

В. Д. Кревчик, А. В. Разумов, В. А. Гришанова

МОДЕЛЬ ПОЛИМЕРНОЙ МОЛЕКУЛЫ В КВАНТОВОЙ ПРОВОЛОКЕ ПРИ НАЛИЧИИ ВНЕШНЕГО ПРОДОЛЬНОГО МАГНИТНОГО ПОЛЯ

Аннотация. Рассмотрен обобщенный вариант модели Кронига – Пенни для полимерной молекулы в виде регулярной цепочки D^0 -центров в квантовой проволоке, моделируемых потенциалами нулевого радиуса. Получены уравнения, определяющие границы примесной зоны. Показана возможность управления шириной примесной зоны и эффективной массой локализованного электрона путем варьирования величины внешнего магнитного поля.

Ключевые слова: квантовая проволока, регулярная цепочка D^0 -центров, примесная зона, эффективная масса электрона в примесной зоне.

Abstract. The generalized model of Kronig – Penny for polymer molecule as regular chain of D^0 -centers in quantum wire, simulated by zero-range potentials, has been considered. Equations, which determine limits of impure zone, have been obtained. Possibility to control the impure zone width and the localized electron effective mass by variation of external magnetic field value, has been also demonstrated.

Keywords: quantum wire, regular chain of D^0 -centers impure zone, effective mass of electron in impure zone.

Введение

Развитие полупроводниковой наноэлектроники стимулировало интерес к исследованию примесных центров молекулярного типа в структурах с пониженной размерностью в условиях внешнего магнитного поля [1–6]. Наложение размерного и магнитного квантования дает новые возможности для управления термами примесных молекулярных состояний, при этом важную роль начинают играть расстояние между примесными атомами и пространственная конфигурация примесной молекулы в объеме наноструктуры [7]. В случае D^- -, D_2^- - и D_3^- -центров удовлетворительной моделью для описания локализованных электронных состояний является модель потенциала нулевого радиуса [7], которая позволяет получить аналитическое решение для волновой функции связанного электрона, а также дисперсионные уравнения для определения энергии связи (D^- -состояние), либо термов примесных молекулярных ионов (D_2^- - и D_3^- -состояния) в наноструктурах. Во всех упомянутых выше применениях метода изучалось движение электрона в поле конечного числа потенциалов нулевого радиуса во внешнем магнитном поле: в параболической квантовой яме [4], в квантовой проволоке (КП) [3], в квантовой точке [8].

В данной работе рассматривается случай бесконечного числа потенциальных ям в КП (модель полимерной молекулы), когда дополнительно возникает математическая задача о вычислении бесконечных сумм по всем примесным центрам. Следует отметить, что вычисление сумм облегчается в том физически важном случае, когда одинаковые потенциальные ямы нулевого

радиуса расположены регулярно и образуют периодическую структуру типа кристалла [9]. Подобные системы могут рассматриваться как обобщение известной модели Кронига – Пенни [10], в которой исследуется движение электрона в поле одномерной периодической цепочки в одномерном пространстве.

Цель настоящей работы заключается в теоретическом исследовании динамики эффективной массы и примесной зоны, образованной локализованными состояниями электрона в поле регулярной цепочки D^0 -центров, расположенных вдоль оси КП, с изменением величины внешнего магнитного поля и параметров структуры.

Для описания одноэлектронных состояний в КП использовался симметричный потенциал конфайнмента вида

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

где $\rho \leq L$; m^* – эффективная масса электрона; ω_0 – характерная частота удерживающего потенциала КП; L – радиус КП.

КП находится в продольном по отношению к ее оси магнитном поле с вектором магнитной индукции $\vec{B} = (0, 0, B)$. Векторный потенциал магнитного поля $\vec{A}(\vec{r})$ выбран в симметричной калибровке $\vec{A} = [\vec{B}, \vec{r}]/2$ так, что $\vec{A} = (-yB/2, xB/2, 0)$.

Для невозмущенных примесями одноэлектронных состояний в продольном магнитном поле гамильтониан в выбранной модели в цилиндрической системе координат имеет вид

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) - \frac{i \hbar \omega_B}{2} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{m^*}{2} \left(\omega_0^2 + \frac{\omega_B^2}{4} \right) \rho^2 + \mathbf{H}_z, \quad (2)$$

где $\omega_B = |e| \hbar B / m^*$ – циклотронная частота; $|e|$ – абсолютное значение заряда электрона; $\mathbf{H}_z = \left(-\hbar^2 / (2m^*) \right) \partial^2 / \partial z^2$.

Спектр гамильтониана (2) запишется как

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

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

где $n = 0, 1, 2, \dots$ – квантовое число, соответствующее уровням Ландау; $m = 0, 1, 2, \dots$ – магнитное квантовое число; k – проекция квазиволнового

вектора электрона в КП на ось Oz ; $a_1^2 = a^2 / \left(2\sqrt{1 + a^4 / (4a_B^4)} \right)$;
 $a = \sqrt{\hbar / (m^* \omega_0)}$; $a_B = \sqrt{\hbar / (m^* \omega_B)}$ – магнитная длина; $L_n^c(x)$ – полиномы Лаггерра.

Регулярная цепочка D^0 -центров в КП моделируется суперпозицией потенциалов нулевого радиуса:

$$V_\delta(\rho, \varphi, z; 0, 0, pa_0) = \gamma \sum_{p=-\infty}^{+\infty} \delta(\rho) \delta(\varphi) \delta(z - pa_0) \left[1 + \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + (z - pa_0) \frac{\partial}{\partial z} \right], \quad (5)$$

где γ – мощность потенциала нулевого радиуса; a_0 – период цепочки D^0 -центров в КП.

В разд. 1 в рамках обобщенного варианта модели Кронига – Пенни для полимерной молекулы в КП в виде регулярной цепочки потенциальных ям нулевого радиуса проводится расчет примесной зоны. Исследуется зависимость ширины примесной зоны от величины внешнего магнитного поля и параметров структуры. В разд. 2 рассчитывается эффективная масса электрона в примесной зоне, а также первая зона Бриллюэна и рассматривается их динамика с изменением величины внешнего магнитного поля.

1. Уравнения, определяющие границы примесной зоны

Волновая функция $\Psi_{\lambda_B}^{(QW)}(\rho, \varphi, z)$ локализованного электрона удовлетворяет уравнению Шредингера:

$$\mathbf{H}_B^\delta \Psi_{\lambda_B}^{(QW)}(\rho, \varphi, z) = E_{\lambda_B} \Psi_{\lambda_B}^{(QW)}(\rho, \varphi, z), \quad (6)$$

где $E_\lambda = -\hbar^2 \lambda^2 / (2m^*)$ – собственные значения оператора Гамильтона

$$\mathbf{H}_B^\delta = \mathbf{H} + V_\delta(\rho, \varphi, z; 0, 0, pa_0).$$

С другой стороны, согласно теореме Блоха, волновая функция электрона, находящегося в поле регулярной цепочки D^0 -центров, будет иметь следующий вид:

$$\Psi_{\lambda_B}^{(QW)}(\rho, \varphi, z) = \sum_{p=-\infty}^{+\infty} \exp(iqpa_0) \Psi_{\lambda_B}^{(QW)}(\rho, \varphi, z, 0, 0, pa_0), \quad (7)$$

здесь q – квазиимпульс электрона в КП; $\Psi_{\lambda_B}^{(QW)}(\rho, \varphi, z, 0, 0, pa_0)$ – одноцентровые волновые функции.

Используем уравнение Липпмана – Швингера для связанных состояний электрона в поле регулярной цепочки D^0 -центров:

$$\Psi_{\lambda_B}^{(QW)}(\rho, \varphi, z) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^{+\infty} \rho_1 d\rho_1 d\varphi_1 dz_1 G(\rho, \varphi, z, \rho_1, \varphi_1, z_1; E_\lambda) \times$$

$$\times V_8(\rho_1, \varphi_1, z_1; 0, 0, pa_0) \Psi_{\lambda_B}^{(QW)}(\rho_1, \varphi_1, z_1), \quad (8)$$

где $G(\rho, \varphi, z, \rho_1, \varphi_1, z_1; E_\lambda)$ – одноэлектронная функция Грина к уравнению Шредингера (6),

$$G(\rho, \varphi, z; 0, 0, pa_0; E_{\lambda_B}) = -\frac{1}{2^2 \pi^2 E_d a_d^3 \sqrt{\beta}} \left(\int_0^{+\infty} \frac{1}{\sqrt{t}} \exp[-(\beta \eta^2 + w)t] \times \right. \\ \times \exp\left(-\frac{(z - pa_0)^2}{4\beta a_d^2 t}\right) \left[2w(1 - \exp[-2wt])^{-1} \exp\left(-\frac{\exp[-2wt]\rho^2}{2a_1^2(1 - \exp[-2wt])}\right) - \right. \\ \left. - \frac{1}{t} \exp\left(-\frac{\rho^2 w}{4\beta a_d^2 t}\right) \right] dt + 2\sqrt{\pi\beta} a_d \frac{\exp\left[-\sqrt{\frac{(\beta \eta^2 + w)(\rho^2 w + (z - pa_0)^2)}{\beta a_d^2}}\right]}{\sqrt{\rho^2 w + (z - pa_0)^2}} \left. \right), \quad (9)$$

где $\beta = E_d / (\hbar \omega_0) = L^* / (4\sqrt{U_0^*})$; $L^* = 2L / a_d$; $U_0^* = U_0 / E_d$; $\eta^2 = |E_\lambda| / E_d$; $w = \sqrt{1 + \beta^2 a^{*-4}}$; $a^* = a_B / a_d$; U_0 – амплитуда потенциала конфинмента КП; a_d и E_d – эффективный борковский радиус и эффективная борковская энергия соответственно; a_B – магнитная длина.

Приходим к суммам следующего вида:

$$\sum_{p=1}^{\infty} \frac{2 \exp(-pa_0^* \sqrt{\eta^2 + w\beta^{-1}})}{pa_0^*} \cos(qpa_0) = \frac{2(\cos qa_0 - 1) \exp(-a_0^* \sqrt{\eta_0^2 + w\beta^{-1}})}{a_0^* (1 - \exp[-a_0^* \sqrt{\eta_0^2 + w\beta^{-1}}])} + \\ + \frac{2}{a_0^*} \ln \left| 1 - \exp(-a_0^* \sqrt{\eta_0^2 + w\beta^{-1}}) \right|; \quad (10)$$

$$\sum_{p=1}^{\infty} \exp(-pa_0^* \sqrt{\eta^2 + w\beta^{-1}}) \cos(qpa_0) = \frac{\exp(-a_0^* \sqrt{\eta_0^2 + w\beta^{-1}})}{(1 - \exp[-a_0^* \sqrt{\eta_0^2 + w\beta^{-1}}])^2} \cos qa_0 -$$

$$-\frac{\exp\left(-2a_0^*\sqrt{\eta_0^2 + w\beta^{-1}}\right)}{\left(1 - \exp\left[-a_0^*\sqrt{\eta_0^2 + w\beta^{-1}}\right]\right)^2}. \quad (11)$$

С учетом соотношений (7)–(11), а также известной процедуры метода потенциала нулевого радиуса дисперсионное уравнение, определяющее зависимость энергии связанного состояния электрона, локализованного в поле регулярной цепочки D^0 -центров в КП, от величины внешнего магнитного поля и параметров структуры, как нетрудно показать, будет иметь следующий вид:

$$\begin{aligned} \eta_i = & \sqrt{\eta_0^2 + w\beta^{-1}} - \frac{w}{2\sqrt{\beta}}(\beta\eta_0^2 + w)^{-\frac{1}{2}} - \frac{2\exp\left(-a_0^*\sqrt{\eta_0^2 + w\beta^{-1}}\right)}{a_0^*\left(1 - \exp\left[-a_0^*\sqrt{\eta_0^2 + w\beta^{-1}}\right]\right)} \times \\ & \times (\cos qa_0 - 1) + \frac{2}{a_0^*} \ln \left| 1 - \exp\left(-a_0^*\sqrt{\eta_0^2 + w\beta^{-1}}\right) \right| - \frac{w}{2\sqrt{\beta}}(\beta\eta_0^2 + w)^{-\frac{1}{2}} \times \\ & \times \frac{\exp\left(-a_0^*\sqrt{\eta_0^2 + w\beta^{-1}}\right) \cos qa_0 - \exp\left(-2a_0^*\sqrt{\eta_0^2 + w\beta^{-1}}\right)}{\left(1 - \exp\left[-a_0^*\sqrt{\eta_0^2 + w\beta^{-1}}\right]\right)^2}, \quad (12) \end{aligned}$$

здесь $a_0^* = a_0/a_d$.

При $qa_0 = 0$ и $qa_0 = \pi$ уравнение (12) распадается на два уравнения, определяющие границы примесной зоны:

$$\begin{aligned} \eta_i = & \sqrt{\eta_0^2 + w\beta^{-1}} - \frac{w}{2\sqrt{\beta}}(\beta\eta_0^2 + w)^{-\frac{1}{2}} + \frac{2}{a_0^*} \ln \left| 1 - \exp\left(-a_0^*\sqrt{\eta_0^2 + w\beta^{-1}}\right) \right| - \\ & - \frac{w}{2\sqrt{\beta}}(\beta\eta_0^2 + w)^{-\frac{1}{2}} \frac{\exp\left(-a_0^*\sqrt{\eta_0^2 + w\beta^{-1}}\right) - \exp\left(-2a_0^*\sqrt{\eta_0^2 + w\beta^{-1}}\right)}{\left(1 - \exp\left[-a_0^*\sqrt{\eta_0^2 + w\beta^{-1}}\right]\right)^2}; \quad (13) \\ \eta_i = & \sqrt{\eta_0^2 + w\beta^{-1}} - \frac{w}{2\sqrt{\beta}}(\beta\eta_0^2 + w)^{-\frac{1}{2}} + \frac{2\exp\left(-a_0^*\sqrt{\eta_0^2 + w\beta^{-1}}\right)}{a_0^*\left(1 - \exp\left[-a_0^*\sqrt{\eta_0^2 + w\beta^{-1}}\right]\right)} + \\ & + \frac{2}{a_0^*} \ln \left| 1 - \exp\left(-a_0^*\sqrt{\eta_0^2 + w\beta^{-1}}\right) \right| + \frac{w}{2\sqrt{\beta}}(\beta\eta_0^2 + w)^{-\frac{1}{2}} \times \end{aligned}$$

$$\times \frac{\exp\left(-a_0^* \sqrt{\eta_0^2 + \eta \beta^{-1}}\right) + \exp\left(-2a_0^* \sqrt{\eta_0^2 + \eta \beta^{-1}}\right)}{\left(1 - \exp\left[-a_0^* \sqrt{\eta_0^2 + \eta \beta^{-1}}\right]\right)^2}. \quad (14)$$

На рис. 1 представлена зависимость ширины примесной зоны $\Delta\epsilon$ в КП на основе InSb от величины внешнего магнитного поля B для различных значений периода цепочки a_0^* , нормированного на эффективный боровский радиус. Видно, что с ростом величины B ширина примесной зоны уменьшается, что связано с уменьшением степени перекрытия одноцентровых волновых функций. Аналогичная ситуация имеет место с ростом периода регулярной цепочки (ср. кривые 2 и 1 на рис. 1).

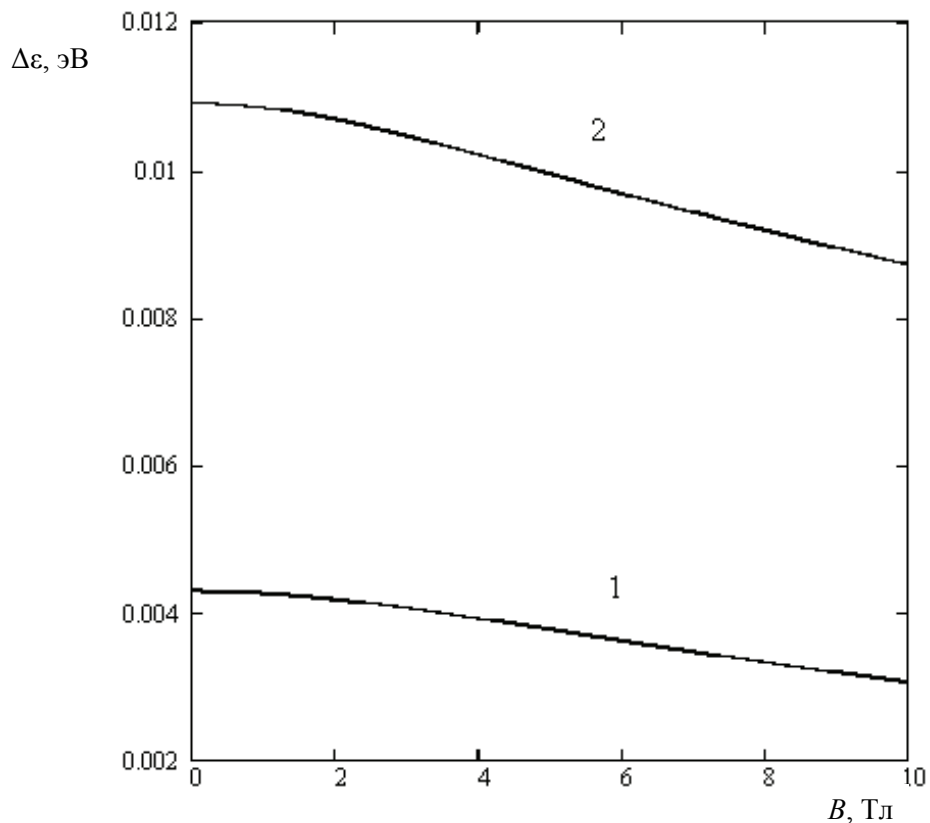


Рис. 1. Зависимость ширины примесной зоны в КП на основе InSb от величины внешнего магнитного поля B при $U_0 = 0,3$ эВ, $E_i = 5 \cdot 10^{-3}$ эВ, $L = 70$ нм: 1 – $a_0 = 35$ нм, 2 – $a_0 = 28$ нм

2. Эффективная масса электрона в примесной зоне

Используя уравнение (12), можно получить в рамках рассматриваемой модели выражение для эффективной массы m_i^* электрона в поле одномерной цепочки D^0 -центров:

$$m_i^* = -\frac{\hbar^2}{E_d} \left(\frac{\partial^2(\eta^2)}{\partial q^2} \right)^{-1} \bigg|_{q=0}. \quad (15)$$

Дифференцируя η^2 по q как неявно заданную функцию, получим

$$m_i^* = \frac{\hbar^2}{E_d} \left(\frac{\partial F}{\partial(\eta^2)} \right)^3 \times \\ \times \left[\left(\frac{\partial F}{\partial(\eta^2)} \right)^2 \frac{\partial^2 F}{\partial q^2} - 2 \frac{\partial F}{\partial(\eta^2)} \frac{\partial F}{\partial q} \frac{\partial^2 F}{\partial(\eta^2) \partial q} + \left(\frac{\partial F}{\partial q} \right)^2 \frac{\partial^2 F}{\partial(\eta^2)^2} \right]^{-1} \bigg|_{q=0}, \quad (16)$$

где

$$F = \sqrt{\eta^2 + w\beta^{-1}} - \frac{w}{2\sqrt{\beta}} (\beta\eta^2 + w)^{-\frac{1}{2}} - \frac{2 \exp\left(-a_0^* \sqrt{\eta^2 + w\beta^{-1}}\right)}{a_0^* \left(1 - \exp\left[-a_0^* \sqrt{\eta^2 + w\beta^{-1}}\right]\right)} \times \\ \times (\cos qa_0 - 1) + \frac{2}{a_0^*} \ln \left| 1 - \exp\left(-a_0^* \sqrt{\eta^2 + w\beta^{-1}}\right) \right| - \frac{w}{2\sqrt{\beta}} (\beta\eta^2 + w)^{-\frac{1}{2}} \times \\ \times \frac{\exp\left(-a_0^* \sqrt{\eta^2 + w\beta^{-1}}\right) \cos qa_0 - \exp\left(-2a_0^* \sqrt{\eta^2 + w\beta^{-1}}\right)}{\left(1 - \exp\left[-a_0^* \sqrt{\eta^2 + w\beta^{-1}}\right]\right)^2} - \eta_i. \quad (17)$$

Для производных в выражении (16) будем иметь

$$\frac{\partial F}{\partial q} = \frac{2a_d \exp\left(-a_0^* \sqrt{\eta^2 + w\beta^{-1}}\right)}{1 - \exp\left[-a_0^* \sqrt{\eta^2 + w\beta^{-1}}\right]} \times \\ \times \left(1 + \frac{wa_0^*}{4} \frac{(\eta^2 + w\beta^{-1})^{-\frac{1}{2}}}{\left(1 - \exp\left[-a_0^* \sqrt{\eta^2 + w\beta^{-1}}\right]\right)} \right) \sin(qa_0^* a_d); \quad (18) \\ \frac{\partial^2 F}{\partial q^2} = \frac{2a_d a_0^* \exp\left(-a_0^* \sqrt{\eta^2 + w\beta^{-1}}\right)}{1 - \exp\left[-a_0^* \sqrt{\eta^2 + w\beta^{-1}}\right]} \times$$

$$\times \left(1 + \frac{wa_0^*}{4} \frac{(\eta^2 + w\beta^{-1})^{-\frac{1}{2}}}{\left(1 - \exp \left[-a_0^* \sqrt{\eta^2 + w\beta^{-1}} \right] \right)} \right) \cos(qa_0^* a_d); \quad (19)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial(\eta^2)} = & \frac{1}{2} (\eta^2 + w\beta^{-1})^{-\frac{1}{2}} + \frac{w\sqrt{\beta}}{4} (\beta\eta^2 + w)^{-\frac{1}{2}} - (\eta^2 + w\beta^{-1})^{-\frac{1}{2}} \times \\ & \times \left[\frac{\exp(-a_0^* \sqrt{\eta^2 + w\beta^{-1}})}{\left(1 - \exp \left[-a_0^* \sqrt{\eta^2 + w\beta^{-1}} \right] \right)^2} (\cos(qa_0^* a_d) - 1) + \frac{\exp(-a_0^* \sqrt{\eta^2 + w\beta^{-1}})}{1 - \exp \left[-a_0^* \sqrt{\eta^2 + w\beta^{-1}} \right]} \right] + \\ & + \frac{w\sqrt{\beta}}{4} (\beta\eta^2 + w)^{-\frac{3}{2}} \frac{\exp(-a_0^* \sqrt{\eta^2 + w\beta^{-1}})}{\left(1 - \exp \left[-a_0^* \sqrt{\eta^2 + w\beta^{-1}} \right] \right)^2} + \frac{w\beta^{\frac{3}{2}} a_0^*}{4} (\beta\eta^2 + w)^{-1} \times \\ & \times \frac{1 + \exp(-a_0^* \sqrt{\eta^2 + w\beta^{-1}})}{\left(1 - \exp \left[-a_0^* \sqrt{\eta^2 + w\beta^{-1}} \right] \right)^3} \exp(-a_0^* \sqrt{\eta^2 + w\beta^{-1}}) (\cos(qa_0^* a_d) - 1); \quad (20) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 F}{\partial(\eta^2) \partial q} = & -a_0^* a_d (\eta^2 + w\beta^{-1})^{-\frac{1}{2}} \frac{\exp(-a_0^* \sqrt{\eta^2 + w\beta^{-1}})}{\left(1 - \exp \left[-a_0^* \sqrt{\eta^2 + w\beta^{-1}} \right] \right)^2} \sin(qa_0^* a_d) + \\ & + \frac{1}{4} a_0^{*2} w\beta^{\frac{3}{2}} a_d (\beta\eta^2 + w)^{-1} \exp(-a_0^* \sqrt{\eta^2 + w\beta^{-1}}) \times \\ & \times \frac{1 + \exp(-a_0^* \sqrt{\eta^2 + w\beta^{-1}})}{\left(1 - \exp \left[-a_0^* \sqrt{\eta^2 + w\beta^{-1}} \right] \right)^3} \sin(qa_0^* a_d); \quad (21) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 F}{\partial(\eta^2)^2} = & -\frac{1}{4} (\eta^2 + w\beta^{-1})^{-\frac{3}{2}} - \frac{3w\beta^{\frac{3}{2}}}{8} (\beta\eta^2 + w)^{-\frac{5}{2}} - \left[\frac{1}{2} + a_0^* (\eta^2 + w\beta^{-1})^{\frac{1}{2}} \frac{1}{2} + \right. \\ & \left. + \frac{3w\beta^{\frac{3}{2}} (\beta\eta^2 + w)^{-2}}{8 \left(1 - \exp \left[-a_0^* \sqrt{\eta^2 + w\beta^{-1}} \right] \right)} + \frac{w\sqrt{\beta}}{8} a_0^* (\beta\eta^2 + w)^{-\frac{1}{2}} \frac{3 - \exp(-a_0^* \sqrt{\eta^2 + w\beta^{-1}})}{\left(1 - \exp \left[-a_0^* \sqrt{\eta^2 + w\beta^{-1}} \right] \right)} \right] \times \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \times (\eta^2 + w\beta^{-1})^{-\frac{3}{2}} \frac{\exp\left(-a_0^* \sqrt{\eta^2 + w\beta^{-1}}\right)}{\left(1 - \exp\left[-a_0^* \sqrt{\eta^2 + w\beta^{-1}}\right]\right)} - \\
& - \left[\frac{w\beta^{\frac{5}{2}} a_0^*}{4} (\beta\eta^2 + w)^{-\frac{1}{2}} \frac{1 + \exp\left(-a_0^* \sqrt{\eta^2 + w\beta^{-1}}\right)}{\left(1 - \exp\left[-a_0^* \sqrt{\eta^2 + w\beta^{-1}}\right]\right)} + \right. \\
& + \frac{w\beta^{\frac{3}{2}} a_0^{*2}}{4} \frac{1 + \exp\left(-a_0^* \sqrt{\eta^2 + w\beta^{-1}}\right)}{\left(1 - \exp\left[-a_0^* \sqrt{\eta^2 + w\beta^{-1}}\right]\right)} + \frac{w\beta^{\frac{7}{2}} a_0^{*2}}{4} \frac{2 - \exp\left(-a_0^* \sqrt{\eta^2 + w\beta^{-1}}\right)}{\left(1 - \exp\left[-a_0^* \sqrt{\eta^2 + w\beta^{-1}}\right]\right)^2} + \\
& + \frac{a_0^*}{2} (\eta^2 + w\beta^{-1})^{\frac{1}{2}} \frac{3 - \exp\left(-a_0^* \sqrt{\eta^2 + w\beta^{-1}}\right)}{\left(1 - \exp\left[-a_0^* \sqrt{\eta^2 + w\beta^{-1}}\right]\right)} - \frac{1}{2} \left((\eta^2 + w\beta^{-1})^{-\frac{3}{2}} \times \right. \\
& \times \frac{\exp\left(-a_0^* \sqrt{\eta^2 + w\beta^{-1}}\right)}{\left(1 - \exp\left[-a_0^* \sqrt{\eta^2 + w\beta^{-1}}\right]\right)^2} \left. \left(\cos(qa_0^* a_d) - 1 \right) \right]. \quad (22)
\end{aligned}$$

Зависимость эффективной массы, нормированной на эффективную массу электрона в зоне проводимости КП, от периода цепочки a_0^* и величины внешнего магнитного поля приведена на рис. 2. Видно, что с ростом величины внешнего магнитного поля эффективная масса примесного электрона возрастает и, когда период регулярной цепочки становится больше эффективного борковского радиуса электрона, эффективная масса в примесной зоне становится равной эффективной массе электрона в зоне проводимости КП.

На рис. 3 представлена динамика первой зоны Бриллюэна с изменением периода регулярной цепочки D^0 -центров в КП. Можно видеть, что с ростом периода первая зона Бриллюэна вырождается в энергетический уровень.

Таким образом, в работе в рамках обобщенного варианта модели Кронига – Пенни для регулярной цепочки D^0 -центров в КП проведен расчет примесной зоны и исследована ее зависимость от величины внешнего магнитного поля и периода цепочки. Получена аналитическая формула для эффективной массы электрона в примесной зоне и выявлена ее достаточно сильная зависимость от периода регулярной цепочки D^0 -центров и величины внешнего магнитного поля. Возможность управления шириной примесной зоны и эффективной массой локализованного электрона открывает определенные перспективы для развития молекулярной электроники на основе отработанной технологии получения полупроводниковых наноструктур.

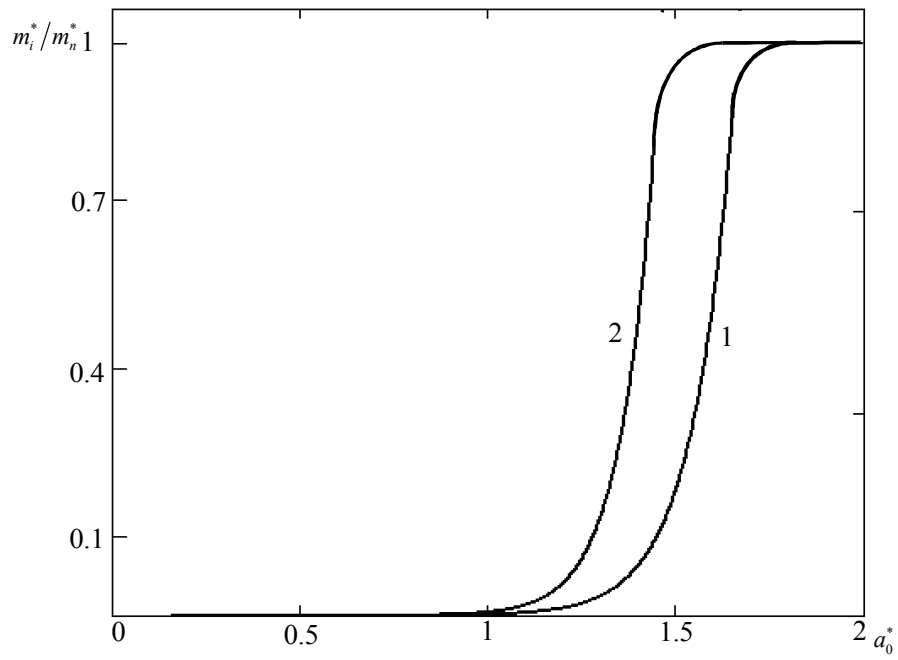


Рис. 2. Зависимость эффективной массы электрона в примесной зоне от периода цепочки D^0 -центров a_0^* в КП при $U_0 = 0,2$ эВ, $E_i = 7 \cdot 10^{-3}$ эВ, $L = 70$ нм: 1 – $B = 0$; 2 – $B = 10$ Тл

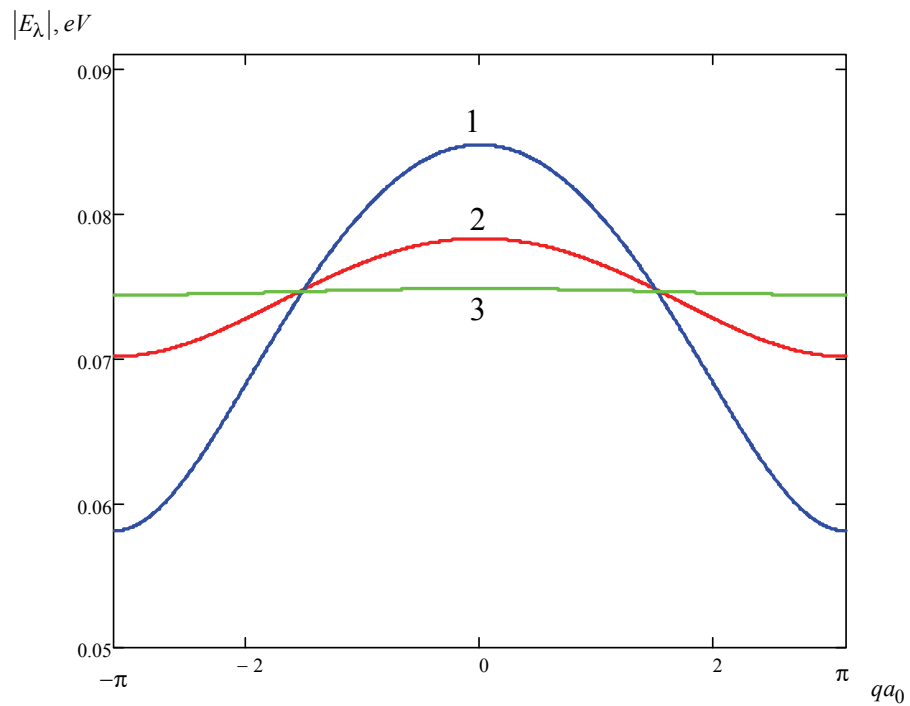


Рис. 3. Динамика первой зоны Бриллюэна с изменением периода регулярной цепочки D^0 -центров при $U_0 = 0,2$ эВ, $L = 70$ нм, $E_i = 7 \cdot 10^{-3}$ эВ: 1 – $a_0 = 20$ нм; 2 – $a_0 = 30$ нм; 3 – $a_0 = 50$ нм

Список литературы

1. **Кревчик, В. Д.** Математическое моделирование одномерного молекулярного иона D_2^- в продольном магнитном поле / В. Д. Кревчик, А. Б. Грунин, А. А. Марко // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. – 2003. – № 6 (9) – С. 57–65. – (Естественные науки).
2. **Кревчик, В. Д.** Термы и магнитооптические свойства молекулярного иона D_2^- в квантовой нити / В. Д. Кревчик, А. Б. Грунин, А. А. Марко, М. Б. Семенов, В. Ч. Жуковский // Вестник МГУ им. М. В. Ломоносова. – 2004. – Вып. 5. – С. 7–10. – (Серия 3. Физика, астрономия).
3. **Кревчик, В. Д.** Магнитооптические свойства молекулярного иона D_2^- в квантовой нити / В. Д. Кревчик, А. Б. Грунин, А. А. Марко // Физика твердого тела. – 2004. – Т. 46. – Вып. 11. – С. 2009–2103.
4. **Krevchik, V. D.** The magneto-optical properties of the multi-well quantum structures with D_2^- -centers / V. D. Krevchik, A. B. Grunin, Vas. V. Evstifeev, M. B. Semenov // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. – 2004. – № 6 (15) – С. 212–219. – (Естественные науки).
5. **Krevchik, V. D.** Magneto-optical properties of a molecular D_2^- -ion in quantum wires / V. D. Krevchik, A. B. Grunin, A. A. Marko // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. – 2004. – № 6 (15) – С. 160–169. – (Естественные науки).
6. **Krevchik, V. D.** The magneto-optical of the multi-well quantum structures with D_2^- -centers / V. D. Krevchik, A. B. Grunin, Vas. V. Evstifeev, M. B. Semenov, A. K. Aringazin // Hadronic Journal. – 2005. – V. 28. – № 6. – P. 646–659.
7. Нанотехнологии и магнитооптика полупроводниковых наноструктур с примесными центрами атомного и молекулярного типа : монография / В. Д. Кревчик, А. Б. Грунин, В. Б. Моисеев, В. А. Скрыбин. – Пенза : Изд-во Пенз. технологич. академии, 2006. – 284 с.
8. **Кревчик, В. Д.** Оптические свойства квазинульмерных структур с D_3^- -центрами / В. Д. Кревчик, А. В. Разумов // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. – 2005. – № 6. – С. 179–190. – (Естественные науки).
9. **Демков, Ю. Н.** Метод потенциалов нулевого радиуса в атомной физике / Ю. Н. Демков, В. Н. Островский. – Л. : Изд-во Ленинград. ун-та, 1975. – 240 с.
10. **Займан, Дж.** Принципы теории твердого тела / Дж. Займан. – М. : Мир, 1974. – 472 с.

Кревчик Владимир Дмитриевич

доктор физико-математических наук,
профессор, заведующий кафедрой
физики, Пензенский государственный
университет

E-mail: physics@pnzgu.ru

Krevchik Vladimir Dmitrievich

Doctor of physical and mathematical
sciences, professor, head of physics
sub-department, Penza State University

Разумов Алексей Викторович

кандидат физико-математических наук,
доцент, кафедра общей физики,
Пензенский государственный
педагогический университет
им. В. Г. Белинского

E-mail: physics@pnzgu.ru

Razumov Aleksey Viktorovich

Candidate of physical and mathematical
sciences, associate professor,
sub-department of general physics,
Penza State Pedagogical University
named after V. G. Belinsky

Гришанова Валерия Александровна

старший преподаватель, кафедра физики,
Пензенский государственный
университет

E-mail: physics@pnzgu.ru

Grishanova Valeriya Alexandrovna

Senior lecturer, sub-department of physics,
Penza State University

УДК 539.23; 539.216.1

Кревчик, В. Д.

Модель полимерной молекулы в квантовой проволоке при наличии внешнего продольного магнитного поля / В. Д. Кревчик, А. В. Разумов, В. А. Гришанова // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2010. – № 2 (14). – С. 105–116.