

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Запорізький національний технічний університет

МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ

до лабораторного практикуму з дисципліни

„ФІЗИКА НИЗЬКОРОЗМІРНИХ СИСТЕМ“

для студентів за напрямом підготовки

6.050801 „Мікро- та наноелектроніка“

денної й заочної форм навчання

2015

Методичні вказівки до лабораторних робіт з дисципліни “Фізика низькорозмірних систем” для студентів спеціальності 6.050801 “Мікро- та наноелектроніка” денної і заочної форм навчання / Укл.: А. В. Бабіч, А. В. Коротун. – Запоріжжя: ЗНТУ, 2015. – 74 с.

Укладачі: А. В. Бабіч, доц., канд. фіз.-мат. наук,
А. В. Коротун, 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 №11
від „15“ червня 2015 р.

ЗМІСТ

1 ЛАБОРАТОРНА РОБОТА № 1 “КВАНТОВОРОЗМІРНІ ГЕТЕРОСТРУКТУРИ НА ОСНОВІ ТВЕРДОГО РОЗЧИНУ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ”	5
1.1 Загальні теоретичні відомості	5
1.2 Завдання до лабораторної роботи	9
2 ЛАБОРАТОРНА РОБОТА № 2 “МОДЕЛЮВАННЯ ЕНЕРГЕТИЧНОГО СПЕКТРУ ЕЛЕКТРОНА В ОДНОВИМІРНІЙ ПРЯМОКУТНІЙ КВАНТОВІЙ ЯМІ”	10
2.1 Загальні теоретичні відомості	10
2.1.1 Рух електрона в ямі з нескінченно високими потенціальними стінками	12
2.1.2 Рух електрона в потенціальній ямі зі стінками кінцевої висоти	14
2.2 Завдання до лабораторної роботи	16
3 ЛАБОРАТОРНА РОБОТА № 3 “МОДЕЛЮВАННЯ РУХУ ЕЛЕКТРОНА ЧЕРЕЗ ПОТЕНЦІАЛЬНИЙ БАР’ЄР”	17
3.1 Загальні теоретичні відомості	17
3.1.1 Рух електрона поблизу потенціальної сходинки	17
3.1.2 Рух електрона через потенціальний бар’єр кінцевої ширини	22
3.2 Завдання до лабораторної роботи	26
4 ЛАБОРАТОРНА РОБОТА № 4 “МЕТОД МАТРИЦЬ ПЕРЕНЕСЕННЯ ТА ЙОГО ЗАСТОСУВАННЯ ДЛЯ МОДЕЛЮВАННЯ РУХУ ЕЛЕКТРОНА В СКЛАДНОМУ ПОТЕНЦІАЛЬНОМУ РЕЛЬЄФІ”	28
4.1 Загальні теоретичні відомості	28
4.1.1 Формування матриці перенесення	28
4.1.2 Моделювання руху електрона через двобар’єрну квантову структуру (ДБКС)	31
4.1.3 Моделювання руху електрона при прикладеному постійному електричному полі у напрямку перпендикулярному до площини шарів	33
4.2 Завдання до лабораторної роботи	35
5 ЛАБОРАТОРНА РОБОТА № 5 “РОЗРАХУНОК ГУСТИНИ СТАНІВ 2D- ЕЛЕКТРОННОГО ГАЗУ ТА ЕНЕРГІЇ ФЕРМІ МЕТАЛЕВОЇ НАНОПЛІВКИ”	37
5.1 Загальні теоретичні відомості	37
5.1.1 Розмірні ефекти в електронних властивостях нанометрових плівок	37
5.1.2 Розрахунок енергетичного спектра електронів у наноплівці	39
5.2 Завдання до лабораторної роботи	41
6 ЛАБОРАТОРНА РОБОТА № 6 “РОЗРАХУНОК ГУСТИНИ СТАНІВ 1D- ЕЛЕКТРОННОГО ГАЗУ ТА ЕНЕРГІЇ ФЕРМІ МЕТАЛЕВОГО НАНОДРОТУ”	42
6.1 Загальні теоретичні відомості	42

6.1.1 Розв'язок рівняння Шредінгера в циліндричній системі координат ..	42
6.1.2 Енергія Фермі нанометрового металевго дроту	44
6.1.3 Енергетичний спектр електронів у еліптичному квантовому дроті з малим ексцентриситетом	46
6.2 Завдання до лабораторної роботи	47
7 ЛАБОРАТОРНА РОБОТА № 7 “РОЗРАХУНОК ГУСТИНИ СТАНІВ ОД-ЕЛЕКТРОННОГО ГАЗУ ТА ЕНЕРГІЇ ФЕРМІ МЕТАЛЕВОГО СФЕРИЧНОГО НАНОКЛАСТЕРУ”	48
7.1 Загальні теоретичні відомості	49
7.1.1 Розв'язок рівняння Шредінгера в сферичній системі координат	49
7.1.2 Енергія Фермі нанометрової металевго кульки	50
7.2 Завдання до лабораторної роботи	51
8 ЛАБОРАТОРНА РОБОТА № 8 “РОЗМІРНА ЗАЛЕЖНІСТЬ ТЕМПЕРАТУРИ ДЕБАЯ”	52
8.1 Теплові властивості нанокластерів у наближенні Дебая	52
8.2 Завдання до лабораторної роботи	56
9 ЛАБОРАТОРНА РОБОТА № 9 “ПОВЕРХНЕВА ПРОВІДНІСТЬ ВУГЛЕЦЕВОЇ НАНОТРУБКИ”	57
9.1 Загальні теоретичні відомості	57
9.1.1 Структура та електронні властивості вуглецевих нанотрубок	57
9.1.2 Електрична провідність вуглецевих нанотрубок	58
9.2 Завдання до лабораторної роботи	61
10 ЛАБОРАТОРНА РОБОТА № 10 “ОПТИЧНА ПРОВІДНІСТЬ ТА КОЕФІЦІЄНТ ПОГЛИНАННЯ ТОНКОЇ МЕТАЛЕВОЇ ПЛІВКИ”	63
10.1 Загальні теоретичні відомості	63
10.1.1 Тонка металева плівка в полі електромагнітної хвилі	63
10.1.2 Метод матриці густини	64
10.1.3 Наближення „діагонального відгуку“	66
10.1.4 Квантові стани в плівці	67
10.1.5 Оптична провідність та коефіцієнт поглинання тонких металевих плівок	68
10.2 Завдання до лабораторної роботи	70
Рекомендована література	71
Додаток А. Деякі параметри твердого розчину AlGaAs за кімнатної температури	72

1 ЛАБОРАТОРНА РОБОТА № 1 “КВАНТОВОРОЗМІРНІ ГЕТЕРОСТРУКТУРИ НА ОСНОВІ ТВЕРДОГО РОЗЧИНУ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ”

Мета роботи: ознайомитися з гетероструктурами і їх класифікацією, зокрема з квантоворозмірними гетероструктурами на основі твердого розчину $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$.

1.1 Загальні теоретичні відомості

Фізика напівпровідників останні 10–15 років, завдяки успіхам технології і, перш за все, методу МВЕ (Molecular Beam Epitaxy – молекулярно-променева епітаксія), це головним чином фізика напівпровідникових низькорозмірних структур (наноструктур). Сучасні методи епітаксії дозволяють створювати монокристалічні шари і багатошарові гетероструктури з товщиною шарів $1 \div 10$ нм, порівняної з довжиною хвилі де Бройля носіїв заряду:

$$\Lambda = \frac{h}{m_n^* v} . \quad (1.1)$$

Це відкриває принципову можливість спостереження і використання явищ, обумовлених хвильовою природою електрона. До них, зокрема, відносяться інтерференція електронних хвиль і викликані нею розмірні квантові ефекти, наприклад, такі, як квантування енергії і імпульсу носіїв заряду в тонких шарах, резонансний характер проходження електронів через ці шари і т.п. [5–7]. Розмірне квантування кардинально міняє енергетичний спектр носіїв заряду, фононів, квазічастинок, і виникненню цілого ряду нових фізичних явищ і властивостей напівпровідникових наноструктур.

Важлива перевага наноструктур пов'язана з тим, що, змінюючи геометричні розміри і конфігурацію нанооб'єктів, можна керувати властивостями системи. Відкривається широка можливість конструювання параметрів структур і, перш за все, енергетичного спектру носіїв заряду.

Гетероструктура – термін у фізиці напівпровідників, що позначає вирощену на підкладці шарувату структуру з різних напівпровідників, в загальному випадку відрізняються шириною забороненої

зони. Між двома різними матеріалами формується гетероперехід, на якому можлива підвищена концентрація носіїв, і звідси – формування виродженого двовимірного електронного газу. На відміну від гомоструктур має більшу гнучкість в конструюванні потрібного потенційного профілю зони провідності і валентної зони.

Енергетичні схеми деяких гетероструктур зображені на рис. 1.1 і 1.2. 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.

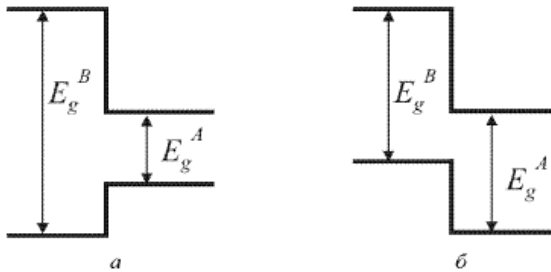


Рисунок 1.1 – Зонна схема одиночного гетеропереходу типу I (а) і типу II (б)

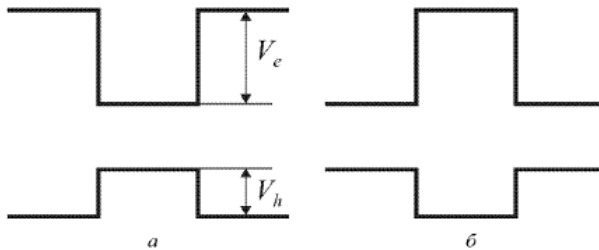


Рисунок 1.2 – Зонна схема подвійного гетеропереходу першого роду з квантовою ямою (а) або бар'єром (б); $V_{e,h}$ – висота потенціального бар'єру (глибина квантової ями) або розрив зон на інтерфейсі в зоні провідності і валентній зоні відповідно

Одиночний гетероперехід між двома матеріалами – напівпровідниками A і B зображений на рис. 1.1. Розрізняють гетеропереходи першого і другого типу залежно від того, лежить заборонена зона E_g одного з композиційних матеріалів у середині забороненої зони іншого матеріалу, як наприклад для гетеропари $\text{GaAs}/\text{Al}_{0,35}\text{Ga}_{0,65}\text{As}$ (рис. 1.1, 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. 1.1, б). На рис. 1.2 зображений подвійний гетероперехід.

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 $E_g^A < E_g^B$ або структуру з одиночним бар'єром, якщо $E_g^A > E_g^B$. У першому випадку внутрішній шар A утворює потенціальну яму (рис. 1.2, а), в якій відбувається розмірне квантування електронних і діркових станів. У другому випадку шар A утворює потенціальний бар'єр для електронів і дірок (рис. 1.2, б). На рис. 1.2, а схематично показана структура з прямокутною ямою. Використовуючи як композиційний матеріал A твердий розчин і змінюючи його склад в процесі зростання, можна створювати ями іншої форми – параболічні, трикутні і т.п.

Логічним розвитком однобар'єрної структури є двобар'єрні і трибар'єрні структури, тобто одиночна або подвійна квантові ями, відокремлені бар'єрами кінцевої товщини від напівнескінченних шарів з меншою шириною забороненої зони. А періодична структура з квантовими ямами, розділеними не дуже широкими потенціальними бар'єрами, утворює надгратку, в якій носії заряду можуть тунелювати з ями до ями і довжина вільного пробігу цього носія уздовж осі, перпендикулярної площинам шарів, перевищує період структури.

Як правило, квантоворозмірні ефекти спостерігаються в шаруватих гетероструктурах, складених з матеріалів, що розрізняються розташуванням і шириною енергетичних зон [8–9]. У таких структурах в поперечному до площини шарів напрямі потенціальний рельєф для електронів має форму потенціальних ям і бар'єрів, що істотно впливає на їх енергетичний спектр і характер руху. Особливо сильне квантування поперечних значень імпульсу і енергії позначається на поперечному транспорті електронів в гетероструктурах. Інтерференція електронних хвиль, відбитих від границь шарів, призводить до резонансних осциляцій струму, що протікає в поперечному до шарів напрямі під дією прикладеної до них різниці потенціалів, і появи на вольт-амперних характеристиках шаруватих структур ділянок з негативним диференціальним опором.

Якщо вважати, що електрони тунелюють з тепловою швидкістю ($\sim 5 \cdot 10^5$ м/с) через шар товщиною менше 10^{-8} м, то час тунелювання

складає 10^{-13} с, і це дає змогу створювати надшвидкодійні прилади з робочими частотами більш 10^3 ГГц.

Такі квантоворозмірні структури створюються із шарів метал-діелектрик і епітаксціальних шарів різних напівпровідникових матеріалів, перш за все, гетероструктур $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ [13, 14].

Оскільки гетероструктури на основі твердих розчинів $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, в якому частина атомів галію заміщена атомами алюмінію, були історично першими і залишаються до цього дня найбільш вивченими і поширеними, комп'ютерне моделювання квантоворозмірних ефектів ми проводитимемо саме на їх прикладі. Величина x – це частка атомів галію, заміщених атомами алюмінію, зазвичай вона змінюється в межах від 0,15 до 0,35.

Зонна структура GaAs представлена на рис. 1.3.

Найбільша увага надається структурам, у яких головну роль виконують стани в центрі зони Бріллюена (точка Γ) – структурам з гетерограницями по площині (001).

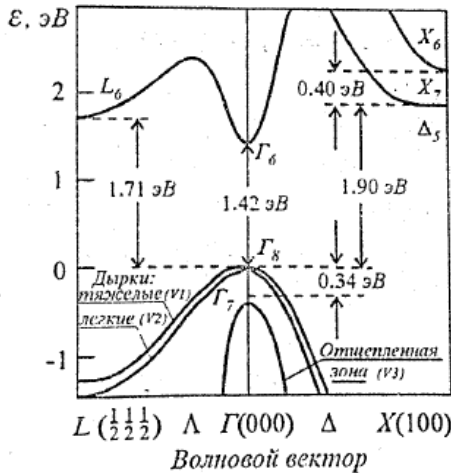


Рисунок 1.3 – Зонна діаграма GaAs

Ефективна маса електронів в Γ -мінімумі таких структур визначається виразом

$$m_n(x) = (0,067 + 0,083x)m_e, \quad (1.2)$$

ширина забороненої зони (у еВ) –

$$E_g(x) = \begin{cases} 1,424 + 1,247x & , \text{ якщо } x < 0,45, \\ 1,9 + 0,125x + 0,143x^2 & , \text{ якщо } x \geq 0,45 \end{cases} \quad (1.3)$$

а постійна ґратки –

$$a_0(x) = 0,56533 + 0,00078x \text{ нм}. \quad (1.4)$$

Таким чином, варіюючи частку заміщення атомів галію алюмінієм x можна змінювати такі важливі параметри напівпровідникового матеріалу як ефективну масу носіїв заряду, ширину забороненої зони і постійну ґратки. Помітна залежність ширини забороненої зони від параметра x дозволяє при вищевказаній монолітних шаруватих структур одержувати заданий потенціальний рельєф для електронів в нормальному до площини шарів напрямі. При цьому внаслідок того, що залежність постійних ґраток від параметра x слабка, кристалічна структура на інтерфейсі між шарами характеризується мінімальними порушеннями – кристалічні ґратки різних шарів практично ідеально підходять один до одного. Через практично повне узгодження постійних ґраток шари мають малі напруження і можуть вирощуватися довільної товщини.

1.2 Завдання до лабораторної роботи

1. Згідно Додатку А ознайомитися з деякими функціями пакету MathCad.
2. Побудувати залежності ефективної маси електронів, ширини забороненої зони та постійної ґратки від долі заміщення атомів галію алюмінієм x в Γ -мінімумі гетероструктури $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$.
3. Побудуйте потенціальну яму і бар'єр, використовуючи подвійний гетероперехід першого типу і напівпровідники $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ і $\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}$, де $x = 0.3 + 0.02N_{\text{var}}$, $y = 0.01N_{\text{var}}$.

Контрольні запитання:

1. Вкажіть основні напрямки розвитку фізики напівпровідників в останні роки. З якою технологією цей розвиток пов'язаний?
2. Які явища характерні для квантоворозмірних структур?
3. Що таке одиночні гетеропереходи першого і другого типу?
4. Що таке подвійні гетеропереходи першого і другого типу?
5. В чому переваги і недоліки квантоворозмірних структур?

6. Як впливає доля заміщення атомів галію алюмінієм x в гетероструктурі $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ на параметри матеріалу?

2 ЛАБОРАТОРНА РОБОТА № 2 “МОДЕЛЮВАННЯ ЕНЕРГЕТИЧНОГО СПЕКТРУ ЕЛЕКТРОНА В ОДНОВИМІРНІЙ ПРЯМОКУТНІЙ КВАНТОВІЙ ЯМІ”

Мета роботи: промоделювати енергетичний спектр електрона в одновимірній квантовій ямі з нескінченно високими стінками.

2.1 Загальні теоретичні відомості

Із загальнотеоретичної точки зору, розрахунок електронних станів в шаруватих структурах повинен проводитися шляхом розв’язку відповідної тримірної задачі про зонну структуру матеріалу. В даний час розроблені витончені методи комп’ютерного розрахунку квантових станів в наноструктурах, засновані на мікроскопічних моделях псевдопотенціалу або сильного зв’язку. Проте ці методи поки не все-сильні і не всемогутні, і 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 гетерограницях вводяться граничні умови для огинаючих хвильовій функції електрона і їх похідних за нормальною координатою.

Розрахунки електронних станів в напівпровідникових наноструктурах, що виконуються за методом ефективної маси, засновані 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:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2 \psi(z, E)}{\partial z^2} + U(z) \psi(z, E) = E \psi(z, E) \quad (2.1)$$

тут 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 $\psi(z, E)$, що характеризує рух електронів в перпендикулярному до площини шарів напрямі і визначає, з точністю до нормування, ймовірність знаходження електрона з енергією E у точці з координатою z .

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

$$\begin{cases} \psi_A = t_{11} \psi_B + t_{12} \tilde{\psi}_B, \\ \tilde{\psi}_A = t_{11} \psi_B + t_{12} \tilde{\psi}_B, \end{cases} \quad (2.2)$$

де $\psi_{A,B}$ – значення огинаючої хвильової функції на інтерфейсі з боку шару A і з боку шару B відповідно,

$$\tilde{\psi}_A = l \left. \frac{\partial \psi}{\partial z} \right|_A, \quad \tilde{\psi}_B = l \left. \frac{m_A}{m_B} \frac{\partial \psi}{\partial z} \right|_B, \quad (2.3)$$

$m_{A,B}$ – ефективні маси електронів в шарах A і B відповідно, l – довільний параметр з розмірністю довжини, введений щоб елементи матриці t_{ij} були безрозмірними. Вибір значень t_{ij} зазвичай здійснюється шляхом порівняння з результатами експерименту або розрахунку в рамках якої-небудь мікроскопічної моделі. Частіше за інших використовуються граничні умови, пов'язані з ім'ям Бастарда:

$$\begin{cases} \psi|_A = \psi|_B, \\ \frac{1}{m_A} \left. \frac{\partial \psi}{\partial z} \right|_A = \frac{1}{m_B} \left. \frac{\partial \psi}{\partial z} \right|_B. \end{cases} \quad (2.4)$$

Розв'язуючи рівняння (2.1) з граничними умовами (2.4), можна побудувати огинаючі хвильових функцій електронів з різними значеннями енергії E .

2.1.1 Рух електрона в ямі з нескінченно високими потенціальними стінками

Якщо сформувати тонкий шар вузькозонного матеріалу між двома достатньо товстими шарами широкозонного матеріалу, то для електрона, що рухається в поперечному до площин шарів напрямі, може бути сформований потенціальний рельєф, зображений на рис. 2.1 (енергія відлічується від дна зони провідності матеріалу ями). Такого роду рельєф носить назву прямокутної потенціальної ями. У цій роботі ми розглядатимемо симетричну потенціальну яму (рис. 2.1, б) з нескінченно високими стінками. В цьому випадку поза ямою функція $\psi(z, E)$ тотожно рівна нулю, а усередині ями задовольняє рівнянню Шредінгера вигляду

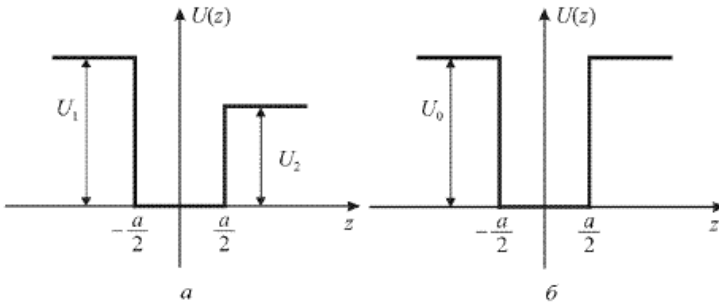


Рисунок 2.1 – Енергетична діаграма прямокутної потенціальної ями: *a* – несиметричної, *б* – симетричної

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2 \psi(z, E)}{\partial z^2} = E(z) \psi(z, E) \quad (2.5)$$

з граничними умовами

$$\psi\left(\pm \frac{a}{2}, E\right) = 0, \quad (2.6)$$

де a – ширина потенціальної ями (товщина середнього шару даної тришарової структури). Тоді $\pm a/2$ – координати інтерфейсів між шарами

З математичної фізики відомо, що рівняння (2.5) має розв'язок лише при дискретних значеннях енергії E_v – власні значення даного рівняння:

$$E(\nu) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\nu\pi}{a} \right)^2. \quad (2.7)$$

де $\nu = 1, 2, 3, \dots$ – квантові числа

Система володіє симетрією за віссю Oz щодо початку координат, тому сукупність власних розв'язків рівняння Шредінгера (2.7) розбивається на підгрупи парних і непарних розв'язків:

$$\psi(z, \nu) = \frac{1}{C(\nu)} \begin{cases} \cos\left(\frac{\pi\nu}{a} z\right) & \text{if } (\nu = 1, 3, 5, \dots) \text{ and } |z| \leq \frac{a}{2}, \\ \sin\left(\frac{\pi\nu}{a} z\right) & \text{if } (\nu = 2, 4, 6, \dots) \text{ and } |z| \leq \frac{a}{2}, \\ 0 & \text{otherwise,} \end{cases} \quad (2.8)$$

де $C(\nu) = \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(z, \nu)|^2 dz}$ – коефіцієнт нормування.

Графіки огинаючих хвильових функцій електрона в квантовій ямі шириною 20 атомних моношарів (11,3 нм) для перших чотирьох дозволених рівнів енергії представлені на рис. 2.2, а, а енергетичний спектр електрона в такій ямі – на рис. 2.2, б. Матеріал ями – GaAs.

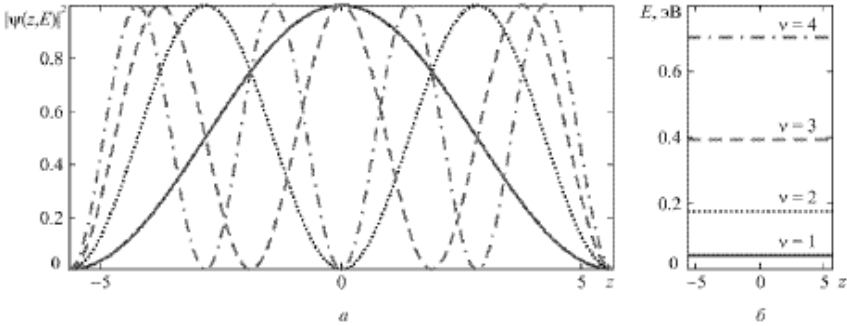


Рисунок 2.2 – Огинаючі хвильових функцій (а) і квантовані рівні енергії (б) електрона в прямокутній квантовій ямі

2.1.2 Рух електрона в потенціальній ямі зі стінками кінцевої висоти

У реальному випадку стінки потенціальної ями мають кінцеву ширину, і для симетричної потенціальної ями потенціал $U(z)$ у рівнянні (2.1) має вигляд:

$$U(z) = \begin{cases} 0, & \text{якщо } |z| \leq \frac{a}{2}, \\ U_0, & \text{якщо } |z| > \frac{a}{2}. \end{cases} \quad (2.9)$$

Розв'язок рівняння Шредінгера (2.5) записуються окремо в кожній з трьох областей, де потенціал $U(z)$ постійний, у вигляді:

$$\psi(z) = \begin{cases} A_1 e^{\beta z} & \text{if } z \leq -\frac{a}{2}, \\ A_2 e^{i\gamma z} + B_2 e^{-i\gamma z} & \text{if } |z| \leq \frac{a}{2}, \\ B_3 e^{-\beta z} & \text{otherwise,} \end{cases} \quad (2.10)$$

де $A_1 = 1/\sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(z, \nu)|^2 dz}$, $\gamma = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_A E}$, $\beta = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_B (U_0 - E)}$, m_A і m_B –

ефективні маси електронів в матеріалі A , що створює яму, і в матеріалі B , що створює бар'єри, відповідно. Розв'язки ψ_1 і ψ_2 записані з урахуванням того, що вони повинні дорівнювати нулю на нескінченності. Значення констант A_2 , B_2 і B_3 знаходяться з граничних умов (2.4), які після підстановки туди розв'язків (2.10) приймають вигляд:

$$\left\{ \begin{array}{l} A_1 e^{-\frac{a}{2}\beta} = A_2 e^{-i\gamma\frac{a}{2}} + B_2 e^{i\gamma\frac{a}{2}}, \\ A_1 \frac{\beta}{m_B} e^{-\frac{a}{2}\beta} = A_2 \frac{i\gamma}{m_A} e^{-i\gamma\frac{a}{2}} - B_2 \frac{i\gamma}{m_A} e^{i\gamma\frac{a}{2}}, \\ A_2 e^{i\gamma\frac{a}{2}} + B_2 e^{-i\gamma\frac{a}{2}} = B_3 e^{-\frac{a}{2}\beta}, \\ A_2 \frac{i\gamma}{m_A} e^{i\gamma\frac{a}{2}} - B_2 \frac{i\gamma}{m_A} e^{-i\gamma\frac{a}{2}} = -B_3 \frac{\beta}{m_B} e^{-\frac{a}{2}\beta}. \end{array} \right. \quad (2.11)$$

Система алгебраїчних рівнянь (2.11) має нетривіальний розв'язок тільки тоді, коли її визначник рівний нулю. Розкриваючи визначника і спрощуючи одержаний вираз, приходимо до рівняння

$$\beta^2 m_A^2 \text{sh}(i\gamma a) + 2i\gamma\beta m_A m_B \text{ch}(i\gamma a) - \gamma^2 m_B^2 \text{sh}(i\gamma a) = 0, \quad (2.12)$$

що визначає дозволені значення енергії електрона у квантовій ямі. Рівняння (2.12) є трансцендентним і вимагає чисельного або графічного розв'язку.

Система (2.11) має нескінченну безліч розв'язків, відмінних один від одного довільним множником. Виражаючи з цієї системи константи A_2 , B_2 і B_3 через A_1 , одержимо частковий розв'язок у вигляді:

$$\begin{aligned} A_2 &= A_1 \frac{1}{2} \left(1 - i \frac{\beta m_A}{\gamma m_B} \right) e^{(i\gamma - \beta)\frac{a}{2}}, \\ B_2 &= A_1 \frac{1}{2} \left(1 + i \frac{\beta m_A}{\gamma m_B} \right) e^{-(i\gamma + \beta)\frac{a}{2}}, \\ B_3 &= A_1 \left[\frac{1}{2} \left(1 - i \frac{\beta m_A}{\gamma m_B} \right) e^{i\gamma a} + \frac{1}{2} \left(1 + i \frac{\beta m_A}{\gamma m_B} \right) e^{-i\gamma a} \right]. \end{aligned} \quad (2.13)$$

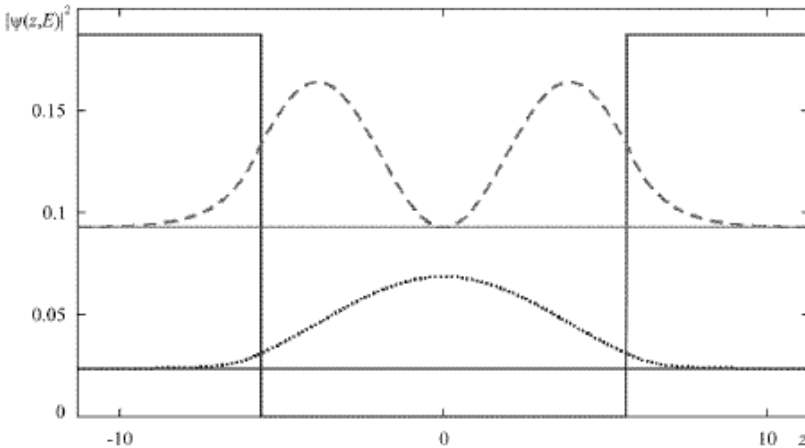


Рисунок 2.3 – Огибаючі хвильових функцій і квантовані рівні енергії електрона в прямокутній квантовій ямі зі стінками кінцевої висоти

Графіки огибаючих хвильових функцій електрона в квантовій ямі шириною 20 атомних моношарів (11,3 нм) для перших трьох дозволених рівнів енергії, розрахованих з рівняння (2.13), представлені на рис. 2.3. Графіки схемно накладені на зонну діаграму гетеропереходів, що створюють квантову яму, при цьому відлік за віссю ординат для графіків огибаючих хвильових функцій суміщений з відповідними значеннями енергії на зонній діаграмі. Матеріал ями — GaAs, матеріал бар'єрів — $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$.

Як видно з рис. 2.3, в областях бар'єрів ймовірність знаходження електрона є визначеною, хоча і вельми малою, тобто електрон, переважно локалізований в квантовій ямі, проникає і в області бар'єрів.

2.2 Завдання до лабораторної роботи

1. Вихідні дані:

– Ширину потенціальної ями проварювати трьома значеннями: $(10 + 0.5N_{\text{var}})a_0$, $(20 + 0.5N_{\text{var}})a_0$ і $(30 + 0.5N_{\text{var}})a_0$, де N_{var} – номер варіанту, a_0 – постійна ґратки напівпровідника GaAs.

– Долю заміщення x атомів Ga атомами Al в напівпровіднику $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ задати як $x = 0.3 + 0.02N_{\text{var}}$.

– Глибину ями визначити як $U_0 = (E_g^{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}} - E_g^{\text{GaAs}})/2$.

2. Побудувати огинаючі хвильових функцій в прямокутній квантовій ямі з нескінченно високими стінками для різних значень ширини ями.
3. Знайти квантовані рівні енергії в ямі з нескінченно високими стінками для різних значень ширини ями.
4. Побудувати огинаючі хвильових функцій в прямокутній квантовій ямі, утвореній шаром GaAs, який обмежений шарами $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, для різних значень ширини ями.
5. Знайти власні значення енергії і порівняти положення енергетичних рівнів у такій квантовій ямі з енергетичними рівнями у нескінченно глибокій квантовій ямі.

Контрольні запитання:

1. Запишіть рівняння Шредінгера в потенціальній ямі з нескінченно високими стінками.
2. Запишіть граничні умови рівняння Шредінгера в потенціальній ямі з нескінченно високими стінками.
3. Чому дорівнюють власні значення енергії в нескінченно глибокій прямокутній ямі?
4. Запишіть рівняння Шредінгера в потенціальній ямі зі стінками кінцевої висоти.
5. Запишіть граничні умови рівняння Шредінгера в потенціальній ямі зі стінками кінцевої висоти.
6. Як знайти власні значення енергії в прямокутній ямі?

3 ЛАБОРАТОРНА РОБОТА № 3 “МОДЕЛЮВАННЯ РУХУ ЕЛЕКТРОНА ЧЕРЕЗ ПОТЕНЦІАЛЬНИЙ БАР’ЄР”

Мета роботи: промоделювати рух електрона через потенціальний бар’єр.

3.1 Загальні теоретичні відомості

3.1.1 Рух електрона поблизу потенціальної сходинки

Розглянемо модель розсіяння електрона на потенціальному рельєфі, що описується наступним виразом:

$$U(z) = \begin{cases} 0, & \text{якщо } z \leq 0, \\ U_0, & \text{якщо } z > 0. \end{cases} \quad (3.1)$$

і зображеному на рис. 3.1. Область 1, зліва від бар'єру, сформована узкозонним матеріалом A , область 2 – широкозонним матеріалом B .

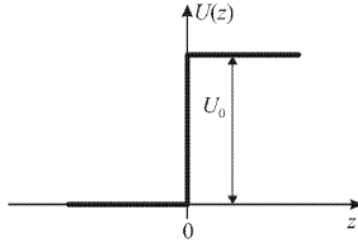


Рисунок 3.1 – Енергетична діаграма потенціальної сходинок

Вважатимемо, що джерело електронів знаходиться у області 1 і нескінченно віддалене від межі розділу (інтерфейсу) між областями 1 і 2. Електрони рухаються від джерела в позитивному напрямі осі Oz , володіючи енергією E .

Розв'язок рівняння Шредінгера (2.1) з потенціалом вигляду (3.1) у області 1 матиме вигляд:

$$\psi_1(z, E) = A_1 e^{i\gamma_1 z} + B_1 e^{-i\gamma_1 z}, \quad (3.2)$$

де $\gamma_1 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_1 E}$, m_1 – ефективна маса електрона в матеріалі A . Тобто ψ_1 є суперпозицією падаючої і відображеної хвилі де Бройля, A_1 – амплітуда хвилі, що розповсюджується від джерела електронів до потенціальної сходинок, B_1 – амплітуда хвилі, відображеної від потенціальної сходинок.

Враховуючи однорідність середовища у області 2 (у області 2 немає джерел електронів і немає неоднорідностей, від яких вони могли б відобразитися) і умова скінченності хвильової функції в усіх точках простору, у тому числі і в точці $z = +\infty$, розв'язок рівняння Шредінгера (2.1) з потенціалом вигляду (3.1) у області 2 можна записати у вигляді:

$$\psi_2(z, E) = A_2 e^{i\gamma_2 z}, \quad (3.3)$$

де $\gamma_2 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_2 (E - U_0)}$, m_2 – ефективна маса електрона в матеріалі B .

Тобто у області 2 має місце тільки хвиля де Бройля, що розповсюджується в позитивному напрямі осі Oz , A_2 – амплітуда цієї хвилі.

Коефіцієнти A_2 і B_1 можуть бути виражені через коефіцієнт A_1 з використанням граничних умов (2.4). Підставляючи вирази (3.2) і (3.3) в (2.4), одержимо:

$$\begin{cases} A_1 + B_1 = A_2, \\ \frac{\gamma_1}{m_1} A_1 - \frac{\gamma_1}{m_1} B_1 = \frac{\gamma_2}{m_2} A_2, \end{cases} \quad (3.4)$$

звідки

$$B_1 = A_1 \frac{\gamma_1 m_2 - \gamma_2 m_1}{\gamma_1 m_2 + \gamma_2 m_1}, \quad A_2 = A_1 \frac{2\gamma_1 m_2}{\gamma_1 m_2 + \gamma_2 m_1}. \quad (3.5)$$

Коефіцієнт A_1 може бути знайдений з умови нормування хвильової функції, яка має сенс ймовірності. При зображенні графіків огинаючих хвильових функцій його можна покласти рівним довільному числу, оскільки фізичний інтерес представляє не амплітуда падаючої електронної хвилі, а відношення амплітуд хвиль, що пройшли і відобразилися, до амплітуди хвилі падаючої.

На рис. 3.2 представлені графіки огинаючих хвильових функцій для різних значень енергії електрона E поблизу інтерфейсу між областями 1 і 2, утвореними матеріалами GaAs і $\text{Al}_{0,4}\text{Ga}_{0,6}\text{As}$ відповідно. Графіки схемно накладені на зонну діаграму гетеропереходу, при цьому відлік по осі ординат для графіків огинаючих хвильових функцій суміщені з відповідними значеннями енергії на зонній діаграмі. Таке представлення результатів розрахунків дозволяє наочно проілюструвати особливості інтерференції електронних хвиль на межі розділу двох матеріалів при різних характерних значеннях енергії електрона.

де $\mathbf{J}_1^+$ – вектор густини потоку ймовірності для електронів, що падають на межу розділу з боку області 1, $\mathbf{J}_1^-$ – вектор густини потоку ймовірності для електронів, що відображаються від межі розділу назад в область 1, $\mathbf{J}_2^+$ – вектор густини потоку ймовірності для електронів, що пройшли через межу розділу в область 2. Слід зазначити, що дана постановка задачі не передбачає рекомбінацію (поглинання) електронів як на межі між областями 1 і 2, так і в самих областях. Підставляючи вирази (3.2) і (3.3) в (3.6), одержимо:

$$\mathbf{J}_1^+ = \hbar \frac{\gamma_1}{m_1} |A_1|^2, \quad \mathbf{J}_1^- = \hbar \frac{\gamma_1}{m_1} |B_1|^2, \quad \mathbf{J}_2^+ = \hbar \frac{\gamma_2}{m_2} |A_2|^2. \quad (3.9)$$

Тоді вирази для коефіцієнтів проходження і віддзеркалення від потенціальної сходинки приймуть вигляд:

$$D = \begin{cases} \frac{|\gamma_2|}{|\gamma_1|} \frac{m_1}{m_2} \frac{|A_2|^2}{|A_1|^2} & \text{if } E > U_0, \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}, \quad (3.10)$$

$$R = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2}. \quad (3.11)$$

Графіки залежності коефіцієнтів віддзеркалення і проходження від енергії електрона представлені на рис. 3.3.

Відзначимо, що у разі, коли енергія електрона $E < U_0$, величина γ_2 стає уявною і функція ψ_2 приймає вид спадаючої експоненти:

$$\psi_2(z, E) = A_2 e^{-\beta z}, \quad (3.12)$$

де $\beta = i\gamma_2 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_2(E - U_0)}$.

В цьому випадку, відповідно до (3.6), потік частинок у області 2 відсутній ($\mathbf{J}_2^+ = 0$), а коефіцієнт віддзеркалення

$$R = \left| \frac{\gamma_1 - i\beta}{\gamma_1 + i\beta} \right|^2 = 1.$$

Не зважаючи на це, у області 2 хвильова функція відмінна від нуля (рис. 3.2), тобто є визначена, хоча і мала, ймовірність того, що електрон проникає під потенціальний бар'єр. Крім того, коли енергія

електрона $E > U_0$, є кінцева ймовірність віддзеркалення частинки від потенціального бар'єру.

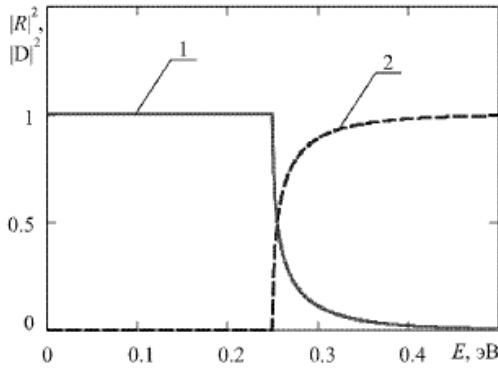


Рисунок 3.3. Залежність коефіцієнтів віддзеркалення (крива 1) і проходження (крива 2) електронів через потенціальну сходинку від енергії

3.1.2 Рух електрона через потенціальний бар'єр кінцевої ширини

Як вже наголошувалося, можливість формування заданого енергетичного спектру електронів з'являється в шаруватих гетероструктурах. Розглянемо структуру, утворену тонким шаром широкозонного матеріалу, розміщеного між двома практично напівнескінченними областями узкозонного матеріалу. Зонна діаграма такої структури зображена на рис. 3.4. Потенціальний рельєф для електрона в такій структурі можна записати у вигляді:

$$U(z) = \begin{cases} E_{c1} & \text{if } z \leq 0, \\ E_{c2} & \text{if } 0 < z \leq a, \\ E_{c3} & \text{otherwise,} \end{cases} \quad (3.13)$$

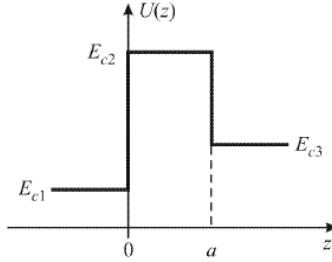


Рисунок 3.4 – Енергетична діаграма прямокутного потенціального бар'єру

де a – товщина шару широкозонного матеріалу.

Як і у попередньому випадку вважатимемо, що джерело електронів знаходиться у області 1 і нескінченно віддалене від межі розділу між областями 1 і 2. Електрони рухаються від джерела в позитивному напрямі осі Oz , володіючи енергією E . Розв'язок рівняння Шредінгера в областях 1, 2 і 3, в кожній з яких потенціал $U(z)$ постійний, можна записати у вигляді:

$$\psi(z, E) = \begin{cases} A_1 e^{i\gamma_1 z} + B_1 e^{-i\gamma_1 z} & \text{if } z \leq 0, \\ A_2 e^{i\gamma_2 z} + B_2 e^{-i\gamma_2 z} & \text{if } 0 < z \leq a, \\ A_3 e^{i\gamma_3 z} & \text{otherwise,} \end{cases} \quad (3.14)$$

де $\gamma_i = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_i(E - E_{ci})}$, $i = 1, 2, 3$, m_i і E_{ci} – ефективна маса і енергія дна зони провідності в i -ій області.

Коефіцієнти B_1 , A_2 , B_2 і A_3 можуть бути виражені через коефіцієнт A_1 з використанням граничних умов (2.4). Підставляючи вираз (3.14) у (2.4), отримаємо:

$$\begin{cases} A_1 + B_1 = A_2 + B_2, \\ \frac{\gamma_1}{m_1} (A_1 - B_1) = \frac{\gamma_2}{m_2} (A_2 - B_2), \\ A_2 e^{i\gamma_2 a} + B_2 e^{-i\gamma_2 a} = A_3 e^{i\gamma_3 a}, \\ \frac{\gamma_2}{m_2} (A_2 e^{i\gamma_2 a} - B_2 e^{-i\gamma_2 a}) = \frac{\gamma_3}{m_3} A_3 e^{i\gamma_3 a}, \end{cases} \quad (3.15)$$

звідки

$$A_3 = 4 \frac{\gamma_1}{m_1} \frac{\gamma_2}{m_2} \frac{1}{\zeta} A_1, \quad (3.16)$$

де

$$\zeta = \left(\frac{\gamma_1}{m_1} + \frac{\gamma_2}{m_2} \right) \left(\frac{\gamma_2}{m_2} + \frac{\gamma_3}{m_3} \right) e^{i(\gamma_3 - \gamma_2)a} + \left(\frac{\gamma_1}{m_1} - \frac{\gamma_2}{m_2} \right) \left(\frac{\gamma_2}{m_2} - \frac{\gamma_3}{m_3} \right) e^{i(\gamma_3 + \gamma_2)a}, \quad (3.17)$$

і

$$A_2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\gamma_3}{\gamma_2} \frac{m_2}{m_3} \right) e^{i(\gamma_3 - \gamma_2)a} A_3, \quad B_2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\gamma_3}{\gamma_2} \frac{m_2}{m_3} \right) e^{i(\gamma_3 + \gamma_2)a} A_3, \quad (3.18)$$

$$B_1 = A_2 + B_2 - A_1. \quad (3.19)$$

Коефіцієнти проходження і віддзеркалення від потенціального бар'єру можуть бути обчислені таким чином з урахуванням виразів (3.16) – (3.19):

$$D = \lim_{|z| \rightarrow \infty} \frac{\mathbf{J}_3^+}{\mathbf{J}_1^+} = \frac{|\gamma_3|}{|\gamma_1|} \frac{m_1}{m_3} \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2}, \quad (3.20)$$

$$R = \lim_{|z| \rightarrow \infty} \frac{\mathbf{J}_1^-}{\mathbf{J}_1^+} = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2}. \quad (3.21)$$

Графіки огинаючих хвильових функцій електрона в структурі GaAs – Al_{0,3}Ga_{0,7}As – GaAs з товщиною середнього шару в 20 атомних моношарів (11,3 нм) для різних значень енергії електрона представлені на рис. 3.5. Графіки схемно накладені на зонну діаграму гетероструктури, при цьому початок відліку по осі ординат для графіків огинаючих хвильових функцій суміщені з відповідними значеннями енергії на зонній діаграмі. Енергія електронів відлічується від середини забороненої зони узкозонного матеріалу (GaAs). Оскільки середина забороненої зони в твердому розчині Al_{0,3}Ga_{0,7}As співпадає з серединою забороненої зони GaAs, потенціальний профіль даної структури (вона є симетричною) можна описати виразом:

$$U(z) = \frac{E_g(z)}{2} = \begin{cases} \frac{E_g^{\text{GaAs}}}{2}, & \text{якщо } |z| > a, \\ \frac{E_g^{\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}}}{2}, & \text{якщо } |z| \leq a. \end{cases} \quad (3.22)$$

Графіки залежності коефіцієнта проходження від енергії електрона для цієї структури представлені на рис. 3.6.

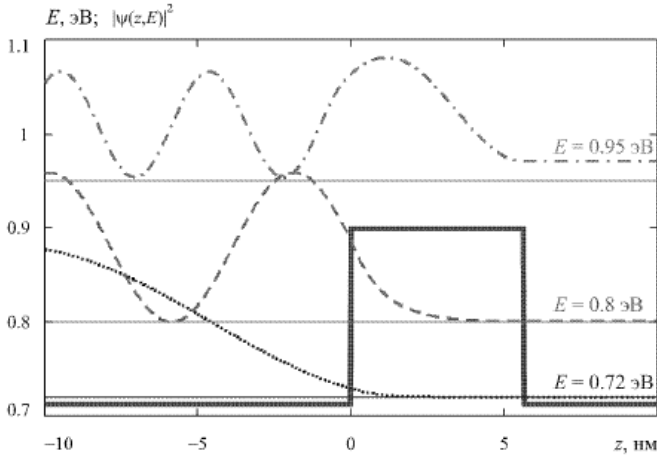


Рисунок 3.5 – Графіки огинаючих хвильових функцій електрона в структурі GaAs – Al_{0,3}Ga_{0,7}As – GaAs

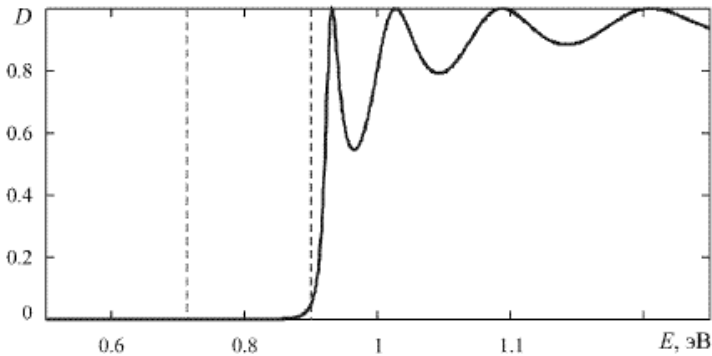


Рисунок 3.6 – Графіки залежності коефіцієнта проходження від енергії електрона для структури GaAs – Al_{0,3}Ga_{0,7}As – GaAs

Розрахунки показують, що при достатньо вузькому потенціальному бар'єрі для значень енергії електрона $E < U_0$ є кінцева ймовірність його проходження через потенціальний бар'єр з області 1 в область 3. Це явище носить назву тунельного ефекту і є чисто квантовомеханічним. Також слід зазначити, що при енергії електрона $E > U_0$

залежність коефіцієнта проходження від енергії має вид квазіперіодичної осцилюючої функції (рис. 3.6). При цьому існують вибрані значення енергії електрона, для яких внаслідок інтерференції електронних хвиль, відображених від меж бар'єру, амплітуда хвильової функції у області бар'єру буде більша, ніж в інших областях (рис. 3.5, штрихпунктирна крива).

3.2 Завдання до лабораторної роботи

1. Вихідні дані:

– Товщину потенціального бар'єру проварювати трьома значеннями: $0.5N_{\text{var}}a_0$, $(5 + 0.5N_{\text{var}})a_0$ і $(10 + 0.5N_{\text{var}})a_0$, де N_{var} – номер варіанту, a_0 – постійна ґратки напівпровідника GaAs.

– Долю заміщення x атомів Ga атомами Al в напівпровіднику $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ задати як $x = 0.3 + 0.02N_{\text{var}}$.

– Глибину ями визначити як $U_0 = (E_{\text{g}}^{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}} - E_{\text{g}}^{\text{GaAs}})/2$.

2. Розглянути структуру, що є інтерфейсом між двома напівнескінченими областями GaAs і $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$:

а) побудувати потенціальний профіль для електронів в даній структурі;

б) побудувати залежності коефіцієнтів віддзеркалення і проходження від енергії електрона в діапазоні від 0 до $3U_0$;

в) побудувати огинаючі хвильових функцій поблизу інтерфейсу між областями 1 і 2 для різних значень енергії електрона і схематично накласти їх на потенціальний профіль структури;

г) проілюструвати наступні факти: 1) при енергії електрона $E > U_0$ є кінцева ймовірність віддзеркалення частинки від потенціального бар'єру, 2) при $E < U_0$ всі частинки відображаються від потенціальної сходинок, тобто у області бар'єру потік частинок відсутній, 3) є певна ймовірність проникнення частинки з енергією $E < U_0$ всередину потенціального бар'єру;

д) оцінити ефективну глибину проникнення електрона під потенціальний бар'єр, тобто глибину, на якій ймовірність виявлення електрона зменшується в e раз.

3. Розглянути гетероструктуру, що складається з трьох шарів: GaAs –

$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As} - \text{GaAs}$. Шари 1-ий і 3-ій – напівнескінченні, шар 2-ий – тунельно-тонкий:

а) побудувати сімейство графіків залежності коефіцієнтів проходження електронів з шару 1 через шар 2 в шар 3 від енергії електрона в діапазоні від 0 до $3U_0$ для різних значень товщини потенціального бар'єру;

б) побудувати огинаючі хвильових функцій в гетероструктурі для різних значень енергії електрона, зокрема, для енергій, що відповідають мінімумам і максимумам коефіцієнта проходження, і схематично накласти ці графіки на потенціальний профіль структури;

в) проілюструвати наступні факти: 1) у разі достатньо вузького потенціального бар'єру для частинок з енергією, меншої його висоти, існує кінцева ймовірність проходження електрона з області 1 в область 3, 2) при проходженні електрона над потенціальним бар'єром існує кінцева ймовірність того, що електрон відобразиться від шару 2, 3) існують вибрані значення енергії електрона, при яких амплітуда хвильової функції у області бар'єру буде більша, ніж в інших областях.

Контрольні запитання:

1. Запишіть рівняння Шредінгера руху електрона поблизу потенціальної сходинки.
2. Запишіть граничні умови рівняння Шредінгера при русі електрона поблизу потенціальної сходинки.
3. Що таке коефіцієнт проходження D ? Чому він рівний при падінні електрона на потенціальну сходинку?
4. Що таке коефіцієнт віддзеркалення R ? Чому він рівний при падінні електрона на потенціальну сходинку?
5. Запишіть рівняння Шредінгера руху електрона через потенціальний бар'єр кінцевої ширини.
6. Запишіть граничні умови рівняння Шредінгера руху електрона через потенціальний бар'єр кінцевої ширини.
7. Чому дорівнюють коефіцієнт проходження і віддзеркалення при русі електрона через потенціальний бар'єр кінцевої ширини?
8. Що таке тунельний ефект?

4 ЛАБОРАТОРНА РОБОТА № 4 “МЕТОД МАТРИЦЬ ПЕРЕНЕСЕННЯ ТА ЙОГО ЗАСТОСУВАННЯ ДЛЯ МОДЕЛЮВАННЯ РУХУ ЕЛЕКТРОНА В СКЛАДНОМУ ПОТЕНЦІАЛЬНОМУ РЕЛЬЄФІ”

Мета роботи: вивчити метод матриць перенесення і застосувати його для моделювання руху електрона в складному потенціальному рельєфі.

4.1 Загальні теоретичні відомості

4.1.1 Формування матриці перенесення

Як можна помітити з вже розглянутих прикладів, при розв’язанні задач про рух електронів в шарувато-неоднорідних середовищах розв’язок рівняння Шредінгера записуються окремо в кожній з областей, де потенціал $U(z)$ постійний, у вигляді суперпозиції падаючої і відображеної хвиль де Бройля, а для знаходження амплітуд цих хвиль використовуються граничні умови на інтерфейсах між шарами. Такий підхід дозволяє легко формалізувати розрахунок амплітуд хвиль де Бройля і коефіцієнтів віддзеркалення і проходження в багатошарових середовищах з використанням методу матриць перенесення.

Розглянемо структуру, що складається з N шарів, розташованих між напівнескінченними областями, причому в кожному шарі і в крайніх областях потенціал $U(z)$ постійний (рис. 4.1):

$$U(z) = \begin{cases} U_0 & \text{if } z \leq z_0, \\ U_i & \text{if } z_{i-1} < z \leq z_i, \quad i = 1, \dots, N, \\ U_{N+1} & \text{if } z \geq z_N, \end{cases} \quad (4.1)$$

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

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

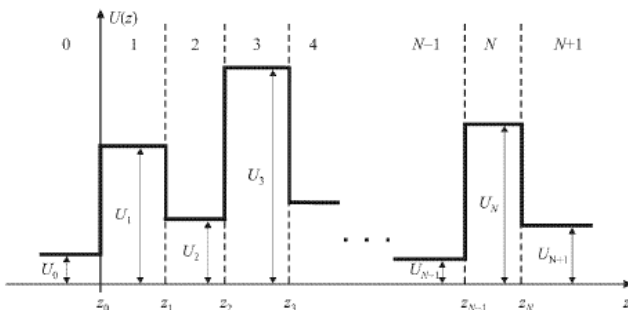


Рисунок 4.1 – Енергетична діаграма багатобар'явної гетероструктури

Розв'язок рівняння Шредінгера (2.1) для i -ої області ($i = 0, \dots, N+1$) записується у вигляді:

$$\psi_i(z, E) = A_i e^{i\gamma_i z} + B_i e^{-i\gamma_i z}, \quad (4.2)$$

де A_i і B_i – амплітуди падаючої і відображеної хвиль де Бройля, від-

повідно, $\gamma_i = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_i(E - U_i)}$, m_i – ефективна маса. Граничні умови (2.2) приймають вигляд:

$$\begin{cases} \psi_k(z_k) = \psi_{k+1}(z_k), \\ \frac{1}{m_k} \frac{\partial \psi_k}{\partial z}(z_k) = \frac{1}{m_{k+1}} \frac{\partial \psi_{k+1}}{\partial z}(z_k). \end{cases} \quad (4.3)$$

Підставляючи загальний розв'язок (4.2) в граничні умови (4.3), одержимо систему лінійних алгебраїчних рівнянь щодо коефіцієнтів A_i , B_i :

$$\begin{cases} A_k e^{i\gamma_k z_k} + B_k e^{-i\gamma_k z_k} = A_{k+1} e^{i\gamma_{k+1} z_k} + B_{k+1} e^{-i\gamma_{k+1} z_k}, \\ i \frac{\gamma_k}{m_k} (A_k e^{i\gamma_k z_k} - B_k e^{-i\gamma_k z_k}) = i \frac{\gamma_{k+1}}{m_{k+1}} (A_{k+1} e^{i\gamma_{k+1} z_k} - B_{k+1} e^{-i\gamma_{k+1} z_k}), \end{cases} \quad (4.4)$$

яка шляхом перетворень алгебри може бути приведена до вигляду:

$$\begin{cases} A_{k+1} = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\gamma_k}{\gamma_{k+1}} \frac{m_{k+1}}{m_k} \right) e^{-i(\gamma_{k+1} - \gamma_k) z_k} A_k + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\gamma_k}{\gamma_{k+1}} \frac{m_{k+1}}{m_k} \right) e^{-i(\gamma_{k+1} + \gamma_k) z_k} B_k, \\ B_{k+1} = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\gamma_k}{\gamma_{k+1}} \frac{m_{k+1}}{m_k} \right) e^{i(\gamma_{k+1} + \gamma_k) z_k} A_k + \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\gamma_k}{\gamma_{k+1}} \frac{m_{k+1}}{m_k} \right) e^{i(\gamma_{k+1} - \gamma_k) z_k} B_k, \end{cases} \quad (4.5)$$

або в матричній формі:

$$\begin{pmatrix} A_{k+1} \\ B_{k+1} \end{pmatrix} = \mathbf{T}_{k,k+1} \begin{pmatrix} A_k \\ B_k \end{pmatrix}, \quad (4.6)$$

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

$$\mathbf{T}_{k,k+1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\gamma_k}{\gamma_{k+1}} \frac{m_{k+1}}{m_k} \right) e^{-i(\gamma_{k+1} - \gamma_k)z_k} & \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\gamma_k}{\gamma_{k+1}} \frac{m_{k+1}}{m_k} \right) e^{-i(\gamma_{k+1} + \gamma_k)z_k} \\ \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\gamma_k}{\gamma_{k+1}} \frac{m_{k+1}}{m_k} \right) e^{i(\gamma_{k+1} + \gamma_k)z_k} & \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\gamma_k}{\gamma_{k+1}} \frac{m_{k+1}}{m_k} \right) e^{i(\gamma_{k+1} - \gamma_k)z_k} \end{pmatrix}. \quad (4.7)$$

З рекуррентного співвідношення (4.5), 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:

$$\begin{pmatrix} A_{N+1} \\ 0 \end{pmatrix} = \mathbf{T} \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix}, \quad (4.8)$$

де

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} \mathbf{T}_{00} & \mathbf{T}_{01} \\ \mathbf{T}_{10} & \mathbf{T}_{11} \end{pmatrix} = \prod_{k=N}^0 \mathbf{T}_{k,k+1} \quad (4.9)$$

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

Коефіцієнти віддзеркалення і проходження електронної хвилі через структуру можуть бути виражені через елементи $\mathbf{T}$ -матриці передачі з системи рівнянь (4.8):

$$D = \frac{|\gamma_{N+1}|}{|\gamma_0|} \frac{m_0}{m_{N+1}} \frac{|A_{N+1}|^2}{|A_0|^2} = \frac{|\gamma_{N+1}|}{|\gamma_0|} \frac{m_0}{m_{N+1}} \left| \frac{\mathbf{T}_{11} \mathbf{T}_{00} - \mathbf{T}_{01} \mathbf{T}_{10}}{\mathbf{T}_{11}} \right|^2, \quad (4.10)$$

$$R = \frac{|B_0|^2}{|A_0|^2} = \left| \frac{\mathbf{T}_{10}}{\mathbf{T}_{11}} \right|^2. \quad (4.11)$$

Таким чином, з використанням матричного методу можуть бути розраховані коефіцієнти віддзеркалення і проходження електронних

хвиль через шарувату структуру, а також амплітуди хвиль де Бройля в кожній точці структури, віднесені до амплітуди падаючої на структуру електронної хвилі.

4.1.2 Моделювання руху електрона через двобар'єрну квантову структуру (ДБКС)

Ми вже розглянули задачі, що стосуються поведінки частинок в системах з ізольованими квантовими ямами і потенціальними бар'єрами. Як вже наголошувалося, сучасні технології вирощування епітаксціальних структур дозволяють формувати багат шарові системи зі складним потенціальним рельєфом, зокрема систем із зв'язаними квантовими ямами. Останні цікаві тим, що в них можливе формування заданого енергетичного спектру і швидкостей розсіяння електронів не тільки шляхом завдання форми потенціальної ями, але і шляхом зміни зв'язку між сусідніми квантовими ямами. Крім того, у ряді випадків коефіцієнт проходження через двохбар'єрні структури виявляється більшим за коефіцієнти проходження через кожен бар'єр окремо. Даний ефект виникає унаслідок інтерференції хвиль де Бройля і носить назву резонансного тунелювання через багатобар'єрну структуру.

Розглянемо проходження частинки через систему з двох потенціальних бар'єрів, розділених квантовою ямою, розташованою між двома напівнескінченими областями (рис. 4.2). Вважатимемо, що джерело електронів знаходиться у області 0 і нескінченно віддалене від структури. Електрон рухається від джерела в позитивному напрямі осі Oz , володіючи енергією E . Для розрахунку коефіцієнта проходження електрона і амплітуд хвиль де Бройля скористаємося матричним методом:

- число шарів в структурі $N = 3$;
- число меж в даній системі $N + 1 = 4$;
- число областей, в яких потенціал $U(z)$ постійний $N + 2 = 5$.

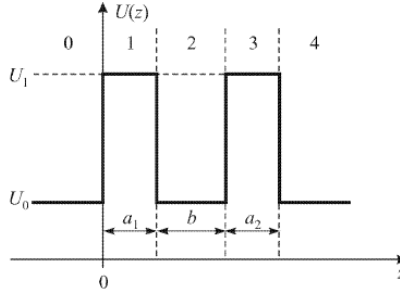


Рисунок 4.2 – Енергетична діаграма двохбар’єрної квантоворозмірної гетероструктури

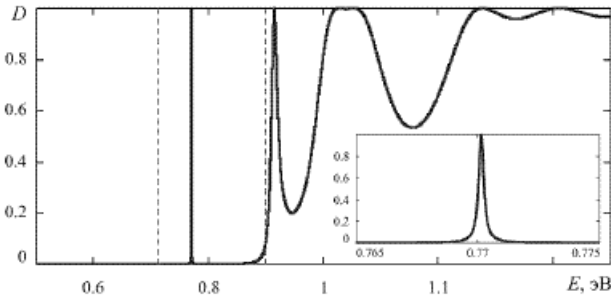


Рисунок 4.3 – Графіки залежності коефіцієнта проходження від енергії електрона для структури $\text{GaAs} - \text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As} - \text{GaAs} - \text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As} - \text{GaAs}$

Для опису системи необхідно задати параметри матеріалу в 5-ти областях, а також координати меж між областями. Ці початкові дані дозволяють розрахувати 4 матриці передачі хвилі де Бройля для кожної з меж з використанням виразу (4.7) і загальну матрицю передачі структури (4.9), з якої обчислюється коефіцієнт проходження (4.10). А з використанням виразів (4.6) і (4.8) розраховуються амплітуди хвиль де Бройля в кожній з областей.

Результати розрахунку залежності коефіцієнта проходження від енергії електронів представлені на рис. 4.3. Як випливає з результатів розрахунків, існує деяке значення енергії електрона, менше висоти потенціальних бар’єрів, при якому коефіцієнт проходження рівний одиниці. Стани в квантовій ямі, відповідні значенням енергії, для яких $D = 1$, називають резонансними, а спостережуване явище – резонансним тунелюванням через структуру. Графіки огинаючих хвильових функцій електрона в даній структурі для різних значень енергії елект-

рона, суміщені з потенціальним рельєфом гетероструктури, представлені на рис. 4.4.

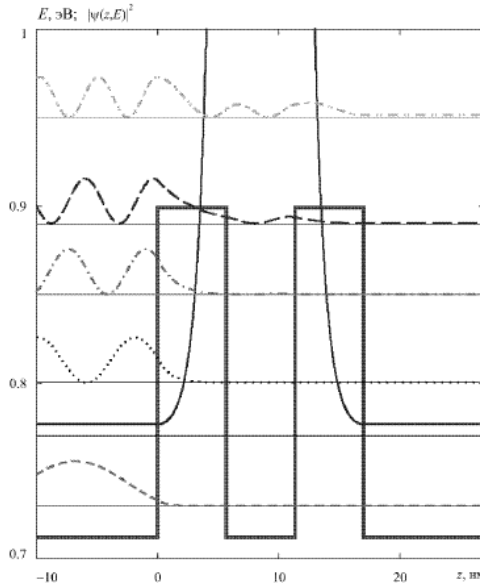


Рисунок 4.4 – Графіки огинаючих хвильових функцій електрона в структурі GaAs – Al_{0,3}Ga_{0,7}As – GaAs – Al_{0,3}Ga_{0,7}As – GaAs

4.1.3 Моделювання руху електрона при прикладеному постійному електричному полі у напрямку перпендикулярному до площини шарів

Очевидно, що при створенні різних електронних приладів необхідно реалізувати управління енергетичним спектром електронів за допомогою різного роду зовнішніх дій. Найчастіше для такого управління використовують електричне поле.

При прикладенні електричного поля до багатошарової гетероструктури енергетичні зони скривлюються і залежність $U(z)$ відрізнятиметься від ступінчастої форми, зображеної, наприклад, на рис. 4.5,а. У простому випадку однорідного електричного поля, потенціал $U(z)$ в структурі з потенціальним бар'єром може бути представлений у вигляді (рис. 4.5, б):

$$U(z) = \begin{cases} E_{c1} & \text{if } z \leq 0, \\ E_{c2} - \frac{V}{a}z & \text{if } 0 < z \leq a, \\ E_{c3} & \text{otherwise,} \end{cases} \quad (4.12)$$

де a – ширина потенціального бар'єру, V – прикладена до бар'єру різниця потенціалів. У даній моделі передбачається, що падіння напруги повністю відбувається у області бар'єру.

Рівняння Шредінгера (2.1) з потенціалом вигляду (4.12) є неоднорідним. Проте, розбиваючи дану просторову область на N таких малих відрізків, що в кожному з них потенціал $U(z)$ можна вважати незмінним, можна вирішувати рівняння матричним методом, замінюючи безперервну функцію $U(z)$ (рис. 4.5, а) ступінчастою (рис. 4.5, в):

$$U(z) = \begin{cases} E_{c1}, & \text{якщо } z \leq 0, \\ E_{c2} - \frac{V}{a} \frac{i}{N}, & \text{якщо } i \frac{a}{N} < z \leq (i+1) \frac{a}{N}, i = 0, 1, \dots, N-1, \\ E_{c3}, & \text{якщо } z > a, \end{cases} \quad (4.13)$$

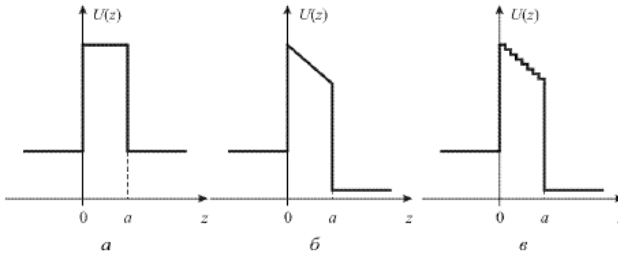


Рисунок 4.5 – Енергетична діаграма прямокутного потенціального бар'єру (a), при прикладені до нього електричного поля (δ) і представлення потенціалу у вигляді ступінчастої функції (ϵ)

Даний підхід дозволяє вирішувати задачі про рух електрона через потенціальний рельєф довільної форми, з одного боку, не вдаючись до числового розв'язання крайової задачі (що є обчислювально ємким процесом), а з другого боку, одержуючи достатньо точний розв'язок.

На рис. 4.6 представлений коефіцієнт проходження електронів через потенціальний бар'єр за наявності (пунктирна лінія) і відсутнос-

ті зовнішнього електричного поля. Як видно з рисунка, ймовірність тунелювання електрона при прикладенні електричного поля збільшується, що обумовлене зменшенням площини потенціального бар'єру.

На рис. 4.7 представлений коефіцієнт проходження електронів через ДБКС за наявності (пунктирна лінія) і відсутності зовнішнього електричного поля. Як видно з рисунка енергія резонансного тунелювання електрона при прикладенні електричного поля зменшується.

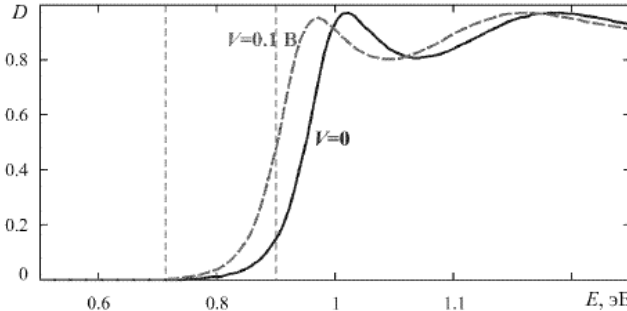


Рисунок 4.6 – Коефіцієнт проходження електронів через потенціальний бар'єр за наявності (пунктирна лінія) і відсутності зовнішнього електричного поля

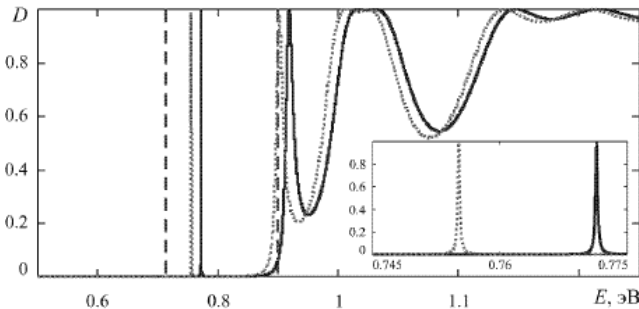


Рисунок 4.7 – Коефіцієнт проходження електронів через ДБКС за наявності (пунктирна лінія) і відсутності зовнішнього електричного поля

4.2 Завдання до лабораторної роботи

1. Вихідні дані:

– Товщина потенціального бар'єру $b = 0.5 N_{\text{var}} a_0$, де N_{var} – номер варіанту, a_0 – постійна ґратки напівпровідника GaAs.

– Долю заміщення x атомів Ga атомами Al в напівпровідни-

ку $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ задати як $x = 0.3 + 0.02N_{\text{var}}$.

– Глибину ями визначити як $U_0 = (E_g^{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}} - E_g^{\text{GaAs}}) / 2$.

2. Розглянути двошарову гетероструктуру $\text{Al}_{x-0.15}\text{Ga}_{1.15-x}\text{As} - \text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, товщина кожного шару якої b , розташовану між напівнескінченними областями GaAs :

а) побудувати її потенціальний профіль для електронів;

б) побудувати залежності коефіцієнтів віддзеркалення і проходження від енергії електрона в діапазоні від 0 до $3U_0$;

в) побудувати огинаючі хвильових функцій в гетероструктурі для різних значень енергії електрона, зокрема, для енергій, що відповідають мінімумам і максимумам коефіцієнта проходження, і схематично накласти ці графіки на потенціальний профіль структури.

3. Розглянути гетероструктуру, що складається з трьох однакової товщини b наночарів $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As} / \text{GaAs} / \text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, розташовану між напівнескінченними областями GaAs :

а) побудувати графік залежності коефіцієнта проходження електронів через таку структуру від енергії електрона в діапазоні від 0 до $3U_0$;

б) визначити значення енергії резонансного тунелювання через структуру;

в) побудувати огинаючі хвильових функцій в гетероструктурі для різних значень енергії електрона, зокрема, для енергії резонансного тунелювання, і схематично накласти ці графіки на потенціальний профіль структури.

4*. Дослідити рух електрона в шаруватих гетероструктурах при прикладенні постійного електричного поля в напрямі, перпендикулярному площинам шарів:

а) дослідити зміну графіків огинаючих хвильових функцій і коефіцієнта проходження електронів в одно- і двохбар'єрній структурах при збільшенні прикладеного до структури постійного електричного поля;

б) провести порівняння результатів розрахунків, проведених з використанням запропонованого методу за відсутності зовнішнього електричного поля, з раніше одержаними результатами.

В). зробити висновок про максимально допустимий крок роз-

биття уздовж осі абсцис, перпендикулярної площинам шарів.

Контрольні запитання:

1. Як скласти матрицю перенесення через складну структуру?
2. Яким чином виражається коефіцієнт проходження D і коефіцієнт відбивання R через матрицю перенесення T ?
3. Як застосувати матрицю перенесення для розрахунку руху електрона через ДБКС?
4. Як за допомогою матриці перенесення розрахувати рух електрона при прикладеному постійному електричному полі?

5 ЛАБОРАТОРНА РОБОТА Ї 5 “РОЗРАЖУНОК ГУСТИНИ СТАНІВ 2D-ЕЛЕКТРОННОГО ГАЗУ ТА ЕНЕРГІЇ ФЕРМІ МЕТАЛЕВОЇ НАНОПЛІВКИ”

Мета роботи: вивчити ефект квантування електронного спектру в нанометрових плівках, розрахувати в них розмірну залежність енергії Фермі.

5.1 Загальні теоретичні відомості

5.1.1 Розмірні ефекти в електронних властивостях нанометрових плівок

Назвемо *тонкою такою плівку*, товщина якої L за порядком величини співпадає з фермієвською довжиною хвилі електрона в нескінченному металі ($\lambda_F^0 \approx 0.5$ нм). Поздовжні розміри плівки передбачаються набагато більшими її товщини: $a, b \gg L$. У цьому випадку квантування поперечної (стосовно плівки) компоненти імпульсу електронів є суттєвим, що призводить до формування *підзон* – груп енергетичних рівнів, які відповідають тому самому значенню поперечної компоненти імпульсу.

На прикладі тонкої металевої плівки товщиною L (рис. 5.1) розглянемо, як впливає квантування «нанометрової» компоненти хвильового вектора електронів ультратонких металевих систем на їх електронні характеристики.

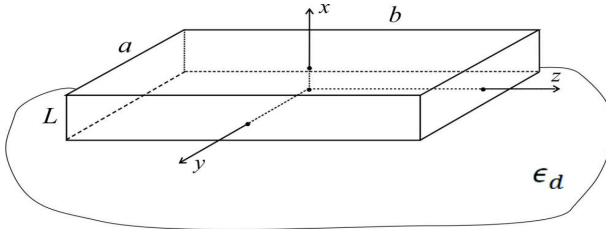


Рисунок 5.1 – Геометрична схема плівки

Нехай квантування компоненти хвильового вектора здійснюється у напрямку x (рис. 5.2). В $\mathbf{k}$ -просторі стан електрона позначається точкою з координатами (k_x, k_y, k_z) . Кожному значенню поперечної компоненти хвильового вектора k_{xm} відповідає площина. Густина станів на всіх площинах однакова, а індекс m нумерує підзони.

Напівсфера Фермі перетинає площини і утворює систему кіл, в межах яких всі стани зайняті (рис. 5.2). Кількість заповнених підзон, тобто таких, в яких є рівні, зайняті електронами, визначається відносною товщиною плівки L . В тонких плівках кількість заповнених підзон невелика. Нехай товщина плівки збільшується. Тоді всі площини, що відповідають різним значенням k_{xm} , знижуються, причому нижчі знижуються повільніше за верхні, так що відстань між площинами зменшується. В межах напівсфери Фермі утворюються все нові й нові кола. При цьому сама напівсфера пульсує, почергово то розширюючись, то стискаючись. Перехід від розширення до стискання відбувається стрибком у той момент, коли в напівсфері виникає чергове коло, а на графіках залежностей з'являється „зубець“.

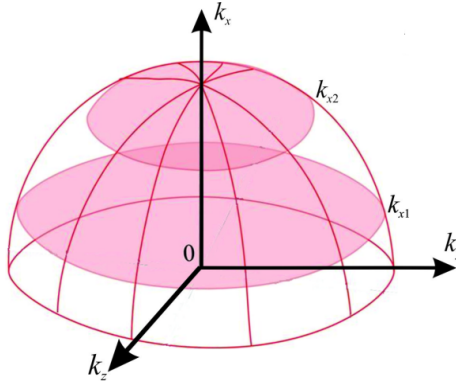


Рисунок 5.2 – Схема заповнення електронних станів в k -просторі

Таким чином, у розмірній залежності електронних характеристик тонких плівок є дві складові: неперервна, яка визначається зміною енергетичних рівнів підзон, і стрибкоподібна, пов'язана зі зміною кількості заповнених підзон, або іншими словами, зі стрибкоподібною зміною рівня Фермі.

5.1.2 Розрахунок енергетичного спектра електронів у наноплівці

Профіль потенціальної енергії електронів плівки спрощено можна представити у вигляді асиметричного потенціального ящика глибиною $-U_0$ – відносно вакуумного рівня, $-U_d$ – з боку діелектрика та шириною L (рис. 5.3). В подальшому скористаємось позначеннями: $\hbar^2 k_{01}^2 = 2m_e U_0$; $\hbar^2 k_{02}^2 = 2m_e U_d$, де m_e – маса електрона; $-\chi$ – глибина залягання дна зони провідності діелектрика відносно вакуумного рівня (χ – електронна спорідненість), що враховує наявність діелектрика з одного боку від плівки.

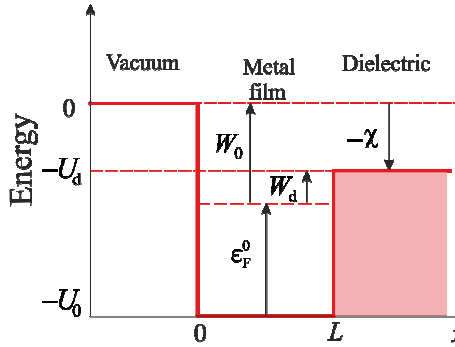


Рисунок 5.3 – Енергетична діаграма металевої плівки в моделі асиметричної потенціальної ями

Внаслідок того, що позовжні розміри плівки $a, b \gg L$ спектр можна записати у вигляді

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2}{2m_e} (k_{\parallel}^2 + k_{xm}^2),$$

де $k_{\parallel}$ – хвильове число електронів у площині плівки. Величина поперечної компоненти імпульсу $\hbar k_{xm}$ ($m = 1, 2, 3, \dots$) визначається граничними умовами для хвильової функції електронів у даній системі та розв'язком рівняння

$$k_{xm}L = \pi m - \arcsin \frac{k_{xm}}{k_{01}} - \arcsin \frac{k_{xm}}{k_{02}}. \quad (5.1)$$

В $\mathbf{k}$ -просторі стан електрона позначається точкою з координатами $\{k_x, k_y, k_z\}$. Заповнення станів електронами починається з точки $\{k_{x1}, 0, 0\}$ і здійснюється в порядку зростання енергії станів. У результаті виявляється, що всі зайняті електронами стани знаходяться в області $\mathbf{k}$ -простору, обмеженій площиною $k_x = k_{xm}$ та напівсферою радіусом $k_F = \sqrt{2m_e \varepsilon_F} / \hbar$. Для знаходження повного числа зайнятих станів потрібно проінтегрувати густину станів двовимірного електронного газу в площині плівки та прирівняти числу електронів провідності. В результаті отримуємо рівняння для визначення розмірно-залежної енергії Фермі ε_F :

$$k_F = \sqrt{\frac{1}{m_F} \left(2\pi \bar{n} L + \sum_{m=1}^{m_F} k_{xm}^2 \right)}, \quad (5.2)$$

де

$$\bar{n} = \left(\frac{4}{3} \pi r_s^3 \right)^{-1}$$

- концентрація електронів провідності у 3D-металі з радіусом комірки Вігнера-Зейтца r_s ; $\hbar^2 k_F^2 = 2m_e \varepsilon_F$; m_F – номер останньої зайнятої або частково зайнятої підзони.

5.2 Завдання до лабораторної роботи

1. Вихідні дані:

– Радіус комірки Вігнера-Зейтца визначити відповідно до номеру варіанта N_{var} як $r_s = 1.8 + 0.2N_{\text{var}}$ бор (1 бор=0.0529 нм).

– Глибину ями відносно вакуумного рівня задати виразом $U_0 = \frac{\hbar^2 \bar{k}_F^2}{2m_e} + W$, де $\bar{k}_F = (3\pi^2 \bar{n})^{1/3}$ – хвильовий вектор фермівських електронів, $W = 5.6 - 0.6r_s$ еВ – робота виходу електронів об'ємного металу.

– Глибину ями з боку діелектрика визначити як $U_d = U_0 - \chi$, де $\chi = 0.05N_{\text{var}}$ еВ.

– Товщину плівки проварювати у межах діапазону $L = (n+1)r_s$, де $n = 1, 2, \dots, 10$.

2. Знайти з виразу (5.1) значення поперечної компоненти імпульсу $\hbar k_{xm}$ металевої плівки для різних значень товщини L .

3. Розрахувати за виразом (5.2) хвильовий вектор k_F металевої плівки для різних значень товщини L .

4. Побудувати приведену розмірну залежність енергії Фермі $\varepsilon_F(L)/\bar{\varepsilon}_F$, де $\bar{\varepsilon}_F = \hbar^2 \bar{k}_F^2 / 2m_e$ – енергія Фермі об'ємного металу.

Контрольні запитання:

1. Що називається тонкою плівкою?
2. Що таке енергетична підзона тонкої плівки?

3. Як заповнюються електронні стани в k -просторі тонкої плівки?
4. Які дві складові характерні для розмірної залежності електронних характеристик тонких плівок?
5. Побудуйте енергетичну діаграму металевої плівки в моделі асиметричної потенціальної ями.
6. З яких умов визначається величина поперечної компоненти імпульсу $\hbar k_{xm}$ тонкої плівки?
7. Наведіть рівняння для розрахунку розмірно-залежної енергії Фермі ε_F тонкої плівки.

6 ЛАБОРАТОРНА РОБОТА № 6 “РОЗРАХУНОК ГУСТИНИ СТАНІВ 1D-ЕЛЕКТРОННОГО ГАЗУ ТА ЕНЕРГІЇ ФЕРМІ МЕТАЛЕВОГО НАНОДРОТУ”

Мета роботи: вивчити ефект квантування електронного спектру в нанодротах з різною формою поперечного перетину, розрахувати в них розмірну залежність енергії Фермі.

6.1 Загальні теоретичні відомості

6.1.1 Розв’язок рівняння Шредінгера в циліндричній системі координат

Розв’яжемо рівняння Шредінгера для прямокутної циліндричної ями (об’ємом Ω , довжиною L і радіусом ρ_0 , $L \gg \rho_0$) нескінченної глибини:

$$U(\rho) = \begin{cases} \infty, & \rho > \rho_0 \\ 0, & \rho < \rho_0, \end{cases}$$

(див. рис. 6.1).

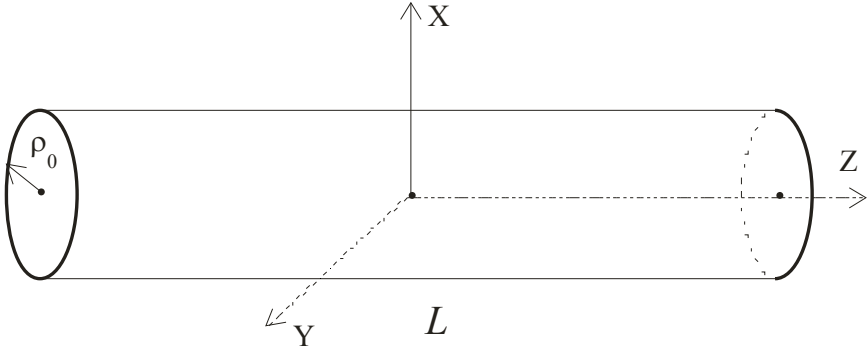


Рисунок 6.1 – Вибір системи координат

В циліндричній системі координат рівняння Шредінгера з гамільтоніаном

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \left\{ \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right\} \quad (6.1)$$

допускає розділення змінних, і хвильову функцію можна представити у вигляді

$$\psi_{mnp}(\rho, \varphi, z) = R_{mn}(\rho) \Phi_m(\varphi) Z_p(z).$$

Повздовжньому руху електрона уздовж осі нитки відповідає функція

$$Z_p(z) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ik_p z}. \quad (6.2)$$

Індекс p нумерує значення z -компоненти хвильового вектора.

Кутова частина хвильової функції

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \quad (6.3)$$

повинна задовольняти умові періодичності

$$\Phi_m(\varphi + 2\pi) = \Phi_m(\varphi), \quad (6.4)$$

з якої випливає спектр власних значень $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

Радіальна залежність хвильової функції описується функціями Бесселя цілого порядку

$$R_{mn}(\rho) = C_{mn} J_m(k_{mn}\rho), \quad (6.5)$$

де

$$C_{mn} = \frac{\sqrt{2}}{\rho_0 |J'_m(k_{mn}\rho_0)|}; \quad (6.6)$$

$k_{mn} = a_{mn}/\rho_0$, a_{mn} – позитивні нулі функції Бесселя m -ого порядку $J_m(\xi)$; $n = 1, 2, \dots$; штрих означає похідну по ξ .

Рівні енергії визначаються формулою

$$\varepsilon_{mnp} = \frac{\hbar^2}{2m_e} (k_{mn}^2 + k_{zp}^2). \quad (6.7)$$

6.1.2 Енергія Фермі нанометрового металевго дроту

Станам електронів можна поставити у відповідність точки (k_{mn}, k_{zp}) на півплощині з осями координат $k_{\perp}$, k_z ($k_{\perp} > 0$). Оскільки спектр значень k_{zp} квазінеперервний, ці точки утворюють систему прямих $k_{\perp} = k_{mn}$. Зайняті стани знаходяться на відрізках, що відтинаються півколом радіуса k_F , як це показано на рис. 6.2 (енергія Фермі електронів у нитці $\varepsilon_F \equiv \hbar^2 k_F^2 / 2m_e$). Густина електронних станів на відрізках дорівнює L/π .

Число заповнених станів, рівне числу електронів провідності,

$$N = 2 \frac{L}{\pi} \sum_{m,n} \sqrt{k_F^2 - k_{mn}^2} = 2 \frac{L}{\pi} \sum_{m,n} \sqrt{k_F^2 - \left(\frac{a_{mn}}{\rho_0} \right)^2}. \quad (6.8)$$

З іншого боку,

$$N = n\pi\rho_0^2 L, \quad (6.9)$$

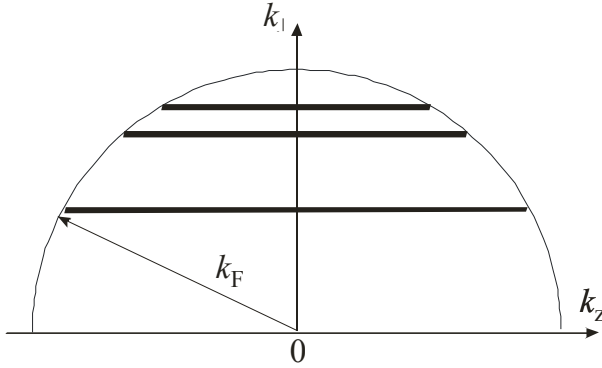


Рисунок 6.2 – Геометрична схема заповнення електронних станів у квантовій нитці

де

$$\bar{n} = \left(\frac{4}{3} \pi r_s^3 \right)^{-1}$$

- концентрація електронів провідності у 3D-металі з радіусом комірки Вігнера-Зейтца r_s ; ($\bar{\epsilon}_F \equiv \hbar^2 \bar{k}_F^2 / 2m_e$ – енергія Фермі електронів у 3D металі, $\bar{k}_F = \sqrt[3]{3\pi^2 \bar{n}}$). Прирівнюючи (6.8) і (6.9), отримуємо рівняння для визначення k_F :

$$\bar{n} = \frac{2}{\pi^2 \rho_0^2} \sum_{m,n}^{high} \sqrt{k_F^2 - k_{mn}^2}. \quad (6.10)$$

Тут значення k_{mn} повинні бути впорядковані у порядку зростання, підсумовування виконується за всіма значеннями m і n до верхньої межі $high$, що є параметром. Тоді додатковою умовою до виразу (6.10) для визначення k_F є нерівність:

$$k_{high} < k_F < k_{high+1} \quad (6.11)$$

Також передбачається, що концентрація електронів у нитці така ж, що і у нескінченному металі.

6.1.3 Енергетичний спектр електронів у еліптичному квантовому дроті з малим ексцентриситетом

Для знаходження спектра електронів у еліптичному квантовому дроті з малим ексцентриситетом ($\varepsilon = \frac{a-b}{a} \ll 1$) скористаємось теорією збурень. За нульове наближення для хвильової функції приймемо радіальну хвильову функцію електрона в циліндричному квантовому дроті (6.5) з нормувальним множником (6.6):

$$R_{mn}(\rho) = \frac{\sqrt{2}}{\rho_0 |J'_m(k_{mn}\rho_0)|} J_m(k_{mn}\rho), \quad (6.12)$$

де

$$\rho_0 = \frac{a+b}{2},$$

a і b – велика та мала напівосі еліпсу, відповідно.

Внаслідок малості ексцентриситету еліптичного перерізу дроту значення хвильової функції на межі можна розкласти в ряд Тейлора за ступенями ексцентриситету. Обмежуючись першими двома членами розкладу, граничну умову можна записати у вигляді:

$$R_{mn}(\rho_0) + \varepsilon \rho_0 \left. \frac{dR_{mn}(\rho)}{d\rho} \right|_{\rho=\rho_0} = 0, \quad (6.13)$$

Підставляючи вираз для хвильової функції в (6.13), отримаємо

$$C_{mn} J_m(k_{mn}\rho_0) + \varepsilon \rho_0 C_{mn} [J_m(k_{mn}\rho)]' \Big|_{\rho=\rho_0} = 0,$$

або

$$J_m(k_{mn}\rho_0) + \varepsilon \rho_0 \left. \frac{dJ_m(k_{mn}\rho)}{d\rho} \right|_{\rho=\rho_0} = 0.$$

Скориставшись рекурентним співвідношенням для похідної від функції Бесселя

$$\frac{dJ_m(\xi)}{d\rho} = J_{m-1}(\xi) - J_{m+1}(\xi),$$

матимемо

$$J_m(k_{mn}\rho_0) + \varepsilon\rho_0 \{J_{m-1}(k_{mn}\rho_0) - J_{m+1}(k_{mn}\rho_0)\} = 0.$$

Замінюючи функцію Бесселя $(m-1)$ -го порядку за допомогою наступного рекурентного співвідношення

$$J_{m-1}(\xi) + J_{m+1}(\xi) = \frac{2m}{\xi} J_m(\xi),$$

звідки

$$J_{m-1}(\xi) = \frac{2m}{\xi} J_m(\xi) - J_{m+1}(\xi).$$

Таким чином,

$$J_m(k_{mn}\rho_0) + \varepsilon\rho_0 \left\{ \frac{2m}{k_{mn}\rho_0} J_m(k_{mn}\rho_0) - 2J_{m+1}(k_{mn}\rho_0) \right\} = 0,$$

або остаточно

$$(1 + \varepsilon m) J_m(k_{mn}\rho_0) - \varepsilon k_{mn}\rho_0 J_{m+1}(k_{mn}\rho_0) = 0. \quad (6.14)$$

Отже, співвідношення (6.14) визначає спектр електронів у еліптичному квантовому дроті з малим ексцентриситетом.

6.2 Завдання до лабораторної роботи

1. Вихідні дані:

– Радіус комірки Вігнера-Зейтца визначити відповідно до номеру варіанта N_{var} як $r_s = 1.8 + 0.2N_{\text{var}}$ бор ($1 \text{ бор} = 0.0529 \text{ нм}$).

– Радіус нанодроту варіювати у межах діапазону $\rho_0 = (n+1)r_s$, де $n = 1, 1.5 \dots 10$.

– Ексцентриситет еліптичного металевго нанодроту задати такими значеннями $\varepsilon = 0.01, 0.05, 0.1$.

2. Знайти значення радіальної компоненти хвильового вектора $k_{mn} = a_{mn} / \rho_0$ для різних значень радіусу нанодроту ρ_0 . Тут a_{mn} – позитивні нулі функції Бесселя m -ого порядку $J_m(\xi)$; $n = 1, 2, \dots$, m задавати в межах від 0 до 5.
3. Розрахувати за виразом (6.10) і умовою (6.11) хвильовий вектор k_F циліндричного металевого нанодроту для різних значень радіусу ρ_0 .
4. Побудувати приведену розмірну залежність енергії Фермі $\varepsilon_F(\rho_0) / \bar{\varepsilon}_F$.
5. Розрахувати за виразом (6.14) величину радіальної компоненти хвильового вектора k_{mn} еліптичного металевого нанодроту з ексцентриситетом ε і $\rho_0 = 10 r_s$. Порівняти результати з розрахунками для циліндричного нанодроту.

Контрольні запитання:

1. Наведіть розв'язок рівняння Шредінгера в циліндричній системі координат.
2. Наведіть схему заповнення електронних станів у металевій квантовій нитці.
3. Як розрахувати енергію Фермі металевий нанодроту?
4. Який вигляд має розмірна залежність енергії Фермі металевий нанодроту?
5. Який енергетичний спектр електронів має еліптичний квантовий дріт з малим ексцентриситетом?

7 ЛАБОРАТОРНА РОБОТА Ж 7 “РОЗРАХУНОК ГУСТИНИ СТАНІВ 0D-ЕЛЕКТРОННОГО ГАЗУ ТА ЕНЕРГІЇ ФЕРМІ МЕТАЛЕВОГО СФЕРИЧНОГО НАНОКЛАСТЕРУ”

Мета роботи: вивчити ефект квантування електронного спектру в сферичних нанокластерах, розрахувати в них розмірну залежність енергії Фермі.

7.1 Загальні теоретичні відомості

7.1.1 Розв'язок рівняння Шредінгера в сферичній системі координат

Задачу про знаходження хвильових функцій та енергетичного спектру електронів у сферичній металевій наночастинці доцільно розв'язувати у сферичній системі координат. У цьому випадку рівняння Шредінгера з гамільтоніаном:

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \left\{ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\} + U(r), \quad (7.1)$$

де m_e – маса вільного електрона; $U(r)$ – потенціальна енергія, яка для випадку сферичної ями (об'ємом Ω і радіусом r_0) нескінченної глибини має вигляд:

$$U(r) = \begin{cases} \infty, & r > r_0; \\ 0, & r < r_0, \end{cases}$$

допускає розділення змінних, і хвильова функція може бути записана як

$$\psi_{mnp}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi), \quad (7.2)$$

$Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ – кутова частина хвильової функції, а радіальна залежність хвильової функції описується функціями Бесселя напівцілого порядку

$$R_{nl}(r) = C_{nl} \frac{j_l(k_{nl}r)}{r}. \quad (7.3)$$

Тут

$$C_{nl} = \left\{ \int_0^{r_0} j_l^2(k_{nl}r) dr \right\}^{-\frac{1}{2}};$$

$k_{nl} = a_{nl}/r_0$, a_{nl} – позитивні нулі сферичної функції Бесселя $j_l(\xi)$,

$n = 1, 2, \dots$

Рівні енергії визначаються формулою

$$\varepsilon_{nl} = \frac{\hbar^2}{2m_e} k_{nl}^2. \quad (7.4)$$

7.1.2 Енергія Фермі нанометрової металевої кульки

Розглянемо тепер питання про знаходження розмірної залежності енергії Фермі металевих $0D$ -систем. Вважатимемо, що, як і у випадку $2D$ -систем та $1D$ -систем, число заповнених станів у сферичній металевій наночастинці дорівнює числу електронів провідності:

$$N = \int_0^{\varepsilon_F} g(\varepsilon) d\varepsilon = 2 \int_0^{\varepsilon_F} \sum_{n,l} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{nl}) d\varepsilon = \bar{n} \Omega, \quad (7.5)$$

де $g(\varepsilon) = 2 \sum_{n,l} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{nl})$ – енергетична густина станів $0D$ -системи; $\bar{n}$ – концентрація електронів провідності в $3D$ -металі; $\Omega = 4\pi r_0^3 / 3$ – об’єм сфери.

Для розрахунку інтеграла в (7.5) скористаємось розкладанням δ -функції в ряд Фур’є за синусами на скінченному інтервалі $\varepsilon \in (0, \varepsilon_F)$:

$$\delta(\varepsilon - \varepsilon_{nl}) = \frac{2}{\varepsilon_F} \sum_{m=1}^{\infty} \sin \frac{\pi m \varepsilon}{\varepsilon_F} \sin \frac{\pi m \varepsilon_{nl}}{\varepsilon_F}. \quad (7.6)$$

Підставляючи (7.6) в (7.5) та розраховуючи отримані інтеграли, матимемо:

$$\bar{n} \Omega = \begin{cases} \frac{8}{\pi} \sum_{\kappa=1}^{\infty} \frac{1}{2\kappa-1} \sum_{n,l}^{high} \sin \frac{\pi(2\kappa-1)\varepsilon_{nl}}{\varepsilon_F}, & m = 2\kappa-1; \\ 0, & m = 2\kappa. \end{cases} \quad (7.7)$$

Тут значення ε_{nl} повинні бути впорядковані у порядку зростання, підсумовування виконується за всіма значеннями n і l до верхньої межі

$high$, що є параметром. Тоді додатковою умовою до виразу (7.7) для визначення ε_F є нерівність:

$$\varepsilon_{high} < \varepsilon_F < \varepsilon_{high+1} \quad (7.8)$$

Підсумовування за k у (7.7) достатньо провести до 100. Також передбачається, що концентрація електронів у нитці така ж, що і у нескінченному металі.

7.2 Завдання до лабораторної роботи

1. Вихідні дані:

- Радіус комірки Вігнера-Зейтца визначити відповідно до номеру варіанта N_{var} як $r_s = 1.8 + 0.2N_{var}$ бор (1 бор=0.0529 нм).
- Радіус сферичного нанокластера варіювати у межах діапазону $r_0 = (n+1)r_s$, де $n = 1, 1.5 \dots 10$.

2. Знайти значення радіальної компоненти хвильового вектора $k_{nl} = a_{nl} / r_0$ для різних значень радіусу сферичного нанокластера r_0 . Тут a_{nl} – позитивні нулі сферичної функції Бесселя $j_l(\xi)$, $n = 1, 2, \dots$, l задавати в межах від 0 до 5.

3. Розрахувати за виразом (7.7) і умовою (7.8) енергію Фермі ε_F нанометрової металевої кульки для різних значень радіусу r_0 .

4. Побудувати приведену розмірну залежність енергії Фермі $\varepsilon_F(r_0) / \bar{\varepsilon}_F$.

Контрольні запитання:

1. Наведіть розв'язок рівняння Шредінгера в сферичній системі координат.
2. Як розрахувати енергію Фермі нанометрової металевої кульки?
3. Який вигляд має розмірна залежність енергії Фермі нанометрової металевої кульки?

8 ЛАБОРАТОРНА РОБОТА Б 8 “РОЗМІРНА ЗАЛЕЖНІСТІ ТЕМПЕРАТУРИ ДЕБАЯ”

Мета роботи: вивчити розмірну залежність температури Дебая.

8.1 Теплові властивості нанокластерів у наближенні Дебая

Нанокластер (або наночастинка) на відміну від макроскопічного кристалу має *обрізаний фононний спектр* не лише з боку великих частот, але і малих в силу обмеженості своїх розмірів. Як відомо, модель Дебая є континуальною, що розглядає тверду фазу як суцільне середовище. Дослідимо модель суцільного середовища у застосуванні до наночастинок.

Нехай в деякому об'ємі V знаходиться N атомів речовини, кристалічна структура якої характеризується простою кубічною ґраткою із середньою міжатомною відстанню a (стала ґратки) і максимальним лінійним розміром L . У кристалі з подібною внутрішньою структурою на одну елементарну комірку припадає один атом, тому для довільного об'єму кінцевих розмірів приймемо $V = Na^3$. Звідси характерний лінійний розмір L кристала дорівнює

$$L = a\sqrt[3]{N}. \quad (8.1)$$

Практично цей вираз для розміру L справедливий і для кристалічних наноматеріалів, внутрішня симетрія яких відрізняється від простої кубічної. Стосовно наночастинок під L розуміють їх характерний геометричний розмір.

За нульових граничних умов (закріплена межа, тобто амплітуда коливань на межі дорівнює нулю) зміщення ξ може бути записане у вигляді

$$\xi = A e^{i\omega_n t} \sin \frac{\pi x}{L} n_x \sin \frac{\pi y}{L} n_y \sin \frac{\pi z}{L} n_z, \quad (8.2)$$

а частота n -го коливання ω_n дорівнює

$$\omega_n = \frac{2\pi s}{L} \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2}, \quad (8.3)$$

де s – швидкість звуку в наночастинці, числа n_x , n_y , n_z приймають усі цілочисельні значення ≥ 1 .

Введемо величину, яку будемо називати *температурою Дебая* – температура, при якій збуджуються всі моди коливань в даному твердому тілі. Подальше збільшення температури не приводить до появи нових мод коливань, а лише веде до збільшення амплітуд вже існуючих, тобто середня енергія коливань із зростанням температури зростає.

$$\Theta_D = \frac{\hbar \omega_{\max}}{k_B} \quad (8.4)$$

Енергія коливань

$$\varepsilon = 3 \sum_{n_x, n_y, n_z} \frac{\hbar \omega_n}{\frac{\hbar \omega_n}{k_B T} - 1}, \quad (8.5)$$

де коефіцієнт «3» – це три незалежних поляризації. За великих L сума може бути замінена інтегралом

$$\varepsilon(T) = \int_{\omega_{\min}}^{\omega_{\max}} \mathcal{D}(\omega) n(\omega, T) \hbar \omega d\omega, \quad (8.6)$$

де $\mathcal{D}(\omega) = \frac{3}{2} \frac{\omega^2 V}{\pi^2 s^3}$, звідки енергія кластера

$$u_{\text{clust}} = \frac{\varepsilon}{V} = \frac{3}{2} \frac{\hbar}{\pi^2 s^3} \int_{\omega_{\min}}^{\omega_{\max}} \frac{\omega^3 d\omega}{e^{\frac{\hbar \omega}{k_B T}} - 1} = \frac{3}{2} \frac{(k_B T)^4}{\pi^2 \hbar^3 s^3} \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} \frac{x^3 dx}{e^x - 1}. \quad (8.7)$$

де $x \equiv \frac{\hbar \omega}{k_B T}$,

$$\omega_{\max} = k_D s, \quad (8.8)$$

$$k_D = \sqrt[3]{6\pi^2 N/V} \quad (8.9)$$

(величина k_D^{-1} – характеризує середню відстань між частинками в кристалі).

Підставимо (8.8) і (8.9) у (8.4)

$$\Theta_D = \frac{\hbar s}{k_B} \sqrt[3]{6\pi^2 N/V} = \sqrt[3]{6\pi^2} \frac{\hbar s}{ak_B}. \quad (8.10)$$

З урахуванням (8.10) із (8.7) отримаємо вираз для внутрішньої енергії N частинок кластера

$$U_N = 9Nk_B T \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3 \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} \quad (8.11)$$

Виходячи з кінцевого розміру наночастинки L та найбільшої довжини хвилі коливань атомів $\lambda_{\max} = 2L$, для найменшої частоти коливань наночастинки отримаємо

$$\omega_{\min} = \frac{2\pi s}{\lambda_{\max}}. \quad (8.12)$$

Цій частоті поставимо у відповідність температуру

$$\Theta_N = \frac{\hbar\omega_{\min}}{k_B} = \frac{2\pi\hbar s}{\lambda_{\max} k_B} = \frac{\pi\hbar s}{a\sqrt[3]{N}k_B}. \quad (8.13)$$

Представляючи температуру Дебая у вигляді (8.10), отримаємо співвідношення

$$\frac{\Theta_N}{\Theta_D} = \sqrt[3]{\frac{\pi}{6N}}. \quad (8.14)$$

Отже, у наночастинок, на відміну від макроскопічного кристалу, є дві характерних температури – *дебайівська* Θ_D і температура Θ_N , **пов'язана з розміром наночастинки**.

Введення нової, характерної для наночастинок температури Θ_N , меншої, ніж температура Θ_D , дозволяє з'ясувати інші якісні результати при дослідженні теплових властивостей наноматеріалів. Обмежуючись температурами $T < \Theta_N$, матимемо значення параметра

$$x = \frac{\hbar\omega_{\min}}{k_B T} = \frac{\Theta_N}{T} > 1. \text{ Використовуючи далі наближення } x \gg 1, \text{ можна}$$

сильно спростити для внутрішньої енергії нанокластера U_N . Фактично таке спрощення можливо вже при $x > 2$, тобто $T < \frac{\Theta_N}{2}$. Тоді внут-

рішня енергія наночастинки у вказаному низькотемпературному інтервалі дорівнює

$$U_N = \frac{9Nk_B T^4}{\Theta_D^3} \int_{\frac{\Theta_N}{T}}^{\infty} x^3 e^{-x} dx =$$

$$= \frac{9Nk_B T^4}{\Theta_D^3} \left[\left(\frac{\Theta_N}{T} \right)^3 + 3 \left(\frac{\Theta_N}{T} \right)^2 + 6 \left(\frac{\Theta_N}{T} \right) + 6 \right] e^{-\frac{\Theta_N}{T}} \quad (8.4)$$

і сильно відрізняється від відповідної енергії для макрокристалу. Випадок для теплоємності нанокластера в умовах, коли $e^{\frac{\hbar\omega_{\min}}{k_B T}} \gg 1$, також змінюється. Так, в області низьких температур ($T \ll \Theta_D$) відома в теорії Дебая формула для теплоємності

$$C = 9Nk_B \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3 \int_0^{\infty} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx \quad (8.5)$$

переходить у формулу для **теплоємності наночастинки**

$$C_N = 9Nk_B \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3 \int_{\frac{\Theta_N}{T}}^{\infty} x^4 e^{-x} dx = 9Nk_B \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3 \times$$

$$\times \left[\left(\frac{\Theta_N}{T} \right)^4 + 4 \left(\frac{\Theta_N}{T} \right)^3 + 12 \left(\frac{\Theta_N}{T} \right)^2 + 24 \left(\frac{\Theta_N}{T} + 1 \right) \right] e^{-\frac{\Theta_N}{T}} \quad (8.6)$$

Отже, в області низьких температур закон Дебая для нескінченного за спектром довжин хвиль кристалу, коли $C_V \sim \alpha T^3$, змінюється досить незначно. Відповідну зміну теплоємності можна трактувати як перехід до нового матеріалу з іншими тепловими властивостями по відношенню до матеріалу того ж хімічного складу, але макроскопічного об'єму.

Коефіцієнт теплопровідності для наночастинок дорівнює

$$\kappa = \frac{1}{3} C_V s \ell. \quad (8.7)$$

Кількість теплоти, необхідна для нагріву одиниці об'єму класте-

ра

$$Q_{\text{clust}} = \Delta u_{\text{clust}}. \quad (8.8)$$

8.2 Завдання до лабораторної роботи

1. Оцініть, наскільки зміниться кількість теплоти, потрібна для нагріву одиниці об'єму кристалічного кластера, що складається з декількох сотень атомів, від $T_1 = 0$ К до $T_2 = (10 + 3N_{\text{var}}) \Theta_D$ К (N_{var} – номер варіанту), по відношенню до кількості теплоти, потрібної для такого ж нагріву речовини нескінченних розмірів, якщо характерний розмір кластера $L = 10a$, де $a = 0.3 + 0.01N_{\text{var}}$ нм - стала ґратки. Підсумувати енергію коливальних, обмежуючись числами (n_x, n_y, n_z) : $(1, 1, 1)$; $(1, 1, 2)$; $(1, 2, 1)$; $(2, 1, 1)$; $(2, 2, 1)$; $(2, 1, 2)$; $(1, 2, 2)$; $(1, 1, 3)$; $(1, 3, 1)$; $(3, 1, 1)$ і $(2, 2, 2)$. Вважайте, що збуджуються лише об'ємні фонони, а внеском поверхневих коливальних можна знехтувати. Крім того, рух кластера як цілого та його обертання не враховувати.

2. Дві наночастинки з характерними розмірами $L_1 = 10a$ і $L_2 = 20a$ з одного матеріалу знаходяться за температури T_2 (значення a і T_2 взяти із завдання 1). Знайдіть відношення коефіцієнтів ґраткової теплопровідності $\frac{\kappa_1}{\kappa_2}$ цих наночастинок. Вважайте, що усереднена швид-

кість звуку в обох наночастинок однакова: $s_1 = s_2 = s$, а середня довжина вільного пробігу фононів ℓ обмежена процесами розсіювання на поверхні частинок.

Контрольні запитання:

1. Яка величина називається температурою Дебая?
2. Яким є фононний спектр нанокластера у порівнянні з макроскопічним кристалом?
3. Чим обмежена нижня межа частоти коливальних фононів у кластері?

9 ЛАБОРАТОРНА РОБОТА № 9 “ПОВЕРХНЕВА ПРОВІДНІСТЬ ВУГЛЕЦЕВОЇ НАНОТРУБКИ”

Мета роботи: дослідити механізмів провідності одностінних вуглецевих нанотрубок.

9.1 Загальні теоретичні відомості

9.1.1 Структура та електронні властивості вуглецевих нанотрубок

Одношарова вуглецева нанотрубка (ВНТ) представляє собою порожнисту вуглецеву макромолекулу (рис. 9.1)

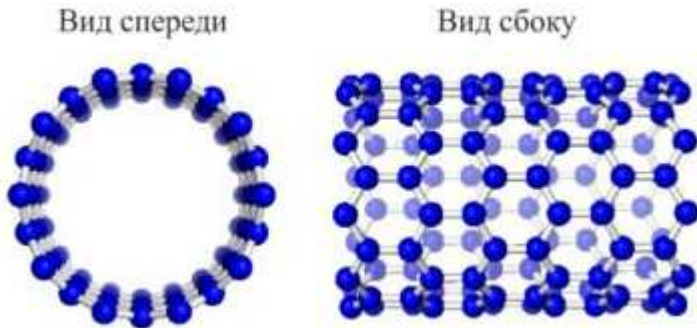


Рисунок 9.1 – Одношарова вуглецева нанотрубка: вид попереду та збоку. Атоми вуглецю позначені синіми сферами

Розташування атомів вуглецю на поверхні вуглецевої нанотрубки можна представити, згорнувши одноатомний шар графіту (графен) у циліндр вздовж вектора C_h , який з’єднує два кристалографічно еквівалентних атоми у ґратці графену (рис. 9.2). даний вектор, який називають також **вектором хіральності** вуглецевої нанотрубки, можна розкласти за базисними векторами кристалічної ґратки графену $a_{1,2}$:

$$C_h = m a_1 + n a_2,$$

де m та n – цілі числа. Залежно від значень індексів хіральності виділяють три різних конфігурації вуглецевих нанотрубок:

- ❖ хіральні нанотрубки ($m \neq n > 0$);
- ❖ нехіральні нанотрубки типу «зигзаг» ($m > 0, n = 0$);

❖ нехіральні нанотрубки типу «крісло» ($m = n > 0$).

Радіус одношарової нанотрубки залежить від індексів її хіральності так:

$$R = \frac{\sqrt{3}b\sqrt{m^2 + mn + n^2}}{2\pi}, \quad (9.1)$$

де $b = 0.142$ нм міжатомна відстань у кристалічній ґратці графена.

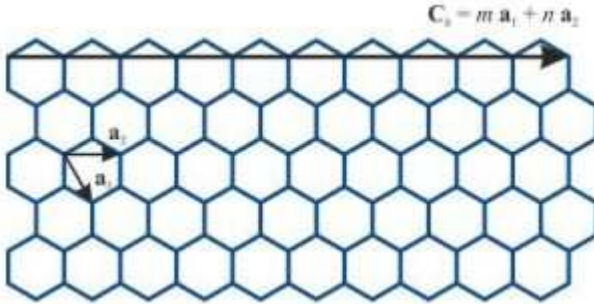


Рисунок 9.2 – Одноатомний шар графіту (графен), при згортанні якого в циліндр вздовж вектора C_h , одержують нанотрубку

Відмітимо, що фізичні властивості вуглецевих нанотрубок істотно залежать від їх індексів хіральності. Існує загальне правило: вуглецеві нанотрубки являються металевими при $m - n = 3q$ і напівпровідниковими при $m - n \neq 3q$, де q – ціле число.

9.1.2 Електрична провідність вуглецевих нанотрубок

Розглянемо одношарову вуглецеву нанотрубку, вісь якої орієнтована вздовж вісі z декартової системи координат (рис. 9.3). Припустимо, що на вуглецеву нанотрубку падає плоска електромагнітна хвиля $\mathcal{E}(t) = \mathbf{e}_z \mathcal{E}_0 e^{-i\omega t}$, поляризована вздовж осі вуглецевої нанотрубки, а хвильовий вектор $\mathbf{k}$ (і, відповідно, напрям поширення хвилі) перпендикулярний вісі вуглецевої нанотрубки. Електромагнітна хвиля збуджує в вуглецевій нанотрубці електричний струм, густина якого має вигляд $\mathbf{j}(t) = \mathbf{e}_z j_0(\omega) e^{-i\omega t}$. Тут і надалі ми припускаємо, що довжина

хвилі $\lambda = \frac{2\pi}{|\mathbf{k}|}$ набагато більше за радіус вуглецевої нанотрубки, але набагато менше за довжину вуглецевої нанотрубки L . В цьому випадку амплітуда густини індукованого в вуглецевій нанотрубці струму $j_0(\omega)$ та амплітуда плоскої хвилі $\mathcal{E}_0$ пов'язані наступним співвідношенням:

$$j_0(\omega) = \sigma(\omega) \mathcal{E}_0, \quad (9.2)$$

де $\sigma(\omega)$ – поверхнева провідність вуглецевої нанотрубки.

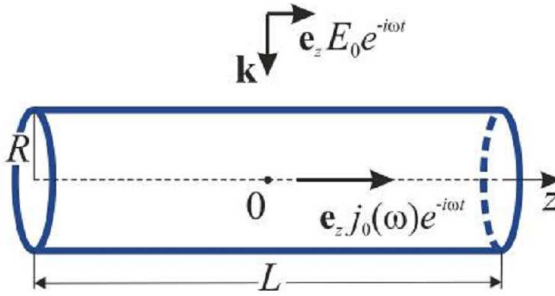


Рисунок 9.3 – Одношарова вуглецева нанотрубка, опромінена плоскою електромагнітною хвилею

В одноелектронному наближенні поверхнева провідність зигзаг $(m, 0)$ вуглецевої нанотрубки має наступний вигляд:

$$\sigma(\omega) = \sigma_1(\omega) + \sigma_2(\omega), \quad (9.3)$$

де

$$\sigma_1 = \frac{e^2}{2\pi^2 \hbar \left(i\omega - \frac{1}{\tau} \right) R} I_1, \quad (9.4)$$

$$I_1 = \sum_{s=1}^m \int_{-a}^a \frac{\partial \varepsilon_c(p, s)}{\partial p} \cdot \frac{\partial}{\partial p} \left[f(\varepsilon_c(p, s)) - f(-\varepsilon_c(p, s)) \right] dp,$$

$$\sigma_2 = \frac{i\omega e^2}{\pi^2 \hbar^2 R} \sum_{s=1}^m \int_{-a}^a \frac{\omega_{cv}(p,s) \mathcal{R}_{cv}^2(p,s) [f(\varepsilon_c(p,s)) - f(-\varepsilon_c(p,s))]}{\omega_{cv}^2(p,s) - \left(\omega + \frac{i}{\tau}\right)^2} dp. \quad (9.5)$$

Матричний елемент оператора дипольного моменту вуглецевої нанотрубки має вигляд:

$$\mathcal{R}_{cv}(p,s) = -\frac{b\gamma_0^2}{2\varepsilon_c^2(p,s)} \left(1 + \cos \frac{3pb}{2\hbar} \cos \frac{\pi s}{m} - 2 \cos^2 \frac{\pi s}{m} \right), \quad (9.6)$$

де енергія ε_c визначається виразом

$$\varepsilon_c(p,s) = \gamma_0 \sqrt{1 + 4 \cos \frac{3pb}{2\hbar} \cos \frac{\pi s}{m} + 4 \cos^2 \frac{\pi s}{m}}. \quad (9.7)$$

Обчислюючи похідну за імпульсом від енергії, матимемо:

$$\frac{\partial \varepsilon_c}{\partial p} = -\frac{3\gamma_0 b \sin \frac{3pb}{2\hbar} \cos \frac{\pi s}{m}}{\hbar \sqrt{1 + 4 \cos \frac{3pb}{2\hbar} \cos \frac{\pi s}{m} + 4 \cos^2 \frac{\pi s}{m}}}. \quad (9.8)$$

Використовуючи вирази для функцій розподілу Фермі – Дірака, обчислимо різницю $f(\varepsilon_c) - f(-\varepsilon_c)$:

$$f(\varepsilon_c) - f(-\varepsilon_c) = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon_c}{k_B T}} + 1} - \frac{1}{e^{-\frac{\varepsilon_c}{k_B T}} + 1} = -\text{th} \frac{\varepsilon_c}{2k_B T}. \quad (9.9)$$

Розраховуючи похідну за імпульсом від різниці функцій розподілу Фермі – Дірака:

$$\frac{\partial}{\partial p} [f(\varepsilon_c) - f(-\varepsilon_c)] = -\frac{1}{2k_B T \text{ch}^2 \frac{\varepsilon_c}{2k_B T}} \cdot \frac{\partial \varepsilon_c}{\partial p} \quad (9.10)$$

та підставляючи отримані результати у формулу для провідності в середині зони ВНТ (9.4), після розділення дійсної та уявної частини, отримаємо вирази для внутризонної провідності

$$\text{Re} \sigma_1 = -\frac{e^2}{2\pi^2 \hbar \tau R \left(\omega^2 + \frac{1}{\tau^2} \right)} I_1; \quad (9.11)$$

$$\operatorname{Im} \sigma_1 = -\frac{e^2 \omega}{2\pi^2 \hbar R \left(\omega^2 + \frac{1}{\tau^2} \right)} I_1. \quad (9.12)$$

Другий доданок у формулі (9.3) описує провідність, зумовлену міжзонними переходами електронів. Частота між зонної переходів

$$\omega_{cv}(p, s) = \frac{2\varepsilon_c(p, s)}{\hbar}. \quad (9.13)$$

Для дійсної та уявної частин міжзонної провідності (9.5) маємо вирази

$$\operatorname{Re} \sigma_2 = -\frac{2\omega^2 e^2}{\pi^2 \hbar^2 \tau R} I_2, \quad (9.14)$$

$$\operatorname{Im} \sigma_2 = \frac{\omega e^2}{\pi^2 \hbar^2 R} \left(\omega_{cv}^2 - \omega^2 + \frac{1}{\tau^2} \right) I_2, \quad (9.15)$$

$$I_2 = \sum_{s=1}^m \int_{-a}^a \frac{\omega_{cv}(p, s) \mathcal{R}_{cv}^2(p, s) \left[f(\varepsilon_c(p, s)) - f(-\varepsilon_c(p, s)) \right]}{\left(\omega_{cv}^2 - \omega^2 + \frac{1}{\tau^2} \right)^2 + \frac{4\omega^2}{\tau^2}} dp.$$

9.2 Завдання до лабораторної роботи

1. Вихідні дані:

– Квазіімпульс електронів p у ВНТ змінюється в межах $-a \leq p \leq a$, де $a = 2\pi\hbar/(3b)$, $b = 0.142$ нм – міжатомна відстань у кристалічній ґратці графена.

– Інтеграл перекриття $\gamma_0 = 2.7$ еВ.

– Час релаксації $\tau = N_{\text{var}} \cdot 10^{-14}$ с, де N_{var} – номер варіанту.

– Частотний діапазон моделювання знаходиться в межах від $\omega_{\min} = 10^{13}$ до $\omega_{\max} = 10^{15}$ рад/с.

– Температура $T = 5N_{\text{var}}$ К.

2. Для нехіральної нанотрубки типу «зигзаг» з $m = 14$ розрахувати спектри дійсної та уявної частин провідності з урахуванням як внутрішньозонних, так і міжзонних переходів. З графіку визначити частоти резонансних піків і занести їх у таблицю. Порівняйте поведінку провідності у низькочастотній та високочастотній областях. Зробіть висновки.

3. Провести аналогічні п.2 розрахунки для $m = 15$. Порівняйте отримані значення резонансних частот з частотами при $m = 14$.
4. Розрахуйте за (9.13) частоту міжзонних переходів $\omega_{cv}(p, s)$ для $p = 0$, підбираючи такі значення номерів підзон s , щоб частота $\omega_{cv}(p, s)$ співпадала із значеннями частоти резонансу в спектрах, розрахованих у п.2 і 3. Зробіть висновки.
5. Змінюючи індекс хіральності ВНТ в межах від 12 до 30 з кроком 1, по спектрах дійсної та уявної частин провідності з урахуванням як внутризонних, так і міжзонних переходів визначити значення частоти першого резонансного піку в спектрі провідності та занести їх у таблицю. Зробіть висновки.
6. Збільшивши температуру на 300 К, розрахуйте спектри дійсної та уявної частин провідності з урахуванням як внутризонних, так і міжзонних переходів для нехіральні нанотрубки типу «зигзаг» з $m = 14$. Зробіть висновок, як впливає температура на провідність ВНТ.

Контрольні запитання:

1. Що являє собою одношарова вуглецева нанотрубка?
2. Що називають вектором хіральності вуглецевої нанотрубки?
3. Які конфігурації вуглецевих нанотрубок виділяють залежно від значень індексів хіральності?
4. Яким вимогам повинні задовольняти індекси хіральності, щоб ВНТ мала напівпровідникові властивості?
5. Чому дорівнює радіус одношарової нанотрубки залежно від значень індексів хіральності?
6. Що таке електрична провідність?
7. Які типи електронних рухів дають внесок у провідність ВНТ? В яких частотних діапазонах внесок кожного з типів є домінуючим?

10 ЛАБОРАТОРНА РОБОТА № 10 “ОПТИЧНА ПРОВІДНІСТЬ ТА КОЕФІЦІЄНТ ПОГЛИНАННЯ ТОНКОЇ МЕТАЛЕВОЇ ПЛІВКИ”

Мета роботи: дослідити оптичну провідність та коефіцієнт поглинання тонкої металевої плівки

10.1 Загальні теоретичні відомості

10.1.1 Тонка металева плівка в полі електромагнітної хвилі

Припустимо, що електрони провідності плівки знаходяться в прямокутному потенційному ящику глибиною $U_0 < 0$, форма якого повторює форму плівки. Тонкою будемо вважати таку плівку, товщина якої L порівняна з фермівською довжиною хвилі електрона в нескінченному металі: $L \cong \lambda_F^0 \approx 0,5$ нм. Поздовжні розміри плівки набагато більше від її товщини $a, b \gg L$. У цьому випадку проявляє себе квантування поперечної компоненти імпульсу, що призводить до формування підзон – груп енергетичних рівнів, які відповідають одному і тому ж значенню поперечної компоненти імпульсу. В тонких плівках кількість підзон, заповнених електронами повністю або частково, невелика і складає

$$m_F \approx \frac{2L}{\lambda_F^0},$$

де m_F – номер підзони, в якій знаходиться рівень Фермі.

Гамільтоніан системи незалежних електронів в електромагнітному полі може бути записаний у вигляді

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2m_e} \left(\hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + U(\mathbf{r}), \quad (10.1)$$

де $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ – векторний потенціал поля, $U(\mathbf{r})$ – одночастинковий потенціал електрона за відсутності зовнішнього поля, $\hat{\mathbf{p}}$ – оператор імпульсу, m_e – ефективна маса електрона. Поле, що діє на електрони, вважається малим і розглядається як збурення. Після ліанеризації га-

мільтоніан набуває вигляду

$$\hat{\mathcal{H}} = \left(\frac{\hat{\mathbf{p}}}{2m_e} + U(\mathbf{r}) \right) + \frac{e}{2m_e c} \left(\hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathcal{A}} + \hat{\mathcal{A}} \cdot \hat{\mathbf{p}} \right) \equiv \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{H}}_1. \quad (10.2)$$

Гамільтоніан $\hat{\mathcal{H}}_1$ розглядатиме як збурення станів $|i\rangle$ гамільтоніана $\hat{\mathcal{H}}_0$ електронів провідності за відсутності поля.

10.1.2 Метод матриці густини

Для обчислення струму, що індукується зовнішнім електромагнітним полем, скористаємося **методом матриці густини**, визначивши її для системи в термодинамічній рівновазі, що описується гамільтоніаном $\hat{\mathcal{H}}$, як

$$\hat{\varrho} \equiv \left\{ \exp \left[\beta \left(\hat{\mathcal{H}} - \mu \right) \right] + 1 \right\}^{-1}, \quad (10.3)$$

отже для кожної власної функції $|i\rangle$ гамільтоніану $\hat{\mathcal{H}}$

$$\hat{\varrho} |i\rangle = f_i |i\rangle \quad (10.4)$$

де $f_i \equiv \left\{ \exp \left[\beta (\varepsilon_i - \mu) \right] + 1 \right\}^{-1}$ – коефіцієнт заповнення стану $|i\rangle$,

$\beta \equiv 1/k_B T$. Середнє значення будь-якої величини $\hat{F}$ знаходиться за звичайним у цьому випадку правилом:

$$\langle \hat{F} \rangle = \text{Sp} \left\{ \hat{\varrho} \hat{F} \right\} = \sum_{ij} \langle i | \hat{\varrho} | j \rangle \langle j | \hat{F} | i \rangle. \quad (10.5)$$

Як відомо, матриця густини задовольняє рівнянню

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\varrho}}{\partial t} = \left[\hat{\mathcal{H}}, \hat{\varrho} \right]. \quad i\hbar \frac{\partial \hat{\varrho}}{\partial t} = \left[\hat{\mathcal{H}}, \hat{\varrho} \right] \quad (10.6)$$

В лінійному наближенні одержуємо

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\varrho}^{(1)}}{\partial t} = \left[\hat{\mathcal{H}}_1, \hat{\varrho}^{(0)} \right] + \left[\hat{\mathcal{H}}_0, \hat{\varrho}^{(1)} \right], \quad (10.7)$$

де $\hat{\varrho}^{(0)}$ – матриця густини системи, що описується гамільтоніаном $\hat{\mathcal{H}}_0$, $\hat{\varrho}^{(1)}$ – малий „відгук“ на збурення $\hat{\mathcal{H}}_1$. Припускаючи, що відгук відбувається на частоті збурення ω , легко знайти його матричний елемент з формули (10.7):

$$\langle i | \hat{\varrho}^{(1)} | j \rangle = \frac{f_i - f_j}{\varepsilon_i - \varepsilon_j - \hbar\omega} \langle i | \hat{\mathcal{H}}_1 | j \rangle, \quad (10.8)$$

де $|i\rangle$ та $|j\rangle$ – власні функції гамільтоніана $\hat{\mathcal{H}}_0$.

$$\langle i | \hat{\varrho}^{(1)} | j \rangle = \frac{e}{mc} \frac{f_i - f_j}{\varepsilon_i - \varepsilon_j - \hbar\omega} \mathcal{A}_0 \left\{ \langle i | e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \hat{\mathbf{p}} | j \rangle + \frac{\hbar\mathbf{q}}{2} \langle i | e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} | j \rangle \right\}. \quad (10.9)$$

Знайдемо індукований струм, використовуючи усереднення за допомогою матриці густини і загальне правило (2.5),

$$\mathbf{j}_{\text{ind}}(\mathbf{r}, t) = \text{Sp} \left\{ \hat{\varrho} \hat{\mathbf{j}} \right\} \cong \text{Sp} \left\{ \hat{\varrho}^{(0)} \hat{\mathbf{j}}^{(1)} + \hat{\varrho}^{(1)} \hat{\mathbf{j}}^{(0)} \right\}, \quad (10.10)$$

де оператор струму

$$\hat{\mathbf{j}} = \hat{\mathbf{j}}^{(0)} + \hat{\mathbf{j}}^{(1)},$$

$$\hat{\mathbf{j}}^{(0)} = -\frac{e}{2m} \left[\hat{\mathbf{p}} \delta(\mathbf{r} - \hat{\mathbf{r}}) + \delta(\mathbf{r} - \hat{\mathbf{r}}) \hat{\mathbf{p}} \right], \quad \hat{\mathbf{j}}^{(1)} = -\frac{e^2}{mc} \mathcal{A} \delta(\mathbf{r} - \hat{\mathbf{r}}).$$

Після фур'є-перетворення виразу (10.10) отримуємо

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_{ind}(\mathbf{k}, \omega) = & -\frac{e^2}{\Omega m c} \mathcal{A}_0 \sum_i f_i \langle i | e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}} | i \rangle - \frac{e^2}{\Omega m^2 c} \times \\ & \times \sum_{ij} \frac{f_i - f_j}{\varepsilon_{ij} - \hbar \omega} \left[\langle i | e^{i \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \mathcal{A}_0 \cdot \hat{\mathbf{p}} | j \rangle + \frac{\hbar}{2} \mathbf{q} \cdot \mathcal{A}_0 \langle i | e^{i \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} | j \rangle \right] \times \\ & \times \left[\langle j | e^{-i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{p}} | i \rangle - \frac{\hbar}{2} \mathbf{k} \langle j | e^{-i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} | i \rangle \right], \end{aligned}$$

де $\varepsilon_{ij} \equiv \varepsilon_i - \varepsilon_j$, $\Omega = abL$ – об'єм плівки.

10.1.3 Наближення „діагонального відгуку“

У наближенні „діагонального відгуку“, в якому припускаємо $\mathbf{k} = \mathbf{q}$, всіма іншими фур'є-компонентами індукційного струму нехтують. Тим самим передбачається, що в тонких плівках розмірне квантування відіграє домінуючу роль порівняно з впливом неоднорідності розподілу заряду. Наступне припущення, $\mathbf{q} \rightarrow 0$, стає прийнятним після додаткового обмеження в постановці задачі. Оскільки в даній роботі акцентується увага на розгляді оптичних переходів між підзонами, що утворилися в результаті розмірного квантування, ми обмежилися випадком, коли поле $\mathbf{E}$ спрямоване перпендикулярно до поверхні плівки (вздовж осі x). Внесок поздовжньої компоненти поля, який описується класичною теорією Друде і певною мірою „змазує“ квантово-механічні розмірні ефекти, не враховувався.

В результаті зроблених припущень вираз для індукованого струму спрощується:

$$\begin{aligned} j_{ind}(\mathbf{q}, \omega) = & \frac{iNe^2}{m_e \omega \Omega} \mathbf{E}(\mathbf{q}, \omega) + \frac{ie^2}{m_e^2 \omega \Omega} \mathbf{E}(\mathbf{q}, \omega) \times \\ & \times \sum_{ij} \frac{f_i - f_j}{\varepsilon_{ij} - \hbar \omega} \left(\langle i | e^{i \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \hat{p}_E | j \rangle + \frac{1}{2} \hbar q_E \langle i | e^{i \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} | j \rangle \right) \\ & \times \left(\langle j | e^{-i \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \hat{p}_E | i \rangle + \frac{1}{2} \hbar q_E \langle j | e^{-i \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} | i \rangle \right), \end{aligned} \quad (10.11)$$

де $\mathbf{\mathcal{E}}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{i\omega}{c} \mathbf{\mathcal{A}}(\mathbf{q}, \omega)$ – напруженість електричного поля, $\hat{p}_E$ і q_E – компоненти імпульсу і хвильового вектору вздовж напрямку електричного поля, $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_i - \varepsilon_j$, N – число електронів провідності в планці, об'єм якої $\Omega = abL$.

Оптична провідність σ_{xx} , що відповідає випадку, коли поле $\mathbf{\mathcal{E}}$ направлене перпендикулярно поверхні плівки (вздовж осі x), визначається співвідношенням

$$j_x = \sigma_{xx} \mathcal{E}_x.$$

Її легко знайти з формули (10.11)

$$\sigma_{xx}(\omega) = \frac{iNe^2}{m_e \omega \Omega} + \frac{ie^2}{m_e^2 \omega \Omega} \sum_{ij} \frac{f_i - f_j}{\varepsilon_{ij} - \hbar \omega} \left| \langle i | \hat{p} | j \rangle \right|^2. \quad (10.12)$$

10.1.4 Квантові стани в плівці

Незбурені стани в плівці описуються хвильовими функціями

$$\Psi_{mp}(x, y, z) = \frac{1}{\sqrt{ab}} \psi_m(x) e^{\frac{2\pi n y i}{a}} e^{\frac{2\pi p z i}{b}}, \quad (10.12)$$

де $n = \pm 1, \pm 2, \dots$; $p = \pm 1, \pm 2, \dots$; $m = \pm 1, \pm 2, \dots$. За парних значень m

$$\psi_m(x) = \begin{cases} C_m \sin k_{xm} x, & -L/2 < x < L/2, \\ (-1)^{\frac{m}{2}+1} C_m \frac{k_{xm}}{k_0} e^{\kappa_m L/2} e^{-\kappa_m x}, & x > L/2, \\ (-1)^{\frac{m}{2}} C_m \frac{k_{xm}}{k_0} e^{\kappa_m L/2} e^{\kappa_m x}, & x < -L/2, \end{cases} \quad (10.13, a)$$

а за непарних m

$$\psi_m(x) = \begin{cases} C_m \cos k_{xm} x, & -L/2 < x < L/2, \\ (-1)^{\frac{m-1}{2}} C_m \frac{k_{xm}}{k_0} e^{\kappa_m L/2} e^{-\kappa_m x}, & x > L/2, \\ (-1)^{\frac{m-1}{2}} C_m \frac{k_{xm}}{k_0} e^{\kappa_m L/2} e^{\kappa_m x}, & x < -L/2, \end{cases} \quad (10.13, б)$$

де $C_m = 1/\sqrt{1/\kappa_m + L/2}$ – коефіцієнт нормування;

$$\kappa_m \equiv \sqrt{k_0^2 - k_{xm}^2}, \quad \hbar k_0 \equiv \sqrt{2m_e |U_0|};$$

числа k_{xm} – корені рівняння

$$k_{xm} L = -2 \arcsin \left(\frac{k_{xm}}{k_0} \right) + \pi m. \quad (10.14)$$

Тут індекс m нумерує підзони.

10.1.5 Оптична провідність та коефіцієнт поглинання тонких металевих плівок

Розрахунок матричних елементів оператора проекції імпульсу $\hat{p}_E = i\hbar \partial / \partial x$ на основі (2.12) і (2.13) приводить до виразу:

$$\left| \langle mnp | \hat{p}_E | m'n'p' \rangle \right|^2 = \frac{\hbar^2}{\left(\frac{1}{\kappa_m} + \frac{L}{2} \right) \left(\frac{1}{\kappa_{m'}} + \frac{L}{2} \right)} \frac{2k_{xm}^2 k_{xm'}^2 \{1 - (-1)^{m+m'}\} \delta_{nn'} \delta_{pp'}}{(k_{xm'}^2 - k_{xm}^2)^2}. \quad (10.15)$$

Як видно з виразу (10.15), всередині однієї підзони переходи взагалі не відбуваються, а перехід між підзонами має місце лише у випадку, коли m і m' – числа різної парності, тобто $m + m'$ – непарне число.

Використовуючи для апроксимації коефіцієнта заповнення східчасту функцію $f_{mnp} = \theta(\varepsilon_F - \varepsilon_{mnp})$, де $\varepsilon_F > 0$ – енергія Фермі та вико-

нуючи заміну підсумовування за n, n', p і p' відповідним інтегруванням

$$\sum_{n, p} \theta\{\varepsilon_F - \varepsilon_i\} \rightarrow \iint \frac{bc}{4\pi^2} dk_y dk_z = \frac{bc}{4\pi^2} \pi \left(\frac{2m_e \varepsilon_F}{\hbar^2} - k_{xm}^2 \right) = \frac{bc}{4\pi} (k_F^2 - k_{xm}^2)$$

та вводячи уширення $\omega \rightarrow \omega + \frac{i}{\tau}$ для дійсної й уявної частин оптичної провідності отримуємо вирази:

$$\operatorname{Re} \sigma(k_\omega) = \left(\frac{4}{L} \right)^3 \frac{a_0 \gamma^2}{\pi} \left(\frac{1}{\hbar} \frac{e^2}{2a_0} \right) \mathcal{F}_+, \quad \operatorname{Im} \sigma(k_\omega) = - \left(\frac{4}{L} \right)^3 \frac{a_0 k_\omega^2}{\pi} \left(\frac{1}{\hbar} \frac{e^2}{2a_0} \right) \mathcal{F}_-, \quad (10.16)$$

де

$$\mathcal{F}_\pm \equiv \sum_{m=1}^{m_F} \sum_{m'=1}^{m_{\max}} \frac{k_{xm}^2 k_{xm'}^2 (k_F^2 - k_{xm}^2) \left\{ 1 - (-1)^{m+m'} \right\} \left\{ (k_{xm'}^2 - k_{xm}^2)^2 \pm k_\omega^4 \pm \gamma^4 \right\}}{\left(1 + \frac{2}{L\kappa_m} \right) \left(1 + \frac{2}{L\kappa_{m'}} \right) (k_{xm}^2 - k_{xm'}^2)^3 \left\{ \left((k_{xm'}^2 - k_{xm}^2)^2 - k_\omega^4 + \gamma^4 \right)^2 + 4\gamma^4 k_\omega^4 \right\}}, \quad (10.17)$$

a_0 – радіус Бора;

$$\hbar k_\omega \equiv \sqrt{2m_e \hbar \omega},$$

$$\hbar k_F \equiv \sqrt{2m_e \varepsilon_F};$$

$$m_F \equiv \left\lceil \frac{Lk_F}{\pi} + \frac{2}{\pi} \arcsin \frac{k_F}{k_0} \right\rceil \quad m_{\max} \equiv \left\lceil \frac{Lk_0}{\pi} \right\rceil + 1. \quad (10.18)$$

Квадратні дужки в (10.18) позначають цілу частину числа.

Для проведення чисельних розрахунків за формулами (10.16) – (10.17) до них потрібно додати співвідношення, яке визначає рівень Фермі тонкої металевої плівки:

$$k_F^2 = \frac{1}{m_F} \left(2\pi \bar{n} L + \sum_{m=1}^{m_F} k_{xm}^2 \right), \quad (10.19)$$

де $\bar{n}$ – концентрація електронів провідності в плівці.

10.2 Завдання до лабораторної роботи

1. Вихідні дані:

– Радіус комірки Вігнера-Зейтца визначити відповідно до номеру варіанта N_{var} як $r_s = 1.8 + 0.2N_{\text{var}}$ бор (1 бор=0.0529 нм).

– Глибину ями відносно вакуумного рівня задати виразом $U_0 = \frac{\hbar^2 \bar{k}_F^2}{2m_e} + W$, де $\bar{k}_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$ – хвильовий вектор фермівських електронів, $W = 5.6 - 0.6r_s$ еВ – робота виходу електронів об'ємного металу.

– Товщину плівки проварювати у межах діапазону $L = (n+1)r_s$, де $n = 1, 2, \dots, 10$.

2. Знайти з виразу (10.14) значення поперечної компоненти імпульсу $\hbar k_{xm}$ металевої плівки для різних значень товщини L .

3. Розрахувати за виразом (10.16) дійсну та уявну частини оптичної провідності для різних значень L .

Контрольні запитання:

1. Запишіть гамільтоніан системи незалежних електронів в електромагнітному полі.
2. У чому сутність наближення «діагонального відгуку»?
3. В чому сутність метода матриці густини?

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. **Драгунов, В. П.** Основы наноЭлектроники [Текст] / В. П. Драгунов, И. Г. Неизвестный, В. А. Гридчин. – М.: Логос, 2006. – 496 с.
4. **Байков, Є . А.** Физика конденсированного состояния [Текст] / Ю. А. Байков, В. М. Кузнецов. – М.: Бином, 2011 – 240 с.
5. **Келдыш, Л. В.** О влиянии ультразвука на Электронный спектр кристалла [Текст] / Л. В. Келдыш // ФТТ. - 1962. - Т. 4. - С. 2265-2267.
6. **Chang, L. L.** Resonant tunneling in semiconductor double barriers [Text] / L. L. Chang, L. Esaki, R. Tsu // Appl. Phys. Lett. – 1974. - V. 24, No 12. - id. 593.
7. **Курбацкий, В. П.** Энергия Ферми и оптическая проводимость квантовых металлических нитей [Текст] / В. П. Курбацкий, А. В. Коротун, А. В. Бабич, В. В. Погосов // Физика твердого тела.- 2009.- Т.51.- №12.- С.2371-2378.
8. **Курбацкий, В. П.** Оптична провідність і поглинання тонких металевих плівок в інфрачервоній області спектру [Текст] / В. П. Курбацкий, А. В. Коротун, В. В. Погосов // УФЖ. – 2008.- Т.53.- №5.- С. 569 – 573.
9. **Коротун, А. В.** Високочастотна провідність вуглецевих нанотрубок zigzag-конфігурації [Текст] / А. В. Коротун, І. М. Тітов, Я. В. Карандась // ЖНЕФ. – 2015. – Т. 7, №2. – id. 02021 (6сс).
10. **Коротун, А. В.** Розмірна залежність енергії Фермі сферичного металевого нанокластера [Текст] / А. В. Коротун // ЖНЕФ. – 2015. – Т. 7, №3. – id. 03020 (3сс).

ДОДАТОК А. ДЕЯКІ ПАРАМЕТРИ ТВЕРДОГО РОЗЧИНУ AlGaAs ЗА КІМНАТНОЇ ТЕМПЕРАТУРИ¹

Параметр	GaAs	AlAs	$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$
a , нм	0,56533	0,56611	$0,56533 + 0,00078x$
$\hbar\omega_{LO}$, меВ	36,2	50,1	не інтерполюється
$\hbar\omega_{TO}$, меВ	33,3	44,9	не інтерполюється
ΔE_g^Γ , еВ	1,424	3,018	$1,424 + 1,247x, \quad x < 0,45$ $1,656 + 0,215x + 0,143x^2, \quad x > 0,45$
ΔE_g^X , еВ	1,900	2,168	$1,900 + 0,125x + 0,143x^2$
ΔE_g^L , еВ	1,708	2,350	$1,708 + 0,642x$
ΔE_c^Γ , еВ	0	1,12	$0,733x, \quad x < 0,45$ $0,232 - 0,259x + 1,147x^2, \quad x > 0,45$
ΔE_c^X , еВ	0,476	0,270	$0,476 - 0,349x + 0,143x^2$
ΔE_c^L , еВ	0,284	0,452	$0,284 + 0,168x$
ΔE_v , еВ	0	0,474	$0,474x$
χ , еВ	4,07	3,5	$4,07 - 1,1x, \quad x < 0,45$ $3,65 - 0,14x, \quad x > 0,45$
m_Γ	0,067	0,150	$0,067 + 0,083x$
m_T^X	0,23	0,19	
m_L^X	1,3	1,1	
m_{lh}	0,082	0,153	$0,082 + 0,071x$
m_{hh}	0,5	0,5	
m_{s0}	0,15	0,24	$0,15 + 0,09x$
$\varepsilon_h (\omega = 0)$	13,18	10,06	$13,18 - 3,12x$

¹ Розриви ΔE_c^Γ , ΔE_c^X , ΔE_c^L в зоні провідності відраховуються від низу валентної зони GaAs (Γ_6)

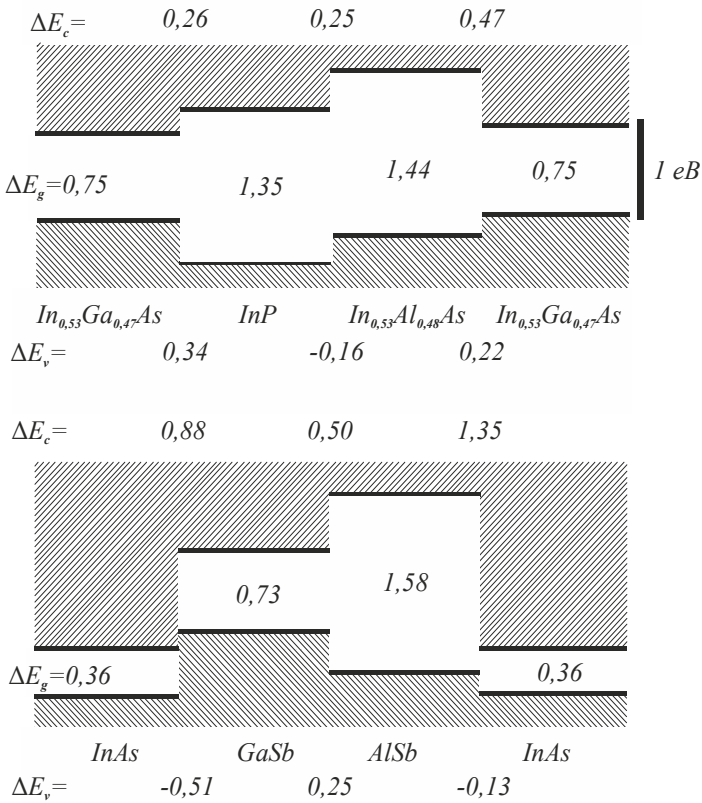


Рисунок А.1 – Експериментально визначені розриви валентної зони та зони провідності двох найбільш близьких за параметрами ґратки гетеропар:

$a - \text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As} - \text{In}_{0.52}\text{Ga}_{0.48}\text{As} - \text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As} - \text{InP}$;

$\text{б} - \text{InAs} - \text{GaSb} - \text{AlSb}$

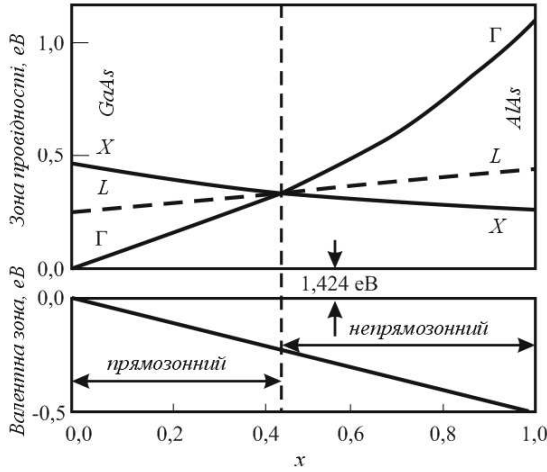


Рисунок А.2 – Розташування валентної зони і зони провідності у $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$

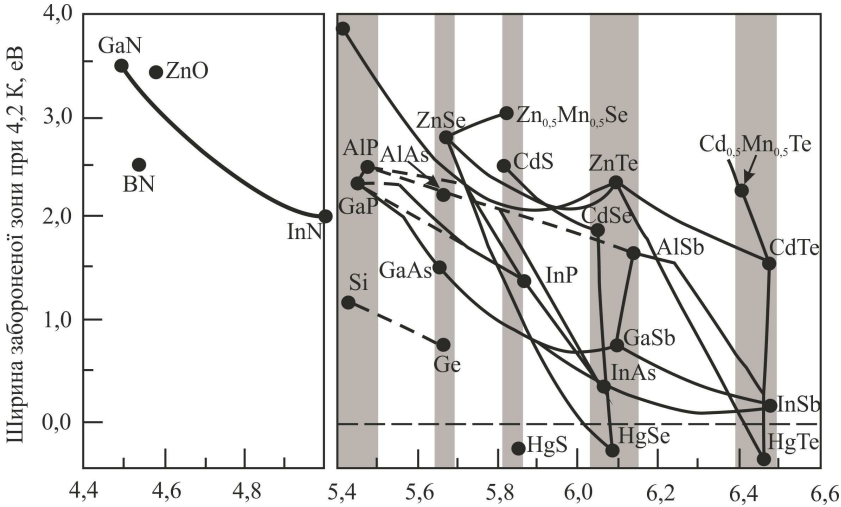


Рисунок А.3 – Графік залежності енергії забороненої зони за низької температури від сталої ґратки для низки напівпровідників зі структурою алмазу та цинкової обманки. Затемнені області об'єднують групи напівпровідників із близькими сталими ґраток. Напівпровідники, з'єднані суцільними лініями утворюють між собою стабільні тверді розчини. Штрихові лінії вказують на непрямі заборонені зони¹

¹ Від'ємне значення, наведене для енергії забороненої зони HgSe , є спірним.