

В. Д. Кревчик, А. В. Разумов,
С. Е. Козенко, М. А. Манухина, Е. Н. Калинин

МАГНИТООПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КВАНТОВЫХ МОЛЕКУЛ С РЕЗОНАНСНЫМИ D_2^- -СОСТОЯНИЯМИ

Аннотация. Исследовано влияние магнитного поля и параметров диссипативного туннелирования на спектральную зависимость вероятности фотовозбуждения D_2^- -центра в квантовой молекуле.

Ключевые слова: квантовая точка, квантовая молекула, D_2^- -центр, метод потенциала нулевого радиуса, вероятность фотовозбуждения, диссипативное туннелирование.

Abstract. The authors have investigated the influence of magnetic field and dissipative tunneling parameters on the spectral dependence of photoexcitation of D_2^- -center in a quantum molecule.

Key words: quantum dot, quantum molecule, D_2^- -center, method of zero-range potential, probability of photoexcitation, dissipative tunneling.

Введение

Одной из задач теории примесных центров в полупроводниковой наноэлектронике является определение уровней энергии электрона в потенциальном поле сложной конфигурации. Это поле может представлять собой наложение центрально симметричных потенциалов с центрами в разных точках – в соответствии с расположением атомов в молекуле. Решение квантовомеханических задач для суперпозиции таких полей чрезвычайно затруднительно. Однако существует такое поле, являющееся суперпозицией произвольного числа центральных потенциальных полей, для которого квантовомеханическая задача о движении частицы имеет простое аналитическое решение. Речь идет о модели потенциалов нулевого радиуса [1], которая может быть применена, например, для описания поведения внешних электронов в атомно-молекулярных системах типа отрицательных ионов, анионов, а также (при соответствующем подборе параметров) и для описания внутренних электронов. В данной статье проведено обобщение метода потенциалов нулевого радиуса на случай двухцентральной задачи (D_2^- -центр) в квантовой молекуле (КМ) при наличии внешнего магнитного поля. Основной целью было выявить возможность стабилизации резонансных связанных состояний молекулярного типа в магнитном поле в условиях диссипативного туннелирования. Следует отметить, что вопрос о стабилизации состояний молекулярного типа в наноструктурах приобретает особый интерес, поскольку при переходе «объемный полупроводник → наноструктура» важную роль начинает играть эффект размерного квантования и фактор пространственной конфигурации примесной молекулы в объеме наноструктуры. Рассмотрен также процесс фотовозбуждения D_2^- -центра, связанный с оптическими переходами электрона между резонансными g - и u -состояниями в КМ при наличии внешнего магнитного поля.

Дисперсионные уравнения, описывающие g - и u -термы резонансных D_2^- -состояний в квантовой молекуле во внешнем магнитном поле

Рассмотрим задачу о резонансных D_2^- -состояниях в КМ во внешнем магнитном поле при наличии диссипативного туннелирования. Согласно принципу суперпозиции квантовых состояний волновая функция резонансного D_2^- -состояния имеет вид линейной комбинации одноцентровых волновых функций с коэффициентами $\tilde{c}_i$. При этом двухцентровая задача сводится к рассмотрению нетривиальных решений однородной системы алгебраических уравнений для коэффициентов $\tilde{c}_i$, что приводит к дисперсионному уравнению для электрона, локализованного на D_2^- -центре. Последнее в том случае, когда мощности потенциалов нулевого радиуса одинаковы, распадается на два уравнения, определяющих симметричное (g -терм) и антисимметричное (u -терм) состояния электрона. Следует отметить, что энергии g - и u -состояния в рассматриваемом случае являются комплексными. Их действительная часть определяет соответственно среднюю энергию g -состояния $\bar{E}_{gB}$ и u -состояния $\bar{E}_{uB}$, а удвоенная мнимая часть – уширение соответствующих энергетических уровней.

Векторный потенциал магнитного поля $\vec{A}(\vec{r})$ выбирается в симметричной калибровке:

$$\vec{A} = \frac{1}{2} [\vec{B}, \vec{r}]. \quad (1)$$

Оператор Гамильтона, соответствующий спектральной задаче в цилиндрической системе координат, имеет вид

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

где $\omega_B = |e|B / m^*$ – циклотронная частота; $|e|$ – абсолютное значение электрического заряда электрона; B – величина внешнего магнитного поля;

$$\hat{H}_z^{QD} = -\hbar^2 / (2m^*) \left(\partial^2 / \partial z^2 \right) + m^* \omega_0^2 z^2 / 2.$$

Собственные значения E_{n_1, m, n_2} и соответствующие собственные функции $\Psi_{n_1, m, n_2}(\rho, \varphi, z)$ гамильтониана (2) определяется выражениями вида

$$E_{n_1, m, n_2} = \frac{\hbar\omega_B m}{2} + \hbar\omega_0 \left(n_2 + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega_0 \sqrt{1 + \frac{\omega_B^2}{4\omega_0^2}} (2n_1 + |m| + 1), \quad (3)$$

$$\Psi_{n_1, m, n_2}(\rho, \varphi, z) = \frac{1}{a_1} \left(\frac{n_1!}{2^{n_2+1} \pi^2 n_2! (n_1 + |m|)! a} \right)^{1/2} \left(\frac{\rho^2}{2a_1^2} \right)^{\frac{|m|}{2}} \exp \left[- \left(\frac{\rho^2}{4a_1^2} + \frac{z^2}{2a^2} \right) \right] \times \\ \times H_{n_2} \left(\frac{z}{a} \right) L_{n_1}^{|m|} \left(\frac{\rho^2}{2a_1^2} \right) \exp(im\varphi), \quad (4)$$

где $n_1, n_2 = 0, 1, 2, \dots$ – квантовые числа, соответствующие уровням Ландау и уровням энергии осцилляторной сферически-симметричной ямы; $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ – магнитное квантовое число; $a_1^2 = a^2 / \left(2 \sqrt{1 + a^4 / (4a_B^4)} \right)$; $a = \sqrt{\hbar / (m^* \omega_0)}$ – характерная длина осциллятора; $a_B = \sqrt{\hbar / (m^* \omega_B)}$ – магнитная длина; $H_n(x)$ – полиномы Эрмита; $L_\alpha^\beta(x)$ – полиномы Лагерра.

Двухцентровой потенциал моделируется суперпозицией потенциалов нулевого радиуса мощностью $\gamma_i = 2\pi\hbar^2 / (\alpha_i m^*)$, $i = 1, 2$, и определяется выражением вида

$$V_\delta = \sum_{i=1}^2 \gamma_i \delta(\vec{r} - \vec{R}_i) [1 + (\vec{r} - \vec{R}_i) \nabla_{\vec{r}}]. \quad (5)$$

В приближении эффективной массы волновая функция $\Psi^{(QD)}(\rho, \varphi, z; \rho_1, \varphi_1, z_1, \rho_2, \varphi_2, z_2)$ резонансного D_2^- -состояния в квантовой точке (КТ) с параболическим потенциалом конфайнмента при наличии внешнего магнитного поля удовлетворяет уравнению Шредингера

$$(E_{2\lambda_B} - \hat{H}^{QD}) \Psi^{(QD)}(\rho, \varphi, z; \rho_1, \varphi_1, z_1, \rho_2, \varphi_2, z_2) = \\ = V_\delta(\rho, \varphi, z; \rho_1, \varphi_1, z_1, \rho_2, \varphi_2, z_2) \times \Psi^{(QD)}(\rho, \varphi, z; \rho_1, \varphi_1, z_1, \rho_2, \varphi_2, z_2), \quad (6)$$

где $E_{2\lambda_B} = -\hbar^2 \lambda_B^2 / (2m^*)$ – собственные значения гамильтониана

$$\hat{H}_B^{\delta(QD)} = \hat{H}^{QD} + V_\delta(\rho, \varphi, z; \rho_1, \varphi_1, z_1, \rho_2, \varphi_2, z_2).$$

Одноэлектронная функция Грина $G(\rho, \varphi, z, \rho_1, \varphi_1, z_1; E_{2\lambda_B})$ к уравнению Шредингера (6), соответствующая энергии $E_{0\lambda_B}$ и источнику в точке $\vec{r}_1 = (\rho_1, \varphi_1, z_1)$, запишется в виде

$$G(\rho, \varphi, z, \rho_1, \varphi_1, z_1; E_{2\lambda_B}) = \sum_{n_1, m, n_2} \frac{\Psi_{n_1, m, n_2}^*(\rho_1, \varphi_1, z_1) \Psi_{n_1, m, n_2}(\rho, \varphi, z)}{(E_{2\lambda_B} - E_{n_1, m, n_2} - i\hbar\Gamma_0)}. \quad (7)$$

Уравнение Липпмана – Швингера для резонансного D_2^- -состояния в КТ имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \Psi_{\lambda_B}^{(QD)}(\rho, \varphi, z; \rho_1, \varphi_1, z_1; \rho_2, \varphi_2, z_2) = \\ = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^{+\infty} \rho_1 d\rho_1 d\varphi_1 dz_1 G(\rho, \varphi, z, \rho_1, \varphi_1, z_1; E_{0\lambda_B}) \times \\ \times V_\delta(\rho_1, \varphi_1, z_1; \rho_a, \varphi_a, z_a) \Psi_{\lambda_B}^{(QD)}(\rho_1, \varphi_1, z_1; \rho_a, \varphi_a, z_a). \end{aligned} \quad (8)$$

После подстановки выражения (5) для двухцентрового потенциала в (8) получим

$$\begin{aligned} \Psi_\lambda(r, \varphi, \theta, r_1, \varphi_1, \theta_1; r_2, \varphi_2, \theta_2) = \\ = \gamma_1 G(r, \varphi, \theta, r_1, \varphi_1, \theta_1, E_\lambda) (\hat{T}_1 \Psi_\lambda)(r, \varphi, \theta, r_1, \varphi_1, \theta_1; r_2, \varphi_2, \theta_2) + \\ + \gamma_2 G(r, \varphi, \theta, r_2, \varphi_2, \theta_2, E_\lambda) (\hat{T}_1 \Psi_\lambda)(r, \varphi, \theta, r_1, \varphi_1, \theta_1; r_2, \varphi_2, \theta_2). \end{aligned} \quad (9)$$

Одноэлектронная функция Грина в цилиндрической системе координат запишется как

$$\begin{aligned} G(\rho, \varphi, z, \rho_a, \varphi_a, z_a; E_{2\lambda_B}) = - \frac{w}{(2\pi)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\beta} E_d a_d^3} \exp \left[- \frac{(\rho_a^2 + \rho^2)w + z_a^2 + z^2}{4\beta a_d^2} \right] \times \\ \times \int_0^{+\infty} dt \exp \left[- \left(\beta \eta_{2B}^2 + w + i \frac{\hbar \Gamma_0}{E_d} + \frac{1}{2} \right) t \right] \left(1 - e^{-2t} \right)^{-\frac{1}{2}} \left(1 - \exp[-2wt] \right)^{-1} \times \\ \times \exp \left\{ \frac{2z_a z e^{-t} - (z_a^2 + z^2) e^{-2t}}{2\beta a_d^2 (1 - e^{-2t})} \right\} \exp \left[- \exp[-2wt] \frac{(\rho_a^2 + \rho^2)w}{2\beta a_d^2 (1 - \exp[-2wt])} \right] \times \\ \times \exp \left[\frac{1}{2} \left(\exp[i(\varphi - \varphi_a) - \beta a^{*-2}t] + \exp[-i(\varphi - \varphi_a) + \beta a^{*-2}t] \right) \right] \times \\ \times \frac{\rho_a \rho w \exp[-wt]}{\beta a_d^2 (1 - \exp[-2wt])}, \end{aligned} \quad (10)$$

где $\eta_{2B}^2 = |E_{2\lambda_B}| / E_d$; $w = \sqrt{1 + \beta^2 a^{*-4}}$; $a^* = a_B / a_d$.

После выделения в (10) расходящейся части одноэлектронную функцию Грина можно представить в виде

$$G(\rho, \varphi, z, \rho_a, \varphi_a, z_a; E_{2\lambda_B}) = - \frac{1}{2^3 \pi^2 \sqrt{\beta} E_d a_d^3} \times$$

$$\begin{aligned}
 & \times \left[\int_0^{+\infty} dt \exp \left[- \left(\beta \eta_{2B}^2 + w + i\beta \frac{\hbar \Gamma_0}{E_d} + \frac{1}{2} \right) t \right] \times \right. \\
 & \times \left(2\sqrt{2} w \exp \left[- \frac{z_a^2 + z^2}{4\beta a_d^2} \right] \left(1 - e^{-2t} \right)^{-\frac{1}{2}} \left(1 - \exp[-2wt] \right)^{-1} \times \right. \\
 & \times \exp \left[\frac{2z_a z e^{-t} - (z_a^2 + z^2) e^{-2t}}{2\beta a_d^2 (1 - e^{-2t})} \right] \exp \left[- \frac{(\rho_a^2 + \rho^2) w (1 + \exp[-2wt])}{4\beta a_d^2 (1 - \exp[-2wt])} \right] \times \\
 & \times \exp \left[\frac{1}{2} \left(\exp \left[i(\varphi - \varphi_a) - \beta a^{*-2} t \right] + \exp \left[-i(\varphi - \varphi_a) + \beta a^{*-2} t \right] \right) \times \right. \\
 & \times \left. \frac{\rho_a \rho w \exp[-wt]}{\beta a_d^2 (1 - \exp[-2wt])} \right] - t^{-\frac{3}{2}} \exp \left[- \frac{(\rho - \rho_a)^2 w + (z - z_a)^2}{4\beta a_d^2 t} \right] \left. \right] + 2\sqrt{\pi\beta} a_d \times \\
 & \times \frac{\exp \left[- \sqrt{\left(2\beta \eta_{2B}^2 + 2w + i2\beta \frac{\hbar \Gamma_0}{E_d} + 1 \right) \left((\rho - \rho_a)^2 w + (z - z_a)^2 \right) (2\beta a_d^2)^{-1}} \right]}{\sqrt{(\rho - \rho_a)^2 w + (z - z_a)^2}} \left. \right]. \quad (11)
 \end{aligned}$$

Действуя оператором $\hat{T}_i$ на обе части соотношения (11), получим систему алгебраических уравнений вида

$$\begin{cases} \tilde{c}_1 = \gamma_1 a_{11} \tilde{c}_1 + \gamma_2 a_{12} \tilde{c}_2, \\ \tilde{c}_2 = \gamma_1 a_{21} \tilde{c}_1 + \gamma_2 a_{22} \tilde{c}_2, \end{cases} \quad (12)$$

где $\tilde{c}_1 = (\hat{T}_1 \Psi_\lambda)(\vec{R}_1, \vec{R}_1, \vec{R}_2)$; $\tilde{c}_2 = (\hat{T}_2 \Psi_\lambda)(\vec{R}_2, \vec{R}_1, \vec{R}_2)$; $a_{ij} = (\hat{T}_i G)(\vec{r}, \vec{R}_j; E_\lambda)$.

Исключая из системы (12) коэффициенты $\tilde{c}_i$, содержащие неизвестную функцию, получим дисперсионное уравнение, определяющее зависимость энергии связи резонансного D_2^- -состояния от параметров КТ, координат D^0 -центров и величины внешнего магнитного поля:

$$\gamma_1 a_{11} + \gamma_2 a_{22} - 1 = \gamma_1 \gamma_2 (a_{11} a_{22} - a_{12} a_{21}). \quad (13)$$

В случае, когда $\gamma = \gamma_1 = \gamma_2$, дисперсионное уравнение (13) распадается на два уравнения:

$$(a_{11} + a_{22})\gamma = 2 - \gamma \sqrt{(a_{11} + a_{22})^2 - 4(a_{11} a_{22} - a_{12}^2)} \quad (14)$$

и

$$(a_{11} + a_{22})\gamma = 2 + \gamma \sqrt{(a_{11} + a_{22})^2 - 4(a_{11} a_{22} - a_{12}^2)}, \quad (15)$$

описывающих соответственно g - и u -термы.

Действуя оператором T_1 на одноэлектронную функцию Грина (11), получим выражение для коэффициентов a_{ii} и a_{ij} :

$$a_{ii} = -\frac{1}{2^3 \pi^{\frac{3}{2}} \sqrt{\beta} E_d a_d^3} \left[\int_0^{+\infty} dt \exp \left[- \left(\beta \eta_{2B}^2 + w + i \frac{\hbar \Gamma_0}{E_d} + \frac{1}{2} \right) t \right] \times \right. \\ \times \left(2\sqrt{2} w \exp \left[-\frac{z_i^2}{2\beta a_d^2} \right] (1 - e^{-2t})^{-\frac{1}{2}} (1 - \exp[-2wt])^{-1} \times \right. \\ \times \exp \left\{ \frac{z_i^2 e^{-t}}{\beta a_d^2 (1 + e^{-t})} \right\} \exp \left[-\frac{\rho_i^2 w (1 + \exp[-2wt])}{2\beta a_d^2 (1 - \exp[-2wt])} \right] \times \\ \left. \times \exp \left[\frac{\text{ch}(\beta a^{*-2} t) \cdot 2\rho_i^2 w \exp[-wt]}{\beta a_d^2 (1 - \exp[-2wt])} \right] - t^{-\frac{3}{2}} \right) + 2\sqrt{\pi} \sqrt{\beta \eta_{2B}^2 + w + i \frac{\hbar \Gamma_0}{E_d} + \frac{1}{2}} \left. \right]; \quad (16)$$

$$a_{ij} = -\frac{1}{2^3 \pi^{\frac{3}{2}} \sqrt{\beta} E_d a_d^3} \left[\int_0^{+\infty} dt \exp \left[- \left(\beta \eta_{2B}^2 + w + i \frac{\hbar \Gamma_0}{E_d} + \frac{1}{2} \right) t \right] \times \right. \\ \times \left(2\sqrt{2} w_1 \exp \left[-\frac{z_i^2 + z_j^2}{4\beta a_d^2} \right] (1 - e^{-2t})^{-\frac{1}{2}} (1 - \exp[-2wt])^{-1} \times \right. \\ \times \exp \left\{ \frac{2z_i z_j e^{-t} - (z_i^2 + z_j^2) e^{-2t}}{2\beta a_d^2 (1 - e^{-2t})} \right\} \exp \left[-\frac{(\rho_i^2 + \rho_j^2) w (1 + \exp[-2wt])}{4\beta a_d^2 (1 - \exp[-2wt])} \right] \times \\ \times \exp \left[\left(\exp[i(\varphi_i - \varphi_j) - \beta a^{*-2} t] + \exp[-i(\varphi_i - \varphi_j) + \beta a^{*-2} t] \right) \times \right. \\ \times \frac{\rho_i \rho_j w \exp(-wt)}{2\beta a_d^2 (1 - \exp[-2wt])} \left. \right] - t^{-\frac{3}{2}} \exp \left[-\frac{(\rho_i - \rho_j)^2 w + (z_i - z_j)^2}{4\beta a_d^2 t} \right] \left. \right) + 2\sqrt{\pi} \beta a_d \times \\ \times \frac{\exp \left[-\sqrt{\left(2\beta \eta_{2B}^2 + 2w + i2 \frac{\hbar \Gamma_0}{E_d} + 1 \right) \left((\rho_i - \rho_j)^2 w + (z_i - z_j)^2 \right) (2\beta a_d^2)^{-1}} \right]}{\sqrt{(\rho_i - \rho_j)^2 w + (z_i - z_j)^2}} \left. \right]. \quad (17)$$

Необходимо отметить, что средние энергии g - и u -состояния определяются соответственно как $\bar{E}_{gB} = E_{0,0,0} + \text{Re } E_{2\lambda_{Bg}}$, $\bar{E}_{uB} = E_{0,0,0} + \text{Re } E_{2\lambda_{Bu}}$, а уширение g - и u -термов как $\Delta E_{gB} = 2 \text{Im } E_{2\lambda_{Bg}}$, $\Delta E_{uB} = 2 \text{Im } E_{2\lambda_{Bu}}$ соответственно.

На рис. 1 показано влияние внешнего магнитного поля на g - и u -термы ($\bar{E}_{gB}(\rho_{12})$ и $\bar{E}_{uB}(\rho_{12})$) молекулярного иона D_2^- в КМ (ρ_{12} – расстояние между D^0 -центрами в радиальной плоскости КМ). Из рис. 1 видно, что в магнитном поле величина $\bar{E}_{gB}$ возрастает за счет сжатия D_2^- -орбитали в радиальной плоскости КТ, при этом точка вырождения g - и u -термов смещается ближе к началу координат, а область возможного существования резонансных D_2^- -состояний расширяется. Близость границ системы для такой конфигурации D_2^- -центра приводит к излому термов, соответствующих вырожденным g - и u -состояниям. Исследована динамика уширения термов молекулярного иона D_2^- , связанная с изменением параметров диссипативного туннелирования. Найдено, что наибольшее уширение термов имеет место вблизи границ системы (рис. 2), а динамика уширения с изменением параметров ε_T^* , ε_L^* и ε_C^* аналогична случаю одноцентральной задачи (рис. 3), рассмотренной в [2].

Влияние внешнего магнитного поля на спектры фотовозбуждения молекулярного иона D_2^- при наличии туннельного распада

Рассмотрим процесс фотовозбуждения D_2^- -центра, связанный с оптическими переходами электрона между резонансными g - и u -состояниями в КТ при наличии внешнего магнитного поля. Будем предполагать, что D^0 -центры расположены симметрично относительно центра КТ: $\vec{R}_1\{0,0,z_a\}$ и $\vec{R}_2\{0,0,-z_a\}$, тогда волновые функции начального Ψ_g и конечного Ψ_u состояний запишутся в виде (Ψ_g и Ψ_u с точностью до постоянного множителя совпадают с одноэлектронной функцией Грина при соответствующей замене $\eta_{2B} \rightarrow \eta_g$ и $\eta_{2B} \rightarrow \eta_u$):

$$\begin{aligned} \Psi_g(\rho, \varphi, z, 0, 0, z_a, 0, 0, -z_a) = C_g \int_0^{+\infty} dt \exp \left[- \left(\beta \eta_g^2 + w + i\Gamma_0^* + \frac{1}{2} \right) t \right] \times \\ \times \left(1 - e^{-2t} \right)^{-\frac{1}{2}} \left(1 - \exp[-2wt] \right)^{-1} \exp \left[- \frac{1 + \exp(-2wt)}{1 - \exp(-2wt)} \cdot \frac{\rho^2 w}{4\beta a_d^2} \right] \times \\ \times \exp \left[- \frac{1 + \exp(-2wt)}{1 - \exp(-2wt)} \cdot \frac{(z_a^2 + z^2)}{4\beta a_d^2} \right] \cosh \left[\frac{z_a z \exp(-t)}{\beta a_d^2 (1 - \exp(-2t))} \right]; \quad (18) \end{aligned}$$

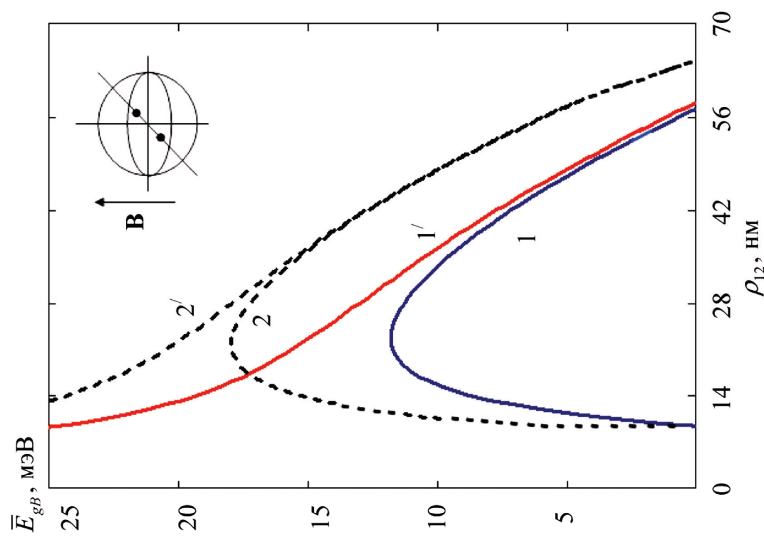


Рис. 1. Зависимость средней энергии связи $\bar{E}_{gB}$ резонансного

D_2^- -состояния от расстояния ρ_{12} между D^0 -центрами в радиальной плоскости КТ (кривые 1, 2 – g-терм; 1', 2' – u-терм) при $U_0 = 0,4$ эВ; $R_0 = 70$ нм: 1, 1' – $B = 0$; 2, 2' – $B = 7$ Тл

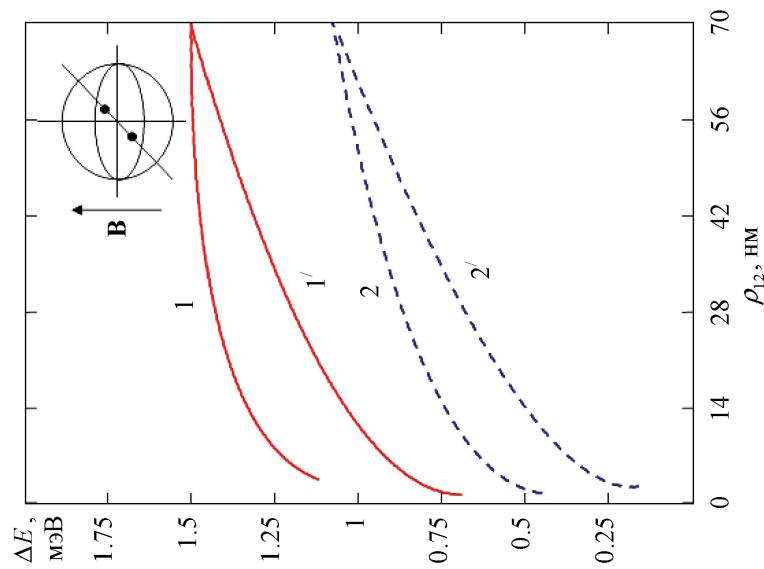


Рис. 2. Зависимость уширения уровня ΔE резонансного

D_2^- -состояния от расстояния ρ_{12} между D^0 -центрами в радиальной плоскости КТ (кривые 1, 2 – g-терм; 1', 2' – u-терм) при $U_0 = 0,4$ эВ; $R_0 = 70$ нм: 1, 1' – $B = 0$; 2, 2' – $B = 7$ Тл

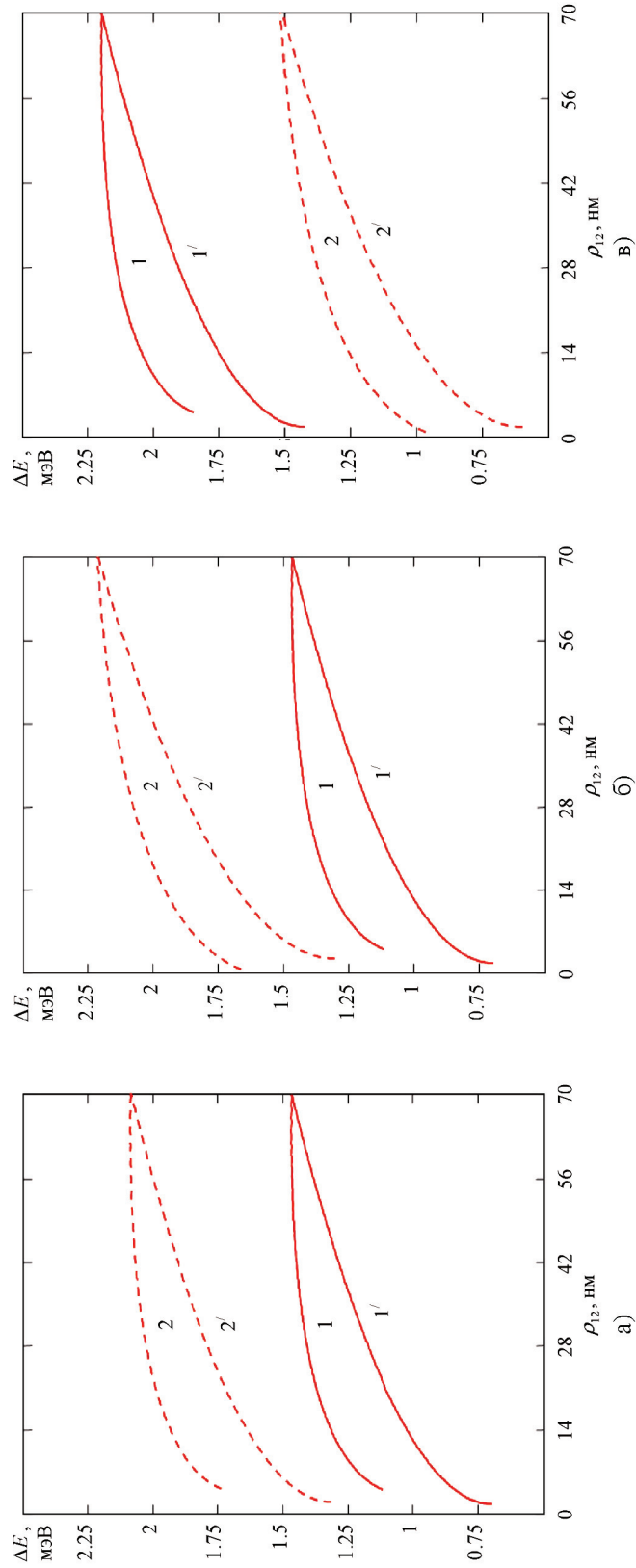


Рис. 3. Зависимость уширения уровня ΔE резонансного D_2^- -состояния от расстояния ρ_{12} между D^0 -центрами в радиальной плоскости КТ (кривые 1, 2 – g -терм; 1', 2' – u -терм) при $U_0 = 0,4$ эВ; $R_0 = 70$ нм; $B = 0$ для различных значений параметров диссипативного туннелирования: а – $\epsilon_T^* : 1, 1' - \epsilon_T^* = 1; 2, 2' - \epsilon_T^* = 4; б - \epsilon_L^* : 1, 1' - \epsilon_L^* = 0,2; 2, 2' - \epsilon_L^* = 1; в - \epsilon_C^* : 1, 1' - \epsilon_C^* = 1; 2, 2' - \epsilon_C^* = 4$

$$\begin{aligned}
\Psi_u(\rho, \varphi, z, 0, 0, z_a, 0, 0, -z_a) = C_u \int_0^{+\infty} dt' \exp \left[- \left(\beta \eta_u^2 + w + i\Gamma_0^* + \frac{1}{2} \right) t' \right] \times \\
\times \left(1 - e^{-2t'} \right)^{-\frac{1}{2}} \left(1 - \exp[-2wt'] \right)^{-1} \exp \left[- \frac{1 + \exp(-2wt')}{1 - \exp(-2wt')} \cdot \frac{\rho^2 w}{4\beta a_d^2} \right] \times \\
\times \exp \left[- \frac{1 + \exp(-2wt')}{1 - \exp(-2wt')} \cdot \frac{(z_a^2 + z^2)}{4\beta a_d^2} \right] \sinh \left[\frac{z_a z \exp(-t')}{\beta a_d^2 (1 - \exp(-2t'))} \right], \quad (19)
\end{aligned}$$

где η_g^2 , η_u^2 определяются системой уравнений (14), (15); $\Gamma_0^* = \hbar\Gamma_0/E_d$; C_g и C_u определяются выражениями вида

$$\begin{aligned}
C_g = 2^{\frac{1}{4}} (\beta)^{-\frac{3}{4}} a_d^{-\frac{3}{2}} \left[-8\pi^2 w \times \right. \\
\times \left[\left[\left(\frac{\beta \eta_g^2 + w}{2} + \frac{3}{4} \right) \left[\Psi \left(\frac{\beta \eta_g^2 + w}{2} + \frac{7}{4} \right) - \Psi \left(\frac{\beta \eta_g^2 - w}{2} + \frac{5}{4} \right) \right] - 1 \right] \times \right. \\
\times \Gamma \left(\frac{\beta \eta_g^2 + w}{2} + \frac{7}{4} \right) \Gamma \left(\frac{1}{2} - w \right) \Big/ \left[\left(\frac{\beta \eta_g^2 + w}{2} + \frac{3}{4} \right)^2 \Gamma \left(\frac{\beta \eta_g^2 - w}{2} + \frac{5}{4} \right) \right] + \\
\times \left(2\Psi \left(\frac{\beta \eta_g^2 - w}{2} + \frac{3}{4}, w - \frac{1}{2}; \frac{z_a^2}{4\beta a_d^2} \right) \Gamma \left(\frac{\beta \eta_g^2 - w}{2} + \frac{3}{4} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{z_a^2}{4\beta a_d^2} \right) \Gamma \left(\beta \eta_g^2 + w + \frac{1}{2} \right) \times \right. \\
\times \Psi \left(\beta \eta_g^2 + w + 1, \frac{5}{2} - w; \frac{z_a^2}{4\beta a_d^2} \right) \exp \left(-\frac{z_a^2}{4\beta a_d^2} \right) \Big]^{-\frac{1}{2}}; \quad (20) \\
C_u = 2^{\frac{1}{4}} (\beta)^{-\frac{3}{4}} a_d^{-\frac{3}{2}} \left[-8\pi^2 w \times \right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\times \left[\left[\left(\frac{\beta \eta_u^2 + w}{2} + \frac{3}{4} \right) \left[\Psi \left(\frac{\beta \eta_u^2 + w}{2} + \frac{7}{4} \right) - \Psi \left(\frac{\beta \eta_u^2 - w}{2} + \frac{5}{4} \right) \right] - 1 \right] \times \right. \\
\times \Gamma \left(\frac{\beta \eta_u^2 + w}{2} + \frac{7}{4} \right) \Gamma \left(\frac{1}{2} - w \right) \Big/ \left[\left(\frac{\beta \eta_u^2 + w}{2} + \frac{3}{4} \right)^2 \Gamma \left(\frac{\beta \eta_u^2 - w}{2} + \frac{5}{4} \right) \right] \times
\end{aligned}$$

$$\times \left(2\Psi \left(\frac{\beta\eta_u^2 - w}{2} + \frac{3}{4}, w - \frac{1}{2}; \frac{z_a^2}{4\beta a_d^2} \right) \Gamma \left(\frac{\beta\eta_u^2 - w}{2} + \frac{3}{4} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{z_a^2}{4\beta a_d^2} \right) \Gamma \left(\beta\eta_u^2 + w + \frac{1}{2} \right) \times \right. \\ \left. \times \Psi \left(\beta\eta_u^2 + w + 1, \frac{5}{2} - w; \frac{z_a^2}{4\beta a_d^2} \right) \exp \left(-\frac{z_a^2}{4\beta a_d^2} \right) \right]^{-\frac{1}{2}}. \quad (21)$$

Эффективный гамильтониан взаимодействия $\hat{H}_{\text{int}B}^s$ с полем световой волны в случае $\vec{e}_\lambda \parallel \vec{B}$ запишется в виде

$$\hat{H}_{\text{int}B}^s = -i\hbar\lambda_0 \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2\alpha^*}{m^{*2}\omega}} I_0 \exp(i\vec{q}_s \vec{r}) (\vec{e}_{\lambda s} \nabla_{\vec{r}}). \quad (22)$$

Матричный элемент M_{gu} , определяющий величину силы осциллятора дипольных оптических переходов электрона из резонансного g -состояния $\Psi_g(\rho, \varphi, z, 0, 0, z_a, 0, 0, -z_a)$ в резонансное u -состояние $\Psi_u(\rho, \varphi, z, 0, 0, z_a, 0, 0, -z_a)$ D_2^- -центра запишется следующим образом:

$$M_{gu} = i\lambda_0 \sqrt{\frac{2\pi\alpha^*}{\omega}} I_0 (E_g - E_u) \times \\ \times \langle \Psi_g(\rho, \varphi, z, 0, 0, z_a, 0, 0, -z_a) | (\vec{e}_{\lambda s}, \vec{r}) | \Psi_u(\rho, \varphi, z, 0, 0, z_a, 0, 0, -z_a) \rangle. \quad (23)$$

Учитывая (18) и (19), выражение (23) можно представить в виде

$$M_{gu} = i\lambda_0 E_d \sqrt{\frac{2\pi\alpha^*}{\omega}} I_0 (\eta_g^2 - \eta_u^2) C_g C_u \int_0^{+\infty} dt \int_0^{+\infty} dt' \exp \left[-\beta (\eta_g^2 t + \eta_u^2 t') \right] \times \\ \times \exp \left[-\left(w + i\Gamma_0^* + \frac{1}{2} \right) (t + t') \right] \left(1 - e^{-2t} \right)^{-\frac{1}{2}} \left(1 - e^{-2t'} \right)^{-\frac{1}{2}} \left(1 - \exp[-2wt] \right)^{-1} \times \\ \times \left(1 - \exp[-2wt'] \right)^{-1} \exp \left[-\left(\frac{1 + \exp(-2wt)}{1 - \exp(-2wt)} + \frac{1 + \exp(-2wt')}{1 - \exp(-2wt')} \right) \cdot \frac{z_a^2}{4\beta a_d^2} \right] \times \\ \times \int_0^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{2\pi} \rho d\rho dz d\varphi \exp \left[-\left(\frac{1 + \exp(-2wt)}{1 - \exp(-2wt)} + \frac{1 + \exp(-2wt')}{1 - \exp(-2wt')} \right) \cdot \frac{\rho^2 w}{4\beta a_d^2} \right] z \times \\ \times \exp \left[-\left(\frac{1 + \exp(-2wt)}{1 - \exp(-2wt)} + \frac{1 + \exp(-2wt')}{1 - \exp(-2wt')} \right) \cdot \frac{z^2}{4\beta a_d^2} \right] \times \\ \times \cosh \left[\frac{z_a z \exp(-t)}{\beta a_d^2 (1 - \exp(-2t))} \right] \sinh \left[\frac{z_a z \exp(-t')}{\beta a_d^2 (1 - \exp(-2t'))} \right]. \quad (24)$$

Вычисление интегралов в (24) дает

$$\begin{aligned}
 & \int_0^{+\infty} \rho \exp \left[- \left(\frac{1 + \exp(-2wt)}{1 - \exp(-2wt)} + \frac{1 + \exp(-2wt')}{1 - \exp(-2wt')} \right) \cdot \frac{\rho^2 w}{4\beta a_d^2} \right] d\rho = \\
 & = \frac{4\beta a_d^2}{w} \left(\frac{1 + \exp(-2wt)}{1 - \exp(-2wt)} + \frac{1 + \exp(-2wt')}{1 - \exp(-2wt')} \right)^{-1}; \quad (25) \\
 & \int_{-\infty}^{+\infty} z \exp \left[- \left(\frac{1 + \exp(-2wt)}{1 - \exp(-2wt)} + \frac{1 + \exp(-2wt')}{1 - \exp(-2wt')} \right) \cdot \frac{z^2}{4\beta a_d^2} \right] \times \\
 & \times \cosh \left[\frac{z_a z \exp(-t)}{\beta a_d^2 (1 - \exp(-2t))} \right] \sinh \left[\frac{z_a z \exp(-t')}{\beta a_d^2 (1 - \exp(-2t'))} \right] dz = -2\sqrt{2\pi} a_d^2 z_a^* \times \\
 & \times \left(\frac{1 + \exp(-2wt)}{1 - \exp(-2wt)} + \frac{1 + \exp(-2wt')}{1 - \exp(-2wt')} \right)^{-\frac{3}{2}} \left(\frac{\exp(-t)}{(1 - \exp(-2t))} + \frac{\exp(-t')}{(1 - \exp(-2t'))} \right) \times \\
 & \times \exp \left[2z_a^* \left(\frac{\exp(-t)}{(1 - \exp(-2t))} + \frac{\exp(-t')}{(1 - \exp(-2t'))} \right)^2 \right] \times \\
 & \times \left(\frac{1 + \exp(-2wt)}{1 - \exp(-2wt)} + \frac{1 + \exp(-2wt')}{1 - \exp(-2wt')} \right)^{-1} \Bigg], \quad (26)
 \end{aligned}$$

где $z_a^* = z_a / \sqrt{2\beta} a_d$.

С учетом (25) и (26) матричный элемент (23) запишется в виде

$$\begin{aligned}
 M_{gu} &= -i\lambda_0 4\beta (2\pi)^{\frac{3}{2}} a_d^4 z_a^* w^{-1} E_d \sqrt{\frac{\alpha^*}{\omega}} I_0 (\eta_g^2 - \eta_u^2) C_g C_u \times \\
 & \times \int_0^{+\infty} dt \int_0^{+\infty} dt' \exp \left[-\beta (\eta_g^2 t + \eta_u^2 t') \right] \left(\frac{1 + \exp(-2wt)}{1 - \exp(-2wt)} + \frac{1 + \exp(-2wt')}{1 - \exp(-2wt')} \right)^{-\frac{5}{2}} \times \\
 & \times \exp \left[- \left(w + i\Gamma_0^* + \frac{1}{2} \right) (t + t') \right] \left(1 - e^{-2t} \right)^{-\frac{1}{2}} \left(1 - e^{-2t'} \right)^{-\frac{1}{2}} (1 - \exp[-2wt])^{-1} \times \\
 & \times (1 - \exp[-2wt'])^{-1} \exp \left[- \left(\frac{1 + \exp(-2wt)}{1 - \exp(-2wt)} + \frac{1 + \exp(-2wt')}{1 - \exp(-2wt')} \right) \cdot \frac{z_a^2}{4\beta a_d^2} \right] \times \\
 & \times \left(\frac{\exp(-t)}{(1 - \exp(-2t))} + \frac{\exp(-t')}{(1 - \exp(-2t'))} \right) \times
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \times \exp \left[2z_a^* \left(\frac{\exp(-t)}{(1-\exp(-2t))} + \frac{\exp(-t')}{(1-\exp(-2t'))} \right)^2 \times \right. \\ & \left. \times \left(\frac{1+\exp(-2wt)}{1-\exp(-2wt)} + \frac{1+\exp(-2wt')}{1-\exp(-2wt')} \right)^{-1} \right]. \end{aligned} \quad (27)$$

Квадрат модуля матричного элемента (27) запишется в виде

$$\begin{aligned} |M_{gu}|^2 &= 2^7 \lambda_0^2 \beta^2 \pi^3 a_d^8 z_a^{*2} w^{-2} E_d^2 \frac{\alpha^*}{\omega} I_0 \left(\eta_g^2 - \eta_u^2 \right)^2 C_g^2 C_u^2 \times \\ & \times \int_0^{+\infty} dt \int_0^{+\infty} dt' \exp \left[-\beta \left(\eta_g^2 t + \eta_u^2 t' \right) \right] \left(\frac{1+\exp(-2wt)}{1-\exp(-2wt)} + \frac{1+\exp(-2wt')}{1-\exp(-2wt')} \right)^{-\frac{5}{2}} \times \\ & \times \exp \left[-\left(w + \frac{1}{2} \right) (t+t') \right] \left(1 - e^{-2t} \right)^{-\frac{1}{2}} \left(1 - e^{-2t'} \right)^{-\frac{1}{2}} \left(1 - \exp[-2wt] \right)^{-1} \times \\ & \times \left(1 - \exp[-2wt'] \right)^{-1} \exp \left[-\left(\frac{1+\exp(-2wt)}{1-\exp(-2wt)} + \frac{1+\exp(-2wt')}{1-\exp(-2wt')} \right) \cdot \frac{z_a^2}{4\beta a_d^2} \right] \times \\ & \times \left(\frac{\exp(-t)}{(1-\exp(-2t))} + \frac{\exp(-t')}{(1-\exp(-2t'))} \right) \times \\ & \times \exp \left[2z_a^* \left(\frac{\exp(-t)}{(1-\exp(-2t))} + \frac{\exp(-t')}{(1-\exp(-2t'))} \right)^2 \times \right. \\ & \left. \times \left(\frac{1+\exp(-2wt)}{1-\exp(-2wt)} + \frac{1+\exp(-2wt')}{1-\exp(-2wt')} \right)^{-1} \right]^2. \end{aligned} \quad (28)$$

Выражение для вероятности фотовозбуждения D_2^- -центра с резонансными g - и u -состояниями запишется следующим образом:

$$P_{gu}(\omega) = \frac{2\pi}{\hbar} |M|^2 \frac{\hbar \Gamma_0}{E_d^2 \left(\left(\eta_g^2 - \eta_u^2 - X \right)^2 + \frac{\hbar^2}{E_d^2} \Gamma_0^2 \right)}, \quad (29)$$

где Γ_0 – вероятность диссипативного туннелирования.

Используя полученное выражение для квадрата модуля матричного элемента (28), получим

$$\begin{aligned}
P(\omega) = & 2^8 \lambda_0^2 \beta^2 \pi^4 a_d^8 z_a^{*2} w^{-2} \alpha^* X^{-1} I_0 \left(\eta_g^2 - \eta_u^2 \right)^2 C_g^2 C_u^2 \times \\
& \times \left| \int_0^{+\infty} dt \int_0^{+\infty} dt' \exp \left[-\beta \left(\eta_g^2 t + \eta_u^2 t' \right) \right] \left(\frac{1 + \exp(-2wt)}{1 - \exp(-2wt)} + \frac{1 + \exp(-2wt')}{1 - \exp(-2wt')} \right)^{\frac{5}{2}} \times \right. \\
& \times \exp \left[-\left(w + \frac{1}{2} \right) (t + t') \right] \left(1 - e^{-2t} \right)^{-\frac{1}{2}} \left(1 - e^{-2t'} \right)^{-\frac{1}{2}} \left(1 - \exp[-2wt] \right)^{-1} \times \\
& \times \left(1 - \exp[-2wt'] \right)^{-1} \exp \left[-\left(\frac{1 + \exp(-2wt)}{1 - \exp(-2wt)} + \frac{1 + \exp(-2wt')}{1 - \exp(-2wt')} \right) \cdot \frac{z_a^2}{4\beta a_d^2} \right] \times \\
& \times \left(\frac{\exp(-t)}{(1 - \exp(-2t))} + \frac{\exp(-t')}{(1 - \exp(-2t'))} \right) \times \\
& \times \exp \left[2z_a^* \left(\frac{\exp(-t)}{(1 - \exp(-2t))} + \frac{\exp(-t')}{(1 - \exp(-2t'))} \right)^2 \times \right. \\
& \times \left. \left. \left(\frac{1 + \exp(-2wt)}{1 - \exp(-2wt)} + \frac{1 + \exp(-2wt')}{1 - \exp(-2wt')} \right)^{-1} \right]^2 \right] \times \\
& \times \Gamma_0^* \left(\left(\eta_g^2 - \eta_u^2 - X \right)^2 + \Gamma_0^{*2} \right)^{-1}. \tag{30}
\end{aligned}$$

На рис. 4 показано влияние внешнего магнитного поля на спектральную зависимость вероятности фотовозбуждения (в относительных единицах). Как видно, спектр фотовозбуждения D_2^- -центра с резонансными g - и u -состояниями представляет собой полосу, граница которой во внешнем магнитном поле смещается в длинноволновую область спектра (сравн. кривые 1 и 2 на рис. 4), что связано с уменьшением величины расщепления между термами.

Влияние параметров диссипативного туннелирования на спектр фотовозбуждения молекулярного иона D_2^- (см. рис. 5,а,б и рис. 6) обусловлено соответствующей динамикой резонансных g - и u -состояний, а также величиной расщепления между термами: с ростом параметров ε_T^* и ε_L^* (см. кривые 1 и 2 на рис. 5,а и рис. 6) уменьшаются величины $\bar{E}_{gB}$ и $\bar{E}_{uB}$ и порог фотовозбуждения смещается в «красную» область спектра. Увеличение «вязкости» контактной среды (параметр ε_C^*) сопровождается блокировкой туннельного распада, ростом $\bar{E}_{gB}$ и $\bar{E}_{uB}$, и порог фотовозбуждения смещается в коротковолновую область спектра (см. рис. 6).

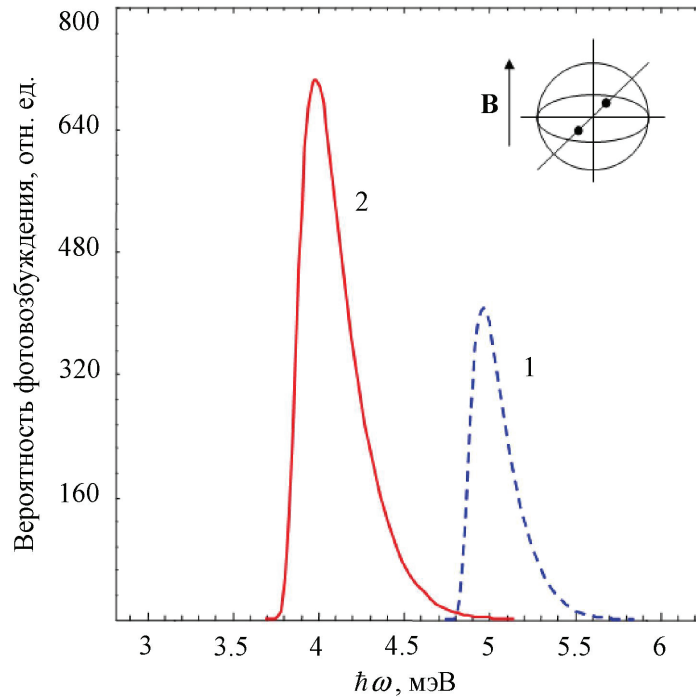


Рис. 4. Влияние внешнего магнитного поля на спектральную зависимость вероятности фотовозбуждения молекулярного иона D_2^- (в относительных единицах) с резонансными g - и u -состояниями в КТ при $U_0 = 0,4$ эВ; $R_0 = 70$ нм; $\rho_{12} = 15$ нм; $\epsilon_T^* = \epsilon_L^* = \epsilon_C^* = 1$; кривые: 1 – $B = 0$; 2 – $B = 7$ Тл

Таким образом, в данной статье в рамках модели потенциала нулевого радиуса в приближении эффективной массы получено дисперсионное уравнение для электрона, локализованного на D_2^0 -центре в КМ, находящейся во внешнем магнитном поле при наличии диссипативного туннелирования. Показано, что в магнитном поле средняя энергия g -состояния возрастает за счет сжатия D_2^- -орбитали в радиальной плоскости КТ, при этом точка вырождения g - и u -термов смещается ближе к началу координат и расширяется область возможного существования резонансных D_2^- -состояний. Найдено, что близость границ системы для симметричной конфигурации D_2^- -центра приводит к излому термов, соответствующих вырожденным g - и u -состояниям. Показано, что наибольшее уширение термов имеет место вблизи границ системы, а динамика их уширения с изменением параметров диссипативного туннелирования аналогична случаю одноцентральной задачи. В дипольном приближении получена аналитическая формула для вероятности фотовозбуждения резонансного D_2^- -центра с учетом туннельного распада во внешнем магнитном поле. Показано, что спектр фотовозбуждения D_2^- -центра с резонансными g - и u -состояниями представляет собой полосу, граница которой во внешнем магнитном поле смещается в длинноволновую область спектра, что связано с уменьшением величины расщепления между термами.

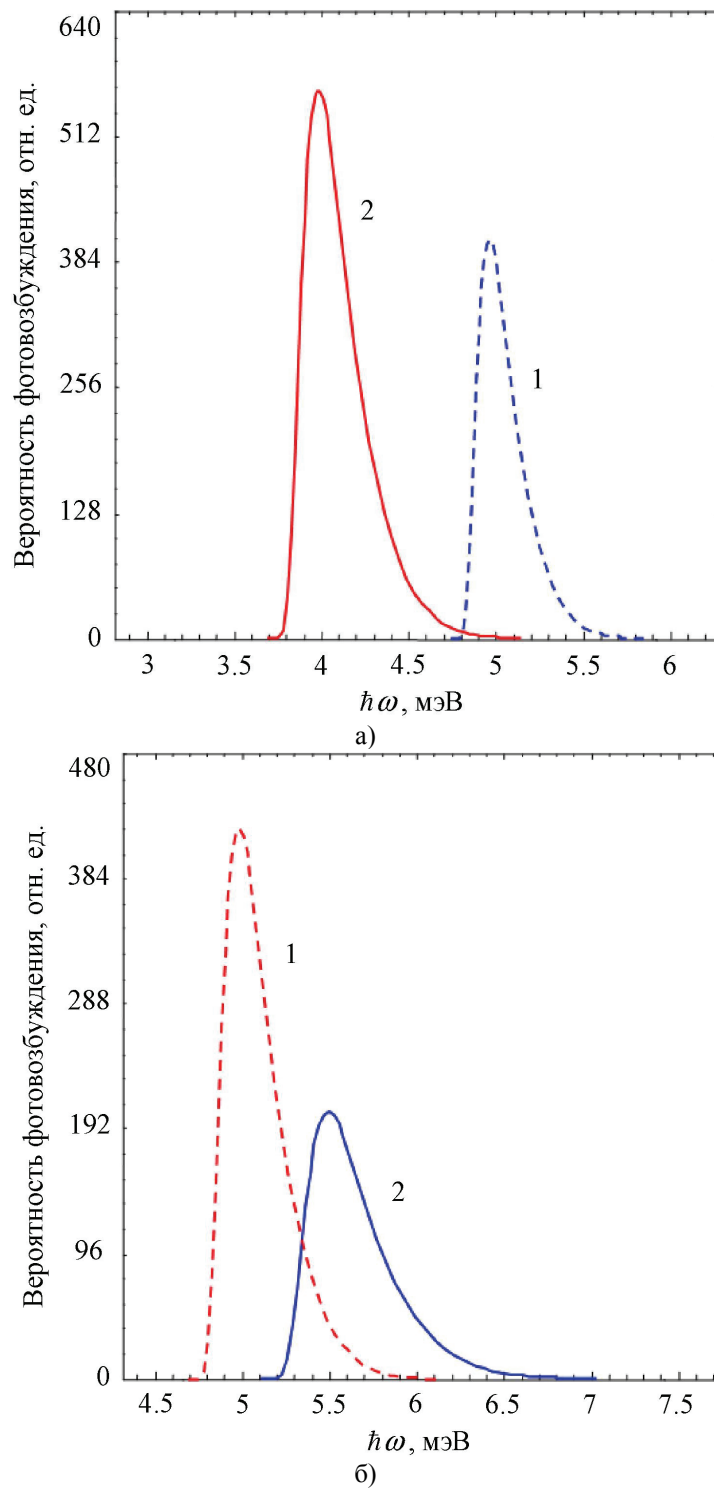


Рис. 5. Спектральная зависимость вероятности фотовозбуждения молекулярного иона D_2^- в КМ (в относительных единицах) при $U_0 = 0,4$ эВ; $R_0 = 70$ нм; $\rho_{12} = 15$ нм; $B = 0$ для различных значений параметров диссипативного туннелирования:
 а – ϵ_T^* ; кривые: 1 – $\epsilon_T^* = 1$; 2 – $\epsilon_T^* = 4$; б – ϵ_C^* ; кривые: 1 – $\epsilon_C^* = 1$; 2 – $\epsilon_C^* = 4$

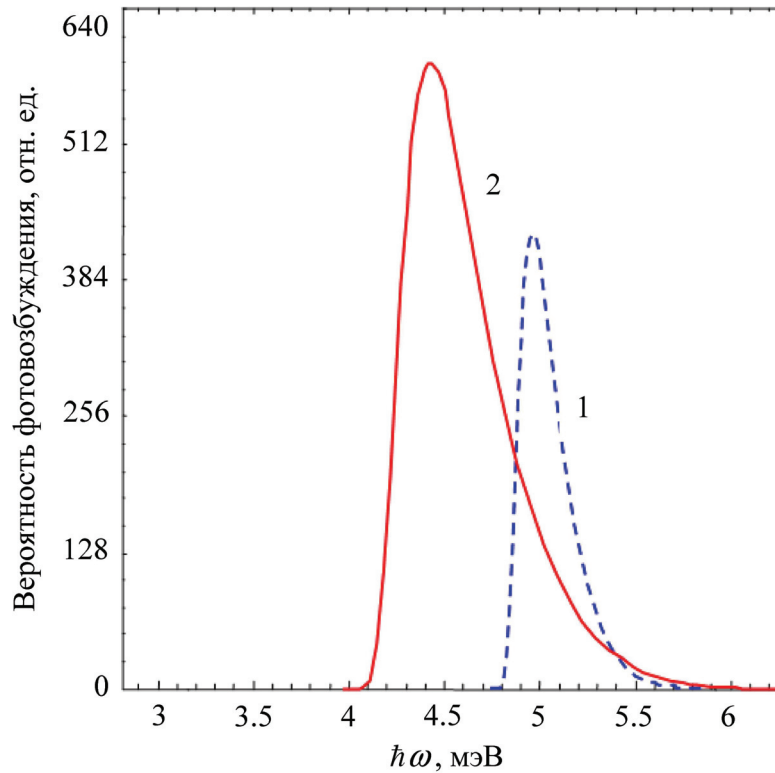


Рис. 6. Спектральная зависимость вероятности фотовозбуждения молекулярного иона D_2^- в КМ (в относительных единицах) при $U_0 = 0,4$ эВ; $R_0 = 70$ нм; $\rho_{12} = 15$ нм; $B = 0$; $\epsilon_T^* = \epsilon_C^* = 1$; кривые: 1 – $\epsilon_L^* = 0,2$; 2 – $\epsilon_L^* = 1$

Найдено, что влияние параметров диссипативного туннелирования на спектр фотовозбуждения молекулярного иона D_2^- обусловлено соответствующей динамикой резонансных g - и u -состояний и величины расщепления между термами.

Список литературы

1. Демков, Ю. Н. Метод потенциалов нулевого радиуса в атомной физике / Ю. Н. Демков, В. Н. Островский. – Л. : Изд-во Ленингр. ун-та, 1975. – С. 240.
2. Кревчик, В. Д. Влияние магнитного поля на оптические свойства квантовых молекул с резонансными донорными состояниями / В. Д. Кревчик, А. В. Калинина, Е. Н. Калинин, М. Б. Семенов // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2011. – № 3 (19). – С. 91–109.

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 sub-department
of physics, 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

Козенко Сергей Евгеньевич

соискатель, кафедра физики, Пензенский
государственный университет; начальник
планового экономического отдела
ОАО «НИИФИ»

E-mail: physics@pnzgu.ru

Kozenko Sergey Evgenyevich

Applicant, sub-department of physics,
Penza State University; head of economic
planning department at "NIFI" plc.

Манухина Мария Александровна

аспирант, Пензенский государственный
университет

E-mail: physics@pnzgu.ru

Manuhina Maria Alexandrovna

Postgraduate student,
Penza State University

Калинин Евгений Николаевич

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

E-mail: kalinin_en@mail.ru

Kalinin Evgeny Nikolaevich

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

УДК 539.23; 539.216.1; 537.311.322

Кревчик, В. Д.

Магнитооптические свойства квантовых молекул с резонансными

D_2^- -состояниями / В. Д. Кревчик, А. В. Разумов, С. Е. Козенко, М. А. Манухина, Е. Н. Калинин // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2011. – № 4 (20). – С. 142–159.