной интеграл (17) распадается на произведение одномерных интегралов.

$$= \frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\vec{r}_2}{|\vec{r}_2|} \exp\left(i \frac{2\pi}{a} (\Delta\alpha_{x2} x_2 + \Delta\alpha_{y2} y_2) + i \frac{2\pi}{L} (\Delta n_{x2} x_2 + \Delta n_{y2} y_2)\right) \times \\ \times \frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(i \frac{2\pi}{a} ((\Delta\alpha_{x1} + \Delta\alpha_{x2}) x_1 + (\Delta\alpha_{y1} + \Delta\alpha_{y2}) y_1)\right) \times \\ \times \exp\left(i \frac{2\pi}{L} ((\Delta n_{x1} + \Delta n_{x2}) x_1 + (\Delta n_{y1} + \Delta n_{y2}) y_1)\right) d\vec{r}_1 = \dots \quad (18)$$

Второй интеграл отличен от нуля только в том случае, если результирующий показатель экспоненты равен нулю.

$$\left(\frac{2\pi}{L} \Delta n_1 - \frac{2\pi}{a} \alpha \right) \left(\frac{2\pi}{L} \Delta n_2 - \frac{2\pi}{a} \alpha_2 \right) = 0 \quad (19)$$

Это выражает закон сохранения квазиимпульса при соударениях в кристалле. Кроме того, когда изменение квантовых чисел $\Delta n \ll L/a$, т. е. процессы переброса незначительны, то при кулоновском взаимодействии будет сохраняться квазиволновой вектор

$$\Delta k + \Delta k_2 = 0 \quad (20)$$

Первый интеграл в выражении (18) вычисляется аналитически, и с учетом условий (19) и (20) получаем

$$I(\Delta \alpha_1, \Delta \alpha_2, \Delta n_1, \Delta n_2) = \frac{\delta_{\Delta \alpha_1 + \Delta \alpha_2, \Delta n_1 + \Delta n_2}}{L^2 \sqrt{\left(\frac{\Delta \alpha_{x2}}{a} + \frac{\Delta n_{x2}}{L} \right)^2 + \left(\frac{\Delta \alpha_{y2}}{a} + \frac{\Delta n_{y2}}{L} \right)^2}} \quad (21)$$

Если размер анализируемой области много больше постоянной решетки $L \gg a$, основной вклад в матричные элементы будут вносить слагаемые вида (21) с $\Delta \alpha = 0$. Тогда, пренебрегая зависимостью коэффициентов разложения в выражении (16) от волнового вектора и учитывая ортонормированность волновых функций для недиагонального матричного элемента (15), приближенно получаем

$$H_{\mu} \approx - \frac{e^2 \delta_{\vec{n}_\mu, \vec{n}'_\mu + \vec{n}_\mu}}{4\pi\epsilon L \sqrt{(n_x - n'_x)^2 + (n_y - n'_y)^2}} \quad (22)$$

Диагональные элементы (14) с теми же допущениями записываются как

$$\hat{H}_{mm} = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[- \left(\frac{2\pi n_m^x}{L} \right)^2 + \left(\frac{2\pi n_m^y}{L} \right)^2 \right] \quad (23)$$

где для определенности считается $E_0 = E + E = 0$. Заметим, что в силу условия (20) равны нулю все недиагональные матричные элементы для многочастичных волновых функций, отличающихся только одним одноэлектронным состоянием.

Как известно, задача на собственные значения с матричными элементами (22) и (23) в неограниченном пространстве допускает аналитическое решение и эквивалентна нахождению энергий состояний водородоподобного атома. В этом случае гамильтониан электронно-

лырочной системы с равным нулю полным импульсом представляется в виде

$$\hat{H}^2 = \frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m_c} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon r} \quad (24)$$

где $\frac{1}{m_c} = \left(\frac{1}{m_c} + \frac{1}{m_v} \right)$. Волновые функции могут быть представлены в виде произведения радиальной и угловой функций $\Phi_{nm} = R_{nm}(r) \exp(im\phi)$, $n=1, 2, \dots$, $m=0, \pm 1, \dots, \pm(n-1)$. Энергии локализованных состояний оказываются равными

$$\bar{E}_{nm} = \frac{m_c}{m_c \epsilon (n - \frac{1}{2})^2} \bar{E}_n \quad \text{при} \quad \bar{E}_n = \frac{m_0 e^4}{2\hbar^2 \epsilon_0} = 13.6 \text{ эВ} \quad (25)$$

На рис. 1 и 2 представлены результаты расчетов экситонных состояний в квадратной области, размер которой $L = 200$ нм более чем на порядок превышает характерный радиус основного экситонного состояния для неограниченного пространства $a_1 = 12$ нм. Поэтому волновым функциям начальных состояний для ограниченной области можно поставить в однозначное соответствие определенные волновые функции для неограниченной области. Как видно из рис. 3, энергии начальных состояний в зависимости от размерности используемого базиса монотонно уменьшаются. Предельные значения энергий, найденные путем экстраполяции зависимостей $E(N)$ экспоненциальными функциями, несколько отличаются от энергий экситонных состояний для неограниченного пространства, что может быть объяснено влиянием граничных условий. Характерный параметр экстраполяции N_{eff} для энергии основного состояния порядка 10, что соответствует размерности экситонного базиса двумерной системы порядка 1000. Что касается энергий вышележащих состояний, то по сравнению с основным состоянием их сходимость оказывается лучше.

Таким образом, для получения удовлетворительных численных результатов многочастичных систем размерность одноэлектронного базиса по каждому координатному направлению должна превышать несколько десятков. Проведенные численные расчеты показали, что при анализе экситонных состояний основным препятствием на пути увеличения числа базисных векторов выступает время вычисления собственных значений матриц большой размерности. Дальнейшее

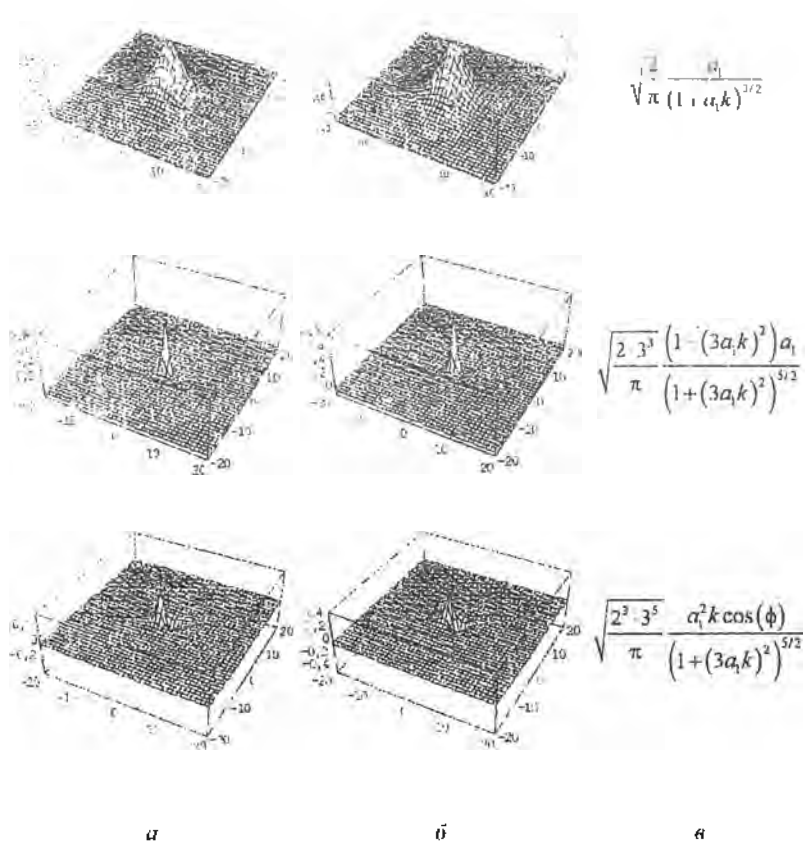


Рис. 1 Начальные волновые функции в пространстве волновых векторов (а), рассчитанные в области 200×200 нм, в неограниченном пространстве (б) и их аналитический вид (в)

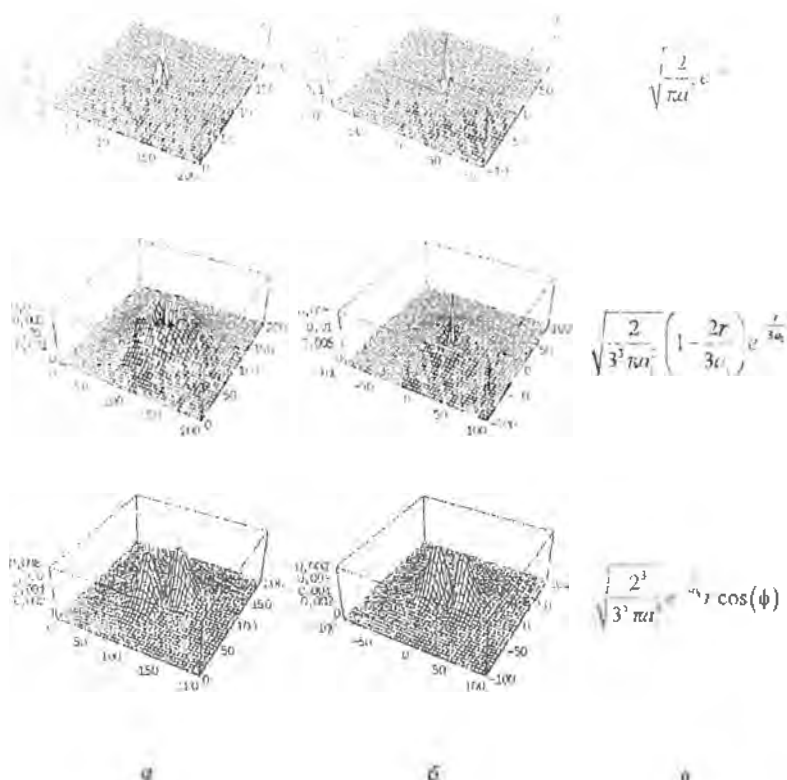


Рис. 2. Начальные волювые функции в координатном пространстве (а), рассчитанные в области 200х200 нм, в неограниченном пространстве (б) и их аналитический вид (в)

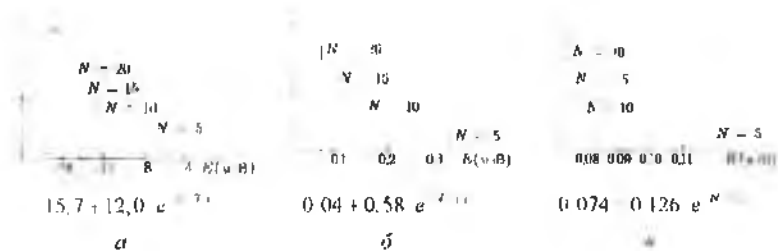


Рис. 3. Рассчитанная энергия начальных волновых функций Φ_{10} (а), Φ_{20} (б) и Φ_{11} (в) при разной размерности пространства базисных векторов N $L = 200$ нм. Под графиками приведены значения выражения, аппроксимирующие зависимость энергии от размерности базиса по формуле

$$E(N) = E_{\infty} + \Delta E \exp(-N/N_{\text{ср}})$$

увеличение размерности используемого базиса, не приводящее к росту размерности матриц в вычислениях собственных значений, ожидается осуществить путем применения теории групп

Литература

1. Блиссев П. Г., Акимова И. В. Излучение квантово-размерных структур InGaAs. I. Спектры спонтанного излучения // ФТП. 1998. Т. 32, № 4. С. 472-477.
2. Блиссев П. Г., Акимова И. В. Излучение квантово-размерных структур InGaAs. II. Форм-фактор однородного уширения // ФТП. 1998. Т. 32, № 4. С. 477-483.
3. Маделунг О. Теория твердого тела. М.: Наука, 1980. 414 с.