

УДК 537.311.322

К.К. Товстюк, Ю.В. Прийма, М.В. Дума  
Національного університету "Львівська політехніка",  
кафедра напівпровідникової електроніки

## ЗМІНА ШИРИНИ ЗАБОРОНЕНОЇ ЗОНИ У НАНОСТРУКТУРІ ЗАЛЕЖНО ВІД ЇЇ КОНФІГУРАЦІЙНИХ ОСОБЛИВОСТЕЙ

ã Товстюк К.К., Прийма Ю.В., Дума М.В., 2011

C.C. Tovstyuk, Ju.V. Pryima, M.B. Duma

## ENERGY BAND MODIFICATION ACCORDING TO CONFIGURATION OF NANOSTRUCTURE

ã Tovstyuk C.C., Pryima Ju.V., Duma M.B., 2011

Розраховується енергія основного стану електронів та дірок у структурі, утвореній квантовою ямою (ZnSe) та асиметричними бар'єрами (ZnBeMnSe та ZnBeSe) залежно від ширини немагнітного шару та висоти бар'єру (ZnBeMnSe), що змінюється у магнітному полі внаслідок гігантського ефекту Зеемана. Показано особливості та проаналізовано відмінності, що наявні у спектрах електронів та дірок. Обчислено зміну ширини забороненої зони залежно від ширини немагнітного шару та розщеплення Зеемана.

*Ключові слова: наноструктура, спектр електронів, спектр дірок, зміна ширини забороненої зони*

The lowest energy level for electrons and holes is calculated in a structure formed by quantum pit (ZnSe) and asymmetric barriers (ZnBeMnSe and ZnBeSe). The dependence of this energy on the non magnetic barrier width is investigated. The effect on energy by semimagnetic barrier energy, which changes in magnetic field due to giant Zeeman splitting. The differences in specerums of electrons and holes are investigated and the features of spectrums of electrons and holes are pointed out. The energy gap, depending on the width of semi magnetic barrier and Zeeman splitting is investigated.

*Key words: nanostructure, electrons spectrum, holes spectrum, energy gap*

### Вступ

У [1–3] досліджуються спектри люмінесценції у наноструктурі, утворені шарами ZnBeSe – ZnSe – ZnBeSe – ZnBeMnSe, залежно від прикладеного магнітного поля. Розглядаються зразки із різними товщинами немагнітного шару. Для пояснення отриманих значень автори [1–3] використовують вплив на спектр частинок двох факторів: як гігантського ефекту Зеемана [4], так і значної обмінної взаємодії, що спостерігаються у таких зразках. Теоретичне дослідження, виконане нами, покликане з'ясувати, які зміни у спектрах обумовлені саме конфігурацією системи: ширини немагнітного та висоти магнітного бар'єру, що змінюється внаслідок розщеплення у магнітному полі.

У роботі розраховується енергія основного стану носіїв струму (електронів та дірок) у структурі утвореній квантовою ямою ZnSe та асиметричними бар'єрами ZnBeMnSe та ZnBeSe, зображеною на рис. 1 [1–3].

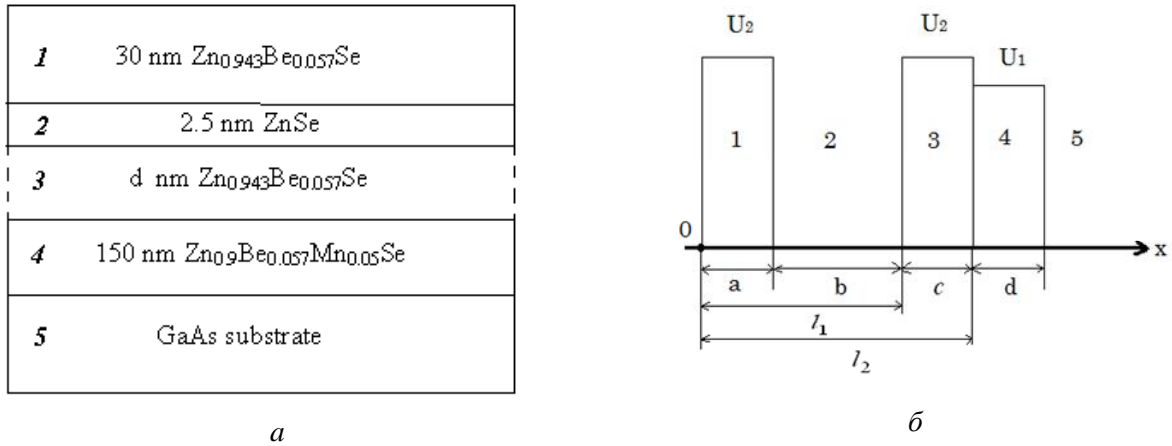


Рис. 1. Наноструктура досліджена у [1–3] (а) та її умовне одновимірне зображення (б)

Енергія зв'язаного стану знаходиться під час розв'язування стаціонарного рівняння Шредінгера, із потенціалом

$$U(x) = \begin{cases} U_2, & 0 < x < a; \\ 0, & a < x < l_1; \\ U_2, & l_1 < x < l_2; \\ U_1, & l_2 < x < l_2 + d. \end{cases} \quad (1)$$

з якого випливає

$$y_j(x) = C_{j1} \exp\{k_2 x\} + C_{j2} \exp\{-k_2 x\}, \quad (2)$$

$$k_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(U_2 - E)} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}U_2 - k^2}, \quad (3)$$

$$j = 1, 3$$

Хвильова функція основного стану частинки в ямі не повинна мати вузлів у внутрішніх точках, отже:

$$y_2(x) = C_2 \cos(k(x - x_{10})); \quad (4)$$

$$x_{10} = a + b/2;$$

Враховуючи геометрію зразка і умову скінченності хвильової функції:

$$\Psi_4 = \begin{cases} C_4 \exp\{-k_1 x\}, & \text{для } E < U_1 < U_2; \\ C_4 \cos(k_1(x - x_{20})), & \text{для } U_1 < E < U_2. \end{cases} \quad (5)$$

$$\text{де } x_{20} = l_2 + d/2;$$

де

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(U_1 - E)} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}U_j - k^2}, \quad (6)$$

Умова неперервності хвильової функції та її першої похідної у точках  $l_1, l_2$ :

$$\begin{cases} y_2(l_1) = y_3(l_1); \\ y_2'(l_1) = y_3'(l_1); \\ y_3(l_2) = y_4(l_2); \\ y_3'(l_2) = y_4'(l_2). \end{cases} \quad (7)$$

Яка  $E < U_1 < U_2$  для набуває вигляду

$$\begin{cases} C_2 \cos(k(l_1 - x_{10})) = C_{31} \cdot e^{k_2 l_1} + C_{32} \cdot e^{-k_2 l_1}; \\ -k C_2 \sin(k(l_1 - x_{10})) = k_2 (C_{31} \cdot e^{k_2 l_1} - C_{32} \cdot e^{-k_2 l_1}); \\ C_{31} e^{k_2 l_2} + C_{32} e^{-k_2 l_2} = C_4 e^{-k_1 l_2}; \\ k_2 (C_{31} \cdot e^{k_2 l_2} - C_{32} \cdot e^{-k_2 l_2}) = -k_1 C_4 e^{-k_1 l_2}. \end{cases} \quad (8)$$

А для  $U_1 < E < U_2$  переписується

$$\begin{cases} C_2 \cos(k(l_1 - x_{10})) = C_{31} \cdot e^{k_2 l_1} + C_{32} \cdot e^{-k_2 l_1}; \\ -k C_2 \sin(k(l_1 - x_{10})) = k_2 (C_{31} \cdot e^{k_2 l_1} - C_{32} \cdot e^{-k_2 l_1}); \\ C_{31} e^{k_2 l_2} + C_{32} e^{-k_2 l_2} = C_4 \cos(k_1(l_2 - x_{20})); \\ k_2 (C_{31} \cdot e^{k_2 l_2} - C_{32} \cdot e^{-k_2 l_2}) = -k_1 C_4 \sin(k_1(l_2 - x_{20})). \end{cases} \quad (9)$$

Отримуємо системи однорідних рівнянь відносно коефіцієнтів, які мають нетривіальний розв'язок за умови рівності нулеві визначника. Для енергій  $E < U_1 < U_2$

$\Delta 1(k) = 0$ , де

$$\Delta 1(k) = \begin{vmatrix} \cos(k(l_1 - x_{10})) & -e^{k_2 l_1} & -e^{-k_2 l_1} & 0 \\ -k \sin(k(l_1 - x_{10})) & -k_2 e^{k_2 l_1} & k_2 e^{-k_2 l_1} & 0 \\ 0 & e^{k_2 l_2} & e^{-k_2 l_2} & -e^{-k_1 l_3} \\ 0 & k_2 e^{k_2 l_2} & -k_2 e^{-k_2 l_2} & k_1 e^{-k_1 l_2} \end{vmatrix}. \quad (10)$$

А коли  $U_1 < E < U_2$

$\Delta 2(k) = 0$ ,

$$\Delta 2(k) = \begin{vmatrix} \cos(k(l_1 - x_{10})) & -e^{k_2 l_1} & -e^{-k_2 l_1} & 0 \\ -k \sin(k(l_1 - x_{10})) & -k_2 e^{k_2 l_1} & k_2 e^{-k_2 l_1} & 0 \\ 0 & e^{k_2 l_2} & e^{-k_2 l_2} & -\cos(k_1(l_2 - x_{20})) \\ 0 & k_2 e^{k_2 l_2} & -k_2 e^{-k_2 l_2} & k_1 \sin(k_1(l_2 - x_{20})) \end{vmatrix}. \quad (11)$$

Обчислення проводилися для значень ефективних мас  $m_e = 0,2m_0$ ;  $m_p = 2m_0$ . та  $U_2 = 36$  меВ.

Для перевірки правильності знаходження енергетичного спектра врахуємо, що енергія основного стану частинки у нескінченно глибокій потенціальній ямі відома [6, 7]:

$$E = \frac{\hbar^2 p^2}{2mb^2}. \quad (12)$$

До значень (12) прямує отримана нами енергія при  $U_2 \rightarrow \infty$ ,  $d \rightarrow 0$ .

### Залежність зміни шири забороненої зони від товщини немагнітного шару

У [1–3] досліджують структури із ширинами немагнітного шару 1,5 нм; 2,5 нм; 12,5 нм. Досліджується вплив товщини немагнітного шару на значення енергії основного стану носіїв. Зміна енергії забороненої зони, зумовлена різною шириною немагнітного шару для певних значень потенціалу  $U_1$  відображена на рис. 2.

Енергія основного стану електронів монотонно залежить від товщини немагнітного шару. Значне зростання  $c$  приводить до прямування енергії до певного асимптотичного значення. Однак така залежність має різні тенденції залежно від енергії рівня: для рівнів із енергіями меншими від  $U_1$  (пунктирна крива на рис. 2) спостерігається зростання енергії із збільшенням  $c$ , у той час як для рівнів із енергіями більшими  $U_1$  має місце спадання енергії рівня при збільшенні товщини немагнітного шару. Енергія дірок, незалежно від її значення відносно  $U_1$ , слабо змінюється із шириною немагнітного шару, і при  $c = 5$  нм стає практично постійною.

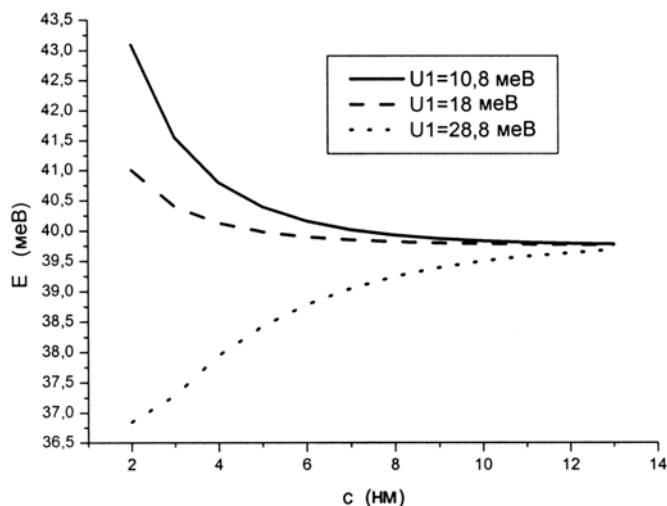


Рис. 2. Зміна енергії забороненої зони, обумовлена наявністю немагнітного шару, шириною  $d$  з урахуванням ефекту Зеємана у магнітному шарі

### Зміна шири забороненої зони залежно від величини Зеєманового розщеплення

Із зростанням магнітного поля зростає Зеєманове розщеплення, що приводить до зміни потенціалу  $U_1$ . Залежність енергії основного стану електрона та дірки від  $U_1$  зображено на рис. 3, зміна ширини забороненої зони залежно від  $U_1$  відображено на рис. 4. Розраховували за методом половинного ділення [8]. У залежності енергії основного стану електрона від  $U_1$  (рис. 3, а) спостерігається немонотонність, що з'являється при переході із області  $U_1 < E < U_2$  до області  $E < U_1$ . Зростання ширини немагнітного шару істотно впливає на числові значення отриманого мінімуму (рис. 3, а). Так відносне відхилення мінімального значення енергії від асимптоти (енергії рівня при  $c = 25$  нм,  $U_1 = U_2$  – штрих-пунктирна пряма на рис. 3, а) при  $c = 1,5$  нм становить 25,1 %, при  $c = 2,5$  нм – 13,43 %, при  $c = 12,5$  нм – 0,248 %, а при  $c = 25$  нм –  $2 \cdot 10^{-3}$  %.

На рис. 3, б показано зміну енергії основного стану дірки при різних товщинах немагнітного шару залежно від  $U_1$ . Як бачимо, тут теж спостерігаються немонотонні залежності, однак від енергії електрона вони відрізняються: 1) значення енергії збігаються для всіх розрахованих величин  $U_1$  при  $c = 12,5$  нм та  $c = 25$  нм; 2) для всіх проаналізованих ширин немагнітного шару існує енергетичний рівень  $E < U_1$  при  $U_1 = 0,4U_2$ . Як і для електронного спектра, спостерігається зменшення відхилення від асимптотичного значення енергії (горизонтальна пряма на рис. 3, б) із зростанням ширини немагнітного шару (2,868 % при  $c = 1,5$  нм, 0,278 % при  $c = 25$  нм,  $1 \cdot 10^{-4}$  % при  $c = 12,5$  нм), а також однакові значення енергій для розглянутих  $c$  при  $U_1 = U_2$ .

На рис. 4 наведено значення зміни енергії забороненої зони для проаналізованих товщин немагнітного шару залежно від  $U_1$ . Як видно із рис. 4, зростання товщини немагнітного шару приводить до нівелювання немонотонності у  $dEg$ . Зокрема, відносне відхилення мінімальної енергії від асимптотичного значення становить 17,879 % при  $c = 1,5$  нм, 1,274 % при  $c = 25$  нм, 0,177 % при  $c = 12,5$  нм.

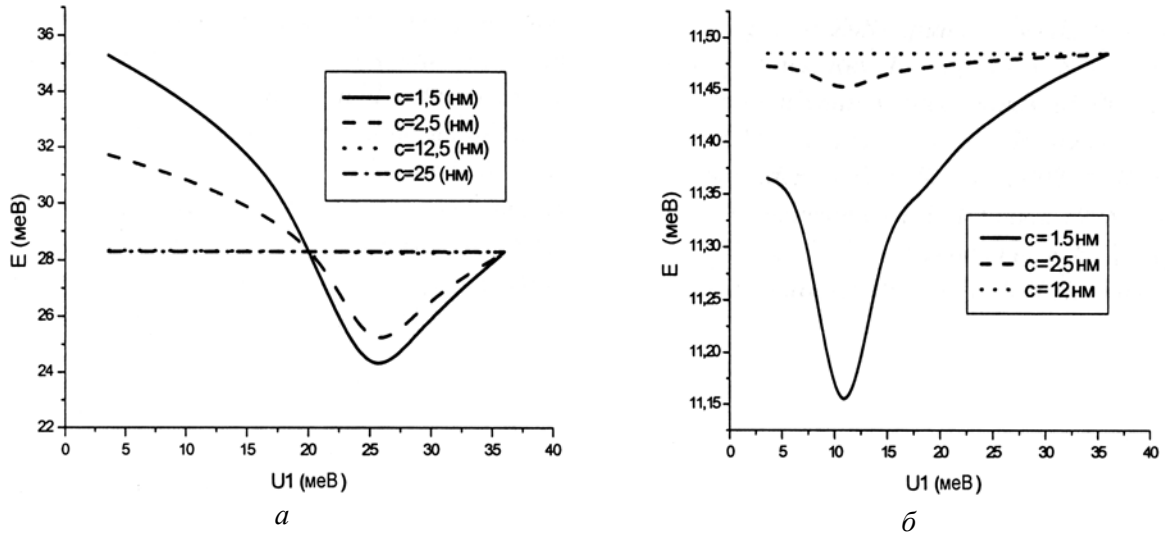


Рис. 3. Зміна енергії основного стану електрона (а) та дірки (б) для різних товщин немагнітного шару залежно від розщеплення Зесмана

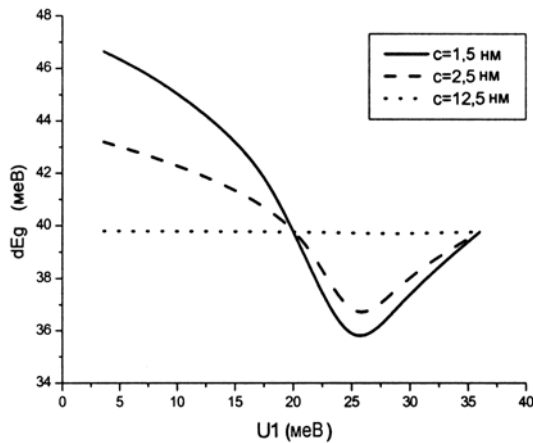


Рис. 4. Зміна енергії основного зв'язаного стану електрона для різних товщин немагнітного шару залежно від розщеплення Зесмана

Зазначимо, що отримані залежності зміни ширини забороненої зони (рис. 4) узгоджуються із отриманими експериментальними даними [1–3], де спостерігається слабе, а пізніше значне спадання енергії люмінесценції із зростанням магнітного поля. Відсутність у експерименті немонотонності, отриманої нами, може бути поясненою 1) незначним відносним відхиленням отриманого мінімуму від асимптотичних значень енергії – як показано, така немонотонність буде відчутною лише для малих товщин немагнітного шару; 2) проявом обмінної взаємодії, яка дуже істотна у таких зразках.

1. Zayachuk D.M., Slobodskyy T., Astakhov G.V., Gould C., Schmidt G., Ossau W., Molenkamp L.W. Interaction between Mn ions and free carriers in quantum wells with asymmetrical semimagnetic barriers/ *Letters Journal Exploring the Frontiers of Physics*. – 2010. – **91**. – 67007. 2. Zayachuk D.M., Slobodskyy T., Astakhov G.V., Slobodskyy A., Gould C., Schmidt S., Ossau W., Molenkamp L.W. Magnetic-field-induced exchange effects between Mn ions and free carriers in ZnSe quantum wells through the intermediate nonmagnetic barrier studied by photoluminescence. *Phys. Rev. B*. – 2011. – Vol. 8. – P. 085308 3. Zayachuk D.M.. Magnetic field-induced dynamics of the photoluminescence bands of the II–VI semimagnetic quantum structures. *Journal of Luminescence*. – 2011. – Vol. 131, Issue 8. – P. 1696. 4. Dyakonov M.I. (Editor), *Spin Physics in Semiconductors*, (Springer-Verlag, Berlin) 2002. 5. Вакарчук І.О. *Квантова механіка*. – Львів: Вид-во Львівського держ. університету ім. І. Франка, 1998. – 614 с.

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