

нитей сетки максимальная: напряженность поля на «анодной» стороне нити велика, а на «обратной» стороне ослаблена. При средних зазорах напряженность поля на «обратной» стороне нитей за счет выравнивания поверхностного заряда нити сначала возрастает, а затем начинает спадать с падением средней напряженности поля в основном промежутке анод – сетчатый катод.

Основной вывод, вытекающий из факта появления быстрых электронов за катодом разрядного промежутка на фоне нарастающего межэлектродного напряжения, – это генерация в разряде некоторого количества электронов (по оценке ~ 10 % в данных условиях), энергия которых заметно выше, чем соответствующая мгновенной разности потенциалов анод – катод.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Tarasenko V.F., Vaksht E.Kh., Burachenko A.G., et al. // IEEE Transact. Plasma Sci. – 2010. – V. 38. – No. 10. – P. 2583–2587.
2. Бакшт Е.Х., Бураченко А.Г., Соломонов В.И., Тарасенко В.Ф. // Изв. вузов. Физика. – 2011. – Т. 54. – № 6. – С. 17–20.
3. Костыря И.Д., Рыбка Д.В., Тарасенко В.Ф. // ПТЭ. – 2012. – № 1. – С. 80–85.
4. Бохан П.А., Сорокин А.Р. // ЖТФ. – 1985. – Т. 55. – Вып. 6. – С. 1168–1170.

Институт сильноточной электроники СО РАН, г. Томск, Россия
E-mail: VFT@loi.hcei.tsc.ru

Поступило в редакцию 24.09.12.

Костыря Игорь Дмитриевич, ведущ. инженер;
Рыбка Дмитрий Владимирович, к.ф.-м.н., мл. науч. сотр.;
Тарасенко Виктор Федотович, д.ф.-м.н., профессор, зав. лаб. оптических излучений;
Козырев Андрей Владимирович, д.ф.-м.н., профессор, зав. теоретической лабораторией;
Бакшт Евгений Хаимович, к.т.н., науч. сотр.

УДК 621.382+539.293

В.Н. НИКИФОРОВ*, Б.Л. ОКСЕНГЕНДЛЕР**, Н.Н. ТУРАЕВА**, М.Б. МАРАСУЛОВ**

ПРОБЛЕМА ЭФФЕКТИВНОЙ МАССЫ ЭЛЕКТРОНА В НАНОКЛАСТЕРАХ

Ключевые слова: наночастица, эффективная масса, метод « k - p -возмущения».

Многочисленные исследования нанокластеров [1] убедительно показали, что их свойства существенно отличаются от свойств объемных кристаллов, генетически связанных с нанокластерами. Эти отличия двойные:

- могут наблюдаться принципиально новые эффекты;
- свойства могут быть аналогичными, но величина параметров существенно различаться.

Ко второму типу проблем относится вопрос о величине массы электрона в нанокластере. В самом деле, в многочисленных работах, где изучается квантовая химия нанокластеров [2, 3], используется величина массы электрона m , равная величине массы свободного электрона в вакууме. С помощью этой величины рассчитываются энергетические характеристики [3], магнитные свойства [2] и т.д. С другой стороны, имеются расчеты методом псевдопотенциала [4], где используется величина эффективной массы (m^*), позволяющей проанализировать конкретные эффекты (например, каскадную ионизацию электронов). С третьей стороны, имеются работы по феноменологическому моделированию нанокластеров [5], где рассматриваются оптические свойства на основе также представлений об эффективной массе электронов (по Шокли и Пекару [6]).

Целью данной работы является определение характера зависимости эффективной массы электрона от размера нанокластера. Рассмотрим нанокластер с радиусом R , гораздо большим, чем межатомное расстояние a , т.е. $R > a$. Таким образом, число атомов в нанокластере $N \propto \left(\frac{R}{a}\right)^3 \gg 1$. Это означает, что в анализе

электронной структуры к такому кластеру применимо представление об эффективной массе m^* . Следовательно, здесь можно использовать метод « $k \times p$ -возмущения» [6]. Значит, волновая функция электрона является блоховской волной $\psi_{nk} = u_{nk} e^{ikr}$, причем модулирующий множитель u_{nk} , отражающий существование периодического поля, удовлетворяет возмущенному уравнению Шредингера [7]

$$(H_{k_0} + H'_k)u_{nk} = E_n(k)u_{nk}, \quad (1)$$

где $H'_k = \frac{\hbar^2}{m}(k - k_0) \mathbf{p} + \frac{\hbar^2}{2m}(k^2 - k_0^2)$; n – номер электронной зоны; k_0 – некоторая точка зоны Бриллюэна; оператор $\mathbf{p} = -i\nabla$.

Вблизи дна зоны проводимости (в точке \mathbf{k}_0), где $\mathbf{k} - \mathbf{k}_0$ мало, можно использовать теорию возмущений второго порядка (« $\mathbf{k} \times \mathbf{p}$ -возмущение») и получить уравнение относительно эффективной массы m^* [6]

$$\left(\frac{1}{m^*}\right)_{ij} = \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{\partial^2 E_c}{\partial k_i \partial k_j} \right)_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0} = \frac{1}{m} \delta_{ij} + \frac{2}{m^2} \sum_{n \neq c} \frac{\langle u_{c\mathbf{k}_0} | p_i | u_{n\mathbf{k}_0} \rangle \langle u_{n\mathbf{k}_0} | p_j | u_{c\mathbf{k}_0} \rangle}{E_c(\mathbf{k}_0) - E_n(\mathbf{k}_0)}. \quad (2)$$

Таким образом, эффективная масса электрона m^* выражается через массу электрона m в вакууме, матричные элементы $\langle 0 | -i\nabla | \alpha \rangle$ и величину энергетической щели $\Delta E_g = E_c - E_n$. Что дополнительно нового вносит в эту картину такой объект, как нанокластер? Этих моментов два: во-первых, будут иметь место изменения в величинах волновых функций $\psi_{n\mathbf{k}} = u_{n\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ (особенно в выражении $u_{n\mathbf{k}}$, а также выбор электронных волновых функций в виде блоховской волны). Во-вторых, из-за явления конфинмента электрона сама величина размера щели становится зависящей от размера нанокластера: $\Delta E_g = \Delta E_g^0 + \frac{A}{R^2}$, где $A = \frac{\hbar^2 \chi^2}{2m}$, χ – нули сферической функции Бесселя [5]. Следовательно, согласно (2), величина m/m^* зависит от радиуса R нанокластера. Сделаем оценку этой зависимости, упростив (2). Положим $\langle u_{c\mathbf{k}_0} | p | u_{n\mathbf{k}_0} \rangle \approx \hbar/a$. Тогда

$$\frac{m}{m^*} \approx 1 + 2 \frac{\frac{\hbar^2}{ma^2}}{\Delta E_g^0 + \frac{\hbar^2 \chi^2}{2mR^2}}. \quad (3)$$

Видно, что при $R \rightarrow \infty$ (т.е. для бесконечного кристалла) имеем

$$m_{R \rightarrow \infty}^* = m \left[1 + 2 \frac{\frac{\hbar^2}{ma^2}}{\Delta E_g^0} \right]^{-1}, \quad (4)$$

т.е. получается эффективная масса для объемных материалов. С уменьшением R эффективная масса увеличивается, т.е. приближается к массе свободного электрона (рис. 1). Таким образом, при $R \rightarrow 0$ получаем $m^* \rightarrow m$. Интересно отметить, что закономерность типа (3), демонстрирующая симбатность эффективной массы m^* и ширины щели $\Delta E_g = \Delta E_g^0 + \frac{\text{const}}{R^2}$ в нанокластере, уже давно обнаруживалась и для группы объемных полупроводниковых сплавов «GaAs–InAs» [8] (рис. 2). Существенно, что для этих объектов

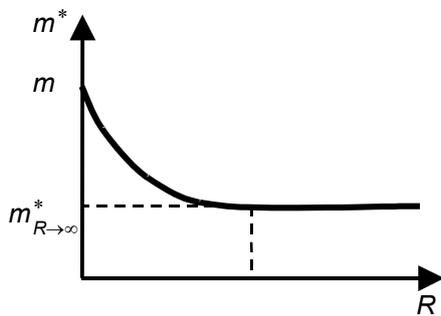


Рис. 1. Зависимость эффективной массы электрона в нанокластере от его радиуса

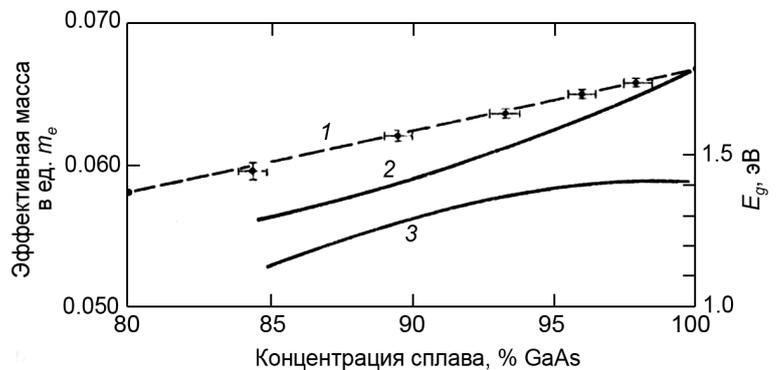


Рис. 2. Экспериментальные значения эффективных масс с поправками на непараболичность (точки); кр. 1 – линейное изменение массы между GaAs и InAs; кр. 2 – изменение эффективной массы на границе зоны, предсказанное k - p -методом; кр. 3 – соответствующее изменение фундаментальной ширины запрещенной зоны E [8]

метод « $k-p$ -возмущения» с учетом даже такого тонкого эффекта, как спин-орбитальное расщепление Δ валентной зоны, оказался вполне адекватным рассматриваемой задаче, так как формула, показывающая симбатность m_c^* и ΔE_g^0 для сплавов, имеет вид

$$\frac{m}{m_c^*} = 1 + \frac{P^2}{3} \left(\frac{2}{\Delta E_g^0} + \frac{1}{\Delta E_g^0 + \Delta} \right). \quad (5)$$

Здесь $P^2 \approx 19,6$ эВ. Качественное соответствие (5) с рис. 2 вполне очевидно.

Таким образом, обсуждаемая зависимость $m^*(R)$, несомненно, должна учитываться как в эксперименте (например, в явлениях наномagnetизма [1,9]), так и в теоретическом анализе различных эффектов (например, как это сделано в теории множественной генерации экситонов в квантовой точке, но на эвристической основе ([10, 11])).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Суздалев И. П. Нанотехнология: физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов. – М.: КомКнига, 2006. – 592 с.
2. Rodriguez-Lopez J.L. et al. // Phys. Rev. – 2003. – V. B67. – P. 174413.
3. Khakimov Z., Tereshchuk P., Sulaymanov N., et al. // Phys. Rev. B. – 2005. – V. 72. – P. 115335.
4. Califano M., Zunger A., and Franceschetti A. // Appl. Phys. Lett. – 2004. – V. 84. – P. 2409.
5. Эфрос Ал., Эфрос А. Л. // ФТП. – 1982. – Т. 16. – Вып. 7. – P. 1209.
6. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. – М.: Наука, 1963.
7. Ридли Б. Квантовые процессы в полупроводниках. – М.: Мир, 1986. – 304 с.
8. Fetterman H., Waldman I., and Wolfe C. // Solid State Commun. – 1972. – V. 11. – P. 375.
9. Nikiforov N.N. and Filinova E.Yu. Biomedical application of magnetic nanoparticles. – Weinheim, Germany: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2009. – P. 393.
10. Turaeva N.N., Oksengendler B.L., and Uralov I. // Appl. Phys. Lett. – 2011. – V. 98. – P. 243103.
11. Oksengendler B.L., Turaeva N.N., and Rashidova S.Sh. // Appl. Sol. Energy. – 2009. – V. 3. – P. 36.

*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, г. Москва, Россия

Поступило в редакцию 18.06.12.

**Институт химии и физики полимеров АН РУз, г. Ташкент, Узбекистан

E-mail: nvn@lt.phys.msu.ru

Wiley-VCH Verlag GmbH

Никифоров Владимир Николаевич, к.ф.-м.н., доцент, ст. науч. сотр.;
Оксенгендлер Борис Леонидович, д.ф.-м.н., профессор, ведущ. науч. сотр.;
Тураева Нигора Назаровна, д.ф.-м.н., зав. лабораторией;
Марасулов Мурад Бабинович, стажер-исследователь.

УДК 519.7

Н.В. ЕВТУШЕНКО, Н.Г. КУШИК

К УСТАНОВКЕ СЛОЖНЫХ СИСТЕМ В ИЗВЕСТНОЕ СОСТОЯНИЕ

Ключевые слова: недетерминированное поведение, установочные эксперименты.

В настоящее время поведение сложных технических систем все чаще описывается моделями с недетерминированным поведением. Недетерминизм возникает по различным причинам, связанным с физическими свойствами системы, уровнем абстракции при построении модели, низкой управляемостью и/или наблюдаемостью при анализе системы и др. [1]. Если поведение изучаемой системы на некотором уровне абстракции можно описать в виде конечного множества состояний и переходов между ними с неизвестным начальным состоянием, то для установки системы в известное состояние можно воспользоваться так называемым установочным экспериментом с исследуемой системой, который строится по модели соответствующего недетерминированного автомата [2]. Для технических систем, поведение которых описано детерминированными автоматами, такие эксперименты хорошо изучены. В частности, показано, что любой детерминированный автомат, не имеющий эквивалентных состояний, обладает установочной последовательностью, длина которой не превышает величины $n(n-1)/2$, где n – число состояний автомата, предъявленно к эксперименту. Более того, показано, что длина входной последовательности не уменьшается и в том случае, если следующий входной символ зависит от выходных символов на ранее поданные входные симво-

¹ Работа проводилась при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках соглашения № 14.В37.21.0622 от 16.08.2012 г.