УДК 539.23; 539.216.1; 537.311.322

ТЕРМЫ ОДНОМЕРНОГО МОЛЕКУЛЯРНОГО ИОНА D_2^- В ПРОДОЛЬНОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

В. Ч. Жуковский, В. Д. Кревчик*), А. А. Марко*), М. Б. Семенов*), А. Б. Грунин*)

(*кафедра теоретической физики*)

E-mail: zhukovsk@phys.msu.su

В рамках модели потенциала нулевого радиуса рассмотрена задача о связанных состояниях электрона в поле двух D^0-центров (двухцентровая задача) в полупроводниковой квантовой нити с параболическим потенциалом конфайнмента при наличии продольного магнитного поля. Получены уравнения, описывающие g- и u-термы, соответствующие симметричным и антисимметричным состояниям электрона, локализованного на D_2^--центре. Исследована зависимость термов от величины магнитного поля в квантовой нити с параболическим потенциалом конфайнмента.

Как показывают эксперименты [1], в низкоразмерных системах при определенных условиях возможны реакции типа $D^0 + e \to D^-$, в результате которых нейтральные мелкие доноры связывают дополнительный электрон с образованием популяции так называемых D^--состояний. Такие состояния, ограниченные потенциалом конфайнмента, открывают новые возможности для изучения корреляционных эффектов в низкоразмерных системах [1]. В настоящей работе рассмотрена ситуация, когда не все D^0-позиции могут эффективно заполняться электронным переносом из барьера. В этом случае в зависимости от расстояния R между D^0-центрами возможно образование отрицательного молекулярного иона D_2^-. Следует отметить, что система, состоящая из слабосвязанного электрона в поле двух одинаковых потенциальных центров, встречается также и в щелочно-галоидных кристаллах [2]. Это так называемый M^--центр окраски, который представляет собой электрон в поле нейтрального M-центра (два рядом расположенных F-центра). Как известно [3, 4], D^--центр является простейшей системой, которая может моделироваться электроном в поле потенциала нулевого радиуса. Ранее [5, 6] нами было показано, что метод потенциала нулевого радиуса позволяет получить аналитическое решение для волновой функции и энергии связи локализованного на D^0-центре электрона, а также исследовать примесное магнитопоглощение света в квантовой нити (КН) с параболическим потенциалом конфайнмента. Моделирование отрицательного молекулярного иона D_2^- и исследование его магнитооптических свойств в КН представляет отдельный интерес. Так как D_2^--система является симметричной относительно ее центра, состояния электрона при фиксированном расстоянии R между D^0-центрами должны быть либо симметричными (g-термы), либо антисимметричными (u-термы). Очевидно, что расщепление g- и u-термов (вырожденных при больших R) будет определяться величиной R и как следствие понижения размерности параметрами КН. С другой стороны, приложенное вдоль оси КН магнитное поле играет роль варьируемого параметра, посредством которого можно изменять геометрический конфайнмент системы и, следовательно, управлять как величиной расщепления, так и энергиями оптических переходов [6].

Цель настоящей работы состоит в том, чтобы в рамках модели потенциала нулевого радиуса проследить за эволюцией термов с изменением величины продольного магнитного поля.

Предполагается, что КН имеет форму круглого цилиндра, радиус основания L которого значительно меньше его длины L_z ($L \ll L_z$). Для описания одноэлектронных состояний в КН используется параболический потенциал конфайнмента:

$$V(\rho) = \frac{m^*}{2}\omega_0^2\rho^2, \tag{1}$$

где $\rho \leqslant L$; ρ, ϕ, z — цилиндрические координаты; m^* — эффективная масса электрона; ω_0 — характерная частота удерживающего потенциала КН.

Векторный потенциал продольного по отношению к оси КН магнитного поля $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ выбирается в симметричной калибровке так, что $\mathbf{A} = (-yB/2,\, xB/2,\, 0)$. Для не возмущенных примесями одноэлектронных состояний в продольном магнитном поле [6] гамильтониан в выбранной модели (в цилиндрической системе координат) имеет вид

$$\begin{gathered}\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m^*}\left(\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial}{\partial\rho}\right) + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right) - \\ -\frac{i\hbar\omega_B}{2}\frac{\partial}{\partial\phi} + \frac{m^*}{2}\left(\omega_0^2 + \frac{\omega_B^2}{4}\right)\rho^2 + \hat{H}_z,\end{gathered} \tag{2}$$

где $\omega_B = |e|B/m^*$ — циклотронная частота; e — заряд электрона; $\hat{H}_z = \left(-\hbar^2/(2m^*)\right)\partial^2/\partial z^2$.

*) Кафедра физики Пензенского государственного университета, physics@diamond.stup.ac.ru.

Тогда спектр гамильтониана (2) запишется как [7]

$$E_{n,m,k}=\frac{\hbar\omega_B m}{2}+\hbar\omega_0\sqrt{1+\frac{\omega_B^2}{4\omega_0^2}}\left(2n+|m|+1\right)+\frac{\hbar^2k^2}{2m^*}, \tag{3}$$

$$\Psi_{n,m,k}\left(\rho,\phi,z\right)=\frac{1}{2\pi a_1}\left[\frac{n!}{(n+|m|)!}\right]^{1/2}\left(\frac{\rho^2}{2a_1^2}\right)^{|m|/2}\times \times\exp\left(-\frac{\rho^2}{4a_1^2}\right)L_n^{|m|}\left(\frac{\rho^2}{2a_1^2}\right)\exp\left(im\phi\right)\exp\left(ikz\right), \tag{4}$$

где $n=0,1,2,\ldots$ — квантовое число, соответствующее уровням Ландау; $m=0,\pm1,\pm2,\ldots$ — магнитное квантовое число; k — проекция квазиволнового вектора электрона в КН на ось OZ; $a_1^2=a^2/\left(2\sqrt{1+a^4/\left(4a_B^4\right)}\right)$; $a=\sqrt{\hbar/\left(m^*\omega_0\right)}$; $a_B=\sqrt{\hbar/\left(m^*\omega_B\right)}$ — магнитная длина; $L_n^s\left(x\right)$ — полиномы Лагерра [8].

Следует отметить, что в использованном здесь приближении амплитуда потенциала КН U_0 является эмпирическим параметром и, следовательно, выражения (3) и (4) справедливы, когда $U_0\sqrt{1+\omega_B^2/\left(4\omega_0^2\right)}/\left(\hbar\omega_0\right)\gg1$, где $U_0=m^*\omega_0^2L^2/2$.

Двухцентровой потенциал моделируется суперпозицией потенциалов нулевого радиуса мощностью $\gamma_i=2\pi\hbar^2/\left(\alpha_i m^*\right)$, $i=1,2$:

$$V_\delta\left(\mathbf{r},\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2\right)=\sum_{i=1}^{2}\gamma_i\delta\left(\mathbf{r}-\mathbf{R}_i\right)\left[1+\left(\mathbf{r}-\mathbf{R}_i\right)\nabla_{\mathbf{r}}\right], \tag{5}$$

где $\mathbf{R}_i=\left(\rho_i,\phi_i,z_i\right)$ — координаты D^0-центров; α_i определяется энергией E_i электронного локализованного состояния на этих же D^--центрах в массивном полупроводнике.

Волновая функция электрона $\Psi_\lambda\left(\mathbf{r},\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2\right)$, локализованного на D_2^--центре, удовлетворяет уравнению Липпмана–Швингера для связанного состояния:

$$\Psi_\lambda\left(\mathbf{r},\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2\right)=\int d\mathbf{r}_1\,G\left(\mathbf{r},\mathbf{r}_1;E_\lambda\right)\times \times V_\delta\left(\mathbf{r}_1,\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2\right)\Psi_\lambda\left(\mathbf{r}_1,\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2\right), \tag{6}$$

где $G\left(\mathbf{r},\mathbf{r}_1;E_\lambda\right)$ — одноэлектронная функция Грина, соответствующая источнику в точке $\mathbf{r}_1$, и энергии $E_\lambda=-\hbar^2\lambda^2/\left(2m^*\right)$ (E_λ — энергия связанного состояния электрона в поле D^0-центров при наличии продольного магнитного поля, отсчитываемая от дна двумерной осцилляторной ямы):

$$G\left(\mathbf{r},\mathbf{r}_1;E_\lambda\right)=\int_{-\infty}^{\infty}d\left(\frac{kL}{2\pi}\right)\sum_{n,m}\frac{\Psi^*_{n,m,k}\left(\mathbf{r}_1\right)\Psi_{n,m,k}\left(\mathbf{r}\right)}{E_\lambda-E_{n,m,k}}. \tag{7}$$

Подставляя (5) в (6), получим

$$\Psi_\lambda\left(\mathbf{r},\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2\right)= =\gamma_1G\left(\mathbf{r},\mathbf{R}_1;E_\lambda\right)\left(\hat{T}_1\Psi_\lambda\right)\left(\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2\right)+ +\gamma_2G\left(\mathbf{r},\mathbf{R}_2;E_\lambda\right)\left(\hat{T}_2\Psi_\lambda\right)\left(\mathbf{R}_2,\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2\right), \tag{8}$$

где

$$\hat{T}_i=\lim_{\mathbf{r}\to\mathbf{R}_i}\left[1+\left(\mathbf{r}-\mathbf{R}_i\right)\nabla_{\mathbf{r}}\right]. \tag{9}$$

Применяя последовательно операцию (9) к обеим частям соотношения (8), получим систему алгебраических уравнений вида

$$\begin{cases}c_1=\gamma_1a_{11}c_1+\gamma_2a_{12}c_2,\\ c_2=\gamma_1a_{21}c_1+\gamma_2a_{22}c_2.\end{cases} \tag{10}$$

Здесь

$$c_1=\left(\hat{T}_1\Psi_\lambda\right)\left(\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2\right);$$
$$c_2=\left(\hat{T}_2\Psi_\lambda\right)\left(\mathbf{R}_2,\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2\right);$$
$$a_{i,j}=\left(\hat{T}_i\Psi_\lambda\right)\left(\mathbf{R}_i,\mathbf{R}_j;E_\lambda\right),\quad i,j=1,2.$$

Исключая из системы (10) коэффициенты c_i, содержащие неизвестную функцию, получим уравнение, определяющее зависимость энергии связанного состояния E_λ электрона на D_2^--центре от координат D^0-центров, параметров КН и величины магнитного поля:

$$\gamma_1a_{11}+\gamma_2a_{22}-1=\gamma_1\gamma_2\left(a_{11}a_{22}-a_{12}a_{21}\right). \tag{11}$$

В случае, когда $\gamma_1=\gamma_2=\gamma$, уравнение (11) распадается на два уравнения, определяющие симметричное (g-терм) и антисимметричное (u-терм) состояния электрона соответственно:

$$\gamma a_{11}=1-\gamma a_{12}\quad\left(c_1=c_2\right), \tag{12}$$

$$\gamma a_{11}=1+\gamma a_{12}\quad\left(c_1=-c_2\right). \tag{13}$$

Учитывая явный вид одноэлектронной функции Грина в цилиндрической системе координат [5]

$$G\left(\rho,\phi,z,\rho_i,\phi_i,z_i;E_\lambda\right)=-\hbar^2\left(2^3\pi^{3/2}E_da_d^3m^*\beta^{1/2}\right)^{-1}\times \times\left\{\int_0^\infty\frac{1}{\sqrt{t}}\exp\left[-\left(\left(\beta\eta^2+w\right)t+\frac{\left(z-z_i\right)^2}{4\beta a_d^2t}\right)\right]\times \times2w\left(1-\exp(-2wt)\right)^{-1}\times \times\exp\left[-\frac{\left(\rho_i^2-\rho^2\right)w(1+\exp(-2wt))}{4\beta a_d^2(1-\exp(-2wt))}\right]\times \times\exp\left[\frac{1}{2}\left(\exp\left[i(\phi-\phi_i)-\beta a^{*-2}t\right]+ +\exp\left[-i(\phi-\phi_i)+\beta a^{*-2}t\right]\right)\frac{\rho_i\rho w\exp(-wt)}{\beta a_d^2(1-\exp(-2wt))}-\right.$$

$$-\frac{1}{t}\exp\left[-\frac{(\rho-\rho_i)^2 w}{4\beta a_d^2 t}\right]\Bigg]dt+$$
$$+2\sqrt{\pi\beta}\,a_d\left[(\rho-\rho_i)^2 w+(z-z_i)^2\right]^{-1/2}\times \tag{14}$$
$$\times\exp\left[-\sqrt{\frac{(\beta\eta^2+w)\,(\rho-\rho_i)^2 w+(z-z_i)^2}{\beta a_d^2}}\right]\Bigg\}$$

и принимая во внимание, что D^0-центры расположены на оси КН $\mathbf{R}_i=(0,0,z_i)$, уравнения (12) и (13) можно представить в следующем виде:

$$\frac{1}{\sqrt{\pi\beta}}\int\limits_0^\infty\frac{dt}{\sqrt{t}}\exp\left[-\left(\beta\eta^2+w\right)t\right]\times$$
$$\times\left[\frac{1}{t}-2w(1-\exp(-2wt))^{-1}\right]\times \tag{15}$$
$$\times\left(1\pm\exp\left(-\frac{R_{12}^*}{4\beta t}\right)\right)+2\sqrt{\eta^2+\beta^{-1}w}-2\eta_i=$$
$$=\pm\frac{2\sqrt{\pi\beta}}{R_{12}^*}\exp\left[-R_{12}^*\sqrt{\frac{\beta\eta^2+w}{\beta}}\right],$$

где знак «+» относится к симметричным (g-терм), а знак «−» — к антисимметричным (u-терм) состояниям;

$$\eta^2=|E_\lambda|/E_d;\quad \beta=L^*/\left(4\sqrt{U_0}\right);\quad L^*=2L/a_d;$$

$$U_0^*=U_0/E_d;\quad \eta_i^2=|E_i|/E_d;\quad w=\sqrt{1+\beta^2 a*^{-4}};$$

$$R_{12}^*=R_{12}/a_d;\quad R_{12}=|z_1-z_2|;$$

$a^*=a_B/a_d$; a_d и E_d — эффективный боровский радиус и эффективная боровская энергия соответственно.

Зависимость термов от величины магнитного поля B в КН на основе InSb, полученная с помощью уравнения (15), показана на рис. 1 для случая $E_\lambda<0$.

При этом было учтено, что из-за наличия квантового размерного эффекта энергию связи локализованного на D_2^--центре электрона $E_\lambda^{(QW)}$ в КН необходимо определить как [5]

$$E_\lambda^{(QW)}=\begin{cases}E_{0,0}+|E_\lambda|, & E_\lambda<0,\\ E_{0,0}-|E_\lambda|, & E_\lambda>0,\end{cases} \tag{16}$$

где $E_{0,0}=\hbar\omega_0\sqrt{1+\omega_B^2/\left(4\omega_0^2\right)}$.

Из рис. 1 видно, что в случае g-терма (кривая *1*) $|E_\lambda^{(QW)}|\to\infty$ при $R_{12}^*\to 0$, т. е. наблюдается своеобразное «падение на центр» [2]. Напротив, у состояния с меньшей энергией связи (u-терм) (кривая *2*) $|E_\lambda^{(QW)}|$ уменьшается при $R_{12}^*\to 0$. Таким образом, с уменьшением R_{12}^* возникает расщепление между вырожденными при $R_{12}^*\geqslant 1$ g- и u-термами.

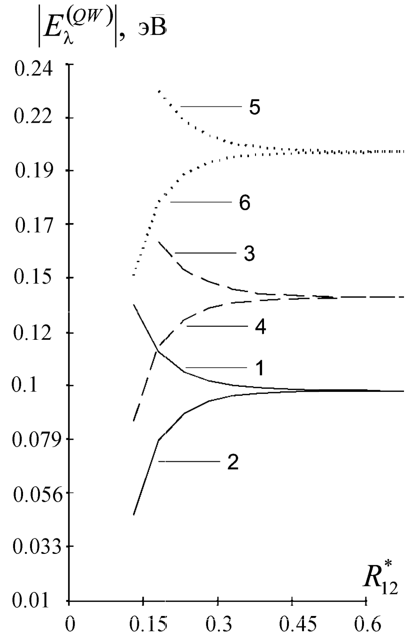

Рис. 1. Зависимость энергии связи электрона от расстояния между D^0-центрами при $L=65$ нм, $U_0=0.1$ эВ, $E_l=0.01$ эВ: *1* — g-терм, $B=0$; *2* — u-терм, $B=0$; *3* — g-терм, $B=10$ Тл; *4* — u-терм, $B=10$ Тл; *5* — g-терм, $B=20$ Тл; *6* — u-терм, $B=20$ Тл

На рис. 1 видна также эволюция g- и u-термов с изменением величины магнитного поля (ср. кривые *1, 2* и *5, 6*): с ростом величины магнитного поля энергия связи D_2^--центра возрастает, причем условия существования g-состояния становятся более жесткими (ср. кривые *1* и *5*). На рис. 2 приведена зависимость расщепления $|E_{\lambda g}-E_{\lambda u}|$ между g- и u-термами от величины магнитного поля. Наличие чувствительности расщепления к магнитному полю важно для экспериментального изучения структуры полосы поглощения, возникающей из-за электронных переходов между g- и u-состояниями D_2^--центра. Магнитное поле оказывает, таким образом, стабилизирующее действие на D_2^--состояния в КН. Возможность управления энергиями оптических переходов в магнитном поле представляет интерес для технологии лазерных структур, а также фотоприемников с управляемой чувствительностью в области примесного поглощения света.

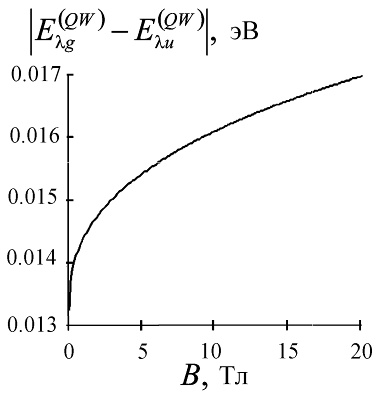

Рис. 2. Зависимость расщепления между g- и u-термами от величины магнитного поля при $L=65$ нм, $U_0=0.1$ эВ, $E_l=0.01$ эВ, $R_{12}^*=0.25$

Литература

1. *Huant S., Najda S.P.* // Phys. Rev. Lett. 1990. **65**, N 12. P. 1486.
2. *Демков Ю.Н., Островский В.Н.* Метод потенциалов нулевого радиуса в атомной физике. Л., 1975.
3. *Пахомов А.А., Халинов К.В., Яссиевич И.Н.* // ФТП. 1996. **30**, №8. С. 1387.
4. *Кревчик В.Д., Зайцев Р.В.* // ФТП. 2000. **34**, №10. С. 1244.
5. *Кревчик В.Д., Грунин А.Б.* // ФТТ. 2003. **45**, №7. С. 142.
6. *Krevchik V.D., Grunin A.B., Aringazin A.K.* et al. // Hadronic J. 2003. **26**, N 1. P. 31.
7. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика (нерелятивистская теория). М., 1989.
8. *Бейтмен Г., Эрдейи А.* Высшие трансцендентные функции. Т. 1, 2. М., 1973.

Поступила в редакцию
19.01.04