

6. Давыдов А.С.. Квантовая механика. – М.: Наука, 1973. – 703 с. 7. Лукіянець Б.А., Товстюк К.К.. Основи квантової теорії. – Львів: Вид-во Держ. ун-ту «Львівська політехніка», 2000. – 86 с. 8. Калиткин Н.Н. Численные методы. – М.: Наука, 2000. – 511 с.

УДК 530.145

В.М. Фітьо

Національний університет «Львівська політехніка»,
кафедра фотоніки

РЕЗОНАНСНІ РІВНІ ПОТЕНЦІЙНОЇ ЯМИ, УТВОРЕНОЇ ПРЯМОКУТНИМИ БАР'ЄРАМИ СКІНЧЕНОЇ ВИСОТИ

© Фітьо В.М., 2011

V.M. Fityo

RESONANCE LEVELS OF THE POTENTIAL WELL CREATED BY RECTANGULAR BARRIERS OF FINITE HEIGHT

© Fityo V.M., 2011

Створено два методи пошуку резонансних рівнів енергії квантових наноструктур, що складаються з декількох потенційних бар'єрів та потенційної ями. Ці методи ґрунтуються на неперервності хвильової функції та її першої похідної і зводяться до неоднорідної лінійної алгебраїчної системи рівнянь. У першому методі шукається зміна фази хвилі де Бройля при поширенні в потенційній ямі залежно від енергії частинки. Другий метод полягає в пошуку максимуму модуля амплітуди хвилі де Бройля в потенційній ямі залежно від енергії частинки. Обидва методи дають дуже близькі значення резонансних енергій.

Ключові слова: потенційний бар'єр, потенційна яма, хвильова функція, наноструктура, хвиля де Бройля.

Two methods of finding the resonance levels energy of the quantum nanostructures, consisting of the several potential barriers and potential well are generated. These methods are based on the continuity of the wave function and the first derivative. They are reduced to the inhomogeneous linear algebraic equations. In the first method, the phase-change de Broglie wave is searched at the propagation in potential well depending from the energy of particle. The second method is to find the maximum module amplitude of the de Broglie wave in the potential well depending from the energy of particle. Both methods give very similar resonance energies.

Key words: potential barrier, potential well, wave function, nanostructure, de Broglie wave.

Вступ

Доволі часто експериментально і теоретично вивчаються наноструктури, що являють собою послідовно нанесені наночастиці на основі матеріалів одного хімічного складу, але з різними легуючими добавками [1]. Проходження носіїв заряду (електрони або дірки) через таку структуру можна подати у вигляді поширення хвиль де Бройля через послідовну систему прямокутних

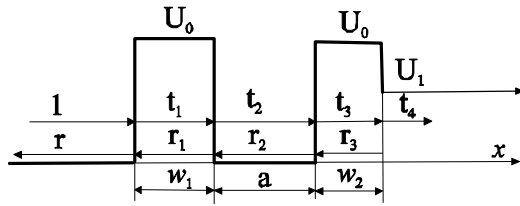


Рис. 1. Залежність потенційної енергії наноструктури від координати x . Два потенційні бар'єри висотою U_0 та шириною, відповідно, w_1 і w_2 утворюють потенційну яму, ширина якої дорівнює a . На структуру падає плоска хвиля де Бройля з одиничною амплітудою; t_j – амплітуди хвиль, що поширюються вправо; r_j – амплітуди хвиль, що поширюються вліво

через бар'єри вона рухається в нескінченність. Для знаходження віртуальних рівнів енергії та часу їх життя, мабуть, неможливо скористатись стаціонарним рівнянням Шредінгера, оскільки $\psi(x)$ для $x \rightarrow -\infty$ відмінна від нуля.

Тому метою роботи є знаходження віртуальних рівнів енергії та часу їх життя для потенційної ями, яка сформована прямокутними бар'єрами скінченної висоти та ширини. Для пошуку скористаємось методом хвиль де Бройля, так як він описаний в книзі [1], вимагаючи щоб сума плоских хвиль де Бройля, які поширюються вправо і вліво, та її перша похідна були неперервними функціями від x . Причому ці віртуальні рівні енергії знайдемо двома, але близькими, методами.

Зміна фази частинки під час руху в потенціальній ямі (фазовий метод)

Для прикладу розчленуємо структуру, що наведена на рис. 1, на дві складові, які наведені на рис. 2. Ліва складова містить потенціальний бар'єр висотою U_0 і шириною w_1 , а права складова має

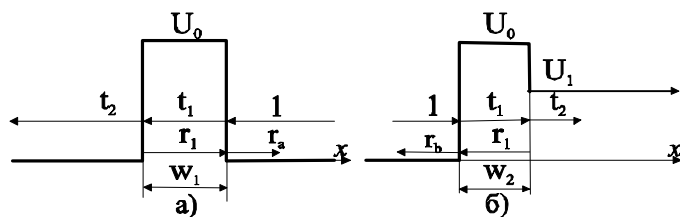


Рис. 2. Розчленування нашої структури на дві складові

два бар'єри: висотою U_0 і шириною w_2 і висотою U_1 і який простягається в плюс нескінченність. Спочатку розглянемо бар'єр, який наведений на рис. 2, а. Нехай на нього справа наліво падає плоска хвиля де Бройля одиничної амплітуди, що описує рух частинки з енергією E . Рівняння плоскої хвилі таке:

$$\psi_1(x) = \exp(-ik_0x), \quad (1)$$

де $k_0 = \sqrt{2mE/\hbar^2}$, m – маса частинки, $\hbar = h/2\pi$, h – стала Планка.

Від бар'єру відбивається хвиля з амплітудою r_a , яка є, взагалі кажучи, комплексною величиною. Відповідна плоска хвиля описується рівнянням:

$$\psi_{ra}(x) = r_a \exp(ik_0x). \quad (2)$$

Аналогічно опишемо плоскі хвилі де Бройля для інших ділянок:

$$\Psi_{r_1}(x) = t_1 \exp(-ik_1x), \Psi_{r_1}(x) = r_1 \exp(ik_1x), \Psi_{t_2}(x) = t_2 \exp(-ik_0x) \quad (3)$$

де $k_1 = \sqrt{2m(E - U_0)}/\hbar$.

Враховуючи (1)–(3) та задовольняючи умову неперервності для кожного розриву потенційної енергії, напишемо таку неоднорідну систему лінійних алгебраїчних рівнянь:

$$\begin{aligned} 1 + r_a &= t_1 + r_1 \exp(ik_1w_1), \\ -ik_0 + ik_0r_a &= -ik_1t_1 + ik_1r_1 \exp(ik_1w_1), \\ t_1 \exp(-ik_1w_1) + r_1 &= t_2, \\ -ik_1t_1 \exp(-ik_1w_1) + ik_1r_1 &= -ik_0t_2. \end{aligned} \quad (4)$$

Систему рівнянь (4) можна записати у матричній формі:

$$\begin{pmatrix} -1 & 1 & \exp(ik_1w_1) & 0 \\ -ik_0 & -ik_1 & ik_1 \exp(ik_1w_1) & 0 \\ 0 & -\exp(-ik_1w_1) & -1 & 1 \\ 0 & ik \exp(-ik_1w_1) & -ik_1 & -ik \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r_a \\ t_1 \\ r_1 \\ t_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ -ik_0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (5)$$

Розв'язавши алгебраїчну систему рівнянь (5), знаходимо r_a , який є комплексним, та аргумент r_a : $\Theta_a(E) = \arg(r_a)$, $-\pi \leq \arg(r_a) \leq \pi$.

Аналогічно діємо для складової наноструктури, яка наведена на рис. 2б:

$$\begin{aligned} \Psi_1(x) &= \exp(ik_0x), \Psi_{r_b}(x) = r_b \exp(-ik_0x), \Psi_{t_1}(x) = t_1 \exp(ik_1x), \\ \Psi_{r_1}(x) &= r_1 \exp(-ik_1x), \Psi_{t_2}(x) = t_2 \exp(ik_2x), \end{aligned} \quad (6)$$

де $k_2 = \sqrt{2m(E - U_1)}/\hbar$.

Для цієї складової також формуємо систему лінійних алгебраїчних рівнянь і, розв'язавши її, знаходимо r_b та відповідний аргумент комплексного числа r_b : $\Theta_b(E) = \arg(r_b)$, $-\pi \leq \arg(r_b) \leq \pi$.

Побудуємо функцію зміни фази від енергії E частинки, яка здійснить повний обхід „туди – назад” потенційної ями:

$$\Phi(E) = \Theta_a(E) + \Theta_b(E) + 2k_0(E)a. \quad (7)$$

Будемо стверджувати, що віртуальні рівні енергії матимуть резонансну енергію E таку, що буде виконуватись співвідношення:

$$\Phi(E) = 2m\pi, \quad m = 0, 1, 2, \dots \quad (8)$$

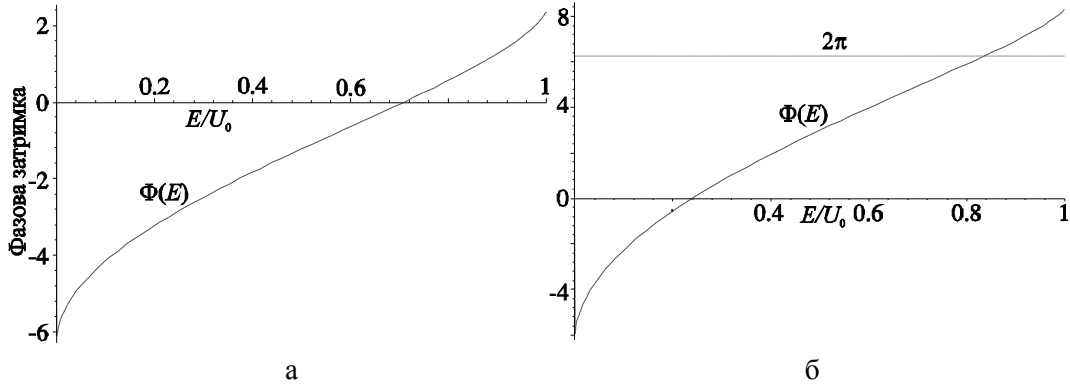
На рис. 3 наведена функція $\Phi(E)$ для таких структур: $U_0 = U_1 = 0.056$ eВ, $m = 0.2m_e$, $w_1 = 2.5$ нм, $a = 2.5$ нм – рис. 3, а, $a = 8$ нм – рис. 3, б.

З рис. 3, а випливає, що в потенційній ямі для $a = 2.5$ нм можливий лише один резонансний рівень при $m = 0$ відповідно до формули (8) і який дорівнює: $E_0 = 0.7084951U_0$. Якщо ж $a = 8$ нм, то будемо мати для резонансні рівні енергії, які дорівнюють: $E_0 = 0.238927U_0$ і $E_1 = 0.838314U_0$, відповідно, для $m = 0$ і $m = 1$.

На основі параметрів квантової частинки та потенційної ями можна розрахувати середній час t_l перебування частинки в потенційній ямі за виразом:

$$t_l = \frac{a}{V[1 - |r_a r_b|]}, \quad (9)$$

де $V = \sqrt{\frac{2E}{m}}$ – швидкість руху частинки [4].

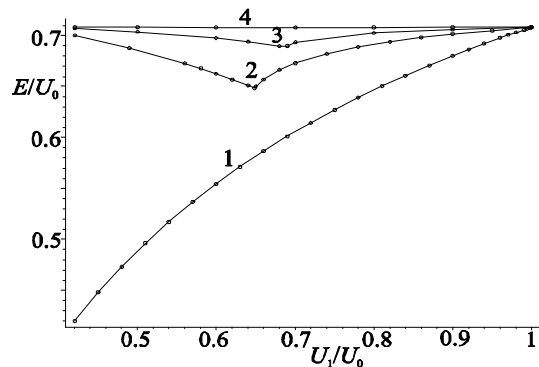
Рис. 3. Функція $\Phi(E)$, яка розрахована за виразом(7)

Відповідно довжина хвилі де Бройля: $\lambda = \frac{2\pi\hbar}{mV}$ [4]. На основі останніх виразів можливо визначити добротність Q резонансного рівня енергії так:

$$Q = \frac{2\pi V t_l}{\lambda}. \quad (10)$$

Формули (9) і (10) дають занижені значення t_l і Q , тому що не враховується час перебування частинки в потенційних бар'єрах (проникнення частинок в потенційні бар'єри під час відбивання від них).

На рис. 4 наведено залежності резонансних рівнів енергії від U_1 для декількох значень w_2 . Як випливає з останнього рисунка, при зменшенні U_1 резонансний рівень E також зменшується, але повільніше ніж U_1 . Як тільки U_1 зрівнюється за величиною з E , то у разі подальшого зменшення U_1 починає зростати E . Така поведінка E виразно відображена на кривій 2 рис.4. З ростом w_2 залежність E від U_1 слабшає (криві 3 і 4).

Рис. 4. Залежність резонансів енергії від U_1 для таких ширин бар'єрів:

$$1 - w_2 = 0, 2 - w_2 = 2.5 \text{ нм}, 3 - w_2 = 4.5 \text{ нм}, 4 - w_2 = 12.5 \text{ нм}$$

Цікаво порівняти час життя частинки в потенційній ямі для $E < U_1$ та $E > U_1$. Ця залежність наведена на рис. 5 для кривої 2 рис.4. Аналізуючи рис. 5, можна зробити висновок, що як тільки $E > U_1$, то час життя частинки в потенційній ямі різко зменшується і прямує, практично, до нуля.

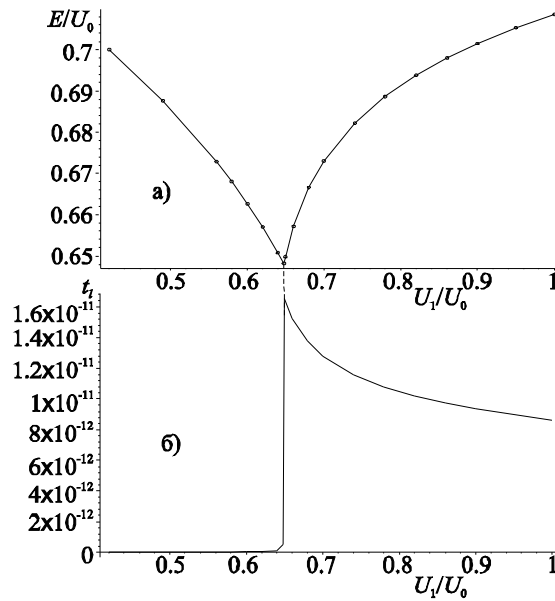


Рис. 5. Залежність резонансу енергії E (а) та часу життя частинки в потенційній ямі від U_1 (б)

Амплітуда хвилі де Бройля в потенційній ямі (амплітудний метод)

У цьому методі вважаємо, що на структуру, яка наведена на рис.1 падає хвиля де Бройля одиначної амплітуди. Амплітуди t_j і r_j визначимо з умови неперервності хвильової функції та її першої похідної. Отримаємо лінійну неоднорідну алгебраїчну систему рівнянь восьмого порядку, аналогічну системі (5). Резонансні енергії отримаємо з умови максимуму модуля $|t_2(E)|$ або максимуму $|r_2(E)|$. На рис. 6 наведено залежність $|t_2(E)|$ (другий спосіб) та залежність $\Phi(E)$ відповідно до першого способу для таких параметрів: $U_0 = U_1 = 0.056$ eV, $m = 0.2m_e$, $w_1 = 2.5$ нм, $a = 8$ нм.

Для першого і другого способів масштаби по осі абсцис однакові, а початки відліків збігаються. Бачимо збіг резонансів енергії (графічний), отриманих двома способами. Згідно з другим способом на резонансах енергії маємо два вузьких піки $|t_2(E)|$, які відповідно рівні: $E_0 = 0.239107U_0$, і $E_1 = 0.838763U_0$, відповідно, для $m = 0$ і $m = 1$. Резонанси енергій, отриманих двома способами, відрізняються в четвертому знаку після крапки, але, якщо ширини потенційних бар'єрів будуть зростати, то різниця між резонансами рівнів енергії, отриманих обома способами прямуватиме до нуля і в остаточному випадку шуканий резонансний рівень збігатиметься з рівнем енергії, отриманого на основі стаціонарного рівняння Шриденгера.

Ці два способи пошуку резонансних рівнів енергії мають аналогію з коливаннями в послідовному RLC-контурі. Перший спосіб відповідає вільним загасаючим коливанням у контурі, частота яких в основному визначається індуктивністю та ємністю і меншою мірою опором. Другий спосіб відповідає вимушеним коливанням, причому резонанс відбувається на частоті, яка визначається винятково індуктивністю та ємністю. Частота вільних коливань і частота резонансу зближатимуться при зменшенні опору резистора.

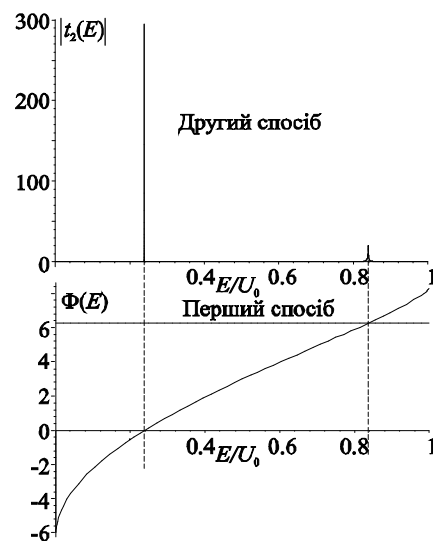


Рис. 6. Визначення резонансних рівнів енергії першим та другим способами

Симетрична структура

Цікава поведінка симетричної структури, для якої $w_1 = w_2$, $U_1 = 0$ відповідно до рис. 1. Проведено аналіз такої структури при таких параметрах: $U_0 = 0.056$ eV, $m = 0.1m_e$, $w_1 = w_2 = 25$ нм, $a = 2.5$ нм.

На рис. 7 наведено залежність коефіцієнта відбивання $R(E) = |r(E)|^2$, коефіцієнта пропускання $T(E) = |t_4(E)|^2$ і відношення $|t_2(E)/t_{2\max}(E)|^2$ – крапки. Розрахунок залежностей, що наведені на рис. 7, проводився другим способом, причому резонанс енергії (єдиний) дорівнює

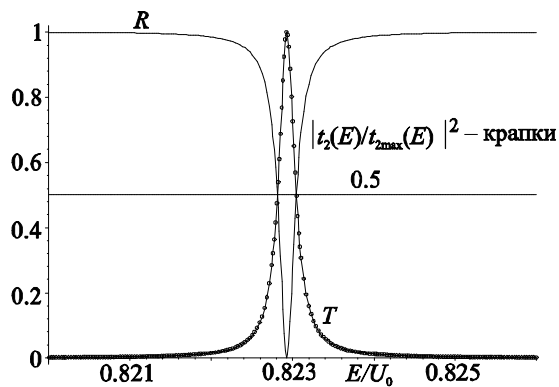


Рис. 7. Залежності коефіцієнта відбивання R , коефіцієнта пропускання T і відношення

$$|t_2(E)/t_{2\max}(E)|^2 \text{ від енергії частинки}$$

$0.822768U_0$. Резонанс енергії, визначений першим способом, дорівнює $0.822928U_0$. Півширина кривої $T(E)$ на рівні 0.5: $\Delta E = 0.0002356U_0$. За цими даними можна визначити $Q_2 = 3501$. А потім за виразом (10) визначити t_{12} .

На основі першого способу можна знайти, що $t_{11} = 0.851 \cdot 10^{-11}$ с та $Q_1 = 1191$. Порівнюючи результати аналізу, можна зробити висновок, що резонанси енергії, визначені двома способами, практично рівні, часи життя частинок (добротність резонансів) в потенційній ямі істотно відрізняються. Це пов'язано з тим, що у першому способі не враховується час знаходження частинки під час відбивання від потенціального бар'єру поза потенціальною ямою. Але якщо ширина потенціальної ями зростатиме, то часи життя частинки в потенціальній ямі, визначених обома способами, будуть зближатися.

Як впливає з рис. 7, для симетричної структури на резонансній енергії коефіцієнт відбивання хвилі де Бройля дорівнює нулю, відповідно коефіцієнт пропускання — одиниці. Було б цікаво виготовити таку симетричну структуру, яка б мала декілька резонансів. Тоді можна було б спостерігати експериментально значне пропускання такою структурою на резонансних енергіях, і практично нульове пропускання поза резонансами.

Варто також зауважити, що ця теорія буде правильною, якщо довжина вільного пробігу частинок набагато більша, ніж ширина структури в напрямку осі x . Очевидно її потрібно модифікувати, враховуючи розсіювання та поглинання частинок через комплексність хвильових векторів $k_j(E)$.

Висновки

Створено два способи аналізу квантових наноструктури, що послідовно складаються з потенційних прямокутних бар'єрів, між якими формується потенційна яма. Обидва способи ґрунтуються на неперервності хвильової функції та її першої похідної, що приводить до формування неоднорідних систем алгебраїчних рівнянь, розмірність яких визначається кількістю стрибків потенційної енергії на всьому просторовому інтервалі наноструктури. Перший спосіб полягає в пошуку зміни фази хвилі де Бройля при її поширенні в потенційній ямі, та прирівняння цієї зміни до $2m\pi$, де $m = 0, 1, 2, \dots$. У другому способі розраховується амплітуда хвилі де Бройля в потенційній ямі, та визначається енергія частинки, при якій модуль амплітуди має максимальне значення. Резонанси енергії, визначені обома способами, близькі між собою. Обидва методи дозволяють визначити час життя частинок в потенційній ямі, та добротність резонансів, причому перший метод дає ці величини заниженими. Якщо один з потенціальних бар'єрів почне знижуватися, то резонансна енергія частинки також буде знижуватися, але повільніше ніж зменшується висота

бар'єру. Після рівності резонансної енергії та висоти потенційного бар'єру, резонансна енергія зростає при подальшому зменшенні потенціального бар'єру; при переході рівності обох величин час життя частинки в потенційній ямі стрибкоподібно міняється. Для симетричних структур на резонансних енергіях коефіцієнт відбивання дорівнює нулю, а пропускання – одиниці.

1. Zayachuk D.M., Slobodskyu T., Astakhov G.V., Slobodskyu A., Gould C., Schmidt G., Ossau W., and Molenkamp L.W. *Magnetic-field-induced exchange effects between Mn ions and free carriers in ZnSe quantum wells through the intermediately nonmagnetic barrier studied by photoluminescence* // *PHYSICAL REVIEW B*. – 2011. – Vol. 83. – P. 085308 – 1–12. 2. Вакарчук О.І. *Квантова механіка*. – 2-ге вид. – Львів: Львівський національний університет імені Івана Франка, 2004. – 784 с. 3. Давыдов А.С. *Квантовая механика, издание второе*. – М.: Наука, 1973. – 704 с. 4. Вихман Э., Берклеевский курс физики, том IV, *Квантовая физика, издание второе*. – М.: Наука, 1977. – 416 с.

УДК 621.315.592;539.143.4

О.Г. Хандожко¹, Г.І. Ластівка¹, А.П. Саміла¹, З.Д. Ковалюк²

¹ Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича,
кафедра радіотехніки та інформаційної безпеки,
² Чернівецьке відділення ІПМ НАН України

ЕПР І ЯКР У ШАРУВАТОМУ КРИСТАЛІ GaSe:GD

© Хандожко О.Г., Ластівка Г.І., Саміла А.П., Ковалюк З.Д., 2011

O.G. Khandozhko, G.I. Lastivka, A.P. Samila, Z.D. Kovalyuk

THE EPR AND NQR IN LAYERED CRYSTAL GaSe:Gd

© Khandozhko O.G., Lastivka G.I., Samila A.P., Kovalyuk Z.D., 2011

Досліджений вплив політипної структури GaSe на форму спектрів ЕПР домішки гадолінію у стані Gd^{3+} . Показано, що під час концентрації домішки порядку 10^{18} см^{-3} у шаруватому кристалі існують, щонайменше, три типи парамагнітних центрів. Наявність нееквівалентних позицій іона Gd^{3+} пояснюється присутністю політипних модифікацій в GaSe. Виявлено, що введення парамагнітної домішки в кристал істотно уширює спектр ЯКР.

Ключові слова: шаруваті кристали, політипи, спектри ЯКР.

The influence of the polytype structure of GaSe on the shape of the EPR spectra of gadolinium impurity in a state of Gd^{3+} were studied. Shown that when the impurity concentration of the order 10^{18} cm^{-3} in a layered crystal, there are at least three types of paramagnetic centers. The presence of nonequivalent sites of Gd^{3+} is associated with the presence of polytypic modifications in GaSe. It was found that the introduction of paramagnetic impurities in the crystal is considerably broadened NQR spectra.

Key words: layered crystals, polytypes, the NQR spectra.

Вступ

Легування шаруватих напівпровідникових сполук групи A^3B^6 рідкоземельними елементами надає особливі специфічні фізичні властивості отриманим матеріалам. У кристалах GaSe:Gd