

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Запорізький національний технічний університет

МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ
до виконання
РОЗРАХУНКОВО-ГРАФІЧНОГО ЗАВДАННЯ
з дисципліни
„ФІЗИКА НИЗЬКОРОЗМІРНИХ СИСТЕМ“
для студентів спеціальності
6.050801 „Мікро- та наноелектроніка“
денної й заочної форм навчання

2014

Методичні вказівки до виконання розрахунково-графічного завдання з дисципліни „Фізика низькорозмірних систем“ для студентів спеціальності 6.050801 „Мікро- та наноелектроніка“ денної й заочної форм навчання / Укл.: А. В. Коротун, А. В. Бабіч. – Запоріжжя: ЗНТУ, 2014. – 42 с.

Укладачі: А. В. Коротун, доц., канд.фіз.-мат.наук,
А. В. Бабіч, доц., канд.фіз.-мат.наук

Рецензент: В. В. Погосов, проф., д-р фіз.-мат. наук

Відповідальний за випуск: Є.Л.Жавжаров, доц., канд.фіз.-мат.наук

Затверджено
на засіданні кафедри
мікро- та наноелектроніки
Протокол №3
від „15“ жовтня 20 14 р.

ЗМІСТ

Передмова.	4
1 Вказівки і рекомендації до виконання	5
1.1 Етапи виконання розрахунково-графічного завдання	5
1.2 Рекомендації з виконання розрахунково-графічного завдання	6
1.3 Вимоги до оформлення текстової версії розрахунково-графічного завдання.	7
1.4 Вимоги до змісту і оформлення презентації.	8
1.5 Найбільш поширені помилки студентів при написанні та оформленні розрахунково-графічного завдання	9
2 Наноструктури.	10
2.1 Загальні відомості про наноструктури.	10
2.2 Квантове обмеження.	11
2.3 Класифікація низькорозмірних структур.	13
2.4 Квантово-розмірні явища в низькорозмірних структурах	16
2.5 Тунелювання.	19
2.6 Гетероструктури	22
3 Завдання до розрахунку.	29
3.1 Перелік тем реферативної частини розрахунково-графічних завдань.	29
3.2 Тематика типових розрахунково-графічних завдань	30
Рекомендована література.	32
Додаток А Приклад оформлення титульної сторінки.	33
Додаток Б Приклад оформлення реферату.	34
Додаток В Приклад оформлення змісту.	35
Додаток Г Функції для роботи в математичному пакет Mathcad.	36
Додаток Д Приклад виконання завдання	38

ПЕРЕДМОВА

На сьогодні характеристичні розміри напівпровідникових наноструктур сучасної мікро- та наноелектроніки складають 100...10 нм. Такий діапазон лінійних розмірів елементів – це фундаментальний фізичний бар'єр, за яким різко змінюються всі властивості твердого тіла, включаючи електропровідність. У повній мірі починають проявлятися квантові ефекти, і фізика провідності визначається квантово-механічною інтерференцією електронних хвиль. Крім традиційного переходу до наноструктур через зменшення лінійних розмірів елементів у чипі, є й інший шлях, який ґрунтується на ідеях виготовлення штучних періодичних шаруватих структур із шарами нанометрової товщини. У таких шарах відкривається можливість формувати заданий енергетичний спектр електронів, і з появою технологічної можливості виготовляти такі структури з'явився навіть термін „зонна інженерія“.

При цьому на сучасному етапі перед дослідником постала задача не лише побудувати теоретичну модель фізичного процесу або технічного пристрою і провести розрахунок у рамках цієї моделі, але й наочно представити, візуалізувати результати розрахунку у вигляді схем і графіків. Наочність представлення результатів відіграє важливу роль в успіху наукового дослідження. У зв'язку з цим формування у студентів навичок і вмінь наочно представити результати своїх розрахунків є актуальною задачею.

Метою курсу „Фізика низькорозмірних систем“ є ознайомлення студентів з деякими задачами з фізики твердого тіла, фізики напівпровідників, фізики квантоворозмірних структур; навчання студентів вмінно давати короткий теоретичний опис фізичної проблеми, скласти її математичну модель, яка ґрунтується на наявних у студентів знаннях з конкретної галузі, формулювати задачу для моделювання, що включає реалізацію математичної моделі у математичному пакеті і дозволяє проілюструвати ті чи інші відомі студенту факти з даної проблеми. При цьому акцент зміщується від виведення аналітичних виразів до програмної реалізації. Це дозволяє студентам навчитися формулювати чисельні алгоритми для задач, які не мають точного аналітичного розв'язку.

1 ВКАЗІВКИ І РЕКОМЕНДАЦІЇ ДО ВИКОНАННЯ

Розрахунково-графічне завдання (РГЗ) – це самостійне дослідження студента. Виконуючи РГЗ студент удосконалює знання і вміння, отримані в процесі вивчення дисципліни „Комп’ютерне моделювання наноструктур“, а саме: визначати мету, виділяти задачі, формулювати проблеми і знаходити шляхи їх вирішення. Працюючи над РГЗ студент отримує вміння і навички, які будуть корисні в майбутньому – при виконанні більш складних задач (курсовий проект, дипломна робота, дисертація, наукове дослідження).

Написання розрахунково-графічної роботи є одним із видів самостійної роботи з дисципліни „Комп’ютерне моделювання наноструктур“.

Метою написання РГЗ є:

- систематизація, закріплення і розширення теоретичних знань і практичних вмінь студентів;
- набуття досвіду роботи з літературою й іншими джерелами інформації, вміння узагальнювати і аналізувати наукову інформацію, формувати власне ставлення до проблеми;
- набуття вміння застосовувати інформаційні та комп’ютерні технології для вирішення прикладних задач;
- розвиток навичок оволодіння спеціалізованим програмним забезпеченням;
- проведення глибокого аналізу результатів досліджень і формування змістовних висновків щодо якості отриманих результатів.

1.1 Етапи виконання розрахунково-графічного завдання

Розрахунково-графічне завдання виконується в два етапи відповідно до кредитно-модульної структури дисципліни.

Перший етап РГЗ виконується впродовж першого модуля і включає:

- вибір теми РГЗ;
- визначення актуальності і мети роботи;
- підбір літератури і джерел інформації згідно з обраною темою;
- збір даних, необхідних для розкриття обраної теми;
- систематизацію і структурування даних;

– оформлення результату виконання першого етапу в текстовому редакторі.

Результат виконання першого етапу надається в роздрукованому вигляді.

Другий етап РГЗ виконується впродовж другого модулю і включає:

- вибір методу обробки інформації;
- обґрунтування і опис обраного методу;
- обробку інформації;
- отримання результатів;
- інтерпретацію результатів;
- формулювання висновків;
- оформлення звіту;
- підготовка до публічного захисту виконаної роботи.

Звіт про виконання РГЗ оформлюється в електронному і друкованому вигляді. До звіту додаються електронні файли з результатами обробки інформації. Для захисту РГЗ створюється електронна презентація.

1.2 Рекомендації з виконання розрахунково-графічного завдання

Тему РГЗ обирає студент відповідно свого варіанту (Додаток Б).

Актуальність проблеми не має бути багатослівною. Достатньо декількома реченнями висловити головне – суть проблеми.

Мета РГЗ полягає в аналізі певної проблеми: у ній сконцентрована головна ідея роботи, її кінцевий пізнавальний і практичний результат. Мета має носити практично-прикладний характер – вона має розкривати те, задля чого здійснюється дослідження, і має описувати конкретні кроки, які необхідно здійснити студенту для отримання результатів. Мета дослідження конкретизується в задачах, сукупність яких дає уявлення про те, що потрібно зробити для її досягнення. Задач не має бути багато, як правило, 4–5. Задачі формулюються дієсловами у формі переліку дій: „вивчити...“, „проаналізувати...“, „встановити...“, „побудувати модель...“, „з’ясувати...“, „оцінити...“, „ідентифікувати...“, „порівняти...“, „обґрунтувати...“, „визначити чинники...“ тощо.

Анотація до кожного джерела інформації повинна мати обсяг не менше 10 друкованих рядків.

В кінці формулюються висновки. Вони за логікою і кількістю мають співпадати з поставленими в меті задачами, тобто одна задача – один висновок (!). Кожен з висновків має „перекликатися“ із задачами роботи. Отже, висновки мають ґрунтуватися на проведеному студентом власному аналізі проблеми і відповідати задачам РГЗ.

Розрахунково-пояснювальна записка до РГЗ має містити:

- титульний лист (друкується у вигляді бланку; див. Додаток А);
- реферат обсягом 0,5–1 стор. (включає інформацію про обсяг РГЗ, ключові слова, короткий зміст роботи і методику проведення дослідження);
- зміст;
- вступ обсягом 1–2 стор. (відображає інформацію про актуальність дослідження, мету і задачі РГЗ);
- основний розділ, який включає детальний розв’язок задачі та фізичний аналіз отриманих результатів;
- список використаної літератури;
- додатки (за необхідності).

Розв’язок задачі має бути викладений зрозуміло і детально, з проведенням усіх проміжних викладок і перетворень. Основні формули мають бути пронумеровані. У додатки включають допоміжний матеріал, який, на думку автора, необхідний для розуміння ходу розв’язку, але загромаджує основний текст роботи.

Слід мати на увазі, що оформлення РГЗ впливає на оцінку.

Вимоги до оформлення текстової версії розрахунково-графічного завдання:

- формат сторінок А4;
- шрифт Times New Roman;
- розмір шрифту 14;
- міжрядковий інтервал – полуторний;
- вирівнювання – за шириною сторінки;
- поля – 2 см;
- назви структурних частин і розділів – прописними літерами, напівжирним шрифтом, по центру, підрозділів – малими (крім першої букви), напівжирним шрифтом, з абзацу;
- відстань між заголовком і основним текстом – один рядок;

- кожную структурну частину (розділ) починати з нової сторінки;
- нумерація сторінок зверху праворуч;
- номер на титульній сторінці, рефераті та змісті не ставиться, але враховується;
- таблиці повинні мати заголовки і нумеруватися;
- рисунки, графіки, діаграми мають бути підписані і пронумеровані.

Вимоги до змісту і оформлення презентації:

- презентація виконується в форматі Microsoft Power Point XP/2003 за темою РГЗ;
- презентація має бути розрахована на п'ятихвилинну доповідь за темою РГЗ;
- зміст презентації має бути **чітко структурований**. Кожен новий слайд має логічно впливати з попереднього й одночасно готувати появу наступного. Найкращий спосіб перевірити, чи вірно побудована презентація, – швидко прочитати лише заголовки. Якщо після цього стане зрозуміло, про що презентація – структура побудована вірно;
- оптимальний об'єм презентації – не менше, ніж 15 традиційних слайдів;
- текст у презентаціях має складати **не більше 35%**, решта – ілюстративний матеріал (рисунки, графіки, діаграми, схеми тощо);
- слайд №1 повинен містити:
 - 1) назву навчального закладу і кафедру, де виконувалася робота (розмір шрифту – не менше 24);
 - 2) дисципліну, тему (розмір шрифту – не менше 28, напівжирний);
 - 3) прізвище, ім'я, по-батькові студента, факультет, групу (розмір шрифту – не менше 24);
 - 4) прізвище, ім'я, по-батькові викладача (розмір шрифту – не менше 24);
 - 5) рік створення презентації (розмір шрифту – не менше 24);
- слайди №2 – 3 мають описувати актуальність теми і мету, яку необхідно досягти в ході виконання роботи (загальний обсяг одного слайду – не більше 15 рядків тексту);

- останній слайд (слайди) повинен містити висновки по роботі (не більше 15 рядків тексту – на один слайд);

- усі слайди (крім першого) мають містити порядковий номер, розміщений в правому верхньому куті (розмір шрифту – не менше 20);

- кожний слайд (крім першого) повинний мати назву, набрану шрифтом не менше 24;

- оптимальне оформлення презентації – застосування кольорових схем «світлий текст на темному фоні» або «темний текст на світлому фоні». У разі співпадіння кольорів фону і тексту рекомендується оформлювати текст із використанням ефекту «тіні»;

- фонові рисунки не повинні відволікати увагу від змісту слайда;

- припустимий розмір шрифту – не менше 20;

- рекомендований розмір шрифту – 24;

- максимальна кількість текстової інформації на одному слайді – 15 строк тексту, набраних Arial или Verdana, розмір – 28;

- максимальна кількість графічної інформації на одному слайді – 2 рисунка (фотографії, схеми тощо) з текстовими коментарями (не більше 2-х рядків до кожного);

- бажано, щоб на слайдах залишалися поля, не менше 1 см з кожного боку;

- використовувати єдиний стиль оформлення;

- використовувати шрифти без засічок (їх легше читати) і не більше 2-х варіантів шрифту на одному слайді;

- використати не більше трьох кольорів на одному слайді (наприклад, один для фону, другий для заголовків, третій - для тексту);

- використовувати ефекти анімації, звукові і відео файли лише у разі, коли це виправдано і дійсно необхідно для покращення сприйняття матеріалу;

- файл презентації має бути записаний на CD-ROM або DVD-ROM.

Найбільш поширені помилки студентів при написанні та оформленні розрахунково-графічного завдання:

- зміст роботи не відповідає темі або не розкриває її;

- мета не пов'язана з проблемою, що досліджується, сформульована абстрактно і не відображає специфіки предмету дослідження;

- не проведено глибокий і всебічний аналіз джерел, нової спеціальної літератури за темою дослідження;
- список джерел за темою роботи не анотований; не вказано, з яких саме джерел взяті вихідні дані;
- кінцевий результат не відповідає меті дослідження, висновки не відповідають поставленим задачам;
- об’єм і оформлення роботи не відповідають вимогам;
- РГЗ виконана неохайно, з граматичними і стилістичними помилками.

2 НАНОСТРУКТУРИ

2.1 Загальні відомості про наноструктури

На сьогодні в наноелектроніці використовують гетероструктури нанометрових розмірів, функціонування яких ґрунтується на квантових явищах. Такими структурами є квантові точки, ями і нитки, на базі яких створюють електронні прилади наноелектроніки, такі як резонансно-тунельні діоди й транзистори.

Слід розрізняти поняття „нанорозмірні структури“ і „низькорозмірні структури“. У першому випадку головною ознакою є лінійний розмір структури, який хоча б в одному напрямку відповідає нанометровому діапазону. Низькорозмірними структурами (*low-dimensional structures*) називають структури, в яких хоча б один із розмірів дорівнює нулю. Таке визначення носить досить умовний характер, оскільки реальний фізичний світ складається з тривимірних об’єктів. Потрібно розуміти, що двовимірні, одновимірні і нульвимірні структури не є такими в строгому геометричному розумінні, їх називають так лише тому, що їх розмір в одному, двох або трьох напрямках менше деякого „критичного“ значення, нижче якого фізичні властивості структури в цьому напрямку (напрямах) істотно відрізняються від властивостей об’ємного (тривимірного) матеріалу, з якого дана структура виготовлена. У твердотільних структурах таке зазвичай відбувається, коли один з лінійних розмірів зменшується до величини порядку нанометра. У науковій і технічній літературі нанорозмірні структури часто називають наноструктурами (*nanosttructures*). Квантово-механічні явища в них відіграють домінуючу роль, що визначає їх специфічні фізичні властивості.

2.2 Квантове обмеження

Поводження рухливих носіїв заряду (електронів і дірок) в нанорозмірних структурах визначають три групи фундаментальних явищ:

- квантове обмеження;
- балістичний транспорт і квантова інтерференція;
- тунелювання.

Всі ці ефекти за своїм походженням є типовими квантовомеханічними явищами.

Квантове обмеження виникає, коли вільний рух електронів в одному з напрямків виявляється обмеженим потенціальними бар'єрами, що утворюють наноструктуру, в якій ці електрони перебувають. Воно змінює спектр дозволених значень і впливає на перенесення носіїв заряду через наноструктури. Транспорт носіїв заряду може, в принципі, здійснюватися як паралельно, так і перпендикулярно потенціальним бар'єрам. У випадку руху носіїв вздовж потенціальних бар'єрів домінуючими ефектами є балістичний транспорт і квантова інтерференція. Проходження же носіїв заряду через потенціальні бар'єри має місце виключно через їх тунелювання, що й забезпечує перенесення носіїв заряду з однієї області наноелектронного приладу в іншу.

Вільний електрон, який рухається в тривимірній системі ($3D$), має кінетичну енергію, величина якої, відповідно до просторових компонент його імпульсу p_x , p_y , p_z , складає

$$E = \frac{1}{2m^*} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2), \quad (2.1)$$

або, в хвильовому уявленні

$$E = \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2), \quad (2.2)$$

де m^* – ефективна маса електрона (в твердих тілах вона зазвичай менша за масу вільного електрона m_e); k_x , k_y , k_z – просторові компоненти хвильового вектора. Густина електронних станів при цьому є неперервною функцією енергії:

$$g_{3D}(E) = \frac{m^* \sqrt{2m^* E}}{\pi^2 \hbar^3}. \quad (2.3)$$

У низькорозмірній системі вільний рух електрона обмежений принаймні в одному з напрямків. У даному напрямку (нехай це буде напрямок вздовж осі x) потенціальна енергія електрона може бути представлена у вигляді нескінченно глибокої потенціальної ями, як це показано на рис. 2.1. Якщо ширина ями вздовж осі x дорівнює a , то в області $0 < x < a$ електрон має нульову потенціальну енергію. Нескінченно високий потенціальний бар'єр унеможливило знаходження електрона за межами цієї області.

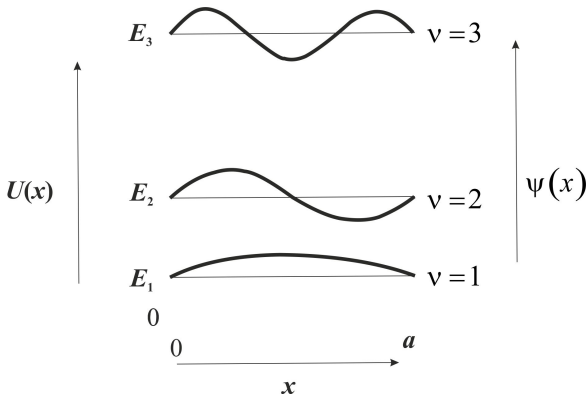


Рисунок 2.1 – Потенціальна яма і хвильові функції електрона в ній

Отже, хвильова функція електрона має обернутися в нуль на межах потенціальної ями, тобто при $x=0$ і $x=a$. Такій умові відповідає лише певний набір хвильових функцій. Це – стоячі хвилі з довжиною хвилі λ , яка визначається співвідношенням

$$\lambda_v = \frac{2a}{v} \quad (v = 1, 2, \dots). \quad (2.4)$$

Відповідні дозволені значення хвильового вектора дискретні й дорівнюють:

$$k_v = \frac{2\pi}{\lambda_v} = \frac{\pi v}{a}. \quad (2.5)$$

Як наслідок, енергії дозволених енергетичних станів електрона в ямі також виявляються дискретними. Спектр цих станів має вигляд

$$E_v = \frac{\hbar^2 k_v^2}{2m^*} = \frac{\pi^2 \hbar^2 v^2}{2m^* a^2}. \quad (2.6)$$

Ціле число v – квантове число, яке позначає квантовий стан. Отже, електрон, поміщений в обмежену область простору, може займати лише дискретні енергетичні рівні. Найнижчий стан має енергію

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m^* a^2}, \quad (2.7)$$

яка завжди більша нуля. *Ненульова мінімальна енергія* відрізняє квантово-механічну систему від класичної, для якої енергія частинки, яка перебуває на дні потенціальної ями, тотожно дорівнює нулю. Крім того, дозволені значення енергії електрона виявляються квантованими і пропорційними v^2 .

Для того щоб задовольнити принципу невизначеності $\Delta p \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$ (у нашому випадку $\Delta x = a$), невизначеність імпульсу електрона має бути $\Delta p \geq \frac{\hbar}{2a}$, що задовольняє мінімальній зміні енергії $\Delta E = \frac{(\Delta p)^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2}{8m^* a^2}$, яке (з точністю до множника $\frac{\pi^2}{4}$) відповідає наведеному вище виразу для E_1 . Отже, принцип невизначеності також підводить нас до висновку про ненульове значення мінімальної енергії електрона в потенціальній ямі.

Обмеження руху електронів (дірок) у низькорозмірній структурі, яке призводить (внаслідок їх квантово-хвильової природи) до ненульового мінімального значення їх енергії та дискретності енергій дозволених станів, називають квантовим обмеженням (*quantum confinement*).

2.3 Класифікація низькорозмірних структур

У твердих тілах квантове обмеження може бути реалізоване в трьох просторових напрямках. Кількість напрямків, в яких ефекту квантового обмеження немає, використовують як критерій для класифікації елементарних низькорозмірних структур за трьома групами:

- квантові плівки;
- квантові шнури;
- квантові точки.

Схематично вони наведені на рис. 2.2.

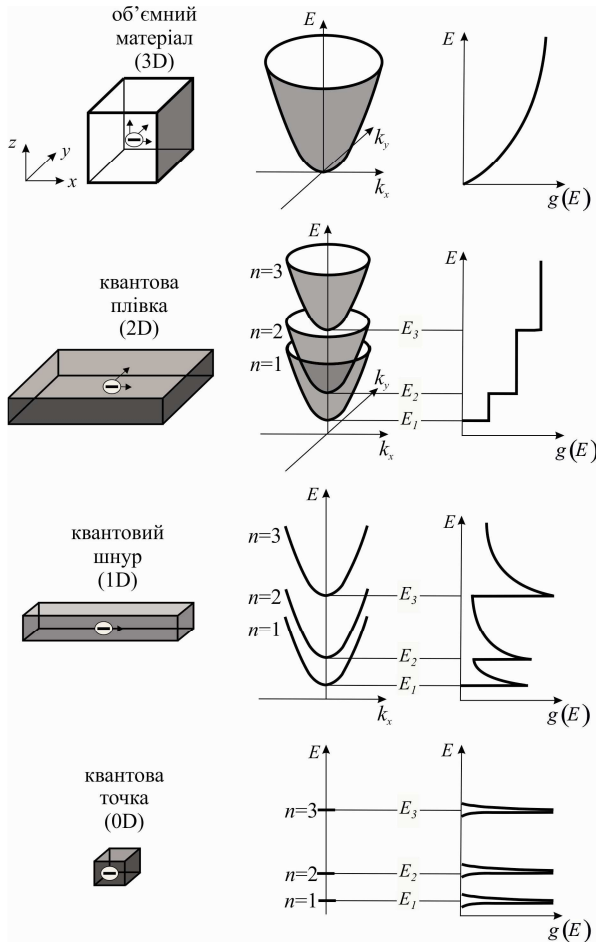


Рисунок 2.2 – Елементарні низькорозмірні структури, їх енергетичні діаграми і густина станів $g(E)$ порівняно з тривимірною структурою

Квантові плівки (*quantum films*) - це двовимірні (2D) структури, в яких квантове обмеження діє лише в одному напрямку – перпендикулярно плівці (напрямок z на рис. 2.2). Носії заряду в таких структурах можуть вільно переміщатися в площині xy . Їх енергія складається з квантованих значень, які визначаються ефектом квантового

обмеження в напрямку z (відповідно із товщиною плівки d_z), і неперервних складових в напрямках x та y :

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2 v^2}{2m^* d_z^2} + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m^*}. \quad (2.8)$$

У k -просторі енергетична діаграма квантової плівки - це сімейство параболічних зон, які, перекриваючись, утворюють підзони. Мінімальна енергія електрона в n -й зоні задається співвідношенням (2.6). Електрон з такою енергією нерухомий у площині плівки.

Залежність густини електронних станів від енергії в квантовій плівці має східчастий характер (замість параболічної залежності в тривимірних структурах):

$$g_{2D}(E) = \frac{m^*}{\pi^2 \hbar^3 d_z} \sum_i \Theta(E - E_i), \quad i = 1, 2, \dots, \quad (2.9)$$

де $\Theta(E - E_i)$ – східчаста функція.

Електрони в кантових плівках зазвичай називають **двовимірним електронним газом** (*two-dimensional electron gas*, 2DEG).

Квантові шнур (*quantum wires*) – це одновимірні (1D) структури. На відміну від квантових плівок вони мають не один, а два нанометрових розміри, в напрямку яких і діє ефект квантового обмеження. Носії заряду можуть вільно рухатися лише в одному напрямку – вздовж осі шнура. Отже, внесок в енергію носія заряду дає кінетична складова вздовж одного напрямку і квантовані значення в двох інших напрямках:

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2 v_1^2}{2m^* d_y^2} + \frac{\pi^2 \hbar^2 v_2^2}{2m^* d_z^2} + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*}, \quad v_1 = 1, 2, \dots; \quad v_2 = 1, 2, \dots \quad (2.10)$$

Для кожної пари дискретних рівнів у напрямку квантового обмеження густина електронних станів у квантовому шнурі залежить від енергії за законом $\frac{1}{\sqrt{E}}$:

$$g_{1D}(E) = \frac{\sqrt{2m^*}}{\pi \hbar d_y d_z} \sum_{i,j} \frac{1}{\sqrt{E - E_{i,j}}}, \quad i, j = 1, 2, \dots \quad (2.11)$$

Квантові точки (*quantum dots*) – це нульвимірні (0D) структури, в яких рух носіїв заряду обмежений у всіх трьох напрямках. У ко-

жному з цих напрямків енергія електрона виявляється квантованою відповідно до формули (2.6), а густина станів є набором гострих піків, які описуються δ -функціями:

$$g_{0D}(E) = \frac{2}{d_x d_y d_z} \sum_{i,j,k} \delta(E - E_{i,j,k}), \quad i, j, k = 1, 2, \dots \quad (2.12)$$

Через схожість енергетичних характеристик атомів і квантових точок останні іноді називають „штучними атомами“. Квантові точки складаються з порівняно невеликої кількості атомів. У цьому відношенні до них близькі атомні кластери і нанокристаліти (кристаліти нанометрових розмірів), де також діє ефект квантового обмеження.

Розглянуті елементарні низькорозмірні структури в певному сенсі є ідеалізованими об'єктами. Очевидно, що низькорозмірні структури, які мають практичне значення, мають розміщуватися на будь-якій підкладці і мати контакт з іншими структурами і функціональними елементами. Більш того, приладні застосування вимагають комбінації декількох елементарних структур. Проте, незважаючи на появу в складних комбінованих структурах нових квантово-механічних ефектів, визначальну роль у них відіграє квантове обмеження.

Для виготовлення низькорозмірних структур використовують два принципових підходи:

– геометричний – ґрунтується на використанні технологій, які забезпечують формування об'єктів з нанометровими розмірами;

– електронний – ґрунтується на можливості керування розмірами областей з певним типом і концентрацією носіїв заряду в напівпровідниках за допомогою електричного поля.

2.4 Квантово-розмірні явища в низькорозмірних структурах

Енергетичний спектр частинок у квантовій ямі розбивається на серію окремих розмірних підзон:

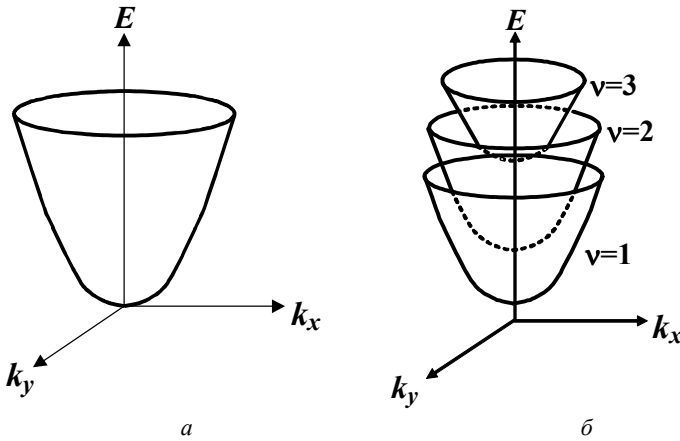
$$E_v = \frac{\hbar^2}{2m} \left(k_x^2 + k_y^2 + \frac{\pi^2}{d^2} v^2 \right); \quad v = 1, 2, 3, \dots \quad (2.13)$$

де $\hbar k_{x,y} = p_{x,y}$ – складові квазіімпульсу носіїв заряду¹, а v – кван-

¹ За гіпотезою де Бройля на класично дозволений траєкторії руху (у даному випадку – замкнена лінія довжиною $2d$) має вкладатися ціле число v довжин

тові числа. Для прямокутної ями $v \neq 0$, оскільки значення $v = 0$ суперечить співвідношенню невизначеностей.

На рис. 2.3 схематично подано зміну енергетичного спектра у фазовому просторі при переході від нескінченного зразка до зразка скінченної товщини d у разі квадратичного закону дисперсії. Сукупність значень енергії E_v , зумовлену квантовим числом v і довільними комбінаціями квазіімпульсів $p_{x,y}$ або хвильових чисел $k_{x,y}$, називають **розмірною підзоною**.



a – нескінченний; b – скінченний
Рисунок 2.3 – Енергетичний спектр для зразків

Розмірні дозволені підзони розділені забороненими підзонами. Відстань між дозволеними підзонами залежить від v і d . Для прямокутної потенціальної ями вона, згідно із (2.13),

хвиль $\lambda = 2\pi/k_z$, тобто $d = \lambda\upsilon/2$. Узагальнення цього правила на випадок фінітного руху у полі довільного потенціалу приводить до правила квантування Бора–Зомерфельда

$$\oint_C \frac{dz}{\lambda(z)} = v + \frac{1}{2}.$$

Тут C – класична траєкторія, а $\lambda(z) = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m(V(z) - E)}}$.

$$\Delta E_{v,v+1} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2md^2} (2v+1). \quad (2.14)$$

Квантовий розмірний ефект виникає й може спостерігатися за умов, коли:

– відстань між розмірними підзонами більша за тепловий розкид енергії квазічастинок

$$- \Delta E_{v,v+1} > k_B T; \quad (2.15)$$

– $\Delta E_{v,v+1}$ більше за природну ширину енергетичних рівнів

$$- \Delta E_{v,v+1} > \delta \varepsilon; \quad (2.16)$$

– концентрація носіїв заряду n не надто велика для заповнення лише першої розмірної підзони, що має місце, коли

$$- n < g_1 = \frac{3\pi}{2d^3}, \quad (2.17)$$

де $g_1 = \frac{3\pi}{2d^3}$ – концентрація станів у першій розмірній підзоні¹.

– тонкий зразок (нанометрових товщин) однорідний із розкидом товщин, менших за довжину хвилі де Бройля.

За цих умов КРЕ матиме такі прояви:

- а) зміну в енергетичному спектрі носіїв заряду, що може спричинити появу напівпровідникових властивостей у деяких напівметалах і викликати зміну ефективної маси носіїв заряду;
- б) зміну густини електронних станів та її залежність від енергії; у двовимірному випадку вона перестав залежати від енергії носіїв і починає залежати від товщини зразка d ;
- в) зміну концентрації носіїв заряду $n(d)$;
- г) появу залежності часу релаксації носіїв заряду τ від d ;
- д) зміну глибини екранування електричного поля $L_e(d)$.

¹ Концентрацію електронних станів у v -й енергетичній зоні в $2D$ -випадку можна знайти за допомогою відповідного значення для густини станів:

$$g_v = \int_{E_v}^{E_{v+1}} g_{2D}(d) dE = \int_{E_v}^{E_{v+1}} \frac{m}{\pi \hbar^2 d} dE = \frac{m}{2\pi \hbar^2 d} (E_{v+1} - E_v) = \frac{\pi}{2d^3} (2v_1 + 1).$$

2.5 Тунелювання

Термін тунелювання (*tunneling*) означає перенесення частинки крізь область, обмежену потенціальним бар'єром, висота якого більше повної енергії даної частинки (або проникнення в цю область). Такий ефект неможливий з точки зору класичної механіки, проте має місце для квантових частинок, яким, як відомо, характерний корпускулярно-хвильовий дуалізм. Хвильові властивості частинок призводять до іншого, аномального з точки зору класичної механіки, ефекту – надбар'єрному відбиванню. Основні закономірності цих явищ зображені нижче.

Взаємодію квантових частинок із різними потенціальними бар'єрами наведено на рис. 2.4.

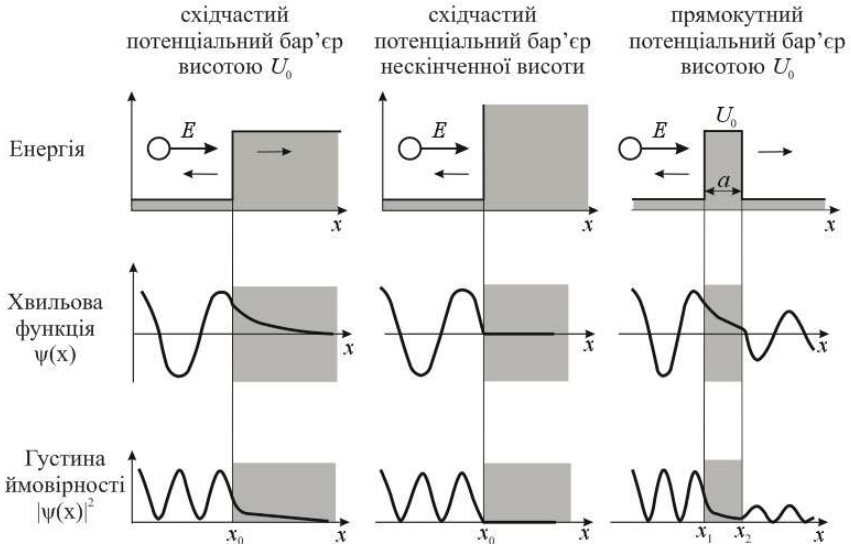


Рисунок 2.4 – Взаємодія квантової частинки з повною енергією E зі східчастим бар'єром кінцевої ширини U_0 , з нескінченно високим потенціальним бар'єром і прямокутним потенціальним бар'єром висотою U_0 завширшки a

Згідно класичної механіки, частинка з енергією $E < U_0$, яка рухається зліва направо, тобто наближується до потенціального бар'єра, відіб'ється від нього і почне рухатися в зворотному напрямку. Якщо ж $E > U_0$, то частинка продовжить рух у попередньому напрямку. У кван-

товій механіці картина інша.

На мові квантової механіки рух частинки в одномірному потенціальному полі $U(x)$ описується рівнянням Шредінгера:

$$-\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + U(x) \psi(x) = E \psi(x), \quad (2.18)$$

де m – маса частинки; $\psi(x)$ – її хвильова функція.

Якщо ж енергія квантової частинки більше висоти східчастого бар'єра ($E > U_0$), то в області перед потенціальним бар'єром, де $U(x) = 0$, розв'язок рівняння Шредінгера для частинки з імпульсом

$k_1 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}$ має вигляд суперпозиції двох хвиль:

$$\psi(x) = A' e^{ik_1 x} + B e^{-ik_1 x}, \quad (2.19)$$

де A' , B – константи; i – уявна одиниця. Хвильову функцію звичай формують так, що $A' = 1$.

Перший член в (2.19) відповідає хвилі, яка падає на бар'єр, рухається вздовж осі x зліва направо. Другий член описує відбиту хвилю, яка рухається вздовж осі x у протилежному напрямку.

При $x \rightarrow \infty$ хвильова функція частинки, яка пройшла над потенціальним бар'єром, має асимптотичний вигляд:

$$\psi(x) = A e^{ik_2 x}, \quad (2.20)$$

де $k_2 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - U_0)}$. Густина потоку в падаючій хвилі пропорційна k_1 , у відбитій – $k_1 |B|^2$, а у хвилі, яка пройшла, – $k_2 |A|^2$. Коефіцієнт проходження частинки крізь межу потенціального бар'єра, який визначається як відношення густини потоку в хвилі, яка пройшла, до густину потоку в падаючій хвилі, дорівнює:

$$T(E) = \frac{k_2}{k_1} |A|^2. \quad (2.21)$$

Коефіцієнт відбивання частинки від потенціального бар'єра, який визначається відношенням густини відбитого потоку до густини падаючого потоку, дорівнює:

$$R(E) = |B|^2 = 1 - \frac{k_2}{k_1} |A|^2. \quad (2.22)$$

Очевидно, що $\mathcal{R}(E) = 1 - \mathcal{T}(E)$.

Сталі A і B , які визначаються з умови неперервності хвильової функції та її першої похідної при $x = x_0$, дорівнюють:

$$A = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}, \quad B = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}. \quad (2.23)$$

Відповідно до (2.23) коефіцієнти відбивання і проходження дорівнюють:

$$\mathcal{R}(E) = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2, \quad \mathcal{T}(E) = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}. \quad (2.24)$$

З виразів (2.24) випливає, що при $E = U_0$ ($k_2 = 0$) коефіцієнт відбивання $\mathcal{R}$ обертається в одиницю, а коефіцієнт проходження – в нуль. З ростом енергії частинки коефіцієнт відбивання зменшується і прямує до нуля при $E \rightarrow \infty$, оскільки $\mathcal{R} \approx \frac{U_0^2}{4E^2}$ при $E \gg U_0$.

Якщо квантова частинка рухається над прямокутним потенціальним бар'єром U_0 і кінцевою шириною $a = x_2 - x_1$, то розв'язок рівняння Шредінгера для кожної з областей має вигляд:

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= e^{ik_1 x} + C e^{-ik_1 x}, & x < x_1; \\ \psi_2(x) &= D e^{ik_2 x} + F e^{-ik_2 x}, & x_1 < x < x_2; \\ \psi_3(x) &= G e^{ik_1 x}, & x > x_2. \end{aligned} \quad (2.25)$$

де хвильові вектори k_1 і k_2 визначені вище, а C , D , F , G – константи. У виразах (2.25) члени $e^{ik_1 x}$, $C e^{-ik_1 x}$ описують, відповідно, падаючу і відбиту хвилю, а $G e^{ik_1 x}$ – хвилю, яка пройшла. Сталі C , D , F , G визначаються з умов неперервності хвильової функції та її першої похідної в точках $x = x_1$ та $x = x_2$.

Коефіцієнт проходження частинки в даному випадку визначається як $\mathcal{T}(E) = |G|^2$, що призводить до виразу:

$$\mathcal{T}(E) = \frac{4k_1^2 k_2^2}{(k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2 k_2 a + 4k_1^2 k_2^2}. \quad (2.26)$$

Максимум коефіцієнта проходження, $\mathcal{T}(E) = 1$, досягається для

частинок з енергіями:

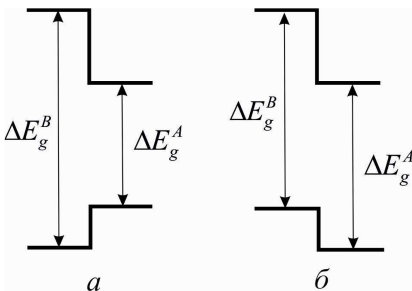
$$E = U_0 + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} v^2, \quad \text{де } v = 1, 2, 3, \dots \quad (2.27)$$

За інших значень енергії спостерігається часткове відбивання падаючих на бар'єр частинок. Отже, з квантової теорії випливає, що навіть у випадку, коли енергія падаючої на потенціальний бар'єр частинки більше від висоти цього бар'єру, коефіцієнт її відбивання може бути відмінний від нуля. Цим квантова частинка відрізняється від класичної, для якої ніякого відбивання в подібній ситуації бути не може.

2.6 Гетероструктури

Найбільш яскраво ефекти розмірного квантування проявляються в гетеропереходах, що виникають у разі контакту двох різних за хімічним складом напівпровідників. На такому контакті краї енергетичних зон зазнають стрибків, що відіграють роль потенціальних бар'єрів – стінок квантової ями для носіїв заряду.

Оскільки гетероструктури на основі твердих розчинів GaAs/Al_xGa_{1-x}As, в якому частина атомів галію замінена атомами алюмінію, були історично першими і залишаються до цього дня найбільш вивченими і поширеними наноструктурами, комп'ютерне моделювання квантоворозмірних ефектів проводиться саме на їх прикладі. Величина x – це частка атомів галію, замінених атомами алюмінію, зазвичай вона змінюється в межах від 0,15 до 0,35.

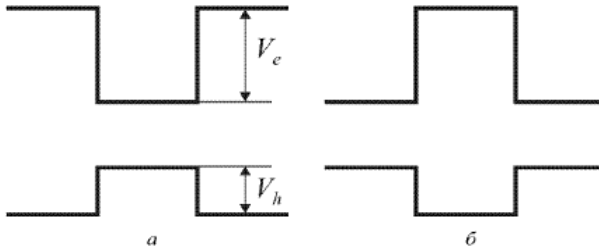


а – поодинокий гетероперехід I типу;
б – поодинокий гетероперехід II типу
Рисунок 2.5 – Зонна схема поодиноких гетеропереходів

Енергетичні схеми деяких гетероструктур зображені на рис. 2.5 і 2.6. Верхня і нижня лінії показують залежність положення дна зони провідності і стелі валентної зони від координати у напрямі головної осі структури, або осі зростання, перпендикулярно площинам шарів.

Поодинокий гетероперехід між двома матеріалами – напівпровідниками А і В зо-

бражено на рис. 2.5 Розрізняють гетеропереходи першого і другого типу залежно від того, лежить заборонена зона ΔE_g одного з композиційних матеріалів усередині забороненої зони іншого матеріалу, як наприклад для гетеропари $\text{GaAs}/\text{Al}_{0,35}\text{Ga}_{0,65}\text{As}$ (рис. 2.5, *а*), або дно зони провідності нижче в одному, а стеля валентної зони вища в іншому матеріалі, як у випадку InAs/AlSb або ZnSe/BeTe (рис. 2.5, *б*). На рис. 2.6 зображений подвійний гетероперехід.



$V_{e,h}$ – висота потенціального бар'єру (глибина квантової ями) або розрив зон на інтерфейсі відповідно в зоні провідності і валентній зоні

Рисунок 2.6 – Зонна схема подвійного гетеропереходу першого роду з квантовою ямою (*а*) або бар'єром (*б*)

Подвійний гетероперехід першого роду $B/A/B$ представляє структуру з одиночною квантовою ямою, якщо ширина забороненої зони в матеріалі A менша, ніж в матеріалі B , тобто $\Delta E_g^A < \Delta E_g^B$, або структуру з одиночним бар'єром, якщо $\Delta E_g^A > \Delta E_g^B$. У першому випадку внутрішній шар A утворює потенціальну яму (рис. 2.6, *а*), в якій відбувається розмірне квантування електронних і діркових станів. У другому випадку шар A утворює потенціальний бар'єр для електронів і дірок (рис. 2.6, *б*). На рис. 2.5, *а* схематично показано структуру з прямокутною ямою. Використовуючи як композиційний матеріал A твердий розчин і змінюючи його склад в процесі зростання, можна створювати ями іншої форми – параболічні, трикутні тощо.

Найбільша увага приділяється структурам, у яких головну роль виконують стани в центрі зони Бріллюена (Γ -мінімум) – структурам з гетеромежами по площині (001).

Ефективна маса електронів у Γ -мінімумі таких структур визначається виразом:

$$m_n^*(x) = (0,067 + 0,083x)m_e,$$

ширина забороненої зони (у еВ) –

$$\Delta E_g(x) = \begin{cases} 1,424 + 1,247x & , \text{ якщо } x < 0,45, \\ 1,9 + 0,125x + 0,143x^2 & , \text{ якщо } x \geq 0,45 \end{cases}$$

а стала ґратки –

$$a_0(x) = (0,56533 + 0,00078x) \text{ нм}.$$

Отже, варіюючи частку заміщення атомів галію алюмінієм x , можна змінювати такі важливі параметри напівпровідникового матеріалу як ефективну масу носіїв заряду, ширину забороненої зони і сталу ґратки. Помітна залежність ширини забороненої зони $\Delta E_g(x)$ від параметра x дозволяє при вирощуванні монолітних шаруватих структур одержувати заданий потенціальний рельєф для електронів в нормальному до площини шарів напрямі. При цьому внаслідок того, що залежність сталих ґраток $a_0(x)$ від параметра x незначна, кристалічна структура на інтерфейсі між шарами характеризується мінімальними зсувами – кристалічні ґратки різних шарів практично ідеально підходять один до одного. Завдяки практично повному узгодженню сталих ґраток шари мають незначні напруження і можуть вирощуватися довільної товщини.

Із загальнотеоретичної точки зору електронні стани в шаруватих структурах розраховують за допомогою розв'язку відповідної тримірної задачі про зонну структуру матеріалу. В даний час розроблені витончені методи комп'ютерного розрахунку квантових станів в наноструктурах, які базуються на мікроскопічних моделях псевдопотенціалу або сильного зв'язку. Проте ці методи поки не завжди застосовні, тому при конкретній роботі саме наближені методи ефективної маси (у разі простих енергетичних зон), ефективного гамільтоніану (для вироджених зон) і плавних огинаючих (у багатозонній моделі, наприклад, в моделі Кейна) виявляються зручнішими і результативнішими.

У наближених підходах розв'язок усередині кожного шару багатшарової структури (або композиційної області меншої розмірності в квантових дротах або точках) записується у вигляді лінійної комбінації незалежних об'ємних рішень, а для зшивання на гетеромежах уводяться граничні умови для огинаючих хвильових функцій електрона

та їх похідних за нормальною координатою. В цьому полягає суть методу матриці переносу.

Розрахунки електронних станів у напівпровідникових наноструктурах, які виконують за методом ефективної маси, ґрунтуються на розв'язку стаціонарного (виключаючи екзотичні випадки, коли потенціальний рельєф є функцією часу) рівняння Шредінгера, яке для руху електронів в перпендикулярному до площини шарів напрямі є одновимірним:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2 \psi(z, E)}{\partial z^2} + U(z) \psi(z, E) = E \psi(z, E), \quad (2.28)$$

де m^* – ефективна маса електрона; E – його повна енергія; $U(z)$ – потенціальний рельєф для електрона уздовж осі z , направленої в перпендикулярному до площини шарів напрямі. Розв'язком даного рівняння Шредінгера є z -складова огинаючої хвильової функції $\psi(z, E)$, яка характеризує рух електронів в перпендикулярному до площини шарів напрямі і визначає з точністю до нормування ймовірність перебування електрона з енергією E у точці з координатою z .

Для простої зонної структури граничні умови на інтерфейсі між шарами A і B мають вигляд:

$$\begin{cases} \psi|_A = \psi|_B, \\ \frac{1}{m_A} \frac{\partial \psi}{\partial z} \Big|_A = \frac{1}{m_B} \frac{\partial \psi}{\partial z} \Big|_B. \end{cases} \quad (2.29)$$

Розв'язуючи рівняння (2.28) з граничними умовами (2.29), можна побудувати огинаючі хвильові функції електронів з різними значеннями енергії E .

Фізичний інтерес представляють коефіцієнти відбивання і проходження, які визначаються відношенням густини потоків електронів, які відбилися і пройшли через інтерфейс, до густини потоку падаючих на інтерфейс електронів. Визначимо вектор густини потоку ймовірності $\mathbf{J}$ так (у нашому одномірному випадку це буде скаляр):

$$\mathbf{J} = \frac{i\hbar}{2m} (\psi \psi^{*'} - \psi^* \psi'). \quad (2.30)$$

Тоді коефіцієнт проходження $\mathcal{T}$ і коефіцієнт відбивання $\mathcal{R}$ визначаються так:

$$\mathcal{T} = \lim_{|z| \rightarrow \infty} \frac{\mathbf{J}_2^+}{\mathbf{J}_1^+}, \quad (2.31)$$

$$\mathcal{R} = \lim_{|z| \rightarrow \infty} \frac{\mathbf{J}_1^-}{\mathbf{J}_1^+}, \quad (2.32)$$

де $\mathbf{J}_1^+$ – вектор густини потоку ймовірності для електронів, які падають на ліву межу потенціального бар'єру; $\mathbf{J}_1^-$ – вектор густини потоку ймовірності для електронів, які відображаються від лівої межі потенціального бар'єру назад; $\mathbf{J}_2^+$ – вектор густини потоку ймовірності для електронів, які пройшли через потенціальний бар'єр.

У задачах про рух електронів в шарувато-неоднорідних середовищах рівняння Шредінгера (2.28) є неоднорідним диференціальним рівнянням другого порядку, і його розв'язання є далеко нетривіальною задачею. Проте, якщо складний потенціал $U(z)$ розбити на N ділянок так, щоб на кожній з них потенціал $U(z)$ можна було вважати постійним (рис. 2.7), то рівняння Шредінгера (2.28) на цій ділянці стане однорідним диференціальним рівнянням другого порядку, а його розв'язок записують у вигляді суперпозиції падаючої і відображеної хвиль де Бройля. Для знаходження амплітуд цих хвиль використовують граничні умови на інтерфейсах між ділянками. Такий підхід дозволяє легко формалізувати розрахунок амплітуд хвиль де Бройля і коефіцієнтів відбивання і проходження в багат шарових середовищах з використанням методу матриць перенесення.

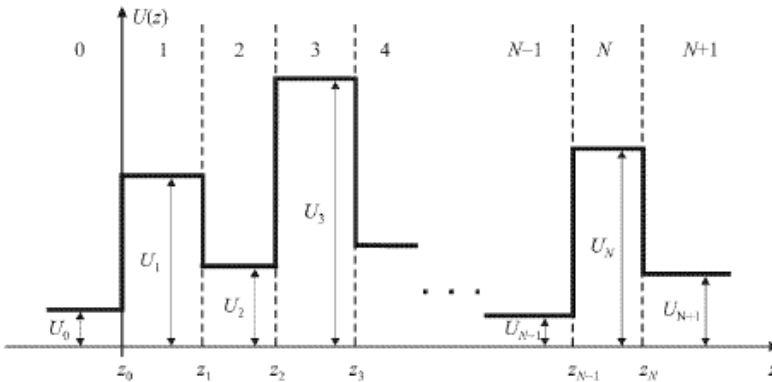


Рисунок 2.7 – Енергетична діаграма багат шарової гетероструктури

Розглянемо структуру, яка складається з N шарів, розміщених між напівнескінченими областями, причому в кожному шарі i в крайніх областях потенціал $U(z)$ постійний (рис. 2.7):

$$U(z) = \begin{cases} U_0, & \text{якщо } z \leq z_0, \\ U_i, & \text{якщо } z_{i-1} < z \leq z_i, \quad i = 1, \dots, N, \\ U_{N+1}, & \text{якщо } z \geq z_N, \end{cases} \quad (2.33)$$

де z_k – координата межі між k -ою і $(k+1)$ областями, $k = 0, \dots, N$.

Вважатимемо, що джерело електронів знаходиться в області 0 і нескінченно віддалене від шаруватої структури. Електрон рухається від джерела в позитивному напрямі осі Oz , і має енергію E .

Розв'язок рівняння Шредінгера (2.28) для i -ої області ($i = 0, \dots, N+1$) записується у вигляді:

$$\psi_i(z, E) = A_i e^{i\gamma_i z} + B_i e^{-i\gamma_i z}, \quad (2.34)$$

де A_i і B_i – амплітуди падаючої і відбитої хвиль де Бройля, відповідно, $\gamma_i = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_i(E - U_i)}$, m_i – ефективна маса. Граничні умови (2.29) приймають вигляд:

$$\begin{cases} \psi_k(z_k) = \psi_{k+1}(z_k), \\ \frac{1}{m_k} \frac{\partial \psi_k}{\partial z}(z_k) = \frac{1}{m_{k+1}} \frac{\partial \psi_{k+1}}{\partial z}(z_k). \end{cases} \quad (2.35)$$

Підставимо загальний розв'язок (2.34) у граничні умови (2.35), і одержимо систему лінійних алгебраїчних рівнянь щодо коефіцієнтів A_i, B_i

$$\begin{cases} A_k e^{i\gamma_k z_k} + B_k e^{-i\gamma_k z_k} = A_{k+1} e^{i\gamma_{k+1} z_k} + B_{k+1} e^{-i\gamma_{k+1} z_k}, \\ i \frac{\gamma_k}{m_k} (A_k e^{i\gamma_k z_k} - B_k e^{-i\gamma_k z_k}) = i \frac{\gamma_{k+1}}{m_{k+1}} (A_{k+1} e^{i\gamma_{k+1} z_k} - B_{k+1} e^{-i\gamma_{k+1} z_k}), \end{cases} \quad (2.36)$$

яка після алгебраїчних перетворень може бути приведена до вигляду:

$$\begin{cases} A_{k+1} = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\gamma_k}{\gamma_{k+1}} \frac{m_{k+1}}{m_k} \right) e^{-i(\gamma_{k+1} - \gamma_k) z_k} A_k + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\gamma_k}{\gamma_{k+1}} \frac{m_{k+1}}{m_k} \right) e^{-i(\gamma_{k+1} + \gamma_k) z_k} B_k, \\ B_{k+1} = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\gamma_k}{\gamma_{k+1}} \frac{m_{k+1}}{m_k} \right) e^{i(\gamma_{k+1} + \gamma_k) z_k} A_k + \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\gamma_k}{\gamma_{k+1}} \frac{m_{k+1}}{m_k} \right) e^{i(\gamma_{k+1} - \gamma_k) z_k} B_k, \end{cases} \quad (2.37)$$

або в матричній формі:
$$\begin{pmatrix} A_{k+1} \\ B_{k+1} \end{pmatrix} = \mathbf{T}_{k,k+1} \begin{pmatrix} A_k \\ B_k \end{pmatrix}, \quad (2.38)$$

де $\mathbf{T}_{k,k+1}$ – матриця передачі хвилі де Бройля з області k до області $k+1$:

$$\mathbf{T}_{k,k+1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\gamma_k}{\gamma_{k+1}} \frac{m_{k+1}}{m_k} \right) e^{-i(\gamma_{k+1} - \gamma_k)z_k} & \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\gamma_k}{\gamma_{k+1}} \frac{m_{k+1}}{m_k} \right) e^{-i(\gamma_{k+1} + \gamma_k)z_k} \\ \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\gamma_k}{\gamma_{k+1}} \frac{m_{k+1}}{m_k} \right) e^{i(\gamma_{k+1} + \gamma_k)z_k} & \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\gamma_k}{\gamma_{k+1}} \frac{m_{k+1}}{m_k} \right) e^{i(\gamma_{k+1} - \gamma_k)z_k} \end{pmatrix}. \quad (2.39)$$

З рекурентного співвідношення (2.37), з урахуванням того, що за умови задачі в області $N+1$ немає зустрічної електронної хвилі (тобто $B_{N+1} = 0$), можна записати наступну систему з двох рівнянь для амплітуд хвиль де Бройля в напівнескінчених областях до і після структури:

$$\begin{pmatrix} A_{N+1} \\ 0 \end{pmatrix} = \mathbf{T} \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix}, \quad (2.40)$$

де
$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} \mathbf{T}_{00} & \mathbf{T}_{01} \\ \mathbf{T}_{10} & \mathbf{T}_{11} \end{pmatrix} = \prod_{k=N}^0 \mathbf{T}_{k,k+1} \quad (2.41)$$

- матриця передачі хвилі де Бройля через всю шарувату структуру. Слід зазначити, що матриця $\mathbf{T}$ повністю визначається параметрами матеріалів структури і прилеглих областей.

Коефіцієнти відбивання і проходження електронної хвилі через структуру можуть бути виражені через елементи $\mathbf{T}$ -матриці передачі з системи рівнянь (2.40):

$$\mathcal{T} = \frac{|\gamma_{N+1}|}{|\gamma_0|} \frac{m_0}{m_{N+1}} \frac{|A_{N+1}|^2}{|A_0|^2} = \frac{|\gamma_{N+1}|}{|\gamma_0|} \frac{m_0}{m_{N+1}} \left| \frac{\mathbf{T}_{11}\mathbf{T}_{00} - \mathbf{T}_{01}\mathbf{T}_{10}}{\mathbf{T}_{11}} \right|^2, \quad (2.42)$$

$$\mathcal{R} = \frac{|B_0|^2}{|A_0|^2} = \left| \frac{\mathbf{T}_{10}}{\mathbf{T}_{11}} \right|^2. \quad (2.43)$$

Отже, з використанням матричного методу можуть бути розраховані коефіцієнти відбивання і проходження електронних хвиль через структуру зі складним потенціальним профілем, а також амплітуди хвиль де Бройля в кожній точці структури, віднесені до амплітуди падаючої на структуру електронної хвилі.

3 ЗАВДАННЯ ДО РОЗРАХУНКУ

3.1 Перелік тем реферативної частини розрахунково-графічних завдань

- 1 Класичні і квантові розмірні ефекти в кристалах. Приклади.
- 2 Одновимірна потенціальна яма. Стани з дискретним спектром. Стани з неперервним спектром. Віртуальні рівні енергії.
- 3 Коефіцієнт проходження крізь потенціальний бар'єр. Поняття прозорого і квазікласичного бар'єра.
- 4 Задача розсіювання в стаціонарній квантовій механіці. Формалізм трансфер-матриці.
- 5 Поодинокі гетеропереходи. Модель Шоклі – Андерсона.
- 6 Структури з легованими δ -шарами
- 7 Резонансні та тунельні явища у квантово-розмірних системах.
- 8 Мілкі домішкові стани в гетероструктурах.
- 9 Прояви хвильових властивостей (інтерференції) електронів у мезоскопічних системах.
- 10 Особливості фононного спектра в системах зниженої розмірності.
- 11 Двовимірний електронний газ у схрещених електричному і магнітному полях.
- 12 Ефект Ааронова – Бома.
- 13 Цілочисельний квантовий ефект Холла і його елементарна теорія.
- 14 Дробовий квантовий ефект Холла.
- 15 Модель „желе“ для металевих кластерів. Електронні оболонки в кластерах. Магічні числа для кластерів.
- 16 Детермінанти Слетера як базисний набір квантових станів системи електронів. Схема розв'язку стаціонарного рівняння Шредінгера за допомогою детермінантів Слетера.
- 17 Метод „конфігурацій“ для розрахунку електронного спектра наночастинок. Наближення хімічних зв'язків.
- 18 Прямий варіаційний метод розрахунку електронного спектра. Стаціонарне рівняння Шредінгера як варіаційна задача. Метод множників Лагранжа.
- 19 Метод Хартрі – Фока для розрахунку електронного спектра наночастинок.
- 20 Поняття про фотонні заборонені зони.
- 21 Графен. Одержання і властивості.

- 22 Рух носіїв заряду в графеновому шарі.
- 23 Вуглецеві нанотрубки. Одержання і властивості.
- 24 Рух носіїв заряду в тубулярних наноструктурах.
- 25 Екситони в системах зниженої розмірності.

3.2 Тематика типових розрахунково-графічних завдань

Розробити за допомогою пакету Mathcad програму для моделювання руху електрона в шаруватих гетероструктурах при прикладенні постійного електричного поля напругою $\phi=0,1$ В (в атомній системі одиниць $\phi=0,1/27,21$) в напрямі, перпендикулярному площинам шарів, використовуючи метод Т-матриці перенесення. Для цього замінити неперервний потенціальний профіль ступінчастим з кроком сходинки $h=0,1a_{0(\text{GaAs})}$. Гетероструктура складається з трьох наночарів $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$ (товщина шару $d_1=5 \cdot a_{0(\text{GaAs})}$) - GaAs (товщина шару $d_2=5 \cdot a_{0(\text{GaAs})}$) - $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$ (товщина шару $d_3=5 \cdot a_{0(\text{GaAs})}$), розташованих між напівнескінченими областями GaAs . Потенціальний профіль для електронів у вказаній гетероструктурі при прикладенні постійного електричного поля напругою ϕ представити у вигляді:

$$U(z) = \begin{cases} \frac{\Delta E_g^{\text{GaAs}}}{2}, & \text{якщо } z \leq 0 \\ \frac{\Delta E_g^{\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}}}{2} - \frac{\phi}{d_1 + d_2 + d_3} \cdot z, & \text{якщо } 0 < z \leq d_1 \\ \frac{\Delta E_g^{\text{GaAs}}}{2} - \frac{\phi}{d_1 + d_2 + d_3} \cdot z, & \text{якщо } d_1 < z \leq d_1 + d_2 \\ \frac{\Delta E_g^{\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}}}{2} - \frac{\phi}{d_1 + d_2 + d_3} \cdot z, & \text{якщо } d_1 + d_2 < z \leq d_1 + d_2 + d_3 \\ \frac{E_g^{\text{GaAs}}}{2} - \phi. & \text{якщо } z > d_1 + d_2 + d_3 \end{cases}$$

Виконати наступні завдання:

- 1) побудувати потенціальний профіль для електронів;
- 2) побудувати графік залежності коефіцієнта проходження $T(E)$ і відбивання $\mathcal{R}(E)$ електронів через таку структуру

від енергії електрона E , що змінюється в діапазоні від $\frac{\Delta E_g^{\text{GaAs}}}{2}$ до $3 \frac{\Delta E_g^{\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}} - \Delta E_g^{\text{GaAs}}}{2}$;

- 3) визначити значення енергії резонансного тунелювання через структуру;
- 4) побудувати огинаючі хвильових функцій у гетероструктурі для різних значень енергії електрона, зокрема, для енергії резонансного тунелювання, і схематично накласти ці графіки на потенціальний профіль структури.

Варіанти завдань:

$$x = 0,15 + 0,02 \cdot l,$$

$$d_1 = (5 + l) \cdot a_{0(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As})},$$

$$d_2 = (5 + m) \cdot a_{0(\text{GaAs})},$$

$$d_3 = (5 + n) \cdot a_{0(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As})},$$

$$\phi = \frac{0,05 + 0,01 \cdot l}{27,21} [\text{в атомних одиницях}],$$

де l - остання цифра номеру залікової книжки, m - передостання цифра номеру залікової книжки, n - третя з кінця цифра номеру залікової книжки.

РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. **Демиховский, В. Я.** Физика квантовых низкоразмерных структур [Текст] / В. Я. Демиховский, Г. А. Вугальтер. – М.: Логос, 2000. – 248 с.
2. **Кульбачинский, В. А.** Двумерные, одномерные, нульмерные структуру и сверхрешетки [Текст] / В. А. Кульбачинский. – М.: МГУ, 1998. – 164с.
3. **Шик, А. Я.** Физика низкоразмерных систем [Текст] / А. Я. Шик, Л. Г. Бакуева, С. Ф. Мусихин, С. А. Рыков. – СПб: Наука, 2001. – 160 с.
4. **Кравченко, А. Ф.** Электронные процессы в твердотельных системах пониженной размерности [Текст] / А. Ф. Кравченко, В. Н. Овсяк. – Новосибирск: Новосиб. Университет, 2000. – 448 с.
5. **Драгунов, В. П.** Основы наноэлектроники [Текст] / В. П. Драгунов, И. Г. Неизвестный, В. А. Гридчин. – М.: Логос, 2006. – 496 с.
6. **Борисенко, В. Е.** Наноэлектроника [Текст] / В. Е. Борисенко, А. И. Воробьева, Е. А. Уткина. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2009. – 223 с.
7. **Венгер, Є. Ф.** Збірник задач з квантової механіки [Текст] / Є. Ф. Венгер, В. М.Грибань, О. В. Мельничук. – К.: Вища школа, 2003. – 230 с.
8. **Гольдман, И. И.** Сборник задач по квантовой механике [Текст] / И. И. Гольдман, В. Д. Кривченков; Под. ред. проф. Б. Т. Гейликмана. М.: Издат. отдел УНЦ ДО, 2001. – 276 с. (репринтное воспроизведение издания 1957 года).
9. **Флюгге, З.** Задачи по квантовой механике [Текст]: в 2 т. / З. Флюгге; т. 1. – М.: Едиториал УРСС, 2008. – 344 с.
10. **Галицкий, В. М.** Задачи по квантовой механике [Текст] / В. М. Галицкий. – М.: Едиториал УРСС, 2001. – 304 с. – (Задачи по квантовой механике: в 2 ч. / В. М. Галицкий; ч. 1).

Додаток А
Приклад оформлення титульної сторінки

Міністерство освіти і науки України

Запорізький національний технічний університет

Кафедра МiНЕ

РОЗРАХУНКОВО-ГРАФІЧНЕ ЗАВДАННЯ
з дисципліни
„Фізика низькорозмірних систем“

(тема роботи)

Виконав:

студент ____ курсу, група РТ—__

(Ініціали, Прізвище)

Прийняв:

(посада)

(Ініціали, Прізвище)

20__ р.

Додаток Б
Приклад оформлення реферату

РЕФЕРАТ

РГЗ: 36 с., 14 рис., 9 джерел.

Об'єкт дослідження – двобар'ерна гетероструктура на основі твердого розчину $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, перпендикулярно до шарів якої прикладене постійне електричне поле.

Предмет дослідження – тунелювання електронів через структуру, що є об'єктом дослідження, і характеристики, що дозволяють це тунелювання описати.

Мета роботи – розрахувати методом матриці перенесення коефіцієнти проходження і відбивання електронів, огинаючи хвильових функцій.

Метод дослідження – застосування чисельних розрахунків, використання математичного пакету MathCad 14.

У першій частині роботи наведені теоретичні відомості про гетероструктури, докладно описаний метод матриці перенесення для розрахунку руху електронів у складному потенціальному профілі. Наприкінці наведено альтернативний методу матриці перенесення чисельний метод Нумерова розрахунку стаціонарного рівняння Шредінгера.

У другій частині роботи наведено лістинг проведених розрахунків в пакеті MathCad 14.

Після виконання розрахунку отримано коефіцієнти проходження і відбиття електронів, огинаючи хвильових функцій.

ГЕТЕРОСТРУКТУРА, РІВНЯННЯ ШРЕДІНГЕРА, ХВИЛЬОВА ФУНКЦІЯ, КОЕФІЦІЄНТ ПРОХОДЖЕННЯ, КОЕФІЦІЄНТ ВІДБИВАННЯ, МЕТОД МАТРИЦІ ПЕРЕНЕСЕННЯ

Додаток В
Приклад оформлення змісту

ЗМІСТ

Вступ	4
1 Квантоворозмірні гетероструктури на основі твердого розчину	5
1.1 Типи гетероструктур на основі твердого розчину $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$	5
1.2 Основні характеристики гетероструктур.....	6
1.3 Електронні стани в напівпровідникових наноструктурах і основні характеристики руху електрона в них.....	8
1.4 Метод матриць перенесення і його застосування для моделювання руху електрона в складному потенціальному рельєфі	9
1.5 Метод Нумерова чисельного розв'язку стаціонарного рівняння Шредінгера	12
2 Моделювання руху електрона через двобар'єрну квантоворозмірну структуру, перпендикулярно площинам шарів якої прикладене постійне електричне поле.....	14
2.1 Завдання для створення моделі.....	14
2.2 Модель руху електрона в двобар'єрній структурі, на яку діє постійне електричне поле.....	15
2.3 Результати розрахунків	18
2.3.1 Модель двобар'єрної структуру з шагом розбиття 1 а.о.....	18
2.3.2 Модель двобар'єрної структуру з шагом розбиття 0,5 а.о.	21
2.3.3 Модель двобар'єрної структуру з шагом розбиття 0,1 а.о.	24
Висновки	28
Перелік посилань	29

Додаток Г

Функції для роботи в математичному пакеті Mathcad

У даному додатку приведені короткі описи функцій, які можуть бути використані при виконанні завдань.

$$\sin(x), \cos(x), \tan(x), \cot(x). \quad (\text{Г.1})$$

Дані функції повертають відповідно синус, косинус, тангенс і котангенс аргументу x . Аргумент x повинен бути безрозмірним скаляром, дійсним або комплексним.

$$\text{if}(\text{cond}, x, y). \quad (\text{Г.2})$$

Дана функція повертає значення аргументу x , якщо значення аргументу cond істинне, і повертає значення аргументу y , якщо значення аргументу cond помилкове; cond – (логічний) булевий вираз, що приймає значення «істина» або «фальш»; x, y – довільні вирази, як наприклад числа, масиви, рядки або інші функції, що повертають подібні значення.

Примітка: дана функція є керуючим оператором і не працює з операторами, які модифікують функції, такими як оператор векторизації.

$$\text{mod}(x, y). \quad (\text{Г.3})$$

Дана функція повертає залишок від ділення числа x на число y . Значення, що повертається, має той же знак, що і значення аргументу x . Аргументи x і y – дійсні скаляри відмінні від нуля.

$$\text{for } x \in Y \quad (\text{Г.4})$$

$$z$$

Дана функція є циклом. Для вставки циклу в програму необхідно вибрати відповідну команду на панелі інструментів або використати комбінацію клавіш **<Ctrl> + <">**. Не слід друкувати слово «**for**», воно не буде пізнане як оператор.

Дана конструкція повторює виконання оператора z для кожного значення x з діапазону Y ; x – будь-яке допустиме ім'я змінної; Y – значення або послідовність значень. У більшості випадків використовується діапазон значень, але допустимі також вектор, набір скалярних, векторних або матричних значень через кому; z –

будь-який вираз або послідовність виразів, які необхідно циклічно виконувати – тіло циклу.

Примітки:

- 1 Цикл **for** виконується задане число разів. Якщо вимагається переривати виконання циклу до завершення всіх ітерацій, в його тіло слід додати оператора **break**.
- 2 Якщо вимагається перейти до наступної ітерації, не чекаючи виконання всіх операторів в тілі циклу, в його тіло слід додати оператора **continue**.

Додаток Д

Приклад виконання завдання

Приклад реалізації завдання у програмі Mathcad наведено у лістингу нижче.

В розрахунках використовується атомна система одиниць.

Властивості сполуки $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$

$m_n(x) := 0.067 + 0.083 \cdot x$ - ефективна маса електронів

$E_g(x) := \text{if} \left(x < 0.45, \frac{1.424 + 1.247 \cdot x}{27.21}, \frac{1.9 + 0.125 \cdot x + 0.143 \cdot x^2}{27.21} \right)$ - ширина забороненої зони

$a_0(x) := \frac{(0.5633 + 0.00078 \cdot x) \cdot 10}{0.527}$ - товщина одного моношару

Визначимо лінійні розміри структури:

ширина першого бар'єру (шар $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$): $d_1 := 5 \cdot a_0(0.3)$,

потенціальної ями (шар GaAs) $d_2 := 5 \cdot a_0(0)$,

другого бар'єру (шар $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$): $d_3 := 5 \cdot a_0(0.3)$.

Визначимо енергію дна зони провідності кожної області без урахування (за початок відліку приймаємо значення енергії середини забороненої зони):

$$U_1 := \frac{E_g(0)}{2}, \quad U_2 := \frac{E_g(0.3)}{2}, \quad U_3 := \frac{E_g(0)}{2}, \quad U_4 := \frac{E_g(0.3)}{2}, \quad U_5 := \frac{E_g(0)}{2}.$$

Визначимо ефективну масу електронів в кожній із зон тунельної структури:

$$m_n(z) := \begin{cases} m_n(0) & \text{if } z \leq 0 \\ m_n(0.3) & \text{if } z > 0 \wedge z \leq d_1 \\ m_n(0) & \text{if } z > d_1 \wedge z \leq (d_1 + d_2) \\ m_n(0.3) & \text{if } z > (d_1 + d_2) \wedge z \leq (d_1 + d_2 + d_3) \\ m_n(0) & \text{otherwise} \end{cases}$$

Різниця потенціалів, що прикладена до тунельної структури (в атомній системі одиниць):

$$\Phi := \frac{0.1}{27.21}$$

Потенціальний профіль:

$$U(z) := \begin{cases} U_1 & \text{if } z \leq 0 \\ \left(U_2 - \frac{\Phi}{d_1 + d_2 + d_3} \cdot z \right) & \text{if } z > 0 \wedge z \leq d_1 \\ \left(U_3 - \frac{\Phi}{d_1 + d_2 + d_3} \cdot z \right) & \text{if } z > d_1 \wedge z \leq (d_1 + d_2) \\ \left(U_4 - \frac{\Phi}{d_1 + d_2 + d_3} \cdot z \right) & \text{if } z > (d_1 + d_2) \wedge z \leq (d_1 + d_2 + d_3) \\ U_5 - \Phi & \text{otherwise} \end{cases}$$

Розіб'ємо структуру від $z=0$ до $z=d_1+d_2+d_3$ на N відрізків так, щоб шаг $h \sim 0.1$ атомного моношару GaAs:

$$h := 0.1$$

$$N := \text{round}\left(\frac{d_1 + d_2 + d_3}{h \cdot a_0(0)}, 0\right)$$

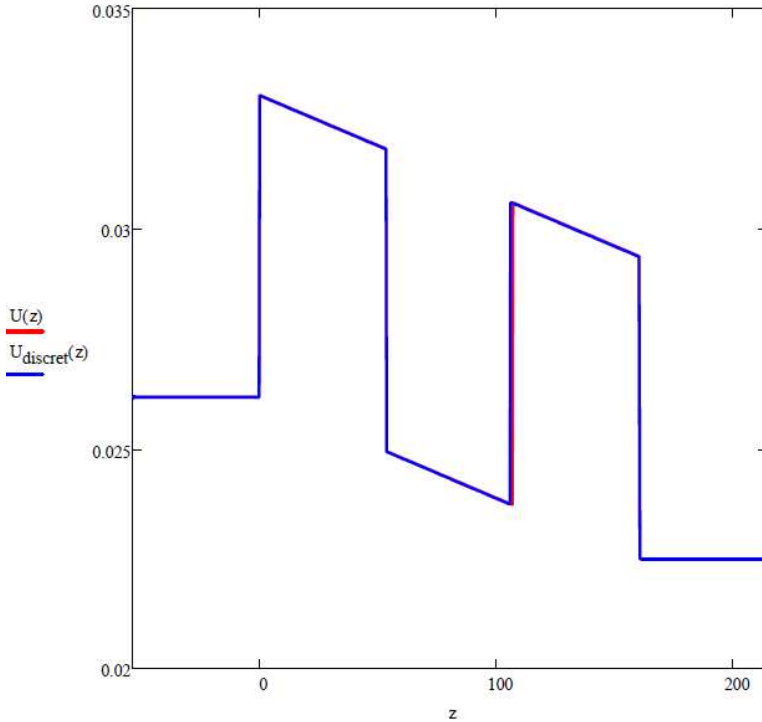
Кількість границь: $N_b := N + 1$ Загальна кількість відрізків: $N_b + 1$.

Визначимо дискретні значення границь B , потенціальної енергії U_{discret} і хвильови векторів y в атомних одиницях кожної області:

$$B := \begin{cases} \text{for } k \in 0 \dots N_b \\ B_k \leftarrow \frac{(d_1 + d_2 + d_3) \cdot k}{N} \\ \text{return } B \end{cases} \quad U_{\text{discret}}(z) := \begin{cases} \text{return } U(B_0) & \text{if } z \leq B_0 \\ \text{for } k \in 1 \dots N_b - 1 \\ \text{return } U(B_k) & \text{if } z > B_{k-1} \wedge z \leq B_k \\ \text{return } U(B_{N_b}) & \text{if } z > B_{N_b-1} \end{cases}$$

$$\gamma(E, k) := \sqrt{2 \cdot m(B_k) \cdot (E - U(B_k))}$$

Побудуємо неперервний потенціальний профіль і кусково-лінійний.



Вектор матриць передачі хвиль де Бройля із області k в область $k+1$:

$$\underline{\underline{c}}(E, k) := \frac{\gamma(E, k)}{\gamma(E, k+1)} \cdot \frac{m(B_{k+1})}{m(B_k)}$$

$$\underline{\underline{T}}(E, k) := \begin{bmatrix} \frac{1}{2} \cdot (1 + c(E, k)) \cdot e^{-i(\gamma(E, k+1) - \gamma(E, k)) \cdot B_k} & \frac{1}{2} \cdot (1 - c(E, k)) \cdot e^{-i(\gamma(E, k+1) + \gamma(E, k)) \cdot B_k} \\ \frac{1}{2} \cdot (1 - c(E, k)) \cdot e^{i(\gamma(E, k+1) + \gamma(E, k)) \cdot B_k} & \frac{1}{2} \cdot (1 + c(E, k)) \cdot e^{i(\gamma(E, k+1) - \gamma(E, k)) \cdot B_k} \end{bmatrix}$$

Матриця передачі хвиль де Бройля через всю структуру:

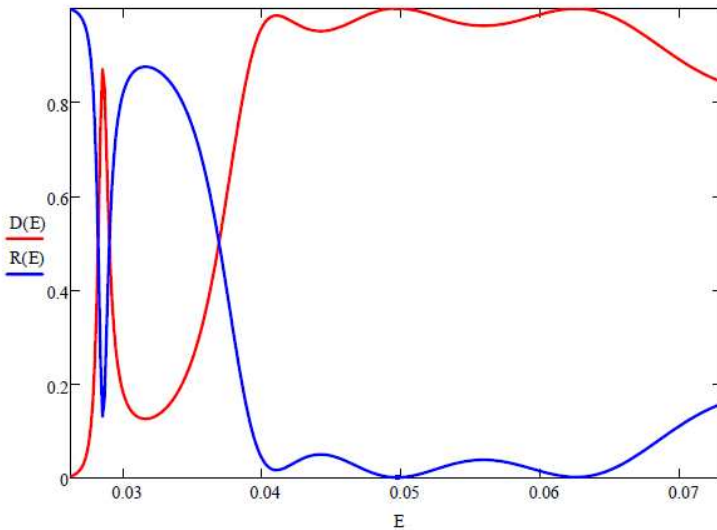
$$T_{all}(E) := \prod_{k=N}^0 T(E, k)$$

$$\underline{\underline{R}}(E) := \left(\left| \frac{T_{all}(E)_{1,0}}{T_{all}(E)_{1,1}} \right| \right)^2$$

$$D(E) := \frac{|\gamma(E, N_b)|}{|\gamma(E, 0)|} \cdot \frac{m(B_0)}{m(B_{N_b})} \cdot \left(\left| \frac{T_{all}(E)_{1,1} \cdot T_{all}(E)_{0,0} - T_{all}(E)_{0,1} \cdot T_{all}(E)_{1,0}}{T_{all}(E)_{1,1}} \right| \right)^2$$

Залежність коефіцієнта проходження і відбиття від енергії

$$E := U_1, U_1 + \frac{2U_2 - 2U_1}{100} \dots 3U_2 - U_1$$



Резонансний рівень: $E_{\text{res}} := 0.029192$

Знайдемо амплітуди хвильових функцій A і B у кожній із областей, якщо $A_0 := 0.02$

$$\text{Mag}(E) := \left| \begin{array}{l} \text{Mag}^{\langle 0 \rangle} \leftarrow \begin{pmatrix} A_0 \\ T_{\text{all}}(E)_{1,0} \\ -A_0 \cdot \frac{T_{\text{all}}(E)_{1,0}}{T_{\text{all}}(E)_{1,1}} \end{pmatrix} \\ \text{for } k \in 1 \dots N_b - 1 \\ \text{Mag}^{\langle k \rangle} \leftarrow T(E, k-1) \cdot \text{Mag}^{\langle k-1 \rangle} \\ \text{Mag}^{\langle N_b \rangle} \leftarrow \begin{pmatrix} T_{\text{all}}(E)_{1,1} \cdot T_{\text{all}}(E)_{0,0} - T_{\text{all}}(E)_{0,1} \cdot T_{\text{all}}(E)_{1,0} \\ A_0 \cdot \frac{T_{\text{all}}(E)_{1,1} \cdot T_{\text{all}}(E)_{0,0} - T_{\text{all}}(E)_{0,1} \cdot T_{\text{all}}(E)_{1,0}}{T_{\text{all}}(E)_{1,1}} \\ 0 \end{pmatrix} \\ \text{return Mag} \end{array} \right|$$

$$\psi(E, z) := \left| \begin{array}{l} \text{return} \left(\left| \text{Mag}(E)_{0,0} \cdot e^{i \cdot \gamma(E,0) \cdot z} + \text{Mag}(E)_{1,0} \cdot e^{-i \cdot \gamma(E,0) \cdot z} \right|^2 \right) \text{ if } z \leq B_0 \\ \text{for } k \in 1 \dots N_b - 1 \\ \text{return} \left[\left| \text{Mag}(E)_{0,k} \cdot e^{i \cdot (\gamma(E,k)) \cdot z} + \text{Mag}(E)_{1,k} \cdot e^{-i \cdot \gamma(E,k) \cdot z} \right|^2 \right] \text{ if } z > B_{k-1} \wedge z \leq B_k \\ \text{return} \left(\left| \text{Mag}(E)_{0,N_b} \cdot e^{i \cdot \gamma(E,N_b) \cdot z} + \text{Mag}(E)_{1,N_b} \cdot e^{-i \cdot \gamma(E,N_b) \cdot z} \right|^2 \right) \text{ if } z > B_{N_b-1} \end{array} \right|$$

Графіки огинаючих хвильових функцій для 5 значень енергії, зокрема для енергії, що відповідає резонансному рівню $D(E) > 1$.

$$E_1 := U_1 + 1 \cdot \frac{U_2 - U_1}{5} \quad E_2 := U_1 + 3 \cdot \frac{U_2 - U_1}{5} \quad E_3 := U_1 + 4 \cdot \frac{U_2 - U_1}{5}$$

$$E_4 := U_1 + 5 \cdot \frac{U_2 - U_1}{5}$$

$$z := -2 \cdot d_1, -2 \cdot d_1 + \frac{d_1}{50} \dots 3 \cdot d_1 + d_2 + d_3$$

