

**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
КРИВОРІЗЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ ПЕДАГОГІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ФІЗИКО-МАТЕМАТИЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ
КАФЕДРА ФІЗИКИ ТА МЕТОДИКИ ІІ НАВЧАННЯ**

«Допущено до захисту»

Завідувач кафедри

(підпис) (прізвище, ініціали)

«__» _____ 20__ р.

Реєстраційний № _____

«__» _____ 20__ р.

**МЕТОДИЧНІ ОСОБЛИВОСТІ ВИВЧЕННЯ ЕЛЕКТРОННОГО
СПЕКТРУ В НАДГРАТЦІ ВЗДОВЖ КВАНТОВОГО ДРОТУ**

Кваліфікаційна робота студента групи
ФМм-22

ступінь вищої освіти магістр
спеціальності 014.08 Середня освіта
(Фізика)

Соколовича Романа Юрійовича

Керівник:

доктор фізико-математичних наук,
професор кафедри фізики та методики іі
навчання

Білинський Ігор Васильович

Оцінка:

Національна шкала _____

Шкала ECTS __ Кількість балів __

Голова ЕК _____

(підпис) (прізвище, ініціали)

Члени ЕК _____

(підпис) (прізвище, ініціали)

(підпис) (прізвище, ініціали)

(підпис) (прізвище, ініціали)

(підпис) (прізвище, ініціали)

ЗАПЕВНЕННЯ

Я, Соколович Роман Юрійович, розумію і підтримую політику Криворізького державного педагогічного університету з академічної доброчесності. Запевняю, що ця кваліфікаційна робота виконана самостійно, не містить академічного плагіату, фабрикації, фальсифікації. Я не надавав і не одержував недозволену допомогу під час підготовки цієї роботи. Використання ідей, результатів і текстів інших авторів мають покликання на відповідне джерело.

Із чинним Положенням про запобігання та виявлення академічного плагіату в роботах здобувачів вищої освіти Криворізького державного педагогічного університету ознайомлений. Чітко усвідомлюю, що в разі виявлення у кваліфікаційній роботі порушення академічної доброчесності робота не допускається до захисту або оцінюється незадовільно.

ЗМІСТ

ВСТУП	4
РОЗДІЛ 1 ПРИНЦИПИ СТВОРЕННЯ ТА ФІЗИКА ЦИЛІНДРИЧНИХ НАПІВПРОВІДНИКОВИХ НАНОГЕТЕРОСИСТЕМ	8
1.1 Фізичні основи створення квантових ям, квантових дротів, квантових точок та їхнє застосування	8
1.2 Основні моделі електрон-фононої взаємодії в низькорозмірних системах.....	15
1.3 Теорія електрон-фононої взаємодії в трьох основних моделях циліндричного квантового дроту.....	23
Висновки до розділу 1	34
РОЗДІЛ 2 ЕЛЕКТРОННИЙ СПЕКТР В НАДГРАТЦІ ВЗДОВЖ ЦИЛІНДРИЧНОГО КВАНТОВОГО ДРОТУ	35
2.1 Періодична структура вздовж квантового дроту.....	35
2.2 Модель Кроніга-Пенні.....	40
2.3 Модель зі скінченною глибиною потенціальної ями	45
Висновки до розділу 2	49
ВИСНОВКИ	50
СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ	51
ДОДАТОК	56

ВСТУП

Розвиток фізики і технології напівпровідникових гетеросистем розпочався недавно, а саме у 60-80-их роках інтенсивно вивчалися оптичні та електричні властивості тонких напівпровідникових плівок та досліджувалися фізичні особливості поверхневих та приповерхневих явищ [1-4].

Зменшення лінійних розмірів напівпровідникових гетеросистем привело до того, що в них стали суттєвими ефекти розмірного квантування. Гетеросистеми з просторовим обмеженням носіїв заряду у всіх трьох вимірах дістали назву квантових точок (КТ). Якщо ж носії заряду обмежені в двох вимірах і можуть вільно рухатися в третьому, то така "квазіодномірна" система являє собою квантовий дріт (КД) [5].

Ефект розмірного квантування в таких системах приводить до того, що електронний спектр квантової точки являє собою набір дискретних рівнів енергії, розділених областями заборонених станів і відповідає електронному спектру поодинокого атома, хоча реальна квантова точка при цьому може складатися із сотень тисяч атомів. Аналогічна ситуація має місце для квантового дроту, але спектром з дискретними рівнями будуть володіти лише ті носії заряду, які рухаються перпендикулярно до аксіальної осі дроту. Таким чином з'являється унікальна можливість моделювати фізичні експерименти з атомами на макроскопічних об'єктах.

З прикладної точки зору, атомоподібний електронний спектр носіїв в КД та КТ для випадку, коли енергетична відстань між рівнями більша від теплової енергії, дає можливість усунути основну проблему сучасної мікро- та оптоелектроніки-"розмиття" носіїв заряду в енергетичному вікні порядку kT , яке приводить до деградації властивостей приладів при збільшенні робочої температури.

Крім того у вже отриманих гетеросистемах на базі квантових дротів та квантових точок виявлені унікальні фізичні властивості, які дозволяють використовувати КД та КТ: в якості робочих тіл для інжекційних лазерів; для

підсилення коефіцієнта модуляції в оптичних модуляторах; як елементну базу для створення одноелектронних приладів.

На даний час вже досить детально розроблена теорія простих циліндричних квантових дротів (циліндричний напівпровідниковий або металевий квантовий дріт в напівпровідниковому середовищі, прямокутний квантовий дріт в середовищі) та простих і складних сферичних гетеросистем. В таких системах був досліджений електронний [6,7], фононний [8-10] спектри, розраховувалася електрон-фононна взаємодія [11-13], обчислювався електронний транспорт (рухливість основних носіїв заряду, швидкість їхнього дрейфу) [14-15].

Напівпровідникові гетерогенні системи нанорозмірів є важливими об'єктами дослідження фізики твердого тіла та теоретичної фізики в зв'язку з можливістю їхнього використання в елементній базі ЕОМ нового покоління (нові польові транзистори), лазерній техніці (лазери на квантових дротах та квантових точках), для створення "одноелектронних" приладів, в електрооптичних модуляторах. Значний інтерес викликають дослідження квазіодномірних (квантові дроти) та квазінульмірних (квантові точки) гетеросистем, оскільки в цих системах можливо спостерігати унікальні оптичні і електричні властивості не характерні для масивних кристалів.

Використання таких "нових" гетеросистем неможливе без створення потужного теоретичного апарату, який би не тільки успішно пояснював оптичні та електричні властивості вже створених квантових дротів та точок, але й дозволив би прогнозувати виготовлення "нових" гетеросистем різної симетрії вже з наперед заданими фізичними характеристиками.

Теорії, яка б успішно пояснювала електричні та оптичні властивості складних циліндричних квантових дротів поки що немає. Крім того ніде в літературі не зустрічаються теоретичні роботи де б вивчалися різного роду надгратки циліндричної симетрії, хоча такі надгратки з квантових точок та квантових дротів вже створені [5,16], а їхні фізичні властивості вказують на

перспективність застосування таких надґраток для побудови лазерів з температурно-стабільною пороговою густиною струму.

Мета роботи – методами кантової теорії поля в теорії твердого тіла дослідити властивості надґратки вздовж квантового дроту та надґратки циліндричних квантових дротів.

Щоб досягнути цієї мети, потрібно було вирішити наступні **завдання**:

- вивчення енергетичного спектру та хвильових функцій електрона в циліндричній квантовій надґратці аксіальної симетрії, радіальний період якої містить два контактуючих напівпровідникових матеріали;
- знаходження енергетичного спектру та хвильових функцій електрона в надґратці вздовж квантового циліндричного дроту;
- вивчення та аналіз теоретичних основ електронного спектру в надґратці з урахуванням квантових властивостей квантового дроту;
- обробка та аналіз отриманих даних для визначення ключових характеристик електронного спектру та порівняння їх з теоретичними моделями;
- формулювання висновків щодо електронного спектру в надґратці та надання рекомендацій для подальших досліджень та можливих застосувань результатів;

Практична цінність роботи полягає у можливості використання одержаних результатів для створення різного роду гетеросистем з наперед заданими оптичними та електричними характеристиками. Виконані дослідження можуть стимулювати постановку експериментів по отриманню нових гетеросистем і дослідженню електронного, фононного та екситонного спектрів квазічастинок в них.

Отримана інформація пояснює фізичні процеси у розмірнообмежених системах і може бути корисною для подальшого їх використання у лазерній, оптоелектронній техніці, для створення ЕОМ нового покоління.

Вивчення електронного спектру в надґратці вздовж квантового дроту має безпосереднє значення для розуміння квантових явищ та їх впливу на властивості матеріалів. Це може привести до нових можливостей у розробці квантових матеріалів та квантових пристроїв.

Розуміння електронного спектру в надґратці може сприяти розвитку квантової електроніки, високошвидкісних пристроїв та квантових комп'ютерів. Це може мати значний вплив на технологічний прогрес.

Тема є складною та цікавою з наукової точки зору. Розуміння електронного спектру в надґратці вздовж квантового дроту може відкривати нові горизонти в фундаментальних концепціях фізики та квантової механіки.

З урахуванням швидкого розвитку технологій, вивчення властивостей матеріалів на квантовому рівні має велике значення. Розуміння спектральних характеристик наноматеріалів дозволить прискорити розробку майбутніх технологій.

Отже, вивчення електронного спектру в надґратці вздовж квантового дроту є актуальною та перспективною темою, яка може мати вагомий внесок у фундаментальні дослідження та практичні застосування в різних галузях науки та технологій.

Об'єкт дослідження: електронний спектр в надґратці вздовж квантового дроту.

Предмет дослідження: особливості побудови та властивості електронного спектру в надґратці вздовж квантового дроту. Це включає в себе вивчення енергетичних рівнів, розподілу електронів та їх взаємодій у даній структурі.

РОЗДІЛ 1 ПРИНЦИПИ СТВОРЕННЯ ТА ФІЗИКА ЦИЛІНДРИЧНИХ НАПІВПРОВІДНИКОВИХ НАНОГЕТЕРОСИСТЕМ

У 80-і роки прогрес у фізиці двомірних (плоских) гетеросистем з квантовими ямами і їхніх прикладних застосуваннях привів багатьох вчених до вивчення систем, які мають ще меншу розмірність-квантові дроти (КД) і квантові точки (КТ). На відміну від квантових ям, де носії обмежені в напрямку, перпендикулярному до шарів і можуть рухатися вільно в площині шару, в КД носії заряду обмежені в двох напрямках і вільно рухаються тільки вздовж осі дроту. В квантових точках носії заряду обмежені вже у всіх трьох напрямках і тому мають дискретний спектр у випадку, коли енергія електрона (дірки) знаходиться у межах квантової ями.

1.1. Фізичні основи створення квантових ям, квантових дротів, квантових точок та їхнє застосування

Експериментальна робота по створенню і дослідженню структур з КД та КТ почалася більше 10 років назад [17] в роботах Петрофа і Госарда. В той же час було виконане теоретичне дослідження проблем, пов'язаних зі створенням лазерів на квантових дротах та точках [18]. Автори [18] вказували на можливість послаблення температурної залежності густини порогового струму (J) для лазера на КД і на повну температурну стабільність лазерів на КТ (Рис.1.1).

Перші напівпровідникові квантові точки-нанокристали сполук $A^{II}B^{IV}$, сформовані в скляній матриці були запропоновані і реалізовані А.І.Скимовим і А.А.Онущенко [19]. Ця робота ініціювала важливі теоретичні дослідження квантових дротів та точок, розпочаті Ал.І.Ефросом і А.Л.Ефросом у фізико-технічному інституті ім.Іоффе [5]. Але, оскільки напівпровідникові квантові точки були введені в ізольовану скляну матрицю і якість гетерограниці між

склом і напівпровідниковою точкою була невисока, це створювало певні обмеження як для фундаментальних досліджень, так і для експериментальних вимірів.

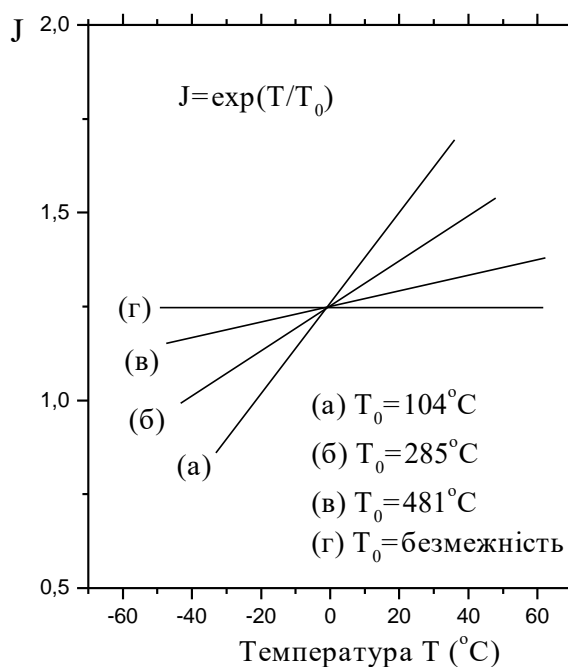


Рис.1.1. Залежність густини порогового струму від температури для різних типів лазерів: (а)-об'ємних, (б)-на квантових ямах, (в)-на квантових дротах, (г)-на квантових точках.

На даний час найбільш перспективним методом формування впорядкованих масивів квантових дротів і квантових точок є метод, в якому використовується явище самоорганізації на кристалічних поверхнях. Релаксація напруги на краях граней може приводити до формування впорядкованих масивів КД і КТ у випадку росту як узгоджених, так і неузгоджених за параметром ґратки матеріалів. Спонтанне формування на кристалічних поверхнях різних впорядкованих структур, що мають періодичність, набагато більшу від параметра ґратки, було предметом інтенсивних теоретичних [20,21] і експериментальних [22,23] досліджень. Кінцевою ціллю цих робіт було виготовлення ідеального КД чи КТ. Тобто, квантова точка повинна була б мати енергетичний спектр, що описується δ -функцією, а отже мати спектр, подібний до атомного. А спектр квантового

дроту повинен був би мати δ -подібний вигляд у напрямку, перпендикулярному до аксіальної осі дроту. Для найбільш повної реалізації переваг цього підходу, необхідно створювати густий і однорідний масив дротів або точок, інакше, неоднорідності можуть анулювати переваги пониженої розмірності. Такі гетероструктури повинні мати розміри в діапазоні декількох нанометрів, щоб забезпечити енергетичні щілини між підрівнями електронів і дірок порядку декількох kT при кімнатній температурі. Крім цього вони повинні бути вільними від дислокацій і дефектів.

Одним із механізмів формування впорядкованих наноструктур є фасетування, в якому плоска кристалічна поверхня перебудовується в періодичну структуру "горбів і долин" для зменшення вільної енергії на поверхні [20,21]. Наступний гетероепітаксіальний ріст на фасетованих поверхнях при оптимізованих умовах росту може приводити до формування гофрованих надграток [24,25].

До іншого класу самоорганізованих структур, на основі яких виготовляють квантові дроти та квантові точки відносять впорядковані масиви сильно напружених "острівців" моношарової висоти, які спонтанно утворюються в процесі субмоношарового осадження одного матеріалу на інший, сильно неузгоджений з ним за параметром кристалічної ґратки [26,27].

Недавно останнім методом в системі InAs – GaAs були отримані високо однорідні масиви трьохмірних квантових точок, що мають поперечне впорядкування [28].

Рухомою силою, що викликає утворення масиву однорідних напружених острівців на кристалічній поверхні, є релаксація пружних напруг на краях граней і взаємодія острівців через напруги, що створюються ними в підложці. Експерименти дають в більшості випадків досить вузький розподіл острівців за розмірами [28]. Більше того, при деяких умовах, когерентні островки InAs утворюють квазіперіодичну квадратну надґратку. Форма

квантових точок і поперечний переріз квантових дрітків можуть значно змінюватися в процесі росту, чи просторового випалювання. Короткоперіодне поперемінне нанесення різних напружених матеріалів може привести до розщеплення КТ і формуванню надграток, що утворюються площинами вертикально зв'язаних квантових точок [29-31]. Як було виявлено, енергія випромінювання із основного стану КТ співпадає з краєм поглинання і енергією лазерної генерації [28]. Спостереження надвузьких ($<0,15\text{eV}$) ліній люмінісценції із одиночних квантових точок, які не проявляють тенденції до розширення зі збільшенням температури [28,29], є доказом того, що енергетичний спектр отриманих квантових точок носить δ -подібний характер.

Щодо розмірів квантових дрітків і квантових точок, то їхня нижня межа визначається розміром, при якому хоча б один електронний рівень існує в КТ. Цей критичний розмір (D_{\min}) істотно залежить від величини розриву зони провідності (ΔE_c) у відповідному гетеропереході, що використовується для отримання КД і КТ. Наприклад, в сферичній квантовій точці хоча б один електронний рівень існує у тому випадку, якщо ΔE_c перевищує величину [16]

$$\Delta E_c^* = \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \left(\frac{\pi}{D_{\min}} \right)^2 \equiv \Delta_1^{\text{QW}}, \quad (1.1)$$

де m_e^* -ефективна маса електрона і Δ_1^{QW} -перший рівень в прямокутній квантовій ямі з нескінченними стінками і шириною D_{\min} . Величина розриву в зоні провідності порядку $0,3\text{eV}$, типова для прямозонних квантових ям. В системі $\text{GaAs} - \text{Al}_{0,4}\text{Ga}_{0,6}\text{As}$, отримується, що діаметр квантової точки не повинен бути меншим 40 \AA . Це, взагалі кажучи, абсолютна нижня границя для розміру КТ, оскільки для КТ навіть дещо більшого розміру енергетична відстань між електронним рівнем в КТ і електронним рівнем в матеріалі матриці буде дуже малою, і при кінцевих температурах тепловий викид

носіїв із КТ може привести до їхнього виснаження. Для системи InAs – AlGaAs величина розриву зони провідності істотно більша, але маса електрона менша, і, таким чином, величини $\Delta E_c m_e^*$ співрозмірні, і критичні розміри квантових точок близькі.

Якщо відстань між енергетичними рівнями стає співрозмірною з тепловою енергією, то збільшується заселеність високих рівнів. Для квантових точок умова, при якій заселеністю більш високих рівнів можна знехтувати, записується як [16]

$$kT \leq \frac{1}{3} (E_2^{QD} - E_1^{QD}), \quad (1.2)$$

де E_2^{QD} , E_1^{QD} -енергії другого і першого рівня розмірного квантування відповідно. Це означає, що у випадку сферичної чи кубічної КТ, переваги розмірного квантування можуть бути повністю реалізовані, якщо [16]

$$kT \leq E_1^{QW}. \quad (1.3)$$

Ця умова встановлює верхню границю для розмірів КТ порядку 120 \AA° в системі GaAs – AlGaAs і порядку 200 \AA° для системи InAs – GaAs в зв'язку з істотно меншою ефективною масою електрона в останньому випадку. Ефективне квантування дірки потребує ще менших розмірів.

Вперше лазерна генерація на квантових ямах була отримана Дж.П. ван дер Зілом та ін. [32,33], але параметри генерації були значно гіршими за ті, які отримані на середніх лазерах з подвійною гетероструктурою. Лише в 1978р. Р.Дюпуї і П.Дапкус в співробітництві з Н.Голон'яком вперше повідомили про створення лазера на квантовій ямі з параметрами, порівняльними зі стандартними лазерами на подвійній гетероструктурі [34]. В цій роботі вперше був використаний термін "квантова яма". Реальну перевагу лазерів на квантових ямах було продемонстровано пізніше

В.Т.Цангом з співробітниками [35]. За рахунок значного покращення технології росту і створення оптимізованої структури вдалося добитися зниження порогової густини струму до $160\text{A}/\text{cm}^2$.

Лазери на квантових дротах та квантових точках, як очікується, будуть мати більш високі характеристики, порівняно зі стандартними лазерами на квантових ямах. В них очікується одночасний прояв таких можливостей: високе диференційоване підсилення, наднизьке значення порогової густини струму і висока температурна стабільність порогової густини струму [18]. Крім того впорядковані масиви КД та КТ, сформовані в області оптичного хвильоводу, можуть привести до появи розподіленого оберненого зв'язку і до стабілізації одномодового лазерного випромінювання. Розміщені в напівпровіднику структури з КД або КТ просторово локалізують носії і запобігають їхній безвипромінюваній рекомбінації на дзеркалах резонатора. Таким чином можна уникнути перегріву дзеркал резонатора, що є однією з найбільш серйозних проблем високопотужних і високоефективних AlGaAs – GaAs і AlGaAs – InGaAs лазерів.

В роботі [30] було показано, що лазери на КТ володіють наступними властивостями:

1. Надвисока температурна стабільність порогової густини струму з характеристичною температурою (T_0) приблизно 350-400К в діапазоні температур (30-150К) та низьке значення порогової густини струму ($120\text{A}/\text{cm}^2$) в діапазоні температур (70-150К);
2. Одномодове лазерне випромінювання на поздовжній моді спостерігається як при низьких, так і при високих температурах (300К). Характеристична температура ($T_0=350\text{K}$) значно перевищує теоретичну границю для лазерів на квантових ямах.

Відносно мала різниця енергій між основним станом екситона в КТ і змочуючого шару ($\sim 100\text{meV}$) і між станами екситона в бар'єрі GaAs ($\sim 200\text{meV}$) приводить до ефективною делокалізації екситонів і носіїв із

квантових точок при високих температурах ($>170\text{K}$) [30]. Внаслідок цього, T_0 зменшується ($T_0 \sim 60\text{K}$), енергія випромінювання зсувається ближче до енергії екситона в змочуючому шарі, а порогова густина струму зростає до $950\text{A}/\text{cm}^2$ при 300K , щоб компенсувати результуючу втрату підсилення.

В лазерах, активна область яких утворена в результаті росту вертикально-зв'язаних масивів квантових точок [29], спостерігається випромінювання через основний стан при $T=300\text{K}$. Не дивлячись на подальше зростання T_0 ($T_0=430\text{K}$ в діапазоні температур $70\text{-}150\text{K}$) і зменшення порогової густини струму ($J=40\text{A}/\text{cm}^2$ при 80K), J при кімнатній температурі була все ще високою ($660\text{A}/\text{cm}^2$) і T_0 залишалась рівною 60K . Квантові точки InGaAs в цих лазерах були вирощені всередині одиночної квантової ями GaAs.

Для лазерів на квантових точках, вирощених методом напружених острівців [30], була продемонстрована надвисока температурна стабільність ($T_0=530\text{K}$ в діапазоні температур $70\text{-}220\text{K}$). Аж до 220K порогова густина струму складала приблизно $50\text{A}/\text{cm}^2$ і практично не залежала від температури. Подальша оптимізація параметрів росту квантових точок і геометрії структури дозволила розширити діапазон надвисокої температурної стабільності порогового струму ($T_0=385\text{K}$) аж до 50°C [30].

Отже фундаментальні фізичні явища в гетероструктурах на основі квантових дротів та квантових точок наступні: *одномірний електронний газ (КД), функція густини станів з гострими максимумами (КД), нульмірний електронний газ (КТ), функція густини станів типу δ -функції, збільшення енергії зв'язку екситона*. Звідси випливають важливі наслідки для застосування квантових дротів та квантових точок у напівпровідникових приладах: *зменшене значення порогового струму в лазері і збільшене диференційне підсилення, зменшена температурна залежність порогового струму (КД), температурна стабільність порогового струму (КТ), дискретний спектр підсилення і можливість отримання робочих*

характеристик, подібних характеристикам твердотільних чи газових лазерів (КТ); більш високий коефіцієнт модуляції в електрооптичних модуляторах; можливість створення "одноелектронних" приладів; нові можливості для створення польових транзисторів.

1.2 Основні моделі електрон-фононної взаємодії в низькорозмірних системах

В частині 1.1 говорилося про те, що квантові дроти і квантові точки мають унікальні електричні і оптичні властивості, порівняно з об'ємними матеріалами, що зумовлює їхнє використання для створення лазерів з надзвичайною температурною стабільністю.

Для створення квантових дротів, точок, а тим більше, надграток дротів або точок з наперед заданими оптичними та електричними властивостями необхідний потужний теоретичний апарат, який би дозволив знайти та описати характеристики спектрів квазічастинок в таких системах: електронів, дірок, екситонів, фононів.

Наявність поверхні в квантових дротах та квантових точках приводить до появи поляризаційних коливань нового типу-поверхневих. Брискін і Фірсов [36] показали, що існують дві групи таких коливань: поверхневі коливання першого типу, амплітуда яких повільно спадає по мірі віддалення від поверхні, та коливання другого типу з амплітудою, яка швидко спадає від поверхні на відстанях порядку постійної ґратки. Поверхневі коливання першого типу, в свою чергу, діляться на радіаційні, які можуть безпосередньо взаємодіяти зі світлом або зарядженими частинками, і нерадіаційні, які без участі третього тіла не взаємодіють із світлом, але можуть взаємодіяти із зарядами (наприклад розсіювання електронів на цих коливаннях).

З того часу, як встановили існування обмежених оптичних фононів в надгратках GaAs/AlAs [37], багато експериментальних [37-40] і теоретичних [41-57] робіт було присвячено вивченню фононних мод у напівпровідникових наноструктурах пониженої розмірності. Для цього були розвинуті мікроскопічні [42,43] та макроскопічні [48-62] моделі. Всі вони були спрямовані на те, щоб описати оптичні фонони і оцінити електрон-фононну взаємодію в різного роду (плоскі, циліндричні, сферичні) наногетеросистемах. При вивченні електрон-фононної взаємодії, а також електронного транспорту на основі мікроскопічних моделей [42,43] необхідно було проводити громіздкі розрахунки, а отже робити спрощення, які не завжди вдавалося обґрунтувати. Тому, недавно, почалася розробка кількох макроскопічних моделей [48-62] для аналітичного опису оптичних фононів. В літературі широко використовуються три типи макроскопічних моделей для опису оптичних фононів у напівпровідникових гетеросистемах:

1. Модель діелектричного континууму. В ній моди оптичних фононів визначаються електростатичними граничними умовами на межах поділу різних середовищ. Модель діелектричного континууму передбачає існування двох типів мод оптичних фононів: обмежені фонони-вони подібні до "звичайних" фононів в об'ємних напівпровідниках і інтерфейсні фонони-вони обумовлені наявністю поверхні (межі розділу між середовищами). Електростатичний потенціал обмежених фононів прямує до нуля, а нормальна складова вектора електричного зміщення максимальна на границі розділу. Потенціал інтерфейсних фононів максимальний на границі розділу і швидко спадає по мірі віддалення від поверхні [50, 51, 58-60].
2. Модель гідродинамічного континууму. Ця модель використовує механічні граничні умови. В ній обмежені фонони є "керованими" і на границі розділу мають вузол для нормальної складової вектора електричного зміщення і максимум для електростатичного потенціалу. Наявність

інтерфейсних фононів в цій моделі все ще залишається під питанням [42-44, 51-53, 63].

3. Модель Хуанга-Цу. Вона була розвинута Хуангом і Цу [45, 47] на основі простої мікроскопічної моделі. Ця модель передбачає, що і електростатичний потенціал і нормальна складова вектора електричного зміщення прямують до нуля на границі розділу між різними середовищами.

Морі і Андо [64] вивчали взаємодію електронів з оптичними фононами у простих і подвійних плоских гетероструктурах (Рис.1.2) в межах моделі діелектричного континууму.

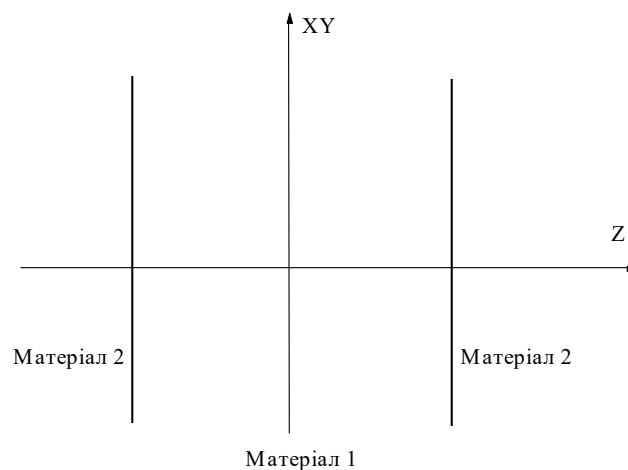


Рис.1.2. Подвійна плоска гетеросистема.

Для подвійної гетеросистеми ними було отримано 6 типів фононних мод:

1. Симетричні інтерфейсні моди, амплітуда яких спадає по мірі віддалення від границі розділу двох середовищ, а поле поляризації паралельне до поверхні розділу і симетричне відносно $z = 0$.
2. Антисиметричні інтерфейсні моди, амплітуда яких спадає по мірі віддалення від границі розділу, а поле поляризації паралельне до поверхні розділу і антисиметричне відносно $z = 0$.
3. Обмежені поздовжні моди, поляризація яких паралельна границі розділу, має вузли на границях розділу і прямує до нуля в бар'єрних плівках.

4. Обмежені поперечні моди, поляризація яких перпендикулярна до границі розділу, має вузли на границях розділу і прямує до нуля в бар'єрних плівках.
5. Напівобмежені поздовжні моди в бар'єрних плівках.
6. Напівобмежені поперечні моди в бар'єрних плівках.

Також в цій роботі було отримано гамільтоніан взаємодії електрона зі всіма фононними вітками і показано, що для вузьких квантових ям електрони, в основному, взаємодіють з фононами бар'єрних плівок.

Щодо акустичних фононів, то вони вивчалися багатьма авторами [65-68]. Моделі, розроблені в цих працях, базувалися на асимптотичній залежності енергії електрона, а енергіями акустичних фононів нехтували (так зване еластичне наближення). Як показано в роботі [69], еластичне наближення справедливе тільки в об'ємних напівпровідникових матеріалах, але не справджується в низькорозмірних системах (квантових дротах, квантових точках). Рідлі в своїх працях [41,70], розробляючи теорію мод та потенціалів поляризації акустичних фононів запропонував метод, який враховував нееластичність в квантових дротах, замінюючи форм-фактор (функція, що описує невизначеність закону збереження імпульсу в напрямку, перпендикулярному до аксіальної осі квантового дроту) сумою зважених δ -символів Кронеккера. Але в цьому методі втрачалися деякі особливості електрон-фононної взаємодії, а саме не вдавалося адекватно описати рухливість електронів при низьких температурах. В теоретичних роботах [71,72] було знайдено потенціали поляризації та енергії акустичних фононів в квантових дротах та квантових точках адекватно враховуючи нееластичність, що зумовлена невизначеністю закону збереження імпульсу (квазізбереження). Але ці праці були зроблені в однозонному наближенні, і міжзонні переходи електронів через акустичні фонони не враховувалися. В роботі [69] були знайдені потенціали поляризації, енергії акустичних фононів, перенормування основного електронного рівня взаємодією з цими фононами в прямокутному квантовому дроті, враховуючи, як внутрізонні,

так і міжзонні переходи електронів, взаємодіючих з акустичними фононами. Показано, що невизначеність закону збереження імпульсу в квазіодномірних системах веде до нееластичності акустичних фононів на відміну від об'ємних матеріалів. Було також визначено, що взаємодія електронів з акустичними фононами зростає при зменшенні поперечного перерізу квантового дроту і стає значно більшою, ніж в об'ємних кристалах. Також доведено, що рухливість електронів в еластичному чи квазіеластичному наближенні, при температурах менших за 100К, обчислюється з великою похибкою.

В роботах [73-75] було показано, що взаємодія електронів з акустичними фононами в низькорозмірних системах стає помітною лише при низьких температурах, тобто при малих енергіях електронів.

В роботі [76] було запропоновано загальний метод для знаходження енергій, потенціалів полів поляризації та нормалізування мод акустичних фононів в циліндричному квантовому дроті і підтверджено той факт, що взаємодія електронів з акустичними фононами зростає із зменшенням радіуса квантового дроту.

Щодо оптичних фононів, то недавно в експериментах по розсіюванню Рамана [40] в циліндричних квантових дротах GaAs спостерігалися моди інтерфейсних фононів. Експериментально вивчалася також рухливість електронів, взаємодіючих з оптичними фононами [77]. В цій роботі була відкрита осциляція електронного струму, спричинена сильним обмеженням електронів в квантовому дроті.

В кінці 80-их років в літературі, де досліджувалися моди оптичних фононів та їхня взаємодія з електронами, спостерігалася дискусія щодо вибору аналітичної моделі для опису оптичних фононів в низькорозмірних системах [51-63, 78-80]. Так, Рюкер [42-44] обчислив інтенсивність електрон-фононного розсіювання в квантових ямах GaAs/AlAs, використовуючи мікроскопічну модель для опису фононого спектру, модель діелектричного, гідродинамічного континууму та модель Хуанга-Цу. Він довів, що результати, отримані в рамках цих чотирьох моделей, можуть бути повністю

несумісними, хоча й близькими для моделей діелектричного континууму, мікроскопічної моделі та Хуанга-Цу. Модель гідродинамічного континууму давала велику похибку і неадекватно описувала оптичні фонони.

У роботі [81] Рудінім і Рейнеке було досліджено взаємодію електронів з оптичними фононами в квантових ямах, враховуючи як внутрізонні, так і міжзонні переходи у межах трьох, вище згаданих, макроскопічних моделей. Вони встановили, що модель гідродинамічного континууму дає велику похибку в обчисленні перенормування електронного рівня взаємодією з фононами, хоча якісно дає вірний результат. В той же час, результати, отримані в моделі діелектричного континууму та Хуанга-Цу практично співпадали. Детальне дослідження фононного спектру і електрон-фононної взаємодії в плоских надгратках Тсючивою і Андо [56,57] показало, що в таких структурах навіть апроксимація об'ємними фононами (фононні моди об'ємного кристалу) добре пояснює залежність інтенсивності електронного розсіювання від товщини шарів різних матеріалів. Цей факт ще раз підкреслює глибоку відмінність між квазідвомірними і квазіодномірними та нульмірними структурами.

В роботі [55] Нешем був відмічений той важливий факт, що інтенсивність електрон-фононного розсіювання в квантових ямах не залежить від базисного набору хвильових функцій, що використовується для опису фононних мод. Необхідною є лише умова повноти і ортогональності функцій цього набору.

Танатар [82] і Константінов [80] описали моди оптичних фононів за допомогою теорії, яка поєднувала в собі всі три, вище описані, макроскопічні моделі (так звана гібридизована теорія). В цій теорії обмежені та інтерфейсні фонони окремо не відділялися, що значно спростило розрахунки, але, в той же час, приводило до великої похибки при обчисленні електрон-фононної взаємодії у вузьких квантових дротах.

Стросіо зі співробітниками [58] обчислили енергії та потенціали полів поляризації обмежених та інтерфейсних фононів в прямокутному квантовому

дроті в межах моделі діелектричного континууму. При вивченні електрон-фононної взаємодії вони отримали результат, який вказував на те, що інтерфейсні фонони відіграють переважну роль у електрон-фононній взаємодії лише у сильно вузьких квантових дротах. Цей же факт був підтверджений в роботі Кніпа і Рейнеке [83], які на відміну від Стросіо врахували ще й міжзонні переходи електронів в електрон-фононній взаємодії в квантовому дроті прямокутного перерізу. Вони також працювали в межах моделі діелектричного континууму для опису фононних мод і в наближенні ефективної маси для отримання хвильових функцій і енергетичного спектру електронів. Ними було показано, що внесок інтерфейсних фононів у електрон-фононну взаємодію стає відчутним і порівняльним з внеском обмежених фононів лише при малих розмірах ($\leq 100 \text{ \AA}$) квантового дроту і великих енергіях електронів.

Тим же Кніпом і Рейнеке [61,62] були знайдені інтерфейсні моди для дротів з еліптичним перерізом в моделі діелектричного континууму і показано, що для дротів більш загального перерізу неможливо аналітично описати інтерфейсні фонони в моделі діелектричного континууму.

Ендерлайн і Селбман [84] описали моди оптичних фононів в квантовому циліндричному дроті GaAs методом узагальнення рівняння Борна-Хуанга з умовою ермітовості для динамічного оператора. Вони отримали гамільтоніан електрон-фононної взаємодії в зображенні чисел заповнення за всіма змінними системи Фреліхівського типу. Розрахунки зсуву основного електронного рівня показали, що результати добре узгоджуються з тими, які отримуються в моделі діелектричного континууму.

В роботах Константінова і Рідлі [85,86] обчислювався спектр фононів та їхня взаємодія з електронами в моделі гідродинамічного континууму в циліндричному квантовому дроті GaAs, що знаходився в середовищі $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ [85] і у вільно розміщеному циліндричному квантовому дроті [86]. Як було показано в [52], модель гідродинамічного континууму можливо

застосовувати лише тоді, коли радіус квантового дроту набагато більший від міжатомної віддалі. Крім того ця модель справедлива тільки для малих хвильових векторів, де електрон-фононна взаємодія є великою. Автори показали, що в таких системах при фіксованому радіусі квантового дроту існує скінчене число керованих мод оптичних фононів. Це число більше, ніж спостерігалось в плоскій системі. Цей факт пояснюється зниженням симетрії при переході від плоского випадку до квазіодномірного (квантовий дріт). Щодо інтерфейсних фононів, то в циліндрі GaAs, розміщеному в середовищі $Al_xGa_{1-x}As$, вони з'являються лише тоді, коли хвильовий вектор більший деякого критичного значення. Найнижча аксіально-симетрична інтерфейсна мода існує завжди, оскільки її критичний хвильовий вектор рівний нулю. При переході до вільно розташованого циліндричного квантового дроту ситуація кардинально змінюється. Хоча керованих мод залишається скінченна кількість, інтерфейсних фононів в такій системі не існує. Це приводить до помітного зменшення електрон-фононної взаємодії в тонких дротах [86].

В роботі Масале і Константінова [87] розглядалася взаємодія електронів з оптичними фононами в циліндричному квантовому дроті в присутності аксіального магнітного поля. Бралися до уваги як внутрізонні, так і міжзонні переходи електронів. Було показано, що завдяки Зееманівському розщепленню першого збудженого рівня, при фіксованому радіусі квантового дроту, існує критичне значення магнітного поля, за межами якого електрон-фононна взаємодія першого порядку заборонена згідно закону збереження енергії. Якщо значення магнітного поля було близьке до критичного, то спостерігалось швидке міжзонне затухання.

В роботі [88] Телангом, при наявності аксіального магнітного поля, була досліджена взаємодія електронів, як з оптичними, так і з акустичними фононами в квантовому дроті прямокутного перерізу. Було показано, що магнітне поле значно знижує інтенсивність розсіювання електронів на

акустичних фононах (на порядок в експериментально легко досяжних величинах магнітного поля), але веде до зростання взаємодії електронів з оптичними фононами (як з обмеженими, так і з інтерфейсними).

Отже, прогрес у вивченні фізичних явищ в електрон-фононних системах низькорозмірних наногетероструктур очевидний. Однак, ще ніде не досліджувалися спектри квазічастинок в складних циліндричних напівпровідникових квантових дротах, тобто гетеросистемах, які складаються з довільної кількості N циліндричних шарів, розміщених у зовнішньому $N + 1$ середовищі. Крім того, в літературі не зустрічаються роботи по вивченню спектрів квазічастинок (електронів, дірок, фононів, екситонів) в різного роду надграткових утвореннях циліндричної симетрії: надгратка вздовж квантового циліндричного дроту і надгратка циліндричних квантових дротів. Дослідження спектрів та взаємодії квазічастинок в таких гетеросистемах і становлять мету цієї дисертаційної роботи.

1.3. Теорія електрон-фононної взаємодії в трьох основних моделях циліндричного квантового дроту.

Найбільш детально фононні моди та електрон-фононна взаємодія в циліндричному квантовому дроті вивчалися в роботі [15]. Розрахунок потенціалів полів поляризації проводився в межах трьох моделей: діелектричного континууму, гідродинамічного континууму та Хуанга-Цу, згаданих вище. Хвильова функція та енергетичний спектр електрона в такій системі обчислювалися в наближенні ефективної маси. Крім того було досліджено електронний транспорт в такому дроті, враховуючи як внутрізонні, так і міжзонні переходи електронів.

Досліджувалася система, що складається з циліндричного квантового дроту GaAs, розміщеного в середовищі AlAs. Радіус дроту R , довжина L (при чому $L \gg R$, так, щоб рух електрона вздовж аксіальної осі циліндру

можна було вважати вільним). Для знаходження хвильових функцій та спектру енергій електрона розв'язується рівняння Шредінгера [89,90]

$$\hat{H}\psi = E\psi, \quad (1.4)$$

де \hat{H} -оператор Гамільтона системи. При апроксимації безмежно-глибокою потенціальною ямою, в циліндричній системі координат, хвильові функції електрона записувались у вигляді

$$\psi_{ljk}(\vec{r}) = \frac{e^{ikz}}{\sqrt{L}} C_j^l J_l(x_j^1 \frac{r}{R}) e^{i\ell\phi}; \quad \begin{cases} l = \dots, -1, 0, 1, \dots \\ j = 1, 2, 3, \dots \end{cases}, \quad (1.5)$$

де l -магнітне квантове число, j -головне квантове число, J_l -функція Бесселя, k -аксіальна компонента хвильового вектора електрона. Підставляючи (1.5) в (1.4), отримується спектр енергій електрона у вигляді

$$\varepsilon_j^l(k) = \frac{k^2}{2m^*} + \frac{x_j^1}{2m^* R^2}. \quad (1.6)$$

Тут $C_j^l = \frac{1}{\sqrt{\pi y_j^1 R}}$ -нормуючий множник, x_j^1 - j -ий нуль функції Бесселя

порядку l ($J_l(x_j^1) = 0$) і $y_j^1 = J_{l+1}(x_j^1)$, m^* -ефективна маса електрона.

Для опису оптично-фононних мод в квантовому дроті GaAs/AlAs в моделі діелектричного континууму, квантовий дріт розглядався як континуум з діелектричною проникністю $\varepsilon_1(\omega)$, розміщений в середовищі з діелектричною проникністю $\varepsilon_2(\omega)$, при чому

$$\varepsilon_i(\omega) = \varepsilon_{i\infty} \frac{(\omega^2 - \omega_{LOi}^2)}{(\omega^2 - \omega_{TOi}^2)}, \quad (1.7)$$

де ω -частота коливань оптичних фононів, $\varepsilon_{i\infty}$ -високочастотна діелектрична проникність, ω_{LOi} та ω_{TOi} -частоти поздовжніх та поперечних об'ємних оптичних фононів відповідно. Електричні потенціали, пов'язані з оптичними коливаннями ґратки задовільняють систему рівнянь Максвелла [91], комбінуючи яку, отримується рівняння

$$\varepsilon_i(\omega)\nabla^2\varphi = 0. \quad (1.8)$$

Обмежена оптична мода з частотою $\omega = \omega_{LO1}$, що відповідає $\varepsilon_1(\omega) = 0$ і граничній умові $\varphi(\rho)|_{\rho > R} = 0$ характеризується аксіальною компонентою хвильового вектора q , квантовим магнітним числом m і головним квантовим числом n . Число n вводиться для того, щоб розрізнити фононні моди з однаковим q і m . Потенціал такої моди, згідно симетрії задачі наступний

$$\varphi(\vec{r}) = \begin{cases} CJ_m(q_{mn}\rho)e^{im\varphi}e^{iqz}, & \rho \leq R \\ 0, & \rho > R \end{cases}. \quad (1.9)$$

Тут $q_{mn} = \frac{x_n^m}{R}$ -поперечна компонента хвильового вектора обмеженого фонона. Нормуючий множник C визначається, використовуючи зв'язок між потенціалом φ і приведеним іонним зміщенням \vec{w}

$$\vec{\nabla}\varphi = \omega_{LOi}\varepsilon_0^{-1/2}(\varepsilon_{i\infty}^{-1} - \varepsilon_{i0}^{-1})\vec{w}, \quad (1.10)$$

де ϵ_{i0} -статична діелектрична проникність відповідного матеріалу.

Повний потенціал всіх обмежених фононних мод всередині дроту може бути записаний у вигляді [15]

$$\varphi^{DC}(\vec{r}) = \sum_{qmn} \alpha \left(\frac{\omega_{LO1}}{L} \right)^{1/2} V_{mn}^{DC}(\rho) e^{im\varphi} e^{iqz} [a_{mn}(q) + a_{mn}^+(-q)], \quad (1.11)$$

де

$$V_{mn}^{DC}(\rho) = C_{mn}^{DC} J_m(q_{mn}\rho), \quad (1.12)$$

$$C_{mn}^{DC} = \frac{1}{\sqrt{\pi R} y_n^m} \left(\frac{1}{q^2 + q_{mn}^2} \right), \quad (1.13)$$

$$\alpha = \left(\frac{\hbar}{2\epsilon_{i0}} \right)^{1/2} \left(\frac{1}{\epsilon_{i\infty}} - \frac{1}{\epsilon_{i0}} \right)^{1/2}, \quad (1.14)$$

$a_{mn}(q), a_{mn}^+(q)$ -оператори знищення і народження обмеженого фонона, що знаходиться в стані m, n з аксіальним хвильовим вектором q .

Тоді гамільтоніан електрон-фононої взаємодії в зображенні чисел заповнення за всіма змінними системи може бути записаний так

$$\begin{aligned} H^C &= -e \sum_{\substack{l'l' \\ j'j}} \int d\vec{r} \psi_{lj}^*(\vec{r}) \varphi^{DC}(\vec{r}) \psi_{l'j'}(\vec{r}) = \\ &= \sum_{\substack{l'l' \\ j'j}} \sum_{nkq} M^{DC}(l, l', j, j', q, n) c_{ijk}^+ c_{l'j'k-q} [a_{l-l'n}(q) + a_{l-l'n}^+(-q)], \end{aligned} \quad (1.15)$$

де c_{ijk}, c_{ijk}^+ -оператори знищення і народження електрона з хвильовим вектором k і квантовими числами l, j ,

$$M^{DC}(l,l',j,j',q,n) = -e\alpha \left(\frac{\omega_{LO1}}{L} \right)^{1/2} C_{l-l'n}^{DC} F_{l,l',j,j'}^C(x_n^{l-l'}) \quad (1.16)$$

- функція зв'язку електрон-фононої взаємодії,

$$F_{l,l',j,j'}^C(x_n^{l-l'}) = 2 \int_0^1 \xi d\xi \frac{1}{y_j^l y_{j'}^{l'}} J_1(x_j^l \xi) J_{1-l'}(x_n^{l-l'} \xi) J_{l'}(x_{j'}^{l'} \xi) \quad (1.17)$$

-форм фактор [92].

Інтерфейсні фонони в циліндричному квантовому дроті в моделі діелектричного континууму також вивчалися в роботах [61,62]. Моді цих фононів та потенціали поля поляризації знаходяться з умов $\varepsilon_i(\omega) = 0$ і $\nabla^2 \varphi = 0$.

Для поперечної моди з аксіальним хвильовим вектором q , потенціал поля поляризації $\varphi_s(\vec{r})$ в матеріалі GaAs ($\rho \leq R$) і матеріалі AlAs ($\rho > R$) виражаються через модифіковані функції Бесселя. Інтерфейсні фонони вносять вклад в електрон-фононну взаємодію лише в надякісних квантових дротах GaAs/AlAs. В таких дротах електрони займають лише основну зону і міжзонними переходами можна знехтувати. Тому в роботі [15] розглядалася лише основна (найнижча) мода інтерфейсного фонону. В цьому наближенні потенціал поля поляризації може бути записаний у вигляді

$$\varphi_s(\vec{r}) = \begin{cases} CK_0(qR)I_0(q\rho)e^{iqz}e^{im\varphi}; & \rho \leq R \\ CI_0(qR)K_0(q\rho)e^{iqz}e^{im\varphi}; & \rho > R \end{cases} \quad (1.18)$$

Повний потенціал інтерфейсних фононів отримується згідно методу нормалізації [49, 58-60] і має вигляд

$$\varphi_s(\vec{r}) = \sum_{qs} \alpha \left(\frac{\hbar}{2\varepsilon_{10}\omega_s L} \right)^{1/2} \frac{1}{\sqrt{\pi qR}} \frac{I_0(q\rho)}{I_0(qR)} C_s(q\omega_s) [a_s(q) + a_s^+(-q)], \quad (1.19)$$

де $a_s(q)$ і $a_s^+(q)$ -оператори знищення і народження інтерфейсного фонону в стані з квантовим числом s і хвильовим вектором q ,

$$C_s^{-2}(q, \omega_s) = \varepsilon_{10} \frac{\omega_{LO1}^2 - \omega_{TO1}^2}{(\omega_s^2 - \omega_{TO1}^2)^2} \left[1 - \frac{I_2(qR)}{I_0(qR)} \right] + \varepsilon_{20} \frac{\omega_{LO2}^2 - \omega_{TO2}^2}{(\omega_s^2 - \omega_{TO2}^2)^2} \left[\frac{K_2(qR)}{K_0(qR)} - 1 \right] + \quad (1.20)$$

-нормуючий множник.

Частота інтерфейсних фононів ω_s визначається із дисперсійного співвідношення [61,62]

$$\varepsilon_{2\infty} \frac{\omega_s^2 - \omega_{LO2}^2}{\omega_s^2 - \omega_{TO2}^2} \frac{K_1(qR)}{I_0(qR)} + \varepsilon_{1\infty} \frac{\omega_s^2 - \omega_{LO1}^2}{\omega_s^2 - \omega_{TO1}^2} \frac{I_1(qR)}{I_0(qR)} = 0. \quad (1.21)$$

Сума по s в рівнянні (1.21) проводиться по двом інтерфейсним віткам ω_s^- і ω_s^+ , що знаходяться в областях: $\omega_{TO1} \leq \omega_s^- \leq \omega_{LO1}$ (інтерфейсні фонони в GaAs) і $\omega_{TO2} \leq \omega_s^+ \leq \omega_{LO2}$ (інтерфейсні фонони в AlAs). Взаємодія електронів з інтерфейсними фононами задається гамільтоніаном

$$H^C = \sum_{l,j'} \sum_{k,q,s} M^s(l,l',j,j',q,s) c_{ljk}^+ c_{l'j'k-q} [a_s(q) + a_s^+(-q)] \quad (1.22)$$

з функцією зв'язку електрон-фононої взаємодії

$$M^s(l,l',j,j',q,s) = -\frac{e}{\sqrt{\pi R}} \left(\frac{\hbar}{2\varepsilon_{10}\omega_s L} \right)^{1/2} C_s(q,\omega_s) \frac{1}{q} F_{l,l',j,j'}^s(qR) \quad (1.23)$$

і форм фактором інтерфейсних фононів

$$F_{l,l',j,j'}^s(qR) = \frac{2}{I_0(qR)} \int_0^1 \xi d\xi \frac{1}{y_j^l y_{j'}^{l'}} J_1(x_j^l \xi) I_0(qR \xi) J_{l'}(x_{j'}^{l'} \xi). \quad (1.24)$$

В моделі гідродинамічного континууму моди оптичних фононів отримуються, як розв'язки загального рівняння Борна-Хуанга з механічними граничними умовами для оптичного зміщення, які передбачають неперервність нормальної складової швидкості і неперервність тиску на границі розділу між середовищами [52,78].

Слідуючи [42-44, 63,78] в роботі [15] припускається, що в моделі гідродинамічного континууму не існують інтерфейсні фонони і розглядаються лише обмежені оптичні фонони. Моди оптичних фононів та потенціал поля поляризації обмежених оптичних фононів шукається згідно методу, описаному в [53,70,71]. Згідно з ним потенціал всіх оптичних мод може бути записаний наступним чином

$$\varphi^{HC} = \sum_{mnq} \alpha \left(\frac{\omega_{LO1}^2}{\omega_{mn} L} \right)^{1/2} V_{mn}^{HC} e^{im\varphi} e^{iqz} [A_{mn}(q) + A_{mn}^+(-q)], \quad (1.25)$$

де

$$V_{mn}^{HC} = C_{mn}^{HC} J_m(q_{mn}\rho) \quad (1.26)$$

i

$$C_{mn}^{\text{HC}} = \frac{1}{\sqrt{j_{mn}^2 - m^2}} \frac{1}{J_m(j'_{mn})} \frac{q_{mn}}{(q^2 + q_{mn}^2)^{1/2}} \quad (1.27)$$

-нормуючий множник, j'_{mn} - n -ий нуль похідної функції Бесселя порядку m .

Далі гамільтоніан електрон-фононої взаємодії має такий самий вигляд, як і (1.15) в моделі діелектричного континууму, але з іншою функцією зв'язку

$$M^{\text{HC}}(l, l', j, j', q, n) = -e\alpha \left(\frac{\omega_{\text{LO1}}^2}{\omega_{mn} L} \right)^{1/2} C_{l-l'n}^{\text{HC}} F_{l, l', j, j'}^{\text{C}}(j'_{l-l'n}). \quad (1.28)$$

Модель Хуанга-Цу була детально розроблена в [45-47] для квантових ям і прямокутних квантових дротів. Ця теорія вимагає того, щоб і нормальна складова вектора електричного зміщення і потенціал поля поляризації зникали на границі розділу між середовищами. Модернізація моделі Хуанга-Цу на випадок циліндричного квантового дроту в роботі [15] дає наступне значення для потенціалу обмежених фононів

$$\varphi^{\text{HZ}}(\vec{r}) = \sum_{qmn} \alpha \left(\frac{\omega_{\text{LO1}}}{L} \right)^{1/2} V_{mn}^{\text{HZ}}(\rho) e^{im\varphi} e^{iqz} [A_{mn}(q) + A_{mn}^+(-q)], \quad (1.29)$$

де

$$V_{mn}^{HZ} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} C_{mn}^{HZ} \Phi_{mn}(\rho). \quad (1.30)$$

Тут

$$\Phi_{mn}(\rho) = \begin{cases} J_0(x'_n \frac{\rho}{R}) - J_0(x'_n); & m = 0 \\ J_m(h_n^m \frac{\rho}{R}) - J_m(h_n^m) \frac{\rho}{R}; & m = 2S + 1 \ (S = 0, 1, 2, \dots) \\ J_m(g_n^m \frac{\rho}{R}) - J_m(g_n^m) \left(\frac{\rho}{R}\right)^2; & m = 2S \ (S = 1, 2, \dots) \end{cases} \quad (1.31)$$

з величинами g_n^m і h_n^m , які визначаються з рівнянь

$$\begin{aligned} h_n^m J'_m(h_n^m) - J_m(h_n^m) &= 0 \\ g_n^m J'_m(g_n^m) - 2J_m(g_n^m) &= 0 \end{aligned} \quad (1.32)$$

а нормуючий множник C_{mn}^{HZ} обчислюється окремо для кожного значення m ($|m| = 2S + 1$, $S = 0, 1, 2, \dots$).

Нарешті функція зв'язку електрона з обмеженими фононами в моделі Хуанга-Цу приймає вигляд

$$M^{HZ}(l, l', j, j', q, n) = -e\alpha \left(\frac{\omega_{LO1}}{\pi L} \right)^{1/2} C_{mn}^{HZ} F_{l, l', j, j'}^{HZ}(q_{l-l'n} R), \quad (1.33)$$

де

$$q_{mn} = \begin{cases} x'_n / R; & m = 0 \\ h_n^m / R; & m = 2S + 1 \\ g_n^m / R; & m = 2S \end{cases} \quad (1.34)$$

-поперечний хвильовий вектор,

$$F_{l,l',j,j'}^{HZ}(q_{l-l'n} \mathbf{R}) = \int_0^1 \xi d\xi \frac{2}{Y_j Y_{j'}} J_1(x_j^l \xi) \Phi_{l-l'n}(q_{l-l'n} \xi) J_{l'}(x_{j'}^{l'} \xi) \quad (1.35)$$

В роботі відмічається, що таким чином отримані фононні моди в моделі Хуанга-Цу є дещо специфічними [55,80]. Але вони досить точні для оцінки електрон-фононної взаємодії і для обчислення електронного транспорту в квантовому циліндричному квантовому дроті. Крім того, потенціали поля поляризації обмежених фононів в моделі Хуанга-Цу співпадають з отриманими в межах гібридизованої теорії, згадуваної вище [80].

Інтерфейсні фонони в моделі Хуанга-Цу нічим не відрізняються від тих, які отримані в межах моделі діелектричного континууму [45-57] і отже гамільтоніан взаємодії електрона з інтерфейсними фононами в цій моделі задається рівнянням (1.22) з тією ж самою функцією зв'язку.

На Рис.1.3 приведено залежності величини V_{01} (для першої моди обмеженого фонону), обчисленої згідно формул (1.12), (1.26), (1.30) від радіуса квантового дроту для трьох різних моделей.

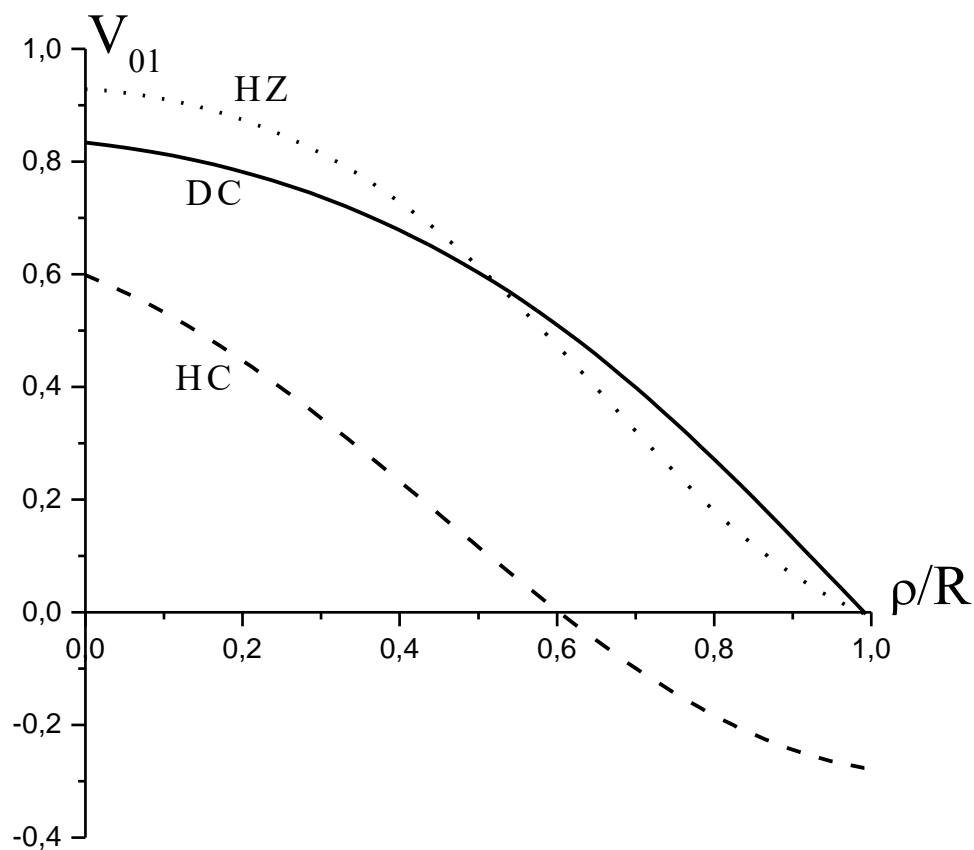


Рис.1.3. Залежність величини V_{01} від радіуса квантового дроту для трьох моделей: точкова крива-модель Хуанга-Цу, суцільна-модель діелектричного континууму, штрихова-модель гідродинамічного континууму.

Точкова крива, яка відповідає моделі Хуанга-Цу близька до кривої, отриманої в межах моделі діелектричного континууму, в той час, як $V_{01}(\rho)$ в моделі гідродинамічного континууму має набагато меншу величину, що проявляється в аномальному послабленні електрон-фононної взаємодії в цій системі.

Крім цього в роботі [15] був досліджений електронний транспорт в циліндричному квантовому дроті GaAs/AlAs і зроблені наступні висновки:

Висновки до розділу 1

1. При обчисленні електрон-фононої взаємодії та електронного транспорту в циліндричному квантовому дроті GaAs/AlAs результати, отримані в моделях діелектричного континууму та Хуанга-Цу близькі.
2. Модель гідродинамічного континууму дає велику похибку в обчисленні електрон-фононої взаємодії, особливо у випадку, коли радіус квантового дроту малий. Оскільки інтерфейсні фонони в цій моделі відсутні, то Неш [55] припустив, що модель гідродинамічного континууму є неповною і не може використовуватись для обчислення оптичних властивостей циліндричних квантових дротів.
3. В моделях діелектричного континууму і Хуанга-Цу інтерфейсні фонони починають вносити вклад в електрон-фононну взаємодію при радіусах дроту, менших 200 \AA і їхній вклад стає домінуючим при радіусах менших 50 \AA .

РОЗДІЛ II ЕЛЕКТРОННИЙ СПЕКТР В НАДГРАТЦІ ВЗДОВЖ ЦИЛІНДРИЧНОГО КВАНТОВОГО ДРОТУ

Спектри квазічастинок в однорідних квантових дротах детально вивчались в багатьох роботах [6,7, 8-10]. Електрон-фононна взаємодія в циліндричних квазіодномірних гетеросистемах також досліджувався експериментально і теоретично [11-13].

Безсумнівний інтерес являє дослідження спектрів квазічастинок в неоднорідних напівпровідникових циліндричних квантових дротах з періодом вздовж осі. Оскільки така система має нанорозмірний поперечний переріз і період, то вона є квантовою квазіодномірною надграткою зі специфічними властивостями, які відрізняють її фізичні властивості від двомірних та тримірних аналогів.

Мета цього розділу-дослідити спектр електронів в надгратці вздовж циліндричного квантового дроту, просторовий період якої складається з двох контактуючих напівпровідникових матеріалів.

2.1. Періодична структура вздовж квантового дроту

Досліджується квантовий циліндричний дріт, в якому два, контактуючих напівпровідникових матеріали утворюють періодичну структуру вздовж його осі (Рис.2.1).

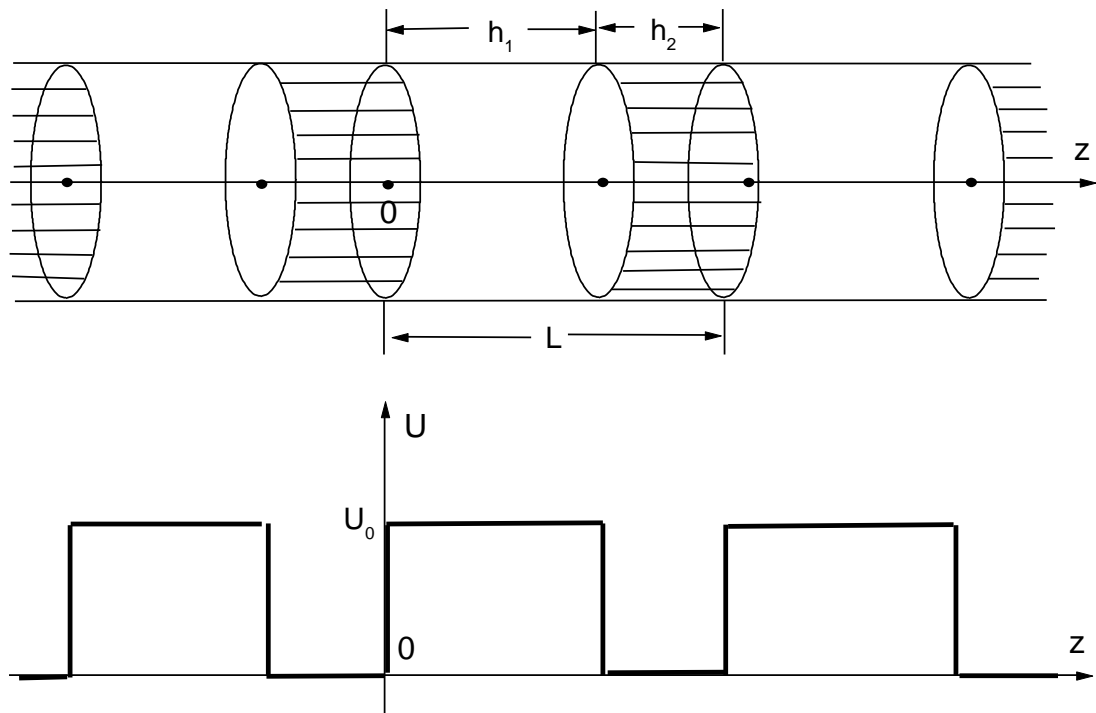


Рис.2.1 Квазіодномірна надгратка вздовж квантового
циліндричного дроту

Така квазіодномірна надгратка створює для електрона періодичний потенціал вздовж квантового дроту (відлік енергії здійснюється вгору від дна потенціальної ями):

$$U(\rho, \varphi, z) = \begin{cases} U_0; & \rho \leq R \text{ і } pL - h_1 \leq z \leq pL, \\ 0; & \rho \leq R \text{ і } pL \leq z \leq pL + h_2, \quad p = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \\ \infty; & \rho > R. \end{cases} \quad (2.1)$$

Період потенціалу $L = h_1 + h_2$, h_1 -ширина бар'єру (матеріал 1), h_2 -ширина квантової ями (матеріал 2), R -радіус дроту. Напівпровідникова структура розміщена в матриці із значно більшим потенціалом, так що границя дроту $\rho = R$ є непроникною для електрона. В кожному середовищі електрон характеризується своєю ефективною масою, тому

$$\mu(\rho, \varphi, z) = \begin{cases} \mu_1; & \rho \leq R \text{ і } pL - h_1 \leq z \leq pL, \\ \mu_2; & \rho \leq R \text{ і } pL \leq z \leq pL + h_2. \end{cases} \quad p = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2.2)$$

Завдання полягає в знаходженні енергетичного спектру та хвильових функцій електрона в такій системі. Для цього розв'язується рівняння Шредінгера, яке в циліндричній системі координат має вигляд:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2} \nabla \frac{1}{\mu(\rho)} \nabla + U(\rho, \varphi, z) - E \right) \Psi_{n_\rho m k}(\rho, \varphi, z) = 0 \quad (2.3)$$

Розв'язки рівняння (3.3) шукаються у вигляді

$$\Psi_{n_\rho m k}(\rho, \varphi, z) = \exp(im\varphi) \Phi_{n_\rho m}(\rho) f_k(z), \quad (2.4)$$

де $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ - магнітне квантове число; $n_\rho = 1, 2, 3, \dots$ - радіальне квантове число; k - квантове число, що характеризує рух електрона вздовж дроту.

Розв'язки радіальної частини рівняння Шредінгера (2.3) є суперпозиція функцій Бесселя

$$\Phi_{n_\rho m}(\rho) = A J_m\left(\frac{\lambda_{n_\rho, m}}{R} \rho\right) + B N_m\left(\frac{\lambda_{n_\rho, m}}{R} \rho\right), \quad (2.5)$$

де $\lambda_{n_\rho, m}$ - n_ρ -й корінь функції Бесселя m -го порядку.

Врахуємо далі умови скінченності радіальної хвильової функції при $\rho \rightarrow 0$, які дають $B = 0$. Коефіцієнт A знаходиться з умови нормування:

$$\int_0^R \Phi_{n' \rho m'}^*(\rho) \Phi_{n \rho m}(\rho) \rho d\rho = \delta_{n' \rho, n \rho} \delta_{m', m}, \quad (2.6)$$

що зрештою дає

$$A^{-2} = -\frac{R^2}{2} J_{m-1}(\lambda_{n \rho m}) J_{m+1}(\lambda_{n \rho m}) \quad (2.7)$$

Далі необхідно знайти зв'язок між хвильовими функціями $f_k(z)$ і $f_k(z+L)$ електрона при його русі вздовж дроту. Із рівнянь Шредінгера для z і $z+L$:

$$\frac{d^2}{dz^2} f_k(z) + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(U(\rho, \varphi, z) - E + \frac{\hbar^2 \lambda_{n \rho, m}^2}{2\mu R^2} \right) f_k(z) = 0, \quad (2.8)$$

$$\frac{d^2}{d(z+L)^2} f_k(z+L) + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(U(\rho, \varphi, z+L) - E + \frac{\hbar^2 \lambda_{n \rho, m}^2}{2\mu R^2} \right) f_k(z+L) = 0, \quad (2.9)$$

видно, що в силу рівностей $U(\rho, \varphi, z) = U(\rho, \varphi, z+L)$ і $\frac{d^2}{dz^2} = \frac{d^2}{d(z+L)^2}$ одному рівню енергії E відповідають дві функції: $f(z)$ і $f(z+L)$, тому вони відрізняються тільки постійним множником. В загальному випадку очевидний зв'язок

$$f(z+L) = \exp(ikL) f(z), \quad (2.10)$$

де k -довільне дійсне число.

Розв'язки рівнянь Шредінгера для областей 1) $-h_1 \leq z \leq 0$,
 2) $0 \leq z \leq h_2$ и 3) $h_2 \leq z \leq h_1 + h_2$ з врахуванням співвідношення (2.10)
 запишуться у вигляді

$$f_{K1}(z) = B_1 \exp(\alpha_{n\rho,m} z) + B_2 \exp(-\alpha_{n\rho,m} z), \quad (2.11)$$

$$f_{K2}(z) = B_3 \exp(i\beta_{n\rho,m} z) + B_4 \exp(-i\beta_{n\rho,m} z), \quad (2.12)$$

$$f_{K3}(z) = \exp(ikL) \left[B_1 \exp(\alpha_{n\rho,m} (z - L)) + B_2 \exp(-\alpha_{n\rho,m} (z - L)) \right], \quad (2.13)$$

де

$$\alpha_{n\rho,m} = \sqrt{\frac{2\mu_1}{\hbar^2} (U_0 - E) + \frac{\lambda_{n\rho,m}^2}{R^2}}; \quad \beta_{n\rho,m} = \sqrt{\frac{2\mu_2}{\hbar^2} E - \frac{\lambda_{n\rho,m}^2}{R^2}}. \quad (2.14)$$

Хвильові функції $f_{K\ell}(z)$ (індекс $\ell = 1,2,3$) неперервні разом з густиною їхніх потоків на границях областей тобто

$$\begin{aligned} f_{k\ell}(z) \Big|_{z=h_\ell} &= f_{k\ell+1}(z) \Big|_{z=h_\ell} \\ \frac{df_{k\ell}(z)}{dz} \Big|_{z=h_\ell} &= \frac{df_{k\ell+1}(z)}{dz} \Big|_{z=h_\ell}. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Це приводить до системи чотирьох лінійних однорідних рівнянь відносно коефіцієнтів B_ℓ .

$$\begin{aligned} B_1 \exp(\alpha_{n\rho,m} h_1) + B_2 \exp(-\alpha_{n\rho,m} h_1) &= \\ &= B_3 \exp(i\beta_{n\rho,m} h_1) + B_4 \exp(-i\beta_{n\rho,m} h_1) \\ B_1 \alpha_{n\rho,m} [\exp(\alpha_{n\rho,m} h_1) - B_2 \exp(-\alpha_{n\rho,m} h_1)] &= \\ &= B_3 i\beta_{n\rho,m} [\exp(i\beta_{n\rho,m} h_1) - B_4 \exp(-i\beta_{n\rho,m} h_1)] \end{aligned} \quad (2.16)$$

$$\begin{aligned}
B_3 \exp(i\beta_{n\rho,m} h_1) + B_4 \exp(-i\beta_{n\rho,m} h_1) &= \\
&= \exp(ikL) [B_1 \exp(\alpha_{n\rho,m}(z-L)) + B_2 \exp(-\alpha_{n\rho,m}(z-L))] \\
B_3 i\beta_{n\rho,m} [\exp(i\beta_{n\rho,m} h_1) - B_4 \exp(-i\beta_{n\rho,m} h_1)] &= \\
&= \exp(ikL) \alpha_{n\rho,m} [B_1 \exp(\alpha_{n\rho,m}(z-L)) - B_2 \exp(-\alpha_{n\rho,m}(z-L))]
\end{aligned}$$

Розв'язуючи цю систему, отримується дисперсійне рівняння

$$\begin{aligned}
\operatorname{ch}(\alpha_{n\rho,m} h_1) \cos(\beta_{n\rho,m} h_2) + \frac{1}{2} \left(\frac{\mu_2 \alpha_{n\rho,m}}{\mu_1 \beta_{n\rho,m}} - \frac{\mu_1 \beta_{n\rho,m}}{\mu_2 \alpha_{n\rho,m}} \right) \times \\
\times \operatorname{sh}(\alpha_{n\rho,m} h_1) \sin(\beta_{n\rho,m} h_2) = \cos(kL)
\end{aligned} \quad (2.17)$$

Аналіз рівняння (3.17) показує, що енергетичний спектр електрона являє собою чергування дозволених енергій (зон), як функцій квантового числа k , і заборонених зон енергій.

2.2. Модель Кроніга-Пенні

Щоб вивчити загальні особливості енергетичного спектру електрона в досліджуваній системі, розглядаються дозвалені та заборонені зони в квантовому циліндричному дроті, використовуючи модель Кроніга-Пенні. Для цього перейдемо до випадку великих U_0 і достатньо малих ширин бар'єрів h_1 , щоб існувала скінченна ймовірність того, що електрон з енергією $E < U_0$ протунелює із однієї комірки в іншу. В граничному випадку $U_0 \rightarrow \infty$, а $h_1 \rightarrow 0$ так, що $h_1 U_0$ залишається кінцевою величиною, рівняння (2.17) приймає вигляд

$$\cos(\beta_{n\rho,m}L) + D \frac{\cos(\beta_{n\rho,m}L)}{\beta_{n\rho,m}L} = \cos(kL), \quad (2.18)$$

де

$$D = \lim_{\substack{U_0 \rightarrow \infty \\ h_1 \rightarrow 0}} \frac{\mu_2 \alpha_{n\rho,m}^2 h_1 h_2}{2\mu_2} \quad (2.19)$$

міра непроникності бар'єрів. В граничному випадку ($D \rightarrow 0$) із (2.18) отримується $\beta = k$, тобто дисперсійне співвідношення

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu_2} + \frac{\hbar^2 \lambda_{n\rho,m}^2}{2\mu_2 R^2} \quad (2.20)$$

для електронів, які рухаються в однорідному циліндричному дроті (матеріал 2) з нескінченно-глибокою потенціальною ямою по його радіусу. В іншому граничному випадку ($D \rightarrow \infty$) отримуються енергетичні рівні електрона в нескінченно-глибокій циліндричній потенціальній ямі (матеріал 2) [15]:

$$E_{n\rho,m,n} = \frac{\hbar^2 \lambda_{n\rho,m}^2}{2\mu_2 R^2} + \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2\mu_2 L^2}, \quad (2.21)$$

де $n=1,2,3,\dots$. Ввівши позначення $\text{tg}\gamma = \frac{D}{\beta_{n\rho,m}L}$, рівняння (2.18) переписується

в зручному для аналізу виді

$$\frac{\cos(\beta_{n\rho,m}L - \gamma)}{\cos\gamma} = \cos(kL). \quad (2.22)$$

Тепер очевидно, що границі електронних енергетичних зон визначаються співвідношенням $\cos(\beta_{n\rho,m}L - \gamma) = \pm \cos\gamma$, тобто $\beta_{n\rho,m}L = n\pi$ або $\beta_{n\rho,m}L - 2\gamma = n\pi$.

У випадку, якщо

$$\left| \cos(\beta_{n\rho, m} L) + D \frac{\sin(\beta_{n\rho, m} L)}{\beta_{n\rho, m} L} \right| \leq 1, \quad (2.23)$$

рівняння (2.18) має дійсні розв'язки і енергія E є функцією від квантового числа k , що відіграє роль квазіімпульсу. В іншому випадку виникають заборонені зони енергій. В результаті енергетичний спектр електрона являє собою чергування дозволених і заборонених зон. Дозволені смуги енергій з номерами n і $n + 1$ визначаються інтервалами:

$$(n - 1)\pi + 2\gamma \leq \beta_{n\rho, m, n} L \leq n\pi; \quad (2.24)$$

$$n\pi + 2\gamma \leq \beta_{n\rho, m, n} L \leq (n + 1)\pi. \quad (2.25)$$

Ширина забороненої зони між n -ю і $(n + 1)$ -ю дозволеними зонами рівна

$$\Delta(\beta_{n\rho, m, n} L) = 2\gamma = 2\operatorname{arctg} \frac{D}{\beta_{n\rho, m, n} L}. \quad (2.26)$$

Визначивши значення $\tilde{\beta}_{n\rho, m, n}$, при якому $kL = 0$ ($k \rightarrow 0$), із співвідношення

$$\cos(\tilde{\beta}_{n\rho, m} L) + D \frac{\sin(\tilde{\beta}_{n\rho, m} L)}{\tilde{\beta}_{n\rho, m} L} = 1 \quad (2.27)$$

і розклавши в ряд по k^2 поблизу цієї точки обидві частини рівності (2.18), після перетворень отримується закон дисперсії для електрона у вигляді

$$E = E_{0; n\rho, m, n} + \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu_{n\rho, m, n}^*}, \quad (2.28)$$

де величина

$$E_{0;n\rho,m,n} = \frac{\hbar^2}{2\mu_2} \left(\tilde{\beta}_{n\rho,m,n}^2 + \frac{\lambda_{n\rho,m}^2}{R^2} \right) \quad (2.29)$$

визначає або дно, або стелю n -ї дозволеної зони у випадках $\mu_{n\rho,m,n}^* > 0$ чи $\mu_{n\rho,m,n}^* < 0$ відповідно. Величина ефективної маси $\mu_{n\rho,m,n}^*$ в різних зонах визначається співвідношенням

$$\mu_{n\rho,m,n}^* = \mu_2 \left[\left(L + \frac{D}{\tilde{\beta}_{n\rho,m,n}^2} \right) \sin(\tilde{\beta}_{n\rho,m,n} L) - \frac{D}{\tilde{\beta}_{n\rho,m,n}} \cos(\tilde{\beta}_{n\rho,m,n} L) \right] \tilde{\beta}_{n\rho,m,n}^{-1} L^{-2} \quad (2.30)$$

В якості матеріалів, що можуть реалізовувати розглянуту періодичну структуру вздовж квантового дроту, розглядаються напівпровідники β – CdS (матеріал 1) і β – HgS (матеріал 2) кубічної гранецентрованої модифікації. Параметри цих кристалів подано в таблиці 1.

На Рис.2.2 зображена розрахована згідно приведеної вище теорії залежність енергії електрона від хвильового вектора у випадку $D = 2$, $L = 10a_2$, $R = 5a_2$, яка являє собою чергування дозволених та заборонених зон для електрона в квантовому циліндричному дроті з періодичною структурою вздовж його осі в моделі Кроніга-Пенні.

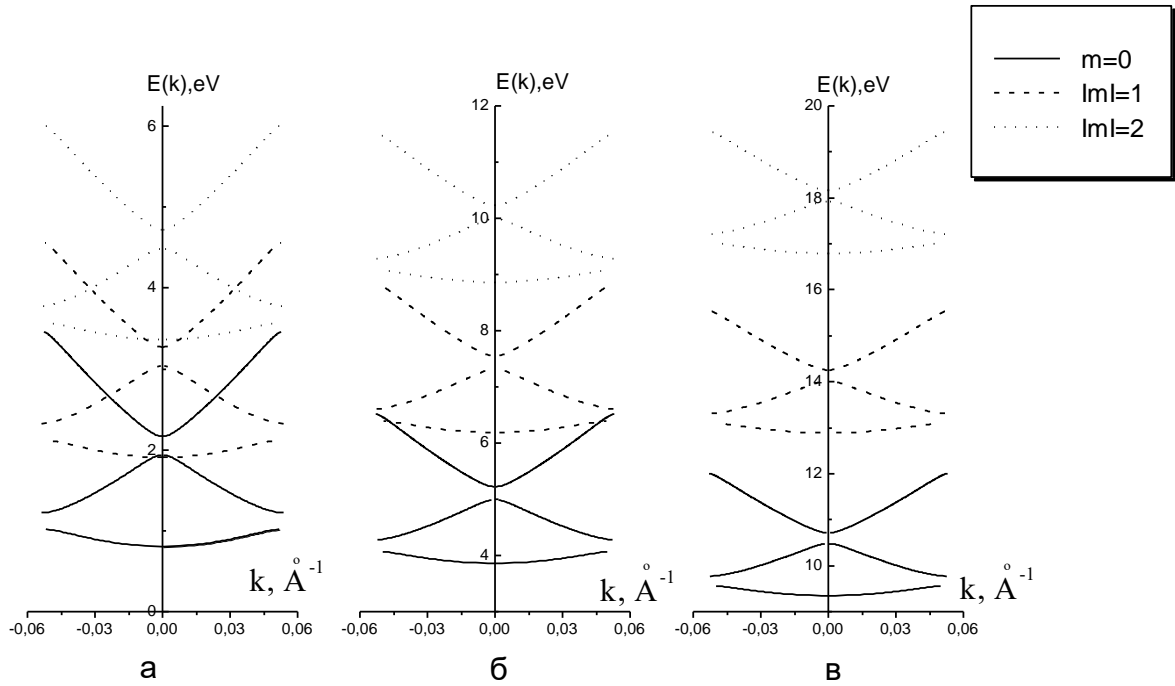


Рис.2.2 Залежність енергії електрона від хвильового вектора в квантовому циліндричному дроті з періодичною структурою вздовж його осі в моделі Кроніґа-Пенні.

Кожній кривій (суцільна- $m=0$, штрихова- $m=1$, пунктирна- $m=2$) відповідає трійка квантових чисел n_ρ, m, n (де $n=1,2,3,\dots$ -квантове число, що співпадає з порядковим номером дозволеної зони, при фіксованих значеннях квантових чисел n_ρ, m). При значеннях радіального квантового числа $n_\rho = 1$ (Рис.2.2а), $n_\rho = 2$ (Рис.2.2б), $n_\rho = 3$ (Рис.2.2в) положення дозволених зон при $m=1$ монотонно зсунуті вгору по вісі енергії відносно положень зон при $m=0$. Аналогічна ситуація для енергетичного спектру має місце при подальшому зростанні магнітного квантового числа. Із співвідношення (2.20) випливає, що верхньою границею для кожної дозволеної зони в цій моделі є значення енергій електрона в нескінченно-глибокій циліндричній потенціальній ямі (2.17), але нижня границя залежить від заданої величини міри непроникності бар'єру D . Дослідження показують, що по мірі

зростання D кожна дозволена зона стягується у все більш вузький інтервал енергії, а ширина забороненої зони збільшується.

Результати, отримані в моделі Кроніга-Пенні, вказують на принципові сторони більш складних і реалістичних систем. Одна із особливостей зон, зображених на Рис.2.2 така, що $\left. \frac{dE}{dk} \right|_{k=0} = 0$, $\left. \frac{d^2E}{dk^2} \right|_{k=0} \neq 0$. Ця особливість характерна і більш реалістичні моделі, розглянутій в розділі 2.1.

Числові розрахунки по формулі (2.30) ефективних мас електрона поблизу дна чи стелі зон дозволених енергій в моделі Кроніга-Пенні показують, що $\mu_{n\rho, m, n}^*$ не залежать від значень квантових чисел $n\rho, m$, а повністю визначаються квантовим числом n (номер дозволеної зони). В дозволених зонах, яким відповідає квантове число $n=1,3,5,\dots$ ($n=2,4,6,\dots$), кривизна залежності $E(k)$ така, що $\mu_{n\rho, m, n}^*$ приймає додатні (від'ємні) значення. При $n=1,2,3$ відношення ефективних мас електрона в квантовому дроті $\mu_{n\rho, m, n}^*$ і масивному зразку $\beta - \text{HgS}$ μ_2 складає відповідно наступні значення: 1,064; -0,055; 0,046. Чим більше n , тим більша енергія електрона, тому збільшується ймовірність тунелювання електрона із однієї комірки в іншу і, очевидно, зменшується його ефективна маса $\mu_{n\rho, m, n}^*$.

2.3. Модель зі скінченною глибиною потенціальної ями

Для дослідження електронного спектру в квазіодномірній надгратці $\beta - \text{CdS} / \beta - \text{HgS}$ нанорозмірного перерізу і періоду вздовж квантового циліндричного дроту розв'язується рівняння (2.14).

На Рис.2.3, 2.4 ($n\rho = 1$, $m = 0$) зображений закон дисперсії $E(k)$ електрона в цій гетероструктурі при фіксованому радіусі дроту ($R = \frac{h_1 + h_2}{2}$), і різних значеннях періода потенціала. Для інших значень R

спостерігається аналогічна картина. На відміну від ідеалізованої моделі Кроніга-Пенні, така система характеризується кінцевим по величині бар'єром U_0 і тому в квантовій ямі існує кінцеве число зон дозволених енергій. Зі збільшенням ширини потенціальної ями β -HgS і зменшенням ширини бар'єра β -CdS в квантовій ямі спочатку з'являється одна дозволена зона, яка монотонно зміщується в напрямку дна ями. Потім з'являються наступні дозвалені зони з аналогічною тенденцією. Чим більші розміри ями, тим більше дозволених зон знаходиться в області енергій квантової ями β -HgS.

На Рис.2.5 ($n_\rho = 1, m = 0$) зображена залежність $E(k)$ для фіксованого періоду потенціалу $L = h_1 + h_2$, $h_1 = 5a_1$, $h_2 = 5a_2$ і різних значеннях радіуса квантового циліндричного дроту.

Перша дозволена зона з'являється, починаючи з деякого мінімального значення радіуса дроту R_{\min} . Якщо $R < R_{\min}$, то трьохмірна циліндрична квантова яма β -HgS дуже мілка, і тому в ній відсутні зв'язані стани. Зі збільшенням R дозволена зона зсувається в область дна потенціальної ями, і при цьому змінюється її ширина Δ (Рис.3.6, де $n_\rho = 1, m = 0$). Спочатку ширина її збільшується, що відповідає випадку, коли дно зони знаходиться в квантовій ямі і

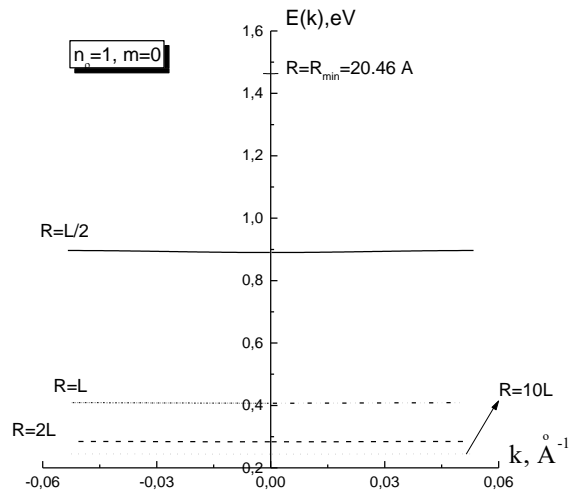


Рис.2.5 Залежність $E(k)$ для фіксованого періоду потенціалу $L = h_1 + h_2$, $h_1 = 5a_1$, $h_2 = 5a_2$ і різних значеннях радіуса квантового циліндричного дроту

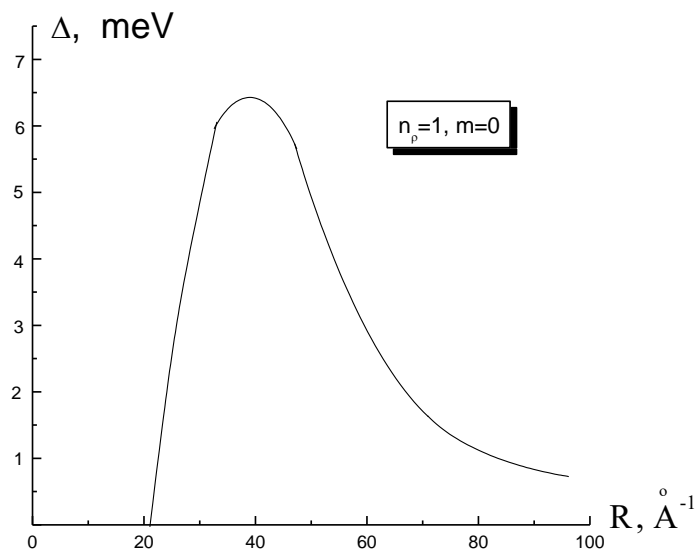


Рис.2.6 Залежність ширини дозволеної зони Δ від радіуса дроту для фіксованого періоду потенціалу $L = h_1 + h_2$, $h_1 = 5a_1$, $h_2 = 5a_2$ зсувається вниз з ростом радіуса дроту, а стеля зони знаходиться вище квантової ями β -HgS. Подальше зменшення Δ при збільшенні R відповідає випадку, коли дозволена зона повністю потрапила в область енергій квантової ями.

Оскільки на теперішній час експериментально реалізовані [111,112] квантові циліндричні дроти з декількома напівпровідниковими шарами вздовж осі, то створення відповідної надгратки є цілком можливим, а тому отримані результати можуть бути корисними для інтерпретації експериментальних досліджень отриманих надграток вздовж квантового дроту.

Висновки до розділу 2

1. Досліджено спектр та хвильові функції електрона в циліндричній квантовій надгратці аксіальної симетрії. Виявлено, що спектр електрона являє собою чергування дозволених і заборонених зон енергій. Оскільки така гетеросистема характеризується скінченим по величині бар'єром, то в ній існує скінчене число зон дозволених енергій. Кількість зон характеризується геометричними розмірами системи, змінюючи які можна змінювати положення енергетичних зон та їхню ширину.
2. Показано, що в циліндричній квантовій надгратці аксіальної симетрії ефективна маса електрона є тензором і складається з поздовжньої та поперечної складових. Поперечна складова ефективної маси електрона в дозволених зонах, яким відповідає квантове число $n = 0, 2, 4, \dots$ - додатна, а $n = 1, 3, 5, \dots$ - від'ємна.
3. Отримано спектр та хвильові функції електрона в надгратці вздовж квантового дроту. Показано, що електронний спектр складається з дозволених та заборонених зон енергій. Виявлено, що перша дозволена зона з'являється лише при деякому певному критичному значенні радіуса дроту R_{\min} . Дослідження такої надгратки на базі напівпровідників $\beta\text{-CdS}/\beta\text{-HgS}$ показали, що чим більша ширина потенціальної ями $\beta\text{-HgS}$ і менша ширина бар'єру $\beta\text{-CdS}$ тим більше дозволених зон енергій знаходиться в області енергій квантової ями $\beta\text{-HgS}$.

ВИСНОВКИ

1. Досліджено енергетичний спектр електрона в надгратці циліндричних квантових дротів і показано, що наявність кристалічного потенціалу приводить до розщеплення всіх електронних та діркових (крім основної) зон на дві.
2. При дослідженні циліндричних квантових дротів β -HgS, періодично розташованих в напівпровідниковій матриці β -CdS виявлено, що ширини дозволених електронних та діркових енергетичних зон практично не чутливі до зміни радіусу квантових дротів, але значення енергій квазічастинок зсуваються в бік менших абсолютних значень при збільшенні радіуса квантового дроту.
3. Ефективні маси квазічастинок в надгратці циліндричних квантових дротів β -CdS/ β -HgS володіють значною анізотропією.
4. Абсолютні значення поперечної складової ефективної маси електрона (дірки) збільшуються при збільшенні відстані між ямами.
5. Для надгратки циліндричних квантових дротів проаналізована залежність енергії зв'язку екситона і енергії екситонного збудження в основному стані від геометричних розмірів квантових дротів.
6. Встановлено, що збільшенню величини енергії зв'язку і енергії екситонного збудження сприяє збільшення відстані між квантовими дротами і зменшення їхніх розмірів.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. A. Fredicucci, Y.Chen, F.Bassani, J.Massines, C.Deparis, G.Neu *Center of mass quantization of excitons and polaritons interference in GaAs thin layers* // Phys. Rev.B.-1993.-V.47.-№16.-P.10348-10357.
2. Литовченко В.М. *Основы физики полупроводниковых слоистых систем.*- Киев: Наук.думка, 1980.-281с.
3. S.Das Sarma and V.B. Campos *LO-phonon emission by hot electrons in one-dimensional semiconductor quantum wires* // Phys.Rev.B.-1994.-V.49.-№3.-P.1867-1874.
4. B. Tanatar, K. Guven, C.R. Bennett, N.C. Constantinou *Screening effects on the confined and interface polarons in cylindrical quantum wires* // Phys.Rev.B.-1996.-V.54.-№16.-P.10866-10870.
5. G.D. Sanders and C.J. Stanton, Y.C. Chang *Theory of transport in silicon quantum wires* // Phys.Rev.B.-1993.-V.48.-№15.-P.11067-11076.
6. X.F. Wang, X.L. Lei *Polar-optic phonons and high-field electron transport in cylindrical GaAs/AlAs quantum wires* // Phys.Rev.B.-1994.-V.49.-№7.-P.4780-4789.
7. P.M. Petroff, A.Y. Cho, F.K. Reinhart, A.C. Gossard, W. Wiegmann *Alloy clustering in Ga_{1-x}Al_xAs compound semiconductors grown by molecular beam epitaxy* // Phys.Rev.Lett.-1982.-V.48.-№3.-P.170-173.
8. Y.Arakawa, H.Sakaki *Multidimensional quantum well laser and temperature dependence of its threshold current* // Appl.Phys.Lett.-1982.-V.40.-№11.-P.939-941.
9. R.Dingle, W.Wiegmann *Optical investigation of stress in the central GaAs layer of molecular-beam-grown Al_xGa_{1-x}As-GaAs-Al_xGa_{1-x}As structures* // J.Appl.Phys.-1975.-V.46.-№10.-P.4312-4315.
10. R.Dingle *Optical and electronic properties of thin Al_xGa_{1-x}As-GaAs heterostructures* // CRC Crit.Revs. Solid State Sci.-1975.-V.5.-№4.-P.585-590.

11. R.Notzel, L.Daweritz, K.Polog *Direct synthesis of semiconductor quantum wires by molecular-beam epitaxy on (311) surfaces* // J.Cryst.Growth.-1991.-V.115.-№1-4.-P.318-323.
12. V.A.Schukin, A.I.Borovkov, N.N.Ledentsov, P.G.Kop *Theory of quantum wire formation on corrugated surfaces* // Phy.Rev.B.-1995.-V.51.-№24.-P.17767-17779.
13. X.S.Wang, K.Self, V.Bressler Hill, R.Maboudian, W.H.Weinbers *Initial stages of Ge/GaAs (100) interface formation* // Phys.Rev.B-1994.-V.49.-№7.-P.4775-4779.
14. S.Ruvimov, P.Werner et.al. *Structural characterization of (In,Ga) As quantum dots in a GaAs matrix* // Phys.Rev.B-1995.-V.51.-№20.-P.14766-14769.
15. N.N.Ledentsov, J.Boher et.al. *Radiative states in type II GaSb/GaAs quantum wells* // Phys.Rev.B-1995.-V.52.-№19.-P.14058-14066.
16. V.Turk, O.Stier, F.Heinrichsdorff, M.Grundmann, D.Bimberg *Electron quantum wires in type II single heterostructures on nonplanar substrates* // Appl.Phys.Lett.-1995.-V.67.-№12.-P.1712-1714.
17. J.P.Van der Ziel, R.M.Mikulyak, A.Y.Cho *Second Harmonic generation in a GaP waveguide* // Appl.Phys.Lett.-1975.-V.27.-№2.-P.71-73.
18. J.P.Van der Ziel *Phase-matched harmonic generation in a laminar structure with wave propagation in the plane of the layers* // Appl.Phys.Lett.-1975.-V.26.-№2.-P.60-61.
19. R.D.Dupuis, P.D.Dapkus, N.Holonyak Jr., E.A.Rezek, R.Chin *Room-temperature laser operation of quantum well Ga_{1-x}Al_xAs-GaAs laser diodes grown by metalorganic chemical vapor deposition* // Appl.Phys.Lett.-1978.-V.32.-№5.-P.295-297.
20. S.R.Mc.Afee, D.V.Lang, W.T.Tsang *Observation of deep levels associated with the GaAs/Al_xGa_{1-x}As interface grown by molecular beam epitaxy* // Appl.Phys.Lett.-1982.-V.40.-№6.-P.520-522.

21. D.S.Kim, J.M.Jacob, J.F.Zhou, J.J.Song, H.Hou, C.W.Tu, H.Morkoc *Initial generation of hot LO-phonons by photoexcited hot carriers in GaAs and Al_xGa_{1-x}As alloys studied by picosecond Raman spectroscopy* // Phys.Rev.B.-1993.-V.45.-№24.-P.13973-13977.
22. M.Klein, F.Hache, D.Richard, C.Flytzanis *Size dependence of electron-phonon coupling in semiconductor nanospheres: The case of CdSe* // Phys.Rev.B.-1990.-V.42.-№17.-P.11123-11133.
23. A.Tanaka, S.Onari, T.Arai *Low-frequency Raman scattering from CdS microcrystals embedded in a germanium dioxide glass matrix* // Phys.Rev.B.-1993.-V.47.-№3.-P.1237-1243.
24. B.K.Ridley *Hot electrons in low-dimensional structures* // Repts.Progr.Phys.-1991.-V.54.-№2.-P.169-174.
25. C. Trallero Giner, F.Comas *Electron-LO phonon interaction in semiconductor double heterostructures* // Phys.Rev.B.-1988.-V.37.-№9.-P.4583-4588.
26. V.K.Arora and M.Prasad *Quantum transport in quasi-one-dimensional systems* // Phys.Stat.Sol.B.-1983.-V.117.-№1.-P.127-140.
27. V.K.Arora and A.Naeem *Electron scattering and mobility in a quantum well heterolayer* // "Phys.Visi.Conf., Palo Alto, Calif., Aug.1-3, 1984".New York.-1984.-P.280-285.
28. М.В.Ткач, В.П.Жаркой, О.М.Маханець *Електрон-фононна взаємодія в циліндричному квантовому дроті* // УФЖ.-1997.-Т.42.-№4.-С.493-499.
29. М.В.Ткач, І.В.Пронишин, О.М.Маханець *Фононний спектр у складних коаксіальних циліндричних квантових дротах* // УФЖ.-1997.-Т.42.-№6.-С.740-748.
30. В.П.Жаркой, О.М.Маханець, М.В.Ткач *Вплив L та I фононів на спектр електрона в циліндричному квантовому дроті з потенціальною ямою скінченої глибини* // УФЖ.-1999.-Т.44.-№3.-С.402-406.
31. M.V. Tkach, V.P. Zharkoy, O.M. Makhanets *Influence of LO-phonons on electron spectrum in cylindrical semiconductor nanoheterosystem* //

- International conference "Material Science and Material Properties for Infrared Opto-electronics", Uzhorod, 30Sept.-02Oct., 1996, P.98.
32. M.V.Tkach, I.V.Pronishin, V.V.Paziuk, O.M.Makhanets *Quasiparticle spectrum in quantum wires* // International conference "Material Science and Material Properties for Infrared Opto-electronics", Uzhorod, 30Sept.-02Oct., 1996, P.99.
33. M.Tkach, I.Pronyshyn, O.Makhanets *Electron spectrum in quantum superlattice with axial symmetry* // Nanostructures:97. Physics and technology. International Symposium. Proceedings, St.Petersburg, 23-27June, 1997, P.429.
34. M. Tkach, V.Zharkoy,O. Makhanets *Spectrum of electron renormalized by interface and confined phonons in cylindrical quantum wire* // II International school-conference. Physical problems in material science of semiconductors, Chernivtsi, 1997, P.152.
35. M.Tkach, I.Pronyshyn, O.Makhanets *Electron spectrum in quantum cylindrical superlattice* // II International school-conference. Physical problems in material science of semiconductors, Chernivtsi, 1997, P.216.
36. I.Pronyshyn, O.Makhanets *Tamm's states of the electron in quantum superlattice of radial symmetry and Cronig-Penni model* // II International school-conference. Physical problems in material science of semiconductors, Chernivtsi, 1997, P.217.
37. I. Pronyshyn, O.Trifanenko, O.Makhanets *Magnetic field influence on electron spectrum in quantum cylindrical wire* // II International school-conference. Physical problems in material science of semiconductors, Chernivtsi, 1997, P.247.
38. Н.В.Ткач, И.В.Пронишин, А.М.Маханец *Спектр электрона в сверхрешётке вдоль квантовой цилиндрической проволоки* // Известия фузов.Физика.-1998.-№2.-С.96-103.
39. Ch.Greus and R.Spiegel, P.A.Knipp, T.L.Reinecke, F.Faller and A.Forchel *Photoluminescence excitation study of lateral-subband structure in barrier-*

- modulated In_{0,09}Ga_{0,91}As quantum wires // Phys.Rev.B.-1994.-V.49.-№8.-P.5753-5756.*
40. Ch.Greus, L.Butov, F.Daiminger and A.Forchel, P.A.Knipp, T.L.Reinecke
Lateral quantization in the optical emission of barrier-modulated wires // Phys.Rev.B.-1993.-V.47.-№12.-P.7626-7629.
41. В.Н.Головач, Г.Г.Зегря, А.М.Маханец, И.В.Пронишин, Н.В.Ткач
Спектры электронов и дырок в сверхрешётке цилиндрических квантовых проволок // ФТП.-1999.-Т.33.-№5.-С.603-607.
42. М.В.Ткач, І.В.Пронишин, О.М.Маханець
Приєднані плоскі хвилі в надгратці циліндричних квантових дротів // Науковий вісник Чернівецького державного університету. Фізика.-1998.-№29.-С.16-20.
43. М.В.Ткач, І.В.Пронишин, О.М.Маханець
Електрон у квазіплоскій надгратці циліндричних квантових точок // Науковий вісник Чернівецького державного університету. Фізика.-1998.-№40.-С.8-9.
44. M.Tkach, I.Pronyshyn,O.Makhanets and V.Zharkoy
Exciton Spectrum in the Superlattice Composed of Cylindric Quantum Wires // The 194th meeting of The Electro-chemical Society,Inc. Third international conference on excitonic processes in condensed matter - Excon'98 Meeting Program, Boston, 1998, P.40.

ДОДАТОК

Таблиця 1

	$m_c(m_0)$	$m_h(m_0)$	$a(\text{Å})$	$E_g(\text{eV})$	$V_c(\text{eV})$	$V_h(\text{eV})$	$\Omega_L(\text{meV})$	ϵ_∞	ϵ_0
ZnS	0,28	0,49	5,41	3,1	3,9	7	60	5,07	8,3
CdS	0,2	0,7	5,818	2,5	3,8	6,3	57,2	5,5	9,1
HgS	0,036	0,044	5,851	0,5	5,0	5,5	27,8	11,36	18.2
H ₂ O	1	∞	-	-	1,15	∞	-	1,78	81