

Міністерство освіти і науки України
Харківський національний університет радіоелектроніки

Факультет Електронної та біомедичної інженерії
(повна назва)

Кафедра Мікроелектроніки, електронних приладів та пристроїв
(повна назва)

КВАЛІФІКАЦІЙНА РОБОТА Пояснювальна записка

рівень вищої освіти перший (бакалаврський)

Енергетичні стани частинок у несиметричних багатопшарових наноструктурах
першого типу
(тема)

Виконав:
студент 4 курсу, групи МНТМН – 21 – 1

Певцова М.О.
(прізвище, ініціали)

Спеціальність 153 – Мікро – та наносистемна
техніка
(код і повна назва спеціальності)

Тип програми освітньо-професійна

Освітня програма

«Мікро- та наноелектроніка»
(повна назва освітньої програми)

Керівник доц. Пащенко О.Г.
(посада, прізвище, ініціали)

Допускається до захисту

Зав. кафедри _____
(підпис)

Бондаренко І.М.
(прізвище, ініціали)

Харківський національний університет радіоелектроніки

Факультет _____ Електронної та біомедичної інженерії _____

Кафедра _____ Мікроелектроніки, електронних приладів та пристроїв _____

Рівень вищої освіти _____ перший (бакалаврський) _____

Спеціальність _____ 153 – Мікро – та наносистемна техніка _____
(код і повна назва)

Тип програми _____ освітньо-професійна _____

Освітня програма _____ «Мікро- та аноелектроніка» _____
(повна назва)

ЗАТВЕРДЖУЮ:

Зав. кафедри _____
(підпис)

« _____ » _____ 20 ____ р.

ЗАВДАННЯ
НА КВАЛІФІКАЦІЙНУ РОБОТУ

студентові _____ Певцової Мадіни Олександрівни _____
(прізвище, ім'я, по батькові)

1. Тема роботи «Енергетичні стани частинок у несиметричних багатошарових наноструктурах першого типу» _____

затверджена наказом по університету від _____ 26 травня _____ 2025 р. № _____ 414 Ст _____

2. Термін подання студентом роботи до екзаменаційної комісії _____ 12 _____ 06 _____ 2025 р.

3. Вихідні дані до роботи _____

3.1. Багатошарова наноструктура на основі GaAs/AlGaAs; _____

3.2. Ширина квантово-обмеженого шару (квантової ями) - 40, 45, 50 ангстрем; _____

3.3. Ширина розділювального бар'єру – 20, 30, 60 ангстрем _____

3.4. Матеріал квантово-обмеженого шару – GaAs; _____

3.5. Матеріал розділювального бар'єру – AlGaAs. _____

4. Зміст пояснювальної записки (перелік питань, що потрібно розробити) _____

4.1. Фізика наноструктур та квантові ефекти _____

4.2. Енергетичні стани частинок у наноструктурах _____

4.3. Енергетичні та геометричні параметри двошарової наноструктури _____


4.4. Енергетичні стани частинок у багатошарових періодичних наноструктурах _____

4.5. КРС з широкими розділювальними бар'єрами _____

5. Перелік графічного матеріалу із зазначенням креслеників, схем, плакатів, комп'ютерних ілюстрацій (п.5 включається до завдання за рішенням випускової кафедри) _____

Слайди: 14 одиниць _____


6. Консультанти розділів роботи (п.6 включається до завдання за наявності консультантів згідно з наказом, зазначеним у п.1)


Найменування розділу	Консультант (посада, прізвище, ім'я, по батькові)	Позначка консультанта про виконання розділу	
		підпис	дата
Аналітична частина	Доц. Пащенко О.Г.		10.06.2025

КАЛЕНДАРНИЙ ПЛАН

№	Назва етапів роботи	Терміни виконання етапів роботи	Примітка
1	Отримання завдання	05.05.25	
2	Пошук інформаційних джерел	06.05.2025 – 16.05.25	
3	Опрацювання інформаційних джерел	17.05.25 – 25.05.25	
4	Огляд і порівняння розглянутих конструкцій пристроїв	25.05.25 – 02.06.25	
5	Оформлення пояснювальної записки	03.06.23 – 09.06.23	
6	Підготовка презентації	10.06.2025	
7	Рецензування, нормоконтроль	11.06.25 – 12.06.25	
	Перевірка роботи на плагіат		
8	Задача роботи на кафедрі	12.06.2025	

Дата видачі завдання 05 05 2025 р.

Студент 
(підпис)

Керівник роботи  доц. Пащенко О.Г.
(підпис) (посада, прізвище, ініціали)

РЕФЕРАТ

Пояснювальна записка кваліфікаційної роботи бакалавра: 39 сторінок, 12 рисунків, 15 джерел.

НАНОСТРУКТУРИ, АСИМЕТРИЧНІ БАГАТОШАРОВІ СТРУКТУРИ, ЕНЕРГЕТИЧНІ СТАНИ, КВАНТОВІ ЕФЕКТИ, ХВИЛЬОВІ ФУНКЦІЇ.

Об'єкт дослідження – енергетичні стани частинок які містяться у асиметричній багат шаровій наноструктурі першого типу.

Мета – визначення шляхом математичного моделювання енергетичних станів частинок в несиметричних багат шарових наноструктурах першого типу і як саме асиметрія шарів впливає на їх квантові властивості.

Метод дослідження – теоретичні дослідження, квантово-механічне моделювання в області теорії функціоналу густини і рішення рівняння Шредінгера.

Актуальність дослідження: у світлі появи нанотехнологій і зростаючого попиту на розробку ефективних наноматеріалів вивчення енергетичних станів частинок в несиметричних багат шарових наноструктурах має значно зрости. Несиметричні багат шарові структури першого типу мають особливі електронні властивості, які можуть бути використані для підвищення ефективності пристроїв у мікро– і наноелектроніці. Дослідження впливу асиметрії на квантові стани є важливим кроком у розробці нових матеріалів з такими властивостями, що відкриває нові перспективи для використання в сучасних технологіях.

ABSTRACT

Explanatory note of the bachelor's qualification work: 39 pages, 12 figures, 15 sources.

NANOSTRUCTURES, ASYMMETRIC MULTILAYER STRUCTURES, ENERGY STATES, QUANTUM EFFECTS, WAVE FUNCTIONS.

The object of research is the energy states of particles contained in an asymmetric multilayer nanostructure of the first type.

The goal is to determine by mathematical modeling the energy states of particles in asymmetric multilayer nanostructures of the first type and how exactly the asymmetry of nanolayers affects their quantum properties.

The research method is theoretical research, quantum mechanical modeling in the field of density functional theory and the solution of the Schrödinger equation.

Relevance of the research: in light of the emergence of nanotechnology and the growing demand for the development of effective nanomaterials, the study of the energy states of particles in asymmetric multilayer nanostructures should increase significantly. Asymmetric multilayer structures of the first type have special electronic properties that can be used to improve the efficiency of devices in micro- and nanoelectronics. The study of the effect of asymmetry on quantum states is an important step in the development of new materials with such properties, which opens up new prospects for use in modern technologies.

ЗМІСТ

ВСТУП	8
1 ОСОБЛИВОСТІ ФОРМУВАННЯ НЕСИМЕТРИЧНИХ НАНОСТРУКТУР....	9
1.1 Фізика наноструктур та квантові ефекти.....	9
1.2 Критерії визначення і фізичні ознаки	13
1.3 Енергетичні стани частинок у наноструктурах.....	16
2 ЕНЕРГЕТИЧНІ СТАНИ ЧАСТИНОК У НЕСЕМЕТРИЧНИХ БАГАТОШАРОВИХ НАНОСТРУКТУРАХ ПЕРШОГО ТИПУ	21
2.1 Постановка задачі.....	21
2.2 Енергетичні та геометричні параметри двошарової наноструктури	24
2.3 Енергетичні стани частинок у багатошарових періодичних наноструктурах	27
2.4 Вихідні дані та результати чисельного експерименту	31
2.5 КРС з широкими розділювальними бар'єрами.....	33
ВИСНОВКИ.....	36
ПЕРЕЛІК ДЖЕРЕЛ ПОСИЛАННЯ	38
ДОДАТОК А.....	Ошибка! Закладка не определена.
ДОДАТОК Б	Ошибка! Закладка не определена.

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ І СКОРОЧЕНЬ

КРС – квантово-розмірна структура;

КЯ – квантова яма;

LED – Light Emission Diode.

ВСТУП

Сучасний розвиток мікро– і наноелектроніки вимагає глибокого осмислення квантових процесів, які здійснюються в наноструктурованих матеріалах. Однією із найперспективніших галузей досліджень є теоретичний і експериментальний аналіз багат шарових наноструктур, зокрема першого типу, які характеризуються просторовим розподілом електронів і дірок між окремими шарами. Цим забезпечується здатність таких структур володіти багатьма унікальними властивостями, які є критично важливими для розвитку компонентів квантової електроніки, фотоніки, сенсорики та інших високотехнологічних галузей сучасної напівпровідникової та наноелектроніки.

Особливий інтерес представляють асиметричні багат шарові наносистеми, в яких порушення просторової симетрії може істотно вплинути на спектр енергетичних станів частинок і змінити їх хвильові функції. Це, в свою чергу, відкриває можливості для точного контролю електронних властивостей матеріалу. Однак такі системи вимагають ретельного теоретичного дослідження, що включає чисельне моделювання квантових станів з урахуванням складної просторової конфігурації.

Зв'язок атестаційної роботи з сучасними технологіями полягає в необхідності розробки інноваційних методів проектування наноструктур з заздалегідь спланованими характеристиками, які можна реалізувати у практичних приладах. У роботі досліджується вплив асиметрії на енергетичні стани частинок у багат шарових наноструктурах першого типу, що дозволяє здійснювати більш глибокі дослідження фізичних ефектів, які лежать в основі роботи аналогічних структур.

Мета даного дослідження – теоретичний аналіз і чисельне моделювання енергетичних станів в асиметричних багат шарових наноструктурах, а також оцінка впливу геометричних параметрів і асиметрії на спектр квантових рівнів.

1 ОСОБЛИВОСТІ ФОРМУВАННЯ НЕСИМЕТРИЧНИХ НАНОСТРУКТУР

1.1 Фізика наноструктур та квантові ефекти

Наноматеріали – це широкий клас матеріалів, які можуть існувати у вигляді як ізольованих індивідуальних наноструктур (кластерів), особливо в момент одержання, так і у вигляді тонких плівок, стрічок, компактованого порошку, композиту з матричними ізольованими або тунельно–, магнітно–, електрично зв’язаними наноструктурами чи кластерами у формі сфери, еліпса, голки, нанотрубки або у вигляді багатогранників (ікосаедрів). Багато з наноматеріалів є складними мікрооб’єктами, які наноструктуровані на поверхні (наприклад, квантові точки) або в об’ємі. Такі наноструктури можна розглядати як особливий стан речовини, тому що їх властивості не ідентичні властивостям як ізольованих атомів (молекул), так і мікро– або макроскопічної речовини.

Загальні ознаки наноматеріалів, які відрізняють їх від традиційних і добре відомих матеріалів, можна визначити наступним чином.

Усі наноматеріали складаються з частинок розмірами меншими за 10 - 100 нм, які не виявляються неозброєним оком. Це означає, по–перше, що на одиниці площі можна розмістити більше функціональних пристроїв, по–друге, дозволяє вводити їх для діагностики або лікування у будь–який орган або локальну ділянку тіла живої істоти.

Наноматеріали характеризуються великою площею поверхні або меж поділу, що дозволяє на багато порядків прискорити взаємодію з оточуючим середовищем, в якому вони перебувають (адсорбція, каталіз, дифузія), хімічні або біохімічні реакції. Наприклад, фотокаталітичний розклад води на водень і кисень, поглинання домішок, токсинів і бактерій нанофільтрами, перенесення ліків, ферментів та нанопоглиначів випромінювання до патологічних (дефектних) клітин з метою їх подальшого вибіркового знищення НВЧ– або ІЧ– випромінюванням.

У наноматеріалах проявляються квантово–механічні ефекти, що дає можливість створювати прилади, основою яких є квантові точки, ями, дроти, надгратки (рис. 1.1) тощо. Характерною особливістю таких квантово–розмірних структур є відсутність дефектів.

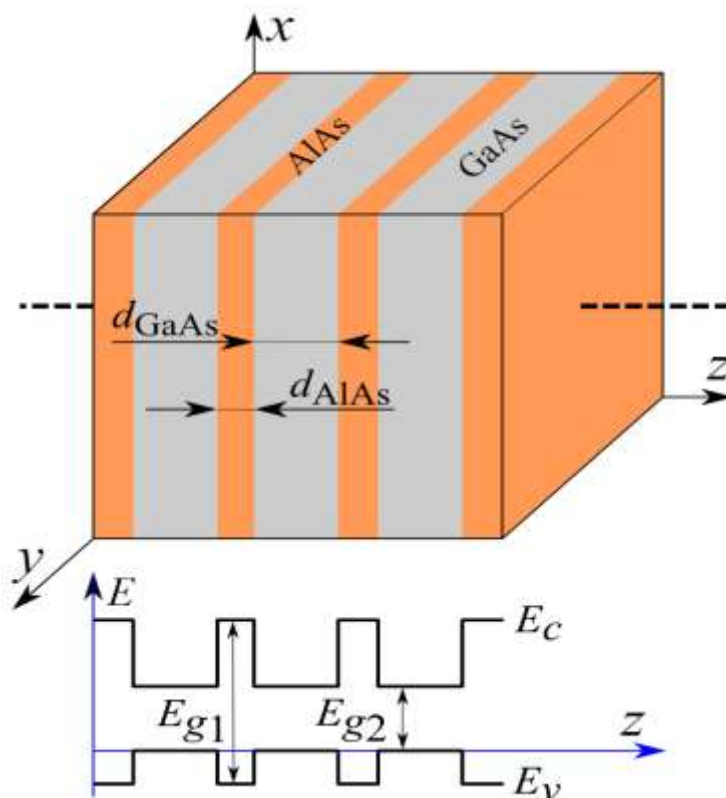


Рисунок 1.1 – Будова надгратки

Квантові ефекти, які можна спостерігати в наноструктурах, носять також на собі наявність тунельного ефекту, при якому частинки можуть пробиватися крізь потенційні бар'єри, які згідно з класичною фізикою вважаються непроникними. Примітно це стосується роботи квантових точок, квантових ям та надграток, де процес передачі носіїв заряду та їх хвильових функцій характеризуються складною взаємодією.

Крім того, при зменшенні розмірів до нанорівня значно зростає роль поверхневих ефектів – через високий відсоток атомів на поверхні змінюється структура зв'язків, що також впливає на енергетичні стани системи.

Основною характеристикою квантових точок є наявність квантових властивостей, які істотно відрізняються від властивостей більших за розміром об'єктів. До ключових особливостей квантових точок належать енергетичне квантування, розмірно-квантовий ефект, колоїдна природа, високий квантовий вихід та кулонівська взаємодія (рис. 1.2).

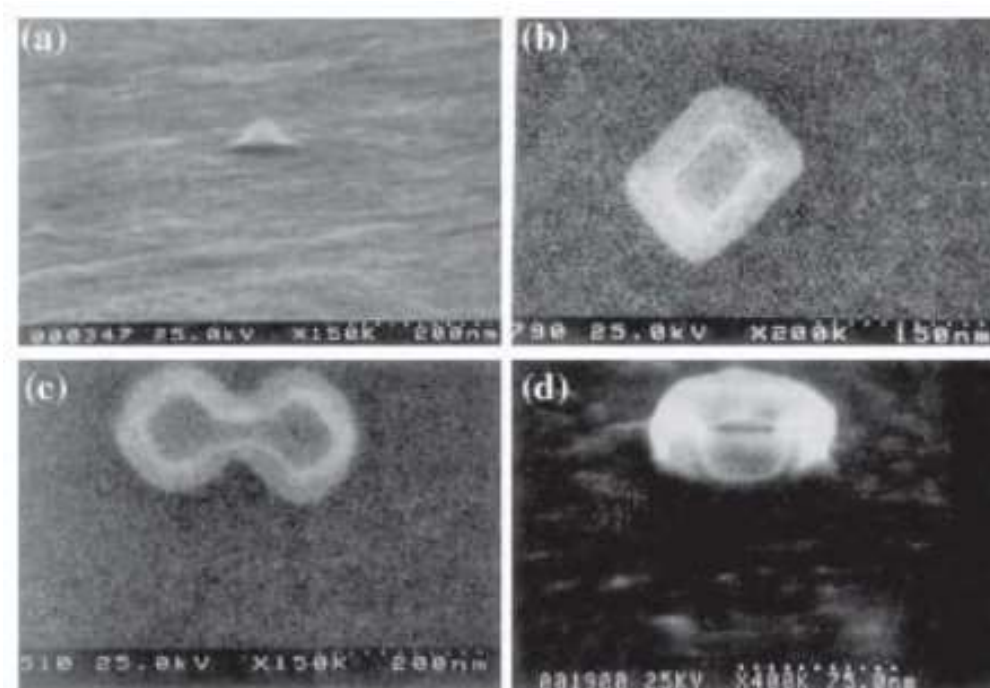


Рисунок 1.2 – Квантові точки з різною геометричною формою

Леговані надгратки – це впорядкована чергова структура шарів n-типу та p-типу, утворених з одного й того ж напівпровідникового матеріалу. У шарах n-типу донорні домішки генерують електрони, які рекомбінують з акцепторними атомами в шарах p-типу. Унаслідок цього виникає додатковий періодичний потенціал, зумовлений наявністю зарядів іонізованих донорів та акцепторів (рис. 1.3)



Рисунок 1.3 – Класифікація надграток

Слід також звернути увагу на вплив діелектричного середовища на динаміку електронів у наноструктурах. Зміна матеріалу оточення або запровадження асиметрії в геометрію наноструктури може викликати модифікації в конфігурації хвильових функцій і спектрі енергетичних рівнів. Ще одним важливим напрямом є спітронні ефекти, що спостерігаються в наноструктурах, де енергії спин–орбітальної взаємодії порівнюються з енергіями квантового обмеження руху. На цьому шляху відкриваються нові можливості для розробки нових типів електронних пристроїв, наприклад, на основі спин–контрольованих переходів між енергетичними станами.

Фізика наноструктур зосереджується на обліку квантової сутності частинок, що дозволяє свідомо модулювати властивості матеріалів шляхом регулювання їхніх розмірів, форм, симетрії структур, а також типу зовнішніх полів, які до них застосовуються.

1.2 Критерії визначення і фізичні ознаки

Перехід від дискретного енергетичного спектру електронів, властивого ізольованим атомам і молекулам, до зонного енергетичного спектру електронів, характерного для твердого тіла, відбувається через невеликі атомні агрегати – кластери проміжного розміру. Відмінною особливістю кластерів є немонотонна залежність властивостей від кількості атомів у кластері.

Порошки – це двофазні системи, які є твердими частинками дисперсної фази, розподіленими в повітрі або іншому газовому середовищі. Як правило, до порошків відноситься більшість сипучих матеріалів, для яких сила взаємодії між частинками стає порівнянною або менше їх ваги. Але термін «порошки» також може бути застосований до високодисперсних систем з розмірами частинок від 0,001 до 1000 мкм. Дисперсні фази в реальних системах мають різноманітну форму: сфери, голки, лусочки, циліндри або щось в цьому роді. Крім того, дисперсна фаза може бути утворена покриттями, мембранами, перетинками, філаментами, капілярами, волокнами, порами і т.д.

Нанокластери – це дисперсні фази розміром 1 нм або менше. Кластери (від англійського cluster – зв'язка, рій, скупчення) – це групи близько розташованих, тісно пов'язаних атомів, молекул та іонів. Найменше число атомів в кластері дорівнює двом. Верхня межа кластера відповідає такій кількості атомів, що додавання іншого атома більше не змінює властивості кластера: електричні, магнітні, оптичні, теплофізичні та кристалографічні характеристики, а також межі фазових рівноваг тощо. Залежно від форми наночастинок цьому критерію відповідають частинки з 10^3 – 10^5 атомами.

Типи наноструктур:

- кластерів (частинок), порошків;
- покриттів, тонких плівок, мембран;
- стрічок, дротів, ниток;
- компактних матеріалів;

- пір, каналів, капілярів, волокон, каркасів;
- поверхневих наноструктур.

До впорядкованих штучно створених наноструктур належать квантово-розмірні структури: 0D-квантові точки; 1D-квантові нитки; 2D-квантові ями, надрешітки.

Окрему групу наноструктур складають вуглецеві (каркасні) структури наноструктури: графен, фулерени та їх похідні, вуглецеві нанотрубки.

На основі перерахованих вище наноструктур формуються наночастинки: компактні кластери і наночастинки; ізольовані наноструктури; електрично, магнітно і тунельні наноструктури; колоїдні системи.

Критерії визначення поняття наноматеріалів:

- критичний розмір (<100 нм);
- розмірний ефект (залежність структури і властивостей від розміру);
- радіус кореляції;
- квантово-механічні ефекти в нанорозмірних структурах.

Поведінка рухомих носіїв заряду (електронів і дірок) в нанорозмірних структурах визначається чотирма групами фундаментальних квантових явищ: квантовим обмеженням, балістичним перенесенням, квантовою інтерференцією і тунелюванням.

Квантове обмеження. Блокування електрона з ефективною частотою t , відповідно до принципу невизначеності Гейзенберга, призводить до збільшення його імпульсу на \hbar/L і кінетичної енергії на (блакитній зсув):

$$\Delta E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right) \left(\frac{\pi^2}{L^2}\right). \quad (1.1)$$

Для невеликих автономних об'єктів (наноструктур) відстань між допустимими рівнями енергії ($\Delta E > 0,05 \text{ eV}$) більша, ніж для масивного матеріалу ($\Delta E \sim 10^{-22} \text{ eV}$). У першому випадку електрон в стані термодинамічної рівноваги не може подолати цей енергетичний бар'єр, а в другому – бар'єр долається тими ж електронами. Це визначає різницю у фізичних властивостях цих систем. Такі невеликі об'єкти можна розглядати як квантові

точки.

Інтерференція. Взаємодія електронних хвиль в наноструктурах може супроводжуватися інтерференцією, яка подібна до світлових хвиль. Завдяки наявності заряду у електронів, можна управляти поширенням електронних хвиль за допомогою електростатичних або електромагнітних полів.

Тунелювання, у тому числі резонансне і тунелювання з одним електроном. Енергетичні та геометричні особливості наноелементів підвищують ймовірність тунелювання електронів через потенційний бар'єр. Рівняння Шредінгера.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} * (d^2\psi/dx^2) = (E - U) \psi(x), \quad (1.2)$$

це показує збільшення ймовірності тунелювання електронів зі зменшенням товщини бар'єру x і зі збільшенням різниці енергій між електроном E і висотою бар'єру U (рис. 1.4).

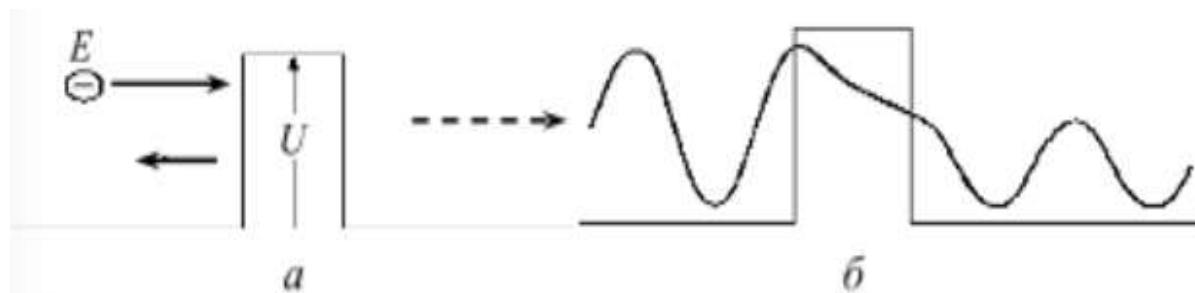


Рисунок 1.4 – Взаємодія електрона з прямокутним потенційним бар'єром висотою U (а); хвильова функція електрона, що тунелює через прямокутний потенційний бар'єр (б)

Балістичний транспорт. Це відбувається, коли електрони рухаються по провіднику без будь-якого розсіювання на домішках і фононах; насправді електрони не розсіюються на дефектах провідника і не втрачають енергію. У той час як провідність звичайного провідника обернено пропорційна його довжині і прямо пропорційна його поперечному перерізу, в разі ідеального одновимірного провідника в балістичному режимі вона не залежить від його довжини або товщини і дорівнює кванту провідності граничне значення провідності,

відповідне вільному переносу електронів, розташованих по всій довжині провідника:

$$G_0 = \frac{2e^2}{h} = 12,9 \text{ (кОм)}^{-1} . \quad (1.3)$$

Він визначається лише фундаментальними константами – зарядом електрона і постійної Планка.

Кореляційний радіус. Коли розмір кластера наближається до радіусу кореляції або лінійних розмірів фізичного явища або процесу, виникають ефекти, які призводять до незвичайних властивостей і характеристик наноструктур і матеріалів на їх основі. Ці критичні розміри можуть включати:

- довжину дебаєвського захисту від електростатичних явищ;
- довжина вільного пробігу електрона визначає електричну провідність, а фонона–теплопровідність;
- довжина когерентності в надпровідниках;
- розмір магнітного домену для переходу до суперпарамагнітний стан;
- критичний розмір зародка твердої фази при кристалізації або фазовому переході;
- радіус петлі Франка–Ріда для ковзної дислокації;
- розмір екситону;
- довжина хвилі де Бройля.

1.3 Енергетичні стани частинок у наноструктурах

На рівні нанометрів (від 1 нм до 100 нм) рух завантажених зернят (електронів і дірок) не може бути досить точно описаний засобами класичної фізики. У цьому випадку починає діяти квантова механіка, яка затверджує, що енергія частинок в обмеженому просторі існує тільки в дискретних (квантованих) значеннях. Це явище називається квантування енергії.

Головним математичним інструментом для вивчення таких станів є стаціонарне рівняння Шредінгера:

$$H\Psi(r) = E\Psi(r), \quad (1.3)$$

де H – є оператором Гамільтона, що включає як кінетичну, так і потенційну енергію частинки;

$\Psi(r)$ – хвильова функція, яка може бути повним математичним описом стану частинки, а її квадрат модуля $|\Psi(r)|^2$ визначає ймовірність знаходження частинки в даній точці простору;

E – дозволені власні значення енергії частинки.

Концепція потенційної ями: у наноструктурах на основі напівпровідників обмеження руху частинок здійснюється через так звані потенційні ями. Це зони, в яких потенційна енергія для електронів (в області провідності) або дірок (в валентній зоні) нижча, ніж у сусідніх матеріалах (бар'єрах). Класичним прикладом є одновимірна квантова яма, в якій частинка обмежена в одному вимірі (рис. 1.5).

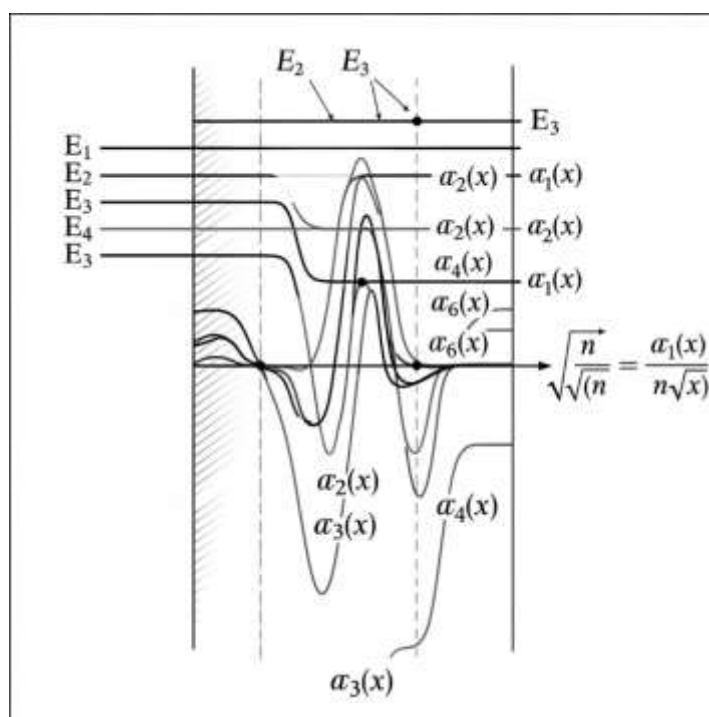


Рисунок 1.5 – Схематичне зображення енергетичних рівнів та хвильових функцій в одновимірній квантовій ямі

Розв'язання рівняння Шредінгера для вказаної потенційної ями демонструє, що енергетичні рівні знаковою мірою залежать від ширини ями

разом з ефективною масою частинки. Урізнення розміру ями веде до більшого розширення енергетичних рівнів, що свідчить про зміцнений ефект квантування.

Основою для розробки більшості наноструктур слугують напівпровідникові гетероструктури – системи, що складаються як мінімум з двох різних напівпровідникових матеріалів, вирощених один на одному. На межі розділу цих матеріалів, яка відома як гетероперехід, виникають розриви (перепади) в енергії зони провідності (E_C) та валентної зони (E_V). Ці розриви або зсуви зон формують потенційні ями та бар'єри, які «утримують» електрони та дірки.

В залежності від співвідношення положень зон провідності та валентності двох з'єднаних матеріалів, існують три основні категорії гетеропереходів:

Гетероперехід I типу (Type-I): заборонена зона одного матеріалу (яма) повністю знаходиться всередині забороненої зони іншого матеріалу (бар'єра). Це означає, що як електрони, так і дірки локалізуються в одному і тому ж шарі. Такі структури широко використовуються у світловипромінюючих діодах (LED) та лазерах, оскільки просторове перекриття хвильових функцій електронів і дірок є максимальним, що сприяє ефективній рекомбінації. Прикладом є система GaAs/AlGaAs.

Гетероперехід другого типу (Type-II): провідникова зона одного матеріалу слугує ямою для електронів, тоді як валентна зона іншого матеріалу у ролі ями для дірок. Це явище викликає просторове розділення носіїв заряду – електрони і дірки концентруються в різних шарах. Дане явище має значення для таких пристроїв, як фотодетектори, терагерцові пристрої, а також деякі класи квантових каскадних лазерів, в яких необхідно контролювати час життя носіїв заряду або їх просторову сегрегацію.

Гетероперехід III типу (Type-III): характеризується порушенням розташуванням зон, коли зона провідності одного матеріалу може бути нижче валентної зони іншого. Це може призвести до напівметалевих або безщілинних станів, які представляють інтерес для конкретних застосувань у сенсоричі та топологічній електроніці.

Коли гетеропереходи періодично повторюються, виникають багат шарові наноструктури, які також називають надґратками (superlattices). Вони утворюються шляхом чергування ультратонких шарів двох чи декілька напівпровідникових матеріалів і товщина кожного з них тільки кілька десятків нанометрів.

Найбільш важливою особливістю надґраток є те, що дискретні енергетичні рівні окремих квантових ям, розташованих близько один до одного, починають взаємодіяти за допомогою тунелювання через тонкі бар'єри. Ця взаємодія призводить до «розщеплення» цих рівнів і утворення енергетичних міні-зон (допустимих діапазонів енергій), що нагадують зонну структуру великих кристалів, але вже сформованих в макроскопічному масштабі надрешітки. Між міні-зонами утворюються міні-зазори.

Ширина мінізонів та мініщілин значною мірою обумовлюється товщиною бар'єрів, їх висотою, а також ефективною масою частинок. Здійснюючи контроль над цими параметрами (шляхом вибору матеріалів та регулювання товщини шарів під час росту), можна «інженерно» проектувати зонну структуру надґратки, що дозволяє оптимізувати її електронні та оптичні характеристики для специфічних застосувань, таких як у квантових каскадних лазерах для генерації інфрачервоного випромінювання.

Звичайні багат шарові структури, як правило, мають симетричний профіль потенціалу. Але несиметричні багат шарові наноструктури, які можуть включати в себе різні товщини шарів, різні бар'єрні матеріали або осередки, що складаються з безлічі різнорідних підшарів, створюють нові і якісно інші можливості для створення енергетичних станів частинок. Додавання несиметричних характеристик викликає ряд значущих ефектів:

Ліквідація виродження енергетичних рівнів: У симетричних системах існує ймовірність, що певні енергетичні рівні можуть бути виродженими. Відсутність симетрії зазвичай «усуває» це виродження, розділяючи рівні і надаючи можливість більш детального налаштування енергетичного спектру.

Контроль над локалізацією хвильових функцій: Хвильові функції як

електронів, так і дірок втрачають симетрію відносно центру потенційної ями і здатні локалізуватися переважно в одній частині несиметричного періоду. Це має критичне значення для оптичних характеристик, оскільки забезпечує управління просторовим перекриттям хвильових функцій електронів і дірок, що, в свою чергу, впливає на ймовірність виникнення випромінювальних або поглинальних переходів. Наприклад, у квантових каскадних лазерах контроль над локалізацією хвильових функцій є ключовим для оптимізації міжпідзонних переходів.

Розробка дипольного моменту та сили осциляторів: асиметрія впливає на дипольні моменти між енергетичними рівнями. Це забезпечує максимальну ефективність оптичних пристроїв, оскільки сила осцилятора (яка визначає інтенсивність оптичного переходу) безпосередньо корелює з дипольним моментом.

Потенціал для створення функціональних градієнтів: асиметрія може бути використана для створення енергетичних «ступенів» або градієнтів, що направляють потік носіїв заряду або забезпечують ефективне введення/витяг в пристрій. Цей аналітичний огляд формує надійну теоретичну основу для вашої бакалаврської роботи, забезпечуючи необхідні концептуальні рамки та візуальні матеріали. Слід пам'ятати, що кожен малюнок повинен бути пронумерований і містити детальний підпис, який пояснює його зміст у контексті відповідного розділу. Крім того, важливо звертатися до авторитетних джерел (монографій, наукових статей) для підтвердження викладених теоретичних аспектів.

2 ЕНЕРГЕТИЧНІ СТАНИ ЧАСТИНОК У НЕСЕМЕТРИЧНИХ БАГАТОШАРОВИХ НАНОСТРУКТУРАХ ПЕРШОГО ТИПУ

2.1 Постановка задачі

Використання наноструктур як активних областей багатьох приладів сучасної електроніки, квантової електроніки та мікроелектроніки набуває в останні роки все більшого поширення. На початку свого розвитку прилади з наноструктурами (квантово-розмірними структурами - КРС) використовувалися в основному як активні області високонапрямлених світловипромінювальних діодів, інжекційних напівпровідникових лазерів (ІНЛ) і фотоприймальних приладів [11]. На цьому етапі завдання дослідників та розробників квантово-розмірних структур полягала в основному у підборі таких матеріалів для вихідних гетероструктур, поєднання яких у готовому приладі забезпечувало б високі оптичні, електричні та експлуатаційні характеристики готового електронного виробу. У багатьох випадках задовільних результатів дозволяла досягти одношарова квантово-розмірна структура, створена за допомогою подвійної гетероструктури на основі напівпровідникових сполук $A^{III}B^V$, $A^{II}B^{VI}$, $A^{IV}B^{VI}$ та їх потрійних та четверних твердих розчинів змішування. Додаткові можливості з поліпшення характеристик квантово-розмірних приладів, або приладів з наноструктурами, надають вже традиційні методи легування напівпровідників і напівпровідникових тонкоплівкових шарів, використання в приладах наноелектроніки контактів метал-напівпровідник у бар'єрах Шоттки, а також структур метал-діелектрик-напівпровідник (МДН), обмеження руху носіїв одного знаку. Легування окремих квантово-обмежених шарів наноструктур надає готовому приладу необхідні розробникам властивості. При цьому за рахунок квантового обмеження легованих шарів вузькозонних та широкозонних напівпровідників, які становлять КРС, основні оптичні та електричні властивості наноструктури не втрачаються під дією полів об'ємних зарядів повністю

іонізованих домішок незалежно від їх концентрації та типу провідності.

Паралельно з використанням квантово-розмірних структур в оптоелектронній та лазерній техніці проводилися роботи з використання таких структур в інших галузях електроніки та мікроелектроніки. Зокрема, на основі КРС були створені та успішно використовуються такі прилади як: високоефективні катоди для НВЧ вакуумних приладів, польові НВЧ - транзистори з підвищеною рухливістю носіїв у каналі, тунельні та резонансно-тунельні структури, нанорозмірні аналоги традиційних генераторних приладів мікроелектроніки НВЧ. Особливістю цих та інших застосувань квантово-розмірних структур є те, що для ефективної роботи приладів на їх основі одного квантово-обмеженого шару може виявитися недостатньо. Навпаки, в приладах не оптоелектронного застосування виявляється необхідним виконувати такі операції як: просторовий поділ хмари об'ємних зарядів як одного, так і різних типів провідності, завдання діапазону енергій носіїв, при якому відбувається найбільш ефективно їх тунелювання через структуру на етапі виготовлення приладів, управління енергією зв'язку квазічастинок і центрів електрон-фононної взаємодії і навіть на вигляд статистичного розподілу частинок у тій чи іншій частині приладу. В оптоелектронних приладах на основі квантово-розмірних структур існує проблема підвищення випромінюваної потужності в заданому частотному діапазоні, а також проблема ефективного управління спектром частот, що випромінюються і приймаються. Таким чином, відразу після створення перших приладів на квантово-розмірних структурах як оптоелектронного, так і не оптоелектронного застосування виникла об'єктивна необхідність збільшення кількості квантово-розмірних структур в активній області одного і того ж приладу, ускладнення їх енергетичного профілю, врахування впливу поверхневих станів на гетеромежах. Задоволення різним (часто суперечливим) вимогам, що пред'являються до нових приладів, а також теоретичні розробки та новітні технологічні методи привели до створення надграток – штучних структур, що володіють періодично повторюваними фізичними, оптичними, електричними, механічними та іншими властивостями

[12].

У надгратці, на відміну від одиначної квантово-розмірної структури, енергетичні стани частинок і квазічастинок визначаються не тільки енергетичними параметрами та лінійними розмірами окремих квантово-обмежених шарів напівпровідника, що входять у надгратку, але взаємним впливом частинок, які знаходяться в сусідніх квантово-обмежених шарах розміри яких у напрямку квантового обмеження не перевищують довжини хвилі де – Бройля електронів у цьому напівпровідниковому матеріалі.

Очевидно, що дослідження властивостей приладів із надгратками як оптоелектронного, так і неоптоелектронного застосувань ґрунтується на розгляді наступних питань:

- як наявність сусідніх квантово-обмежених шарів вплине на енергетичні стани частинок та квазічастинок у всій структурі порівняно з випадком одиначної квантово-розмірної структури;

- чи призведе наявність кількох квантово-обмежених шарів, розділених досить тонкими бар'єрними шарами, до змін спектру енергетичних станів частинок і квазічастинок в КРС;

- як взаємний вплив частинок, що у сусідніх квантово-обмежених шарах надгратки позначиться на координатному перерозподілі хвильових функцій у напрямку, перпендикулярному площинам металургійних контактів гетеропереходів між квантово-обмеженими і бар'єрними шарами, тобто площинам квантового обмеження;

- при яких геометричних розмірах та енергетичних параметрах квантово-обмежених та бар'єрних шарів надгратки сусідні квантово-обмежені шари можна вважати невзаємодіючими – «розв'язаними»?

2.2 Енергетичні та геометричні параметри двошарової наноструктури

Для вирішення задачі про знаходження власних значень енергії частинок і квазічастинок і розподіл їх хвильових функцій у багатошарових надгратках, що використовуються в якості активних областей світлодіодів підвищеної яскравості випромінювання та інжекційних напівпровідникових лазерів, в даній кваліфікаційній роботі використовується ідеалізована фізична модель надгратки. Модель складається з двох квантово-обмежених шарів GaAs, розділених шаром $Al_xGa_{1-x}As$, товщина якого не перевищує довжини хвилі де-Бройля електронів для даного напівпровідникового матеріалу. Обидва квантово-обмежених шари GaAs і шар, що розділяє з алюміній–галій–арсеніду – $Al_xGa_{1-x}As$, який знаходяться між об'ємними (не квантово-обмеженими) шарами матеріалу $Al_xGa_{1-x}As$, причому, молярна частка алюмінію – X в матеріалах зовнішніх шарів і роздільного шару однакова. Відповідно також однаковими є і висота потенційних бар'єрів які виникають на металургійних межах контактів між вузькозонними та широкозонними матеріалами. Структура такої надгратки показана на рис. 2.1.

Описана фізична модель двошарової надгратки є ідеалізованою з таких основних причин:

- ширина обох квантово-обмежених шарів GaAs передбачається однаковою;
- хімічний склад розділового та обмежувальних шарів – $Al_xGa_{1-x}As$ також передбачається однаковим по всіх трьох шарах;
- як початкове припущення прийнято, що вся структура або власного типу провідності або однорідно легована домішкою одного типу, і внесок, що вноситься об'ємним зарядом повністю іонізованих носіїв в енергетичний профіль надгратки, таким чином, можна не враховувати;
- в даній моделі також не враховується внесок, що вноситься неоднорідностями та дефектами, які виникають на металургійних контактах

гетеропереходів, на енергетичний профіль надгратки, оскільки самі поверхні контактів передбачаються ідеально гладкими.

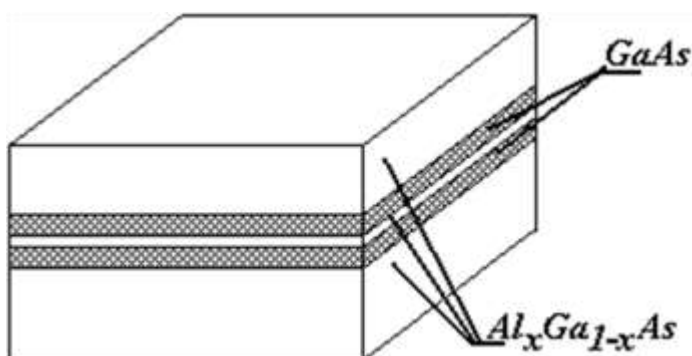


Рисунок 2.1 – Будова двошарової надгратки першого типу

Незважаючи на прийняті припущення, висунута модель може вважатися цілком коректною для описання квантових та оптичних процесів у двошаровій надгратці. По-перше, хоча сучасні технологічні методи створення наноструктур не дозволяють зробити двох абсолютно однакових квантово-обмежених шарів, їхня відмінність може становити не більше трьох – п'яти атомних шарів. По-друге, хімічний склад потрійних розчинів заміщення матеріалів групи $A^{III}B^V$ при використанні технології молекулярно-променевої епітаксії може бути витриманий з дуже високою точністю, аж до тисячних часток моля, що для більшості практично важливих випадків буває цілком достатнім. По-третє, як товщина квантово-обмежених шарів, так і розділового шару, що складають власне надгратку, а також товщина всієї структури в цілому, як правило, в реальних приладах не перевищують дифузійних довжин носіїв у матеріалах які складають надгратку, тому розподіл поля об'ємного заряду іонізованих носіїв по всій ширині, на етапі розрахунків не враховувати. У четвертих, для гетерокордонів переходів $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ відмінність у постійних ґратках становить тисячні, а в багатьох випадках десятитисячні частки ангстрему і внесок деформаційного потенціалу, що виникає в місці контакту двох кристалічних решіток, в енергетичну діаграму надрешітки можна не

враховувати. Крім того, епітаксійні технології дозволяють вирощувати атомарно гладкі шари напівпровідників і напівпровідникових сполук різного хімічного складу, структурні дефекти в яких можливі лише в результаті ресорбції раніше осаджених атомів або молекул, або ж нерівномірного поверхневого розподілу осаджуваних атомів, але концентрація таких дефектів незначна і енергетична. враховано у наступних розрахунках.

Отже, енергетична діаграма надгратки, показаної на рис. 2.1 з урахуванням прийнятих припущень може бути зображена так, як це показано на рис. 2.2.

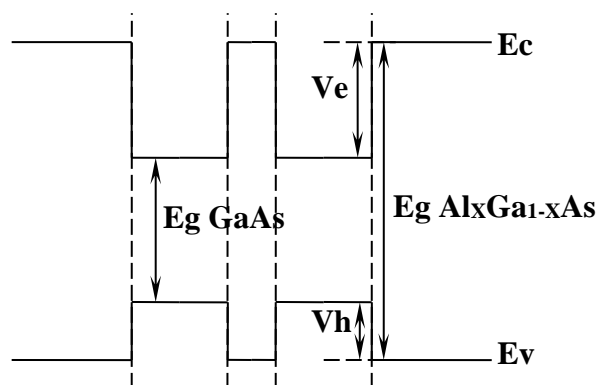


Рисунок 2.2 – Енергетична діаграма надгратки першого типу

Тут «1», «3», «5» – області обмежувальних та роздільних бар'єрів; «2» та «4» – області прямокутних квантових ям; a - напівширина квантової ями; b - напівширина роздільного бар'єру; m_1^* - ефективна маса носіїв у бар'єрах; m_2^* - ефективна маса носіїв у ямі; V - висота потенційного бар'єру. Як і у випадку одновимірної квантово-розмірної структури або об'ємного матеріалу, енергія електронів відраховується від дна зони провідності «вгору», а енергія легких і важких дірок від стелі валентної зони «вниз». Початок відліку координати Z у загальному випадку можна вибрати довільно. У цій роботі початок відліку координати « Z », перпендикулярної до площин гетеропереходів (площин квантового обмеження) обрано в центрі одного з квантово-обмежених шарів GaAs. Таким чином, завдання з визначення власних значень енергії і хвильових функцій частинок і квазічастинок (електронів, легких і важких дірок) у двошаровій надгратці зводиться до вирішення стаціонарного рівняння

Шредінгера для частинки, що рухається в області двох прямокутних квантових ям, розділених тунельно-проникним потенційним бар'єром.

КРС на рис. 2.2 є симетричною, тобто ширина квантово-обмежених шарів – GaAs і висоти зовнішніх обмежувальних та розділювального бар'єрів – AlGaAs однакові відносно осі проведеної по середині розділювального бар'єру. Сама структура відноситься до КРС першого типу тому, що квантове обмеження руху для електронів і дірок спостерігається у одному і тому самому вузкозоновому матеріалі – GaAs. Виходячи з цього енергетична діаграма задачі знаходження власних значень енергій і власних (хвильових) функцій частинок і квазічастинок може бути показана, як зображено на рис. 2.3.

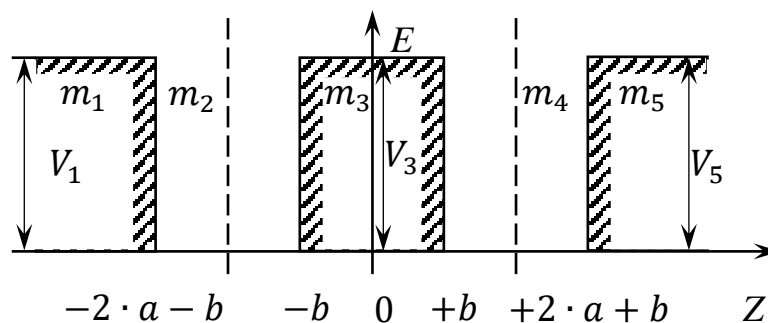


Рисунок 2.3 – Схема завдання знаходження власних значень енергій і власних значень функцій частинок і квазічастинок

2.3 Енергетичні стани частинок у багат шарових періодичних наноструктурах

Стаціонарне рівняння Шредінгера кожної області I – V (рис. 2.3) може бути записане так:

$$-\frac{\hbar^2}{2 \cdot m_1^*} \cdot \frac{\partial^2 \psi_1}{\partial z^2} + V \cdot \psi_1 = E \cdot \psi_1, \quad (2.1)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2 \cdot m_2^*} \cdot \frac{\partial^2 \psi_2}{\partial z^2} = E \cdot \psi_2, \quad (2.2)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2 \cdot m_1^*} \cdot \frac{\partial^2 \psi_3}{\partial z^2} + V \cdot \psi_3 = E \cdot \psi_3, \quad (2.3)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2 \cdot m_2^*} \cdot \frac{\partial^2 \psi_4}{\partial z^2} = E \cdot \psi_4, \quad (2.4)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2 \cdot m_1^*} \cdot \frac{\partial^2 \psi_5}{\partial z^2} + V \cdot \psi_5 = E \cdot \psi_5. \quad (2.5)$$

Після приведення рівнянь системи (2.1) - (2.5) до однорідного виду її вирішення щодо хвильових функцій частинок і квазічастинок ψ у кожній з областей з урахуванням властивостей парності функцій у кожній окремій квантовій ямі та можливої зміни або збереження знака функції при «переході» функції через бар'єр можна записати так [3]:

$$\psi^{++} = \begin{cases} B_2 \cdot \cos(k_2 \cdot a) \cdot \exp(k_1 \cdot (a + z)); & -\infty < z \leq -a \\ B_2 \cdot \cos(k_2 \cdot z); & -a < z < +a \\ B_2 \cdot \frac{\cos(k_2 \cdot a)}{\operatorname{ch}(k_1 \cdot b)} \cdot \operatorname{ch}(k_1 \cdot (z - (a + b))); & +a \leq z \leq +a + 2 \cdot b \\ B_2 \cdot \cos(k_2 \cdot (z - 2 \cdot (a + b))); & +a + 2 \cdot b < z \leq +3 \cdot a + 2 \cdot b \\ B_2 \cdot \cos(k_2 \cdot a) \cdot \exp(k_1 \cdot (3 \cdot a + 2 \cdot b - z)); & +3 \cdot a + 2 \cdot b \leq z < +\infty \end{cases} \quad (2.6)$$

$$\psi^{--} = \begin{cases} -A_2 \cdot \sin(k_2 \cdot a) \cdot \exp(k_1 \cdot (a + z)); & -\infty < z \leq -a \\ A_2 \cdot \sin(k_2 \cdot z); & -a < z < +a \\ -A_2 \cdot \frac{\sin(k_2 \cdot a)}{\operatorname{sh}(k_1 \cdot b)} \cdot \operatorname{sh}(k_1 \cdot (z - (a + b))); & +a \leq z \leq +a + 2 \cdot b \\ A_2 \cdot \sin(k_2 \cdot (z - 2 \cdot (a + b))); & +a + 2 \cdot b < z \leq +3 \cdot a + 2 \cdot b \\ A_2 \cdot \sin(k_2 \cdot a) \cdot \exp(k_1 \cdot (3 \cdot a + 2 \cdot b - z)); & +3 \cdot a + 2 \cdot b \leq z < +\infty \end{cases} \quad (2.7)$$

$$\psi^{+-} = \begin{cases} B'_2 \cdot \cos(k_2 \cdot a) \cdot \exp(k_1 \cdot (a + z)); & -\infty < z \leq -a \\ B'_2 \cdot \cos(k_2 \cdot z); & -a < z < +a \\ -B'_2 \cdot \frac{\cos(k_2 \cdot a)}{\operatorname{sh}(k_1 \cdot b)} \cdot \operatorname{sh}(k_1 \cdot (z - (a + b))); & +a \leq z \leq +a + 2 \cdot b \\ -B'_2 \cdot \cos(k_2 \cdot (z - 2 \cdot (a + b))); & +a + 2 \cdot b < z \leq +3 \cdot a + 2 \cdot b \\ -B'_2 \cdot \cos(k_2 \cdot a) \cdot \exp(k_1 \cdot (3 \cdot a + 2 \cdot b - z)); & +3 \cdot a + 2 \cdot b \leq z < +\infty \end{cases} \quad (2.8)$$

$$\psi^{-+} = \begin{cases} -A'_2 \cdot \sin(k_2 \cdot a) \cdot \exp(k_1 \cdot (a + z)); & -\infty < z \leq -a \\ A'_2 \cdot \sin(k_2 \cdot z); & -a < z < +a \\ A'_2 \cdot \frac{\sin(k_2 \cdot a)}{\operatorname{ch}(k_1 \cdot b)} \cdot \operatorname{ch}(k_1 \cdot (z - (a + b))); & +a \leq z \leq +a + 2 \cdot b \\ -A'_2 \cdot \sin(k_2 \cdot (z - 2 \cdot (a + b))); & +a + 2 \cdot b < z \leq +3 \cdot a + 2 \cdot b \\ -A'_2 \cdot \sin(k_2 \cdot a) \cdot \exp(k_1 \cdot (3 \cdot a + 2 \cdot b - z)); & +3 \cdot a + 2 \cdot b \leq z < +\infty \end{cases} \quad (2.9)$$

У виразах (2.6) - (2.9) перший знак "+" або "-" в позначенні хвильової функції, показує парність або непарність рішення, другий знак "+" - збереження знака функції при "переході" через бар'єр, знак "-" показує відповідно зміну знака хвильової функції. Постійні B_2 , A_2 , B'_2 і A'_2 можуть бути знайдені з умови нормування хвильової функції на одиницю у всьому координатному просторі розв'язку. Застосування умов нормування до рішень (2.6) – (2.9) призводить до таких виразів для невідомих коефіцієнтів:

$$B_2 = \frac{1}{\sqrt{\frac{(\cos(k_2 \cdot a))^2}{k_1} + 2 \cdot a + \frac{\sin(2 \cdot k_2 \cdot a)}{k_2} + \frac{(\cos(k_2 \cdot a))^2}{2 \cdot (\operatorname{ch}(k_1 \cdot b))^2} \cdot \left(\frac{\operatorname{sh}(2 \cdot k_1 \cdot b)}{k_1} + 2 \cdot b \right)}}, \quad (2.10)$$

$$A_2 = \frac{1}{\sqrt{\frac{(\sin(k_2 \cdot a))^2}{k_1} + 2 \cdot a - \frac{\sin(2 \cdot k_2 \cdot a)}{k_2} + \frac{(\sin(k_2 \cdot a))^2}{2 \cdot (\operatorname{sh}(k_1 \cdot b))^2} \cdot \left(\frac{\operatorname{sh}(2 \cdot k_1 \cdot b)}{k_1} - 2 \cdot b \right)}}, \quad (2.11)$$

$$B'_2 = \frac{1}{\sqrt{\frac{(\cos(k_2 \cdot a))^2}{k_1} + 2 \cdot a + \frac{\sin(2 \cdot k_2 \cdot a)}{k_2} + \frac{(\cos(k_2 \cdot a))^2}{2 \cdot (\text{sh}(k_1 \cdot b))^2} \cdot \left(\frac{\text{sh}(2 \cdot k_1 \cdot b)}{k_1} - 2 \cdot b \right)}}, \quad (2.12)$$

$$A'_2 = \frac{1}{\sqrt{\frac{(\sin(k_2 \cdot a))^2}{k_1} + 2 \cdot a - \frac{\sin(2 \cdot k_2 \cdot a)}{k_2} + \frac{(\sin(k_2 \cdot a))^2}{2 \cdot (\text{ch}(k_1 \cdot b))^2} \cdot \left(\frac{\text{sh}(2 \cdot k_1 \cdot b)}{k_1} + 2 \cdot b \right)}}. \quad (2.13)$$

Рішення для власних значень енергії частинок і квазічастинок впливають із умови безперервності хвильових функцій та їх перших похідних за координатою з урахуванням парності та зміни або збереження знака функції при переході через розділовий бар'єр. Трансцендентні рівняння для знаходження всіх можливих власних значень енергії частинок та квазічастинок для наноструктури, показаної на рис. 2.1 мають вигляд:

$$\text{tg}(k_2 \cdot a) = \frac{1}{2} \cdot \frac{k_1 \cdot m_2}{k_2 \cdot m_1} \cdot (1 + \text{th}(k_1 \cdot b)), \quad (2.14)$$

$$\text{ctg}(k_2 \cdot a) = -\frac{1}{2} \cdot \frac{k_1 \cdot m_2}{k_2 \cdot m_1} \cdot (1 + \text{cth}(k_1 \cdot b)), \quad (2.15)$$

$$\text{tg}(k_2 \cdot a) = \frac{1}{2} \cdot \frac{k_1 \cdot m_2}{k_2 \cdot m_1} \cdot (1 + \text{cth}(k_1 \cdot b)), \quad (2.16)$$

$$\text{ctg}(k_2 \cdot a) = -\frac{1}{2} \cdot \frac{k_1 \cdot m_2}{k_2 \cdot m_1} \cdot (1 + \text{th}(k_1 \cdot b)). \quad (2.17)$$

У виразах (2.14) - (2.17) $k_1^2 = \frac{2 \cdot m_1}{\hbar^2} \cdot (V - E)$, $k_2^2 = \frac{2 \cdot m_1}{\hbar^2} \cdot E$.

Вирази (2.6) - (2.17) повністю описують енергетичні стани частинок та

квазічастинок у двошаровій наноструктурі, що складається з двох одношарових симетричних квантово-розмірних структур першого типу у незбуреному (стаціонарному) стані.

2.4 Вихідні дані та результати чисельного експерименту

Матеріальні параметри арсеніду галію та алюміній-галій арсеніду, що використовуються в розрахунках, обрані згідно з даними, наведеними в [2,3]. Використовуючи обрану методику та вихідні дані, розрахунки проводилися у всьому діапазоні зміни молярної частки алюмінію. Ширина квантово-обмеженого шару - L_z змінювалася в межах від постійної кристалічної решітки GaAs до довжини хвилі де Бройля електронів у даному матеріалі. Ширина роздільного бар'єрного шару (бар'єру) L_b змінювалася від постійних кристалічних ґрат до половини ширини квантово-обмеженого шару - квантової ями (у пропорції). Результати розрахунків власних значень енергії електронів при ширині квантово-обмеженого шару - $L_z=20$ А, роздільного бар'єрного шару - $L_b=6$ А, молярної частки алюмінію в твердому розчині заміщення матеріалу бар'єра $x=0,35 - 0,75$, яка визначає висоту потенційного бару, та висоту потенційного бар'єру для важких і легких дірок у валентній зоні - $V_h = 0,448$ еВ, показані на рис. 2.4. На цьому ж рисунку для порівняння показано власні значення енергії електронів для одиночного квантово-обмеженого шару. Товстими пунктирними та штрих-пунктирними лініями показані рішення для двошарової квантово-розмірної структури, тонкими – для одношарової. На рис. 2.5 показані власні функції електронів у двошаровій наноструктурі (рис. 2.5 а) і густини розподілу ймовірності у просторі квантового обмеження (рис. 2.5 б), розраховані для стаціонарного стану, тобто за відсутності зовнішнього електричного та магнітного полів. З аналізу рис. 2.5 слідує, що потоки ймовірності розподілу частинок, проходячи через бар'єр, можуть відчувати відбиття від меж розділу «бар'єр-яма» і «яма-бар'єр» як у фазі, так і в протифазі, змінюючи свій знак (свою парність щодо середини роздільного бар'єру).

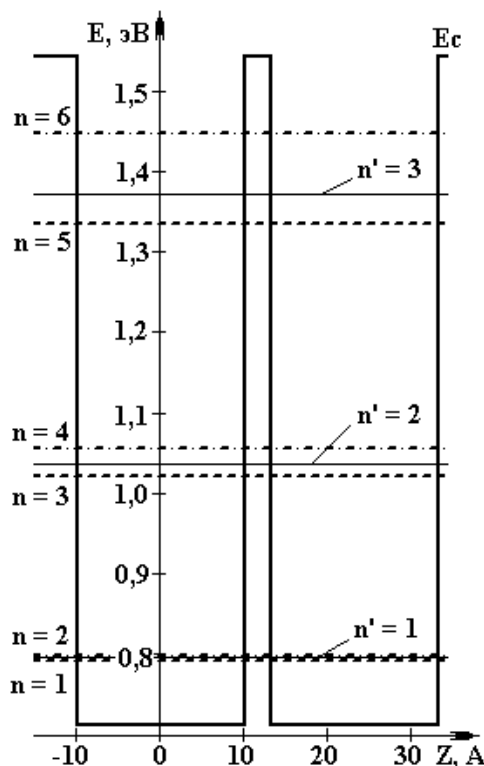


Рисунок 2.4 – Розподіл власних значень енергії частинок у двошаровій симетричній наноструктурі у порівнянні з власними значеннями одношарової КРС з аналогічними параметрами квантової ями

Подібна поведінка хвильових функцій частинок обумовлює виродження власних значень енергії частинок (подвоєння енергетичного рівня), як і показано на рис. 2.5. За результатами розрахунків з іншими енергетичними та геометричними параметрами можна стверджувати, що зі збільшенням ширини квантово-обмежених та бар'єрних шарів власні значення енергії для подвоєних рівнів зближуються, і зі збільшенням ширини квантово-обмежених та бар'єрних шарів можуть зливатися в одну лінію.

Крім описаних розрахунків у цій роботі за раніше викладеною методикою [14, 15] було досліджено вплив стаціонарного (постійного у часі) електричного поля на енергетичні стани та власні функції частинок та квазічастинок.

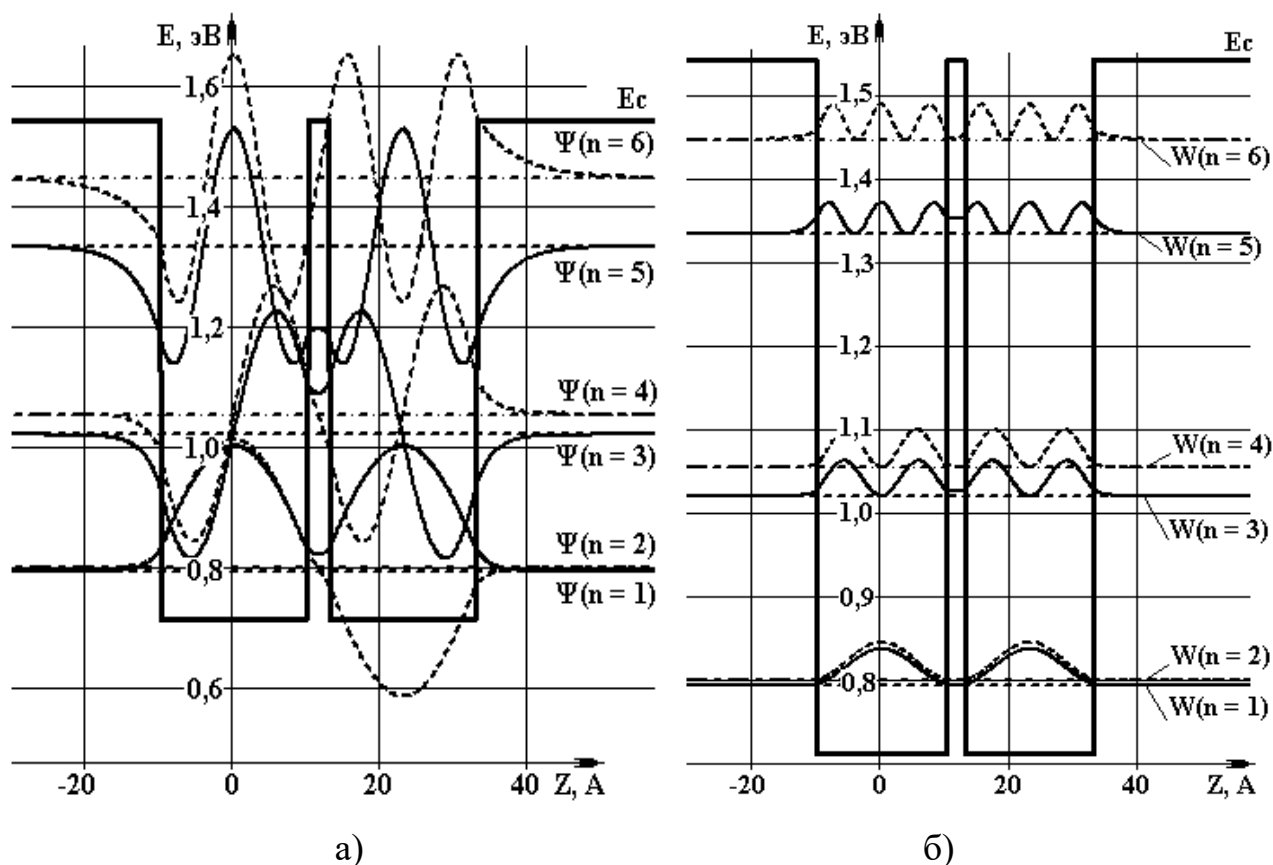


Рисунок 2.5 – Хвильові функції – (а) та вірогідності розподілу імовірності знаходження частинок з певною енергією у просторі двошарової КРС – (б)

2.5 КРС з широкими розділювальними бар'єрами

Процес квантово-механічного моделювання енергетичних станів частинок у симетричній багатошаровій структурі, наведений у підрозділах 2.2 – 2.4 є повним завершеним дослідженням. При цьому, нажаль, описаний метод не є універсальним, у тому сенсі, що він не може бути безпосередньо використаний для моделювання несиметричних структур. До таких структур можна зокрема віднести:

- багатошарові наноструктури з широкими розділювальними бар'єрами;
- багатошарові наноструктури з квантовими ямами різної «глибини»;
- багатошарові наноструктури з квантовими ямами різної «ширини»;
- багатошарові наноструктури з розділювальними бар'єрами різної «висоти».

Однак при постановці задачі моделювання таких структур необхідно брати до уваги наявність будь якої симетрії у конструкції яка моделюється. За відсутності симетрії не йдеться про сумісне рішення для окремих обмежених структур.

Дослідження симетричних двошарових структур з широким бар'єром з урахуванням однакових квантових ям можливо звести до інтерференції рішень записаних окремо для кожної з квантових ям. На рис.2.6 показано порівняння хвильових функцій, розрахованих для двошарової КРС з вузьким з вузьким 20 ангстрем та широким – 40 ангстрем бар'єрами. З аналізу діаграм, наведених на рисунку випливає, що для випадку широкого бар'єру (приблизно від третини до чверті довжини хвилі де-Бройля для електронів у алюміній-галій-арсеніді) хвильові функції частинок сусідніх квантових ям майже повністю загасають.

На рис.2.7 показано порівняння хвильових функцій, розрахованих для двошарової КРС з вузьким з вузьким 20 ангстрем та широким – 40 ангстрем бар'єрами. На відміну від попередніх даних, наведених на рис. 2.6, у даному випадку моделювання проводилося методом інтерференції хвильових функцій.

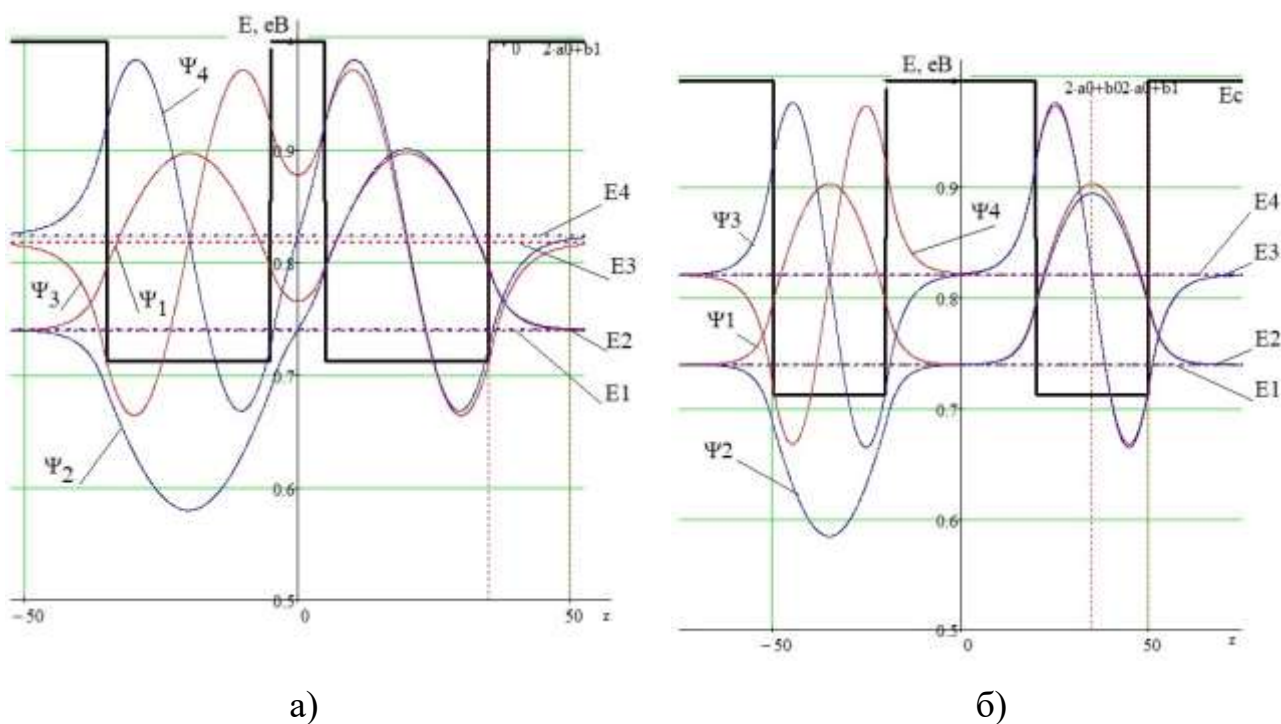


Рисунок 2.6 – Хвильові функції для КРС з вузьким 20 ангстрем – (а) та широким – 40 ангстрем – (б) бар'єрами

У даному випадку хвильові функції зі змінюваною парністю загасають, у той час як функції зі незмінною парністю зберігаються. Також зі зростанням ширини розділювального бар'єру, енергетичні рівні окремих станів все більше «збігаються» і стають нерозрізнюваними.

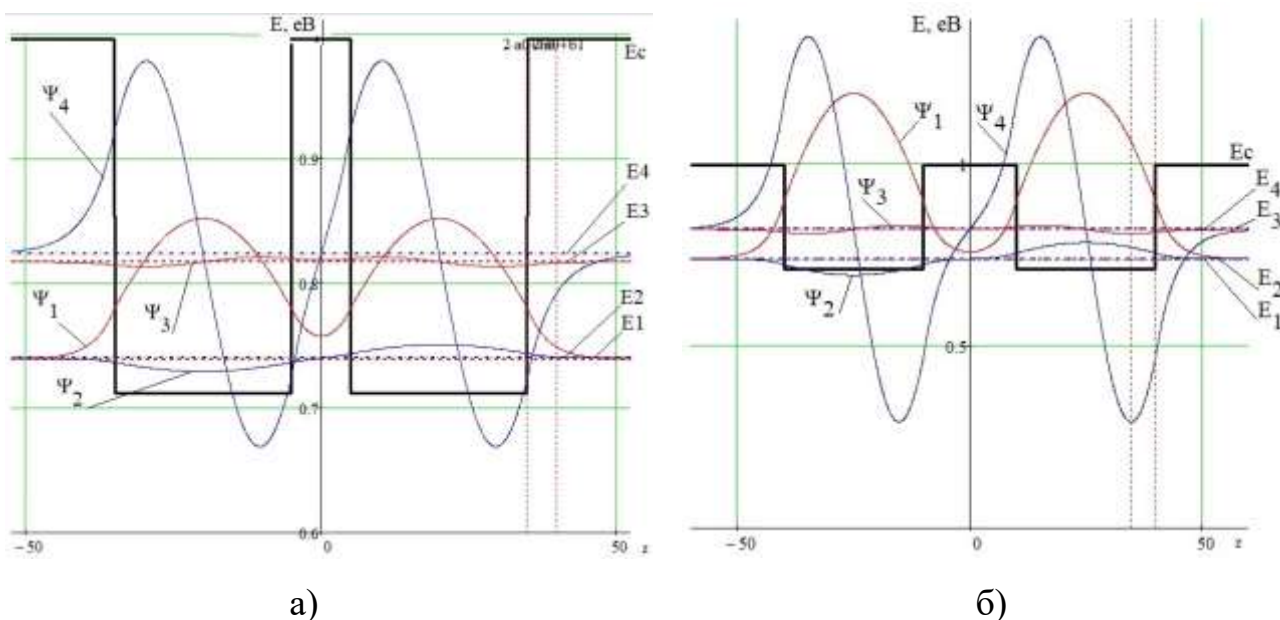


Рисунок 2.7 – Хвильові функції для КРС з вузьким 20 ангстрем – (а) та широким – 40 ангстрем – (б) бар'єрами розраховані методом інтерференції

Водночас збільшення амплітуди хвильових функцій свідчить про більшу локалізацію енергетичних станів частинок окремих квантових ям зі збільшенням ширини розділювального бар'єру і зменшенням зв'язку між ними.

ВИСНОВКИ

У цій роботі здійснено дослідження та аналіз енергетичних станів мікрочастинок в несиметричних багатошарових наноструктурах першого типу, що є найбільш важливим для розвитку сучасної мікро– та наноелектроніки. Виконані дослідження дозволили розширити відомості про квантово–механічні явища в просторово обмежених системах та вплив їх на напівпровідникові властивості пристроїв.

Основні результати дослідження включають:

- систематизовано теоретичні основи квантування енергетичних станів частинок у потенційних ямах. Окрім цього, розглянуто детально принципи формування напівпровідникових гетероструктур та багатошарових надґраток. Особливу увагу було звернено гетероструктурам першого типу, які утворюють основу для досліджуваних систем;

- розроблено та впроваджено математичну модель, призначену для опису потенційного профілю асиметричних багатошарових наноструктур, яка враховує важливі матеріальні та геометричні характеристики. Використання методу ефективної маси разом із матрицею передачі дало змогу точно обчислити енергетичні спектри та хвильові функції носіїв заряду;

- виконано чисельні обчислення та здійснено аналіз впливу геометричних параметрів (товщина шарів, кількість періодів) і матеріальних характеристик на енергетичні рівні та локалізацію хвильових функцій. Досліджено, що варіювання цих параметрів дозволяє ефективно налаштовувати енергетичний спектр даної структури;

- виконано порівняльний аналіз енергетичних станів у симетричних і несиметричних структурах. Було встановлено, що запровадження несиметричності призводить до усунення виродження енергетичних рівнів, зміщення їхніх позицій і, що є особливо важливим, до контрольованої локалізації хвильових функцій у визначених областях структури. Це створює численні

можливості для оптимізації оптичних переходів і розробки пристроїв з заданими характеристиками, наприклад, для квантових каскадних лазерів та терагерцової електроніки. Здобуті результати свідчать про те, що інженерія асиметрії виступає ефективним засобом для контролю електронних та оптичних характеристик наноструктур. Ці відомості можуть бути застосовані при створенні та вдосконаленні напівпровідникових пристроїв нового покоління з підвищеними характеристиками.

ПЕРЕЛІК ДЖЕРЕЛ ПОСИЛАННЯ

1. Кіттель Ч. Введення у фізику твердого тіла. – К.: Наука, 2010.
2. S. Adachi, J. Appl. GaAs, AlAs, and Al_xGa_{1-x}As: Material parameters for use in research and device applications .Phys. 58 (1985) R1.
3. Наноструктури та нанотехнології: навчальний посібник / О.М. Назаров, М.М. Нищенко; МОН МС України, Національний авіаційний університет. – Київ : НАУ, 2012. – 248 с.
4. Esaki L. Superlattice and Negative Differential Conductivity in Semiconductors. IBM Journal of Research and Development. 1970. No. 14. 65 p.
5. Grundmann M. The Physics of Semiconductors An Introduction Including Nanophysics and Applications. 3rd ed. Leipzig : Springer, 2006. 998 p.
6. Esaki L. Advances in semiconductor superlattices, quantum wells and heterostructures. Journal de Physique Colloques. 1984. No. 45 (C5). URL: <https://hal.science/jpa-00224109> (date of access: 04.06.2023).
7. Davies J. H. The Physics of Low-dimensional Semiconductors. Cambridge : Cambridge University Press, 1998. 451 p.
8. Поплавко Ю.М., Борисов О.В., Якименко Ю.І. Нанофізика, наноматематика, наноелектроні. Київ : Нац. техн. ун-т України "Київ. Політехн. Ін-т", 2012. 300 с.
9. Ландау Л.Д., Ліфшиць Є.М. Квантова механіка: Нерелятивістська теорія. – М.: Наука, 1989.
10. Seshan K. Handbook of Thin-film Deposition Processes and Techniques Principles, Methods, Equipment and Applications. 2nd ed. New York : Noyes Publications, 2002. 656 p.
11. Пащенко О.Г. Енергетичні стани частинок у багат шарових періодичних наноструктурах // Радіотехніка: Всеукр. міжвід. наук.-техн. зб. 2004. Вип. 136. С . 85 - 89.

12. Emmanuel Anemogiannis, Elias N. Glytsis, Tomas V. Gaylord. Quasi - Bound States Determination Using a Perturbed Wavenumbers Method in Large Quantum Box // IEEE J. Quantum Electronics 1998. Vol. 34. N 5. P. 742 - 752.

13. J.M. Luttinger, W. Kohn. Motion of Electrons and Holes in Perturbed Periodic Fields // Phys. Rev. B. 1955. Vol. 97, No 4, P. 869 - 883.

14. Пащенко О.Г. Вплив зовнішнього стаціонарного електричного поля на енергетичні стани частинок та квазічастинок у квантоворозмірній структурі. ч. 1. Постановка завдання // Радіотехніка Всеукр. міжвід. наук.-техн. зб. 2001. Вип. 117. С. 117 - 120.

15. Пащенко О.Г. Вплив зовнішнього стаціонарного електричного поля на енергетичні стани частинок та квазічастинок у квантоворозмірній структурі. ч. 2. Обговорення результатів // Радіотехніка Всеукр. міжвід. наук.-техн. зб. 2001. Вип. 118. З. 55 - 60.