

Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя
Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України

Кваліфікаційна наукова
праця на правах рукопису

Бойко Ігор Володимирович

УДК 538.913, 538.915, 538.935, 538.958, 538.971

ДИСЕРТАЦІЯ

**ТЕОРІЯ ЕЛЕКТРОННИХ ПРОЦЕСІВ ТА ВЗАЄМОДІЇ ЕЛЕКТРОНІВ З
АКУСТИЧНИМИ ФОНОНАМИ У АРСЕНІДНИХ ТА НІТРИДНИХ
НАПІВПРОВІДНИКОВИХ НАНОСТРУКТУРАХ**

01.04.02 – теоретична фізика

(104 – фізика та астрономія)

01 – фізико-математичні науки

Подається на здобуття наукового ступеня доктора фізико-математичних наук

Дисертація містить результати власних досліджень. Використання ідей, результатів і текстів інших авторів мають посилання на відповідне джерело



Ігор БОЙКО

Тернопіль – 2024

АНОТАЦІЯ

Бойко І.В. Теорія електронних процесів та взаємодії електронів з акустичними фононами у арсенідних та нітридних напівпровідникових наноструктурах.

– Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 «Теоретична фізика» (104 – Фізика та астрономія). – Інститут фізики конденсованих систем НАН України, Львів, 2024.

Дисертаційну роботу присвячено теоретичним дослідженням електронних процесів, що відбуваються у багат шарових низьковимірних наносистемах – резонансно-тунельних структурах, при урахуванні чинників різної фізичної природи, які впливають на процеси електронного тунелювання та електронні спектральні параметри. Згадані процеси можуть бути як зумовленими розмірним квантуванням у досліджувананих об'єктах, як для прикладу можливість генерації електромагнітного поля з різними частотами у електронних переходах, так і мати дисипативний характер, як наприклад електрон-фононна взаємодія.

Дослідження у дисертації здійснювались шляхом побудови теоретичних й математичних моделей фізичних процесів разом із виконанням розрахунків на їх основі з використанням різних фізичних та геометричних параметрів наносистем з подальшим аналізом та інтерпретацією отриманих результатів. Також у роботі продемонстровано розвиток методу відшукування квантово-механічних варіантів та варіаційних методів у застосуванні до тунельного транспорту в електрон-фононних системах та залежних від часу потенціалах. Основні теоретичні результати, які подано дисертаційні роботи наведено далі.

У першому розділі дисертації побудовано квантово-механічну теорію квазістаціонарних станів та електронної провідності для двох типів наносистем: а) з довільними геометричними параметрами в якій за рахунок змінної концентрації Ga в InGaAs напівпровідниковому сплаві, який виступає середовищем потенціальної ями, досягається можливість формування додаткової гармоніки з частотою, рівною подвоєній робочій частоті квантового каскадного лазера; б) для арсенідних

наноструктур з прикладеним поздовжнім постійним електричним полем за умови реалізації додаткових других гармонік з частотою відмінною від робочої частоти. Встановлено, що величина внеску двофотонних переходів у сумарній величині електронної провідності складає до 37% та виконано дослідження властивостей її парціальних складових. Встановлено, що величина внеску від складової електронної провідності сформованою додатковою гармонікою з іншою частотою у сумарній її величині електронної провідності для різних геометричних конфігурацій наноструктур з електричним полем при лазерній генерації складає до 38%. Розвинено підхід до встановлення безпосередніми розрахунками таких конфігурацій наносистем в яких реалізується можливість лазерної генерації двох однакових та двох різних частот електромагнітного поля з співмірним внеском цих частот у результуючій величині динамічної провідності. Проаналізовано перспективи застосування арсенідних та нітридних напівпровідників як функціональної бази наноприладів функціонуючих на основі механізму з двома робочими частотами.

У другому розділі дисертації розроблено квантову теорію спектральних характеристик електронних квазістаціонарних станів і динамічної провідності відкритої наноструктури з урахуванням змін просторового заряду, що виникає під час транспортування електронів через наносистему та їхньої взаємодії з електромагнітним полем. У межах моделі ефективних мас і прямокутних потенціалів отримано самоузгоджений розв'язок рівнянь Шредінгера та Пуассона для різних концентрацій електронів. На основі розвиненої теорії розраховано резонансні енергії, ширини, активну динамічну провідність та її парціальні складники в моделі відкритої резонансно-тунельної структури, яка найбільш повно відповідає активним зонам експериментально реалізованих квантових каскадних лазерів та детекторів. Встановлено, що концентрації електронів менші ніж 10^{16} см^{-3} , майже не змінюють спектральних характеристик і активної провідності за рахунок виникнення змінного просторового заряду. Показано, що значні концентрації носіїв заряду ($10^{17}-10^{18} \text{ см}^{-3}$), призводить до появи фактора, який змінює форму коефіцієнта прозорості та активної динамічної провідності з лоренцової до клиноподібної. Водночас спектральні характеристики та максимальні значення

провідностей залишаються майже незмінними. Показано, що максимумами коефіцієнта прозорості зміщуються у високоенергетичну область при цьому збільшуються часи життя електронних квазістаціонарних станів. Встановлено, що зі збільшенням концентрації електронів енергія лазерного випромінювання в квантових переходах $3 \rightarrow 2$ і $3 \rightarrow 1$ знижується, тоді як загальна активна динамічна провідність зростає. При цьому підвищується частка парціальної провідності, обумовленої потоком, що спрямований у напрямку, протилежний виходу з наносистеми. Для високих концентрацій електронів n_0 зростає вплив дисипативних явищ, викликаних просторовим динамічним зарядом. За концентрацій близько ($3 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$) спостерігається майже десятикратне збільшення часу життя електронних станів, а також посилення впливу небажаних парціальних складових динамічної провідності, зумовлених потоками електронів, спрямованими у бік, протилежний виходу з активної зони квантового каскадного лазера або детектора.

У третьому розділі дисертації розроблено теоретичний метод розрахунків енергетичних схема нітридних наноструктур із великою кількістю шарів на основі відшукування самоузгоджених аналітичних розв'язків системи рівнянь Шредінгера-Пуассона. На основі отриманих розв'язків побудовано теорію стаціонарних електронних станів, хвильових функцій та сил осциляторів квантових електронних переходів у наносистемах на основі нітридів. На основі розвиненої теорії виконано дослідження геометричних конфігурацій каскадів наноприладів близького інфрачервоного діапазону з метою виявлення таких конфігурацій, які забезпечують максимальну інтенсивність квантових електронних переходів. Встановлено, що в околі експериментально реалізованої конфігурації наноструктури найбільшою є інтенсивність квантових переходів між робочими електронними станами, що визначають робочу величину детектованої енергії. Безпосередніми розрахунками потенціальних схем наносистем та електронних спектрів, виконаними на основі розроблених теоретичних методів розрахунку виконано порівняння їхньої ефективності та варіативності використання у застосуванні до безпосередньо створених наносистем. Встановлено, що аналітичний метод має ряд переваг

порівняно з числовим, забезпечуючи більш швидку збіжність до заданої точності обчислень та його результати можуть використовуватись у подальших теоретичних дослідженнях електронних процесів у нітридних наноструктурах.

У четвертому розділі дисертації розвинено математичний апарат послідовної аналітичної теорії мод поперечних, флексуральних та ділататіональних мод акустичних фононів, виникаючих у нітридних бінарних AlN/GaN і потрійних AlGaIn/GaN багат шарових наносистемах. На базі розвиненої теорії виконано розрахунки спектру та компонент поля зміщення поперечних, флексуральних та ділататіональних типів акустичних фононів, їх залежностей від геометричних параметрів наносистем та досліджено їх властивості. Встановлено, що спектри акустичних фононів формуються в інтервалах, межі яких визначаються швидкостями поширення поперечних та поздовжніх хвиль у масивних напівпровідниках. Встановлено, що спектр акустичних фононів нітридної наноструктури складається з двох груп зміщувальних та п'яти окремих груп флексуральних та ділататіональних фононів. Встановлено особливості нормованих компонент полів зміщення для кожної з фононних груп. З використанням моделі пружного континууму на основі отриманих точних аналітичних розв'язків рівнянь руху пружного середовища багат шарової AlAs/GaAs наносистеми розвинено теорію флексуральних та ділататіональних фононів мод акустичних фононів. Виконано дослідження властивостей спектру та компонент поля зміщення, що визначаються цими типами фононів.

У п'ятому розділі дисертації побудовано аналітичну теорію взаємодії електронів з флексуральними та ділататіональними акустичними фононами у багат шарових нітридних та арсенідних наносистемах за довільних значень температури. Розвинено аналітичну теорію п'єзоелектричного ефекту, зумовленого флексуральними та ділататіональними акустичними фононами в багат шарових нітридних наноструктурах. Виконано дослідження спектру флексуральних та ділататіональних акустичних фононів за наявності п'єзоелектричного ефекту. Розвинено аналітичну теорію зсувних акустичних фононів у багат шарових нітридних наноструктурах у урахуванням створюваного ними п'єзоелектричного

ефекту. Досліджено властивості спектру та компонент поля зміщення поперечних акустичних фононів та виявлено їх особливості, що пов'язані з п'єзоелектричним ефектом. Встановлено, що взаємодія зсувних акустичних фононів з електронами можлива тільки через п'єзоелектричний потенціал. Розвинено теорію взаємодії електронів з поперечними акустичними фононами у нітридних наносистемах через п'єзоелектричний потенціал за довільних значень температури. Досліджено властивості температурних зміщень рівнів електронного спектру та їх згасань, які зумовлені даним механізмом взаємодії електронів з акустичними фононами. Розвинено теорію взаємодії електронів з флексуральними та ділататіональними в багат шарових нітридних наносистемах через механізми деформаційного та п'єзоелектричного потенціалів для довільних значень температури за наявності п'єзоелектричного ефекту. На основі розвиненої теорії виконано розрахунки та досліджено температурні зміщення енергетичних рівнів електронних станів та їх згасань, що зумовлені обома механізмами взаємодії та встановлено їхні закономірності й особливості. Встановлено, що теплові зміщення рівнів електронного спектру, які зумовлені взаємодією електронів з акустичними фононами через деформаційний потенціал при температурах 77K і 300 K набувають як від'ємних так і додатніх значень, а при цьому теплові зміщення рівнів електронного спектру, що зумовлені взаємодією електронів з акустичними фононами через п'єзоелектричний потенціал набувають лише від'ємних значень. При цьому абсолютні величини зміщень для електронних рівнів та їх згасання зростають із збільшенням температури в кілька разів, що приводить до суттєвого перенормування смуги поглинання.

У шостому розділі дисертації розвинено варіаційний метод для рівняння Шредінгера, з використанням якого виконано теоретичні дослідження квазістаціонарних станів електронів разом з підсистемою акустичних фононів та розвинена квантова тунельного транспорту електронів в плоских нітридних наноструктурах з урахуванням підсистеми акустичних фононів за довільних значень температури. Встановлено, що вплив підсистеми акустичних фононів зумовлює температурне збільшення частот квантових переходів та резонансних ширин

електронних квазістаціонарних станів та збільшує величину напруженості електричного поля необхідну для досягнення пікового значення тунельного струму. Шляхом застосування методу Льюїса-Різенфілда до залежного від часу рівняння Шредінгера розвинено теорію електронного тунельного транспорту у відкритій багат шаровій наноструктурі в кожній з квантових ям якої є можливою генерація електромагнітних хвиль з різними амплітудами. Встановлено, що при фіксованих значеннях амплітуд електричної складової електромагнітного поля розраховані залежності коефіцієнта прозорості для значень часу, що менші за час релаксації поводять себе так: зменшується величина максимуму коефіцієнта прозорості, значення резонансної енергії залишається незмінним, значення резонансної ширини зменшується. Встановлено, що для значень часу близьких до часу релаксації та більших від нього у залежностях коефіцієнта прозорості з'являються осциляції які приводять до неможливості однозначного визначення спектральних характеристик квазістаціонарного стану і його фактичного руйнування. Розвинено теорію тунельного транспорту електронів крізь відкриту багат шарову наносистему за умов наявності впливу постійного внутрішнього електричного поля, постійного магнітного поля спрямованого перпендикулярно до напрямку руху електронів й з урахуванням взаємодії тунельованих електронів із змінним електромагнітним полем. Для цього розглянуто повне рівняння Шредінгера з залежним від часу потенціалом. Розв'язки цього рівняння з отримано шляхом модифікації методу Льюїса-Різенфілда разом з представленням хвильової функції у вигляді характерному для теорії розсіювання. Використання граничних умов для хвильової функції та потоку її ймовірності на межах шарів наносистеми дозволило однозначно визначити електронну хвильову функцію та S - матрицю з полюсів якою визначався електронний квазістаціонарний спектр – резонансні енергії та ширини.. Встановлено, що зі збільшенням величини індукції магнітного поля, значення енергій електронних рівнів також зростають, формуючи антикросінги між сусідніми енергетичними рівнями. Положення цих антикросінгів із наближенням величини моменту часу t до значення відповідному часу релаксації τ_{rel} зміщуються в шкалі значень індукції магнітного поля вліво, частина цих антикросінгів взагалі зникає

при $t \geq \tau_{tel}$. Як результат це дозволяє застосовувати магнітне поле, для зміни енергії квантових переходів між електронними рівнями, а також змінювати ширини смуг поглинання та випромінювання в функціонуючих наноприладах.

У цьому розділі дисертації розроблено послідовну аналітичну теорію взаємодії екситонів з акустичними фононами в плоских напівпровідникових нітридних наносистемах. Ця теорія враховує обидва можливі випадки орієнтації кристалічної решітки нітридних напівпровідникових наносистем - типу вюрциту і типу цинкової обманки відповідно, і також може бути застосована для відмінних від нуля температур. З використанням моделі ефективних мас електрона та дірки досліджено екситонні стани та отримано екситонний гамільтоніан у поданні вторинного квантування. Виконавши розрахунок масових операторів та застосувавши метод температурних функцій Гріна разом з рівнянням Дайсона, було вирішено завдання перенормування спектру екситонів для отримання характеристик цього спектра – температурних зміщень та згасань. Отримано вирази для функції форми смуги поглинання екситона та усередненої за шарами наносистеми перенормованої ефективної маси екситона. Встановлено, що рівні енергії електронів та дірок та енергії електронно-діркових переходів у разі наносистеми з ґраткою типу вюрциту дещо переважають аналогічні величини для наносистеми типу цинкової обманки. Встановлено, що деформаційний і п'єзоелектричний потенціали мають негативний знак, але у разі вюрцитної наносистеми ці потенціали є одного порядку, тоді як для наносистеми цинкової обманки деформаційний потенціал значно перевищує п'єзоелектричний потенціал, будучи в цьому випадку визначальним фактором, що визначає екситон-фононну взаємодію. Показано, що температурні зміщення спектру екситонів, розраховані залежно від геометричної конфігурації наносистем, мають негативний знак, а абсолютні значення зміщень мають явну тенденцію до зростання їх абсолютних значень при збільшенні розрахункових значень температури. Аналогічним чином встановлено факт температурного зростання згасань екситонних станів із ростом температури. Виявлено, що значення температурних зміщень і згасань для тих самих екситонних станів у разі наносистеми вюрциту домінують над тими ж значеннями для наносистеми цинкової обманки. Аналізуючи

функції форми смуги поглинання, розраховану для температур від 50К до 300К, було встановлено, що вплив акустичних фононів пригнічує електронно-діркові переходи, і цей ефект більш виражений для вюрцитних наносистем. Виявлено, що величина перенормованої ефективної маси екситона збільшується за рахунок взаємодії з акустичними фононами для всіх розрахункових температур, причому величина такого збільшення становить до 8% у разі вюрцитної наносистеми та до 5% у разі наносистеми типу цинкової обманки.

Ключові слова: електронний тунельний транспорт, резонансно-тунельні структури, багаточастотна генерація електромагнітного поля, динамічний заряд, акустичні фонони, електрон-фононна взаємодія, деформаційний потенціал, п'єзоелектричний потенціал, квантомеханічні інваріанти, метод Льюїса-Різенфілда, екситон-фононна взаємодія.

ABSTRACT

Boyko I.V. Theory of electronic processes and interaction of electrons with acoustic phonons in arsenide and nitride semiconductor nanostructures.

– Qualifying scientific work on the rights of the manuscript.

Thesis for the degree of Doctor of Sciences in Physics and Mathematics in specialization 01.04.02 «Theoretical Physics» (104 – Physics and Astronomy). – Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine, Lviv, 2024.

The thesis focuses on theoretical investigations of electronic processes within multilayer low-dimensional nanosystems exhibiting plane symmetry, particularly in resonant tunnel structures. It considers various physical factors influencing electron tunneling processes and electronic spectral parameters. These factors may arise from size quantization in the studied objects, leading to phenomena like the generation of an electromagnetic field with different frequencies during electronic transitions. Additionally, they may possess dissipative characteristics, such as electron-phonon interaction.

The dissertation research was carried out by constructing theoretical and mathematical models of physical processes, along with performing calculations based on them using various physical and geometric parameters of nanosystems, followed by analysis and interpretation of the obtained results. Also, the dissertation work demonstrated the development of methods for constructing quantum mechanical variants and variational methods in their application to tunnel transport in electron-phonon systems and time-dependent potentials. The main theoretical results presented in the dissertation work are given below.

In the first section of the dissertation, a quantum mechanical theory of quasi-stationary states and electronic conductivity is constructed for two types of nanosystems: a) with arbitrary geometric parameters in which, due to the variable concentration of Ga in the InGaAs semiconductor alloy, which acts as a medium for the potential well, the possibility of forming an additional harmonic equal to twice the operating frequency of a quantum

cascade laser; b) for arsenide nanostructures with an applied longitudinal constant electric field with the generation of additional second harmonics with a frequency different from the operating frequency. It has been established that the contribution of two-photon transitions to the total value of electronic conductivity is up to 37%, and the properties of its partial components have been studied. It has been established that the contribution from the component of electronic conductivity formed by an additional harmonic with a different frequency to its total value of electronic conductivity for geometric configurations of various nanostructures with an electric field during laser generation is up to 38%. An approach has been developed to establish, by direct calculations, such configurations of nanosystems in which the possibility of laser generation of two identical or two different frequencies of an electromagnetic field with a commensurate contribution of these frequencies to the resulting value of dynamic conductivity is realized. The prospects for the use of arsenide and nitride semiconductors as the functional basis of functioning nanodevices based on a mechanism with two operating frequencies are analyzed.

In the second section of the dissertation, a quantum theory of the spectral parameters of electronic quasi-stationary states and the dynamic conductivity of an open nanostructure is developed, taking into account the variable space charge that arises during the transport of electrons through the nanosystem and their interaction with the electromagnetic field. For this purpose, a self-consistent solution to the Schrödinger and Poisson equations at various electron concentrations was found in the model of effective masses and rectangular potentials. Based on the developed theory, the resonant energies, widths, active dynamic conductivity, and its partial components were calculated in the model of an open resonant tunnel structure, which most fully corresponds to the active zones of experimentally implemented quantum cascade lasers and detectors. It has been established that electron concentrations less than 10^{16} cm^{-3} almost do not change the spectral characteristics and active conductivity due to the appearance of an alternating space charge. It is shown that significant concentrations of charge carriers (10^{17} - 10^{18} cm^{-3}) lead to the appearance of a space charge, which, with its potential, deforms the shape of the

transparency coefficient and active dynamic conductivity from Lorentzian to wedge-shaped, but its influence on the spectrum is weak. It is shown that the maxima of the transparency coefficient shift to the high-energy region, while the lifetimes of electronic quasi-stationary states increase. It has been established that with increasing electron concentration, the energy of laser radiation in quantum transitions $3 \rightarrow 2$ and $3 \rightarrow 1$ decreases, and the total value of active dynamic conductivity increases so that the contribution of the partial component of conductivity, determined by the flow directed opposite to the exit from the nanosystem, increases. It has been established that for significant electron concentrations n_0 , the influence of dissipative processes caused by a dynamic space charge increases. For high concentrations ($3 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$), an increase of almost an order of magnitude in the lifetime of the electron quasi-stationary states and an increase in the role of harmful partial components of dynamic conductivity, determined by electron flows directed opposite to the exit from the active zone of a quantum cascade laser or detector, are obtained.

In the third section of the dissertation, a theoretical method for calculating potential profiles of multilayer nitride nanostructures is developed based on finding self-consistent analytical solutions to the Schrödinger-Poisson system of equations. Based on the obtained solutions, a theory of stationary electronic states, wave functions, and oscillator strengths of quantum electronic transitions in nitride nanosystems has been developed. Based on the developed theory, a study of the geometric configurations of cascades of nanodevices in the near-infrared range was carried out in order to identify those configurations, that provide the maximum intensity of quantum electronic transitions. It has been established that in the vicinity of the experimentally realized nanostructure configuration, the intensity of quantum transitions between working electronic states, which determine the working value of the detected energy, is greatest. Direct calculations of potential schemes of nanosystems and electronic spectra, performed on the basis of developed theoretical calculation methods, compared their effectiveness and variability of use in the application to directly created nanosystems. It has been established that the analytical method has a number of advantages over the numerical one, providing faster matching of the given

calculation accuracy, and its results can be used in further theoretical studies of electronic processes in nitride nanostructures.

In the fourth section of the dissertation, the mathematical apparatus of a consistent analytical theory of shear, flexural, and dilatational modes of acoustic phonons arising in nitride binary AlN/GaN and ternary AlGa_xN/GaN multilayer nanosystems is developed. On the basis of the developed theory, calculations of the spectrum and components of the displacement field of shear, flexural, and dilatational types of acoustic phonons, their dependence on the geometric parameters of nanosystems were carried out, and their properties were investigated. It has been established that the spectra of acoustic phonons are formed in intervals, the boundaries of which are determined by the speed of propagation of transverse and longitudinal waves in bulk semiconductors. It has been established that the spectrum of acoustic phonons of the nitride nanostructure consists of two displacement groups and five separate groups of flexural and dilatational phonons. The features of the normalized components of the displacement fields for each of the phonon groups have been established. Using the elastic continuum model and based on the obtained exact analytical solutions of the equations of motion of the elastic medium of a multilayer AlAs_x/GaAs_{1-x} nanosystem, the theory of flexural and dilatational phonons of acoustic phonon modes has been developed. The properties of the spectrum and the components of the displacement field determined by these types of phonons have been studied.

In the fifth section of the dissertation, an analytical theory of the interaction of electrons with flexural and dilatational acoustic phonons in multilayer nitride and arsenide nanosystems for arbitrary temperature values is constructed. An analytical theory of the piezoelectric effect caused by flexural and dilatational acoustic phonons in multilayer nitride nanostructures has been developed. The spectrum of bending and stretching acoustic phonons in the presence of the piezoelectric effect has been studied. An analytical theory of shear acoustic phonons in multilayer nitride nanostructures has been developed, taking into account the piezoelectric effect they create. The properties of the spectrum and components of the displacement field of transverse acoustic phonons were studied, and

their features associated with the piezoelectric effect were revealed. It has been established that the interaction of shear acoustic phonons with electrons is possible only through the piezoelectric potential. A theory has been developed for the interaction of electrons with transverse acoustic phonons in nitride nanosystems through the piezoelectric potential at arbitrary temperatures. The properties of temperature shifts of the levels of the electronic spectrum and their attenuation, which are caused by this mechanism of interaction of electrons with acoustic phonons, have been studied. A theory has been developed for the interaction of electrons with flexural and dilatational electrons in multilayer nitride nanosystems through the mechanisms of deformation and piezoelectric potentials for arbitrary temperature values in the presence of the piezoelectric effect. Based on the developed theory, calculations were performed, and the temperature shifts of energy levels of electronic states and their decay rates, caused by both interaction mechanisms, were studied, and their patterns and features were established. It has been established that the temperature shifts of the levels of the electronic spectrum, which are caused by the interaction of electrons with acoustic phonons through the deformation potential at temperatures of 77 K and 300 K, acquire both negative and positive values, and at the same time, the temperature shifts of the levels of the electronic spectrum, caused by the interaction of electrons with phonons through the piezoelectric potential, acquire only negative values. In this case, the absolute values of the shifts for electronic levels and their decay rates increase several times with increasing temperature, which leads to a significant renormalization of the absorption band.

In the sixth section of the dissertation, a variational method for the Schrödinger equation is developed, using which theoretical studies of quasi-stationary states of electrons together with a subsystem of acoustic phonons have been carried out, and quantum tunneling transport of electrons in flat nitride nanostructures has been developed, taking into account the acoustic subsystem. It has been established that the influence of the acoustic phonon subsystem causes an increase in temperature in the frequencies of quantum transitions and resonant widths of electronic quasi-stationary states and increases the magnitude of the electric field strength necessary to achieve the peak value of the

tunnel current. By applying the Lewis-Riesenfeld method to the time-dependent Schrödinger equation, a theory of electron tunneling transport in an open multilayer nanostructure is developed in each of the quantum wells, of which the generation of electromagnetic waves with different amplitudes is possible. It has been established that for fixed values of the amplitudes of the electric component of the electromagnetic field, the dependences of the transparency coefficient for values of time are calculated; as relaxation time decreases, the maximum value of the transparency coefficient decreases, the value of the resonant energy remains unchanged, and the value of the resonant width decreases. It has been established that for time values close to and greater than the relaxation time, depending on the transparency coefficient, oscillations appear, which lead to the impossibility of unambiguously determining the spectral characteristics of the quasi-stationary state and its actual destruction. A theory has been developed for the tunneling transport of electrons through an open multilayer nanosystem in the presence of the influence of a constant internal electric field, a constant magnetic field directed perpendicular to the direction of electron motion, and taking into account the interaction of tunneled electrons with an alternating electromagnetic field. For this purpose, the complete Schrödinger equation with a time-dependent potential is considered. The solution to this equation was obtained by modifying the Lewis-Riesenfeld method together with the representation of the wave function in the form characteristic of scattering theory. The use of boundary conditions for the wave function and its probability flow at the boundaries of the layers of the nanosystem made it possible to unambiguously determine the electronic wave function and the S-matrix from which the electronic quasi-stationary spectrum - resonant energies and widths - was determined. electronic levels also increase, forming anticrossings between neighboring energy levels. The positions of these anticrossings, as the time instant t approaches the value of the corresponding relaxation time τ_{rel} , shift to the left in the scale of magnetic field induction values; some of these anticrossings disappear altogether at $t \geq \tau_{rel}$. As a result, this makes it possible to use a magnetic field to change the energy of quantum transitions between electronic levels, as well as to change the widths of absorption and emission bands in functioning nanodevices.

In the seventh section of the dissertation, a consistent analytical theory of the interaction of excitons with acoustic phonons in planar semiconductor nitride nanosystems is developed. This theory takes into account both possible cases of orientation of the crystal lattice of nitride semiconductor nanosystems - the wurtzite type and the zinc blende type, respectively, and is also applicable for non-zero temperatures. Using the model of effective masses of an electron and a hole, exciton states are studied, and the exciton Hamiltonian in the secondary quantization representation is obtained. By calculating the mass operators and applying the Green's temperature function method together with the Dyson equation, the problem of renormalizing the exciton spectrum was solved to obtain the characteristics of this spectrum - temperature shifts and decay rates. Expressions are obtained for the exciton basic band shape functions and the renormalized effective exciton mass averaged over the layers of the nanosystem. It has been established that the energy levels of electrons and holes and the energy of electron-hole transitions for a nanosystem with a wurtzite-type lattice are somewhat higher than those for a nanosystem like zinc blende. It has been established that the deformation and piezoelectric potentials have a negative sign, but in the case of a wurtzite nanosystem, these potentials are of the same order, while for a zinc blende nanosystem, the deformation potential significantly exceeds the piezoelectric potential, being in this case the main factor, that determines the exciton-phonon interaction. It is shown that the temperature shifts of the exciton spectrum, calculated depending on the geometric configuration of nanosystems, have a negative sign, and the absolute values of the shifts have a clear tendency to increase with increasing calculated temperature values. Similarly, the increase in the decay rates of exciton states with increasing temperature was established. It has been revealed that the values of temperature shifts and decay rates for the same exciton states in the case of a wurtzite nanosystem dominate over the same values for a zinc blende nanosystem. Analyzing the absorption band shape functions calculated for temperatures from 50K to 300K, it was found that the influence of acoustic phonons suppresses electron-hole transitions, and this effect is more pronounced for wurtzite nanosystems. It was revealed that the value of the renormalized effective mass of the exciton increases due to interaction with acoustic

phonons for all calculated temperatures, and the magnitude of this increase is up to 8% for a wurtzite-type nanosystem and up to 5% for a zinc blende-type nanosystem.

Keywords: electron tunneling transport, resonant-tunneling structures, multi-frequency electromagnetic field generation, dynamic charge, acoustic phonons, electron-phonon interaction, deformation potential, piezoelectric potential, quantum-mechanical invariants, Lewis-Riesenfeld method, exciton-phonon interaction.

**СПИСОК НАУКОВИХ ПРАЦЬ ЗДОБУВАЧА, В ЯКИХ ОПУБЛІКОВАНО
ОСНОВНІ НАУКОВІ РЕЗУЛЬТАТИ ДИСЕРТАЦІЇ**

- 1*. Ткач М. В., Сеті Ю. О., **Бойко І. В.**, Гринишин Ю. Б.. Взаємодія електронів з обмеженими фононами у багат шаровій резонансно-тунельній структурі // *Фіз. хім. тверд. тіла.* - 2014. - Т. 15, № 1. - С. 20-28. [категорія «А»]
- 2*. **Boyko I. V.**, Grynshyn Yu. B., Seti Ju. O., Tkach M. V. The influence of static and dynamic spatial charges on electronic active conductivity of three-barrier resonant tunneling structures // *J. Phys. Stud.* 2014. Vol. 18, No. 4. P. 4702-1 – 4702-10 [Scopus, SCImago Q4]
- 3*. Ткач М. В., Сеті Ю. О., **Бойко І.В.**, Паньків М.В. Роль двофотонних електронних переходів у роботі квантових лазерів // *Сенсор. електрон. мікросистем. технології*, 2014. -Т. 111, № 4. - С. 9-17. [категорія «Б»]
- 4*. Сеті Ю. О., **Бойко І. В.**, Паньків М. В. Теорія динамічної провідності трибар'єрної резонансно-тунельної структури з двофотонними лазерними переходами // *Фіз. хім. тверд. тіла.* 2015. - Т. 16, № 1. - С. 7-13. [категорія «А»]
- 5*. Gryschuk A. M., **Boiko I. V.** Influence of dimensional static and dynamic charges on conduction in the active zone of a quantum cascade laser // *Semicond. phys. quantum electron. optoelectron.* 2015. Vol. 18, No. 2. P. 123-127. [Web of Science, категорія «А»]
- 6*. **Boyko I. V.**, Petryk M. R., Tsupryk H. B. Contribution of two-photon detector electronic transitions in the formation of dynamic conductivity of three-barrier resonant tunneling structures // *J. Nano- Electron. Phys.* 2015. Vol. 7 No. 4, P. 04078 [Scopus, SCImago Q3]
- 7*. **Boyko I.V.** Role of Two-Photon Electronic Transitions in the Formation of Active Dynamic Conductivity in a Three-Barrier Resonance Tunneling Structure with an Applied DC Electric Field // *Ukr. J. Phys.* 2016. Vol. 61, No.1. P. 66-74 [Scopus, SCImago Q2]

- 8*. **Boyko I. V.**, Gryshuk A. M. The Spectrum of Transverse Acoustic Phonons in Planar Multilayer Semiconductor Nanostructures // *J. Nano- Electron. Phys.* 2016. Vol. 8 No. 4, P. 04001 [Scopus, SCImago Q3]
- 9*. **Бойко І. В.**, Гришук А. М. Вплив статичного та динамічного просторових зарядів на спектральні параметри та активну динамічну провідність резонансно-тунельних структур з постійним електричним полем // *Фіз. хім. тверд. тіла.* 2016. - Т. 17, № 1. - С. 21-30. [категорія «А»]
- 10*. **Boyko I. V.**, Tkach M. V., Seti Ju. O. Self-Consistent Calculation of Potential Profile of GaN/AlN Resonance Tunnelling Structures // *Phys. Chem. Solid St.*, 2017. Vol. 18, No. 3. P. 288-296 [Web of Science, категорія «А»]
- 11*. **Boyko I. V.**, Petryk M. R. Influence of the Space Charge on Tunneling of Electrons and Their Conductivity by the Resonance Tunneling Structures in the Constant Electric Field // *J. Nano- Electron. Phys.* 2017. Vol. 9, No 3, P. 03030 [Scopus, SCImago Q3]
- 12*. **Boyko I. V.** Anisotropic wurtzite resonance tunneling structures: stationary spectrum of electron and oscillator strengths of quantum transitions // *J. Phys. Stud.*, 2018. Vol. 22, No 1. P. 1701 [Scopus, SCImago Q4]
- 13*. **Boyko I. V.** Analytical method for calculation of the potential profiles of nitride-based resonance tunneling structures // *Condens. Matter Phys.* 2018. Vol. 21, No. 4, P. 43701 [Scopus, SCImago Q3, IF=1.095]
- 14*. **Boyko I. V.**, Petryk M. R. Shear Acoustic Phonons in Multilayer Arsenide Semiconductor Nanostructures // *J. Nano- Electron. Phys.* 2019. Vol. 11, No 1. P.01019 [Scopus, SCImago Q3]
- 15*. **Boyko I.V.**, Petryk M.R., Fraissard J. Spectrum and normalized modes of acoustic phonons in multilayer nitride-based nanostructure // *Eur. Phys. J. B.* 2020. Vol. 93, No. 3. P. 57 [Scopus, SCImago Q2, IF=1.440]
- 16*. **Boyko I.V.**, Petryk M.R., Fraissard J. Acoustic phonons in multilayer nitride-based AlN/GaN resonant tunneling structures // *Nano Express.* 2020. Vol. 1 No 1. P. 010009 [Scopus]

- 17*. **Boyko I. V.** and Petryk M. R. Electron scattering on acoustic phonons in plane semiconductor GaN/AlN nanostructures // *Proc. SPIE 11369, Fourteenth International Conference on Correlation Optics*, 1136915 (6 February 2020); ISSN 0277786X [Scopus]
- 18*. **Boyko I. V.**, Petryk M. R. Interaction of electrons with acoustic phonons in AlN/GaN resonant tunnelling nanostructures at different temperatures // *Condens. Matter Phys.* 2020. Vol. 23, No. 3. P. 33708 [Scopus, SCImago Q3, IF=0.581]
- 19*. **Boyko I. V.**, Petryk M. R. Electron-acoustic Phonon Interaction in AlAs/GaAlAs Resonance Tunneling Nanostructures // *J. Nano- Electron. Phys.* 2020. Vol. 12, No 6, P. 06030 [Scopus, SCImago Q3]
- 20*. **Boyko I. V.**, Petryk M. R., Fraissard J. Theory of the shear acoustic phonons spectrum and their interaction with electrons due to the piezoelectric potential in AlN/GaN nanostructures of plane symmetry // *Low Temp. Phys.* 2021. Vol. 47, No. 2. P. 159-172 [Scopus, SCImago Q3, IF=0.825]
- 21*. **Boyko I.**, Petryk M., Fraissard J. Investigation of the electron-acoustic phonon interaction via the deformation and piezoelectric potentials in AlN/GaN resonant tunneling nanostructures // *Superlattices Microstruct.* 2021. Vol. 156, No. 8. P. 106928 [Scopus, SCImago Q2, IF=2.658]
- 22*. **Boyko I.**, Petryk M. Tunneling transport in open nitride resonant tunneling structures taking into account the acoustic phonons: An variational approach // *Physica B Condens. Matter.* 2022. Vol. 636, No. 1. P. 413862 [Scopus, SCImago Q2, IF=2.988]
- 23*. **Boyko I.**, Petryk M. and Mykhailyshyn R. Excitons in resonant tunnelling structures based on AlN/GaN/AlN/AlGaIn/AlN nitride: spectral dependences and intensities of interband optical transitions // *Ukr. J. Phys. Opt.* 2022. Vol. 23, No. 3. P. 180 – 191 [Scopus, SCImago Q3, IF=3.9]
- 24*. **Boyko I.** Exciton-phonon interaction in planar nitride nanostructures: The case of acoustic phonons // *Phys. Rev. B.* 2023. Vol. 108, No. 7. P. 075403 [Scopus, SCImago Q1, IF=3.7]

- 25*. **Boyko I.**, Petryk M., Lebovka N. Application of the Lewis-Riesenfeld quantum mechanical invariant method for description of electron tunneling transport in nitride multilayer quantum well nanostructures // *Phys. Lett. A*. 2023. Vol. 489, P. 129152 [Scopus, SCImago Q2, IF=2.6]
- 26*. **Boyko I.**, Petryk M., Lebovka N. Tunnel transport problem for open multilayer nitride nanostructures with an applied constant magnetic field and time-dependent potential: An exact solution // *Phys. Rev. B*. 2024. Vol. 110, No. 4. P. 045438 [Scopus, SCImago Q1, IF=3.2]

СПИСОК НАУКОВИХ ПРАЦЬ ЗДОБУВАЧА ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ, ЯКІ ЗАСВІДЧУЮТЬ АПРОБАЦІЮ МАТЕРІАЛІВ ДИСЕРТАЦІЇ

1. **Бойко І. В.**, Ткач М. В., Сеті Ю. О. Електрон-фононна взаємодія у багатошарових резонансно-тунельних структурах // VI Українська наукова конференція з фізики напівпровідників, Чернівці, Україна, 30 вересня – 4 жовтня 2013 р.:Тези доповідей. С. 66–67.
2. Ткач М. В., Сеті Ю. О., **Бойко І. В.**, Паньків М. В. Роль двофотонних електронних переходів у роботі квантових каскадних лазерів // 6-а Міжнародна науково-технічна конференція “Сенсорна електроніка та мікросистемні технології”, Одеса, Україна, 28 вересня – 3 жовтня 2014 р.:Тези доповідей. С. І-14.
3. **Бойко І. В.**, Грищук А. М. Вплив просторового статичного та динамічного заряду на провідність активної зони квантового каскадного лазера // «Лашкарівські читання - 2015» Конференція молодих вчених з фізики напівпровідників з міжнародною участю, Київ, Україна, 1-3 квітня 2015 р.:Збірник тез. С. 32.
4. Грищук А. М., Грищук В. В., **Бойко І. В.** Спектр поперечних акустичних фононів у плоских багатошарових напівпровідникових наноструктурах // «Лашкарівські читання - 2016» Конференція молодих вчених з фізики напівпровідників з міжнародною участю, Київ, Україна, 6-8 квітня 2016 р.:Збірник тез. С. 23-24.

5. **Бойко І. В.** Теорія двофотонної лазерної генерації у плоских напівпровідникових резонансно-тунельних структурах у поздовжньому електричному полі // XIX Наукова конференція Тернопільського національного технічного університету імені Івана Пулюя, Тернопіль, Україна, 18-19 травня 2016 р.:Збірник тез. С. 186-187.
6. **Бойко І. В.** Самоузгоджений розрахунок потенціального профілю AlN/GaN наноструктур // XX Наукова конференція Тернопільського національного технічного університету імені Івана Пулюя, Тернопіль, Україна, 17-18 травня 2017 р.:Збірник тез. С. 183-184.
7. **Boyko I., Petryk M.** An Analytical Approach to the Calculation of the Spectral Characteristics of an Electron in Nitride Nanostructures // 2018 IEEE 8th International Conference on Nanomaterials: Applications & Properties (NAP – 2018), September 9-14, 2018. Zatoka, Ukraine: Book of Abstracts. P. 03TFNMC17.
8. **Бойко І. В.** Теоретичний підхід до розрахунку потенціальних профілів каскадів нітридних квантових каскадних детекторів // «Лашкарьовські читання - 2018» Конференція молодих вчених з фізики напівпровідників з міжнародною участю, Київ, Україна, 4-6 квітня 2018 р.:Збірник тез. С. 69-70.
9. **Бойко І. В.** Електронний спектр та сили осциляторів квантових переходів у нітридних резонансно-тунельних структурах // VIII Українська наукова конференція з фізики напівпровідників, Ужгород, Україна, 2-4 жовтня 2018 р.:Тези доповідей. С. 182–183.
10. **Boyko I., Tsupryk H., Kinakh I., Stoianov Y., Byts T.** Mathematical Modeling of the Acoustic Phonons Spectra Arising in Multilayer Nanostructures // 2019 9th International Conference on Advanced Computer Information Technologies (ACIT), June 5-7, 2019. Ceske Budejovice, Czech Republic: Conference proceedings. P. 17-20. [Scopus]
11. **Boyko I. V., Petryk M. R. Zayats V. B.** The theory of the interaction of electrons with acoustic phonons in AlN / GaN nanostructures at T=0 K // 7th International Conference "Nanotechnologies and Nanomaterials" NANO-2019, August 27-30, 2019. Lviv, Ukraine: Conference proceedings. P. 555.

12. **Boyko I.**, Tsupryk H., Kinakh I., Stoianov Y. Simulation of Energy Schemes and Electron Spectrum in Plane Nitride Semiconductor Nanostructures // 2019 XIth International Scientific and Practical Conference on Electronics and Information Technologies (ELIT), September 16-18, 2019. Lviv, Ukraine: Conference proceedings. P. 227-231. [Scopus]
13. **Boyko I.**, Tsupryk H., Stoianov Y. Shear Acoustic Phonons in AlN/GaN Nanostructures in the Presence of Piezoelectric Effect // 2020 IEEE 10th International Conference Nanomaterials: Applications & Properties (NAP), November 09-13, 2020. Sumy, Ukraine: Conference proceedings. P. 02TM01-1-02TM01-4. [Scopus]
14. **Boyko I.**, Petryk M., Tsupryk H., Mudryk I., Stoianov Y. A Piezoelectric Properties and Electron-Phonon Interaction in Semiconductor Arsenide GaAs/AlAs Nanosystems of Plane Symmetry // 2022 IEEE 12th International Conference Nanomaterials: Applications & Properties (NAP), September 11-16, 2022. Krakow, Poland: Conference proceedings. P. 1-5. [Scopus]
15. **Boyko I.**, Tsupryk H., Stoianov Y., Grygorchuk G. Petryk M. A Theoretical Model of Thermal Conductivity for Multilayer Nitride-based Nanosystems // 2022 IEEE 41st International Conference on Electronics and Nanotechnology (ELNANO), October 10-14, 2022. Kyiv, Ukraine: Conference proceedings. P. 111-114. [Scopus]
16. **Boyko I.** Mathematical Model of Tunneling Transport in Nanosystems with the Influence of Optical Phonons // 2023 13th International Conference on Advanced Computer Information Technologies (ACIT), September 21-23, 2023. Wroclaw, Poland: Conference proceedings. P. 182-186. [Scopus]

ЗМІСТ

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ СКРОЧЕНЬ	30
ВСТУП	31
РОЗДІЛ 1. ТЕОРІЯ ЛАЗЕРНОЇ ГЕНЕРАЦІЇ ТА ДЕТЕКТУВАННЯ ДВОЧАСТОТНИХ ЕЛЕКТРОМАГНІТНИХ ХВИЛЬ У ВІДКРИТИХ ПЛОСКИХ НАПІВПРОВІДНИКОВИХ НАНОСТРУКТУРАХ	48
1.1. Теоретичні основи лазерної генерації та детектування двочастотних електромагнітних хвиль багатошаровими резонансно-тунельними наноструктурами.....	48
1.2. Теорія активної динамічної провідності двоямної РТС у випадку двофотонного електронного переходу	50
1.3. Властивості динамічної провідності наносистем в яких реалізуються можливості двофотонної лазерної генерації. Критерії отримання геометричних конфігурацій наносистем в яких є можливими двофотонні кванторові переходи з однаковими частотами	60
1.4. Теорія активної динамічної провідності багатошарових наносистем к робочих елементів квантового каскадного лазера у випадку двофотонного електронного переходу з різними частотами електромагнітного поля	65
1.5. Властивості динамічної провідності наносистем в яких реалізуються можливості двофотонної лазерної генерації з різними частотам. Аналіз теоретичної моделі двоколірного квантового каскадного лазера	81
Висновки до розділу 1	90
РОЗДІЛ 2. ТЕОРІЯ ГЕНЕРАЦІЇ ТА ДЕТЕКТУВАННЯ ЕЛЕКТРОМАГНІТНОГО ПОЛЯ В АРСЕНІДНИХ ПЛОСКИХ НАПІВПРОВІДНИКОВИХ СТРУКТУРАХ З УРАХУВАННЯМ ВПЛИВУ ПРОСТОРОВОГО ЗАРЯДУ	91
2.1. Теорія впливу просторового заряду на електронні процеси у напівпровідникових наноструктурах.....	91
2.2. Теорія складових просторового заряду, виникаючого при резонансному тунелюванні крізь відкриті резонансно-тунельні структури	94

2.3.1. Теорія спектральних параметрів та активної динамічної провідності електронів взаємодіючих з полями статичного та динамічного просторових зарядів	100
2.3.2. Застосування теорії електронного тунельного транспорту та спектральних параметрів електронів взаємодіючих з змінним електромагнітним полем та урахуванням впливу полів статичного та динамічного просторових зарядів для наноструктур з прикладеним постійним електричним полем	108
2.4. Властивості спектральних параметрів та активної динамічної провідності електронів взаємодіючих з полем просторового заряду у випадку детекторних електронних переходів	110
2.5. Властивості спектральних параметрів та активної динамічної провідності електронів взаємодіючих з полем просторового заряду у випадку лазерних електронних переходів	131
Висновки до розділу 2	137
РОЗДІЛ 3. ТЕОРІЯ СТАЦІОНАРНИХ ЕЛЕКТРОННИХ СТАНІВ У БАГАТОШАРОВИХ НАНОСТРУКТУРАХ НА ОСНОВІ НІТРИДНИХ НАПІВПРОВІДНИКІВ. ТЕОРЕТИЧНІ ОСНОВИ ТА МЕТОДИ РОЗРАХУНКУ ПОТЕНЦІАЛЬНИХ ПРОФІЛІВ НІТРИДНИХ НАНОСИСТЕМ	139
3.1. Теорія стаціонарних електронних станів у нітридних наноструктурах. Проблеми розрахунку потенціальних профілів наносистем та електронного спектру	139
3.2. Теорія ефективного потенціалу нітридних наноструктур, складові ефективного потенціалу. Постановка проблеми. Метод відшукування розв'язків системи самоузгоджених рівнянь Шредінгера і Пуассона, що заснований на апроксимації складових ефективного потенціалу	141
3.3. Розрахунки та аналіз потенціальних профілів нітридних наноструктур. Властивості стаціонарного електронного спектру та сил осциляторів квантових електронних переходів	159

3.4. Теорія аналітичного методу розрахунку потенціальних профілів нітридних наносистем. Підхід до відшукування аналітичних розв'язків системи рівнянь Шредінгера та Пуассона	163
3.5. Потенціальні профілі нітридних наносистем у двох різних теоретичних моделях. Порівняння застосовності та встановлення ступеня універсальності методів. Електронний спектр та сили осциляторів квантових переходів	173
Висновки до розділу 3	179

РОЗДІЛ 4. ТЕОРІЯ АКУСТИЧНИХ ФОНОНІВ У БАГАТОШАРОВИХ НІТРИДНИХ AlGaN/GaN РЕЗОНАСНО-ТУНЕЛЬНИХ СТРУКТУРАХ.....

4.1. Теорія спектру та нормалізованих мод акустичних фононів у багатошарових AlGaN/GaN наноструктурах. Точні аналітичні вирази для компонент зміщення напівпровідникового середовища асоційовані з акустичними фононами	183
4.2. Властивості спектрів різних типів акустичних фононів виникаючих у плоских нітридних наносистемах та компонент поля зміщення пов'язаних з акустичними фононами.....	197
4.3. Теорія спектру та мод акустичних фононів у багатошарових наноструктурах на основі арсенідних напівпровідникових сполук. Точні аналітичні вирази для компонент зміщення напівпровідникового середовища асоційовані з зсувними та ділататійно-флексуральними модами акустичних фононів	209
4.3.1. Теорія спектру та мод зсувних акустичних фононів в багатошарових арсенідних наносистемах	209
4.3.2. Властивості спектру зсувних акустичних фононів у багатошарових арсенідних наносистемах	213
4.3.3. Теорія спектру та мод флексурально-ділататіональних мод акустичних фононів в багатошарових арсенідних наносистемах	216
4.3.4. Властивості спектру зсувних флексурально-ділататіональних мод акустичних фононів у багатошарових арсенідних наносистемах	223
Висновки до розділу 4.....	226

РОЗДІЛ 5. ТЕОРІЯ ТА МЕХАНІЗМИ ВЗАЄМОДІЇ ЕЛЕКТРОНІВ З АКУСТИЧНИМИ ФОНОНАМИ ЧЕРЕЗ ПЕЗОЛЕКТРИЧНИЙ ТА

ДЕФОРМАЦІЙНИЙ ПОТЕНЦІАЛИ. ТЕОРІЯ П'ЄЗОЕЛЕКТРИЧНОГО ЕФЕКТУ СТВОРЮВАНОВОГО АКУСТИЧНИМИ ФОНОНАМИ У НІТРИДНИХ НАНОСИСТЕМАХ.....227

- 5.1. Теорія взаємодії електронів з акустичними фононами в плоских нітридних наносистемах при $T \neq 0K$ через механізм деформаційного потенціалу.....227
- 5.2. Властивості взаємодії електронів з акустичними фононами при різних значеннях температури. Температурні залежності зміщень рівнів електронного спектру та їх згасань, що зумовлені електрон-фононою взаємодією.....240
- 5.3. Теорія взаємодії електронів з зсувними акустичними фононами через механізм п'єзоелектричного потенціалу. Вплив п'єзоелектричного ефекту на спектр акустичних фононів нітридних наносистем.....249
- 5.4. Властивості взаємодії електронів із зсувними акустичними фононами при різних значеннях температури. Температурні залежності зміщень рівнів електронного спектру та їх згасань, що зумовлені електрон-фононою взаємодією через механізм п'єзоелектричного потенціалу.....261
- 5.5. Теорія електрон-фононої взаємодії через механізми деформаційного та п'єзоелектричного потенціалів за наявності п'єзоелектричного ефекту – загальний випадок.....269
- 5.6. Спектр флексуально-ділататіональних мод акустичних фононів за наявності п'єзоелектричного ефекту. Властивості електрон-фононої взаємодії через деформаційний та п'єзоелектричний потенціали наявності п'єзоелектричного ефекту при різних значеннях температури.....290
- Висновки до розділу 5.....304

РОЗДІЛ 6. ТЕОРІЯ ТУНЕЛЬНОГО ТРАСПОРТУ У СИСТЕМАХ ЕЛЕКТРОННИХ КВАЗІСТАЦІОНАРНИХ СТАНІВ З АКУСТИЧНИМИ ФОНОНАМИ ТА МУЛЬТИЧАСТОТНИМИ ЕЛЕКТРОМАГНІТНИМИ ПОЛЯМИ.....306

- 6.1. Теорія системи квазістаціонарних електронних станів разом з акустичними фононами при збереженні балістичного режиму тунелювання. Теорія

варіаційного методу для відкритих плоских наносистем з довільним ефективним потенціалом.....306

6.2. Вплив акустичних фононів на спектральні характеристики електронних квазістаціонарних станів у відкритих нітридних наносистемах при різних температурах. Імплементация розвинуеного варіаційного методу.....319

6.3. Теорія електронного тунельного транспорту в багатошарових нітридних системах при незалежній генерації електромагнітних хвиль у всіх квантових ямах. Класи точних розв'язків повного рівняння Шредінгера для залежного від часу електронного гамільтоніана.....328

6.4. Властивості спектральних параметрів електрона в багатошарових нітридних системах за умови незалежної генерації електромагнітних хвиль у всіх квантових ямах.....343

6.5. Теорія тунелювання електронів взаємодіючих із залежним від часу електромагнітним полем у плоских наносистемах при наявності постійних електричного та магнітного полів: точний підхід до розв'язанні задачі для повного рівняння Шредінгера.....348

6.5.1. Гамільтоніан електрона взаємодіючого із змінним електромагнітним полем при наявності постійного електричного та магнітного полів всередині наносистеми. Повне рівняння Шредінгера.....350

6.6. Властивості спектральних параметрів та електронної провідності наносистем з прикладеним магнітним полем у різних часових режимах тунелювання.....379

Висновки до розділу 6.....387

РОЗДІЛ 7. ТЕОРІЯ ЕКСИТОНІВ У БАГАТОШАРОВИХ НІТРИДНИХ НАНОСИСТЕМАХ ТА ПЕРЕНОРМУВАННЯ ЇХ СПЕКТРУ ЗА РАХУНОК ВЗАЄМОДІЇ З АКУСТИЧНИМИ ФОНОНАМИ ПРИ РІЗНИХ ТЕМПАТУРАХ.....391

7.1. Теорія екситонних станів у багатошарових нітридних наноструктурах. Електронні, діркові та екситонні спектри у випадку напівпровідників з кристалічною решіткою типу вюрциту та типу цинкової обманки.....393

7.2. Спектр акустичних фононів двоямної наноструктури. Деформаційний та п'єзоелектричний потенціали акустичних фононів у випадку напівпровідників з кристалічною структурою типу вюрциту та цинкової обманки.....	398
7.3. Гамільтоніан екситон-фононної системи. Перенормування спектру екситона взаємодією з акустичними фононами. Скорельована ефективна маса для екситона.....	409
7.4. Властивості екситонних спектрів та характеристик взаємодії екситонів з акустичними фононами у багатошарових нітридних наноструктурах.	413
Висновки до розділу 7.....	425
ВИСНОВКИ.....	428
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ.....	438
ПОДЯКИ.....	468
ДОДАТОК А.....	469
СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ЗДОБУВАЧА ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ.....	469
ТЕЗИ ДОПОВІДЕЙ НА НАУКОВИХ КОНФЕРЕНЦІЯХ.....	472

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ СКРОЧЕНЬ

КСС — квазістаціонарний стан

ККЛ — квантовий каскадний лазер

ККД — квантовий каскадний детектор

РТС — резонансно-тунельна структура

ВСТУП

Обґрунтування вибору теми дослідження. Народження квантової механіки у 20-их роках ХХ століття дало значний пошук у теоретичному дослідженні фізичних явищ, що знаходяться у повному протиріччі з постулатами класичної механіки Ньютона, а також не можуть бути передбаченими на основі її положень та законів. До таких явищ слід зокрема віднести явище фотоелектричного ефекту, ефекту Джозефсона та явища тунелювання в напівпровідниках та надпровідниках. Саме явище електронного тунелювання є містком між класичними задачами квантової теорії з дослідження електронних станів у квантових потенціальних ямах і теоретичною основою сучасної електроніки, функціональну базу якої становлять нанорозмірні структури різної симетрії (квантові точки, квантові дроти, квантові диски, плоскі резонансно-тунельні структури).

Загалом можна виділити три знакові етапи розвитку теорії низьковимірних систем з подальшим впровадженням наукових результатів у розвиток електроніки:

- від теоретичного передбачення тунельного ефекту у працях Хунда, Гамова та Борна до його експериментально виявлення Лео Есакі в 1958 році. Дане відкриття привело спочатку до створення резонансно-тунельних діодів (діодів Есакі) та в подальшому до генераторів та детекторів високочастотних сигналів;
- з кінця 70-их років ХХ століття до початку ХХІ століття пріоритетними напрямками в теорії фізики наноструктур були дослідження електронних явищ, спектрів оптичних фононів, екситонного спектру, особливостей електрон-фононної та екситон-фононної взаємодії спочатку на базі закритих моделей резонансно-тунельних діодів, а далі наносистем сферичної та циліндричної симетрій з невеликою кількістю потенціальних ям (зазвичай це є наноструктури з одною чи двома потенціальними ямами), що виконувались науковою групою теоретиків Дж. Т. Девріза та Ф. Пітерса. Чітко прослідковується перехід від застосування для виготовлення наноструктур напівпровідників на основі германію (Ge) до використання напівпровідників на базі подвійних та потрійних сполук арсеніду галію (GaAs, GaAlAs, InAlAs

та ін.). В поєднанні з теоретичними результатами це все дало поштовх до практичної реалізації напівпровідникових лазерів на основі рекомбінації електронно-діркових пар.

- теоретичні моделі лазерів, що ґрунтуються на застосуванні електронних переходів між квазістаціонарними енергетичними рівнями утвореним розмірним квантуванням, що були запропоновані у 70-их роках Р. Казаріновим та Р. Сурісом були успішно реалізованими експериментально групою Ж. Фейста та Ф. Капассо в роботі ККЛ та ККД. Це стало можливим, зокрема, завдяки застосуванню методу молекулярно-променевої епітаксії, що дозволило створювати багат шарові РТС, високоточно задаючи розміри їх потенціальних ям та бар'єрів.

Сучасний стан теорії електронного транспорту та супутніх фізичних явищ, що відбуваються в РТС, відповідні наукові напрями, є спрямованими на встановлення умов, що забезпечують оптимальне функціонування ККЛ та ККД та вивчення чинників впливу на тунельовані крізь каскади РТС електронні потоки. Слід зауважити, що оскільки значна частина сучасних ККЛ та ККД створена на основі арсенідних напівпровідникових сполук ефективно працює лише у вузькому діапазоні електромагнітних хвиль (здебільшого це наноприлади терагерцового діапазону), а також для такої роботи наноприладів є необхідним забезпечення їх охолодження до криогенних температур. Експериментальним чином було виявлено факт можливості генерації додаткових гармонік іншої частоти разом із робочою гармонікою у каскадах ККЛ з прикладеним електричним полем, проте ґрунтовно пояснення цього явища не було виконано. Тому актуальна теоретична проблема, що полягає у вивченні закономірностей генерації додаткової другої гармоніки у ККЛ у залежності від їх геометричного дизайну та впливу зовнішніх полів, що дає ключ до можливостей оптимізації робочих характеристик наноприладів за рахунок збільшення величини генерованого тунельного струму. Безпосередньо в дисертації ця задача розв'язується шляхом дослідження електронних КСС та відносного внеску від генерованої додаткової гармоніки у сумарну величину активної динамічної провідності.

Необхідність розширити робочий діапазон ККЛ і ККД експериментально була вирішена за рахунок переходу до використання в якості для матеріалів для їх каскадів нітридів III групи. До переваг цих напівпровідникових матеріалів однозначно слід віднести їх значну температурну стабільність, високу оптичну активність та можливість широко варіювати генерованою чи детектованою частотою геометричними параметрами активних зон наноприладів. Проте фактично відразу виник чималий ряд важливих теоретичних проблем:

- зокрема широке варіювання температури при роботі ККЛ і ККД зумовлює необхідність розробки ефективних методів розрахунку потенціальних профілів РТС, що є їхніми робочими елементами. Така теоретична проблема потребує відшукування самоузгоджених розв'язків системи рівнянь Шредінгера та Пуассона з урахуванням впливу просторових статичного та динамічного зарядів, що формуються у наноструктурах тунельованим електронами у виникаючих квазістаціонарних станах з скінченим часом життя, а також акцепторними домішками з якими леговані їх шари. Крім того має бути з'ясовано фізична суть впливу згаданих факторів, а також спонтанної та п'єзоелектричної поляризації в діапазоні температур: від криогенної до кімнатної;
- теорія акустичних фононів у багатошарових РТС як на базі як арсенідних так і нітридних напівпровідників є повністю відсутньою, причому в силу анізотропних властивостей останніх така теорія має будуватись у різних підходах. У цьому напрямку до недавнього часу були відсутніми навіть віддалено близькі праці: дослідними обмежувались розрахунками спектрів акустичних фононів для квантових точок, дротів. Для плоских наносистем розглядались лише моделі одноямних наноструктур, причому для спрощення приймалось, що компоненти тензора напружень, зумовленого для матеріалу шарів наноструктури рівні нулю. Отримані рівняння для пружного зміщення розв'язувались лише чисельно, при цьому фактично постулювалась не можливість отримання їх точних розв'язків. Усе це спричинило ламінарний потік одноманітних робіт, результати, отримані в яких фактично не мають ні

теоретичної, ні практичної цінності в силу застосованих спрощених моделей і методів з відповідно не можуть бути базою для подальшого розвитку теорії. Можна виділити хіба що спроби дослідження в рамках згаданої моделі температурної провідності окремих напівпровідникових плівок;

- послідовна теорія взаємодії електронів з різними типами акустичних фононів через деформаційний потенціал як при тривіальному випадку нульової температури, так і при її ненульових значеннях повністю відсутня. Аналогічно також повністю відсутня теорія взаємодії електронів з акустичними фононами через п'єзоелектричний потенціал, що є особливо важливо для нітридів, які демонструють виражений п'єзоелектричний ефект;
- послідовна теорія, що описує тунелювання електронів крізь плоскі РТС з урахування впливу акустичних фононів відсутня. Актуальність такої розробки такої теорії зумовлена необхідністю дослідження впливу акустичних фононів на спектральні параметри квазістаціонарних станів тунельованих електронів, а також безпосередньо на тунельний струм й електронну провідність;
- теорія екситонних спектрів та їх взаємодії з акустичними фононами при різних температурах, яка дала б змогу дослідити міжзонні електронно-діркові переходи відсутня.

Таким чином розробка послідовної аналітичної теорії акустичних фононів та механізмів їх взаємодії з квазічастинками у плоских багаточарових РТС разом із розв'язанням задач генерації додаткових гармонік у ККЛ й впливу просторового статичних та динамічних зарядів є безумовно актуальною і важливою для розвитку теоретичної фізики напівпровідникових наноструктур. Дані задачі відповідно до постановки розглянутих вище проблем в розширеному й детальному вигляді безпосередньо вирішуються в дисертаційній роботі.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами, грантами.

Дисертаційну роботу виконано у Тернопільському національному технічному університеті імені Івана Пулюя. Результати, які викладено наукових працях, опублікованих на під час виконання досліджень, отримані в результаті виконання таких держбюджетних тем: “Квантова теорія електронного тунелювання крізь

анізотропні резонансно-тунельні наноструктури” (№ держреєстрації 0117U001151), “Моделювання тепломасопереносу та адсорбції вуглеводнів в нанопористих цеолітних каталізаторах систем нейтралізації відпрацьованих газів” (№ держреєстрації 0116U004744), “Високопродуктивні суперкомп’ютерні технології ідентифікації нейро-біо- та нанопористих систем з когнітивними і зворотніми зв’язками ”(№ держреєстрації 0119U001324), “Методи та високопродуктивні технології математичного моделювання і функціональної ідентифікації складних багатокомпонентних систем і процесів (нанопористі і нанорозмірні структури, об’єкти безпечної енергетики, когнітивні системи)” (№ держреєстрації 0122U001979). Автор дисертації є представником наукової школи кафедри теоретичної фізики Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича, заснованої доктором фізико-математичних наук, професором Ткачем Миколою Васильовичем - її багаторічним завідувачем та науковим вчителем здобувача.

У межах вказаної наукової тематики автором дисертації з використанням відомих методів теоретичної фізики (трансфер-матриці, метод функцій Гріна, функції розподілу ймовірності, мацубарівських температурних функцій, коефіцієнта прозорості) та самостійно розвинених теоретичних методів (аналітичного методу для системи рівнянь Шредінгера-Пуассона, варіаційного методу для проходження хвилі) виконано дослідження спектру та компонент поля зміщення акустичних фононів в багат шарових РТС, а також механізмів їх взаємодії з електронами та екситонами при відмінних від нуля температурах; впливу акустичних фононів, просторових зарядів на квазістаціонарні стани, тунельний струм та електронну провідність наноструктур.

Мета і завдання дослідження. Безпосередньою метою дисертаційної роботи є розробка аналітичної теорії акустичних фононів, виникаючих у плоских багат шарових арсенідних та нітридних РТС та дослідження спектрів різних типів цих фононів та відповідних їх компонент пружного зміщення середовища нано-РТС. Побудова теорії розрахунку потенціальних профілів нітридних РТС на базі самоузгоджених розв’язків системи рівнянь Шредінгера-Пуассона, дослідження

стаціонарного електронного спектру та хвильових функцій таких наносистем. Розробка теорії квазістаціонарних електронних станів, тунельного струму та електронної провідності відкритих РТС з урахуванням внеску акустичних фононів. Розробка теорії електронної провідності РТС з урахуванням можливості генерації чи детектування додаткових гармонік, та дослідження внеску цих гармонік у сумарну величину провідності. Розробка послідовної аналітичної теорії взаємодії квазічастинок (електронів, екситонів) з акустичними фононами у плоских арсенідних та нітридних напівпровідникових РТС, а також встановлення і дослідження механізмів такої взаємодії.

Забезпечення ефективного виконання поставленої мети у дисертації здійснюється шляхом виконання наступних необхідних *завдань*:

- Побудувати квантово-механічну теорію квазістаціонарних станів та електронної провідності відкритої РТС з довільними геометричними параметрами в якій за рахунок змінної концентрації Ga в InGaAs напівпровідниковому сплаві, який виступає середовищем потенціальної ями, досягається можливість формування додаткової гармоніки з частотою, рівною подвоєній робочій частоті ККЛ. Дослідити внесок двофотонних переходів у сумарній величині електронної провідності.
- Побудувати квантово-механічну теорію квазістаціонарних станів та електронної провідності багатошарових РТС з прикладеним поздовжнім постійним електричним полем за умови реалізації додаткових других гармонік з частотою відмінною від робочої частоти ККЛ чи ККД та окремо дослідити випадок відсутності електричного поля. Дослідити величину внеску від складової електронної провідності сформованою додатковою гармонікою сумарній величині електронної провідності.
- Розробити квантову теорію електронних КСС та електронної провідності багатошарових РТС з урахування внесків утворюваного в наноструктурі носіями зарядів просторових статичного та динамічного зарядів. Дослідити вплив вхідної концентрації електронів на формування статичного та

динамічного просторових зарядів та їх вплив спектральні параметри електронних КСС.

- Побудувати метод розрахунку потенціальних профілів нітридних РТС на основі розв'язання системи рівнянь Шредінгера та Пуассона при апроксимації складових електронного гамільтоніана.
- Побудувати метод розрахунку потенціальних профілів багат шарових нітридних РТС на основі відшукування самоузгоджених аналітичних розв'язків системи рівнянь Шредінгера-Пуассона. На основі отриманих розв'язків побудувати електронну теорію стаціонарних електронних станів, хвильових функцій та сил осциляторів квантових електронних переходів у нітридних РТС. З використанням розвиненої теорії дослідити геометричні конфігурації каскадів ККД близького інфрачервоного діапазону з метою виявлення таких, які забезпечують максимальну інтенсивність квантових електронних переходів.
- Безпосередніми розрахунками, виконаними на основі розвинутих методів розрахунку потенціальних схем РТС порівняти їхню ефективність та варіативність і універсальність застосування.
- Побудувати теорію електронного транспорту в багат шарових наносистемах на основі нітридів з урахування можливості квантових переходів у всіх квантових ямах наноструктур. Необхідна теорія має описувати електронні стани в наносистемі в довільні моменти часу.
- З використанням моделі пружного континууму розвинути теорію мод поперечних акустичних фононів у багат шарових AlAs/GaAs РТС. Дослідити властивості спектру та компонент поля зміщення зумовленого поперечними акустичними фононами на прикладів двоямної РТС.
- З використанням моделі пружного континууму на основі отриманих точних аналітичних розв'язків рівнянь руху пружного середовища багат шарової AlAs/GaAs РТС розвинути теорію флексуральних та ділататіональних мод акустичних фононів. Дослідити властивості спектру та компонент поля зміщення, що визначаються цими типами фононів.

- Розвинути теорію взаємодії електронів з флексуральними та ділататіональними акустичними фононами у багатошарових арсенідних РТС за довільних значень температури.
- Розвинути теорію мод поперечних акустичних фононів, виникаючих у нітридних бінарних AlN/GaN і потрійних AlGaN/GaN багатошарових РТС. Виконати розрахунки спектру та компонент поля зміщення поперечних акустичних фононів, їх залежностей від геометричних параметрів РТС та дослідити їх властивості.
- Побудувати аналітичну теорію мод флексуральних та ділататіональних мод акустичних фононів, які виникають у нітридних бінарних AlN/GaN і потрійних AlGaN/GaN багатошарових РТС. Виконати розрахунки спектру та компонент поля зміщення флексуральних та ділататіональних мод акустичних фононів, їх залежностей від геометричних параметрів РТС та дослідити їх властивості.
- Розвинути аналітичну теорію взаємодії електронів із флексуральними та ділататіональними акустичними фононами через створюваний ними деформаційний потенціал в AlGaN/GaN багатошарових РТС при відмінних від нуля температурах. Дослідити властивості температурних зміщень рівнів електронного спектру та їх згасань. Виконати перенормування спектру електронів їх взаємодією з акустичними фононами.
- Розвинути аналітичну теорію зсувних акустичних фононів у багатошарових нітридних РТС у урахуванням створюваного ними п'єзоелектричного ефекту. Дослідити властивості спектру та компонент поля зміщення поперечних акустичних фононів та виявити їх особливості, що пов'язані з п'єзоелектричним ефектом.
- Розвинути теорію взаємодії електронів з поперечними акустичними фононами у нітридних РТС через п'єзоелектричний потенціал у багатошарових нітридних РТС за довільних значень температури. Дослідити властивості температурних зміщень рівнів електронного спектру та їх згасань, які зумовлені даним механізмом взаємодії електронів з акустичними фононами.

- Розвинути аналітичну теорію п'єзоелектричного ефекту, зумовленого флексуральними та ділататіональними акустичними фононами в багат шарових нітридних РТС. Дослідити властивості спектру флексуральних та ділататіональних акустичних фононів за наявності п'єзоелектричного ефекту, а також компонент поля зміщення цих фононів.
- Побудувати теорію взаємодії електронів з флексуральними та ділататіональними акустичними фононами в багат шарових нітридних РТС через деформаційний та п'єзоелектричний потенціали для довільних значень температури за наявності п'єзоелектричного ефекту. На основі розвиненої теорії виконати розрахунки та дослідити температурні зміщення енергетичних рівнів електронних станів та їх згасань зумовлені обома механізмами взаємодії та встановити їхні закономірності й особливості.
- Розвинути теорію електронних КСС, електронної провідності та тунельного струму для відкритих нітридних РТС з урахуванням внеску акустичних фононів. Дослідити вплив акустичних фононів на резонансні енергії та ширини електронних КСС, а також на формування тунельного струму та електронної провідності багат шарових РТС.
- Розвинути теорію екситонних станів у багат шарових нітридних AlN/AlGaN РТС з урахуванням внеску внутрішніх полів. Дослідити екситонний спектр, функції зв'язку та інтенсивність міжпідзонних переходів.
- Розвинути послідовну теорію взаємодії екситонів з поперечними, флексуральними та ділататіональними акустичними фононами у багат шарових нітридних AlN/GaN РТС при довільних температурах. Дослідити вплив різних типів акустичних фононів на перенормування екситонного спектру та інтенсивність міжпідзонних електронно-діркових переходів.

Об'єктом дослідження є низьковимірні системи (активні зони, інжектори та екстрактори) ККЛ та ККД, що за своєю природою є плоскими РТС створеними на базі арседіних напівпровідників GaAs/AlGaAs та нітридних напівпровідників GaN/AlGaN з кристалічною ґраткою типу вюрциту.

Предметом дослідження є електронні стаціонарні та квазістаціонарні стани в арсенідних та нітридних РТС та їх безпосередні спектральні характеристики перенормовані впливом зовнішніх та внутрішніх полів, дисипативних факторів. Спектри різних типів акустичних фононів, виникаючих у арсенідних та нітридних напівпровідникових РТС, як наслідок анізотропії їх фізичних властивостей.

Методи дослідження. Теорія електронних КСС та електронної провідності багатошарових РТС з урахуванням двофотонних переходів, а також з урахуванням просторових статичного та динамічного зарядів будувалася за допомогою прямих точних та наближених квантово-механічних методів для відшукування аналітичних розв'язків повного рівняння Шредінгера. Безпосередньо застосовувалось наближення слабкого сигналу, метод нестационарної теорії збурень. Спектральні характеристики електронних КСС в РТС розраховувались за допомогою методів коефіцієнта прозорості та розподілу густини ймовірності.

Теорія стаціонарних електронних станів та їх спектру в нітридних РТС будувалася шляхом знаходження точних розв'язків стаціонарного рівняння Шредінгера, енергетичні схеми РТС розраховувались за допомогою розробленого дисертантом аналітичного методу.

Теорія електронних квазістаціонарних станів у нітридних наносистемах з урахуванням довільної кількості квантових переходів у квантових ямах будувалась на основі запропонованої модифікації методу Льюїса-Різенфілда шляхом відшукування квантово-механічних інваріантів для електронної системи.

Теорія екситонних станів у нітридних РТС розроблялась з використанням варіаційного та ітеративного методів для стаціонарного рівняння Шредінгера.

Теорія акустичних фононів виникаючих в багатошарових РТС будувалася шляхом знаходження точних аналітичних розв'язків рівнянь, що описують пружне зміщення шаруватого середовища наносистеми з застосуванням методу трансфер-матриці. Теорія взаємодії електронів та екситонів з акустичними фононами була розвинута з використанням методу мацубарівських функцій Гріна.

Достовірність теоретично отриманих результатів, що містяться у дисертаційній роботі підтверджується такими фактами:

- вдалось повністю пояснити природу додаткових електронних переходів у двоколірному ККЛ, яка зумовлена двофотонними електронними переходами, що мало подальше експериментальне підтвердження;
- запропоновані аналітичні методи розрахунку потенціальних схем нітридних РТС показали високу надійність та ефективність у застосуванні для наноструктур з довільною кількістю шарів, зокрема й для експериментально отриманих;
- застосування ефективних та надійних методів (методу мацубарівських функцій Гріна, методу трансфер-матриці) дало змогу отримати перенормовані взаємодією з акустичними фононами електронні спектри та смуги поглинання, температурні залежності для яких знаходяться у хорошому узгодженні з результатами експерименту.

Наукова новизна отриманих результатів, які одержано в результаті досліджень представлених у дисертації полягає в тому, що ній з використанням моделей пружного та діелектричного континууму в поєднанні з моделлю прямокутних потенціальних ям та бар'єрів та моделлю модифікованої ефективної маси електрона в шарах відкритих і закритих наносистем *вперше*:

- Розвинено теорію електронної провідності багатошарових РТС в яких реалізуються можливості генерації чи детектування додаткових гармонік електромагнітного поля. Встановлено, що у випадку реалізації додаткового переходу за частотою вдвічі більшою від номінально робочої частоти ККЛ підсилення електронної провідності у сумарній її величині становить до 37%. Встановлено, що для двоколірного ККЛ при реалізації додаткової гармоніки з частотою відмінною від робочої частоти наноприладу, підсилення електронної провідності за рахунок двофотонної генерації становить до 38% від загальної її величини, а для детектувальних електронних переходів ця величина складає не менше 35%.
- Побудовано квантову теорію електронних КСС та електронної провідності багатошарових РТС з урахування внесків просторових статичного та динамічного зарядів. Виявлено, що зі збільшенням концентрації електронів енергія

лазерного випромінювання знижується, а загальна електронна провідність зростає таким чином, що в неї підвищується внесок парціальної складової провідності, обумовленої потоком, спрямованим у напрямок, протилежний виходу з наносистеми. Показано, що для високих концентрацій електронів n_0 посилюється вплив дисипативних процесів, викликаних просторовим динамічним зарядом, а також спостерігається майже десятикратне збільшення часу життя електронних квазістаціонарних станів.

- Побудовано аналітичну теорію типів акустичних фононів, виникаючих у нітридних РТС. Окремо побудовано теорію акустичних фононів у нітридних РТС з урахуванням створюваного ними п'єзоелектричного ефекту та виконано теоретичні розрахунки п'єзоелектричного потенціалу виникаючого в такому випадку. Встановлено, що як у випадку поперечних акустичних фононів так і у випадку флексуральних та ділататіональних акустичних фононів урахування створюваного ними п'єзоелектричного ефекту приводить до появи у спектральних залежностях фононів від хвильового вектора розщеплення спектру, яке спостерігається при малих значеннях цього хвильового вектора.

- Розвинено аналітичну теорію взаємодії електронів з акустичними фононами у багат шарових нітридних РТС через механізми деформаційного та п'єзоелектричного потенціалу за довільних значень температури. Встановлено, що електрони не взаємодіють з поперечними акустичними фононами через деформаційний потенціал, а така взаємодія можлива лише через механізм п'єзоелектричного потенціалу, лише при урахуванні п'єзоелектричного ефекту створюваного цими фононами. Встановлено, що зростання температури спричиняє збільшення абсолютних зміщень енергетичних рівнів електронних станів та їх згасань, спричиняючи перенормування величини поглинутої чи випроміненої енергії та відповідної смуги поглинання. Встановлено, що теплові зміщення електронного спектру зумовлені взаємодією електронів з флексуральними та ділататіональними акустичними фононами через деформаційний потенціал можуть мати довільний знак, тоді як у випадку взаємодії через п'єзоелектричний потенціал тільки додатній.

- Розроблено варіаційний метод для повного рівняння Шредінгера для дослідження тунельного електронного транспорту за наявності парціальної складової гамільтоніана, що умовлена акустичними фононами. З використанням даного методу розвинено теорію електронних КСС, електронної провідності та тунельного струму для відкритих нітридних РТС з урахуванням внеску акустичних фононів. Показано, що вплив акустичних фононів полягає у зміщенні резонансних енергій електронних КСС в низькоенергетичну область, а резонансні ширини цих КСС збільшуються. Також показано, що для багат шарових РТС вплив акустичних фононів з ростом температури приводить до зменшення формованої величини тунельного струму та еквівалентної величини електронної провідності.
- Розвинено теорію електронного тунельного транспорту у відкритій багат шаровій наноструктурі шляхом застосування методу Льюїса-Різенфілда до залежного від часу рівняння Шредінгера в кожній з квантових ям якої є можливою генерація електромагнітних хвиль з різними амплітудами. Встановлено, що при фіксованих значеннях амплітуд електричної складової електромагнітного поля для значень часу, що менші за час релаксації зменшується величина максимуму коефіцієнта прозорості, значення резонансної енергії залишається незмінним, значення резонансної ширини зменшується. Для значень часу близьких до часу релаксації та більших від нього у залежностях коефіцієнта прозорості з'являються осциляції які приводять до неможливості однозначного визначення спектральних характеристик квазістаціонарного стану і його фактичного руйнування.
- Розвинено теорію тунельного транспорту електронів крізь відкриту багат шарову наносистему за умови наявності впливу постійного внутрішнього електричного поля, постійного магнітного поля спрямованого перпендикулярно до напрямку руху електронів й з урахуванням взаємодії тунельованих електронів із змінним електромагнітним полем. Для цього розглянуто повне рівняння Шредінгера з залежним від часу потенціалом. Розв'язки цього рівняння з отримано шляхом модифікації методу Льюїса-Різенфілда разом з представленням хвильової функції у вигляді характерному для теорії розсіювання. Використання граничних умов для хвильової функції та потоку її ймовірності на межах шарів наносистеми дозволило

однозначно визначити електронну хвильову функцію та S - матрицю з полюсів якою визначався електронний квазістаціонарний спектр – резонансні енергії та ширини.. Встановлено, що зі збільшенням величини індукції магнітного поля, значення енергій електронних рівнів також зростають, формуючи антикросінги між сусідніми енергетичними рівнями. Положення цих антикросінгів із наближенням величини моменту часу t до значення відповідному часу релаксації τ_{rel} зміщуються в шкалі значень індукції магнітного поля вліво, частина цих антикросінгів взагалі зникає при $t \geq \tau_{rel}$. Як результат це дозволяє застосовувати магнітне поле, для зміни енергії квантових переходів між електронними рівнями, а також змінювати ширини смуг поглинання та випромінювання в функціонуючих наноприладах.

- Побудовано послідовну теорію взаємодії екситонів з поперечними, флексуральними та ділататіональними акустичними фононами багат шарових нітридних AlN/GaN РТС при довільних температурах. Встановлено, що взаємодія екситонів з акустичними фононами спричиняє перенормування екситонного спектру, зменшення енергій зв'язку, при цьому з ростом температури інтенсивність міжпідзонних електронно-діркових переходів зменшується.

Практичне і наукове значення отриманих результатів.

1. Розвинена теорія електронних квазістаціонарних станів та електронної провідності багат шарових РТС в досягається можливість генерації додаткової гармоніки з частотою, аналогічною робочій частоті ККЛ дозволяє безпосередньо встановлювати умови, які забезпечують ефективне підсилення генерованого тунельного струму.

2. Результати досліджень, які виконані на основі розвинутої теорії квазістаціонарних станів та електронної провідності багат шарових РТС з прикладеним поздовжнім постійним електричним полем за умови реалізації додаткових других гармонік з довільною частотою мають практичне значення для роботи ККЛ з принципово іншими функціональними характеристиками – так званих двоколірних ККЛ.

3. Побудована теорія акустичних фононів в багат шарових нітридних РТС, що має фундаментальний характер. Вона дала змогу у поєднанні з розвиненими

методами розрахунку потенціальних схем наноструктур та дослідження електронних стаціонарних та квазістаціонарних станів дослідити взаємодію електронів з поперечними, флексуральними та ділататіональними акустичними фононами через деформаційний та п'єзоелектричний потенціал. Розвинутий підхід до розрахунку перенормованого взаємодією з акустичними фононами електронного спектру та температурної зміни смуг поглинання чи випромінювання має безпосереднє практичне значення для забезпечення когерентного робочого стану в ККЛ чи ККД й може застосовуватись для нітридних РТС з широким варіюванням їх геометричних та фізичних параметрів.

4. Теоретичні методи, які базуються на здійсненій модифікації методу Льюїса-Різенфілда та варіаційному методі для повного рівнянні Шредінгера, описуючого електрон-фононну систему, відкривають можливості їх застосування до суміжних задач теорії розсіювання, електронного транспорту та спектральних задач із залежними від часу потенціалами.

Особистий внесок здобувача. У всьому переліку робіт, опублікованих із співавторами, здобувачу повністю належить безпосереднє формулювання ідей та постановок задач, визначення цілей та методів дослідження, повністю аналітичні та частково числові розрахунки, безпосереднє написання та підготовка праць до друку.

Основні теоретичні результати та висновки щодо їх аналізу обговорювались з доктором фіз.-мат. наук, професором Ткачем Миколою Васильовичем (Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича), аспекти застосування у розрахунках числових методів, засобів програмування та моделювання обговорювались із доктором фіз.-мат. наук професором Петриком Михайлом Романовичем (Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя), які є співавторами зазначених робіт і де-факто науковими консультантами дисертаційного дослідження.

Апробація результатів дисертації.

Результати наукових досліджень, які подано в дисертації доповідались у форму доповідей в таких науково-дослідних закладах та закладах вищої освіти: наукових семінарах Інституту фізики конденсованих систем НАН України;

наукових семінарах кафедри теоретичної фізики та комп'ютерного моделювання Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича, на спільному науковому семінарі кафедри теоретичної фізики імені І.М. Ліфшиця та відділу теоретичної фізики Інституту радіофізики та електроніки імені О. Я. Усикова НАН України, загальноуніверситетському семінарі Тернопільського національного технічного університету імені Івана Пулюя, семінарі відділу теорії квантових процесів у наносистемах Інституту теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова Національної академії наук України. Крім того результати дисертаційного дослідження доповідались на таких міжнародних і всеукраїнських конференціях:

VI Українська наукова конференція з фізики напівпровідників (Чернівці, Україна, 2013); 6-а Міжнародна науково-технічна конференція “Сенсорна електроніка та мікросистемні технології (Одеса, Україна, 2014); «Лашкарьовські читання - 2015» Конференція молодих вчених з фізики напівпровідників (Київ, Україна, 2015); «Лашкарьовські читання - 2016» Конференція молодих вчених з фізики напівпровідників (Київ, Україна, 2016); XIX Наукова конференція Тернопільського національного технічного університету імені Івана Пулюя (Тернопіль, Україна, 2016); XX Наукова конференція Тернопільського національного технічного університету імені Івана Пулюя (Тернопіль, Україна, 2017); 2018 IEEE 8th International Conference on Nanomaterials: Applications & Properties (NAP – 2018, Sumy, Ukraine); «Лашкарьовські читання - 2018» Конференція молодих вчених з фізики напівпровідників (Київ, Україна, 2018); VIII Українська наукова конференція з фізики напівпровідників УНКФН–8 (Ужгород, Україна, 2018); 2019 9th International Conference on Advanced Computer Technologies ACIT'2019 (České Budějovice, Czech Republic, 2019); Fourteenth International Conference on Correlation Optics (Chernivtsi, Ukraine, 2019); 2019 XIth International Scientific and Practical Conference on Electronics and Information Technologies (ELIT) (Lviv, Ukraine, 2019); 7th International Conference "Nanotechnologies and Nanomaterials" NANO-2019 (Lviv, Ukraine, 2019); IEEE International Conference on “Nanomaterials: Applications & Properties” (NAP-2020) (Sumy, Ukraine, 2020); 2022 IEEE 41th International Conference on Electronics and Nanotechnology (ELNANO) 2022 (Kyiv, Ukraine, 2022); IEEE

International Conference on “Nanomaterials: Applications & Properties” (NAP-2022) (Kraków, Poland, 2022); 2023 13th International Conference on Advanced Computer Information Technologies ACIT’2023 (Wrocław, Poland, 2023).

Публікації. Зміст дисертації відображає у розширеній та узагальненій формі наукові результати, які було опубліковано у 42 працях. Із цих праць [1*–26*] – статті у вітчизняних та міжнародних фахових періодичних виданнях з яких 22 індексуються у наукометричних базах Scopus і Web of Science. Згідно класифікації SCImago Journal and Country Rank 7 статей [7*, 15*, 21*, 22*, 24*–26*] віднесено до першого та другого кuartилів (Q1 і Q2), 9 статей [6*, 8*, 11*, 13*, 14*, 18*–20*, 23*] віднесені до третього кuartиля (Q3), 2 статті [2*, 12*] віднесені до четвертого кuartиля (Q4). Решта наукових праць [27*–42*] – це 16 тез доповідей на всеукраїнських та міжнародних конференціях, з яких 6 індексуються у наукометричних базах Scopus і Web of Science.

Структура та обсяг дисертації. Дисертаційна робота складається з переліку умовних скорочень, вступу, семи розділів основної частини, списку використаних посилань, що складається з 290 посилань, а також бібліографічного списку публікацій за темою дисертації. Загальний обсяг дисертації складає 404 сторінки машинописного тексту в якому міститься 85 рисунків та 5 таблиць.

РОЗДІЛ 1. ТЕОРІЯ ЛАЗЕРНОЇ ГЕНЕРАЦІЇ ТА ДЕТЕКТУВАННЯ ДВОЧАСТОТНИХ ЕЛЕКТРОМАГНІТНИХ ХВИЛЬ У ВІДКРИТИХ ПЛОСКИХ НАПІВПРОВІДНИКОВИХ НАНОСТРУКТУРАХ

1.1. Теоретичні основи лазерної генерації та детектування двочастотних електромагнітних хвиль багат шаровими резонансно-тунельними наноструктурами

Теоретичні розрахунки та експериментальні дослідження, які спрямовані на розробку безпосередніх робочих характеристик квантових каскадних лазерів та детекторів значною мірою полягають у встановленні робочої частоти цих наноприладів та забезпеченні максимальної ефективності квантових переходів між електронними рівнями низьковимірних систем, що є їхніми складовими елементами.

Зокрема, вибір геометричного дизайну активної зони квантових каскадних лазерів (ККЛ) і детекторів (ККД) не лише визначає робочу частоту (енергію) цих наноприладів, але й слугує ефективним методом оптимізації їхніх характеристик [1–10]. Це досягається завдяки використанню фізичних процесів, які підсилюють активний струм, пов'язаний із динамічною провідністю, що виникає в резонансно-тунельних структурах (РТС) під впливом електромагнітного поля внаслідок квантових переходів між електронними станами з випромінюванням або поглинанням електромагнітного поля. Наприклад, за присутності інтенсивного електромагнітного поля під час фотонно-супровідного тунелювання [11–18] в наносистемі відкриваються додаткові канали транспорту заряду, що забезпечують збільшення вихідного струму в резонансно-тунельних структурах [19–25].

Таким чином можна сформулювати основну проблему: розробка теорії, яка дозволяє виконувати встановлення конфігурацій низьковимірних систем, які реалізують підсилення лазерної генерації за рахунок додаткових квантових переходів з частотою, аналогічною робочій. Безпосередньо встановлення таких конфігурацій означає, що за рахунок двофотонних переходів в них забезпечується збільшення величини тунельного струму та інтегральної провідності конкретної наносистеми.

Крім того важливим кроком у розвитку теорії буде розгляд більш загального випадку, коли реалізується можливість лазерної генерації з двома різними частотами: основною та додатковою (так званий двоколірний ККЛ). При цьому надзвичайно важливою задачею є дослідження умов коли відбувається генерація додаткової частоти, а також внеску такого переходу у сумарній величині провідності чи тунельного струму.

Дослідження двофотонних квантових переходів між електронними квазістаціонарними станами, які супроводжуються випромінюванням фотонів однакової або різної частоти в апроксимації слабкого поля, виконані у роботах [26–28]. Вони базуються на спрощеній моделі, що використовує δ -подібні потенціальні бар'єри наноструктур і єдину ефективну масу електрона. Результати цих досліджень мають лише якісний характер і, як зазначено в [29, 30], не придатні для практичного використання при оптимізації геометрії активної зони або каскаду квантових каскадних приладів. Розроблена теорія повинна відповідати наступним вимогам:

- теорія має базуватися на більш достовірній моделі, що враховує прямокутні потенціали та варіативність ефективних мас електрона в різних середовищах відкритої нано-РТС;
- теорія повинна враховувати ключовий фактор обмеженого часу життя електрона в квазістаціонарних станах, який значною мірою впливає на величину динамічної провідності і є одним із визначальних параметрів для забезпечення оптимальної роботи наноприладу;
- двофотонні електронні квантові переходи забезпечують достатнє збільшення величини тунельного струму чи динамічної провідності наноструктури як елемента наноприладу;
- у випадку двофотонних переходів із довільними частотами, внесок додаткової частоти у сумарній величині провідності має бути співрозмірним з величиною внеску від основної робочої частоти, проте має реалізуватись в інших геометричних конфігураціях наноструктури.

Таким чином метою даного розділу є такі завдання. Буде розроблено квантово-механічну теорію активної динамічної провідності багат шарових РТС в

яких у яких забезпечується можливість двофотонної лазерної генерації електромагнітних хвиль з однаковими частотами. Буде розвинений підхід до встановлення таких конфігурацій РТС, в якій реалізуються послідовні електронні переходи з третього у другий та з другого у перший квазістаціонарні стани з випромінюванням двох фотонів із однаковою частотою. Крім того, буде досліджено внесок двофотонних переходів у сумарній величині електронної провідності.

Крім того буде побудовано квантово-механічну теорію квазістаціонарних станів та електронної провідності багатошарових РТС з прикладеним поздовжнім постійним електричним полем за умови реалізації додаткових других гармонік з частотою відмінною від робочої частоти ККЛ чи ККД та окремо дослідити випадок відсутності електричного поля. Буде виконано дослідження величини внеску від складової електронної провідності сформованою додатковою гармонікою сумарній величині електронної провідності.

1.2. Теорія активної динамічної провідності двоямної РТС у випадку двофотонного електронного переходу

У декартовій системі координат досліджується двоямна наноструктура, де межі розділу середовищ орієнтовані перпендикулярно осі OZ (Рис. 1). Враховуючи незначну різницю між параметрами кристалічної решітки шарів-ям і шарів-бар'єрів, для електрона використовується модель з ефективними масами та прямокутних потенціалами, які задаються у такій формі (праці автора дисертації [3*, 4*]):

$$m(z) = m_0 \sum_{p=0}^1 [\theta(z - z_{2p-1}) - \theta(z - z_{2p})] + m_1 \sum_{p=0}^2 [\theta(z - z_{2p}) - \theta(z - z_{2p+1})] + m_2 \sum_{p=2}^3 [\theta(z - z_{2p-1}) - \theta(z - z_{2p})], \quad (1.1)$$

$$U(z) = U \sum_{p=0}^2 [\theta(z - z_{2p}) - \theta(z - z_{2p+1})] - V \sum_{p=2}^3 [\theta(z - z_{2p-1}) - \theta(z - z_{2p})], \quad (1.2)$$

де $\theta(z)$ - одинична функція Хевісайда, $z_{-1} \rightarrow 0$, $z_6 \rightarrow \infty$.

Припускається, що моноенергетичний потік електронів, енергія E яких близька до енергії четвертого енергетичного рівня $E \approx E_4$, з концентрацією n_0 , падає на РТС зліва, перпендикулярно до її площин. У таких умовах рух електронів вважається

одновимірним і описується хвильовою функцією $\Psi(z,t)$, отриманою із повного рівняння Шредінгера [3*,4*]:

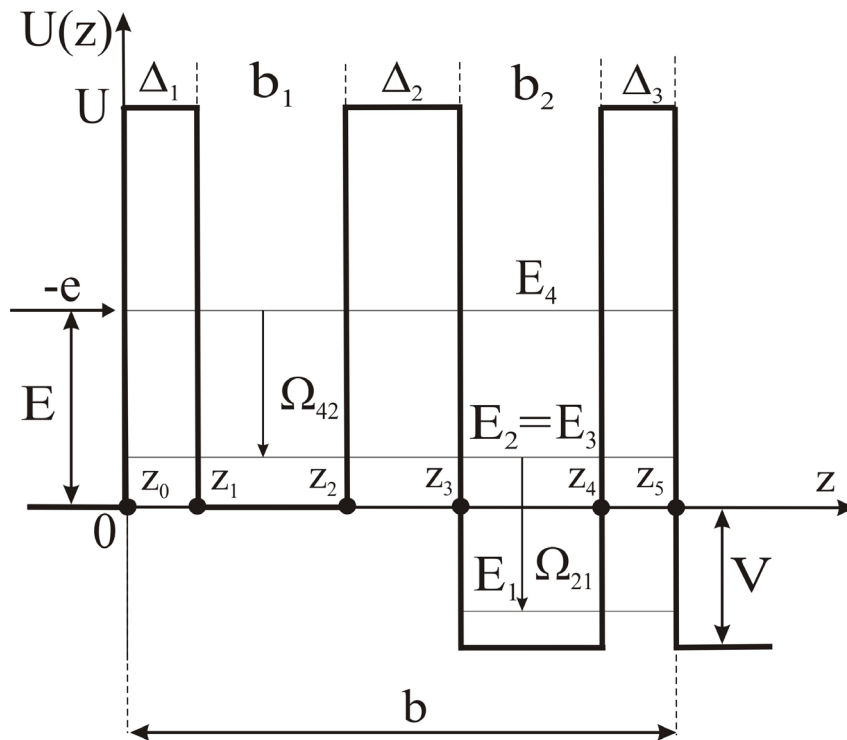


Рис. 1.1. Геометрична та енергетична схеми трибар'єрної РТС.

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(z,t)}{\partial t} = [H_0(z) + H(z,t)]\Psi(z,t), \quad (1.3)$$

де

$$H_0(z) = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} + U(z) \quad (1.4)$$

– стаціонарний гамільтоніан,

$$H(z,t) = -e\mathcal{E}[z\theta(z) + (z_5 - z)\theta(z - z_5)](e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) \quad (1.5)$$

гамільтоніан, що описує взаємодію електронів із змінним електромагнітним полем з частотою ω та амплітудою напруженості його електричної складової \mathcal{E} .

У наближенні слабого сигналу, при умові реалізації двофотонних квантових переходів з випромінюванням та поглинанням електромагнітної хвилі частотою ω , розв'язок рівняння Шредінгера (1.3) знаходиться у другому порядку теорії збурень [3*,4*], що зумовлює подання шуканої хвильової функції у такій формі:

$$\begin{aligned} \Psi(z, t) = & \Psi_0(z)e^{-i\omega_0 t} + \Psi_{-1}(z)e^{-i(\omega_0 - \omega)t} + \Psi_{+1}(z)e^{-i(\omega_0 + \omega)t} + \\ & + \Psi_{-2}(z)e^{-i(\omega_0 - 2\omega)t} + \Psi_{+2}(z)e^{-i(\omega_0 + 2\omega)t}, \end{aligned} \quad (1.6)$$

де $\omega_0 = E / \hbar$.

У результаті підстановки виразу (1.6) у рівняння (1.3), та врахування (1.4) та (1.5) будемо мати:

$$\begin{aligned} & \hbar\Psi_0(z)e^{-i\omega_0 t} + \hbar(\omega_0 - \omega)\Psi_{-1}(z)e^{-i(\omega_0 - \omega)t} + \hbar(\omega_0 + \omega)\Psi_{+1}(z)e^{-i(\omega_0 + \omega)t} + \\ & + \hbar(\omega_0 - 2\omega)\Psi_{-2}(z)e^{-i(\omega_0 - 2\omega)t} + \hbar(\omega_0 + 2\omega)\Psi_{+2}(z)e^{-i(\omega_0 + 2\omega)t} = \\ & = [H_0(z) - e\mathcal{C}[z\theta(z) + (z_5 - z)\theta(z - z_5)](e^{i\omega t} + e^{-i\omega t})]\Psi(z, t) \end{aligned}$$

Звідси, після прирівнювання доданків однакового порядку у лівій та правій частинах попередньої рівності, отримуємо таку систему рівнянь:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} + U(z) - E \right] \Psi_0(z) = 0, \quad (1.7)$$

$$\begin{aligned} & \left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} + U(z) - (E \pm \Omega) \right] \Psi_{\pm 1}(z) - \\ & - e\mathcal{C}[z\theta(z) + (z_5 - z)\theta(z - z_5)]\Psi_0(z) = 0, \quad (\Omega = \hbar\omega) \end{aligned} \quad (1.8)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} + U(z) - (E \pm 2\Omega) \right] \Psi_{\pm 2}(z) - e\mathcal{C}[z\theta(z) + (z_5 - z)\theta(z - z_5)]\Psi_{\pm 1}(z) = 0 \quad (1.9)$$

з якої отримується хвильова функція $\Psi_0(z)$, а також відповідно і поправки першого $\Psi_{\pm 1}(z)$ та другого порядків $\Psi_{\pm 2}(z)$.

Розв'язок рівняння (1.7), що задає стаціонарну хвильову функцію $\Psi_0(z)$ отримується у формі:

$$\begin{aligned} \Psi_0(z) = & \sum_{p=0}^6 \Psi_0^{(p)}(z) [\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)] = \\ & + \sum_{p=0}^6 [A_0^{(p)} e^{ik_0^{(p)}(z - z_{p-1})} + B_0^{(p)} e^{-ik_0^{(p)}(z - z_{p-1})}] [\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)], \end{aligned} \quad (1.10)$$

де уведено такі позначення:

$$k_0^{(0)} = k_0^{(2)} = \sqrt{\frac{2m_0 E}{\hbar^2}}; k_0^{(1)} = k_0^{(3)} = k_0^{(5)} = \sqrt{\frac{2m_1(E-U)}{\hbar^2}}; \quad (1.11)$$

$$k_0^{(4)} = k_0^{(6)} = \sqrt{\frac{2m_2(E+V)}{\hbar^2}}, B_0^{(6)} = 0.$$

Визначена згідно співвідношень (1.10) хвильова функція $\Psi_0(z)$ задовольняє таку умову нормування

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_0^*(k', z) \Psi_0(k, z) dz = \delta(k - k'). \quad (1.12)$$

З використанням отриманої функції $\Psi_0(z)$ здійснюється аналітичний розрахунок функції розподілу густини ймовірності знаходження електрона у межах наноструктури:

$$W(z) = \frac{1}{z_5} \int_0^{z_5} |\Psi_0(z)|^2 dz, \quad (1.13)$$

що визначає спектральні характеристики – резонансні енергії (E_n) та резонансні ширини (Γ_n) електронних квазістаціонарних станів ($\tilde{E}_n = E_n - i\Gamma_n/2$) [31].

Розв'язки неоднорідних рівнянь (1.8) та (1.9) будемо шукати у вигляді такої суперпозиції функцій:

$$\Psi_{\pm\alpha}(z) = \psi_{\pm\alpha}(z) + \Phi_{\pm\alpha}(z), \quad (\alpha = 1, 2), \quad (1.14)$$

де розв'язки однорідних рівнянь (1.8) та (1.9) є такими;

$$\begin{aligned} \psi_{\pm\alpha}(z) &= \sum_{p=1}^5 \psi_{\pm\alpha}^{(p)}(z) [\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)] = \\ &= \sum_{p=0}^6 [A_{\pm\alpha}^{(p)} e^{ik_{\pm\alpha}^{(p)}(z-z_{p-1})} + B_{\pm\alpha}^{(p)} e^{-ik_{\pm\alpha}^{(p)}(z-z_{p-1})}] [\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)] \end{aligned} \quad (1.15)$$

Часткові розв'язки $\Phi_{\pm\alpha}(z)$ неоднорідних рівнянь (1.8) та (1.9) будемо шукати використовуючи метод Лагранжа.

Для випадку одно фотонних переходів частинний розв'язок неоднорідного рівняння (1.8) у окремо взятому шарі наносистеми шукається у вигляді:

$$\Phi_{\pm 1}^{(p)}(z) = C_1^{(p)}(z) e^{ik_{\pm 1}^{(p)}z} + C_2^{(p)}(z) e^{ik_{\pm 1}^{(p)}z}. \quad (1.16)$$

Щоб визначити коефіцієнти $C_1^{(p)}(z)$ та $C_2^{(p)}(z)$ після підстановки (1.16) в рівняння (1.8) отримується система рівнянь Ліувіля-Остроградського:

$$\begin{cases} C_1^{(p)}(z)e^{ik_{\pm 1}^{(p)}z} + C_2^{(p)}(z)e^{-ik_{\pm 1}^{(p)}z} = 0, \\ ik_{\pm 1}^{(p)}C_1^{(p)}(z)e^{ik_{\pm 1}^{(p)}z} - ik_{\pm 1}^{(p)}C_2^{(p)}(z)e^{-ik_{\pm 1}^{(p)}z} = \frac{2m_p e\epsilon}{\hbar^2} z\Psi_0^{(p)}(z), \end{cases}$$

звідки знаходимо:

$$\begin{aligned} C_1^{(p)}(z) &= \frac{im_p e\epsilon}{k_{\pm 1}^{(p)} \hbar^2} \int e^{-ik_{\pm 1}^{(p)}z} z\Psi_0^{(p)}(z) dz = \\ &= \frac{im_p e\epsilon}{k_{\pm 1}^{(p)} \hbar^2} \int z \left(A_0^{(p)} e^{i(k_0^{(p)} - k_{\pm 1}^{(p)})(z - z_{p-1})} + B_0^{(p)} e^{-i(k_0^{(p)} + k_{\pm 1}^{(p)})(z - z_{p-1})} \right) dz = \\ &= \frac{im_p e\epsilon}{k_{\pm 1}^{(p)} \hbar^2} \left\{ A_0^{(p)} e^{i(k_0^{(p)} - k_{\pm 1}^{(p)})(z - z_{p-1})} \left[\frac{1}{(k_0^{(p)} - k_{\pm 1}^{(p)})^2} - \frac{iz}{k_0^{(p)} - k_{\pm 1}^{(p)}} \right] + B_0^{(p)} e^{-i(k_0^{(p)} + k_{\pm 1}^{(p)})(z - z_{p-1})} \times \right. \\ &\quad \left. \times \left[\frac{1}{(k_0^{(p)} + k_{\pm 1}^{(p)})^2} + \frac{iz}{k_0^{(p)} + k_{\pm 1}^{(p)}} \right] \right\}; \\ C_2^{(p)}(z) &= -\frac{im_p e\epsilon}{k_{\pm 1}^{(p)} \hbar^2} \int e^{ik_{\pm 1}^{(p)}z} z\Psi_0^{(p)}(z) dz = \\ &= -\frac{im_p e\epsilon}{k_{\pm 1}^{(p)} \hbar^2} \int z \left(A_0^{(p)} e^{i(k_0^{(p)} + k_{\pm 1}^{(p)})(z - z_{p-1})} + B_0^{(p)} e^{-i(k_0^{(p)} - k_{\pm 1}^{(p)})(z - z_{p-1})} \right) dz = \\ &= -\frac{im_p e\epsilon}{k_{\pm 1}^{(p)} \hbar^2} \left\{ A_0^{(p)} e^{i(k_0^{(p)} + k_{\pm 1}^{(p)})(z - z_{p-1})} \left[\frac{1}{(k_0^{(p)} + k_{\pm 1}^{(p)})^2} - \frac{iz}{k_0^{(p)} + k_{\pm 1}^{(p)}} \right] + B_0^{(p)} e^{-i(k_0^{(p)} - k_{\pm 1}^{(p)})(z - z_{p-1})} \times \right. \\ &\quad \left. \times \left[\frac{1}{(k_0^{(p)} - k_{\pm 1}^{(p)})^2} + \frac{iz}{k_0^{(p)} - k_{\pm 1}^{(p)}} \right] \right\}. \end{aligned}$$

Отже:

$$\begin{aligned} \Phi_{\pm 1}^{(p)}(z) &= \frac{im_p e\epsilon}{k_{\pm 1}^{(p)} \hbar^2} \left\{ A_0^{(p)} e^{ik_0^{(p)}(z - z_{p-1})} \left[\frac{1}{(k_0^{(p)} - k_{\pm 1}^{(p)})^2} - \frac{iz}{k_0^{(p)} - k_{\pm 1}^{(p)}} \right] + B_0^{(p)} e^{-ik_0^{(p)}(z - z_{p-1})} \times \right. \\ &\quad \left. \times \left[\frac{1}{(k_0^{(p)} + k_{\pm 1}^{(p)})^2} + \frac{iz}{k_0^{(p)} + k_{\pm 1}^{(p)}} \right] \right\} - \frac{im_p e\epsilon}{k_{\pm 1}^{(p)} \hbar^2} \left\{ A_0^{(p)} e^{ik_0^{(p)}(z - z_{p-1})} \left[\frac{1}{(k_0^{(p)} + k_{\pm 1}^{(p)})^2} - \frac{iz}{k_0^{(p)} + k_{\pm 1}^{(p)}} \right] + \right. \\ &\quad \left. \times \left[\frac{1}{(k_0^{(p)} - k_{\pm 1}^{(p)})^2} + \frac{iz}{k_0^{(p)} - k_{\pm 1}^{(p)}} \right] \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& +B_0^{(p)} e^{-ik_0^{(p)}(z-z_{p-1})} \times \left[\frac{1}{\left(k_0^{(p)} - k_{\pm 1}^{(p)}\right)^2} + \frac{iz}{k_0^{(p)} - k_{\pm 1}^{(p)}} \right] = \\
& = \frac{im_p e\mathcal{E}}{k_{\pm 1}^{(p)} \hbar^2} \left\{ -\frac{1}{ik_0^{(p)} \left(k_0^{(p)} - k_{\pm 1}^{(p)}\right)} \frac{d\Psi_0^{(p)}(z)}{dz} - \frac{1}{ik_0^{(p)} \left(k_0^{(p)} + k_{\pm 1}^{(p)}\right)} \frac{d\Psi_0^{(p)}(z)}{dz} + \right. \\
& \left. + \frac{iz}{k_0^{(p)} - k_{\pm 1}^{(p)}} \Psi_0^{(p)}(z) - \frac{iz}{k_0^{(p)} + k_{\pm 1}^{(p)}} \Psi_0^{(p)}(z) \right\} = \mp \frac{e\mathcal{E}z}{\hbar\omega} \Psi_0^{(p)}(z) - \frac{e\mathcal{E}\hbar^2}{m_p(\hbar\omega)^2} \frac{d\Psi_0^{(p)}(z)}{dz} = \\
& = \mp \frac{U_1}{\Omega} \frac{z}{z_5} \Psi_0^{(p)}(z) + \frac{\hbar^2 U_1}{m_p z_5 \Omega^2} \frac{d\Psi_0^{(p)}(z)}{dz}.
\end{aligned}$$

Тепер остаточно отримуємо, що:

$$\begin{aligned}
\Phi_{\pm 1}(z) & = \sum_{p=1}^5 \Phi_{\pm 1}^{(p)}(z) \left[\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p) \right] + \Phi_{\pm 1}^{(6)}(z) \theta(z - z_5) = \\
& = \sum_{p=1}^5 \left[\mp \frac{U_1}{\Omega} \frac{z}{z_5} \Psi_0^{(p)}(z) + \frac{\hbar^2 U_1}{m_p z_5 \Omega^2} \frac{d\Psi_0^{(p)}(z)}{dz} \right] \left[\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p) \right] \mp \\
& \mp \frac{U_1}{\Omega} \Psi_0^{(6)}(z) \theta(z - z_5),
\end{aligned} \tag{1.17}$$

Для випадку двофотонних квантових переходів частинний розв'язок рівняння (1.9) згідно методу Лагранжа шукаємо у такому вигляді:

$$\Phi_{\pm 2}^{(p)}(z) = C_3^{(p)}(z) e^{ik_{\pm 2}^{(p)}z} + C_4^{(p)}(z) e^{-ik_{\pm 2}^{(p)}z}. \tag{1.18}$$

Щоб визначити коефіцієнти $C_3^{(p)}(z)$ та $C_4^{(p)}(z)$ після підстановки (1.18) в рівняння (1.8) отримується система рівнянь Ліувіля-Остроградського:

$$\begin{cases} C_3^{(p)'}(z) e^{ik_{\pm 2}^{(p)}z} + C_4^{(p)'}(z) e^{-ik_{\pm 2}^{(p)}z} = 0, \\ ik_{\pm 2}^{(p)} C_3^{(p)}(z) e^{ik_{\pm 2}^{(p)}z} - ik_{\pm 2}^{(p)} C_4^{(p)}(z) e^{-ik_{\pm 2}^{(p)}z} = -\frac{2m_p e\mathcal{E}}{\hbar^2} z \Psi_1^{(p)}(z), \end{cases}$$

звідки знаходимо:

$$\begin{aligned}
C_3^{(p)}(z) & = \frac{im_p e\mathcal{E}}{k_{\pm 2}^{(p)} \hbar^2} \int e^{-ik_{\pm 2}^{(p)}z} z \Psi_1^{(p)}(z) dz = \\
& = \frac{im_p e\mathcal{E}}{k_{\pm 2}^{(p)} \hbar^2} \int z e^{-ik_{\pm 2}^{(p)}z} \left(\mp \frac{e\mathcal{E}z}{\hbar\omega} \Psi_0^{(p)}(z) - \frac{e\mathcal{E}\hbar^2}{m_p(\hbar\omega)^2} \frac{d\Psi_0^{(p)}(z)}{dz} + A_{\pm 1}^{(p)} e^{ik_{\pm 1}^{(p)}(z-z_{p-1})} + B_{\pm 1}^{(p)} e^{-ik_{\pm 1}^{(p)}(z-z_{p-1})} \right) dz =
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \mp \frac{im_p e^2 \mathcal{E}^2}{k_{\pm 2}^{(p)} \hbar^3 \omega} \left\{ \frac{A_0^{(p)} e^{i(k_0^{(p)} - k_{\pm 2}^{(p)})}}{(k_0^{(p)} - k_{\pm 2}^{(p)})^3} \left[2i + 2(k_0^{(p)} - k_{\pm 2}^{(p)})z - i(k_0^{(p)} - k_{\pm 2}^{(p)})^2 z^2 \right] + \right. \\
&+ \left. \frac{B_0^{(p)} e^{-i(k_0^{(p)} - k_{\pm 2}^{(p)})}}{(k_0^{(p)} + k_{\pm 2}^{(p)})^3} \left[-2i + 2(k_0^{(p)} + k_{\pm 2}^{(p)})z + i(k_0^{(p)} + k_{\pm 2}^{(p)})^2 z^2 \right] \right\} - \\
&- \frac{e^2 \mathcal{E}^2 k_0^{(p)}}{(\hbar \omega)^2 k_{\pm 2}^{(p)}} \left\{ A_0^{(p)} e^{i(k_0^{(p)} - k_{\pm 2}^{(p)})} \left[\frac{1}{(k_0^{(p)} - k_{\pm 2}^{(p)})^2} - \frac{iz}{k_0^{(p)} - k_{\pm 2}^{(p)}} \right] + \right. \\
&+ B_0^{(p)} e^{i(k_0^{(p)} + k_{\pm 2}^{(p)})} \left[\frac{1}{(k_0^{(p)} + k_{\pm 2}^{(p)})^2} + \frac{iz}{k_0^{(p)} + k_{\pm 2}^{(p)}} \right] + \\
&+ \frac{im_p e \mathcal{E}}{\hbar^2 k_{\pm 2}^{(p)}} \left\{ A_{\pm 1}^{(p)} e^{i(k_{\pm 1}^{(p)} - k_{\pm 2}^{(p)})} \left[\frac{1}{(k_{\pm 1}^{(p)} - k_{\pm 2}^{(p)})^2} - \frac{iz}{k_{\pm 1}^{(p)} - k_{\pm 2}^{(p)}} \right] + \right. \\
&+ \left. B_{\pm 1}^{(p)} e^{i(k_{\pm 1}^{(p)} + k_{\pm 2}^{(p)})} \left[\frac{1}{(k_{\pm 1}^{(p)} + k_{\pm 2}^{(p)})^2} + \frac{iz}{k_{\pm 1}^{(p)} + k_{\pm 2}^{(p)}} \right] \right\};
\end{aligned}$$

$$C_4^{(p)}(z) = -\frac{im_p e \mathcal{E}}{k_{\pm 2}^{(p)} \hbar^2} \int e^{ik_{\pm 2}^{(p)} z} z \Psi_1^{(p)}(z) dz =$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{im_p e \mathcal{E}}{k_{\pm 2}^{(p)} \hbar^2} \int z e^{ik_{\pm 2}^{(p)} z} \left(\mp \frac{e \mathcal{E} \mathcal{E}}{\hbar \omega} \Psi_0^{(p)}(z) - \frac{e \mathcal{E} \hbar^2}{m_p (\hbar \omega)^2} \frac{d\Psi_0^{(p)}(z)}{dz} + A_{\pm 1}^{(p)} e^{ik_{\pm 1}^{(p)}(z - z_{p-1})} + B_{\pm 1}^{(p)} e^{-ik_{\pm 1}^{(p)}(z - z_{p-1})} \right) dz = \\
&= \pm \frac{im_p e^2 \mathcal{E}^2}{k_{\pm 2}^{(p)} \hbar^3 \omega} \left\{ \frac{A_0^{(p)} e^{i(k_0^{(p)} + k_{\pm 2}^{(p)})}}{(k_{\pm 1}^{(p)} - k_{\pm 2}^{(p)})^3} \left[2i + 2(k_0^{(p)} + k_{\pm 2}^{(p)})z - i(k_0^{(p)} + k_{\pm 2}^{(p)})^2 z^2 \right] + \right. \\
&+ \left. \frac{B_0^{(p)} e^{-i(k_0^{(p)} - k_{\pm 2}^{(p)})}}{(k_{\pm 1}^{(p)} + k_{\pm 2}^{(p)})^3} \left[-2i + 2(k_0^{(p)} - k_{\pm 2}^{(p)})z + i(k_0^{(p)} - k_{\pm 2}^{(p)})^2 z^2 \right] \right\} - \\
&- \frac{e^2 \mathcal{E}^2 k_0^{(p)}}{(\hbar \omega)^2 k_{\pm 2}^{(p)}} \left\{ A_0^{(p)} e^{i(k_0^{(p)} + k_{\pm 2}^{(p)})} \left[\frac{1}{(k_0^{(p)} + k_{\pm 2}^{(p)})^2} - \frac{iz}{k_0^{(p)} + k_{\pm 2}^{(p)}} \right] - \right. \\
&- \left. B_0^{(p)} e^{i(k_0^{(p)} - k_{\pm 2}^{(p)})} \left[\frac{1}{(k_0^{(p)} - k_{\pm 2}^{(p)})^2} - \frac{iz}{k_0^{(p)} - k_{\pm 2}^{(p)}} \right] - \right.
\end{aligned}$$

$$-\frac{im_p e\mathcal{E}}{\hbar^2 k_{\pm 2}^{(p)}} \left\{ A_{\pm 1}^{(p)} e^{i(k_{\pm 1}^{(p)} + k_{\pm 2}^{(p)})} \left[\frac{1}{(k_{\pm 1}^{(p)} + k_{\pm 2}^{(p)})^2} - \frac{iz}{k_{\pm 1}^{(p)} + k_{\pm 2}^{(p)}} \right] + \right. \\ \left. + B_{\pm 1}^{(p)} e^{i(k_{\pm 1}^{(p)} - k_{\pm 2}^{(p)})} \left[\frac{1}{(k_{\pm 1}^{(p)} - k_{\pm 2}^{(p)})^2} + \frac{iz}{k_{\pm 1}^{(p)} - k_{\pm 2}^{(p)}} \right] \right\};$$

Отже, підставляючи попередні два вирази у співвідношення (1.18) будемо мати:

$$\Phi_{\pm 2}^{(p)}(z) = \frac{im_p e^2 \mathcal{E}^2}{k_{\pm 2}^{(p)} \hbar^3 \omega} \left\{ -\frac{2i}{(k_0^{(p)} - k_{\pm 2}^{(p)})^3} \Psi_0^{(p)}(z) + \frac{2i}{(k_0^{(p)} - k_{\pm 2}^{(p)})^3} - \frac{2z}{ik_0^{(p)}(k_0^{(p)} - k_{\pm 2}^{(p)})^2} \frac{d\Psi_0^{(p)}(z)}{dz} - \right. \\ \left. - \frac{2z}{ik_0^{(p)}(k_0^{(p)} + k_{\pm 2}^{(p)})^2} \frac{d\Psi_0^{(p)}(z)}{dz} + \frac{iz^2}{k_0^{(p)} - k_{\pm 2}^{(p)}} \Psi_0^{(p)}(z) - \frac{iz^2}{k_0^{(p)} + k_{\pm 2}^{(p)}} \Psi_0^{(p)}(z) \right\} + \\ + \frac{e^2 \mathcal{E}^2 k_0^{(p)}}{k_{\pm 2}^{(p)} (\hbar\omega)^2} \left\{ -\frac{\Psi_0^{(p)}(z)}{(k_0^{(p)} - k_{\pm 2}^{(p)})^2} + \frac{\Psi_0^{(p)}(z)}{(k_0^{(p)} + k_{\pm 2}^{(p)})^2} + \frac{z}{k_0^{(p)}(k_0^{(p)} - k_{\pm 2}^{(p)})} \frac{d\Psi_0^{(p)}(z)}{dz} - \right. \\ \left. - \frac{z}{k_0^{(p)}(k_0^{(p)} + k_{\pm 2}^{(p)})} \frac{d\Psi_0^{(p)}(z)}{dz} \right\} + \frac{im_p e\mathcal{E}}{k_{\pm 2}^{(p)} \hbar^2} \left\{ \frac{1}{ik_{\pm 1}^{(p)}(k_{\pm 1}^{(p)} - k_{\pm 2}^{(p)})^2} \frac{d\psi_{\pm 1}^{(p)}(z)}{dz} - \frac{1}{ik_{\pm 1}^{(p)}(k_{\pm 1}^{(p)} + k_{\pm 2}^{(p)})^2} \frac{d\psi_{\pm 1}^{(p)}(z)}{dz} - \right. \\ \left. - \frac{iz}{k_{\pm 1}^{(p)} - k_{\pm 2}^{(p)}} \psi_{\pm 1}^{(p)}(z) + \frac{iz}{k_{\pm 1}^{(p)} + k_{\pm 2}^{(p)}} \psi_{\pm 1}^{(p)}(z) \right\} = -\frac{\hbar^2 e^2 \mathcal{E}^2}{4m_p (\hbar\omega)^4} (\mp 2E_0 + \hbar\omega) \Psi_0^{(p)}(z) \mp \\ \mp \frac{\hbar^2 e^2 \mathcal{E}^2}{m_p (\hbar\omega)^3} z \frac{d\Psi_0^{(p)}(z)}{dz} + \frac{e^2 \mathcal{E}^2 z^2}{2(\hbar\omega)^2} \Psi_0^{(p)}(z) + \frac{e^2 \mathcal{E}^2 \hbar^4}{2m_p^2 (\hbar\omega)^4} \frac{d^2 \Psi_0^{(p)}(z)}{dz^2} \mp \frac{e\mathcal{E}}{\hbar\omega} z \psi_{\pm 1}^{(p)}(z) + \\ + \frac{e\mathcal{E} \hbar^2}{m_p (\hbar\omega)^2} \frac{d\psi_{\pm 1}^{(p)}(z)}{dz} = \left(\frac{U_1}{2\Omega} \right)^2 \left(\frac{\hbar^2}{m_p z_5^2} \frac{\Omega \mp 2E_0}{\Omega^2} + 2 \left(\frac{z}{z_5} \right)^2 \right) \Psi_0^{(p)}(z) \mp \frac{\hbar^2 U_1^2 z}{m z_5^2 \Omega^3} \frac{d\Psi_0^{(p)}(z)}{dz} + \\ \left(\frac{\hbar^2 U_1}{2m_p z_5 \Omega^2} \right)^2 \frac{d^2 \Psi_0^{(p)}(z)}{dz^2} \mp \frac{U_1}{\Omega} \frac{z}{z_5} \psi_{\pm 1}^{(p)}(z) + \frac{\hbar^2 U_1}{m_p z_5 \Omega^2} \frac{d\psi_{\pm 1}^{(p)}(z)}{dz}.$$

Тепер остаточно отримуємо, що:

$$\Phi_{\pm 2}(z) = \sum_{p=1}^5 \Phi_{\pm 2}^{(p)}(z) [\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)] + \Phi_{\pm 2}^{(6)}(z) \theta(z - z_5) = \\ = \sum_{p=1}^5 \left[\left(\frac{U_1}{2\Omega} \right)^2 \left(\frac{\hbar^2}{m_p z_5^2} \frac{\Omega \mp 2E_0}{\Omega^2} + 2 \left(\frac{z}{z_5} \right)^2 \right) \Psi_0^{(p)}(z) \mp \frac{\hbar^2 U_1^2 z}{m z_5^2 \Omega^3} \frac{d\Psi_0^{(p)}(z)}{dz} + \right.$$

$$\begin{aligned}
& + \left(\frac{\hbar^2 U_1}{2m_p z_5 \Omega^2} \right)^2 \frac{d^2 \Psi_0^{(p)}(z)}{dz^2} \mp \frac{U_1 z}{\Omega z_5} \Psi_{\pm 1}^{(p)}(z) + \frac{\hbar^2 U_1}{m_p z_5 \Omega^2} \frac{d \Psi_{\pm 1}^{(p)}(z)}{dz} \left[\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p) \right] + \\
& + \left(\frac{1}{2} \left(\frac{U_1}{\Omega} \right)^2 \Psi_0^{(6)}(z) \mp \frac{U_1}{\Omega} \Psi_{\pm 1}^{(6)}(z) \right) \theta(z - z_5)
\end{aligned} \tag{1.19}$$

У виразах (1.17)-(1.19) введено такі позначення:

$$\begin{aligned}
k_{\pm\alpha}^{(0)} = k_{\pm\alpha}^{(2)} &= \sqrt{\frac{2m_0(E \pm \alpha\Omega)}{\hbar^2}}; \quad k_{\pm\alpha}^{(1)} = k_{\pm\alpha}^{(3)} = k_{\pm\alpha}^{(5)} = \sqrt{\frac{2m_1(E - U \pm \alpha\Omega)}{\hbar^2}}; \\
k_{\pm\alpha}^{(4)} = k_{\pm\alpha}^{(6)} &= \sqrt{\frac{2m_2(E + V \pm \alpha\Omega)}{\hbar^2}}, \quad U_1 = eC\epsilon_5; \quad A_{\pm 1}^{(0)} = A_{\pm 2}^{(0)} = B_{\pm 1}^{(6)} = B_{\pm 2}^{(6)} = 0.
\end{aligned} \tag{1.20}$$

Усі невідомі коефіцієнти $A_0^{(p)}, B_0^{(p)}, A_{\pm 1}^{(p)}, B_{\pm 1}^{(p)}, A_{\pm 2}^{(p)}, B_{\pm 2}^{(p)}$ ($p = 0 \div 5$) однозначно визначаються за допомогою граничних умов неперервності для хвильової функції $\Psi(z, t)$ та потоків її ймовірності на всіх гетеромежах РТС у будь-який момент часу t [3*, 4*]:

$$\Psi^{(p)}(z_p - 0, t) = \Psi^{(p+1)}(z_p + 0, t); \quad \frac{1}{m_p} \frac{d\Psi^{(p)}(z, t)}{dz} \Big|_{z=z_p-0} = \frac{1}{m_{p+1}} \frac{d\Psi^{(p+1)}(z, t)}{dz} \Big|_{z=z_p+0}, \tag{1.21}$$

що разом з умовою нормування (1.12) тепер однозначно визначає хвильову функцію $\Psi_0(z)$, а також розраховані вище поправки до неї першого та другого порядків $\Psi_{\pm 1}(z)$ і $\Psi_{\pm 2}(z)$ відповідно, а отже і повну хвильову функцію $\Psi(z, t)$.

Отримані поправки першого та другого порядків $\Psi_{\pm 1}(z)$ і $\Psi_{\pm 2}(z)$ ми далі використаємо для розрахунку величин густин електронного струму через наносистему, який зумовлений впливом електромагнітного поля. Для цього застосовується відоме квантово-механічне співвідношення:

$$j_{\pm\alpha} = \frac{i e \hbar n_0}{2m_p} \left(\Psi_{\pm\alpha}(z) \frac{d\Psi_{\pm\alpha}^*(z)}{dz} - \Psi_{\pm\alpha}^*(z) \frac{d\Psi_{\pm\alpha}(z)}{dz} \right), \quad (\alpha = 1, 2) \tag{1.22}$$

і розрахувати аналітично дійсну частину електронної динамічної провідності наноструктури, яка виражається як сума двох парціальних складових:

$$\sigma^{(II)}(\Omega) = \sigma^{(1)}(\Omega) + \sigma^{(2)}(\Omega), \tag{1.23}$$

де

$$\sigma^{(1)}(\Omega) = \sigma^{(1)+}(\Omega) + \sigma^{(1)-}(\Omega), \quad (1.24)$$

$$\sigma^{(1)+}(\Omega) = \frac{e^2 \hbar \Omega z_5 n_0}{2m_2 U_1^2} \left(k_{+1}^{(6)} |A_{+1}^{(6)}|^2 - k_{-1}^{(6)} |A_{-1}^{(6)}|^2 + \frac{U_1}{2\Omega} (P_{01}^- - P_{01}^+) \right); \quad (1.25)$$

$$\sigma^{(1)-}(\Omega) = \frac{e^2 \hbar \Omega z_5 n_0}{2m_0 U_1^2} \left(k_{+1}^{(0)} |B_{+1}^{(0)}|^2 - k_{-1}^{(0)} |B_{-1}^{(0)}|^2 \right),$$

і аналогічно до (1.24):

$$\sigma^{(2)}(\Omega) = \sigma^{(2)+}(\Omega) + \sigma^{(2)-}(\Omega), \quad (1.26)$$

де

$$\sigma^{(2)+}(\Omega) = \frac{e^2 \hbar \Omega z_5 n_0}{m_2 U_1^2} \left[k_{+2}^{(6)} |A_{+2}^{(6)}|^2 - k_{-2}^{(6)} |A_{-2}^{(6)}|^2 + \frac{U_1}{2\Omega} (P_{12}^- - P_{12}^+) + \left(\frac{U_1}{\Omega} \right)^2 \left(k_{+1}^{(6)} |A_{+1}^{(6)}|^2 - k_{-1}^{(6)} |A_{-1}^{(6)}|^2 \right) + \left(\frac{U_1}{2\Omega} \right)^2 (P_{02}^+ - P_{02}^-) + \frac{1}{4} \left(\frac{U_1}{\Omega} \right)^3 (P_{01}^- - P_{01}^+) \right]; \quad (1.27)$$

$$\sigma^{(2)-}(\Omega) = \frac{e^2 \hbar \Omega z_5 n_0}{m_0 U_1^2} \left(k_{+2}^{(0)} |B_{+2}^{(0)}|^2 - k_{-2}^{(0)} |B_{-2}^{(0)}|^2 \right), \quad (1.28)$$

Тут уведено позначення:

$$P_{01}^{\mp} = \mp (k_0^{(6)} + k_{\pm 1}^6) (A_0^{(6)} A_{\pm 1}^{(6)*} + A_0^{(6)*} A_{\pm 1}^{(6)}); \quad (1.29)$$

$$P_{02}^{\mp} = \mp (k_0^{(6)} + k_{\pm 2}^6) (A_0^{(6)} A_{\pm 2}^{(6)*} + A_0^{(6)*} A_{\pm 2}^{(6)}); \quad (1.30)$$

$$P_{12}^{\mp} = \mp (k_{\pm 1}^6 + k_{\pm 2}^6) (A_{\pm 1}^{(6)} A_{\pm 2}^{(6)*} + A_{\pm 1}^{(6)*} A_{\pm 2}^{(6)}). \quad (1.31)$$

Уведені в (1.24), (1.26) парціальні складові σ^+ та σ^- мають фізичний зміст як провідності електронних потоків, які напрямлені на вихід ($\sigma^+(\Omega)$) та вхід ($\sigma^-(\Omega)$) наносистеми відносно напрямку початкового електронного потоку.

Варто зазначити, що динамічна провідність, розрахована до другого порядку теорії збурень $\sigma^{(II)}$ є залежна від напруженості електромагнітного поля, на відміну від величини електронної провідності $\sigma^{(I)} = \sigma^{(I)}$, обчисленої безпосередньо в першому її порядку, яка не є залежною від неї як видно із аналітичних виразів, що її задають [3*, 4*].

1.3. Властивості динамічної провідності наносистем в яких реалізуються можливості двофотонної лазерної генерації. Критерії отримання геометричних конфігурацій наносистем в яких є можливими двофотонні квантові переходи з однаковими частотами

Ключовим аспектом для забезпечення оптимальної роботи ККЛ є зменшення впливу негативних факторів, які можуть вивести наноприлад з когерентного стану та викликати невизначеності в його функціонуванні. Цей фактор є критично важливим при виборі конструкції активної зони окремого каскаду ККЛ, що працює на основі двофотонної генерації лазерного випромінювання, що виникає через послідовні резонансні квантові переходи між електронними квазістаціонарними станами з відповідними енергіями E_n, E_{n-1}, E_{n-2} . З фізичної точки зору, для стабільної роботи такого наноприладу важливою умовою є випромінювання електромагнітних хвиль з однаковою енергією $\Omega = \Omega_{n,n-1} = E_n - E_{n-1} = \Omega_{n-1,n-2} = E_{n-1} - E_{n-2}$, яка визначається як різниця між електронними енергіями резонансних квазістаціонарних станів [4*]. В такому разі, на прикладі часто досліджуваної [32], трибар'єрної нано-РТС (з $\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$ – бар'єрами, $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ – зовнішньою лівою і вхідною ямами та $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$ - зовнішньою правою і вихідною ямами) з наведеними далі фізичними і геометричними параметрами:

$$n_0 = 10^{16} \text{ см}^{-3}; m_0 = 0.046m_e; m_1 = 0.089m_e;$$

$$m_2 = (0.067 - 0.045x)m_e; U = 516 \text{ меВ}; V = (390 - 830x) \text{ меВ};$$

$$\Delta_1 = \Delta_3 = 2 \text{ нм}; \Delta_2 = 4 \text{ нм}; b_1 = 10,8 \text{ нм}; b_2 = 10,518 \text{ нм}$$

виконувався розрахунок резонансних енергій (E_1, E_2, E_3, E_4) та резонансних ширин ($\Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_3, \Gamma_4$) перших чотирьох квазістаціонарних станів у залежності від концентрації Ga (x) у вихідній потенціальній ямі та в зовнішньому середовищі, що розташоване праворуч від РТС. Результати таких обчислень подано на Рис. 1.2.а, б.

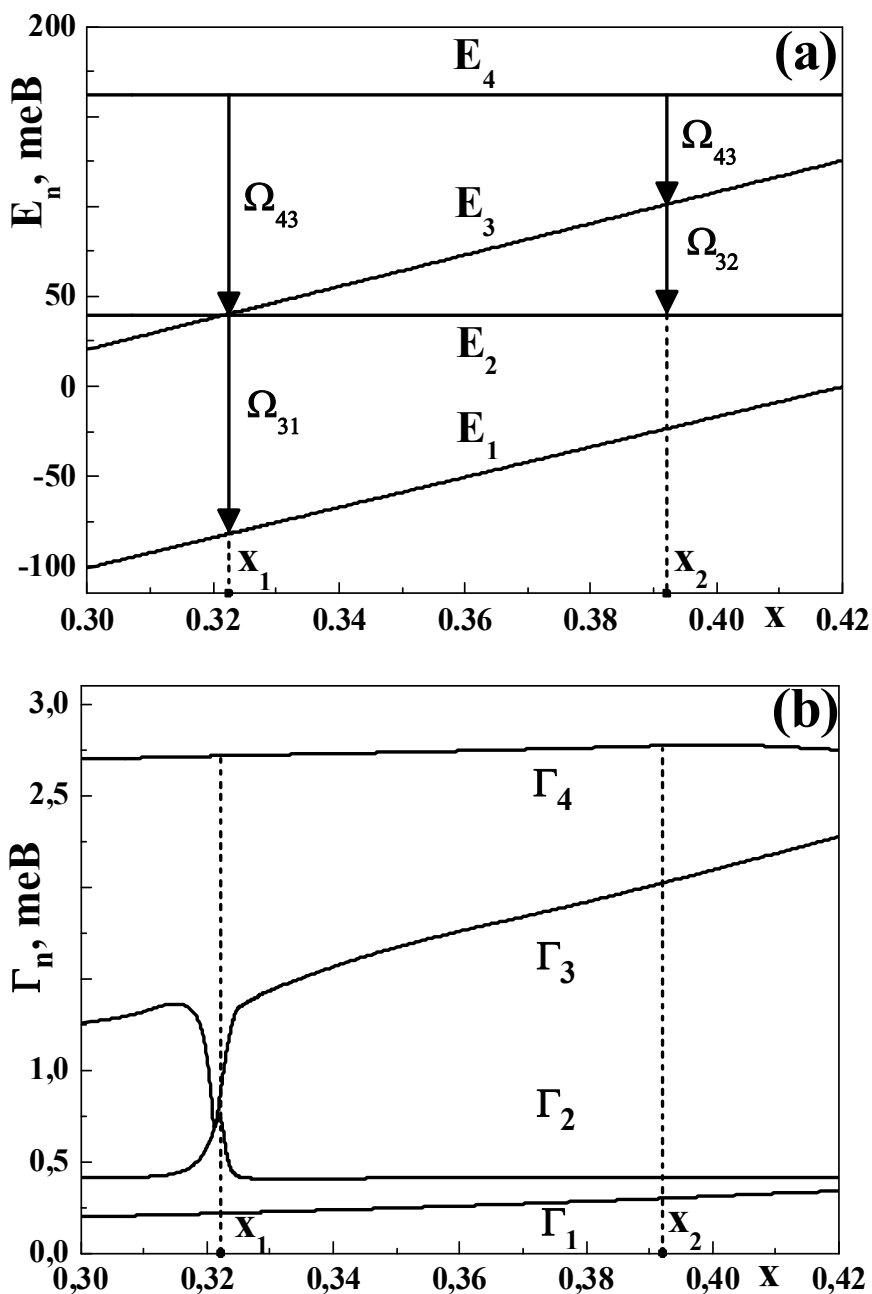


Рис. 1.2. Залежності резонансних енергій (E_n) і резонансних ширин (Γ_n) перших чотирьох електронних квазістаціонарних станів від концентрації Ga (x) у другій потенціальній ямі та зовнішньому середовищі справа від наносистеми.

Як видно з Рис. 1.2, залежності резонансних енергій та ширин квазістаціонарних станів від концентрації Ga (x) визначаються їх областю локалізації в РТС. Зокрема, резонансні енергії та ширини електронних станів, що локалізуються у вихідній потенціальній ямі, лінійно зростають із збільшенням x , що еквівалентно зменшенню глибини вихідної ями та зовнішнього правого середовища.

Натомість резонансні енергії та ширини квазістаціонарних станів, локалізованих у вхідній потенціальній ямі РТС, майже не залежать від концентрації Ga [3*]:.

З Рис. 1.2а також видно, що при значенні концентрації $x = 0,322$ відбувається колапс другого та третього квазістаціонарних станів, умови і причини виникнення якого зумовлені тунелюванням електрона через внутрішній потенціальний бар'єр.

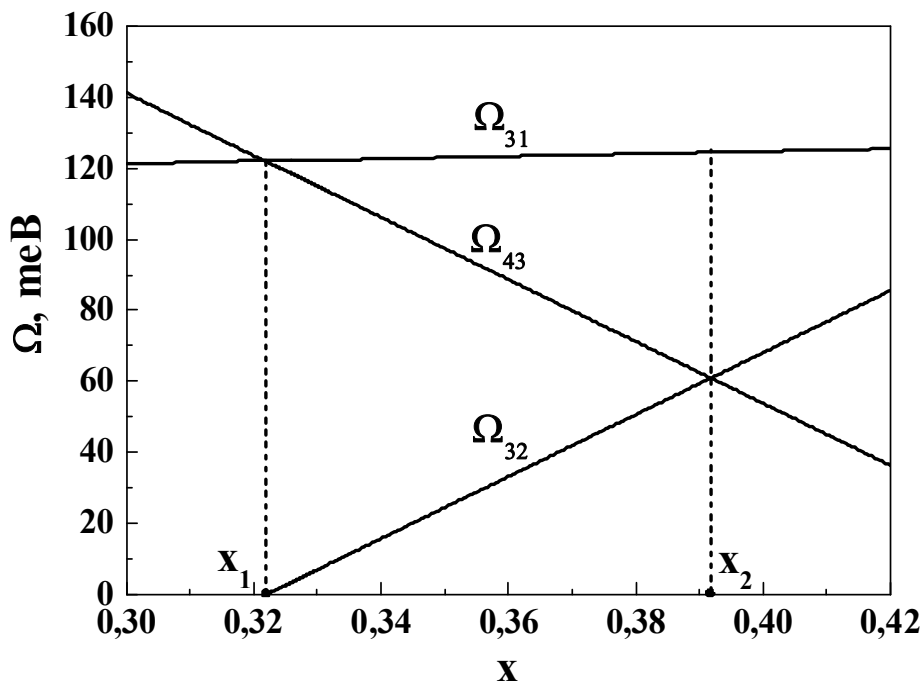


Рис. 1.3. Залежності частот випромінювання Ω_{43} , Ω_{32} і Ω_{31} від концентрації Ga (x) у другій потенціальній ямі та в зовнішньому середовищі справа від РТС.

На Рис. 1.3 подано залежності енергій квантових переходів ($\Omega_{43}, \Omega_{31}, \Omega_{32}$) від x , з якого видно, що існують два значення концентрації Ga ($x_1 = 0,322$; $x_2 = 0,394$), при яких трибар'єрна РТС, як активна зона ККЛ, може працювати у двофотонному режимі у різному частотному діапазоні, оскільки при $x = x_1$: $\Omega_1 = \Omega_{43} = \Omega_{31} = 121,76$ мєВ, а при $x = x_2$: $\Omega_2 = \Omega_{43} = \Omega_{32} = 61$ мєВ.

Для дослідження внеску двофотонних процесів у формування електронної активної провідності РТС було здійснено її розрахунок у рамках однофотонного та двофотонного наближень, згідно теорії розвиненої в попередньому підрозділі. Для того, щоб виконувати умови наближення слабого сигналу ($U_1 = e\epsilon z_5 \ll \Omega_0$)

величина U_1 вибиралась малою ($U_1 = 10^{-3} \Omega_0$). Результати розрахунків логарифмів активної динамічної провідності, що утворюється лазерними квантовими переходами з четвертого квазістаціонарного стану при випромінюванні одного та двох фотонів із енергією Ω_{43} , залежно від концентрації x подано на Рис. 1.4.

З Рис. 1.4 видно, що в залежно від концентрації x електронна провідність у однофотонному $\sigma_{43}^{(I)}$ та двофотонному $\sigma_{43}^{(II)}$ залишається якісно подібною. І збільшенням x в області $0 \leq x \leq 0.325$ величини провідностей поступово зростають, далі при зміні концентрації в області $0.325 \leq x \leq 0.394$ залежності мають різко спадний характер, і при $0.394 \leq x \leq 0.42$ величини $\sigma_{43}^{(I)}$ та $\sigma_{43}^{(II)}$ швидко зростають. Суттєва кількісна різниця між величинами провідностей у однофотонному та двофотонному наближеннях виникає при двох значеннях концентрації Ga ($x_1 = 0.322$; $x_2 = 0.394$), коли, як видно з Рис. 1.2, Рис. 1.3, в РТС реалізується режим двофотонної лазерної генерації при резонансних квантових переходах ($|4\rangle \rightarrow |3\rangle = |2\rangle \rightarrow |1\rangle$ при $x = x_1$; $|4\rangle \rightarrow |3\rangle = |3\rangle \rightarrow |2\rangle$ при $x = x_2$) між квазістаціонарними станами електрона. Отже, виявлені дві конфігурації РТС, в яких за рахунок двофотонного випромінювання має місце підсилення лазерної генерації, як видно зі вставки на Рис. 1.4, складає не менше ніж 37%. Однак не дивлячись на суттєве зростання ефективності роботи РТС у другій конфігурації ($x_2 = 0.394$), як активної зони ККЛ, не є оптимальною через низьке значення провідності, тому не має практичного застосування, як це встановлено у працях автора дисертації [3*, 4*].

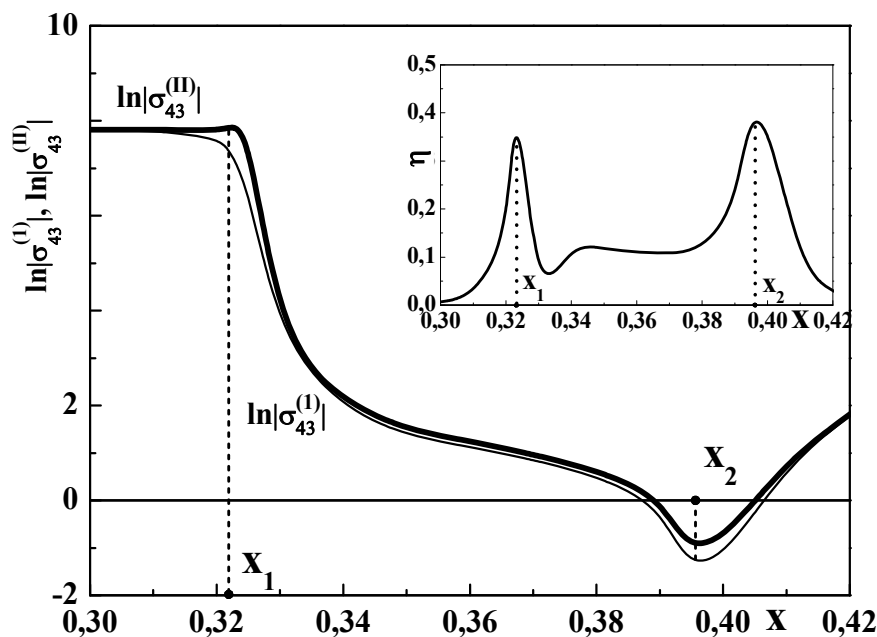


Рис. 1.4. Залежності логарифмів динамічних провідностей, розрахованих у однофотонному $\sigma^{(I)}$ та двофотонному $\sigma^{(II)}$ наближеннях в одиницях $\sigma_0=1$ См/см, та величини відносного підсилення $\eta = (\sigma^{(II)} - \sigma^{(I)})/\sigma^{(II)}$ у залежності від концентрації Ga (x) в другій потенціальній ямі та в зовнішньому середовищі справа від РТС.

У першій конфігурації ($x_1 = 0.322$) РТС величини провідностей та її парціальних складових такі:

$\sigma^{(II)} = -1770.23$ См/см; $\sigma^{(II)+} = -1243.58$ См/см; $\sigma^{(II)-} = -526.648$ См/см. Як можна зауважити, то видно, що не лише абсолютна величина провідності суттєва, але й її “корисна” складова ($\sigma_{43}^{(II)+}$), яка визначається електронним потоком, спрямованим на вихід з РТС, значно переважає складову провідності ($\sigma_{43}^{(II)-}$), сформовану електронним потоком у зворотному напрямі, що забезпечує максимальний електронний потік на виході з активної зони ККЛ, напрямлений у наступний каскад наноприладу.

1.4. Теорія активної динамічної провідності багатошарових наносистем к робочих елементів квантового каскадного лазера у випадку двофотонного електронного переходу з різними частотами електромагнітного поля

Постановка задачі є такою. У Декартовій системі координат розглядається трибар'єрна РТС, яка розташована так, що вісь OZ є перпендикулярною до меж поділу середовищ наносистеми (Рис. 1.5) [6*,7*]. Перпендикулярно до шарів РТС прикладене постійне електричне поле з напруженістю \vec{F} .

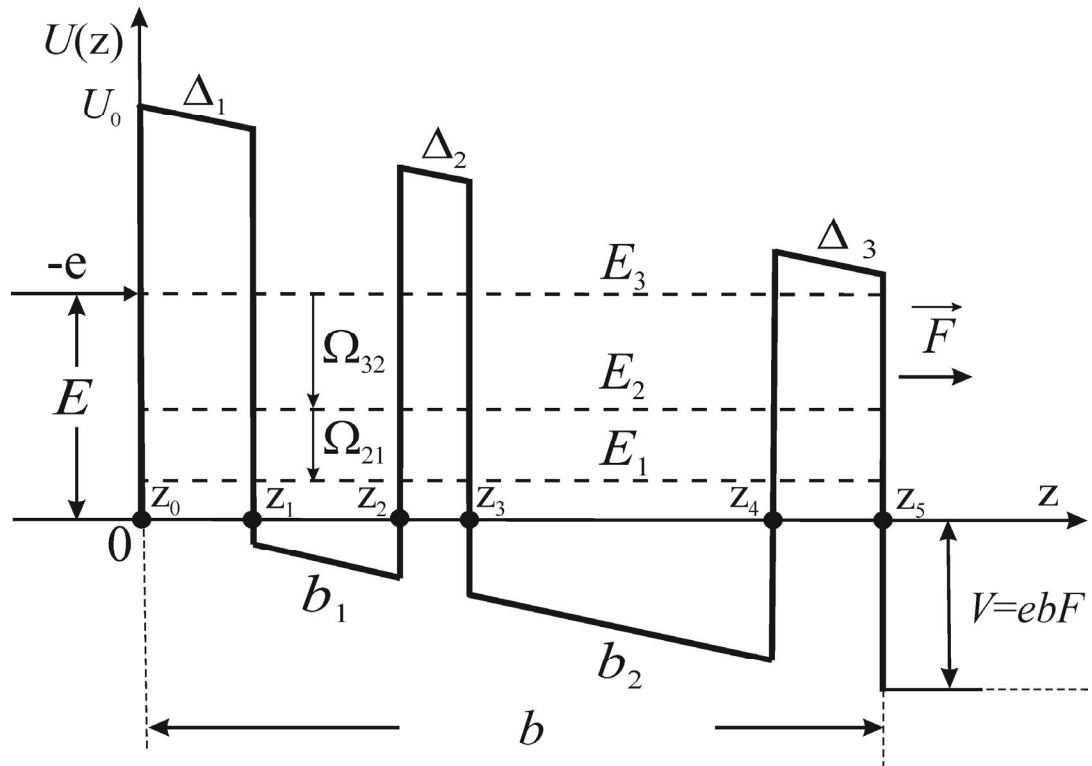


Рис. 1.5. Геометрична та енергетична схеми досліджуваної трибар'єрної наноструктури

З урахуванням незначної різниці між сталими решіток шарів-ям та шарів-бар'єрів для електрона застосовується модель ефективних мас та прямокутних потенціалів [7*]:

$$m(z) = m_0 \sum_{p=0}^3 [\theta(z - z_{2p-1}) - \theta(z - z_{2p})] + m_1 \sum_{p=0}^2 [\theta(z - z_{2p}) - \theta(z - z_{2p+1})] \quad (1.32)$$

$$U(z) = U \sum_{p=0}^2 [(\theta(z - z_{2p}) - \theta(z - z_{2p+1})) - eF \{z[\theta(z) - \theta(z - z_5)] + z_5 \theta(z - z_5)\}] \quad (1.33)$$

де $\theta(z)$ - одинична функція Хевісайда, $z_{-1} \rightarrow -\infty$, $z_6 \rightarrow \infty$, а m_0 і m_1 - ефективні маси електрона в потенціальних ямах та бар'єрах РТС відповідно.

Аналогічно розглядуваному вище випадку також вважається, що моноенергетичний потік електронів з енергією E , близькою до енергії третього енергетичного рівня $E \approx E_3$, та концентрацією n_0 падає зліва вздовж осі OZ перпендикулярно до площин трибар'єрної нано-РТС. За таких умов хвильова функція $\Psi(z, t)$ електрона повинна задовольняти повне рівняння Шредінгера [6*, 7*]:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(z, t)}{\partial t} = [H_0(z) + H(z, t)]\Psi(z, t), \quad (1.34)$$

де відповідно

$$H_0(z) = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} + U(z) \quad (1.35)$$

– гамільтоніан стаціонарної задачі для електрона, а

$$H(z, t) = -e[\epsilon_1(e^{i\omega_1 t} + e^{-i\omega_1 t}) + \epsilon_2(e^{i\omega_2 t} + e^{-i\omega_2 t})][z\theta(z) + (z_5 - z)\theta(z - z_5)] \quad (1.36)$$

– гамільтоніан, який у дипольному наближенні описує взаємодію електронів із слабким змінним двочастотним електромагнітним полем, яке характеризується різними частотами ω_1 і ω_2 та амплітудами напруженості його електричних складових ϵ_1 і ϵ_2 [7*].

У наближенні слабого сигналу, за умови реалізації двофотонних переходів між електронними станами з випромінюванням та поглинанням електромагнітних хвиль, розв'язок рівняння Шредінгера (1.34) шукається у другому порядку теорії збурень у вигляді:

$$\begin{aligned} \Psi(z, t) = & \Psi_0(z)e^{-i\omega_0 t} + \Psi_{-1}(z)e^{-i(\omega_0 - \omega_1)t} + \Psi_{+1}(z)e^{-i(\omega_0 + \omega_1)t} + \\ & + \Psi_{-2}(z)e^{-i(\omega_0 - \omega_1 - \omega_2)t} + \Psi_{+2}(z)e^{-i(\omega_0 + \omega_1 + \omega_2)t}, \end{aligned} \quad (1.37)$$

У результаті підстановки (1.37) в рівняння (1.34) будемо мати:

$$\begin{aligned}
& \hbar\omega_0\Psi_0(z)e^{-i\omega_0 t} + \hbar(\omega_0 - \omega_1)\Psi_{-1}(z)e^{-i(\omega_0 - \omega_1)t} + \hbar(\omega_0 + \omega_1)\Psi_{+1}(z)e^{-i(\omega_0 + \omega_1)t} + \\
& + \hbar(\omega_0 - \omega_1 - \omega_2)\Psi_{-2}(z)e^{-i(\omega_0 - \omega_1 - \omega_2)t} + \hbar(\omega_0 + \omega_1 + \omega_2)\Psi_{+2}(z)e^{-i(\omega_0 + \omega_1 + \omega_2)t} = \\
& = \left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} + U(z) - e[\mathcal{C}_1(e^{i\omega_1 t} + e^{-i\omega_1 t}) + \mathcal{C}_2(e^{i\omega_2 t} + e^{-i\omega_2 t})] \right] \Psi(z, t), \\
& \times [z\theta(z) + (z_5 - z)\theta(z - z_5)].
\end{aligned}$$

Звідси після прирівнювання величини однакового порядку зліва та справа безпосередньо отримується система рівнянь для визначення хвильової функції $\Psi_0(z)$ і поправок до неї першого $\Psi_{\pm 1}(z)$ та другого $\Psi_{\pm 2}(z)$ порядків відповідно:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} + U(z) - E \right] \Psi_0(z) = 0, \quad (1.38)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} + U(z) - (E \pm \Omega_1) \right] \Psi_{\pm 1}(z) - e\mathcal{C}_1 [z\theta(z) + (z_5 - z)\theta(z - z_5)] \Psi_0(z), \quad (1.39)$$

$$\begin{aligned}
& \left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} + U(z) - (E \pm (\Omega_1 + \Omega_2)) \right] \Psi_{\pm 2}(z) - \\
& - e\mathcal{C}_2 [z\theta(z) + (z_5 - z)\theta(z - z_5)] \Psi_{\pm 1}(z),
\end{aligned} \quad (1.40)$$

де зроблено такі позначення: $\omega_0 = E/\hbar$, $\Omega_1 = \hbar\omega_1$, $\Omega_2 = \hbar\omega_2$.

Розв'язок стаціонарного рівняння Шредінгера (1.38), визначений у кожній з областей РТС є лінійною комбінацією функцій Ейрі, в такому разі функція $\Psi_0(z)$ може бути записана у наступному вигляді:

$$\begin{aligned}
\Psi_0(E, z) &= \Psi_0^{(0)}(z)\theta(-z) + \Psi_0^{(6)}(z)\theta(z - z_5) + \sum_{p=1}^5 \Psi_0^{(p)}(z)[\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)] = \\
&= (A_0^{(0)} e^{ik_0^{(0)}z} + B_0^{(0)} e^{-ik_0^{(0)}z})\theta(-z) + A_0^{(6)} e^{ik_0^{(6)}(z-z_5)}\theta(z - z_5) + \\
&+ \sum_{p=1}^5 [A_0^{(p)} Ai(\xi^{(p)}) + B_0^{(p)} Bi(\xi^{(p)})][\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)],
\end{aligned} \quad (1.41)$$

де $Ai(\xi)$, $Bi(\xi)$ - функції Ейрі першого та другого роду відповідно,

$$\begin{aligned}
k^{(0)} &= \hbar^{-1} \sqrt{2m_0 E}, \quad k^{(6)} = \hbar^{-1} \sqrt{2m_0 (E + eFz_5)}, \\
\xi^{(1)} = \xi^{(3)} = \xi^{(5)} &= (2m_1 eF/\hbar^2)^{1/3}, \quad \xi^{(2)} = \xi^{(4)} = -(2m_0 eF/\hbar^2)^{1/3}.
\end{aligned} \quad (1.42)$$

Хвильова функція $\Psi_0(z)$, що визначена згідно зі співвідношеннями (1.41), має задовольняти умову нормування:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_0^*(k', z) \Psi_0(k, z) dz = \delta(k - k') \quad (1.42)$$

із її використанням виконується аналітичний розрахунок функції розподілу густини ймовірності знаходження електрона у межах РТС:

$$W(z) = \frac{1}{z_5} \int_0^{z_5} |\Psi_0(z)|^2 dz, \quad (1.43)$$

яка визначає спектральні характеристики електронних квазістаціонарних станів в цьому випадку: резонансні енергії (E_n) та часи життя (τ_n).

З урахуванням властивостей функцій Ейрі та аналітичної складності рівнянь (1.39) і (1.40) їх доцільно розв'язувати виконуючи лінійну апроксимацію ефективного потенціалу $U_{eff}(z) = U(z)$ на всіх шарах РТС. Тоді апроксимований ефективний потенціал для електрона набуває вигляду:

$$U_{eff}(z) \approx \tilde{U}_{eff}(z) = \sum_{p=0}^4 \sum_{l=0}^N U_{eff}(z_{p_l}) [\theta(z - z_{p_l}) - \theta(z - z_{p_{l+1}})], \quad (1.44)$$

де

$$z_{p_l} = \frac{l}{2N} (z_p - z_{p-1}), \quad p = 1 \div 5; \quad z_0 = 0, \quad (1.45)$$

N - кількість розбиттів p -го шару РТС.

Тепер, знайдений з необхідною точністю, розв'язок стаціонарного рівняння Шредінгера (1.38) отримується у вигляді:

$$\begin{aligned} \Psi_0(E, z) &= \Psi_0^{(0)}(z) \theta(-z) + \Psi_0^{(6)}(z) \theta(z - z_5) + \sum_{p=1}^5 \sum_{l=0}^N \Psi_{0l}^{(p)}(z) [\theta(z - z_{p_l}) - \theta(z - z_{p_{l+1}})] = \\ &= \left(A_0^{(0)} e^{ik_0^{(0)} z} + B_0^{(0)} e^{-ik_0^{(0)} z} \right) \theta(-z) + A_0^{(6)} e^{ik_0^{(6)} (z - z_5)} \theta(z - z_5) + \\ &+ \sum_{p=1}^5 \sum_{l=0}^N \left[A_{0l}^{(p)} e^{ik_0^{(l)} (z - z_{p_l})} + B_{0l}^{(p)} e^{-ik_0^{(l)} (z - z_{p_l})} \right] [\theta(z - z_{p_l}) - \theta(z - z_{p_{l+1}})], \end{aligned} \quad (1.46)$$

де

$$k_0^{(p_l)} = k_0^{(p_l)}(z_{p_l}) = \begin{cases} \hbar^{-1} \sqrt{2m_0(E + eFz_{p_l})}; & z_{p_l} \in (z_1, z_2) \cup (z_3, z_4) \\ \hbar^{-1} \sqrt{2m_1(E - U + eFz_{p_l})}. & z_{p_l} \in (z_0, z_1) \cup (z_2, z_3) \cup (z_4, z_5). \end{cases} \quad (1.47)$$

де $A_{0l}^{(p)}$, $B_{0l}^{(p)}$ - коефіцієнти у розв'язках рівняння (1.38) для l -го розбиття p -го шару наносистеми. Ці коефіцієнти, так само як і коефіцієнти $A_0^{(0)}$, $B_0^{(0)}$, $A_0^{(6)}$ визначаються з умов неперервності хвильової функції $\Psi_0(E, z)$ та потоків її густин ймовірності на гетеромежах усіх шарів наноструктури й меж їх розбиттів, що отримуються при апроксимації ефективного потенціалу [6*, 7*]. Ці умови є такими:

$$\Psi_0^{(p_l)}(E, z_{p_l} - 0) = \Psi_0^{(p_{l+1})}(E, z_{p_l} + 0); \quad \left. \frac{1}{m_{p_l}} \frac{d\Psi_0^{(p_l)}(E, z)}{dz} \right|_{z=z_{p_l}-0} = \left. \frac{1}{m_{p_{l+1}}} \frac{d\Psi_0^{(p_{l+1})}(E, z)}{dz} \right|_{z=z_{p_l}+0}, \quad (1.48)$$

Згадана вище необхідна точність, з якою визначаються розв'язки (1.46) по відношенню до розв'язків (1.41) задається очевидною умовою:

$$\varepsilon = \frac{|\Psi_0(E, z)|^2 - |\tilde{\Psi}_0(E, z)|^2}{|\Psi_0(E, z)|^2} \ll 1, \quad (1.49)$$

де $\Psi_0(E, z)$ - це розв'язки, отримані за співвідношенням (1.41), а $\tilde{\Psi}_0(E, z)$ - розв'язки отримані згідно співвідношення (1.46).

Розв'язки рівняння (1.39) подаються у вигляді суперпозиції функцій:

$$\Psi_{\pm 1}(z) = \psi_{\pm 1}(z) + \Phi_{\pm 1}(z), \quad (1.50)$$

де

$$\begin{aligned} \psi_{\pm 1}(z) &= \psi_{\pm 1}^{(0)}(z)\theta(-z) + \psi_{\pm 1}^{(6)}(z)\theta(z - z_5) + \sum_{p=1}^5 \psi_{\pm 1}^{(p)}(z) [\theta(z - z_{p_l}) - \theta(z - z_{p_{l+1}})] = \\ &= B_{\pm 1}^{(0)} e^{-ik_{\pm 1}^{(0)} z} \theta(-z) + A_{\pm 1}^{(6)} e^{ik_{\pm 1}^{(6)}(z - z_5)} \theta(z - z_5) + \\ &+ \sum_{p=1}^5 \sum_{l=0}^N \left[A_{\pm 1}^{(p)} e^{ik_{\pm 1}^{(p)}(z - z_{p_l})} + B_{\pm 1}^{(p)} e^{-ik_{\pm 1}^{(p)}(z - z_{p_l})} \right] [\theta(z - z_{p_l}) - \theta(z - z_{p_{l+1}})] \end{aligned} \quad (1.51)$$

– розв'язки однорідних рівнянь (1.39), які шукаються з використанням підходу, що застосовувався при знаходженні розв'язків (1.17).

Розв'язки неоднорідних рівнянь (1.39) при введенні позначення $U_1 = e\mathcal{E}_1 z_5$, отримуються також з використанням методу Лагранжа і є такими:

$$\begin{aligned} \Phi_{\pm 1}(z) &= \sum_{p=1}^5 \sum_{l=0}^N \Phi_{\pm 1l}^{(p)}(z) [\theta(z - z_{p_l}) - \theta(z - z_{p_{l+1}})] + \Phi_{\pm 1}^{(6)}(z) \theta(z - z_5) = \\ &= \sum_{p=1}^5 \sum_{l=0}^N \left[\mp \frac{U_1}{\Omega_1} \frac{z}{z_5} \Psi_{0l}^{(p)}(z) + \frac{\hbar^2 U_1}{m_l z_5 \Omega_1^2} \frac{d\Psi_{0l}^{(p)}(z)}{dz} \right] [\theta(z - z_{p_l}) - \theta(z - z_{p_{l+1}})] \mp \frac{U_1}{\Omega_1} \Psi_0^{(6)}(z) \theta(z - z_5) \end{aligned} \quad (1.52)$$

У виразах (1.51) та (1.52) зроблено такі позначення:

$$\begin{aligned} m_{p_l} &= \begin{cases} m_0; & z_{p_l} \in (z_1, z_2) \cup (z_3, z_4) \\ m_1; & z_{p_l} \in (z_0, z_1) \cup (z_2, z_3) \cup (z_4, z_5) \end{cases} \\ k_{\pm 1}^{(p_l)} = k_{\pm 1}^{(p_l)}(z_{p_l}) &= \begin{cases} \hbar^{-1} \sqrt{2m_0(E + eFz_{p_l} \pm \Omega_1)}; & z_{p_l} \in (z_1, z_2) \cup (z_3, z_4) \\ \hbar^{-1} \sqrt{2m_1(E - U_0 + eFz_{p_l} \pm \Omega_1)}; & z_{p_l} \in (z_0, z_1) \cup (z_2, z_3) \cup (z_4, z_5). \end{cases} \end{aligned} \quad (1.53)$$

У виразах (1.51)-(1.53) знаки "+" та "-" відповідають процесам пов'язаним із випромінюванням та поглинанням електромагнітного поля.

Розв'язки рівнянь (1.40) також шукаються у вигляді суперпозиції функцій:

$$\Psi_{\pm 2}(z) = \psi_{\pm 2}(z) + \Phi_{\pm 2}(z), \quad (1.54)$$

де розв'язки однорідних рівнянь такі:

$$\begin{aligned} \psi_{\pm 2}(z) &= \psi_{\pm 2}^{(0)}(z) \theta(-z) + \psi_{\pm 2}^{(6)}(z) \theta(z - z_5) + \sum_{p=1}^5 \psi_{\pm 2}^{(p)}(z) [\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)] = \\ &= B_{\pm 2}^{(0)} e^{-ik_{\pm 2}^{(0)} z} \theta(-z) + A_{\pm 2}^{(6)} e^{ik_{\pm 2}^{(6)}(z - z_5)} \theta(z - z_5) + \\ &+ \sum_{p=1}^5 \sum_{l=0}^N \left[A_{\pm 2l}^{(p)} e^{ik_{\pm 2}^{(p)}(z - z_{p_l})} + B_{\pm 2l}^{(p)} e^{-ik_{\pm 2}^{(p)}(z - z_{p_l})} \right] [\theta(z - z_{p_l}) - \theta(z - z_{p_{l+1}})] \end{aligned} \quad (1.55)$$

а частинні розв'язки неоднорідних рівнянь, отримані за допомогою методу Лагранжа такі:

$$\begin{aligned}
\Phi_{\pm 2}(z) &= \sum_{p=1}^5 \Phi_{\pm 2l}^{(p)}(z) [\theta(z - z_{p_l}) - \theta(z - z_{p_{l+1}})] + \Phi_{\pm 2}^{(6)}(z) \theta(z - z_5) = \\
&= \sum_{p=1}^5 \sum_{l=0}^N \left[\frac{U_1 U_2}{\Omega_1 (\Omega_1 + \Omega_2)} \left(\frac{\hbar^2}{m_l z_5^2} \frac{\Omega_1 + \Omega_2 \mp 4E_0}{(\Omega_1 + \Omega_2)^2} + \left(\frac{z}{z_5} \right)^2 \right) \Psi_{0l}^{(p)}(z) \mp \right. \\
&\mp \frac{\hbar^2}{m_l z_5^2} \frac{U_1 U_2 (3\Omega_1 + \Omega_2)}{\Omega_1^2 (\Omega_1 + \Omega_2)^2} z \frac{d\Psi_{0l}^{(p)}(z)}{dz} + \left. \left(\frac{\hbar^2 \sqrt{U_1 U_2}}{m_l z_5 \Omega_1 (\Omega_1 + \Omega_2)} \right)^2 \frac{d^2 \Psi_{0l}^{(p)}(z)}{dz^2} \mp \right. \\
&\mp \frac{U_2}{\Omega_2} \frac{z}{z_5} \psi_{\pm 1l}^{(p)}(z) + \left. \frac{\hbar^2 U_2}{m_l z_5 \Omega_2^2} \frac{d\psi_{\pm 1l}^{(p)}(z)}{dz} \right] [\theta(z - z_{p_l}) - \theta(z - z_{p_{l+1}})] + \\
&+ \left(\frac{U_1 U_2}{\Omega_1 (\Omega_1 + \Omega_2)} \Psi_0^{(6)}(z) \mp \frac{U_2}{\Omega_2} \psi_{\pm 1}^{(6)}(z) \right) \theta(z - z_5),
\end{aligned} \tag{1.56}$$

де $U_2 = e\mathcal{E}_2 z_5$, а

$$k_{\pm 2}^{(p_l)} = k_{\pm 2}^{(p_l)}(z_{p_l}) = \begin{cases} \hbar^{-1} \sqrt{2m_0 (E + eFz_{p_l} \pm (\Omega_1 + \Omega_2))}; & z_{p_l} \in (z_1, z_2) \cup (z_3, z_4) \\ \hbar^{-1} \sqrt{2m_1 (E - U + eFz_{p_l} \pm (\Omega_1 + \Omega_2))}. & z_{p_l} \in (z_0, z_1) \cup (z_2, z_3) \cup (z_4, z_5) \end{cases} \tag{1.57}$$

Тепер усі невідомі коефіцієнти $A_0^{(0)}, B_0^{(0)}, A_0^{(6)}, A_{0l}^{(p)}, B_{0l}^{(p)}, B_{\pm 1}^{(0)}, A_{\pm 1}^{(6)}, A_{\pm 1l}^{(p)}, B_{\pm 1l}^{(p)}, B_{\pm 2}^{(0)}, A_{\pm 2}^{(6)}, A_{\pm 2l}^{(p)}, B_{\pm 2l}^{(p)}$ ($p = 0 \div 5, l = 0 \div N$) безпосередньо та однозначно визначаються з умов неперервності хвильової функції $\Psi(z, t)$ та потоків її густин ймовірності на всіх гетеромежах РТС у довільний момент часу t [$3^*, 4^*, 6^*, 7^*$]:

$$\Psi^{(p_l)}(z_{p_l} - 0, t) = \Psi^{(p_{l+1})}(z_{p_l} + 0, t); \quad \left. \frac{1}{m_{p_l}} \frac{d\Psi^{(p_l)}(z, t)}{dz} \right|_{z=z_{p_l}-0} = \left. \frac{1}{m_{p_{l+1}}} \frac{d\Psi^{(p_{l+1})}(z, t)}{dz} \right|_{z=z_{p_l}+0}, \tag{1.58}$$

що разом з умовою нормування (1.42) однозначно визначає хвильову функцію $\Psi_0(z)$ та шукані поправки до неї $\Psi_{\pm 1}(z), \Psi_{\pm 2}(z)$, а отже і повна хвильова функція $\Psi(z, t)$ є визначеною також повністю.

Виконавши аналітичний розрахунок енергії взаємодії електрона з електромагнітним полем, як суму енергій електронних хвиль, що виходять з обох сторін нано-РТС, у квазікласичному наближенні знаходиться дійсна частина

активної провідності σ через густини потоків електронних хвиль, що виходять з обох сторін нано-РТС [3*, 4*, 6*, 7*]:

$$\begin{aligned} \sigma^{(III)}(\Omega_1, \Omega_2, E) = & \frac{\Omega_1}{2z_5 e \epsilon_1^2} \{ [j_{+1}(E + \Omega_1, z = z_5) - j_{-1}(E - \Omega_1, z = z_5)] - \\ & - [j_{+1}(E + \Omega_1, z = z_0) - j_{-1}(E - \Omega_1, z = z_0)] \} + \\ & + \frac{(\Omega_1 + \Omega_2)}{2z_5 e \epsilon_2^2} \{ [j_{+2}(E + \Omega_1 + \Omega_2, z = z_5) - j_{-2}(E - \Omega_1 - \Omega_2, z = z_5)] - \\ & - [j_{+2}(E + \Omega_1 + \Omega_2, z = z_0) - j_{-2}(E - \Omega_1 - \Omega_2, z = z_0)] \}, \end{aligned} \quad (1.59)$$

де перші чотири доданки описують густини електронних потоків, які виникають в одно фотонних електронних переходах, а наступні чотири – у двофотонних.

Крім того доданок

$$\begin{aligned} \sigma^{(I)}(\Omega_1, E) = & \frac{\Omega_1}{2z_5 e \epsilon_1^2} \{ [j_{+1}(E + \Omega_1, z = z_5) - j_{-1}(E - \Omega_1, z = z_5)] - \\ & - [j_{+1}(E + \Omega_1, z = z_0) - j_{-1}(E - \Omega_1, z = z_0)] \} \end{aligned} \quad (1.60)$$

визначає провідність, що формується у однофотонних переходах.

Тут $j_{+1}(E + \Omega_1, z = z_5)$ - електронний потік сформований у детекторному переході, спрямований на вихід з РТС (справа від РТС);

$j_{-1}(E - \Omega_1, z = z_5)$ - електронний потік сформований у лазерному переході, спрямований на вихід з РТС (справа від РТС);

$j_{+1}(E + \Omega_1, z = z_0)$ - електронний потік сформований у детекторному переході, спрямований напрямку протилежно до виходу з РТС (зліва від РТС);

$j_{-1}(E - \Omega_1, z = z_0)$ - електронний потік сформований у лазерному переході, спрямований напрямку протилежно до виходу з РТС (зліва від РТС).

Доданок у виразі (1.59):

$$\begin{aligned} \sigma^{(2)}(\Omega_1, \Omega_2, E) = & \frac{(\Omega_1 + \Omega_2)}{2z_5 e \epsilon_2^2} \{ [j_{+2}(E + \Omega_1 + \Omega_2, z = z_5) - j_{-2}(E - \Omega_1 - \Omega_2, z = z_5)] - \\ & - [j_{+2}(E + \Omega_1 + \Omega_2, z = z_0) - j_{-2}(E - \Omega_1 - \Omega_2, z = z_0)] \} \end{aligned} \quad (1.61)$$

визначає поправку до провідності, що відповідає за двофотонні квантові переходи.

Тут:

Тут $j_{+2}(E + \Omega_1 + \Omega_2, z = z_5)$ - електронний потік сформований у детекторному переході, спрямований на вихід з РТС (справа від РТС);

$j_{-2}(E - \Omega_1 - \Omega_2, z = z_5)$ - електронний потік сформований у лазерному переході, спрямований на вихід з РТС (справа від РТС);

$j_{+2}(E + \Omega_1 + \Omega_2, z = z_0)$ - електронний потік сформований у детекторному переході, спрямований напрямку протилежно до виходу з РТС (зліва від РТС);

s - електронний потік сформований у лазерному переході, спрямований напрямку протилежно до виходу з РТС (зліва від РТС).

Згідно з квантовою механікою густини електронних струмів, які виникають у РТС у результаті квантових переходів між електронними станами з випромінюванням чи поглинанням енергії у одно фотонних ($\Psi_{\pm 1}(z)$) та двофотонних ($\Psi_{\pm 2}(z)$) переходах визначаються виразом [7*]:

$$j_{\pm 1(2)}(E, z) = \frac{i\hbar n_0}{2m_0} \left(\Psi_{\pm 1(2)}(E, z) \frac{d\Psi_{\pm 1(2)}^*(E, z)}{dz} - \Psi_{\pm 1(2)}^*(z) \frac{d\Psi_{\pm 1(2)}(E, z)}{dz} \right), p = 1, 2. \quad (1.62)$$

Врахуємо що хвильові функції для електрона зліва та справа від РТС мають вигляд:

$$\Psi_{\pm 1}(z) = \psi_{\pm 1}(z) = B_{\pm 1}^{(0)} e^{-ik_{\pm 1}^{(0)} z}; \quad \Psi_{\pm 2}(z) = \psi_{\pm 2}(z) = B_{\pm 2}^{(0)} e^{-ik_{\pm 2}^{(0)} z}, \quad \text{при } z < 0 \quad (1.63)$$

тоді використовуючи (1.62) маємо:

$$\begin{aligned} \Psi_{\pm 1}(z) &= \psi_{\pm 1}(z) + \Phi_{\pm 1}(z) = A_{\pm 1}^{(6)} e^{ik_{\pm 1}^{(0)}(z-z_5)} \mp \frac{U_1}{\Omega_1} \Psi_0^{(6)}(z) = A_{\pm 1}^{(6)} e^{ik_{\pm 1}^{(0)}(z-z_5)} \mp \frac{U_1}{\Omega_1} A_0^{(6)} e^{ik_0^{(6)}(z-z_5)}; \\ \Psi_{\pm 2}(z) &= \psi_{\pm 2}(z) + \Phi_{\pm 2}(z) = A_{\pm 2}^{(6)} e^{ik_{\pm 2}^{(0)}(z-z_5)} + \frac{U_1 U_2}{\Omega_1(\Omega_1 + \Omega_2)} \Psi_0^{(6)}(z) \mp \frac{U_2}{\Omega_2} \psi_{\pm 1}(z) = \\ &= A_{\pm 2}^{(6)} e^{ik_{\pm 2}^{(0)}(z-z_5)} + \frac{U_1 U_2}{\Omega_1(\Omega_1 + \Omega_2)} A_0^{(6)} e^{ik_0^{(6)}(z-z_5)} \mp \frac{U_2}{\Omega_2} A_{\pm 1}^{(6)} e^{ik_{\pm 1}^{(0)}(z-z_5)}. \end{aligned} \quad (1.64)$$

Далі знаходимо:

$$\begin{aligned}
j_{\pm 1}(E \pm \Omega_1, z = z_0) &= \frac{i\hbar n_0}{2m_0} \left(\Psi_{\pm 1}(E, z) \frac{d\Psi_{\pm 1}^*(E, z)}{dz} - \Psi_{\pm 1}^*(E, z) \frac{d\Psi_{\pm 1}(E, z)}{dz} \right) = \\
&= \frac{i\hbar n_0}{2m_0} \left(B_{\pm 1}^{(0)} e^{-ik_{\pm 1}^{(0)}z} \frac{d}{dz} (B_{\pm 1}^{(0)*} e^{ik_{\pm 1}^{(0)}z}) - B_{\pm 1}^{(0)*} e^{ik_{\pm 1}^{(0)}z} \frac{d}{dz} (B_{\pm 1}^{(0)} e^{-ik_{\pm 1}^{(0)}z}) \right) = \\
&= \frac{i\hbar n_0}{2m_0} \left(ik_{\pm 1}^{(0)} B_{\pm 1}^{(0)} B_{\pm 1}^{(0)*} e^{-ik_{\pm 1}^{(0)}z} e^{ik_{\pm 1}^{(0)}z} - (-ik_{\pm 1}^{(0)}) B_{\pm 1}^{(0)*} B_{\pm 1}^{(0)} e^{ik_{\pm 1}^{(0)}z} e^{-ik_{\pm 1}^{(0)}z} \right) = \\
&= -\frac{e\hbar n_0}{2m_0} \cdot 2k_{\pm 1}^{(0)} |B_{\pm 1}^{(0)}|^2 = -\frac{e\hbar n_0}{m_0} k_{\pm 1}^{(0)} |B_{\pm 1}^{(0)}|^2.
\end{aligned} \tag{1.65}$$

$$\begin{aligned}
j_{\pm 1}(E \pm \Omega_1, z = z_5) &= \frac{i\hbar n_0}{2m_0} \left(\Psi_{\pm 1}(E, z) \frac{d\Psi_{\pm 1}^*(E, z)}{dz} - \Psi_{\pm 1}^*(E, z) \frac{d\Psi_{\pm 1}(E, z)}{dz} \right) = \\
&= \frac{i\hbar n_0}{2m_0} \left\{ \left(A_{\pm 1}^{(6)} e^{ik_{\pm 1}^{(0)}(z-z_5)} \mp \frac{U_1}{\Omega_1} A_0^{(6)} e^{ik_0^{(6)}(z-z_5)} \right) \frac{d}{dz} \left(A_{\pm 1}^{(6)*} e^{-ik_{\pm 1}^{(0)}(z-z_5)} \mp \frac{U_1}{\Omega_1} A_0^{(6)*} e^{-ik_0^{(6)}(z-z_5)} \right) - \right. \\
&\quad \left. - \left(A_{\pm 1}^{(6)*} e^{-ik_{\pm 1}^{(0)}(z-z_5)} \mp \frac{U_1}{\Omega_1} A_0^{(6)*} e^{-ik_0^{(6)}(z-z_5)} \right) \frac{d}{dz} \left(A_{\pm 1}^{(6)} e^{ik_{\pm 1}^{(0)}(z-z_5)} \mp \frac{U_1}{\Omega_1} A_0^{(6)} e^{ik_0^{(6)}(z-z_5)} \right) \right\} = \\
&= \frac{i\hbar n_0}{2m_0} \left\{ -i \left(A_{\pm 1}^{(6)} e^{ik_{\pm 1}^{(0)}(z-z_5)} \mp \frac{U_1}{\Omega_1} A_0^{(6)} e^{ik_0^{(6)}(z-z_5)} \right) \left(k_{\pm 1}^{(0)} A_{\pm 1}^{(6)*} e^{-ik_{\pm 1}^{(0)}(z-z_5)} \mp k_0^{(6)} \frac{U_1}{\Omega_1} A_0^{(6)*} e^{-ik_0^{(6)}(z-z_5)} \right) - \right. \\
&\quad \left. - i \left(A_{\pm 1}^{(6)*} e^{-ik_{\pm 1}^{(0)}(z-z_5)} \mp \frac{U_1}{\Omega_1} A_0^{(6)*} e^{-ik_0^{(6)}(z-z_5)} \right) \left(k_{\pm 1}^{(0)} A_{\pm 1}^{(6)} e^{ik_{\pm 1}^{(0)}(z-z_5)} \mp k_0^{(6)} \frac{U_1}{\Omega_1} A_0^{(6)} e^{ik_0^{(6)}(z-z_5)} \right) \right\} = \\
&= \frac{e\hbar n_0}{2m_0} \left\{ k_{\pm 1}^{(0)} |A_{\pm 1}^{(6)}|^2 \mp \frac{U_1}{\Omega_1} k_{\pm 1}^{(0)} A_0^{(6)} A_{\pm 1}^{(6)*} e^{i(k_0^{(6)} - k_{\pm 1}^{(0)})(z-z_5)} \mp \frac{U_1}{\Omega_1} k_0^{(6)} A_0^{(6)*} A_{\pm 1}^{(6)} e^{i(k_{\pm 1}^{(0)} - k_0^{(6)})(z-z_5)} + \right. \\
&\quad + \left(\frac{U_1}{\Omega_1} \right)^2 k_0^{(6)} |A_0^{(6)}|^2 + k_{\pm 1}^{(0)} |A_{\pm 1}^{(6)}|^2 \mp \frac{U_1}{\Omega_1} k_{\pm 1}^{(0)} A_0^{(6)*} A_{\pm 1}^{(6)} e^{i(k_{\pm 1}^{(0)} - k_0^{(6)})(z-z_5)} \mp \frac{U_1}{\Omega_1} k_0^{(6)} A_0^{(6)} A_{\pm 1}^{(6)*} e^{i(k_0^{(6)} - k_{\pm 1}^{(0)})(z-z_5)} + \\
&\quad \left. + \left(\frac{U_1}{\Omega_1} \right)^2 k_0^{(6)} |A_0^{(6)}|^2 \right\}.
\end{aligned}$$

Оскільки потік розраховується при $z = z_5$, то остаточно отримуємо:

$$\begin{aligned}
& j_{\pm 1}(E \pm \Omega_1, z = z_5) = \\
& = \frac{e\hbar n_0}{2m_0} \left\{ k_{\pm 1}^{(0)} |A_{\pm 1}^{(6)}|^2 \mp \frac{U_1}{\Omega_1} k_{\pm 1}^{(0)} A_0^{(6)} A_{\pm 1}^{(6)*} \mp \frac{U_1}{\Omega_1} k_0^{(6)} A_0^{(6)*} A_{\pm 1}^{(6)} + \right. \\
& + \left. \left(\frac{U_1}{\Omega_1} \right)^2 k_0^{(6)} |A_0^{(6)}|^2 + k_{\pm 1}^{(0)} |A_{\pm 1}^{(6)}|^2 \mp \frac{U_1}{\Omega_1} k_{\pm 1}^{(0)} A_0^{(6)*} A_{\pm 1}^{(6)} \mp \frac{U_1}{\Omega_1} k_0^{(6)} A_0^{(6)} A_{\pm 1}^{(6)*} + \left(\frac{U_1}{\Omega_1} \right)^2 k_0^{(6)} |A_0^{(6)}|^2 \right\} = \\
& = \frac{e\hbar n_0}{2m_0} \left\{ 2k_{\pm 1}^{(0)} |A_{\pm 1}^{(6)}|^2 \mp \frac{U_1}{\Omega_1} (k_{\pm 1}^{(0)} A_0^{(6)} A_{\pm 1}^{(6)*} + k_0^{(6)} A_0^{(6)*} A_{\pm 1}^{(6)} + k_{\pm 1}^{(0)} A_0^{(6)*} A_{\pm 1}^{(6)} + k_0^{(6)} A_0^{(6)} A_{\pm 1}^{(6)*}) + \right. \\
& + \left. 2 \left(\frac{U_1}{\Omega_1} \right)^2 k_0^{(6)} |A_0^{(6)}|^2 \right\} = \\
& = \frac{e\hbar n_0}{2m_0} \left\{ 2k_{\pm 1}^{(0)} |A_{\pm 1}^{(6)}|^2 \mp \frac{U_1}{\Omega_1} (k_0^{(6)} + k_{\pm 1}^{(0)}) (A_0^{(6)} A_{\pm 1}^{(6)*} + A_0^{(6)*} A_{\pm 1}^{(6)}) + 2 \left(\frac{U_1}{\Omega_1} \right)^2 k_0^{(6)} |A_0^{(6)}|^2 \right\} = \\
& = \frac{e\hbar n_0}{m_0} \left\{ k_{\pm 1}^{(0)} |A_{\pm 1}^{(6)}|^2 \mp \frac{U_1}{2\Omega_1} (k_0^{(6)} + k_{\pm 1}^{(0)}) (A_0^{(6)} A_{\pm 1}^{(6)*} + A_0^{(6)*} A_{\pm 1}^{(6)}) + \left(\frac{U_1}{\Omega_1} \right)^2 k_0^{(6)} |A_0^{(6)}|^2 \right\} = \\
& = \frac{e\hbar n_0}{m_0} \left\{ k_{\pm 1}^{(0)} |A_{\pm 1}^{(6)}|^2 + \frac{U_1}{2\Omega_1} P_{01}^{\pm} + \left(\frac{U_1}{\Omega_1} \right)^2 k_0^{(6)} |A_0^{(6)}|^2 \right\}.
\end{aligned} \tag{1.66}$$

де уведено позначення:

$$P_{01}^{\pm} = \mp (k_0^{(6)} + k_{\pm 1}^{(0)}) (A_0^{(6)} A_{\pm 1}^{(6)*} + A_0^{(6)*} A_{\pm 1}^{(6)}). \tag{1.67}$$

Із виразу (1.60) з урахуванням (1.65) і (1.66) знаходимо вираз для провідності:

$$\begin{aligned}
\sigma^{(1)}(\Omega_1, E) & = \frac{\Omega_1}{2z_5 e \epsilon_1^2} \{ [j_{+1}(E + \Omega_1, z = z_5) - j_{-1}(E - \Omega_1, z = z_5)] - \\
& - [j_{+1}(E + \Omega_1, z = z_0) - j_{-1}(E - \Omega_1, z = z_0)] \} = \\
& = \frac{\Omega_1}{2z_5 e \epsilon_1^2} \left\{ \left[\frac{e\hbar n_0}{m_0} \left\{ k_{\pm 1}^{(0)} |A_{\pm 1}^{(6)}|^2 + \frac{U_1}{2\Omega_1} P_{01}^+ + \left(\frac{U_1}{\Omega_1} \right)^2 k_0^{(6)} |A_0^{(6)}|^2 \right\} - \right. \right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{e\hbar n_0}{m_0} \left\{ k_{-1}^{(0)} |A_{-1}^{(6)}|^2 + \frac{U_1}{2\Omega_1} P_{01}^- + \left(\frac{U_1}{\Omega_1} \right)^2 k_0^{(6)} |A_0^{(6)}|^2 \right\} - \left[-\frac{e\hbar n_0}{m_0} k_{+1}^{(0)} |B_{+1}^{(0)}|^2 + \frac{e\hbar n_0}{m_0} k_{-1}^{(0)} |B_{-1}^{(0)}|^2 \right] = \\
& = \frac{\Omega_1}{2z_5 e\mathcal{E}_1^2} \frac{e\hbar n_0}{m_0} \left\{ k_{+1}^{(0)} |A_{\pm 1}^{(6)}|^2 - k_{-1}^{(0)} |A_{-1}^{(6)}|^2 + \frac{U_1}{2\Omega_1} P_{01}^+ - \frac{U_1}{2\Omega_1} P_{01}^- + k_{+1}^{(0)} |B_{+1}^{(0)}|^2 - k_{-1}^{(0)} |B_{-1}^{(0)}|^2 \right\} = \\
& = \frac{\Omega_1 e^2 z_5}{2(e\mathcal{E}_1 z_5)^2} \frac{\hbar n_0}{m_0} \left\{ k_{+1}^{(0)} |A_{\pm 1}^{(6)}|^2 - k_{-1}^{(0)} |A_{-1}^{(6)}|^2 + \frac{U_1}{2\Omega_1} P_{01}^+ - \frac{U_1}{2\Omega_1} P_{01}^- + k_{+1}^{(0)} |B_{+1}^{(0)}|^2 - k_{-1}^{(0)} |B_{-1}^{(0)}|^2 \right\} = \\
& = \frac{e^2 \hbar \Omega_1 z_5 n_0}{2m_0 U_1^2} \left\{ k_{+1}^{(0)} |A_{\pm 1}^{(6)}|^2 - k_{-1}^{(0)} |A_{-1}^{(6)}|^2 + \frac{U_1}{2\Omega_1} P_{01}^+ - \frac{U_1}{2\Omega_1} P_{01}^- + k_{+1}^{(0)} |B_{+1}^{(0)}|^2 - k_{-1}^{(0)} |B_{-1}^{(0)}|^2 \right\} = \\
& = \sigma^{(1)+}(\Omega_1) + \sigma^{(1)-}(\Omega_1).
\end{aligned} \tag{1.68}$$

Далі знаходимо:

$$\begin{aligned}
j_{\pm 2}(E \pm (\Omega_1 + \Omega_2), z = z_0) & = \frac{ie\hbar n_0}{2m_0} \left(\Psi_{\pm 2}(E, z) \frac{d\Psi_{\pm 2}^*(E, z)}{dz} - \Psi_{\pm 2}^*(E, z) \frac{d\Psi_{\pm 2}(E, z)}{dz} \right) = \\
& = \frac{ie\hbar n_0}{2m_0} \left(B_{\pm 2}^{(0)} e^{-ik_{\pm 2}^{(0)} z} \frac{d}{dz} \left(B_{\pm 2}^{(0)*} e^{ik_{\pm 2}^{(0)} z} \right) - B_{\pm 2}^{(0)*} e^{ik_{\pm 2}^{(0)} z} \frac{d}{dz} \left(B_{\pm 2}^{(0)} e^{-ik_{\pm 2}^{(0)} z} \right) \right) = \\
& = -\frac{e\hbar n_0}{2m_0} \cdot 2k_{\pm 2}^{(0)} |B_{\pm 2}^{(0)}|^2 = -\frac{e\hbar n_0}{m_0} k_{\pm 2}^{(0)} |B_{\pm 2}^{(0)}|^2.
\end{aligned} \tag{1.69}$$

$$\begin{aligned}
j_{\pm 2}(E \pm (\Omega_1 + \Omega_2), z = z_5) & = \frac{ie\hbar n_0}{2m_0} \left(\Psi_{\pm 2}(E, z) \frac{d\Psi_{\pm 2}^*(E, z)}{dz} - \Psi_{\pm 2}^*(E, z) \frac{d\Psi_{\pm 2}(E, z)}{dz} \right) = \\
& = \frac{ie\hbar n_0}{2m_0} \left\{ \left(A_{\pm 2}^{(6)} e^{ik_{\pm 2}^{(0)}(z-z_5)} + \frac{U_1 U_2}{\Omega_1(\Omega_1 + \Omega_2)} A_0^{(6)} e^{ik_0^{(6)}(z-z_5)} \mp \frac{U_2}{\Omega_2} A_{\pm 1}^{(6)} e^{ik_{\pm 1}^{(0)}(z-z_5)} \right) \times \right. \\
& \times \frac{d}{dz} \left(A_{\pm 2}^{(6)*} e^{-ik_{\pm 2}^{(0)}(z-z_5)} + \frac{U_1 U_2}{\Omega_1(\Omega_1 + \Omega_2)} A_0^{(6)*} e^{-ik_0^{(6)}(z-z_5)} \mp \frac{U_2}{\Omega_2} A_{\pm 1}^{(6)*} e^{-ik_{\pm 1}^{(0)}(z-z_5)} \right) - \\
& \left. - \left(A_{\pm 2}^{(6)*} e^{-ik_{\pm 2}^{(0)}(z-z_5)} + \frac{U_1 U_2}{\Omega_1(\Omega_1 + \Omega_2)} A_0^{(6)*} e^{-ik_0^{(6)}(z-z_5)} \mp \frac{U_2}{\Omega_2} A_{\pm 1}^{(6)*} e^{-ik_{\pm 1}^{(0)}(z-z_5)} \right) \times \right. \\
& \left. \times \frac{d}{dz} \left(A_{\pm 2}^{(6)} e^{ik_{\pm 2}^{(0)}(z-z_5)} + \frac{U_1 U_2}{\Omega_1(\Omega_1 + \Omega_2)} A_0^{(6)} e^{ik_0^{(6)}(z-z_5)} \mp \frac{U_2}{\Omega_2} A_{\pm 1}^{(6)} e^{ik_{\pm 1}^{(0)}(z-z_5)} \right) \right\} =
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{e\hbar n_0}{2m_0} \left\{ \left(A_{\pm 2}^{(6)} e^{ik_{\pm 2}^{(0)}(z-z_5)} + \frac{U_1 U_2}{\Omega_1(\Omega_1 + \Omega_2)} A_0^{(6)} e^{ik_0^{(6)}(z-z_5)} \mp \frac{U_2}{\Omega_2} A_{\pm 1}^{(6)} e^{ik_{\pm 1}^{(0)}(z-z_5)} \right) \times \right. \\
&\times \left(k_{\pm 2}^{(0)} A_{\pm 2}^{(6)*} e^{-ik_{\pm 2}^{(0)}(z-z_5)} + \frac{U_1 U_2}{\Omega_1(\Omega_1 + \Omega_2)} k_0^{(6)} A_0^{(6)*} e^{-ik_0^{(6)}(z-z_5)} \mp \frac{U_2}{\Omega_2} k_{\pm 1}^{(0)} A_{\pm 1}^{(6)*} e^{-ik_{\pm 1}^{(0)}(z-z_5)} \right) + \\
&+ \left(A_{\pm 2}^{(6)*} e^{-ik_{\pm 2}^{(0)}(z-z_5)} + \frac{U_1 U_2}{\Omega_1(\Omega_1 + \Omega_2)} A_0^{(6)*} e^{-ik_0^{(6)}(z-z_5)} \mp \frac{U_2}{\Omega_2} A_{\pm 1}^{(6)*} e^{-ik_{\pm 1}^{(0)}(z-z_5)} \right) \times \\
&\times \left. \left(k_{\pm 2}^{(0)} A_{\pm 2}^{(6)} e^{ik_{\pm 2}^{(0)}(z-z_5)} + \frac{U_1 U_2}{\Omega_1(\Omega_1 + \Omega_2)} k_0^{(6)} A_0^{(6)} e^{ik_0^{(6)}(z-z_5)} \mp \frac{U_2}{\Omega_2} k_{\pm 1}^{(0)} A_{\pm 1}^{(6)} e^{ik_{\pm 1}^{(0)}(z-z_5)} \right) \right\} = \\
&= \frac{e\hbar n_0}{2m_0} \left\{ \left| k_{\pm 2}^{(0)} A_{\pm 2}^{(6)} \right|^2 + \frac{U_1 U_2}{\Omega_1(\Omega_1 + \Omega_2)} k_{\pm 2}^{(0)} A_0^{(6)} A_{\pm 2}^{(6)*} e^{i(k_0^{(6)} - k_{\pm 2}^{(0)})(z-z_5)} \mp \frac{U_2}{\Omega_2} k_{\pm 2}^{(0)} A_{\pm 1}^{(6)} A_{\pm 2}^{(6)*} e^{i(k_{\pm 1}^{(0)} - k_{\pm 2}^{(0)})(z-z_5)} + \right. \\
&+ \frac{U_1 U_2}{\Omega_1(\Omega_1 + \Omega_2)} k_0^{(6)} A_0^{(6)*} A_{\pm 2}^{(6)} e^{i(k_{\pm 2}^{(0)} - k_0^{(6)})(z-z_5)} + \left. \left(\frac{U_1 U_2}{\Omega_1(\Omega_1 + \Omega_2)} \right)^2 k_0^{(6)} \left| A_0^{(6)} \right|^2 \mp \right. \\
&\mp \frac{U_1 U_2^2}{\Omega_1 \Omega_2 (\Omega_1 + \Omega_2)} k_0^{(6)} A_0^{(6)*} A_{\pm 1}^{(6)} e^{i(k_{\pm 1}^{(0)} - k_0^{(6)})(z-z_5)} \mp \frac{U_2}{\Omega_2} k_{\pm 1}^{(0)} A_{\pm 1}^{(6)*} A_{\pm 2}^{(6)} e^{i(k_{\pm 2}^{(0)} - k_{\pm 1}^{(0)})(z-z_5)} \mp \\
&\mp \frac{U_1 U_2^2}{\Omega_1 \Omega_2 (\Omega_1 + \Omega_2)} k_{\pm 1}^{(0)} A_0^{(6)} A_{\pm 1}^{(6)*} e^{i(k_0^{(6)} - k_{\pm 1}^{(0)})(z-z_5)} + \left. \left(\frac{U_2}{\Omega_2} \right)^2 k_{\pm 1}^{(0)} \left| A_{\pm 1}^{(6)} \right|^2 \right. \\
&+ k_{\pm 2}^{(0)} \left| A_{\pm 2}^{(6)} \right|^2 + \frac{U_1 U_2}{\Omega_1(\Omega_1 + \Omega_2)} k_{\pm 2}^{(0)} A_0^{(6)*} A_{\pm 2}^{(6)} e^{-i(k_0^{(6)} - k_{\pm 2}^{(0)})(z-z_5)} \mp \frac{U_2}{\Omega_2} k_{\pm 2}^{(0)} A_{\pm 1}^{(6)*} A_{\pm 2}^{(6)} e^{i(k_{\pm 2}^{(0)} - k_{\pm 1}^{(0)})(z-z_5)} + \\
&+ \frac{U_1 U_2}{\Omega_1(\Omega_1 + \Omega_2)} k_0^{(6)} A_0^{(6)} A_{\pm 2}^{(6)*} e^{i(k_0^{(6)} - k_{\pm 2}^{(0)})(z-z_5)} + \left. \left(\frac{U_1 U_2}{\Omega_1(\Omega_1 + \Omega_2)} \right)^2 k_0^{(6)} \left| A_0^{(6)} \right|^2 \mp \right. \\
&\mp \frac{U_1 U_2^2}{\Omega_1 \Omega_2 (\Omega_1 + \Omega_2)} k_0^{(6)} A_0^{(6)} A_{\pm 1}^{(6)*} e^{i(k_0^{(6)} - k_{\pm 1}^{(0)})(z-z_5)} \mp \frac{U_2}{\Omega_2} k_{\pm 1}^{(0)} A_{\pm 1}^{(6)*} A_{\pm 2}^{(6)} e^{i(k_{\pm 1}^{(0)} - k_{\pm 2}^{(0)})(z-z_5)} \mp \\
&\mp \left. \frac{U_1 U_2^2}{\Omega_1 \Omega_2 (\Omega_1 + \Omega_2)} k_{\pm 1}^{(0)} A_0^{(6)*} A_{\pm 1}^{(6)} e^{i(k_{\pm 1}^{(0)} - k_0^{(6)})(z-z_5)} + \left(\frac{U_2}{\Omega_2} \right)^2 k_{\pm 1}^{(0)} \left| A_{\pm 1}^{(6)} \right|^2 \right\}.
\end{aligned}$$

Оскільки потік розраховується при $z = z_5$, то остаточно отримуємо:

$$\begin{aligned}
& j_{\pm 2}(E \pm (\Omega_1 + \Omega_2), z = z_5) = \\
& = \frac{e\hbar n_0}{2m_0} \left\{ \left| k_{\pm 2}^{(0)} A_{\pm 2}^{(6)} \right|^2 + \frac{U_1 U_2}{\Omega_1 (\Omega_1 + \Omega_2)} k_{\pm 2}^{(0)} A_0^{(6)} A_{\pm 2}^{(6)*} \mp \frac{U_2}{\Omega_2} k_{\pm 2}^{(0)} A_{\pm 1}^{(6)} A_{\pm 2}^{(6)*} + \frac{U_1 U_2}{\Omega_1 (\Omega_1 + \Omega_2)} k_0^{(6)} A_0^{(6)*} A_{\pm 2}^{(6)} + \right. \\
& + \left(\frac{U_1 U_2}{\Omega_1 (\Omega_1 + \Omega_2)} \right)^2 k_0^{(6)} \left| A_0^{(6)} \right|^2 \mp \frac{U_1 U_2^2}{\Omega_1 \Omega_2 (\Omega_1 + \Omega_2)} k_0^{(6)} A_0^{(6)*} A_{\pm 1}^{(6)} \mp \frac{U_2}{\Omega_2} k_{\pm 1}^{(0)} A_{\pm 1}^{(6)*} A_{\pm 2}^{(6)} \mp \\
& \mp \frac{U_1 U_2^2}{\Omega_1 \Omega_2 (\Omega_1 + \Omega_2)} k_{\pm 1}^{(0)} A_0^{(6)} A_{\pm 1}^{(6)*} + \left(\frac{U_2}{\Omega_2} \right)^2 k_{\pm 1}^{(0)} \left| A_{\pm 1}^{(6)} \right|^2 + k_{\pm 2}^{(0)} \left| A_{\pm 2}^{(6)} \right|^2 + \\
& + \frac{U_1 U_2}{\Omega_1 (\Omega_1 + \Omega_2)} k_{\pm 2}^{(0)} A_0^{(6)*} A_{\pm 2}^{(6)} \mp \frac{U_2}{\Omega_2} k_{\pm 2}^{(0)} A_{\pm 1}^{(6)*} A_{\pm 2}^{(6)} + \frac{U_1 U_2}{\Omega_1 (\Omega_1 + \Omega_2)} k_0^{(6)} A_0^{(6)} A_{\pm 2}^{(6)*} + \\
& + \left(\frac{U_1 U_2}{\Omega_1 (\Omega_1 + \Omega_2)} \right)^2 k_0^{(6)} \left| A_0^{(6)} \right|^2 \mp \frac{U_1 U_2^2}{\Omega_1 \Omega_2 (\Omega_1 + \Omega_2)} k_0^{(6)} A_0^{(6)} A_{\pm 1}^{(6)*} \mp \frac{U_2}{\Omega_2} k_{\pm 1}^{(0)} A_{\pm 1}^{(6)} A_{\pm 2}^{(6)*} \mp \\
& \left. \mp \frac{U_1 U_2^2}{\Omega_1 \Omega_2 (\Omega_1 + \Omega_2)} k_{\pm 1}^{(0)} A_0^{(6)*} A_{\pm 1}^{(6)} + \left(\frac{U_2}{\Omega_2} \right)^2 k_{\pm 1}^{(0)} \left| A_{\pm 1}^{(6)} \right|^2 \right\} = \\
& = \frac{e\hbar n_0}{2m_0} \left\{ 2 \left| k_{\pm 2}^{(0)} A_{\pm 2}^{(6)} \right|^2 + \frac{U_1 U_2}{\Omega_1 (\Omega_1 + \Omega_2)} (k_{\pm 2}^{(0)} A_0^{(6)} A_{\pm 2}^{(6)*} + k_0^{(6)} A_0^{(6)*} A_{\pm 2}^{(6)} + k_{\pm 2}^{(0)} A_0^{(6)*} A_{\pm 2}^{(6)} + k_0^{(6)} A_0^{(6)} A_{\pm 2}^{(6)*}) \mp \right. \\
& \mp \frac{U_2}{\Omega_2} (k_{\pm 2}^{(0)} A_{\pm 1}^{(6)} A_{\pm 2}^{(6)*} + k_{\pm 1}^{(0)} A_{\pm 1}^{(6)*} A_{\pm 2}^{(6)} + k_{\pm 2}^{(0)} A_{\pm 1}^{(6)*} A_{\pm 2}^{(6)} + k_{\pm 1}^{(0)} A_{\pm 1}^{(6)} A_{\pm 2}^{(6)*}) + 2 \left(\frac{U_1 U_2}{\Omega_1 (\Omega_1 + \Omega_2)} \right)^2 k_0^{(6)} \left| A_0^{(6)} \right|^2 + \\
& + 2 \left(\frac{U_2}{\Omega_2} \right)^2 k_{\pm 1}^{(0)} \left| A_{\pm 1}^{(6)} \right|^2 \mp \\
& \left. \mp \frac{U_1 U_2^2}{\Omega_1 \Omega_2 (\Omega_1 + \Omega_2)} (k_0^{(6)} A_0^{(6)*} A_{\pm 1}^{(6)} + k_{\pm 1}^{(0)} A_0^{(6)} A_{\pm 1}^{(6)*} + k_0^{(6)} A_0^{(6)} A_{\pm 1}^{(6)*} + k_{\pm 1}^{(0)} A_0^{(6)*} A_{\pm 1}^{(6)}) \right\} = \\
& = \frac{e\hbar n_0}{2m_0} \left\{ 2 \left| k_{\pm 2}^{(0)} A_{\pm 2}^{(6)} \right|^2 + \frac{U_1 U_2}{\Omega_1 (\Omega_1 + \Omega_2)} (k_0^{(6)} + k_{\pm 2}^{(0)}) (A_0^{(6)} A_{\pm 2}^{(6)*} + A_0^{(6)*} A_{\pm 2}^{(6)}) \mp \right. \\
& \mp \frac{U_2}{\Omega_2} (k_{\pm 1}^{(0)} + k_{\pm 2}^{(0)}) (A_{\pm 1}^{(6)} A_{\pm 2}^{(6)*} + A_{\pm 1}^{(6)*} A_{\pm 2}^{(6)}) + 2 \left(\frac{U_1 U_2}{\Omega_1 (\Omega_1 + \Omega_2)} \right)^2 k_0^{(6)} \left| A_0^{(6)} \right|^2 + 2 \left(\frac{U_2}{\Omega_2} \right)^2 k_{\pm 1}^{(0)} \left| A_{\pm 1}^{(6)} \right|^2 \mp
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \mp \frac{U_1 U_2^2}{\Omega_1 \Omega_2 (\Omega_1 + \Omega_2)} (k_0^{(6)} + k_{\pm 1}^{(0)}) (A_0^{(6)} A_{\pm 1}^{(6)*} + A_0^{(6)*} A_{\pm 1}^{(6)}) \Big\} = \\
& = \frac{e\hbar n_0}{m_0} \left\{ k_{\pm 2}^{(0)} |A_{\pm 2}^{(6)}|^2 + \frac{U_1 U_2}{2\Omega_1 (\Omega_1 + \Omega_2)} P_{02}^{\pm} + \frac{U_2}{2\Omega_2} P_{12}^{\pm} + \left(\frac{U_1 U_2}{\Omega_1 (\Omega_1 + \Omega_2)} \right)^2 k_0^{(6)} |A_0^{(6)}|^2 + \right. \\
& \left. + \left(\frac{U_2}{\Omega_2} \right)^2 k_{\pm 1}^{(0)} |A_{\pm 1}^{(6)}|^2 + \frac{U_1 U_2^2}{2\Omega_1 \Omega_2 (\Omega_1 + \Omega_2)} P_{01}^{\pm} \right\}
\end{aligned} \tag{1.70}$$

де уведено позначення:

$$P_{02}^{\pm} = (k_0^{(6)} + k_{\pm 2}^{(0)}) (A_0^{(6)} A_{\pm 2}^{(6)*} + A_0^{(6)*} A_{\pm 2}^{(6)}), \tag{1.71}$$

$$P_{12}^{\pm} = \mp (k_{\pm 1}^{(0)} + k_{\pm 2}^{(0)}) (A_{\pm 1}^{(6)} A_{\pm 2}^{(6)*} + A_{\pm 1}^{(6)*} A_{\pm 2}^{(6)}). \tag{1.72}$$

Із виразу (1.59) з урахуванням (1.69)-(1.70) отримуємо:

$$\begin{aligned}
\sigma^{(2)}(\Omega_1, \Omega_2, E) &= \frac{(\Omega_1 + \Omega_2)}{2z_5 e \epsilon_2^2} \left\{ \left[|k_{+2}^{(0)} A_{+2}^{(6)}|^2 + \frac{U_1 U_2}{2\Omega_1 (\Omega_1 + \Omega_2)} P_{02}^+ + \frac{U_2}{2\Omega_2} P_{12}^+ + \right. \right. \\
& \left. \left. + \left(\frac{U_1 U_2}{\Omega_1 (\Omega_1 + \Omega_2)} \right)^2 k_0^{(6)} |A_0^{(6)}|^2 + \left(\frac{U_2}{\Omega_2} \right)^2 k_{+1}^{(0)} |A_{+1}^{(6)}|^2 + \frac{U_1 U_2^2}{2\Omega_1 \Omega_2 (\Omega_1 + \Omega_2)} P_{01}^+ \right] - \right. \\
& \left. - \left[|k_{-2}^{(0)} A_{-2}^{(6)}|^2 + \frac{U_1 U_2}{2\Omega_1 (\Omega_1 + \Omega_2)} P_{02}^- + \frac{U_2}{2\Omega_2} P_{12}^- + \left(\frac{U_1 U_2}{\Omega_1 (\Omega_1 + \Omega_2)} \right)^2 k_0^{(6)} |A_0^{(6)}|^2 + \right. \right. \\
& \left. \left. + \left(\frac{U_2}{\Omega_2} \right)^2 k_{-1}^{(0)} |A_{-1}^{(6)}|^2 + \frac{U_1 U_2^2}{2\Omega_1 \Omega_2 (\Omega_1 + \Omega_2)} P_{01}^- \right] - \left[-\frac{e\hbar n_0}{m_0} k_{+2}^{(0)} |B_{+2}^{(0)}|^2 - \left(-\frac{e\hbar n_0}{m_0} k_{-2}^{(0)} |B_{-2}^{(0)}|^2 \right) \right] \right\} = \\
& = \frac{(\Omega_1 + \Omega_2)}{2z_5 e \epsilon_2^2} \frac{e\hbar n_0}{m_0} \left\{ \left[\frac{U_2}{2\Omega_2} (P_{12}^+ - P_{12}^-) + |k_{+2}^{(0)} A_{+2}^{(6)}|^2 - |k_{-2}^{(0)} A_{-2}^{(6)}|^2 + \frac{U_1 U_2}{2\Omega_1 (\Omega_1 + \Omega_2)} (P_{02}^+ - P_{02}^-) + \right. \right. \\
& \left. \left. + \left(\frac{U_2}{\Omega_2} \right)^2 (k_{+1}^{(0)} |A_{+1}^{(6)}|^2 - k_{-1}^{(0)} |A_{-1}^{(6)}|^2) + \frac{U_1 U_2^2}{2\Omega_1 \Omega_2 (\Omega_1 + \Omega_2)} (P_{01}^+ - P_{01}^-) \right] + \right. \\
& \left. + \left[k_{\pm 2}^{(0)} |B_{\pm 2}^{(0)}|^2 - \frac{e\hbar n_0}{m_0} k_{-2}^{(0)} |B_{-2}^{(0)}|^2 \right] \right\} =
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{(\Omega_1 + \Omega_2)e^2 z_5}{2(e\mathcal{E}_2 z_5)^2} \frac{\hbar n_0}{m_0} \left\{ \left[\frac{U_2}{2\Omega_2} (P_{12}^+ - P_{12}^-) + |k_{+2}^{(0)} A_{+2}^{(6)}|^2 - |k_{-2}^{(0)} A_{-2}^{(6)}|^2 + \frac{U_1 U_2}{2\Omega_1(\Omega_1 + \Omega_2)} (P_{02}^+ - P_{02}^-) + \right. \right. \\
&+ \left. \left. \left(\frac{U_2}{\Omega_2} \right)^2 \left(k_+^{(0)} |A_{+1}^{(6)}|^2 - k_-^{(0)} |A_{-1}^{(6)}|^2 \right) + \frac{U_1 U_2^2}{2\Omega_1 \Omega_2 (\Omega_1 + \Omega_2)} (P_{01}^+ - P_{01}^-) \right] + \right. \\
&+ \left. \left[k_{\pm 2}^{(0)} |B_{\pm 2}^{(0)}|^2 - \frac{e\hbar n_0}{m_0} k_{-2}^{(0)} |B_{-2}^{(0)}|^2 \right] \right\} = \\
&= \frac{e^2 \hbar (\Omega_1 + \Omega_2) z_5 n_0}{2m_0 U_2^2} \left\{ \left[\frac{U_2}{2\Omega_2} (P_{12}^+ - P_{12}^-) + |k_{+2}^{(0)} A_{+2}^{(6)}|^2 - |k_{-2}^{(0)} A_{-2}^{(6)}|^2 + \frac{U_1 U_2}{2\Omega_1(\Omega_1 + \Omega_2)} (P_{02}^+ - P_{02}^-) + \right. \right. \\
&+ \left. \left. \left(\frac{U_2}{\Omega_2} \right)^2 \left(k_+^{(0)} |A_{+1}^{(6)}|^2 - k_-^{(0)} |A_{-1}^{(6)}|^2 \right) + \frac{U_1 U_2^2}{2\Omega_1 \Omega_2 (\Omega_1 + \Omega_2)} (P_{01}^+ - P_{01}^-) \right] + \right. \\
&+ \left. \left[k_{\pm 2}^{(0)} |B_{\pm 2}^{(0)}|^2 - \frac{e\hbar n_0}{m_0} k_{-2}^{(0)} |B_{-2}^{(0)}|^2 \right] \right\}
\end{aligned} \tag{1.73}$$

де

$$\begin{aligned}
\sigma^{(1)+}(\Omega_1) &= \frac{e^2 \hbar \Omega_1 z_5 n_0}{2m_0 U_1^2} \left\{ k_{+1}^{(0)} |A_{+1}^{(6)}|^2 - k_{-1}^{(0)} |A_{-1}^{(6)}|^2 + \frac{U_1}{2\Omega_1} (P_{01}^+ - P_{01}^-) \right\}; \\
\sigma^{(1)-} &= \frac{e^2 \hbar \Omega_1 z_5 n_0}{2m_0 U_1^2} \left\{ k_{+1}^{(0)} |B_{+1}^{(0)}|^2 - k_{-1}^{(0)} |B_{-1}^{(0)}|^2 \right\}. \\
\sigma^{(2)+}(\Omega_1, \Omega_2) &= \frac{e^2 \hbar (\Omega_1 + \Omega_2) z_5 n_0}{2m_0 U_2^2} \left\{ \frac{U_2}{2\Omega_2} (P_{12}^+ - P_{12}^-) + |k_{+2}^{(0)} A_{+2}^{(6)}|^2 - |k_{-2}^{(0)} A_{-2}^{(6)}|^2 + \right. \\
&\frac{U_1 U_2}{2\Omega_1(\Omega_1 + \Omega_2)} (P_{02}^+ - P_{02}^-) + \left. \left(\frac{U_2}{\Omega_2} \right)^2 \left(k_+^{(0)} |A_{+1}^{(6)}|^2 - k_-^{(0)} |A_{-1}^{(6)}|^2 \right) + \right. \\
&\left. + \frac{U_1 U_2^2}{2\Omega_1 \Omega_2 (\Omega_1 + \Omega_2)} (P_{01}^+ - P_{01}^-) \right\}, \\
\sigma^{(2)-}(\Omega_1, \Omega_2) &= \frac{e^2 \hbar (\Omega_1 + \Omega_2) z_5 n_0}{2m_0 U_2^2} \left\{ k_{\pm 2}^{(0)} |B_{\pm 2}^{(0)}|^2 - \frac{e\hbar n_0}{m_0} k_{-2}^{(0)} |B_{-2}^{(0)}|^2 \right\}
\end{aligned} \tag{1.74}$$

$$U_1 = e\mathcal{E}_1 z_5, \quad U_2 = e\mathcal{E}_2 z_5.$$

Таким чином дійсна частина динамічної провідності σ наносистеми, з урахуванням (1.68) і (1.74) подається у вигляді суми двох парціальних складових [7*]:

$$\sigma^{(n)}(\Omega_1, \Omega_2) = \sigma^{(1)}(\Omega_1) + \sigma^{(2)}(\Omega_1, \Omega_2), \quad (1.75)$$

де

$$\sigma^{(1)}(\Omega_1) = \sigma^{(1)+}(\Omega_1) + \sigma^{(1)-}(\Omega_1), \quad (1.76)$$

– провідність, знайдена у першому порядку теорії збурень (сформована однофотонними електронними переходами),

$$\sigma^{(2)}(\Omega_1, \Omega_2) = \sigma^{(2)+}(\Omega_1, \Omega_2) + \sigma^{(2)-}(\Omega_1, \Omega_2), \quad (1.77)$$

– провідність у другому порядку теорії збурень (сформована двофотонними електронними переходами).

Уведені парціальні складові σ^+ та σ^- визначають провідності електронних потоків, які спрямовані на вихід ($\sigma^+(\Omega)$) та вхід ($\sigma^-(\Omega)$) РТС по відношенню до напрямку початкового електронного потоку.

Слід зауважити, що динамічна провідність, яка знайдена у другому порядку теорії збурень, виявляється залежною від напруженостей ϵ_1 і ϵ_2 електричних складових електромагнітного поля, на відміну від провідності у першому порядку [7*].

1.5. Властивості динамічної провідності наносистем в яких реалізуються можливості двофотонної лазерної генерації з різними частотам. Аналіз теоретичної моделі двоколірного квантового каскадного лазера

З фізичних міркувань зрозуміло, що оптимальна робота ККЛ з довільним геометричним дизайном активної зони визначається існуванням у потрібному частотному діапазоні максимальної величини динамічної провідності $\sigma^+(\Omega)$, що формується прямим електронним потоком. Підхід до оптимізації роботи каскадних наноприладів, що працюють у одномодовому режимі, який був розвинений у працях [5, 6, 29, 30], може бути узагальнений на випадок оптимізації геометричного дизайну активної зони ККЛ при умові реалізації процесів двофотонної генерації [7*].

Конкретні розрахунки виконувались на прикладі експериментально досліджуваної трибар'єрної РТС [33] з GaAs - потенціальними ямами та $\text{Al}_{0,15}\text{Ga}_{0,85}\text{As}$ - потенціальними бар'єрами з відомими фізичними параметрами: $n_0 = 3,2 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$; $m_0 = 0,063m_e$; $m_1 = 0,075m_e$; $U = 516 \text{ меВ}$; $F = 17 \text{ кВ/см}$, m_e - маса вільного електрона. Геометричні параметри досліджуваної трибар'єрної РТС такі: ширини потенціальних ям $b_1 = 7,1 \text{ нм}$, $b_2 = 16,7 \text{ нм}$, товщини вхідного, внутрішнього, вихідного потенціальних бар'єрів $\Delta_1 = 5,6 \text{ нм}$, $\Delta_2 = 3,1 \text{ нм}$, $\Delta_3 = 5,6 \text{ нм}$ відповідно.

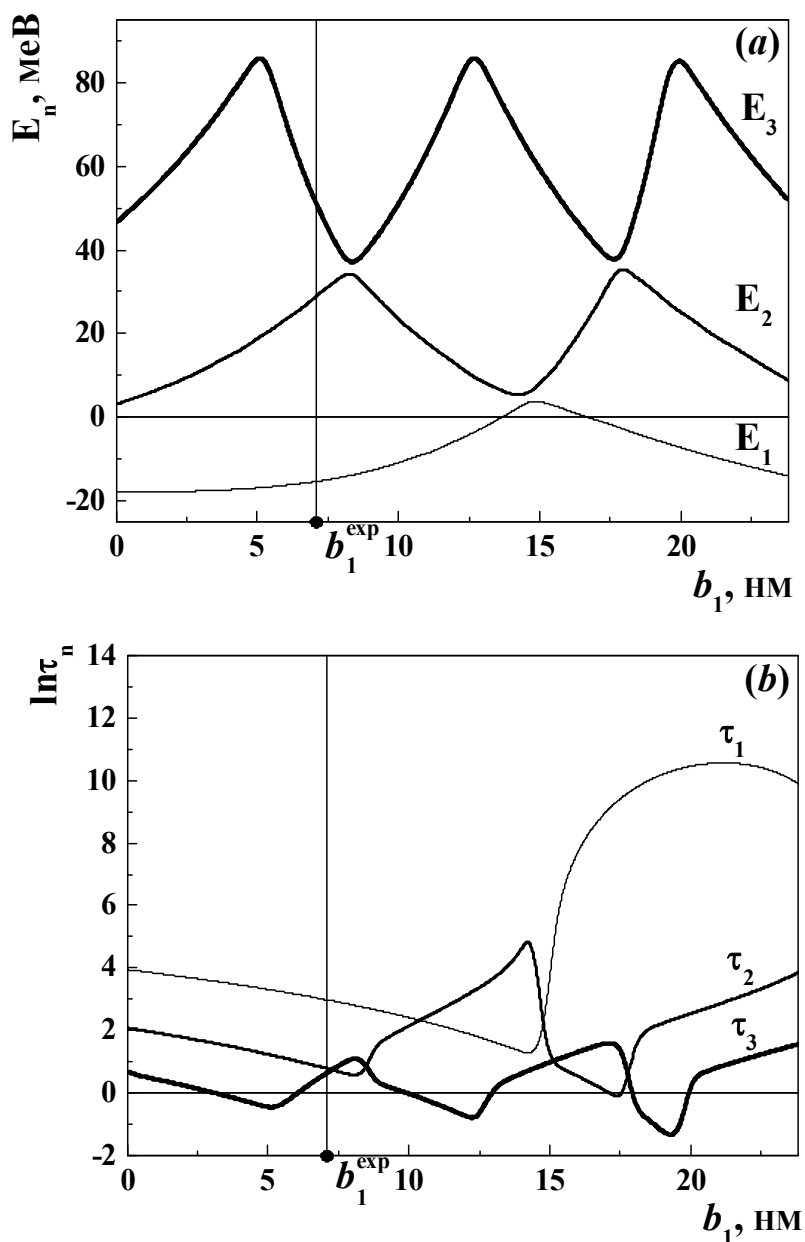


Рис. 1.6. Залежності резонансних енергій (E_n) (а) та часів життя (τ_n) (б) електрона у залежності від положення внутрішнього бар'єра b_1 у загальній потенціальній ямі.

Результати розрахунків резонансних енергій (E_1, E_2, E_3) та часів життя (τ_1, τ_2, τ_3) для перших трьох квазістаціонарних станів електрона у залежності від положення внутрішнього бар'єра b_1 у загальній потенціальній ямі b при фіксованих решті геометричних параметрів РТС, приведено на Рис. 2а, б. Для експериментально реалізованої геометричної конфігурації РТС (b_1^{exp}) теоретично розраховані енергії квантових переходів $\Omega_{32}^{\text{teor}} = 20,8$ меВ; $\Omega_{21}^{\text{teor}} = 41,1$ меВ відрізняються від експериментально отриманих $\Omega_{32}^{\text{exp}} = 19$ меВ; $\Omega_{21}^{\text{exp}} = 37$ меВ не більше ніж на 10%. Часи життя електрона у перших трьох робочих квазістаціонарних станах такі: $\tau_1 = 19,22$ пс; $\tau_2 = 2,20$ пс; $\tau_3 = 1,89$ пс (див. також працю автора дисертації [7*]).

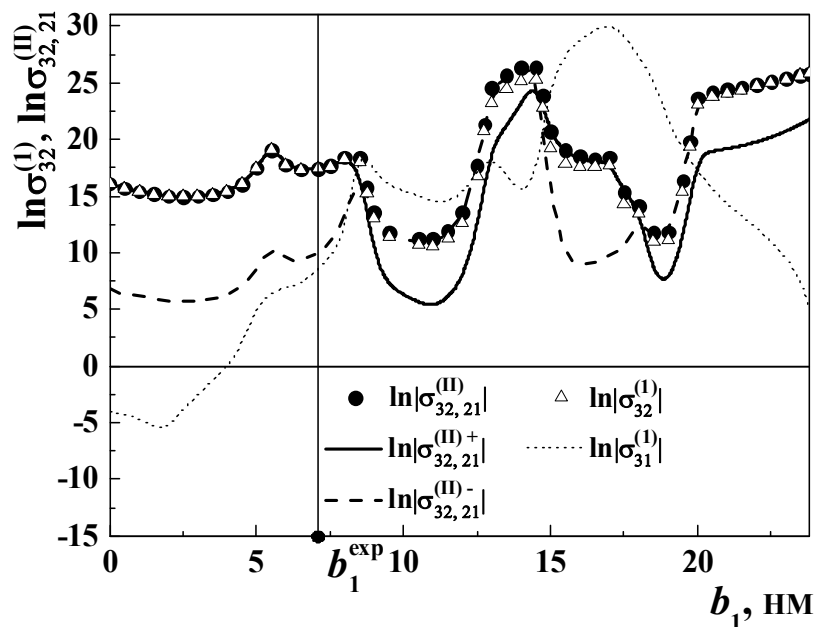


Рис. 1.7. Залежності логарифмів динамічної провідності, сформованої у лазерному квантовому переході, розрахованих у однофотонному $\sigma^{(I)}(|3\rangle \rightarrow |2\rangle)$, $\sigma^{(I)}(|3\rangle \rightarrow |1\rangle)$ та двофотонному $\sigma^{(II)}(|3\rangle \rightarrow |2\rangle, |2\rangle \rightarrow |1\rangle)$ наближеннях в одиницях $\sigma_0 = 1 \text{См/см}$ у залежності від положення внутрішнього бар'єра b_1 у загальній потенціальній ямі.

Для дослідження внеску двофотонних процесів у формуванні електронної активної динамічної провідності РТС, згідно з розвинутою у попередньому розділі теорією, виконувався розрахунок провідності двофотонному наближеннях для лазерних квантових переходів з третього збудженого електронного стану. Для того, щоб задовольнити умови наближення слабого сигналу [3*, 4*, 6*, 7*]

($U_1 = e\mathcal{E}_1 z_5 \ll \Omega_1$; $U_2 = e\mathcal{E}_2 z_5 \ll \Omega_2$) величини U_1 і U_2 вибирались малими ($U_1 = 10^{-3}\Omega_1$; $U_2 = 10^{-3}\Omega_2$).

Результати розрахунків у одно- та двофотонному наближеннях логарифмів активної динамічної провідності та її парціальних складових, що сформовані лазерними квантовими переходами з третього квазістаціонарного стану, та які пов'язані з випромінюванням одного фотона енергії $\Omega_1 = \Omega_{32}$ (при переході $3 \rightarrow 2$ – в однофотонному наближенні) $\sigma_{32}^{(I)}$ (трикутники) та двох фотонів енергії $\Omega_1 = \Omega_{32}$ і $\Omega_2 = \Omega_{21}$ (при послідовних переходах $3 \rightarrow 2, 2 \rightarrow 1$ – у двофотонному наближенні) $\sigma_{32,21}^{(II)}$ (круги), $\sigma_{32,21}^{(II)+}$ (суцільна лінія), $\sigma_{32,21}^{(II)-}$ (штрихова лінія) в залежності від положення внутрішнього бар'єра b_1 у загальній потенціальній ямі b приведено на Рис. 3. Також на Рис. 3 приведено залежності від b_1 розрахованої у однофотонному наближенні провідності $\sigma_{31}^{(I)}$ (пунктирна лінія), що виникає у переході $3 \rightarrow 1$, конкуруючому до переходу $3 \rightarrow 2$. Вклад двофотонних переходів у сумарній величині динамічної провідності порівняно з однофотонним наближенням будемо характеризувати, розраховуючи величину відносного підсилення $\eta = (\sigma^{(II)} - \sigma^{(I)}) / \sigma^{(I)}$. Залежність величини η від b_1 приведено на Рис. 4. З Рис. 4 видно, що на розглядуваній залежності варто виділити два інтервали зміни b_1 : $0 \text{ nm} \leq b_1 \leq 8 \text{ nm}$ та $8 \text{ nm} \leq b_1 \leq 23,8 \text{ nm}$ [7*].

Основною вимогою оптимізації роботи активної зони чи каскаду ККЛ чи ККД є реалізація в певній їх геометричній конфігурації максимальної величини динамічної провідності в необхідному квантовому переході, яка визначається електронним потоком на вихід з наносистеми, порівняно з складовою провідності у протилежному напрямку та провідностями, що формуються в інших квантових переходах [3*, 4*, 6*, 7*]. В першому інтервалі зміни b_1 , що містить експериментальну геометричну конфігурацію b_1^{exp} згадана умова виконується, оскільки $\sigma_{32}^{(I)} \approx \sigma_{32}^{(I)+} \gg \sigma_{31}^{(I)}, \sigma_{31}^{(I)}$. З Рис. 4 видно, що для першого інтервалу зміни b_1 вклад двофотонних процесів є малим ($\eta < 2\%$), а тому двофотонна лазерна генерація не відбувається. Отже, для згаданого інтервалу зміни b_1 , досліджувана РТС може

ефективно працювати як активна зона ККЛ в якій реалізуються однофотонні лазерні переходи з частотою $\Omega = \Omega_{32}$ [7*].

Для другого інтервалу зміни b_1 умова оптимізації роботи активної зони ККЛ не виконується, оскільки при $8 \text{ нм} \leq b_1 \leq 12 \text{ нм}$ – $\sigma_{31}^{(1)} \gg \sigma_{32}^{(1)}, \sigma_{32}^{(II)}$ (переважає провідність, що формується у переході $3 \rightarrow 1$), при $12 \text{ нм} \leq b_1 \leq 14,7 \text{ нм}$ – $\sigma_{32}^{(II)} \approx \sigma_{32}^{(II)-} \gg \sigma_{32}^{(II)+}, \sigma_{31}^{(1)}$ (переважає провідність, яка визначається потоком у зворотному напрямі до виходу з РТС), при $14,7 \text{ нм} \leq b_1 \leq 19,7 \text{ нм}$ – $\sigma_{31}^{(1)} \gg \sigma_{32}^{(1)}, \sigma_{32}^{(II)}$ (переважає провідність, що формується у переході $3 \rightarrow 1$), при $19,7 \text{ нм} \leq b_1 \leq 23,8 \text{ нм}$ – $\sigma_{32}^{(II)} \approx \sigma_{32}^{(II)-} \gg \sigma_{32}^{(II)+}, \sigma_{31}^{(1)}$ (переважає провідність, яка визначається потоком у зворотному напрямі до виходу з РТС) [7*].

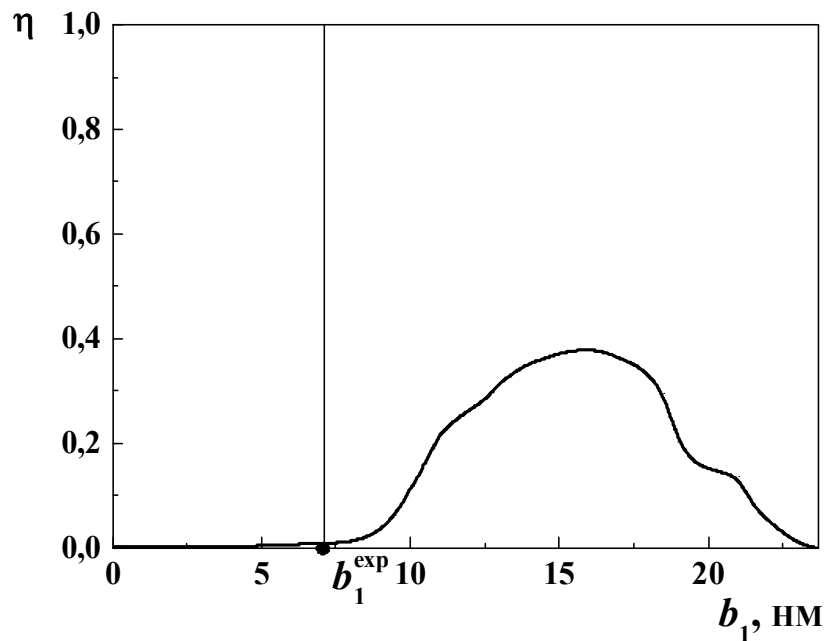


Рис. 1.8. Залежності величини відносного підсилення $\eta = (\sigma^{(II)} - \sigma^{(1)}) / \sigma^{(II)}$ у залежності від положення внутрішнього бар'єра b_1 у загальній потенціальній ямі.

З Рис. 4 видно, що для інтервалу $8 \text{ нм} \leq b_1 \leq 23,8 \text{ нм}$ залежність η від b_1 при $8 \text{ нм} \leq b_1 \leq 16 \text{ нм}$ плавно зростає, формуючи при $b_1 \approx 16 \text{ нм}$ максимум $\eta \approx 0,38$, а далі при $16 \text{ нм} \leq b_1 \leq 23,8 \text{ нм}$ плавно зменшується до нуля.

Далі дослідимо умови формування конфігурацій наносистем в яких внесок від двофотонної генерації є значним. Для цього використаємо параметри трибар'єрної

РТС з фіксованою шириною загальної потенціальної ями $b_1 + b_2 = 10,8 \text{ нм}$ і товщиною внутрішнього бар'єра $\Delta_2 = 1,5 \text{ нм}$ та трьома різними співвідношеннями між товщинами зовнішніх бар'єрів: $(\Delta_1 = 1,5 \text{ нм}; \Delta_3 = 4,5 \text{ нм};)$; $(\Delta_1 = \Delta_3 = 3 \text{ нм})$; $(\Delta_1 = 4,5 \text{ нм}; \Delta_3 = 1,5 \text{ нм})$, за умови, що $\Delta_1 + \Delta_3 = 6 \text{ нм}$. Результати розрахунків резонансних енергій (E_1, E_2, E_3) та часів життя (τ_1, τ_2, τ_3) для перших трьох квазістаціонарних станів електрона у залежності від положення внутрішнього бар'єра b_1 у загальній потенціальній ямі b приведено на Рис. 1.9, де вказані товщини зовнішніх бар'єрів (Δ_1, Δ_3) [6*, 7*].

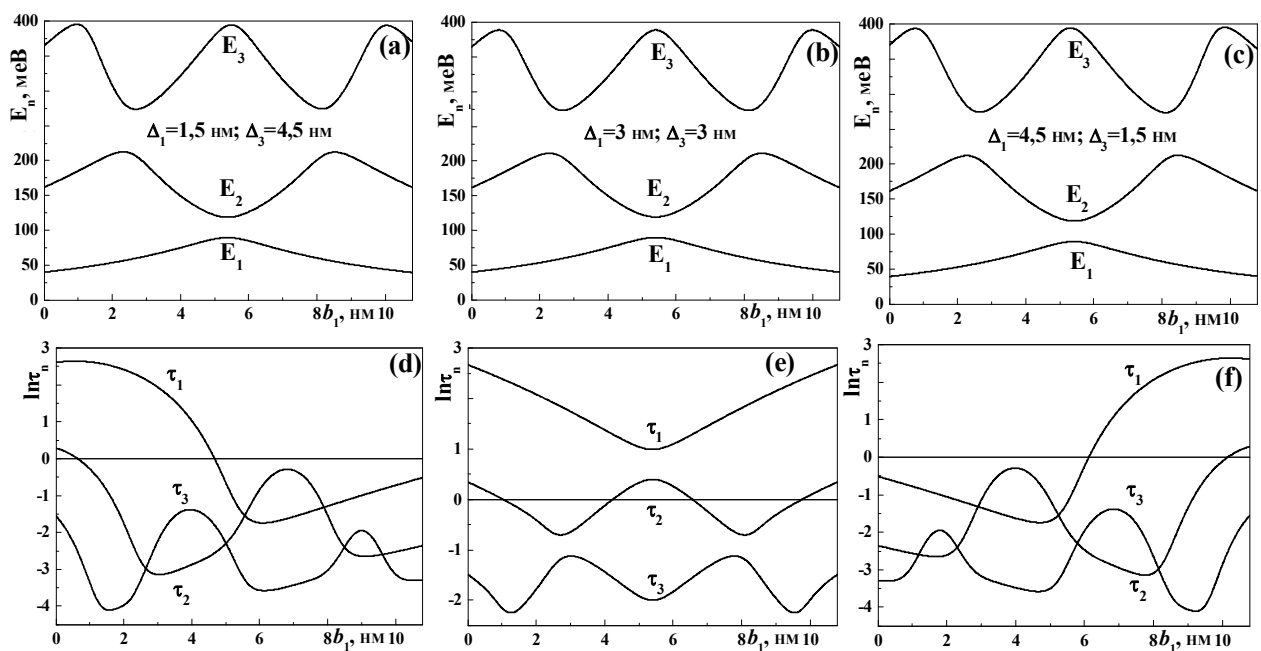


Рис. 1.9. Залежності резонансних енергій (E_n) та часів життя (τ_n) електрона у залежності від положення внутрішнього бар'єра b_1 у загальній потенціальній ямі.

З Рис. 1.9а, б, с видно, що залежності резонансних енергій (E_n) від b_1 якісно однакові для всіх трьох РТС, а тому в них реалізуються однакові умови оптимізації для отримання генерації лазерного випромінювання певних частот [7*].

З Рис. 1.9, d, e, f видно, що залежності часів життя (τ_n) електрона у перших трьох квазістаціонарних станах від b_1 для несиметричних за товщинами зовнішніх бар'єрів РТС мають чітко виражену асиметрію, пов'язану саме з несиметричністю вхідного (Δ_1) та вихідного (Δ_3) потенціальних бар'єрів [7*].

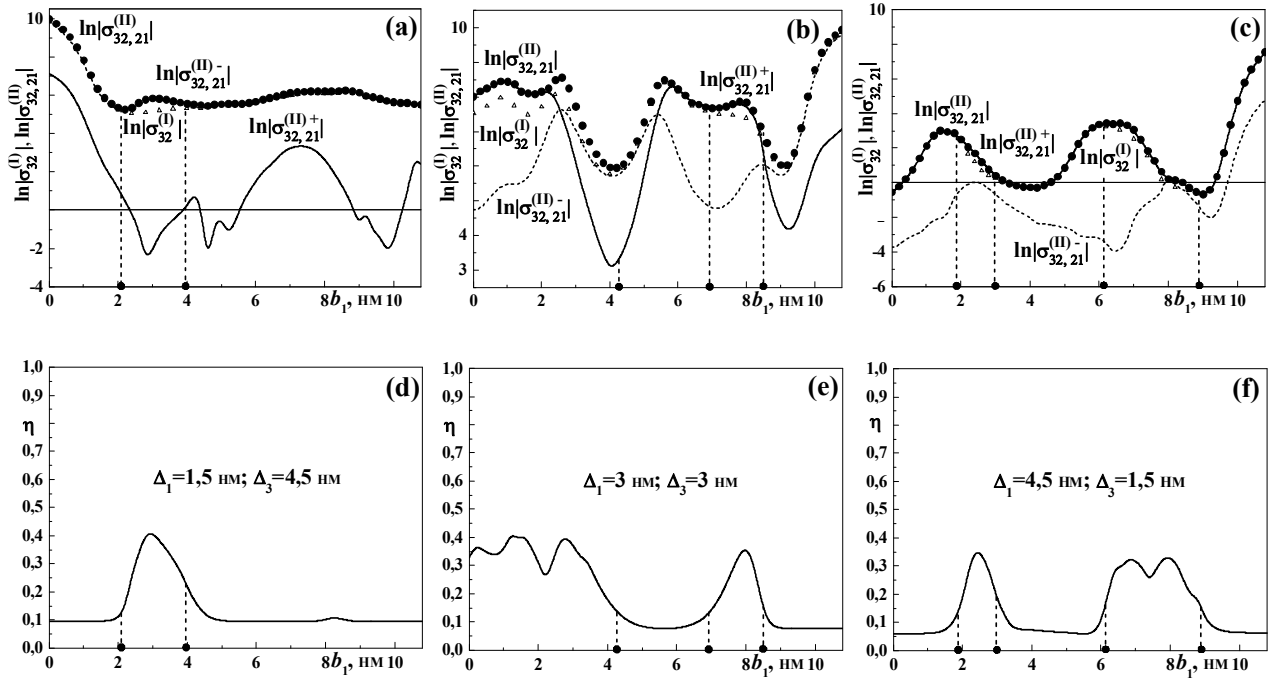


Рис. 1.10. Залежності логарифмів динамічних провідностей та їх парціальних складових, сформованих у лазерних квантових переходах, розрахованих у однофотонному $\sigma^{(I)}(|3\rangle \rightarrow |2\rangle)$ та двофотонному $\sigma^{(II)}(|3\rangle \rightarrow |2\rangle, |2\rangle \rightarrow |1\rangle)$ наближеннях в одиницях $\sigma_0 = 1 \text{ См/см}$, та величини відносного підсилення $\eta = (\sigma^{(II)} - \sigma^{(I)}) / \sigma^{(II)}$ у залежності від положення внутрішнього бар'єра b_1 у загальній потенціальній ямі.

З метою дослідження внеску двофотонних процесів у формування електронної активної динамічної провідності РТС, згідно з розвиненою вище теорією, виконувався розрахунок провідності двофотонному наближеннях для лазерних квантових переходів з третього збудженого електронного стану. Для того, щоб задовольнити умови наближення слабого сигналу ($U_1 = e\epsilon_1 z_5 \ll \Omega_1; U_2 = e\epsilon_2 z_5 \ll \Omega_2$) величини U_1 і U_2 вибирались малими ($U_1 = 10^{-3} \Omega_1; U_2 = 10^{-3} \Omega_2$) [6*, 7*].

Результати розрахунків у одно- та двофотонному наближеннях логарифмів активної динамічної провідності та її парціальних складових, сформованих лазерним квантовим переходам з третього квазістаціонарного стану, та які пов'язані з випромінюванням одного фотона енергії $\Omega_1 = \Omega_{32}$ (при переході $3 \rightarrow 2$ – однофотонне наближення) та двох фотонів енергії $\Omega_1 = \Omega_{32}$ і $\Omega_2 = \Omega_{21}$ (при

послідовних переходах $3 \rightarrow 2, 2 \rightarrow 1$ – двофотонне наближення), а також величини відносного підсилення $\eta = (\sigma^{(II)} - \sigma^{(I)})/\sigma^{(II)}$ у залежності від положення внутрішнього бар'єра b_1 у загальній потенціальній ямі b приведено на Рис. 1.10 для РТС з трьома різними товщинами зовнішніх потенціальних бар'єрів: $\Delta_1 = 1,5$ нм, $\Delta_3 = 4,5$ нм (Рис. 1.10а, d); $\Delta_1 = 3$ нм, $\Delta_3 = 3$ нм (Рис. 1.10b, e); $\Delta_1 = 4,5$ нм, $\Delta_3 = 4,5$ нм (Рис. 1.10с, f) (також детально у працях [3*, 4*, 6*, 7*]).

З Рис. 1.10а, d видно, що для несиметричної РТС з меншим вхідним бар'єром і більшим вихідним на залежності відносного підсилення η від b_1 виникає пік з максимумом при $b_1 \approx 3$ нм. Це означає, що в цій конфігурації РТС має місце підсилення лазерної генерації за рахунок двофотонних квантових переходів з випромінюванням двох фотонів різної енергії $\Omega_{32} \approx 84$ меВ та $\Omega_{32} \approx 131$ меВ, і система може працювати як двочастотний квантовий каскадний лазер. Проте дана конфігурація РТС, не зважаючи на суттєве зростання інтенсивності випромінювання ($\eta_{\max} \approx 0,4$), не задовольняє умовам оптимізації роботи ККЛ оскільки в цьому випадку $\sigma_{32,21}^{(II)} \approx \sigma_{32,21}^{(II)-} \gg \sigma_{32,21}^{(II)+}$, а отже провідність формується електронним потоком у зворотному напрямі на вихід з РТС, що унеможливорює послідовну роботу усіх каскадів структури [6*, 7*].

З Рис. 1.10b, e видно, що для РТС з однаковими зовнішніми потенціальними бар'єрами суттєве підсилення інтенсивності випромінювання виникає у двох інтервалах зміни b_1 : $0 \text{ нм} \leq b_1 \leq 3,5 \text{ нм}$ і $7,7 \text{ нм} \leq b_1 \leq 8,3 \text{ нм}$ де η досягає значення від 0,3 до 0,4. В обох конфігураціях РТС величина провідності $\sigma_{32,21}^{(II)}$ суттєва і формується “корисною” складовою $\sigma_{32,21}^{(II)+}$, яка визначається прямим електронним потоком. Отже, в цих конфігураціях трибар'єрна РТС може працювати не лише як окремий двочастотний квантовий лазер, але й як активна зона ККЛ. Подальший вибір конкретної конфігурації РТС залежить від необхідних робочих (ω_{32}, ω_{21}) частот лазерної системи з урахуванням, у випадку ККЛ, часу життя електрона у робочих квазістаціонарних станах, який не повинен переважати час резонування на фонах.

У несиметричній РТС (Рис. 1.10с, f) з більшим вхідним бар'єром (Δ_1) і меншим вихідним (Δ_3), де на залежності η від b_1 хоч і виникають піки, однак всюди абсолютні величини провідності настільки малі (Рис. 1.10с), що така РТС не має прикладного значення.

Отже, геометричні конфігурації РТС, в яких, за рахунок ефективної двофотонної лазерної генерації оптимізується робота окремого квантового лазера чи активної зони ККЛ, отримуються в трибар'єрних РТС з однаковими ширинами зовнішніх потенціальних бар'єрів. Розташуванням внутрішнього бар'єра в трибар'єрній РТС визначаються робочі частоти приладу.

Таким чином, зміною геометричного дизайну наносистем можна отримати такі геометричні конфігурації досліджуваної РТС як активної зони ККЛ, в яких за рахунок двофотонних електронних переходів отримується підсилення лазерної генерації до 38%. Проте для цих конфігурацій РТС часто не виконуються умови оптимізації роботи ККЛ і, оскільки, часи життя електрона у робочих квазістаціонарних станах стають дуже великими, що є суттєвим негативним фактором, який перешкоджає узгодженому когерентному електронному транспорту електронів через активну зону та каскад ККЛ. Як вирішення цієї проблеми слід кардинально міняти функціональну базу наноприладів та режими їх роботи, зокрема температурний. Такі умови можуть бути реалізовані застосуванням іншого роду напівпровідників, які мають більшу зону провідності, що дозволить широко варіювати величинами частот генерованого електромагнітного випромінювання. Крім того температурна стабільність і можливість роботи наноприладів на основі таких напівпровідників у широкому температурному діапазоні – від температур, які забезпечують охолодженням рідким азотом до кімнатних. Саме такими властивостями володіють нітридні напівпровідники III-ї та IV-ї груп, такі як AlN та GaN. Якраз для ККЛ на базі таких напівпровідників нещодавно було експериментально встановлено [34-37] можливість генерації двох різних робочих частот, які виникають у двох різних режимах роботи, що є достатнім підтвердженням теорії поданої у даному розділі дисертації та працях, розкриваючих його зміст [3*, 4*, 6*, 7*].

Висновки до розділу 1

1. Побудовано квантово-механічну теорію квазістаціонарних станів та електронної провідності наносистеми з довільними геометричними параметрами в якій за рахунок змінної концентрації Ga в InGaAs напівпровідниковому сплаві, який виступає середовищем потенціальної ями, досягається можливість формування додаткової гармоніки з частотою, рівною подвоєній робочій частоті квантового каскадного лазера.
2. Встановлено, що величина внеску двофотонних переходів у сумарній величині електронної провідності складає до 37% та виконано дослідження властивостей її парціальних складових. Розвинено підхід до встановлення безпосередніми розрахунками таких конфігурацій РТС, в якій реалізуються послідовні електронні кванторові переходи з третього у другий та з другого у перший квазістаціонарні стани з випромінюванням двох фотонів однакової частоти.
3. Побудовано квантово-механічну теорію квазістаціонарних станів та електронної провідності багат шарових наноструктур з прикладеним поздовжнім постійним електричним полем за умови реалізації додаткових других гармонік з частотою відмінною від робочої частоти ККЛ чи ККД. Окремо досліджено випадок відсутності електричного поля.
4. Встановлено, що величина внеску від складової електронної провідності сформованою додатковою гармонікою у сумарній її величині електронної провідності для різних геометричних конфігурацій наноструктур при лазерній генерації складає до 38%.
5. Розвинено підхід до встановлення безпосередніми розрахунками таких конфігурацій наносистем в яких реалізується можливість лазерної генерації двох різних частот електромагнітного поля з співмірним внеском цих частот у результуючій величині динамічної провідності. Проаналізовано перспективи застосування арсенідних та нітридних напівпровідників як функціональної бази наноприладів функціонуючих на основі механізму з двома робочими частотами.

РОЗДІЛ 2. ТЕОРІЯ ГЕНЕРАЦІЇ ТА ДЕТЕКТУВАННЯ ЕЛЕКТРОМАГНІТНОГО ПОЛЯ В АРСЕНІДНИХ ПЛОСКИХ НАПІВПРОВІДНИКОВИХ СТРУКТУРАХ З УРАХУВАННЯМ ВПЛИВУ ПРОСТОРОВОГО ЗАРЯДУ

2.1. Теорія впливу просторового заряду на електронні процеси у напівпровідникових наноструктурах

Значний інтерес теоретиків до вивчення фізичних процесів, пов'язаних з балістичним електронним транспортом у багатошарових напівпровідникових РТС, зумовлений значною мірою розробкою квантових каскадних лазерів та детекторів, працюючих у інфрачервоному діапазоні електромагнітних хвиль.

Як було встановлено [38-40], час, за який відбувається тунелювання електронного потоку крізь шари наносистем – прецизійних елементів ККЛ і ККД є скінченним і часто дуже близьким до часу τ_{ph} за який відбувається релаксація вхідного потоку на оптичних фонах [41-45]. При застосуванні моделей відкритих наносистем [46-55], вдається в основному найбільш повно описати процеси тунельного транспорту, генерації та детектування енергії електромагнітного поля за рахунок дослідження електронних переходів.

Тому слід очікувати, що за певних умов вплив дисипативних процесів, таких як електрон-електронна взаємодія, взаємодія електронів з фонами та домішками, та особливо, створеними полями просторових статичного та динамічного зарядів буде суттєвим.

Ефект взаємодії електронів зі статичним просторовим зарядом досліджувався в основному для резонансно-тунельних діодів у моделі закритих наносистем [56-65] на основі системи стаціонарного рівняння Шредінгера та рівняння Пуассона. Згадані розрахунки виконувалися для моделювання вольт-фарадних характеристик резонансно-тунельних діодів та врахування впливу легування на потенціальні профілі гетероструктур, що містять досить велику ($\sim 30 - 50$ нм) потенціальну яму. Тому такі задачі тільки формально є суміжними з задачами, виникаючими при

резонансному тунелюванні електронів крізь багатошарові РТС, особливо у фізичній суті виникаючих суттєво нових дисипативних ефектів.

Серед праць де виконувалось спроби теоретичного дослідження самоузгодженого впливу полів просторового статичного та динамічного зарядів на тунелювання електронів взаємодіючих зі змінним електромагнітним полем у дво- та трибар'єрних відкритих РТС можна виділити лише п'ять праць [66-70]. Однак, в цих працях було зроблено ряд спрощень серед яких варто виділити такі:

- у всіх працях [66-70] поставлена задача вивчалася виключно з застосуванням δ - бар'єрної моделі, яка є грубим наближенням моделі ефективних мас і відповідно, може бути використана лише для оціночних розрахунків [20]. Крім того, як відомо з праць [20, 21, 71], значення резонансних ширини Γ_n електронних квазістаціонарних станів у такій моделі є заниженими, що з урахуванням співвідношення $\tau_n = \hbar/\Gamma_n$ для часу життя електрона у n - у стані дає хибне уявлення про електронний транспорт у відкритих РТС. Тому слід зауважити, що у випадку застосування δ - бар'єрної моделі ефекти, пов'язані з урахуванням впливу просторово статичного та динамічного зарядів та процес електронного транспорту можуть бути не цілком адекватно виявленими, охарактеризованими та поясненими з фізичної точки зору;
- у працях [66, 67] повністю відсутнє обґрунтування фізичного змісту складових полів просторового заряду та їх відповідної диференціації на поля статичного φ_{st} та динамічного φ_{dyn} просторового заряду;
- у працях [68-70] нехтується впливом статичного просторового заряду, як такого, що може бути екранованим зарядом іонізованих акцепторних домішок, однак таке наближення не можна застосовувати для багатошарових наносистем – каскадів для сучасних ККЛ і ККД, для яких концентрація вільних носіїв заряду n_0 завжди є на кілька порядків більшою від концентрації легуючих домішок n_D , тобто $n_0 \gg n_D$;
- в працях [66] і [68-70] потенціал взаємодії електрона з просторовим динамічним зарядом уважався малим, у зв'язку з чим застосовувались для

знаходження розв'язків системи рівнянь Шредінгера та Пуассона використовувались методи стаціонарної теорії збурень. Проте критерій малості для такого потенціалу у цих працях не був встановленим, ним могло би бути значення енергії першого резонансного рівня E_1 електрона в досліджуваній РТС.

Враховуючи приведені вище аргументи, слід зробити висновок, що теорія, яка б послідовно, детально і реалістично описувала процеси електронного тунелювання у багат шарових РТС з урахуванням ефектів впливу просторового статичного та динамічного зарядів, власне як і сама теорія, пояснююча виникнення цих зарядів, відсутня. З урахуванням вказаних причин, результати, що були отримані у згаданих нечисленних працях [66-70] можуть бути не правильно кількісно охарактеризованими або ж хибно інтерпретованими в процесі аналізу.

Безпосередньою метою даного розділу є розробка теорії тунельного транспорту крізь відкриті багат шарові РТС електронних потоків, взаємодіючих з високочастотним електромагнітним полем з урахуванням ефектів впливу виникаючих полів просторово статичного та динамічного зарядів.

Для цього буде розроблена схема знаходження аналітичних розв'язків самоузгодженої системи, що складається з повного рівняння Шредінгера та рівняння Пуассона. З використанням отриманих розв'язків буде встановлено вирази, які описують потенціали статичного та динамічного зарядів, що виникають у відкритих напівпровідникових РТС. Також використовуючи самоузгоджені розв'язки системи рівнянь Шредінгера-Пуассона буде розвинена теорія динамічної провідності електронів відкритих напівпровідникових РТС з урахуванням внеску полів статичного та динамічного просторового заряду.

З використанням розвиненої теорії буде проаналізовано виникнення просторового заряду та його складових у плоских РТС в яких реалізуються:

- лазерні квантові переходи з генерацією електромагнітного поля;
- детекторні квантові переходи.

З використанням безпосередніх розрахунків для типових РТС буде показано, що у залежності від того лазерні чи детекторні електронні переходи реалізуються в

наноструктурах формування складових просторового заряду відбувається різним чином.

Буде встановлено та детально проаналізовано механізми впливу складових просторового заряду на спектральні параметри електронних квазістаціонарних станів у РТС та їх динамічну провідність, що дозволить показати, як поля цих зарядів впливають на інтенсивність квантових переходів.

Розрахунками спектральних параметрів та активної динамічної провідності для наносистем, які можуть функціонувати як активні елементи ККЛ чи ККД буде показано, що поле статичного заряду впливає на спектральні параметри та інтенсивність квантових переходів однаково для обох типів наноприладів. При цьому поля динамічного заряду, які мають для ККЛ і ККД різну фізичну природу кардинально по різному впливають на електронні стани у РТС, інтенсивність квантових переходів, та й відповідно сам процес електронного транспорту.

На основі аналізу отриманих теоретичних та розрахункових результатів буде встановлено критерії, які дають змогу узагальнити та покращити розуміння процесів тунельного транспорту у відкритих РТС з урахуванням ефектів впливу складових просторового заряду, та показати за яких умов ці ефекти стають суттєвими й установити загальні підходи до урахування цих ефектів.

2.2. Теорія складових просторового заряду, виникаючого при резонансному тунелюванні крізь відкриті резонансно-тунельні структури

Дослідження електронного тунельного транспорту у відкритих РТС будемо виконувати на прикладі відкритої трибар'єрної арсенідної напівпровідникової наносистеми з $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$ - потенціальними ямами та $\text{In}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ - бар'єрами. Для розрахунку спектральних характеристик електронних квазістаціонарних станів та активної динамічної провідності електронів наносистеми як характеристики інтенсивності квантових переходів, будемо вважати, що ця система у декартовій системі координат розміщується таким чином, що її шари є перпендикулярними до осі OZ (див. також праці автора дисертації [2*, 5*, 9*, 11*]). Усі геометричні параметри наноструктури є відомими, їх позначення вказано на Рис. 1.

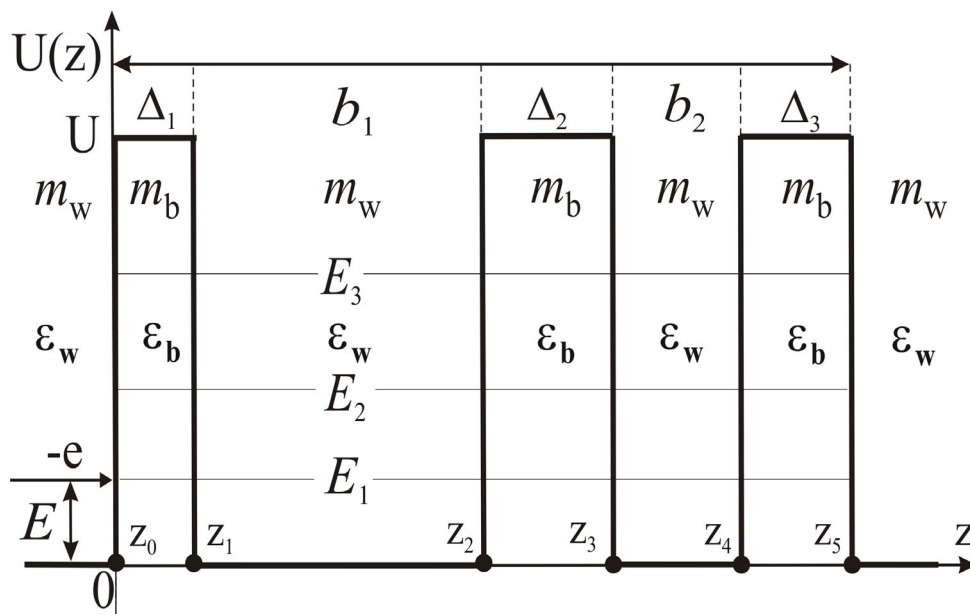


Рис. 2.1. Геометрична та енергетична схеми відкритої трибар'єрної РТС.

Оскільки для арсенідних напівпровідників різниця між сталими решіток шарів-ям та шарів-бар'єрів є незначною, то це дозволяє застосовувати до електрона в трибар'єрній РТС модель ефективних мас та прямокутних потенціалів.

Ефективна маса електрона в досліджуваній наноструктурі може бути подана як:

$$m(z) = m_w \left\{ \theta(-z) + \sum_{p=1}^3 (\theta(z - z_{2p-1}) - \theta(z - z_{2p})) \right\} + m_b \sum_{p=0}^2 \{ \theta(z - z_{2p}) - \theta(z - z_{2p+1}) \}, \quad (2.1)$$

$$U(z) = U \sum_{p=0}^2 (\theta(z - z_{2p}) - \theta(z - z_{2p+1})), \quad (2.2)$$

де $\theta(z)$ - функція Хевісайда, $z_6 = \infty$.

Уважається, що моноенергетичний потік електронів з енергією E і початковою концентрацією n_0 падає перпендикулярно до площин двоямної відкритої РТС зліва. Також у постановці задачі будемо уважати, що всередині РТС тунельованим електронним потоком унаслідок скінченності часу тунелювання електронів, спричиняється просторовий заряд, взаємодія з яким у одно електронній задачі розглядається далі. В даному випадку рух електрона вважається

одновимірним і таким, що описується хвильовою функцією $\Psi(z,t)$, яка задовольняє повне рівняння Шредінгера [2*, 5*, 9*, 11*]:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(z,t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} + U(z) + H(z,t) \right) \Psi(z,t), \quad (2.3)$$

– де

$$H(z,t) = -e\epsilon [z\theta(z) + (z_5 - z)\theta(z - z_5)] (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) + e\phi(z,t) \quad (2.4)$$

залежний від часу нелінійний гамільтоніан, перший доданок якого описує взаємодію електрона зі змінним електромагнітним полем з частотою ω та амплітудою напруженості його електричної складової ϵ ; а другий доданок характеризує взаємодію електрона з полем просторового заряду, потенціал $\phi(z,t)$ якого визначається рівнянням Пуассона [2*, 5*, 9*, 11*]:

$$\frac{\partial}{\partial z} \left[\epsilon(z) \frac{\partial \phi(z,t)}{\partial z} \right] = -en(z,t), \quad (2.5)$$

а фізичний зміст потенціалу $\phi(z,t)$ буде встановлено далі.

У рівнянні (2.5):

$$\epsilon(z) = \epsilon_1 \left\{ \theta(-z) + \sum_{p=1}^3 (\theta(z - z_{2p-1}) - \theta(z - z_{2p})) \right\} + \epsilon_2 \sum_{p=0}^2 \{ \theta(z - z_{2p}) - \theta(z - z_{2p+1}) \} \quad (2.6)$$

– діелектрична проникливість трибар'єрної РТС, а

$$n(z,t) = n_0 |\Psi(z,t)|^2 \quad (2.7)$$

змінна у просторі концентрація електронів.

Зі структури рівнянь (2.3) і (2.5), з урахуванням явного вигляду гамільтоніана (2.4) та співвідношення (2.7) видно, що вони утворюють самоузгоджену систему.

Розв'язок повного рівняння Шредінгера (2.3) з гамільтоніаном (2.4) будемо шукати з використанням наближення слабкого сигналу, що дозволяє подати шукану функцію у вигляді:

$$\Psi(z,t) = \Psi_0(z)e^{-i\omega_0 t} + \Psi_{-1}(z)e^{-i(\omega_0 - \omega)t} + \Psi_{+1}(z)e^{-i(\omega_0 + \omega)t}, \quad \omega_0 = E/\hbar. \quad (2.8)$$

Підставляючи співвідношення (2.8) у рівняння Пуассона (2.5) з урахуванням співвідношення (2.7) отримуємо рівняння:

$$\frac{\partial}{\partial z} \left[\varepsilon(z) \frac{\partial \varphi(z, t)}{\partial z} \right] = -e \left| \Psi_0(z) e^{-i\omega_0 t} + \Psi_{-1}(z) e^{-i(\omega_0 - \omega)t} + \Psi_{+1}(z) e^{-i(\omega_0 + \omega)t} \right|^2, \quad (2.9)$$

Перетворюючи праву частину цього рівняння будемо мати:

$$\begin{aligned} & -e \left| \Psi_0(z) e^{-i\omega_0 t} + \Psi_{-1}(z) e^{-i(\omega_0 - \omega)t} + \Psi_{+1}(z) e^{-i(\omega_0 + \omega)t} \right|^2 = \\ & = -e \left(\Psi_0(z) e^{-i\omega_0 t} + \Psi_{-1}(z) e^{-i(\omega_0 - \omega)t} + \Psi_{+1}(z) e^{-i(\omega_0 + \omega)t} \right) \times \left(\Psi_0(z) e^{-i\omega_0 t} + \Psi_{-1}(z) e^{-i(\omega_0 - \omega)t} + \right. \\ & \left. + \Psi_{+1}(z) e^{-i(\omega_0 + \omega)t} \right)^* = -e \left(\Psi_0(z) e^{-i\omega_0 t} + \Psi_{-1}(z) e^{-i(\omega_0 - \omega)t} + \Psi_{+1}(z) e^{-i(\omega_0 + \omega)t} \right) \times \left(\Psi_0^*(z) e^{i\omega_0 t} + \right. \\ & \left. + \Psi_{-1}^*(z) e^{i(\omega_0 - \omega)t} + \Psi_{+1}^*(z) e^{i(\omega_0 + \omega)t} \right) = -e \left(\left| \Psi_0(z) \right|^2 + \Psi_0^*(z) \Psi_{-1}(z) e^{i\omega t} + \Psi_0^*(z) \Psi_{+1}(z) e^{-i\omega t} + \right. \\ & \left. + \Psi_0(z) \Psi_{-1}^*(z) e^{i\omega t} + \left| \Psi_{-1}(z) \right|^2 + \Psi_0(z) \Psi_{+1}^*(z) e^{i\omega t} + \Psi_{-1}(z) \Psi_{+1}^*(z) e^{2i\omega t} + \left| \Psi_{+1}(z) \right|^2 \right). \end{aligned} \quad (2.10)$$

Оскільки доданки $\left| \Psi_{\pm 1}(z) \right|^2$ є величинами другого порядку малості, то виконуються умови:

$$\left| \Psi_{\pm 1}(z) \right|^2 \ll \left| \Psi_0(z) \right|^2, \quad \left| \Psi_{\pm 1}(z) \right|^2 \ll \left| \Psi_0(z) \Psi_{\pm 1}^*(z) \right|; \quad \left| \Psi_{\pm 1}(z) \right|^2 \ll \left| \Psi_0(z) \Psi_{\pm 1}^*(z) \right|. \quad (2.11)$$

Тоді, враховуючи умову (2.11), у виразі (2.10) можна знехтувати згаданими доданками, унаслідок чого рівняння Пуассона (2.9) набуває вигляду:

$$\frac{\partial}{\partial z} \left[\varepsilon(z) \frac{\partial \varphi(z, t)}{\partial z} \right] = -en_0 \left[\xi_0(z) + \xi(z) e^{i\omega t} + \xi^*(z) e^{-i\omega t} \right]. \quad (2.12)$$

де введено позначення:

$$\xi_0(z) = \left| \Psi_0(z) \right|^2, \quad \xi_+(z) = \Psi_0(z) \Psi_{+1}^*(z) + \Psi_0^*(z) \Psi_{-1}(z), \quad \xi_-(z) = \xi_+^*(z). \quad (2.13)$$

Розв'язок рівняння Пуассона (2.12) будемо шукати наступним чином. Нехай $\varphi^{(p)}(z, t)$ - є розв'язком цього рівняння для довільного p -го шару всередині наносистеми. Тоді розв'язок рівняння (2.12) може бути представленим у вигляді:

$$\begin{aligned} \varphi(z, t) &= \sum_{p=1}^5 \varphi^{(p)}(z, t) \left[\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p) \right] = \\ &= \sum_{p=1}^5 \left[\varphi_{st}^{(p)}(z) + \varphi_-^{(p)}(z) e^{i\omega t} + \varphi_+^{(p)}(z) e^{-i\omega t} \right] \left[\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p) \right] \end{aligned} \quad (2.14)$$

Записуючи рівняння (2.12) для довільного p - го шару наносистеми з урахуванням (2.14) і виразу для діелектричної проникності (2.6) знаходимо:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial z} \left[\varepsilon_p \frac{\partial}{\partial z} \left[\sum_{p=1}^5 \left\{ \varphi_{st}^{(p)}(z) + \varphi_-^{(p)}(z)e^{i\omega t} + \varphi_+^{(p)}(z)e^{-i\omega t} \right\} \right] \left[\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p) \right] \right] = \\ & = -en_0 \left[\sum_{p=1}^5 \left\{ \xi_0^{(p)}(z) + \xi^{(p)}(z)e^{i\omega t} + \xi^{(p)*}(z)e^{-i\omega t} \right\} \right] \left[\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p) \right] \end{aligned} \quad (2.15)$$

де $\xi_0^{(p)}(z)$, $\xi^{(p)}(z)$, $\xi^{(p)*}(z)$ - значення виразів (2.13) у довільному p - му шарі всередині наносистеми.

З рівняння (2.15) з використанням властивостей θ - функції, опускаючи знак суми, та після прирівнювання величин однакового порядку (нульового та першого при степенях $e^{i\omega t}$ і $e^{-i\omega t}$ отримуються такі рівняння:

$$\frac{d^2 \varphi_{st}^{(p)}(z)}{dz^2} = -\frac{en_0}{\varepsilon_p} \xi_0^{(p)}(z), \quad (2.16)$$

$$\frac{d^2 \varphi_{\pm}^{(p)}(z)}{dz^2} = -\frac{en_0}{\varepsilon_p} \xi_{\mp}^{*(p)}(z), \quad (2.17)$$

Розв'язки рівнянь (2.16), (2.17) можуть бути подані у вигляді:

$$\varphi_{st}^{(p)}(z) = -\frac{en_0}{\varepsilon_p} \int_0^z \int_0^{z'} \xi_0^{(p)}(z'') dz' dz'' + C_1^{(p)}(z - z_{p-1}) + C_2^{(p)}, \quad (2.18)$$

$$\varphi_{\pm}^{(p)}(z) = -\frac{en_0}{\varepsilon_p} \int_0^z \int_0^{z'} \xi_{\mp}^{*(p)}(z'') dz' dz'' + C_1^{\mp(p)}(z - z_{p-1}) + C_2^{\mp(p)} \quad (2.19)$$

Враховуючи явний вигляд функцій (2.13) та те, як вони входять у рівняння (2.18) і (2.19) тепер зрозуміло, що вираз:

$$\begin{aligned} \varphi_{st}(z) &= \sum_{p=1}^5 \varphi_{st}^{(p)}(z) \left[\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p) \right] = \\ &= \sum_{p=1}^5 \left(-\frac{en_0}{\varepsilon_p} \int_0^z \int_0^{z'} \xi_0^{(p)}(z'') dz' dz'' + C_1^{(p)}(z - z_{p-1}) + C_2^{(p)} \right) \left[\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p) \right] \end{aligned} \quad (2.20)$$

визначає функцію потенціалу $\varphi_{st}^{(p)}(z)$, який спричинений статичним просторовим зарядом в довільній точці z усередині досліджуваної РТС.

Аналогічним чином задається функція, яка визначає потенціал динамічного заряду:

$$\begin{aligned} \varphi_{\pm}(z) &= \sum_{p=1}^5 \varphi_{\pm}^{(p)}(z) [\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)] = \\ &= \sum_{p=1}^5 \left(-\frac{en_0}{\varepsilon_p} \int_0^z \int_0^{z'} \xi_0^{(p)}(z'') dz' dz'' + C_1^{(p)}(z - z_{p-1}) + C_2^{(p)} \right) [\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)] \end{aligned} \quad (2.21)$$

де випадку детекторних електронних переходів з поглинанням електромагнітного поля відповідає знак “+”, тобто вираз для потенціалу динамічного заряду $\varphi_+^{(p)}(z)$, а випадку лазерних переходів з випромінюванням енергії електромагнітного поля відповідає знак “-” і вираз $\varphi_-^{(p)}(z)$ відповідно.

Таким чином, усі складові просторового заряду, виникаючого у відритих РТС та відповідні їм потенціали є визначеними.

Усі невідомі коефіцієнти $C_1^{(p)}$; $C_2^{(p)}$; $C_1^{\mp(p)}$; $C_2^{\mp(p)}$ однозначно визначаються з умов неперервності потенціалу $\varphi_p(z, t)$ та вектора електричної індукції

$$\varphi_p(z, t) = \varepsilon_0 \varepsilon_p E_p(z, t) = \varepsilon_0 \varepsilon_p \frac{\partial \varphi_p(z, t)}{\partial z} \text{ на всіх гетеромежах РТС:}$$

$$\begin{cases} \varphi_p(z_p, t) = \varphi_{p+1}(z_p, t); \\ \varepsilon_p \frac{\partial \varphi_p(z, t)}{\partial z} \Big|_{z=z_p} = \varepsilon_{p+1} \frac{\partial \varphi_{p+1}(z, t)}{\partial z} \Big|_{z=z_p} \end{cases} \quad (2.22)$$

З урахуванням (2.14) з системи (2.22) маємо:

$$\begin{cases} \varphi_{st}^{(p)}(z_p) + \varphi_-^{(p)}(z_p) e^{i\alpha} + \varphi_+^{(p)}(z_p) e^{-i\alpha} = \varphi_{st}^{(p+1)}(z_p) + \varphi_-^{(p+1)}(z_p) e^{i\alpha} + \varphi_+^{(p+1)}(z_p) e^{-i\alpha}; \\ \varepsilon_p \left(\frac{\partial \varphi_{st}^{(p)}(z)}{\partial z} + \frac{\partial \varphi_-^{(p)}(z)}{\partial z} e^{i\alpha} + \frac{\partial \varphi_+^{(p)}(z)}{\partial z} e^{-i\alpha} \right) \Big|_{z=z_p} = \varepsilon_{p+1} \left(\frac{\partial \varphi_{st}^{(p+1)}(z)}{\partial z} + \frac{\partial \varphi_-^{(p+1)}(z)}{\partial z} e^{i\alpha} + \frac{\partial \varphi_+^{(p+1)}(z)}{\partial z} e^{-i\alpha} \right) \Big|_{z=z_p} \end{cases}, \quad (2.23)$$

Тепер після прирівнювання у системі (2.23) величин нульового порядку та коефіцієнтів при $e^{i\alpha}$ і $e^{-i\alpha}$ отримуються граничні умови для потенціалів $\varphi_{st}^{(p)}(z)$, $\varphi_{\pm}^{(p)}(z)$:

$$\left\{ \begin{array}{l} \varphi_{st}^{(p)}(z_p) = \varphi_{st}^{(p+1)}(z_p); \\ \varepsilon_p \frac{\partial \varphi_{st}^{(p)}(z)}{\partial z} \Big|_{z=z_p-0} = \varepsilon_{p+1} \frac{\partial \varphi_{st}^{(p+1)}(z)}{\partial z} \Big|_{z=z_p+0} \end{array} \right. , \quad \left\{ \begin{array}{l} \varphi_{\pm}^{(p)}(z_p) = \varphi_{\pm}^{(p+1)}(z_p); \\ \varepsilon_p \frac{\partial \varphi_{\pm}^{(p)}(z)}{\partial z} \Big|_{z=z_p} = \varepsilon_{p+1} \frac{\partial \varphi_{\pm}^{(p+1)}(z)}{\partial z} \Big|_{z=z_p} \end{array} \right. . \quad (2.24)$$

Крім того, враховуючи постановку задачі, слід урахувати те, що зліва і справа за межами наносистеми для потенціалів, що спричинені статичним та динамічним просторовими зарядами повинні виконуватися умови їх зникнення:

$$\varphi_{st}(z) \Big|_{z \rightarrow 0} = 0; \quad \varphi_{st}(z) \Big|_{z \rightarrow z_5} = 0; \quad \varphi_{\pm}(z) \Big|_{z \rightarrow 0} = 0; \quad \varphi_{\pm}(z) \Big|_{z \rightarrow z_5} = 0. \quad (2.25)$$

Також для хвильової функції $\Psi(z, t)$ та потоків її ймовірності виконуються граничні умови на усіх межах наносистеми:

$$\Psi^{(p)}(E, z_p) = \Psi^{(p+1)}(E, z_p); \quad \frac{d\Psi^{(p)}(E, z)}{m(z)dz} \Big|_{z=z_p-\varepsilon} = \frac{d\Psi^{(p+1)}(E, z)}{m(z)dz} \Big|_{z=z_p+\varepsilon}. \quad (2.26)$$

2.3.1. Теорія спектральних параметрів та активної динамічної провідності електронів взаємодіючих з полями статичного та динамічного просторових зарядів

Для побудови теорії електронних квазістаціонарних станів та теорії активної динамічної провідності з урахуванням впливу виникаючих у РТС полів статичного та динамічного заряду необхідним є знаходження самоузгоджених розв'язків системи повного рівняння Шредінгера (2.3) та Пуассона (2.5). Для отримання цих розв'язків можна скористатися ітераційною процедурою, суть якої викладено далі.

Перетворимо повне рівняння Шредінгера (2.3) з урахуванням виразів (2.4), (2.8) та позначень (2.14):

$$\begin{aligned} & i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left[\Psi_0(z) e^{-i\omega_0 t} + \Psi_{-1}(z) e^{-i(\omega_0 - \omega)t} + \Psi_{+1}(z) e^{-i(\omega_0 + \omega)t} \right] = \\ & = \left(-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} + U(z) - eC [z\theta(z) + (z_5 - z)\theta(z - z_5)] (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) + \right. \\ & \left. + e(\varphi_{st}(z) + \varphi_{-}(z) e^{i\omega t} + \varphi_{+}(z) e^{-i\omega t}) \right) \times (\Psi_0(z) e^{-i\omega_0 t} + \Psi_{-1}(z) e^{-i(\omega_0 - \omega)t} + \Psi_{+1}(z) e^{-i(\omega_0 + \omega)t}); \end{aligned} \quad (2.27)$$

де потенціали $\varphi_{st}(z)$ і $\varphi_{\pm}(z)$ визначаються згідно співвідношень (2.20) і (2.21), звідки:

$$\begin{aligned}
& \hbar\omega_0\Psi_0(z) + \hbar(\omega_0 - \omega)\Psi_{-1}(z)e^{i\omega t} + \hbar(\omega_0 + \omega)\Psi_{+1}(z)e^{-i\omega t} = \\
& = \left(-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} + U(z) + e\varphi_{st}(z) \right) \Psi_0(z) + \\
& + \left(-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} + U(z) + e\varphi_{st}(z) \right) \Psi_{-1}(z)e^{i\omega t} - \\
& - e\{C[z\theta(z) + (z_5 - z)\theta(z - z_5)] - \varphi_{-}(z)\} \Psi_0(z) + \\
& + \left(-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} + U(z) + e\varphi_{st}(z) \right) \Psi_{+1}(z)e^{-i\omega t} - \\
& - e\{C[z\theta(z) + (z_5 - z)\theta(z - z_5)] - \varphi_{+}(z)\} \Psi_0(z) - \\
& - eC[z\theta(z) + (z_5 - z)\theta(z - z_5)] (e^{-2i\omega t} + 1) \Psi_{+1}(z) - \\
& - eC[z\theta(z) + (z_5 - z)\theta(z - z_5)] (e^{2i\omega t} + 1) \Psi_{-1}(z) + \\
& + \varphi_{-}(z) \Psi_{-1}(z)e^{2\omega t} + \varphi_{+}(z) \Psi_{+1}(z)e^{-2\omega t}
\end{aligned} \tag{2.28}$$

Нехтуючи у рівнянні (2.28) доданками другого порядку, та після прирівнювання коефіцієнтів при $e^{\pm i\omega t}$, а також величин нульового порядку, з урахуванням того, що $\hbar\omega_0 = E$, отримуються рівняння:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} + U(z) + e\varphi_{st}(z) - E \right) \Psi_0(z) = 0, \tag{2.29}$$

$$\begin{aligned}
& \left(-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} + U(z) + e\varphi_{st}(z) - \hbar(\omega \pm \omega_0) \right) \Psi_{\pm 1}(z) = \\
& = e\{C[z\theta(z) + (z_5 - z)\theta(z - z_5)] - \varphi_{\pm}(z)\} \Psi_0(z).
\end{aligned} \tag{2.30}$$

Легко зробити висновок, що отримані стаціонарні рівняння Шредінгера (2.29) і (2.30), відповідно разом з рівняннями Пуассона (2.16) і (2.17) утворюють систему взаємоузгоджених рівнянь [2*, 5*, 9*, 11*].

В подальшому при розв'язуванні цієї системи, з метою спрощення громіздких виразів тимчасово опустимо символ енергії E у виразах для $\Psi_0(z)$ і $\varphi_{st}(z)$, $\varphi_{\pm}(z)$ від якої є залежними усі ці три функції унаслідок відкритості наносистеми.

Спочатку у нульовому наближенні шукається розв'язок рівняння (2.29) без урахування статичного просторового заряду $[2^*, 5^*, 9^*]$, покладаючи в ньому $\varphi_{st}(z) = 0$. З урахуванням виразу (2.2) цей розв'язок є наступним:

$$\begin{aligned} \tilde{\Psi}_0(z) &= \Psi_0^{(0)}(z)\theta(-z) + \Psi_0^{(6)}(z)\theta(z - z_5) + \sum_{p=1}^5 \Psi_0^{(p)}(z)[\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)] = \\ &= (A_0^{(0)} e^{ik_0^{(0)}z} + B_0^{(0)} e^{-ik_0^{(0)}z})\theta(-z) + A_0^{(6)} e^{ik_0^{(6)}(z-z_5)}\theta(z - z_5) + \\ &+ \sum_{p=1}^5 [A_0^{(p)} e^{ik_0^{(p)}(z-z_{p-1})} + B_0^{(p)} e^{-ik_0^{(p)}(z-z_{p-1})}] [\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)], \end{aligned} \quad (2.31)$$

де уведено позначення

$$k_0^{(0)} = k_0^{(2)} = k_0^{(4)} = k_0^{(6)} = \sqrt{\frac{2m_w E}{\hbar^2}}; \quad k_0^{(1)} = k_0^{(3)} = k_0^{(5)} = \sqrt{\frac{2m_b(E - U)}{\hbar^2}}. \quad (2.32)$$

Далі, підставляючи розв'язок (2.31) у рівняння Пуассона (2.16), з урахуванням співвідношення (2.20) визначається потенціал $\varphi_{st_0}(z)$. Далі, для потенціалу $\varphi_{st_0}(z)$ з врахуванням непевності функції $\xi_0(z)$ виконується його апроксимація потенціалом заданим як:

$$\varphi_{st_0}(z) = \tilde{\varphi}_{st_0}(z) = \sum_{p=0}^5 \sum_{l=0}^N \varphi_{st}^{(p)}(z_l) [\theta(z - z_{l-1}) - \theta(z - z_l)], \quad (2.33)$$

де точки

$$z_l = \frac{l}{2N} (z_{p+1} - z_p), \quad p = 0 \div 4; \quad z_0 = 0, \quad (2.34)$$

задають координати розбиттів p -го шару РТС, а N - відповідно кількість цих розбиттів.

Підставивши потенціал $\varphi_{st_0}(z)$ визначений як (2.33) у (2.30) отримується рівняння:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} + U(z) + e\varphi_{st_0}(z) - E \right) \Psi_1(z) = 0, \quad (2.35)$$

що визначає хвильову функцію для першого наближення $\Psi_1(z)$. Його розв'язок тепер подається у такому вигляді:

$$\begin{aligned}
\Psi_1(z) &= \Psi_0^{(0)}(z)\theta(-z) + \Psi_0^{(6)}(z)\theta(z - z_5) + \sum_{p=1}^5 \sum_{l=0}^N \Psi_0^{(p)}(z) [\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)] = \\
&= (A_1^{(0)} e^{ik_0^{(0)}z} + B_1^{(0)} e^{-ik_0^{(0)}z})\theta(-z) + A_1^{(6)} e^{ik_0(z-z_5)}\theta(z - z_5) + \\
&+ \sum_{p=1}^5 \sum_{l=0}^N [A_{1l}^{(p,l)} e^{iK_1^{(p,l)}(z-z_{l-1})} + B_{1l}^{(p)} e^{-iK_1^{(p,l)}(z-z_{l-1})}] [\theta(z - z_{l-1}) - \theta(z - z_l)],
\end{aligned} \tag{2.36}$$

де

$$K_1^{(l)} = K_1^{(l)}(z_l) = \begin{cases} \hbar^{-1} \sqrt{2m_0(\hbar\omega_0 - e\tilde{\varphi}(z_l))}; & \text{в ямах} \\ \hbar^{-1} \sqrt{2m_1(\hbar\omega_0 - U - e\tilde{\varphi}(z_l))}; & \text{в бар'єрах} \end{cases} \tag{2.37}$$

Знайдена у першому порядку ітерацій стаціонарна хвильова функція $\Psi_1(z)$ дозволяє застосуванням описаної вище ітераційної процедури отримати потенціал статичного просторового заряду $\varphi_{st_l}(z)$ також у першому порядку наближень. Тоді самоузгоджений розв'язок системи рівнянь (2.35) і (2.16) з необхідною точністю отримується в L -ому циклі ітерацій, при виконанні очевидне співвідношення, яке характеризує збіжність отримуваних значень статичного потенціалу [2*, 5*, 9*, 11*]:

$$|\varphi_{st_{L-1}}(z) - \varphi_{st_L}(z)| / \varphi_{st_L}(z) \ll 1. \tag{2.38}$$

Тоді, відновлюючи опущений раніше символ енергії (E), отримується

$$\Psi_0(E, z) \approx \Psi_L(z), \quad \varphi_{st}(E, z) \approx \varphi_{st_L}(z). \tag{2.39}$$

У співвідношенні (2.38):

$$\varphi_{st}(E, z) = \sum_{p=0}^5 \sum_{l=0}^N \varphi_{st}^{(p_l)}(E, z_l) [\theta(z - z_{l-1}) - \theta(z - z_l)], \tag{2.40}$$

де:

$$\begin{aligned}
\varphi_{st}^{(p_l)}(E, z_l) &= -\frac{en_0}{\varepsilon_0 \varepsilon_{p_l}} \int_0^z \int_0^{z'} \left| A_{1l}^{(p)} e^{iK_1^{(l)}(z''-z_{l-1})} + B_{1l}^{(p)} e^{-iK_1^{(l)}(z''-z_{l-1})} \right|^2 dz'' dz' + C_1^{(p_l)}(z - z_{p-1}) + C_2^{(p_l)} = \\
&= -\frac{en_0}{\varepsilon_0 \varepsilon_{p_l}} \left\{ \frac{1}{2} \left(|A_{1l}^{(p)}|^2 + |B_{1l}^{(p)}|^2 \right) (z - z_{l-1})^2 + \frac{e^{-2iK_1^{(l)}z_{l-1}} \left[A_{1l}^{(p)} B_{1l}^{(p)*} \left(e^{2iK_1^{(l)}z} + 2iK_1^{(l)}z - 1 \right) \right]}{K_1^{(l)2}} \right\} +
\end{aligned}$$

$$+ \frac{e^{2iK_1^{(l)}z_{l-1}} \left[A_{1l}^{(p)*} B_{1l}^{(p)} \left(1 - 2iK_1^{(l)}z - e^{-2iK_1^{(l)}z} \right) \right]}{K_1^{(l)2}} \left. \right\} + C_1^{(p_l)}(z - z_{p_l-1}) + C_2^{(p_l)}, \quad (2.41)$$

а

$$\varepsilon_{p_l} = \begin{cases} \varepsilon_1; & \text{в ямах} \\ \varepsilon_2; & \text{в бар'єрах} \end{cases}. \quad (2.42)$$

З граничних умов (2.26), а також із умови нормування хвильової функції:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_0^*(k', z) \Psi_0(k, z) dz = \delta(k - k') \quad (2.43)$$

однозначно визначаються усі коефіцієнти $A^{(0)}$, $B^{(0)}$, $A^{(6)}$, $A^{(p,l)}$, $B^{(p,l)}$

Знайдена згідно (2.39) хвильова функція $\Psi_0(E, z)$ дозволяє виконати аналітичний розрахунок функції розподілу за енергією густини ймовірності знаходження електрона у межах РТС $[2^*, 5^*, 11^*]$:

$$\begin{aligned} W(E) &= \frac{1}{z_5} \int_0^{z_5} |\Psi_0(E, z)|^2 dz = \frac{1}{z_5} \sum_{p=1}^5 \sum_{l=0}^N \int_{z_{l-1}}^{z_l} \left| A^{(p,l)} e^{iK^{(p,l)}(z'-z_{l-1})} + B^{(p,l)} e^{-iK^{(p,l)}(z'-z_{l-1})} \right|^2 dz' = \\ &= \frac{1}{z_5} \sum_{p=1}^5 \sum_{l=0}^N \int_{z_{l-1}}^{z_l} \left(|A^{(p,l)}|^2 + |B^{(p,l)}|^2 + A^{(p,l)*} B^{(p,l)} e^{-2iK^{(p,l)}(z'-z_{l-1})} + A^{(p,l)} B^{(p,l)*} e^{2iK^{(p,l)}(z'-z_{l-1})} \right) dz' = \\ &= \frac{1}{z_5} \left\{ \sum_{p=1}^5 \sum_{l=0}^N \left(\frac{A^{(p,l)} B^{(p,l)*} \left(e^{2iK^{(p,l)}(z_l-z_{l-1})} \right) - A^{(p,l)*} B^{(p,l)} \left(e^{-2iK^{(p,l)}(z_l-z_{l-1})} - 1 \right)}{2iK^{(p,l)}} + \right. \right. \\ &\left. \left. + \left(|A^{(p,l)}|^2 + |B^{(p,l)}|^2 \right) (z_l - z_{l-1}) \right) \right\} \quad (2.44) \end{aligned}$$

з якої визначаються спектральні характеристики електронних квазістаціонарних станів – їхні резонансні енергії (E_n) та часи життя (τ_n).

Також резонансні енергії (E_n) та часи життя (τ_n) електронних КСС можна отримати, виконуючи розрахунок коефіцієнта прозорості досліджуваної наносистеми, який визначається як:

$$D(E) = \left| \frac{A^{(6)}}{A^{(0)}} \right|^2. \quad (2.45)$$

Знайдена хвильова функція $\Psi_0(E, z)$ дозволяє також використовуючи застосований при знаходженні розв'язків системи рівнянь (2.30) і (2.16) розроблений ітераційний підхід знайти самоузгоджені розв'язки системи рівнянь (2.29) і (2.17). Аналогічно, у нульовому порядку ітерацій будемо вважати, що в рівняннях (2.29) можна покласти $\varphi_{\pm}(z) = 0$. Зважаючи на це розв'язки цих рівнянь з апроксимованим потенціалом $\tilde{\varphi}_{st}(z)$ шукаються у вигляді:

$$\Psi_{\pm}^0(z) = \Psi_{0\pm}(z) + \Phi_{0\pm}(z). \quad (2.46)$$

Розв'язок однорідного рівняння

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} + U(z) + e\varphi_{st}(z) - \hbar(\omega \pm \omega_0) \right) \Psi_{\pm 1}(z) = 0 \quad (2.47)$$

враховуючи (2.2) має вигляд:

$$\begin{aligned} \Psi_{0\pm}(z) &= \Psi_{0\pm}^{(0)} \theta(-z) + \Psi_{0\pm}^{(6)} \theta(z - z_5) + \sum_{p=1}^5 \sum_{l=1}^N \Psi_{0\pm}^{(p,l)}(z) [\theta(z - z_{l-1}) - \theta(z - z_l)] = \\ &= B_{0\pm}^{(0)} e^{-ik_{\pm}^{(0)} z} \theta(-z) + A_{0\pm}^{(6)} e^{ik_{\pm}^{(6)}(z-z_5)} \theta(z - z_5) + \\ &+ \sum_{p=1}^5 \sum_{l=1}^N [A_{0\pm}^{(p,l)} e^{iK_{\pm}^{(p,l)}(z-z_{l-1})} + B_{0\pm}^{(p,l)} e^{-iK_{\pm}^{(p,l)}(z-z_{l-1})}] [\theta(z - z_{l-1}) - \theta(z - z_l)] \end{aligned} \quad (2.48)$$

Розв'язок неоднорідного рівняння (2.30) шукається аналогічно, як це робилося при знаходженні неоднорідного розв'язку рівняння (2.29) в однофотонному наближенні.

Шуканий розв'язок має вигляд:

$$\begin{aligned} \Phi_{0\pm}(z) &= \sum_{p=1}^5 \sum_{l=1}^N \Phi_{0\pm}^{(p,l)}(z) [\theta(z - z_{l-1}) - \theta(z - z_l)] + \Phi_{0\pm}^{(6)}(z) \theta(z - z_5) = \\ &= \sum_{p=1}^5 \sum_{l=1}^N \left(\mp \frac{e\mathcal{E}z}{\hbar\omega} \Psi_0^{(p,l)}(z) + \frac{e\mathcal{E}}{m_l \omega^2} \frac{d\Psi_0^{(p,l)}(z)}{dz} \right) [\theta(z - z_{l-1}) - \theta(z - z_l)] + \frac{e\mathcal{E}z_5}{\hbar\omega} \Psi_0^{(6)}(z) \theta(z - z_5) \end{aligned} \quad (2.49)$$

- частинні розв'язки відповідних неоднорідних рівнянь, де

$$k_{\pm}^{(0)} = k_{\pm}^{(6)} = \hbar^{-1} \sqrt{2m_0(\hbar(\omega_0 \pm \omega))}; \quad (2.50)$$

$$K_{\pm}^{(p,l)} = K_{\pm}^{(p,l)}(z_l) = \begin{cases} \sqrt{2m_0(\hbar(\omega_0 \pm \omega) - e\phi(z_l))}; & \text{в ямах} \\ \sqrt{2m_1(\hbar(\omega_0 \pm \omega) - U - e\phi(z_l))}. & \text{в бар'єрах} \end{cases}$$

Подібно до викладеної раніше схеми розрахунку статичного потенціалу, далі виконується аналітичний розрахунок динамічної складової потенціалу $\phi_{0\pm}(z)$ у нульовому порядку ітерацій [9*, 11*].

Усі коефіцієнти $B_{0\pm}^{(0)}$, $A_{0\pm}^{(6)}$, $A_{0\pm}^{(p,l)}$, $B_{0\pm}^{(p,l)}$ можуть бути визначені з граничних умов (2.26).

З використанням співвідношень (2.13), (2.36) і (2.49) отримуємо:

$$\begin{aligned} \xi_{\pm}^{(p,l)}(z) &= \Psi_0^{(p,l)}(z)\Psi_{+1}^{(p,l)*}(z) + \Psi_0^{(p,l)*}(z)\Psi_{-1}(z) = \\ &= \Psi_0^{(p,l)}(z) \left(\Psi_{0+}^{(p,l)*}(z) - \frac{e\mathcal{E}z}{\hbar\omega} \Psi_0^{(p,l)*}(z) + \frac{e\mathcal{E}}{m_{p_l}\omega^2} \frac{d\Psi_0^{(p,l)*}(z)}{dz} \right) + \\ &+ \Psi_0^{(p,l)*}(z) \left(\Psi_{0-}^{(p,l)}(z) + \frac{e\mathcal{E}z}{\hbar\omega} \Psi_0^{(p,l)}(z) + \frac{e\mathcal{E}}{m_{p_l}\omega^2} \frac{d\Psi_0^{(p,l)}(z)}{dz} \right) = \\ &= \Psi_0^{(p,l)}(z)\Psi_{0+}^{(p,l)*}(z) + \Psi_0^{(p,l)*}(z)\Psi_{0-}^{(p,l)}(z) + \frac{e\mathcal{E}}{m_{p_l}\omega^2} \frac{d}{dz} \left(\Psi_0^{(p,l)}(z)\Psi_0^{(p,l)*}(z) \right) \end{aligned} \quad (2.51)$$

аналогічно отримується:

$$\xi_{\pm}^{(p,l)*}(z) = \Psi_0^{(p,l)*}(z)\Psi_{0+}^{(p,l)}(z) + \Psi_0^{(p,l)}(z)\Psi_{0-}^{(p,l)*}(z) + \frac{e\mathcal{E}}{m_{p_l}\omega^2} \frac{d}{dz} \left(\Psi_0^{(p,l)}(z)\Psi_0^{(p,l)*}(z) \right) \quad (2.52)$$

Підставляючи у вираз (2.51) аналітичні вирази для функцій $\Psi_0^{(p_l)}(z)$ і $\Psi_{0\pm}^{(p_l)}(z)$

у явному вигляді маємо:

$$\begin{aligned} \xi_{\pm}^{(p,l)}(z) &= \left(A^{(p,l)} e^{iK^{(p,l)}(z-z_{l-1})} + B^{(p,l)} e^{-iK^{(p,l)}(z-z_{l-1})} \right) \left(A_{0+}^{(p,l)*} e^{-iK_{+}^{(p,l)}(z-z_{l-1})} + B_{0+}^{(p,l)*} e^{iK_{+}^{(p,l)}(z-z_{l-1})} \right) + \\ &+ \left(A^{(p,l)*} e^{-iK^{(p,l)}(z-z_{l-1})} + B^{(p,l)*} e^{iK^{(p,l)}(z-z_{l-1})} \right) \left(A_{0-}^{(p,l)} e^{iK_{-}^{(p,l)}(z-z_{l-1})} + B_{0-}^{(p,l)} e^{-iK_{-}^{(p,l)}(z-z_{l-1})} \right) + \\ &+ \frac{e\mathcal{E}}{m_{p_l}\omega^2} \frac{d}{dz} \left[\left(A^{(p,l)} e^{iK^{(p,l)}(z-z_{l-1})} + B^{(p,l)} e^{-iK^{(p,l)}(z-z_{l-1})} \right) \left(A^{(p,l)*} e^{-iK^{(p,l)}(z-z_{l-1})} + B^{(p,l)*} e^{iK^{(p,l)}(z-z_{l-1})} \right) \right] = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= A^{(p,l)} A_{0+}^{(p,l)*} e^{i(K^{(p,l)} - K_+^{(p,l)})(z-z_{l-1})} + B^{(p,l)} A_{0+}^{(p,l)*} e^{-i(K^{(p,l)} + K_+^{(p,l)})(z-z_{l-1})} + \\
&+ A^{(p,l)} B_{0+}^{(p,l)*} e^{i(K^{(p,l)} + K_+^{(p,l)})(z-z_{l-1})} + B^{(p,l)} B_{0+}^{(p,l)*} e^{-i(K^{(p,l)} - K_+^{(p,l)})(z-z_{l-1})} + \\
&+ A^{(p,l)*} A_{0-}^{(p,l)} e^{-i(K^{(p,l)} - K_-^{(p,l)})(z-z_{l-1})} + B^{(p,l)*} A_{0-}^{(p,l)} e^{i(K^{(p,l)} + K_-^{(p,l)})(z-z_{l-1})} + \\
&+ A^{(p,l)*} B_{0-}^{(p,l)} e^{-i(K^{(p,l)} + K_-^{(p,l)})(z-z_{l-1})} + B^{(p,l)*} B_{0-}^{(p,l)} e^{i(K^{(p,l)} - K_-^{(p,l)})(z-z_{l-1})} + \\
&+ \frac{e\epsilon}{m_{p_l} \omega^2} \frac{d}{dz} \left[\left| A^{(p,l)} \right|^2 + B^{(p,l)} A^{(p,l)*} e^{-2iK^{(p,l)}(z-z_{l-1})} + A^{(p,l)} B^{(p,l)*} e^{2iK^{(p,l)}(z-z_{l-1})} + \left| B^{(p,l)} \right|^2 \right]
\end{aligned} \tag{2.53}$$

Тепер, з урахуванням виразу (2.1) для складової $\varphi_{\pm}^{(p,l)}(z)$, що визначає складову потенціалу, визначену динамічним просторовим зарядом у l -ому шарі розбиття p -го шару наносистеми, отримується вираз:

$$\begin{aligned}
\varphi_{\pm}^{(p,l)}(z) &= -\frac{en_0}{\epsilon_0 \epsilon_{p_l}} \int_0^z \int_0^z \left\{ \left(A^{(p,l)} A_{0+}^{(p,l)*} e^{i(K^{(p,l)} - K_+^{(p,l)})(z''-z_{l-1})} + B^{(p,l)} B_{0+}^{(p,l)*} e^{-i(K^{(p,l)} - K_+^{(p,l)})(z''-z_{l-1})} \right) + \right. \\
&+ \left(A^{(p,l)} B_{0+}^{(p,l)*} e^{i(K^{(p,l)} + K_+^{(p,l)})(z''-z_{l-1})} + B^{(p,l)} A_{0+}^{(p,l)*} e^{-i(K^{(p,l)} + K_+^{(p,l)})(z''-z_{l-1})} \right) + \\
&+ \left(A^{(p,l)*} A_{0-}^{(p,l)} e^{-i(K^{(p,l)} - K_-^{(p,l)})(z''-z_{l-1})} + B^{(p,l)*} B_{0-}^{(p,l)} e^{i(K^{(p,l)} - K_-^{(p,l)})(z''-z_{l-1})} \right) + \\
&+ \left. \left(B^{(p,l)*} A_{0-}^{(p,l)} e^{i(K^{(p,l)} + K_-^{(p,l)})(z''-z_{l-1})} + A^{(p,l)*} B_{0-}^{(p,l)} e^{-i(K^{(p,l)} + K_-^{(p,l)})(z''-z_{l-1})} \right) - \right. \\
&- \left. \frac{2ie\epsilon K^{(p,l)}}{m_{p_l} \omega^2} \left(B^{(p,l)} A^{(p,l)*} e^{-2iK^{(p,l)}(z''-z_{l-1})} - A^{(p,l)} B^{(p,l)*} e^{2iK^{(p,l)}(z''-z_{l-1})} \right) \right\} dz'' dz' = \\
&= C_1^{\pm(p,l)}(z - z_{l-1}) + C_2^{\pm(p,l)} + \frac{en_0}{\epsilon_0 \epsilon_{p_l}} \times \\
&\times \left\{ \frac{A_0^{(p,l)} A_{\pm}^{*(p,l)} e^{i(K_0^{(p,l)} - K_{\pm}^{(p,l)})(z-z_l)} + B_0^{(p,l)} B_{\pm}^{*(p,l)} e^{-i(K_0^{(p,l)} - K_{\pm}^{(p,l)})(z-z_l)}}{(K_0^{(p,l)} - K_{\pm}^{(p,l)})^2} + \right. \\
&+ \left. \frac{A_0^{(p,l)} B_{\pm}^{*(p,l)} e^{i(K_0^{(p,l)} + K_{\pm}^{(p,l)})(z-z_l)} + B_0^{(p,l)} A_{\pm}^{*(p,l)} e^{-i(K_0^{(p,l)} + K_{\pm}^{(p,l)})(z-z_l)}}{(K_0^{(p,l)} + K_{\pm}^{(p,l)})^2} + \right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{A_0^{*(p,l)} A_{\mp}^{(p,l)} e^{-i(K_0^{(p,l)} - K_{\mp}^{(p,l)})(z-z_l)} + B_0^{*(p,l)} B_{\mp}^{*(p,l)} e^{i(K_0^{(p,l)} - K_{\mp}^{(p,l)})(z-z_l)}}{(K_0^{(p,l)} - K_{\mp}^{(p,l)})^2} - \\
& - \frac{B_0^{*(p,l)} A_{\mp}^{*(p,l)} e^{i(K_0^{(p,l)} + K_{\mp}^{(p,l)})(z-z_l)} + A_0^{*(p,l)} B_{\mp}^{*(p,l)} e^{-i(K_0^{(p,l)} + K_{\mp}^{(p,l)})(z-z_l)}}{(K_0^{(p,l)} + K_{\mp}^{(p,l)})^2} - \quad (2.54) \\
& - \frac{ie\epsilon}{2K_0^{(p,l)} m_l \omega^2} \left(A_0^{(p,l)} B_0^{*(p,l)} e^{2iK_0^{(p,l)}(z-z_l)} - B_0^{(p,l)} A_0^{*(p,l)} e^{-2iK_0^{(p,l)}(z-z_l)} \right) \Bigg\}.
\end{aligned}$$

Усі коефіцієнти $C_1^{\pm(p,l)}$, $C_2^{\pm(p,l)}$ однозначно визначаються з умов (2.24) та (2.25).

З використанням знайдених хвильових функцій першого далі виконується розрахунок густини електронних струмів через РТС:

$$j(E \pm \hbar\omega, z) = \frac{ie\hbar n_0}{2m_w} \left(\Psi_{\pm 1}(E, z) \frac{d\Psi_{\pm 1}^*(E, z)}{dz} - \Psi_{\pm 1}^*(E, z) \frac{d\Psi_{\pm 1}(E, z)}{dz} \right), \quad (2.55)$$

що пропорційні відповідним дійсним частинам активних динамічних провідностей $\sigma^{\pm}(E, \Omega)$.

З врахуванням (2.54), повна активна динамічна провідність РТС $\sigma(E, \Omega)$ визначається як сума двох парціальних складових [1* -11*]:

$$\sigma(E, \Omega) = \sigma^+(E, \Omega) + \sigma^-(E, \Omega), \quad (2.56)$$

де

$$\begin{aligned}
\sigma^+(E, \Omega) &= \frac{\hbar\Omega n_0}{2m_0 z_5 \epsilon^2} \left(k_{+1}^{(6)} |A_{+1}^{(6)}|^2 - k_{-1}^{(6)} |A_{-1}^{(6)}|^2 \right); \\
\sigma^-(E, \Omega) &= \frac{\hbar\Omega n_0}{2m_0 z_5 \epsilon^2} \left(k_{+1}^{(0)} |B_{+1}^{(0)}|^2 - k_{-1}^{(0)} |B_{-1}^{(0)}|^2 \right).
\end{aligned} \quad (2.57)$$

За фізичним змістом ці парціальні складові формуються електронними потоками, які спрямовані на вихід ($\sigma^+(E, \Omega)$) та вхід ($\sigma^-(E, \Omega)$) РТС по відношенню до початкового напрямку електронного потоку.

2.3.2. Застосування теорії електронного тунельного транспорту та спектральних параметрів електронів взаємодіючих з змінним електромагнітним полем та урахуванням впливу полів статичного та

динамічного просторових зарядів для наноструктур з прикладеним постійним електричним полем

Функціональні особливості експериментально реалізованих квантових каскадних лазерів, зокрема необхідність коригування генерованої частоти електромагнітного поля та забезпечення тунелювання електронного потоку крізь шари багат шарових РТС зумовлюють застосування постійного електричного поля, яке прикладене перпендикулярно до шарів.

Застосування теорії статичного та динамічного зарядів та їхнього впливу на тунельний електронний транспорт, розвиненої у пунктах 2.2., 2.3.1. вимагає невеликої її модифікації. Для цього необхідно у електронний гамільтоніан внести доданок, який описує взаємодію електронів з постійним електричним полем.

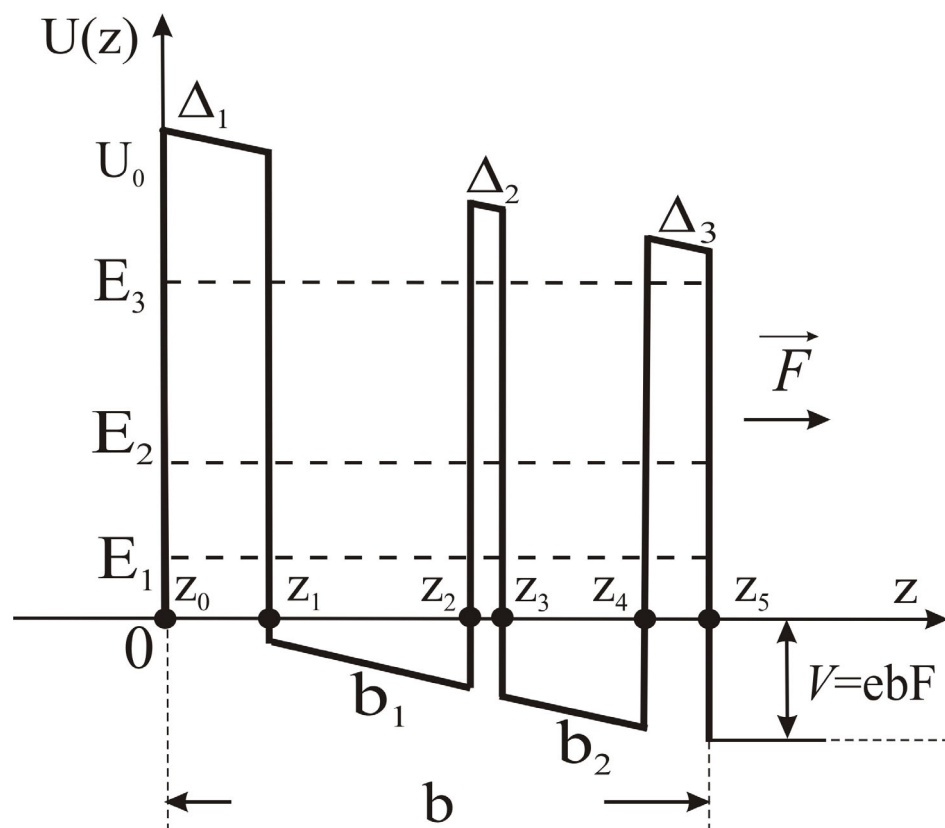


Рис. 2.2. Геометрична та енергетична схеми відкритої трибар'єрної РТС з прикладеним постійним електричним полем.

Розглянемо дво'ямну відкриту РТС, перпендикулярно до шарів якої прикладене постійне електричне поле, напруженість якого \bar{F} , геометрична та енергетична схеми якої подано на Рис.2.2.

Тепер модифікована стаціонарна частина гамільтоніана електрона набуває вигляду:

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} + U(z) - eF \{z[\theta(z) - \theta(z - z_5)] + z_5 \theta(z - z_5)\}, \quad (2.58)$$

де останній доданок у (2.4) відповідає за взаємодію електрона зі стаціонарним електричним полем.

З урахуванням виду гамільтоніана (2.54), розв'язки стаціонарного рівняння Шредінгера (2.29) мають вигляд:

$$\begin{aligned} \Psi_1(z) = & (A_1^{(0)} e^{ik_0^{(0)}z} + B_1^{(0)} e^{-ik_0^{(0)}z}) \theta(-z) + A_1^{(6)} e^{ik_0(z-z_5)} \theta(z - z_5) + \\ & + \sum_{p=1}^5 \sum_{l=0}^N [A_{II}^{(p,l)} Ai(\xi^{(p)}) + B_{II}^{(p)} Bi(\xi^{(p)})] [\theta(z - z_{l-1}) - \theta(z - z_l)], \end{aligned} \quad (2.59)$$

де $Ai(\xi)$, $Bi(\xi)$ - функції Ейрі,

$$\begin{aligned} k^{(0)} = \hbar^{-1} \sqrt{2m_w E}, \quad k^{(6)} = \hbar^{-1} \sqrt{2m_w (E + eFz_5)}, \\ \xi^{(1)} = \xi^{(3)} = \xi^{(5)} = (2m_b eF / \hbar^2)^{1/3}, \quad \xi^{(2)} = \xi^{(4)} = -(2m_b eF / \hbar^2)^{1/3}. \end{aligned} \quad (2.60)$$

Подальша апроксимація потенціалу статичного заряду та знаходження самоузгоджених розв'язків систем рівнянь (2.29) і (2.16), та відповідно (2.30) і (2.17) виконується аналогічно, як це робилося у пункті 2.3.а.

2.4. Властивості спектральних параметрів та активної динамічної провідності електронів взаємодіючих з полем просторового заряду у випадку детекторних електронних переходів

Теорія та аналітичні вирази, які дозволяють проаналізувати фізичний зміст, механізми виникнення та класифікація статичного та динамічного зарядів як складових просторового заряду, виникаючого у відкритих РТС була виконана у пункті 2.2.

Безпосередні розрахунки потенціалів статичного та динамічного просторових зарядів виконувались на прикладі арсенідної напівпровідникової РТС системи $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$ фізичні параметри якої приведено у табл.2.1.

Таблиця 2.1.

m_w / m_e	m_b / m_e	ε_1	ε_2	U , меВ
0.046	0.089	$10.89 + 1.41x$	$10.89 - 2.73x$	520

Геометричні параметри наносистеми вибирались наступними: $\Delta_1 = 3.2$ нм, $\Delta_2 = 6.4$ нм, $\Delta_3 = 5.9$ нм, $b_1 = 15.8$ нм, $b_2 = 6.5$ нм.

На основі розвиненої теорії виконувались розрахунки коефіцієнта прозорості наноструктури $D(E)$ (2.44) для перших трьох електронних КСС з урахуванням впливу статичного просторового заряду при двох різних значеннях концентрації носіїв заряду. Також було виконано розрахунок коефіцієнта прозорості для випадку, коли врахування впливу статичного заряду відсутнє. Результати цих розрахунків $D = D(E)$ в околі значень резонансних енергій електронних КСС приведено на Рис. 2.3. а, б, в.

Як видно з Рис. 2.3., розраховані залежності $D = D(E)$ для усіх КСС є якісно схожими між собою. При цьому на відміну від випадку без урахування впливу статичного заряду форми залежностей $D(E)$ вже не мають квазілоренцової форми, а деформуються, набуваючи в околі резонансу вигляду клиноподібної кривої, ліва частина якої до досягнення максимуму зростає під значним ухилом, а права досить різко зростає, формуючи зі збільшенням значення концентрації n практично вертикальну ділянку. При цьому максимуми залежностей $D(E)$ для всіх КСС у обох підходах залишаються незмінними.

Слід зауважити, що резонансні енергії E_n електронних КСС не залежно від розглядуваного випадку визначаються як максимуми функції $D(E)$, тобто:

$$E_n = \max D(E), n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.61)$$

Щодо резонансних ширин Γ_n електронних КСС, то виникає необхідність для випадку врахування статичного заряду введення її узагальненого поняття. Резонансні ширини для окремого резонансного рівня з номером n тепер однозначно визначаються як:

$$\Gamma_n = E_n^{(2)} - E_n^{(1)}, \quad (2.62)$$

де $E_n^{(1)}, E_n^{(2)}$ є розв'язками рівняння:

$$D(E_n)/2 = D(E), n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.63)$$

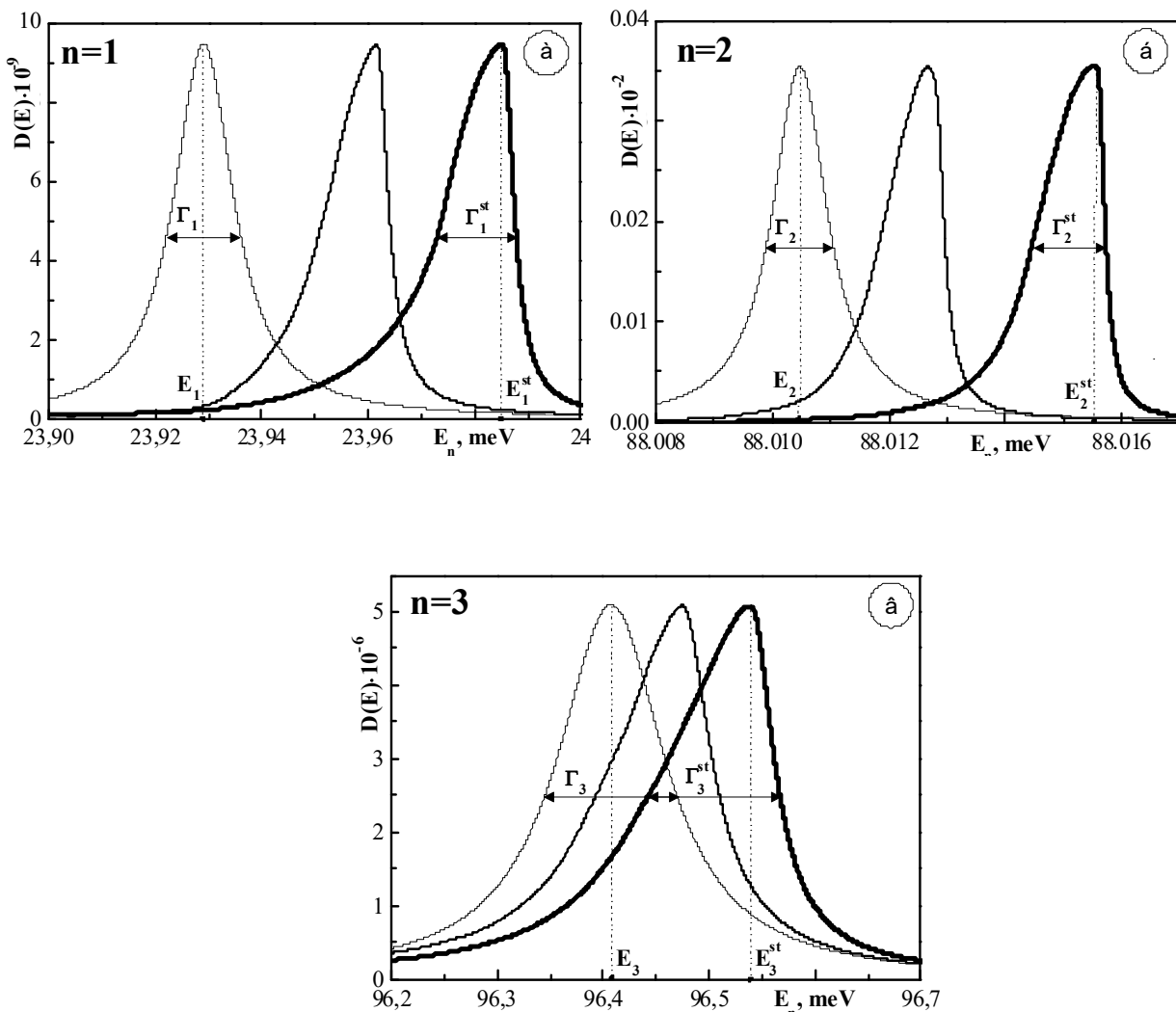


Рис. 2.3. Залежності коефіцієнта прозорості від енергії з урахуванням просторового заряду та без його урахування (штрихова лінія) для перших трьох квазістаціонарних станів, при різних значеннях концентрації носіїв заряду $n_0 = (10^{16} \text{ см}^{-3}; 5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3})$.

На Рис. 2.4а, б, в подано залежності спектральних параметрів – резонансних енергій E_n^{st} та резонансних ширин Γ_n^{st} перших трьох КСС електрона у досліджуваній РТС від концентрації носіїв заряду у падаючому на РТС пучку n_0 .

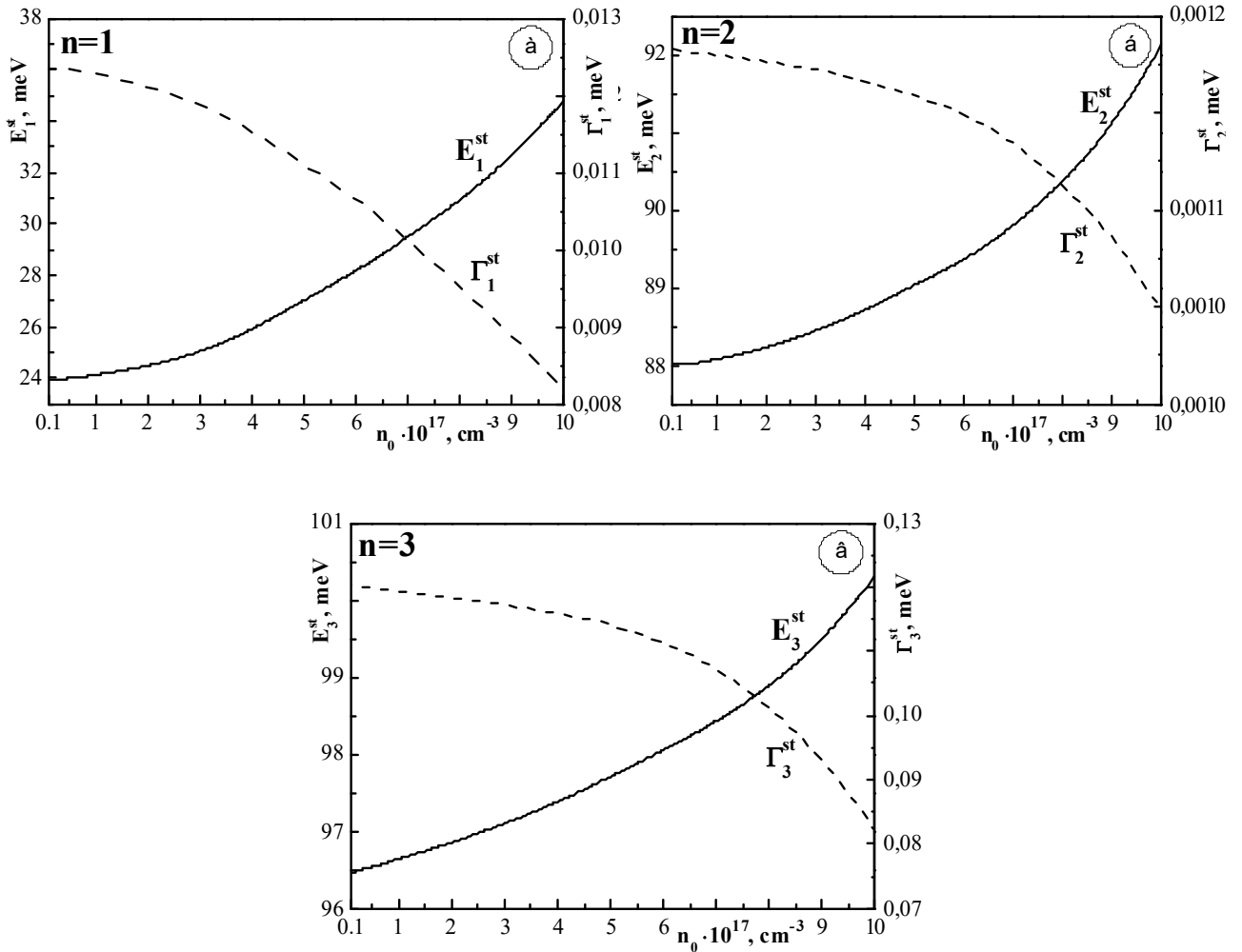


Рис. 2.4. Залежності енергетичного спектру електрона (E_1^{st} , E_2^{st} , E_3^{st}) і резонансних ширин цих квазістаціонарних станів (Γ_1^{st} , Γ_2^{st} , Γ_3^{st}) з урахуванням впливу статичного заряду від концентрації носіїв заряду n_0 .

Як видно з Рис. 2.4а, б, в, у кожному із трьох КСС $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle$ зі збільшенням величини концентрації n_0 значення резонансних енергій E_n^{st} швидко зростають, при величині зміщень енергій по відношенню до випадку без урахування внеску статичного заряду становлять:

$\Delta_1^{st} = E_1^{st} - E_1 = 10,89$ меВ; $\Delta_2^{st} = E_2^{st} - E_2 = 4,12$ меВ; $\Delta_3^{st} = E_3^{st} - E_3 = 3,89$ меВ. Отже, можна зробити висновок, що вплив статичного заряду, що полягає у зміщенні резонансних енергій в область їх більших значень, зменшується із ростом номера КСС n .

З іншого, боку, як також видно Рис. 2.4а, б, в вплив статичного заряду на резонансні ширини Γ_n електронних КСС також є значним. Він проявляється у достатньо сильному зменшенні резонансних ширин Γ_n при збільшенні концентрації n_0 .

Оскільки збільшення концентрації у межах $10^{16} \text{ см}^3 \leq n_0 \leq 10^{18} \text{ см}^3$ змінює E_n^{st} і Γ_n^{st} у різних КСС не однаково, то виявляється, що енергія поглинання електромагнітного поля у квантових переходах $|1\rangle \rightarrow |2\rangle$ і $|1\rangle \rightarrow |3\rangle$ зменшується: $64,08 \text{ меВ} \geq \Omega_{12}^{st} \geq 59,31 \text{ меВ}$, $72,48 \text{ меВ} \geq \Omega_{13}^{st} \geq 65,48 \text{ меВ}$. При цьому зменшуються також ширини смуг поглинання: $\Gamma_{12}^{st} = \Gamma_1^{st} + \Gamma_2^{st}$; $\Gamma_{13}^{st} = \Gamma_1^{st} + \Gamma_3^{st}$: $0,0135 \text{ меВ} \geq \Gamma_{12}^{st} \geq 0,0092 \text{ меВ}$; $0,134 \text{ меВ} \geq \Gamma_{13}^{st} \geq 0,090 \text{ меВ}$ через вплив статичного просторового заряду.

Таким чином, виявлені ефекти впливу статичного заряду для процесів детектування електромагнітних хвиль відкритими РТС виражаються в наступному:

- детектована частота електромагнітної хвилі зменшується за рахунок виникаючої неузгодженості між зміщеними резонансними рівнями електронних КСС. В результаті цього детекторні електронні переходи між зміщеними електронними рівнями та зменшеними смугами поглинання мають нижчу інтенсивність, що буде показано далі;
- з урахуванням зв'язку між резонансною шириною та часом життя електрона у відповідному КСС $\tau_n = \hbar/\Gamma_n$ впливає, що в даному випадку статичний заряд виступає у ролі дисипативного фактора, безпосередньо збільшуючи час тунелювання електронного потоку через РТС та роль фононів у його розсіюванні.

Далі, з використанням розвиненої теорії, на основі співвідношень (2.18) і (2.40), для досліджуваної наносистеми виконувались розрахунки виникаючих у ній потенціалів статичного заряду $\varphi_{st}(E_n, z)$. На Рис. 2.5, а, б, в приведено залежності цих потенціалів від z у межах РТС ($0 \leq z \leq z_5$) для усіх значень резонансних енергій електронних КСС E_n . Розрахунки виконувались для концентрації носіїв заряду, рівної $n_0 = 10^{18} \text{ см}^{-3}$, що є типовим граничним значенням для сучасних ККД [1].

Як видно з Рис. 2.5а, б, в, зі зміною z , в розрахованих залежностях формується по одному максимуму, які розташовані у першому $|1\rangle$ та третьому $|3\rangle$ КСС в межах першої (вхідної) квантової ями ($z_1 \leq z \leq z_2$), а в другому $|2\rangle$ КСС – в межах другої (вихідної) квантової ями ($z_3 \leq z \leq z_4$). Слід зауважити, що розраховані значення потенціалів статичного заряду є досить значними, чим й пояснюється зсув енергетичних електронних рівнів РТС.

Внесок, розрахованих вище потенціалів статичного заряду також більш наочно видно з Рис. 2.6а, б, в, де приведено перенормований потенціалом статичного заряду ефективний потенціал РТС для кожного з електронних енергетичних рівнів:

$$U_{eff}(z) = U(E_n, z) + e\varphi_{st}(E_n, z). \quad (2.64)$$

Як видно з Рис. 2.6а, б, в, потенціальний профіль досліджуваної наноструктури значно деформується під впливом статичного заряду. Для кожного номера n електронного КСС висоти потенціальних бар'єрів у шкалі енергій стають суттєво більшими, крім того дно зони провідності для потенціальних ям РТС піднімаються, причому даний ефект деформації потенціального профілю РТС має нелінійний характер. Слід зауважити, що саме унаслідок зміщення зон провідності потенціальних ям відбувається зсув значень резонансних енергій електронних КСС $E_n^{st} - E_n$ в бік їх більших значень, а також зменшення значень резонансних ширин Γ_n .

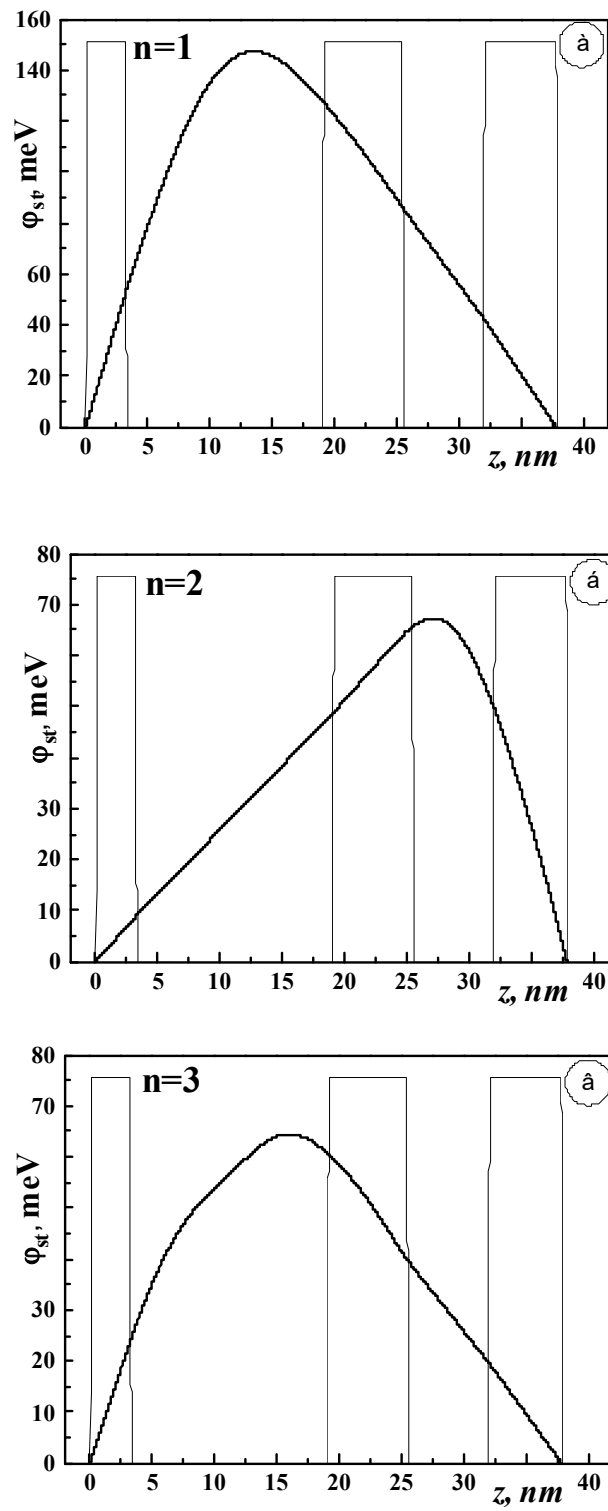


Рис. 2.5. Залежності потенціалів, спричинених статичним зарядом $|\varphi_{st}(z)|$ від z при енергії електронів $E = (E_1^{st}, E_2^{st}, E_3^{st})$ та концентрації носіїв заряду $n = 10^{18} \text{ см}^{-3}$.

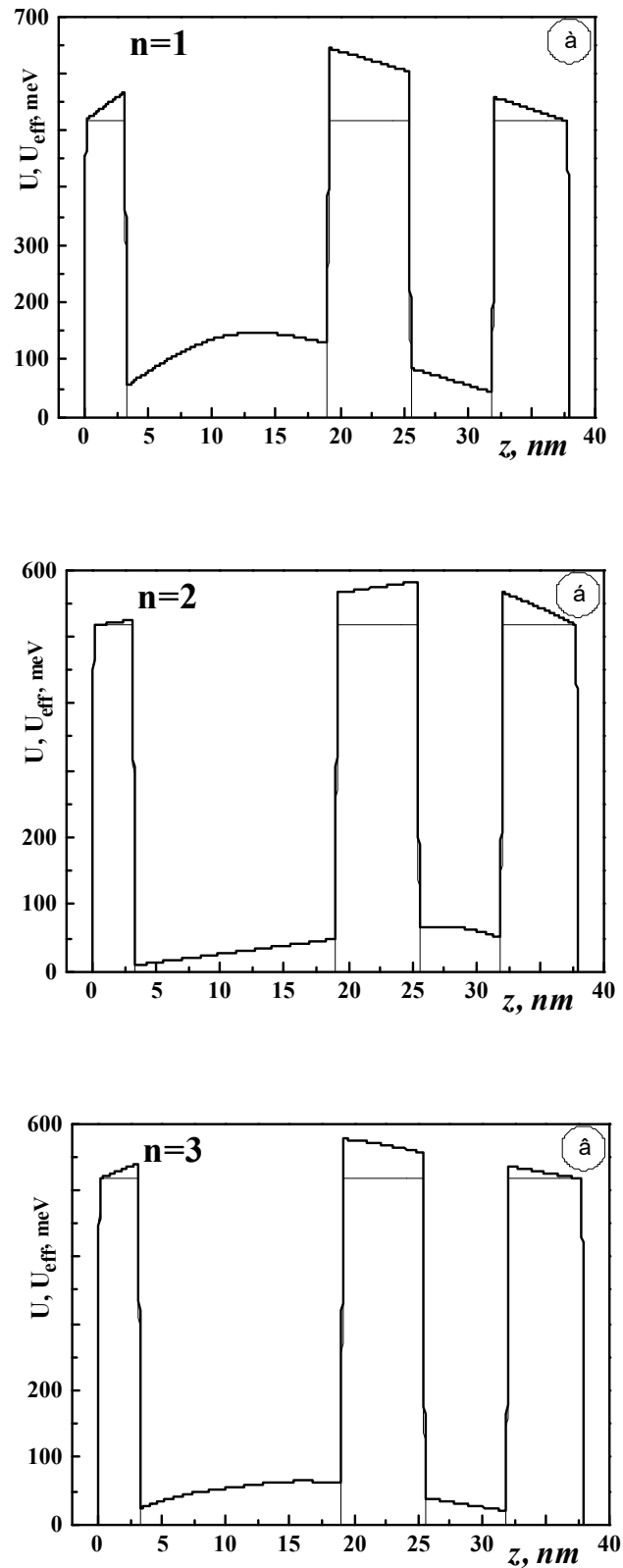


Рис. 2.6. Перенормований потенціальний профіль трибар'єрної РТС, що спричинений статичним зарядом у залежності від z при енергії електронів $E = (E_1^{st}, E_2^{st}, E_3^{st})$ та концентрації носіїв заряду $n = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$.

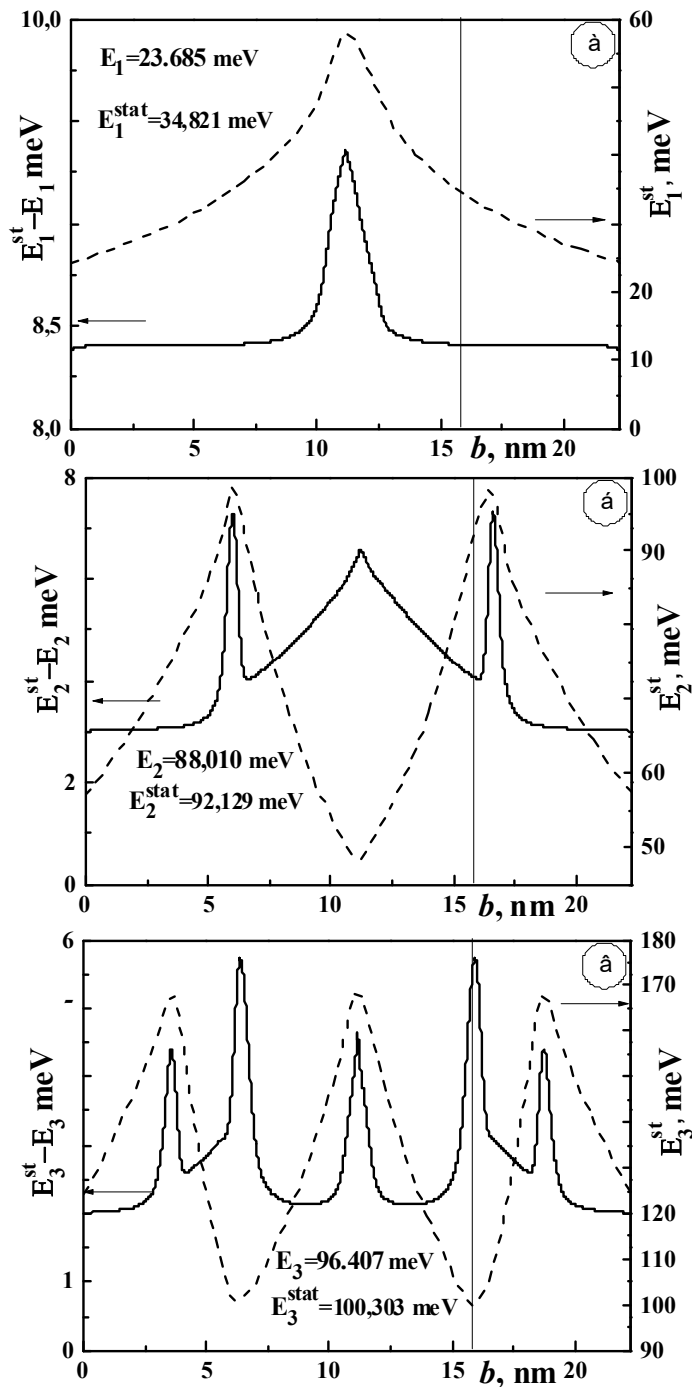


Рис. 2.7. Залежності енергетичного спектру електрона з урахуванням статичного заряду ($E_1^{st}, E_2^{st}, E_3^{st}$) (штрихова лінія) та зміщень енергетичного спектру по відношенню до спектру без урахування статичного заряду ($E_1^{st} - E_1, E_2^{st} - E_2, E_3^{st} - E_3$) (суцільна лінія) від положення внутрішнього потенціального бар'єра (b) у загальній потенціальній ямі при концентрації носіїв заряду $n = 10^{18} \text{ см}^{-3}$.

На Рис. 2.7а, б, в, приведено залежності від положення $b = b_1 + b_2$ внутрішнього потенціального бар'єра у сумарній потенціальній ямі резонансних

енергій $(E_1^{st}, E_2^{st}, E_3^{st})$ електронних КСС, розрахованих з урахуванням впливу статичного заряду при концентрації $n = 10^{18} \text{ см}^{-3}$, та зсувів цих енергій по відношенню до випадку у якому впливом потенціалу статичного заряду нехтується $(\Delta_1^{st} = E_1^{st} - E_1, \Delta_2^{st} = E_2^{st} - E_2, \Delta_3^{st} = E_3^{st} - E_3)$.

Як видно, з Рис. 2.7а, б, в, для кожного номера n електронного КСС, кожна розрахованих залежностей має чітко вираженні особливості та відмінності, що проявляються у різному формуванні їх максимумів $(\max E_n^{st}(b); \max \Delta_n^{st}(b))$ та мінімумів $(\min E_n^{st}(b); \min \Delta_n^{st}(b))$ в інтервалі $0 < b < b_1 + b_2$.

З Рис. 2.7а, видно, що у першому КСС обидві залежності формують по одному максимуму, розташованому при $b/2$, при цьому максимальне зміщення енергетичного рівня, спричинене статичним зарядом: $\max \Delta_1^{st}(b) = \Delta_1^{st}((b_1 + b_2)/2) = E_1^{st}((b_1 + b_2)/2) - E_1$.

З Рис. 2.7б, видно, що у другому КСС залежність $E_2^{st}(b)$ формує два рівні максимуми: $\max_1 E_2^{st}(b) = E_2^{st}((b_1 + b_2)/4) = \max_2 E_2^{st}(b) = E_2^{st}(3(b_1 + b_2)/4)$ та один мінімум: $\min E_2^{st}(b) = \min E_2^{st}((b_1 + b_2)/2)$. На відміну від випадку першого КСС, залежність $\Delta_2^{st}(b)$ тепер формує три максимуми:

$$\max_1 \Delta_2^{st}(b) = \Delta_2^{st}((b_1 + b_2)/4) = \max_3 \Delta_2^{st}(b) = \Delta_2^{st}(3(b_1 + b_2)/4);$$

$$\max_2 \Delta_2^{st}(b) = \Delta_2^{st}((b_1 + b_2)/2)$$

та два мінімуми: $\min_1 \Delta_2^{st}(b) = \Delta_2^{st}((b_1 + b_2)/3) = \min_3 \Delta_2^{st}(b) = \Delta_2^{st}(2(b_1 + b_2)/3)$. Таким чином при $b = (b_1 + b_2)/4$ і $b = 3(b_1 + b_2)/4$ для досліджуваної РТС має місце найбільше зміщення енергетичного рівня другого електронного КСС.

Як видно з Рис. 2.7. в, у третьому електронному КСС залежність $E_3^{st}(b)$ формує три максимуми, дві пари з яких є рівними:

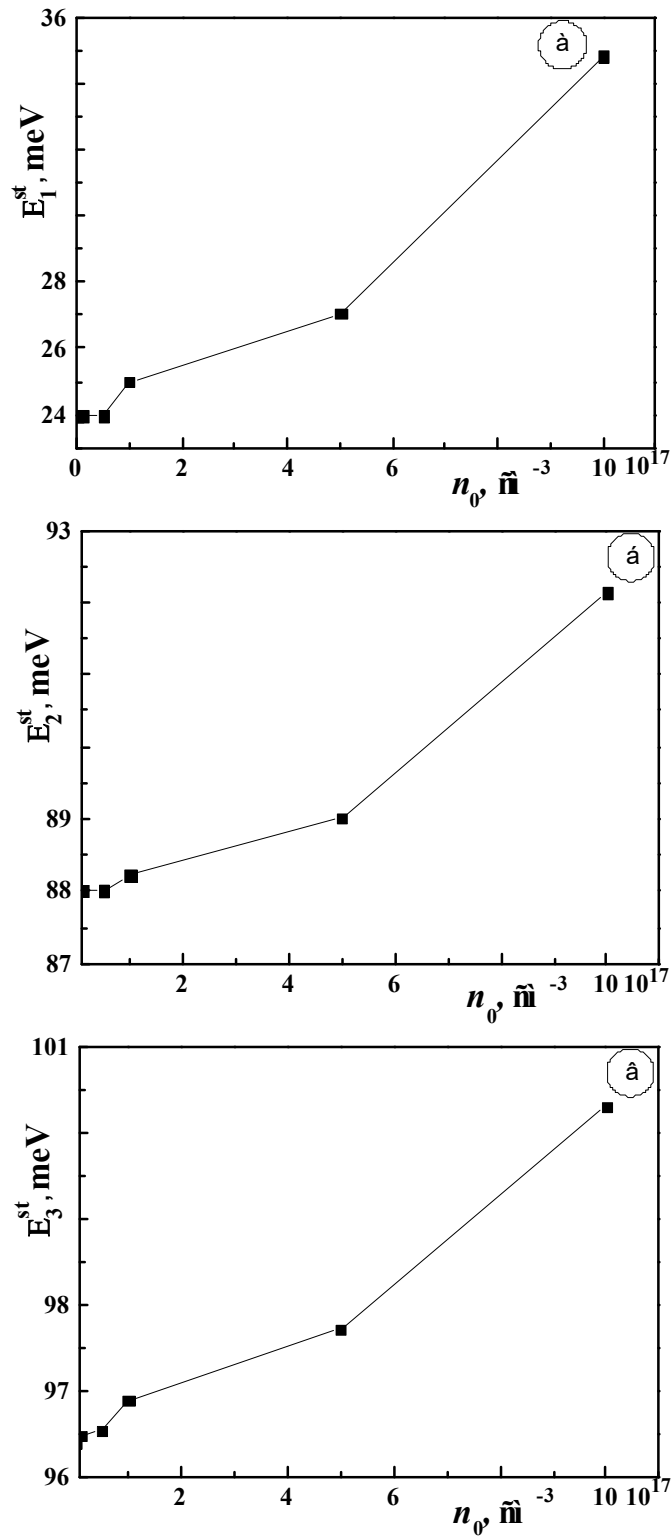


Рис. 2.8. Залежності енергетичного спектру електрона з урахуванням статичного заряду (E_1^{st} , E_2^{st} , E_3^{st}) від концентрації носіїв заряду n .

$$\max_1 E_3^{st}(b) = E_3^{st}((b_1 + b_2)/6) = \max_3 E_2^{st}(b) = E_3^{st}(5(b_1 + b_2)/6);$$

$$\max_2 E_3^{st}(b) = E_3^{st}((b_1 + b_2)/2), \text{ та два рівні мінімуми:}$$

$$\min_1 E_3^{st}(b) = \min E_3^{st}((b_1 + b_2)/3) = \min_2 E_3^{st}(b) = \min E_3^{st}(2(b_1 + b_2)/3).$$

При цьому, з Рис. 2.7. в також видно, що залежність $\Delta_3^{st}(b)$ формує п'ять максимумів, дві пари з яких є рівними:

$$\max_1 \Delta_3^{st}(b) = \Delta_3^{st}((b_1 + b_2)/6) = \max_6 \Delta_3^{st}(b) = \Delta_3^{st}(5(b_1 + b_2)/6);$$

$$\max_2 \Delta_3^{st}(b) = \Delta_3^{st}((b_1 + b_2)/3) = \max_4 \Delta_3^{st}(b) = \Delta_3^{st}(2(b_1 + b_2)/3);$$

$$\max_3 \Delta_3^{st}(b) = \Delta_3^{st}((b_1 + b_2)/2).$$

Також у залежності $\Delta_3^{st}(b)$ формується чотири мінімуми, дві пари з яких є рівними:

$$\min_1 \Delta_3^{st}(b) = \Delta_3^{st}(2(b_1 + b_2)/5) = \min_4 \Delta_3^{st}(b) = \Delta_3^{st}(4(b_1 + b_2)/5);$$

$$\min_2 \Delta_3^{st}(b) = \Delta_3^{st}(3(b_1 + b_2)/8) = \min_3 \Delta_3^{st}(b) = \Delta_3^{st}(5(b_1 + b_2)/8).$$

Отже, при $b = \{(b_1 + b_2)/6; (b_1 + b_2)/3; (b_1 + b_2)/2; 2(b_1 + b_2)/3; 5(b_1 + b_2)/6\}$ для досліджуваної РТС має місце найбільше зміщення енергетичного рівня третього електронного КСС.

Слід зробити висновок, що встановлення максимумів та мінімумів залежностей $E_n^{st}(b)$ і $\Delta_n^{st}(b)$ для довільного номера n електронного КСС дозволяє встановити геометричну конфігурацію сумарної потенціальної ями довільної наноструктури в якій вплив ефектів статичного просторового заряду є найбільшим. Зважаючи на те, що як видно з Рис. 2.7. а, б, в, максимумами функції $\Delta_n^{st}(b)$ локалізуються у вузьких околах встановлених вище точок, можна геометричним дизайном досліджуваної наноструктури мінімізувати вплив дисипативних процесів, пов'язаних із статичним зарядом, встановлених раніше.

Нелінійність зміщень резонансних енергій електронних КСС під впливом потенціалу статичного заряду для різних концентрації n_0 носіїв заряду демонструє Рис. 2.8а, б, в. Як видно з Рисунка, уже встановлений факт зростання зміщень резонансних енергій електронних КСС зі збільшенням n_0 є більше наочним, при цьому при малих значеннях концентрації ($10^{17} \text{ см}^{-3} \leq n_0 \leq 2 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$) це зростання є малим, а в подальшому ($n_0 > 2 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$) воно має степеневий характер.

З використанням співвідношень (2.21) і (2.54) виконувались розрахунки потенціалів динамічного просторового заряду $\varphi_+^{n,n'}(z)$, виникає унаслідок взаємодії електронів із змінним електромагнітним полем, при квантових детектувальних переходах $|n\rangle \rightarrow |n'\rangle$, $n' > n$. На Рис. 2.9 приведено результати розрахунку потенціалів динамічного заряду, виникаючих у квантових переходах $|1\rangle \rightarrow |2\rangle$ і $|1\rangle \rightarrow |3\rangle$.

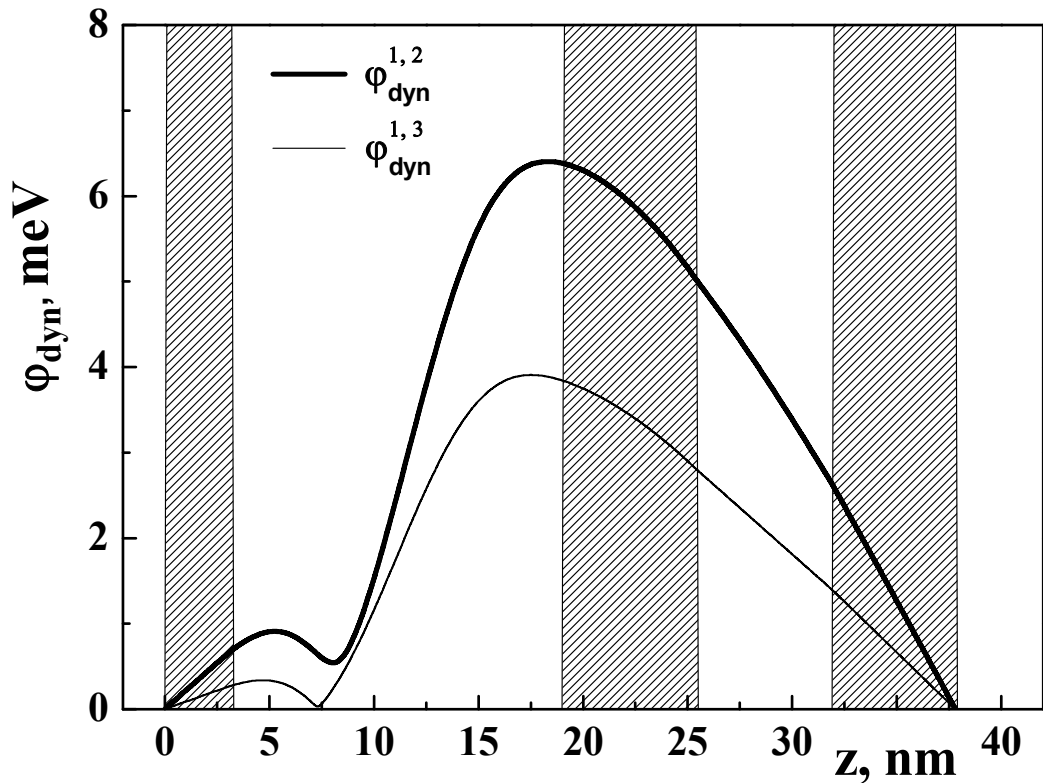


Рис. 2.9. Залежності потенціалів, спричинених динамічним зарядом $\varphi_+^{n,n'}(z)$ від z у детекторних переходах з частотами $\Omega_{\text{stat}}^+ = (E_2^{\text{stst}} - E_1^{\text{stst}}, E_3^{\text{stst}} - E_1^{\text{stst}})$.

Як видно з Рис. 2.9, потенціали динамічного заряду $\varphi_+^{n,n'}(z)$ є на порядок меншими від потенціалів, визначених статичний зарядом $\varphi_{\text{st}}(z)$, тобто завжди виконується умова $\varphi_{\text{st}}(z) \gg \varphi_+^{n,n'}(z)$. Крім того, потенціал, виникаючий при детектувальних переходах між ближніми енергетичними рівнями електрона, є

більшим, ніж потенціал, виникаючий при переходах з нижнього на вищий енергетичний рівень, тобто: $\varphi_+^{1,2}(z) > \varphi_+^{1,3}(z)$.

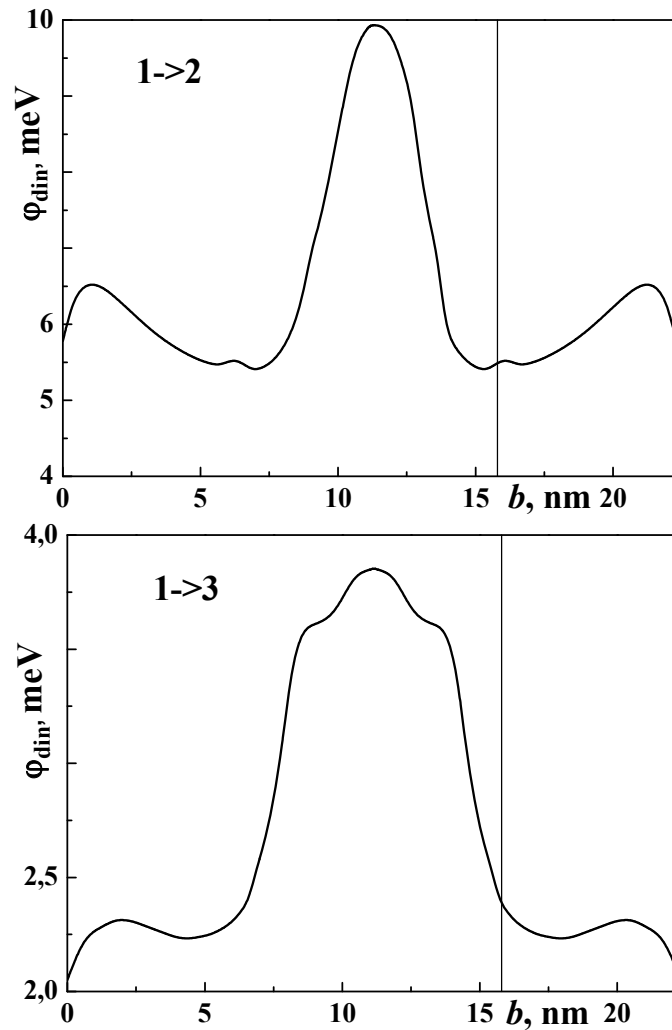


Рис. 2.10. Залежності потенціалів, спричинених динамічним зарядом $\varphi_+^{n,n'}(z)$ від положення внутрішнього потенціального бар'єра (b) у загальній потенціальній ямі у детекторних переходах з частотами $\Omega_{stat}^+ = (E_2^{stst} - E_1^{stst}, E_3^{stst} - E_1^{stst})$.

Враховуючи, що вирази, що описують потенціал динамічного заряду не входять у співвідношення (2.36), (2.40) і (2.43), то динамічний заряд також не має безпосереднього впливу на спектральні характеристики електронних КСС.

Також, з метою з'ясування залежностей потенціалів динамічного заряду $\varphi_+^{n,n'}(z)$ від геометричної конфігурації потенціальної ями РТС, виконувався його

розрахунок у залежності від положення b внутрішнього потенціального бар'єра у сумарній потенціальній ямі.

Результати таких розрахунків для електронних переходів з частотами $\Omega_{12}^+ = E_2^{stst} - E_1^{stst}$ і $\Omega_{13}^+ = E_3^{stst} - E_1^{stst}$, визначеними резонансними енергіями, розрахованими за загальною теорією з урахуванням впливу статичного заряду, приведено на Рис. 2.10 Як видно з Рисунка на усьому діапазоні зміни $0 \leq b \leq b_1 + b_2$ встановлена вище умова $\varphi_+^{1,2}(z) > \varphi_+^{1,3}(z)$ виконується чітко. Максимуми функції $\varphi_+^{n,n'}(z)$ в обох переходах формуються при $b = (b_1 + b_2)/2$, при цьому інтервали, в яких розміщуються ці максимуми рівні: для потенціалу $\varphi_+^{1,2}(z)$ - ($9 \text{ нм} \leq b \leq 13 \text{ нм}$), для потенціалу $\varphi_+^{1,3}(z)$ - ($8 \text{ нм} \leq b \leq 16 \text{ нм}$) відповідно.

Для дослідження впливу статичного та динамічного зарядів на інтенсивність квантових детектувальних переходів у досліджуваній РТС виконувався розрахунок активної динамічної провідності електронів даною наносистемою, а також її парціальних складових, визначених, згідно зі співвідношеннями (2.55), (2.56).

На Рис. 2.11 приведено залежності від концентрації носіїв заряду n_0 сумарної величини динамічної провідності σ_{12} , виникаючої у детекторному переході $|1\rangle \rightarrow |2\rangle$. Розрахунки виконувались з урахуванням ефектів впливу просторового заряду $\sigma_{12}^{st,dyn}$, та для порівняння, без їх урахування σ_{12} . Як видно з Рис. 2.11 врахування ефектів просторового заряду приводить до суттєвих відмінностей у приведених залежностях, що проявляються наступним чином: залежність динамічної провідності без урахування просторового заряду σ_{12} , як і має бути, є пропорційною до величини концентрації n_0 , з іншого ж боку, врахування впливу просторового заряду призводить, до нелінійної залежності провідності $\sigma_{12}^{st,dyn}$ від концентрації.

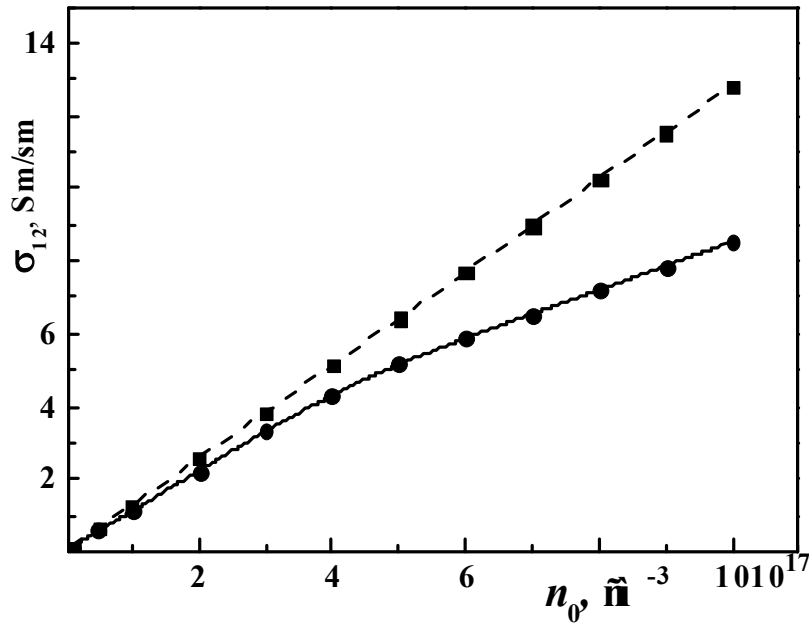


Рис. 2.11. Залежності динамічної провідності, що виникає у детекторному переході $1 \rightarrow 2$ від концентрації носіїв заряду n_0 з урахуванням просторового заряду (суцільна лінія) та без його урахування (штрихова лінія).

Як видно з Рис. 2.11, при малих значеннях концентрації $0 \text{ см}^{-3} \leq n_0 < 3 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ обидві залежності практично не відрізняються одна від одної. З подальшим ростом концентрації $3 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3} \leq n_0 \leq 10^{18} \text{ см}^{-3}$ залежність $\sigma_{12}^{st, dyn}(n_0)$ порівняно із залежністю $\sigma_{12}(n_0)$ дедалі більше відхиляється від неї, причому для кожного значення концентрації завжди виконується умова:

$$\sigma_{12}^{st, dyn}(n_0) < \sigma_{12}(n_0), \quad (2.65)$$

яка з фізичної точки зору означає, що збільшення концентрації носіїв заряду n_0 унаслідок взаємодії електронного потоку з полями статичного та динамічного зарядів приводить до зменшення інтенсивності квантових переходів.

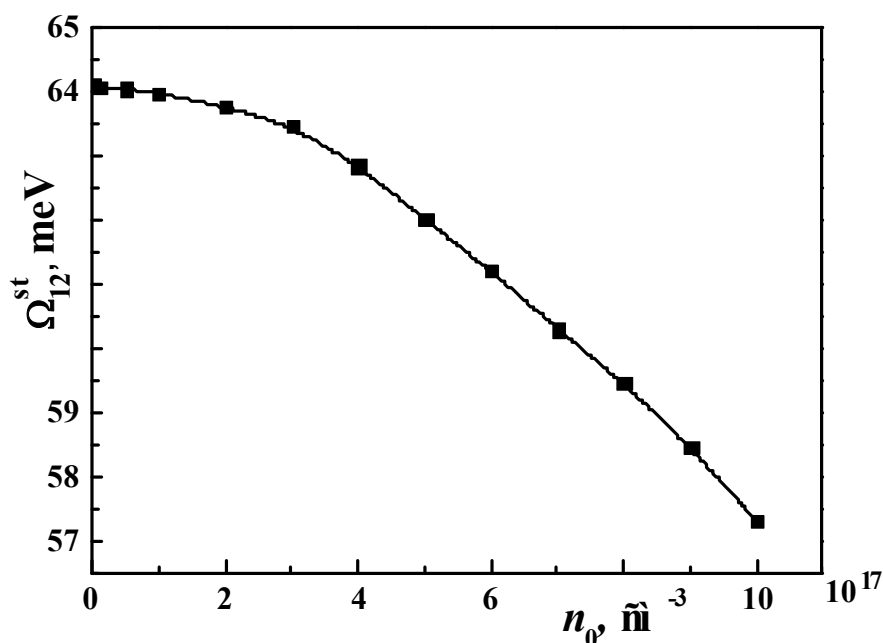


Рис. 2.12. Залежності частоти детектованого електромагнітного випромінювання Ω_{12}^{st} від концентрації носіїв заряду n_0 .

Встановлені вище ефекти впливу просторового заряду на динамічну провідність відкритої наносистеми й, відповідно, інтенсивність квантових переходів визначається такими факторами:

- вплив статичного заряду, який приводить, як було встановлено вище, до різного зміщення енергетичних рівнів електрона, залежно від номера квазістаціонарного стану n , що приводить до залежності детектованої частоти електромагнітного випромінювання від концентрації носіїв заряду n_0 : $\Omega_{12}^{st} = \Omega_{12}^{st}(n_0) = E_2^{st}(n_0) - E_1^{st}(n_0)$, яку приведено на Рис. 2.12. Як видно з Рис. 2.12, зі збільшенням n_0 детектована частота зменшується, тоді як без урахування статичного заряду $\Omega_{12} = E_2 - E_1 = \text{const}$;
- вплив статичного заряду на часи життя електронних КСС τ_n , що приводить зі зростанням n_0 до їх різкого збільшення, що приводить до зменшення сумарної величини динамічної провідності;
- вплив динамічного заряду, який також полягає у зменшенні сумарної динамічної провідності.

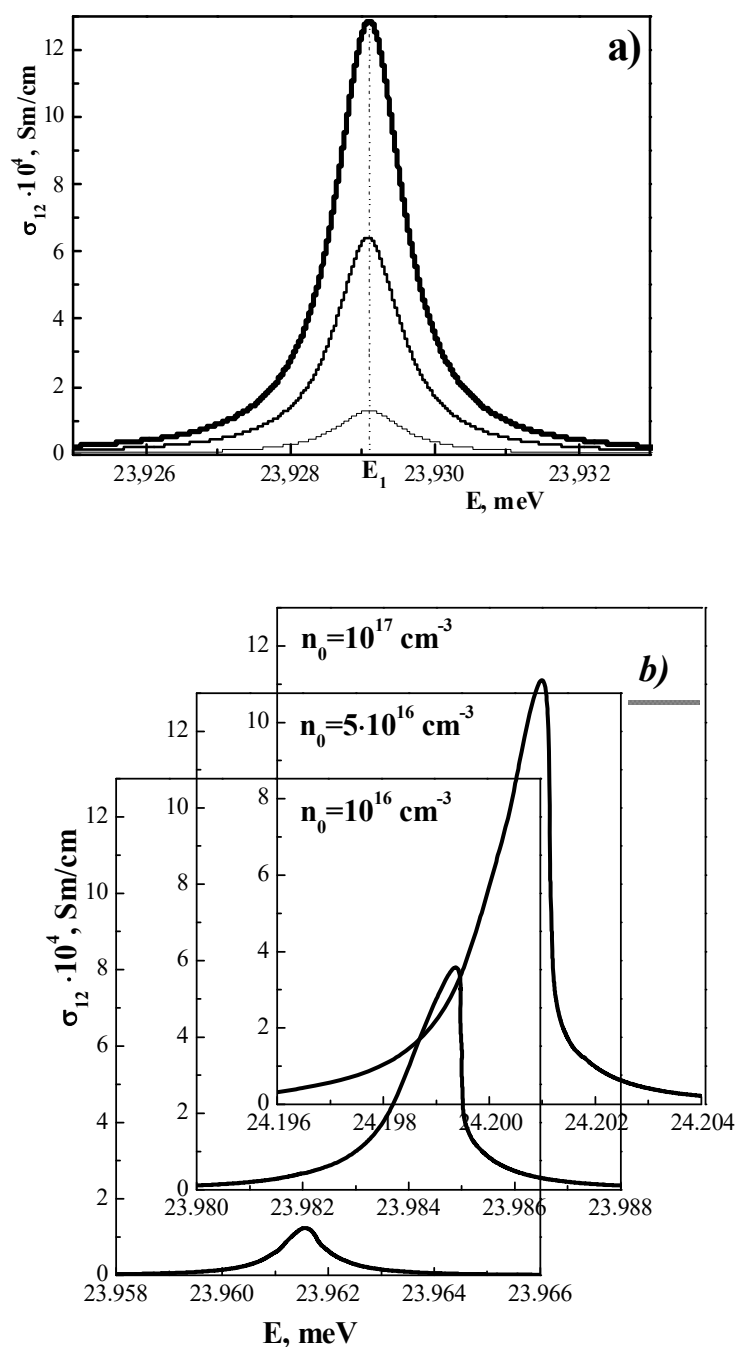


Рис. 2.13. Залежності динамічної провідності, що виникає у детекторному переході $1 \rightarrow 2$ від енергії електронів, при фіксованій частоті випромінювання без урахування змінного просторового заряду (а) та з його урахуванням (б)) при різних значеннях концентрації носіїв заряду $n_0 = (10^{16} \text{ см}^{-3}; 5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}; 10^{17} \text{ см}^{-3})$.

На Рис. 2.13а, б приведено результати розрахунку активної динамічної $(\sigma_{12}(E, \Omega_{12}), \sigma_{12}^{st, dyn}(E, \Omega_{12}^{st}))$ провідності у залежності від електронної енергії для

різних значень концентрації носіїв в заряду n_0 та при фіксованій енергії електромагнітного поля $\Omega_{12} = E_2 - E_1$; $\Omega_{12}^{st} = E_2^{st}(n_0) - E_1^{st}(n_0)$.

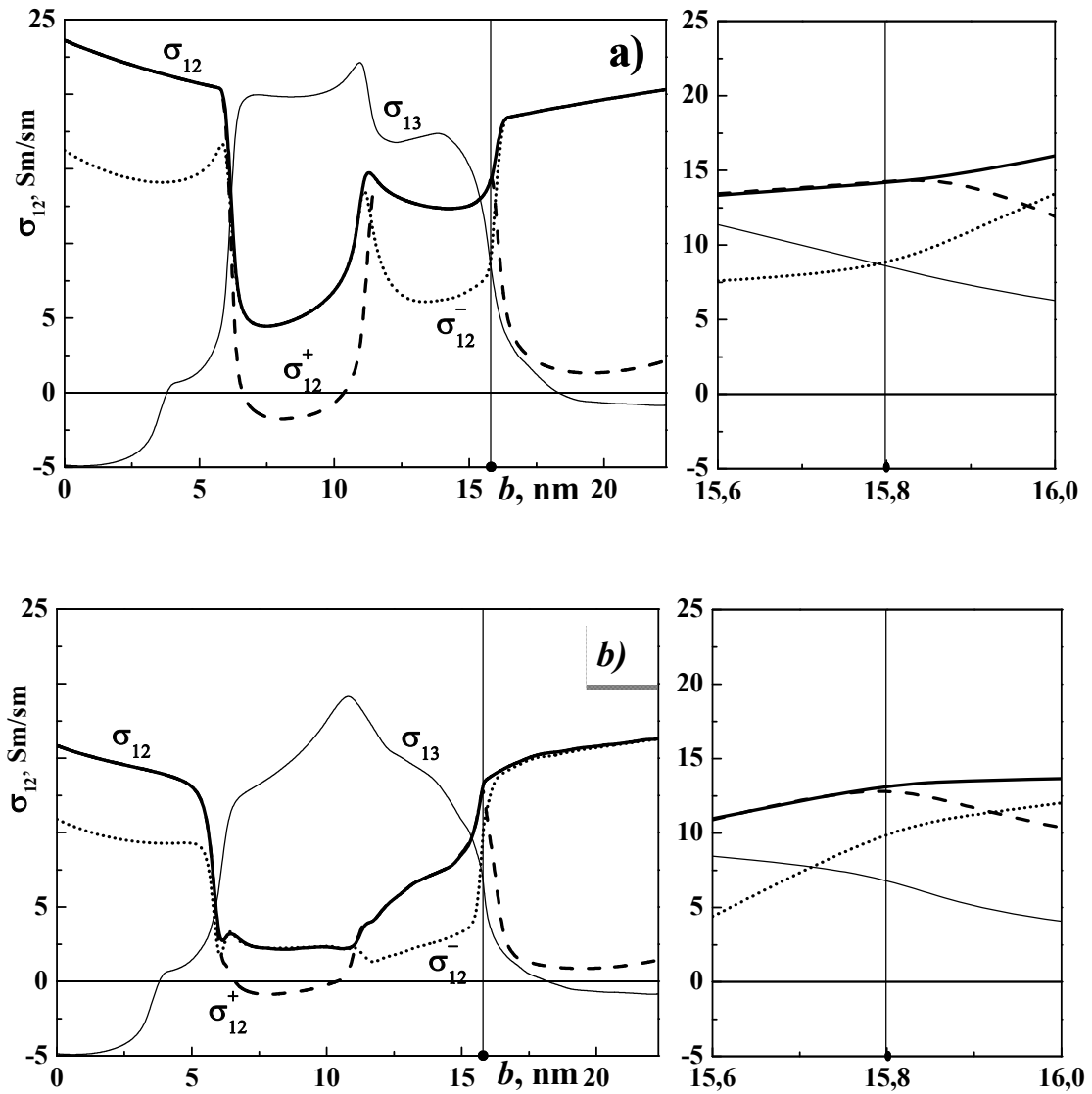


Рис. 2.14. Залежності динамічної провідності, що виникає у переході $1 \rightarrow 2$ і її парціальних складових та сумарної величини динамічної провідності у переході $1 \rightarrow 3$ від положення внутрішнього потенціального бар'єра (b) у загальній потенціальній ямі без урахування змінного просторового заряду (а) та з його урахуванням (б), при концентрації носіїв заряду $n = 10^{18} \text{ см}^{-3}$. Залежності відповідних фізичних величин у інтервалі зміни b 15,6 нм – 16,0 нм показані детальніше на виносках справа.

З Рис. 2.13а видно, що у випадку без урахування змінного просторового заряду збільшення концентрації n_0 не змінює положення максимумів $\sigma_{12} = \max \sigma_{12}(E, \Omega)$, оскільки вони розташовані в околі неперенормованої енергії ($E = E_1$) основного КСС. При цьому збільшення концентрації не змінює лоренцової форми залежності $\sigma_{12}(E, \Omega_{12})$, а лише, як це було уже встановлено, пропорційно збільшує величину її максимуму σ_{12} .

Із Рис. 2.13b видно, що оскільки врахування змінного просторового заряду перенормовує величину енергії основного КСС (E_1^{st}), то збільшення концентрації n_0 , зміщує в область більших енергій максимальне значення $\sigma_{12}^{st,dyn} = \max \sigma_{12}^{st,dyn}(E, \Omega_{12}^{st})$, деформуючи $\sigma_{12}^{st,dyn}$ від лоренцової до клиноподібної форми, та пропорційно, проте уже вже нелінійно збільшуючи величину $\sigma_{12}^{st,dyn}$. Враховуючи уже встановлені (Рис. 2.11, Рис. 2.12) залежності $\sigma_{12}^{st,dyn}$ та енергій квантового переходу $\Omega_{12}^{st}(n_0) = E_2^{st}(n_0) - E_1^{st}(n_0)$ від n_0 видно також, що в інтервалі значень концентрації $10^{16} \text{ см}^{-3} \leq n_0 \leq 10^{18} \text{ см}^{-3}$ максимальна провідність $\sigma_{12}^{st,dyn}$ зростає повільніше ніж σ_{12} (без впливу змінного динамічного заряду), а енергія квантового переходу Ω_{12}^{st} досить суттєво (до 10%) зменшується.

Для виявлення безпосередньої кореляції розвиненої теорії з результатами, отриманими для експериментально реалізованих РТС [72], виконувались розрахунки максимумів динамічної провідності $\sigma_{1n}, \sigma_{1n}^{st,dyn}$ ($n = 2, 3$) без та з урахуванням впливу змінного просторового заряду, залежно від геометричної конфігурації досліджуваної трибар'єрної РТС.

На Рис. 2.14а наведено залежності від положення (b) внутрішнього бар'єра в РТС (при $b_1 + b_2 = 22,3 \text{ нм}$) σ_{12} , її парціальних складових $\sigma_{12}^+, \sigma_{12}^-$ у виникаючому в конкуруючому до переходу $|1\rangle \rightarrow |2\rangle$, переході $|1\rangle \rightarrow |3\rangle$ провідності σ_{13} без урахування просторового заряду (а) та відповідні їм перенормовані впливом цього заряду величини $\sigma_{12}^{st,dyn}, \sigma_{12}^{+st,dyn}, \sigma_{12}^{-st,dyn}, \sigma_{13}^{st,dyn}$ (б). З Рис. 2.14b, видно, що врахування

впливу змінного просторового заряду якісно та кількісно змінює величини максимумів динамічних провідностей та їхніх парціальних складників, що формуються прямими (σ^+) та оберненими (σ^-) електронними потоками. При цьому зміна абсолютної величини максимумів провідності визначається впливом статичного просторового заряду, тоді як зміна парціальних складових провідності у її сумарній величині $\sigma = \sigma^+ + \sigma^-$, що полягає у зменшенні складової σ^+ та збільшенні σ^- при $\sigma = \text{const}$. Найбільше встановлений ефект є вираженим в тій області зміни b , в якій значення потенціалів динамічного заряду $\varphi_+^{1,2}(z)$, $\varphi_+^{1,3}(z)$ набуває максимальних значень, що наочно видно з Рис. 2.10. Таким чином, даний ефект слід віднести до дисипативних чинників.

Також з Рис. 2.14а, b добре видно, що експериментально реалізоване розташування внутрішнього потенціального бар'єра ($b = 15,8$ нм) між зовнішніми бар'єрами у РТС є оптимальним у обох досліджуваних випадках, оскільки тут виконуються умови $\sigma_{12}^{st,dyn} \approx \sigma_{12}^{+st,dyn} \gg \sigma_{12}^{-st,dyn}$, $\sigma_{13}^{st,dyn}$ і $\sigma_{12} \approx \sigma_{12}^+ \gg \sigma_{12}^-, \sigma_{13}$, яка забезпечує при переході $|1\rangle \rightarrow |2\rangle$ значну перевагу електронного потоку вперед по каскаду над потоком у зворотному напрямку, а також перевагу над конкурентними потоками у квантовому переході $|1\rangle \rightarrow |3\rangle$. В інших геометричних конфігураціях РТС (крім області $0 \text{ нм} \leq b \leq 6 \text{ нм}$) умова оптимального функціонуванням ККД не виконується, крім того в цій же області часи життя електронних КСС є надто великими, що переважають тривалість життя за рахунок дисипативних процесів, що руйнують робочі стани.

Крім вище встановленого варто зауважити, що в експериментальних ККД електрони з активної зони попереднього каскаду потрапляють у наступний з використанням ефекту так званої “фононної драбинки”, де при цьому відбувається релаксація їхньої енергії. Це підхід еквівалентно зменшує реальну концентрацію електронів у окремо вибраному каскаді, а отже, і в РТС як моделі активної зони каскаду ККД. Оскільки в експериментальній праці [72] ККД працював на довжині хвилі $\lambda = 18,5 \text{ мкм}$, що відповідає енергії поля 67 меВ, а запропонована теорія при експериментальних параметрах наносистеми визначає енергії квантового переходу

$|1\rangle \rightarrow |2\rangle$ величиною 64 меВ (це видно з Рис. 2.8 при малих концентраціях n_0), то можна уважати, що запропонований теоретичний підхід добре описує експеримент.

2.5. Властивості спектральних параметрів та активної динамічної провідності електронів взаємодіючих з полем просторового заряду у випадку лазерних електронних переходів

Як було встановлено вище, робочі характеристики ККД у значній мірі визначаються властивостями активної зони окремого каскаду як відкритої РТС, зокрема її активної динамічною провідністю σ , що визначає інтенсивність квантових переходів, і яка в свою чергу залежить від спектральних параметрів (резонансних енергій E_n та резонансних ширин Γ_n) електронних КСС, що визначаються геометричними (розмірами потенціальних ям та бар'єрів) і фізичними (ефективні маси, діелектричні проникності, концентрації носіїв заряду) наноструктури [9*, 11*].

Тому подальший розрахунок та аналіз потенціалів $\varphi_{st}^{(p)}(z)$ спричинених статичним просторовим зарядом, а також потенціалів, що визначаються просторовим динамічним зарядом для випромінювальних електронних переходів $\varphi_+^{(p)}(z)$; розрахунок активної динамічної провідності та спектральних параметрів електронних КСС з врахуванням змінного просторового заряду для трибар'єрної РТС, згідно з розвиненою в попередньому розділі теорією виконувався на прикладі активної зони експериментального ККЛ, який досліджено в праці [73] (Рис. 2.2). Усі розрахунки та аналіз отриманих залежностей далі виконуються у тому ж ключі, як це було виконано у пункті 2.4. (див. також праці [2*, 5*, 9*, 11*])

Досліджувана наносистема містить $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ – ями і $\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$ – бар'єри й характеризується наступними геометричними параметрами товщини вхідного, внутрішнього, вихідного потенціальних бар'єрів:

$$\Delta_1 = 4.5 \text{ нм}, \Delta_2 = 1.0 \text{ нм}, \Delta_3 = 2.4 \text{ нм}, b_1 = 8.0 \text{ нм}, b_2 = 5.7 \text{ нм}$$

та фізичними:

$m_w = 0.041m_e, m_b = 0.082m_e, U = 516\text{ meV}, F = 62\text{ кВ/см}$ $\varepsilon_w = 13.899, \varepsilon_b = 12.726$

параметрами.

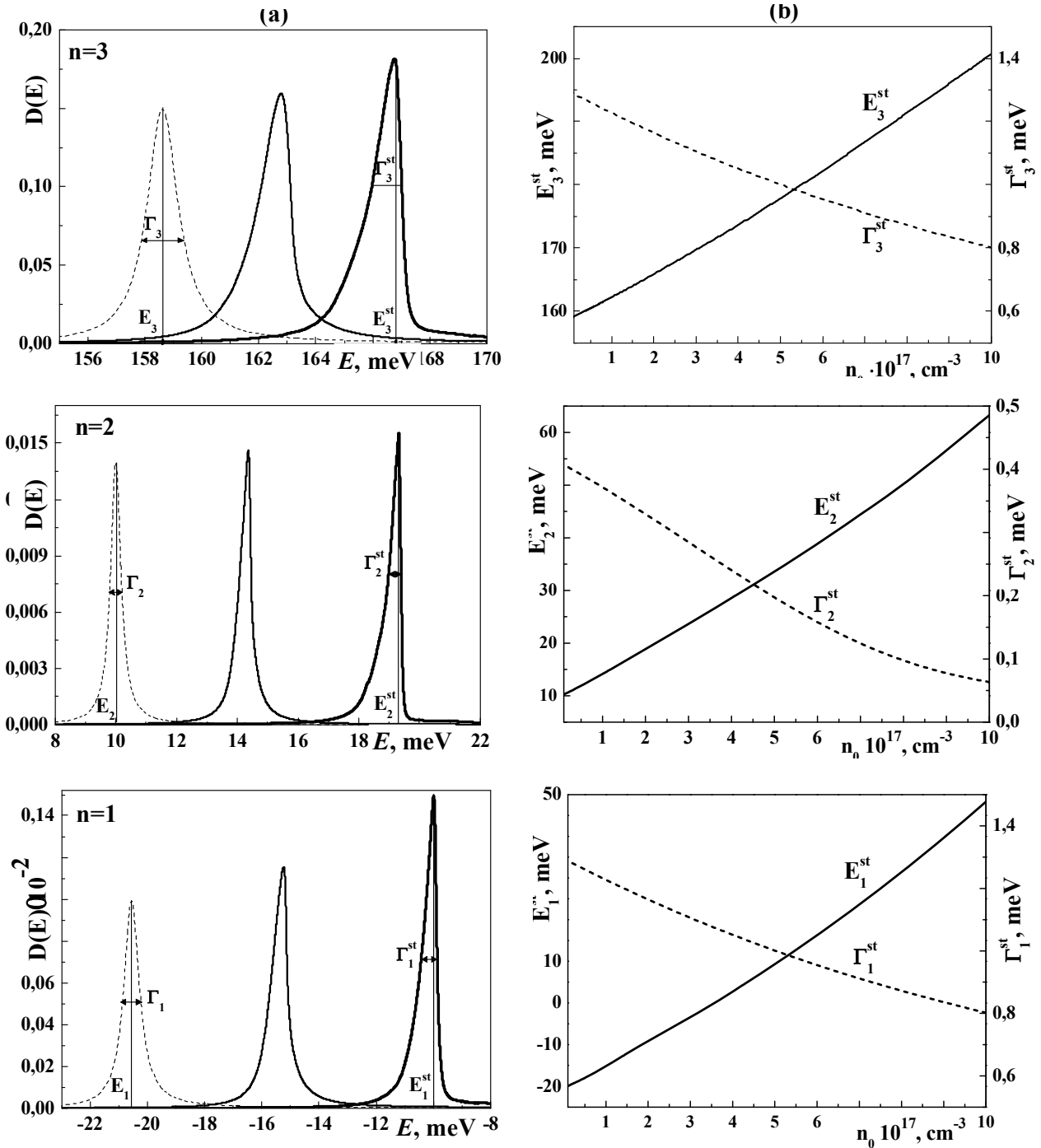


Рис. 2.15. Залежності коефіцієнта прозорості від енергії без (пунктирні лінії) і з урахуванням просторового заряду (суцільні лінії) перших трьох квазістаціонарних станів при концентраціях $n_0 = (10^{17}\text{ cm}^{-3}; 2 \cdot 10^{17}\text{ cm}^{-3})$ (a) та залежності їх резонансних енергій ($E_1^{st}, E_2^{st}, E_3^{st}$) і ширин ($\Gamma_1^{st}, \Gamma_2^{st}, \Gamma_3^{st}$) від концентрації n_0 (b)

Оскільки теорія активної динамічної провідності багатошарових РТС як активних елементів ККЛ і ККД детально досліджувалась у працях [29, 30] без урахування просторового заряду, то тут основну увагу зосередимо на виникаючих у залежностях досліджуваних величин ефектах, що пов'язані з існуванням цього заряду.

На Рис. 2.15 приведено перенормований статичним зарядом ефективний потенціальний профіль ($U_{eff}(z) = U(z) + e\varphi_{st}(z)$) досліджуваної наносистеми перенормований статичним зарядом, розрахований для різних значень концентрації електронів ($n = 2 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$; $5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$; 10^{18} см^{-3}).

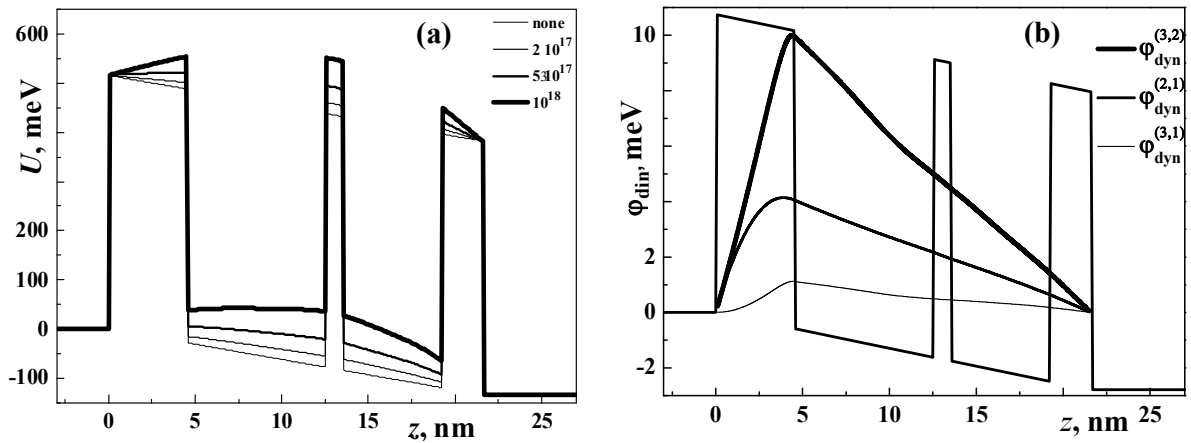


Рис. 2.16. Перенормований статичним зарядом потенціальний профіль РТС (а) та залежності потенціалів $\varphi_{dyn}^{n,n'}$, сформованого динамічним зарядом у лазерних переходах $3 \rightarrow 2$, $2 \rightarrow 1$ і $3 \rightarrow 1$ з енергіями $\Omega_{32}^{st} = E_3^{st} - E_2^{st}$, $\Omega_{31}^{st} = E_3^{st} - E_1^{st}$, $\Omega_{21}^{st} = E_2^{st} - E_1^{st}$ від z

З Рис. 2.15b видно, що зі збільшенням концентрації електронів потенціальний профіль наносистеми дедалі більше деформується, що як буде видно далі відображається на зміні спектральних характеристик електронних КСС. Згадані зміни відображають результати розрахунку коефіцієнта прозорості $D(E)$ (Рис. 2.15a) в околах енергій перших трьох КСС, а також резонансних енергій E_n^{st} та часів життя електрона τ_n^{st} (Рис. 2.15b) у залежності від концентрації заряду n_0 з урахуванням просторового заряду. Із Рис. 2.15a видно, що просторовий заряд зі

збільшення концентрації електронів деформує лоренцеву форму D до клиноподібної, збільшуючи при цьому величини усіх резонансних енергій (E_n^{st}) та ширин (Γ_n^{st}) (Рис. 2.15b). Величини ж максимумів $D(E)$ зі збільшенням концентрації зростають. Оскільки часи життя електрона (τ_n^{st}) у відповідних КСС пов'язані з резонансними ширинами (Γ_n^{st}) як $\tau_n^{\text{st}} = \hbar/\Gamma_n^{\text{st}}$, то зі збільшенням концентрації електронів вони також зростають, що для великих значень n_0 стає суттєвим деструктивним фактором [2*, 5*, 9*, 11*].

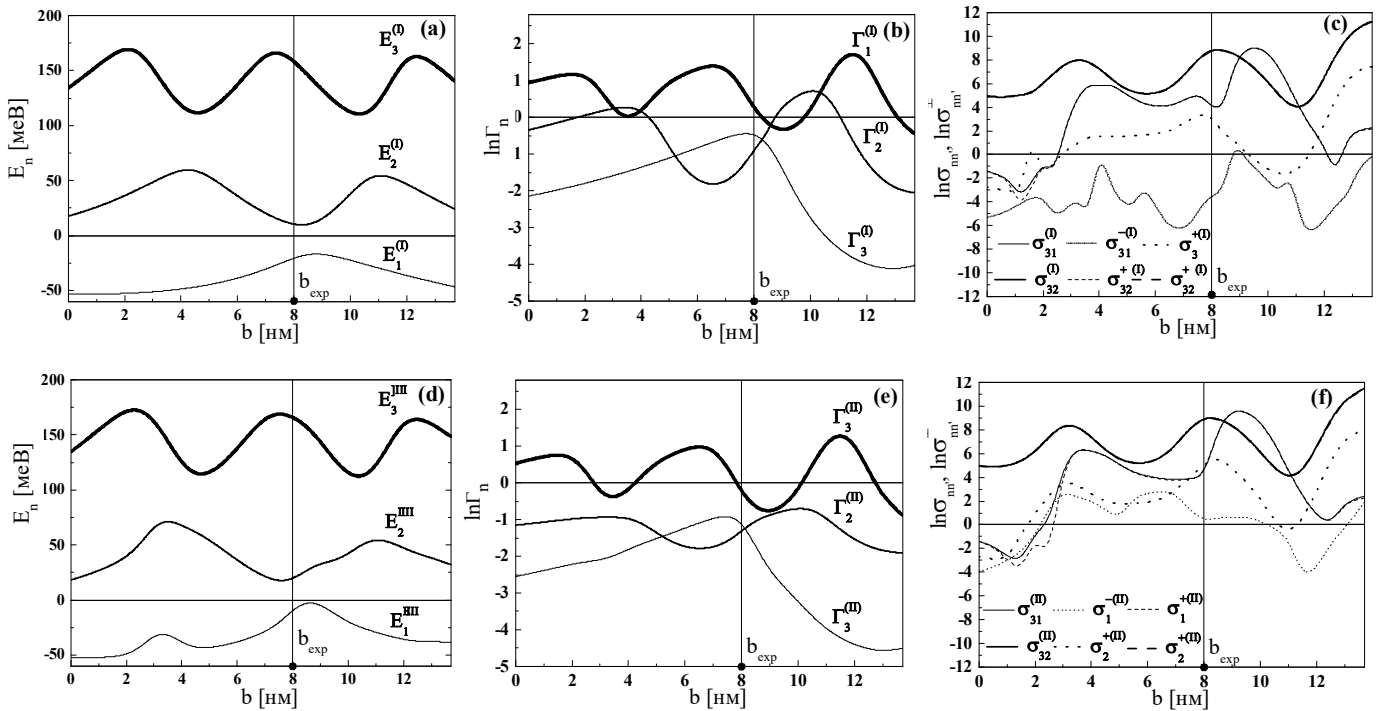


Рис. 2.17 Залежності енергетичного спектру електрона E_n , логарифмів резонансних ширин Γ_n , логарифмів динамічних провідностей та їх парціальних складових, що виникають у лазерних переходах $3 \rightarrow 2$ ($\sigma_{32}^-, \sigma_{32}^+, \sigma_{32}^-$) і $3 \rightarrow 1$ ($\sigma_{31}^-, \sigma_{31}^+, \sigma_{31}^-$) від положення внутрішнього потенціального бар'єра (b) у загальній потенціальній ямі без урахування змінного просторового заряду (a, b, c) та з його урахуванням (d, e, f), при концентрації носіїв заряду $n = 2 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$.

На Рис. 2.16b приведено залежності від геометричних розмірів РТС z величини потенціалу φ_{dyn} , визначеного динамічним просторовим зарядом у лазерних

квантових переходах $3 \rightarrow 2$, $2 \rightarrow 1$, $3 \rightarrow 1$. Як видно з Рисунка для розрахованих потенціалів φ_{dyn} виконується співвідношення:

$$\varphi_{\text{dyn}}^{(3,2)} > \varphi_{\text{dyn}}^{(2,1)} > \varphi_{\text{dyn}}^{(3,1)}. \quad (2.66)$$

При цьому характер залежностей потенціалів $\varphi_{\text{dyn}}^{(3,2)}$, $\varphi_{\text{dyn}}^{(2,1)}$, $\varphi_{\text{dyn}}^{(3,1)}$ від z є якісно однаковим: величини потенціалів зростають у межах лівого потенціального бар'єра, тобто при $0 \leq z \leq \Delta_1$, досягаючи своїх максимальних значень на границі цього бар'єра з вхідною потенціальною ямою. Для $\Delta_1 < z \leq b_1$ залежності потенціалів від z мають спадний характер.

На Рис. 2.17а, б, с, d, е, f приведено залежності від положення внутрішнього потенціального бар'єра b у загальній потенціальній ямі при незмінних інших геометричних параметрах РТС енергетичного спектру електрона E_n , логарифмів резонансних ширин Γ_n , логарифмів динамічних провідностей, виникаючих у квантових електронних переходах з третього на другий і третього на перший енергетичні рівні: σ_{32} , σ_{32}^+ , σ_{32}^- і σ_{31} , σ_{31}^+ , σ_{31}^- . Розрахунки виконувались для концентрації електронів $n = 2 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ у межах двох моделей: у моделі без урахування впливу просторового заряду [14, 15], результати для яких приведено на Рис. 2.17а, б, с (I) у межах моделі, теорія для якої розвинута в попередньому розділі, що приведені на Рис. 2.17d, е, f. (II) Значення $b = b_{\text{exp}}$ відповідає геометричній конфігурації експериментально реалізованої РТС [73].

З Рис. 2.17а і Рис. 2.17d видно, що залежності енергетичного спектру E_n від b , що розраховані у двох моделях є якісно однаковими. Однак в залежностях енергетичного спектру, розрахованих з урахуванням впливу просторового статичного та динамічного заряду виникають ефекти зростання величин резонансних енергій першого квазістаціонарного стану, та в меншій мірі другого й порівняно мало третього квазістаціонарних станів. Як уже згадувалось раніше, дані ефекти пов'язані з перенормуванням потенціального профілю РТС потенціалами статичного та динамічного просторових зарядів. Для експериментально реалізованої геометричної конфігурації b_{exp} у обох моделях маємо:

$E_1^{(I)} = -20,553$ меВ; $E_2^{(I)} = 10,003$ меВ; $E_3^{(I)} = 158,624$ меВ і $E_1^{(II)} = -8,962$ меВ; $E_2^{(II)} = 18,879$ меВ; $E_3^{(II)} = 163,736$ меВ. Таким чином, для обох моделей величина енергії електромагнітного поля, генерованої в квантовому переході $3 \rightarrow 2$: $\Omega_{32}^{(I)} = 148,621$ меВ і $\Omega_{32}^{(II)} = 144,857$ меВ відрізняються від експериментально реалізованої $\Omega_{32}^{\text{exp}} = 146,161$ меВ на 1,7% і 0,9% відповідно.

З Рис. 2.17b і Рис. 2.17f видно, що залежності резонансних ширин квазістаціонарних станів електрона Γ_n від b . Слід зауважити, що не зважаючи на якісну схожість залежностей резонансних ширин, розрахованих у обох моделях, у моделі, що враховує внесок просторового заряду значення резонансних ширин є меншими. По відношенню до моделі, що не враховує внеску просторового заряду значення резонансних ширин Γ_n зменшуються зі зростанням квантового числа n . Зокрема для експериментально реалізованої геометричної конфігурації b_{exp} у обох моделях маємо: $\Gamma_1^{(I)} = 0,638$ меВ; $\Gamma_2^{(I)} = 0,409$ меВ; $\Gamma_3^{(I)} = 1,295$ меВ і $\Gamma_1^{(II)} = 0,352$ меВ; $\Gamma_2^{(II)} = 0,269$ меВ; $\Gamma_3^{(II)} = 0,780$ меВ.

Оскільки час життя електрона у квазістаціонарному статі пов'язаний з резонансною шириною цього стану співвідношенням $\tau_n = \hbar / \Gamma_n$, то просторовий заряд спричиняє збільшення часів життя електрона в перших двох робочих квазістаціонарних станах майже удвічі. Таким чином, можна зробити висновок, що для значних концентрацій електронів n , вплив просторового заряду приймати дисипативний характер, спричиняючи вихід наноприладів з когерентного стану.

На Рис. 2.17c і Рис. 2.17 г приведено залежності від величини b логарифмів динамічних провідностей, виникаючих у лазерних квантових електронних переходах $3 \rightarrow 2$ і $3 \rightarrow 1$, та їх парціальних складових: σ_{32}^+ , σ_{32}^- і σ_{31}^+ , σ_{31}^- . З даних Рисунків видно, що зі зміною b абсолютні величини провідностей в σ_{32} і σ_{31} залишаються майже однаковими для обох моделей, проте у моделі, що враховує вплив просторового заряду парціальні складові провідності σ_{32}^+ , σ_{31}^+ , що визначаються прямим електронним потоком зменшуються, а парціальні складові σ_{32}^- , σ_{31}^- , визначені електронним потоком у протилежному напрямку зростають. Слід

зауважити, що даний ефект більше виражений для квантового переходу $3 \rightarrow 2$, що можна пояснити виконанням співвідношення (2.66). Зокрема, для експериментально реалізованої конфігурації РТС b_{exp} маємо:

$$\sigma_{32}^{(I)} = -7397,14 \text{ См/см}, \sigma_{32}^{+(I)} = -7342,96 \text{ См/см},$$

$$\sigma_{32}^{-(I)} = -54,18 \text{ См/см}, \sigma_{31}^{(I)} = -54,15 \text{ См/см},$$

$$\sigma_{31}^{+(I)} = -54,12 \text{ См/см}, \sigma_{31}^{-(I)} = -0,03 \text{ См/см} \text{ і}$$

$$\sigma_{32}^{(II)} = -7423,21 \text{ См/см}, \sigma_{32}^{+(II)} = -7420 \text{ См/см}, \sigma_{32}^{-(II)} = -34,81 \text{ См/см}, \sigma_{31}^{(II)} = -54,15 \text{ См/см},$$

$$\sigma_{31}^{+(II)} = -53,50 \text{ См/см}, \sigma_{31}^{-(II)} = -0,65 \text{ См/см}.$$

Висновки до розділу 2

1. Побудовано квантову теорію спектральних параметрів електронних квазістаціонарних станів та динамічної провідності відкритої наноструктури як моделі активної зони каскаду квантового каскадного лазера чи детектора з урахуванням змінного просторового заряду, що виникає при транспортуванні електронів крізь наносистему та їх взаємодії з електромагнітним полем.

2. У моделі ефективних мас та прямокутних потенціалів знайдено самоузгоджений розв'язок рівняння Шредінгера та Пуассона за різних концентрацій електронів. Розраховано резонансні енергії, ширини, активну динамічну провідність та її парціальні складники в моделі відкритої резонансно-тунельної структури, яка відповідає активним зонам експериментально реалізованих квантових каскадних лазерів та детекторів.

3. Встановлено, що концентрації електронів менші ніж 10^{16} см^{-3} , майже не змінюють спектральних характеристик і активної провідності за рахунок виникнення змінного просторового заряду. Показано, що значні концентрації носії заряду ($10^{17}-10^{18} \text{ см}^{-3}$), спричиняють появу просторового заряду, потенціал якого деформує форми коефіцієнта прозорості й активної динамічної провідності від лоренцової до клиноподібної, при цьому однак спектральні характеристики й максимальні величини провідностей все одно змінюються слабо. Показано, що максимуми коефіцієнта прозорості зміщуються у високоенергетичну область при цьому збільшуються часи життя електронних квазістаціонарних станів.

4. Встановлено, що розраховані величини поглиненої (випроміненої) електронами активної зони наноприладів енергії електромагнітного поля у квантовому переході $1 \rightarrow 2$ ($2 \rightarrow 1$) з точністю до 4.5-5% збігається з їх експериментальними значеннями. При цьому експериментально реалізовані геометричні конфігурації активної зони виявляються оптимальними, оскільки для них провідність сформована прямим електронним потоком значно переважає провідність у зворотному напрямку та конкурентну провідність у квантовому переході $1 \rightarrow 3$ ($3 \rightarrow 1$).

5. Показано, що зі збільшенням концентрації електронів енергія лазерного випромінювання у квантових переходах $3 \rightarrow 2$ та $3 \rightarrow 1$ зменшується, а сумарна величина активної динамічної провідності збільшується так, що в ній зростає внесок парціальної складової провідності, визначеної потоком, напрямленим протилежно до виходу із наносистеми.

6. Встановлено, що для значних концентрацій електронів n_0 зростає вплив дисипативних процесів, спричинених просторовим динамічним зарядом. Для великих концентрацій ($3 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$) отримується зростання майже на порядок величин часів життя електронних КСС та зростання ролі шкідливих парціальних складових динамічної провідності, визначених електронними потоками, спрямованими протилежно до виходу з активної зони квантового каскадного лазера чи детектора.

РОЗДІЛ 3. ТЕОРІЯ СТАЦІОНАРНИХ ЕЛЕКТРОННИХ СТАНІВ У БАГАТОШАРОВИХ НАНОСТРУКТУРАХ НА ОСНОВІ НІТРИДНИХ НАПІВПРОВІДНИКІВ. ТЕОРЕТИЧНІ ОСНОВИ ТА МЕТОДИ РОЗРАХУНКУ ПОТЕНЦІАЛЬНИХ ПРОФІЛІВ НІТРИДНИХ НАНОСИСТЕМ

3.1. Теорія стаціонарних електронних станів у нітридних наноструктурах. Проблеми розрахунку потенціальних профілів наносистем та електронного спектру

У сучасній фізиці низьковимірних систем з її значним акцентом на застосування наноструктур у приладах різноманітного частотного діапазону значна увага з теоретичного боку приділяється вивченню властивостей низькорозмірних 3D-наносистем – резонансно-тунельних структур (РТС). Як було з'ясовано у першому та другому розділі дисертації застосування напівпровідників на основі арсеніду галію є малоперспективним, оскільки функціональні межі використання наносистем на основі таких сполук є обмеженими. Насамперед це стосується частотних діапазонів в яких можуть працювати наноприлади, а також неможливість варіювати їх робочими характеристиками та режимами. Крім того для ефективної роботи необхідне охолодження рідким азотом. Як наступний етап розвитку в останні роки на основі бінарних та потрійних сполук нітридів InN, GaN, AlN та ін. створені квантові каскадні лазери (ККЛ) та детектори (ККД) [74-84] працюючі в інфрачервоному діапазоні електромагнітних хвиль. У порівнянні з ККЛ та ККД [85-92], створеними на основі бінарних та потрійних арсенідних напівпровідникових сполук GaAs, InAs, AlAs та ін., згадані наноприлади мають ряд функціональних переваг. Зокрема температурна стабільність нітридів дає можливості роботи наноприладів у діапазоні від криогенних до кімнатних температур. При цьому забезпечується їх значна оптична активність.

Проте властивості нітридів зумовлюють цілий ряд проблем, розв'язання яких має велике значення для як для теорії квазічастинок в наносистемах створених на основі цих напівпровідників так і для розвитку нових теоретичних методів у описанні стаціонарних та квазістаціонарних електронних станів, розвитку теорії

електрон- та екситон-фононної взаємодії. Як відомо, нітриди III групи характеризуються сильним міжатомним зв'язком та великою шириною забороненої зони, їх кристалічна ґратка має здебільшого гексагональну структуру вюрциту або цинкової обманки, що визначає анізотропність фізичних властивостей таких матеріалів. Зокрема це приводить до виникнення п'єзоелектричної та спонтанної поляризації, що було передбачено теоретично [93-102] з використанням методу фаз Беррі [103-105] й підтверджено експериментально [106, 107]. Це визначає кардинальні відмінності при розрахунку потенціальних профілів РТС, що потребують врахування впливу внутрішніх полів, розрахунків електронного енергетичного спектру, фононного спектру у порівнянні з ізотропними системами, що мають кубічну структуру кристалічної ґратки.

Саме розрахунок потенціальних профілів анізотропних нано-РТС становить зараз не вирішену до кінця проблему. Теорія внутрішніх полів, виникаючих в наноструктурах з малою кількістю шарів, яка була розвинена в працях [94-97, 100-102], може бути поширена на багат шарові РТС. При цьому на даний момент існує лише два підходи до розрахунку потенціальних профілів РТС, кожен з яких має свої суттєві недоліки. Одним з перших був розвинений метод, запропонований у праці [108] – він є досить грубим, оскільки дозволяє врахувати лише внесок внутрішніх полів у величину ефективного потенціального профілю, то як буде показано нижче, він може бути використаним лише для якісних оцінок. Другий підхід, запропонований у багатьох працях [109-119], базується на чисельному моделюванні розв'язків самоузгодженої системи рівнянь Шредінґера та Пуассона. Недоліком цього підходу є те, що він не є загальним і не може бути застосованим для розрахунків потенціальних профілів різноманітних РТС. Також він може бути реалізованим лише на потужних ЕОМ. Загальним недоліком згаданих методів є те, що вони фактично унеможливають побудову теорії електрон-фононної взаємодії у наноструктурах такого типу в силу своєї не аналітичності та відсутності загальної методології виконання розрахунків.

Тому метою даного розділу є розробка послідовної теорії стаціонарних електронних станів та сил осциляторів квантових переходів у анізотропних

багат шарових наносистемах $\text{AlN}/\text{GaN}/\text{AlN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}$ з кристалічною ґраткою типу вюрциту, що можуть бути реалізовані як каскади чи інші функціональні елементи ККД ближнього інфрачервоного діапазону. Для цього будуть розроблені два методи знаходження розв'язків системи самоузгоджених рівнянь Шредінгера та Пуассона. На основі розв'язків отриманих на основі методів буде побудовано електронну теорію стаціонарних електронних станів, хвильових функцій та сил осциляторів квантових електронних переходів у нітридних РТС. З використанням обох методів буде виконано розрахунок потенціального профілю РТС й порівняння ступеня їх застосовності та загальності. Також буде вперше виконано розрахунок енергетичного спектру електрона та сил осциляторів квантових переходів у залежності від геометричних параметрів досліджуваних нітридних наноструктур.

3.2. Теорія ефективного потенціалу нітридних наноструктур, складові ефективного потенціалу. Постановка проблеми. Метод відшукування розв'язків системи самоузгоджених рівнянь Шредінгера і Пуассон, що заснований на апроксимації складових ефективного потенціалу

У Декартовій системі координат розглядається двоямна РТС, яка розташована таким чином, що вісь OZ є перпендикулярною до гетеромеж наносистеми (рис. 1). При цьому вважається, що середовищам (0), (1), (3), (5), (6) відповідають напівпровідниковому матеріалу AlN, середовищу (2) – GaN, середовищу (4) – $\text{Al}_{0.58}\text{Ga}_{0.42}\text{N}$. Будемо уважати, що досліджувана РТС поміщена у зовнішнє ненапружене середовище $[10^*, 12^*, 13^*]$.

Оскільки кристалічні решітки для напівпровідникових структур $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ мають вигляд решіток типу вюрциту, то механічні напруги та зміщення виникаючі у довільному шарі РТС зв'язані співвідношеннями:

$$\begin{aligned}\sigma_x &= C_{11}\varepsilon_x + C_{12}\varepsilon_y + C_{13}\varepsilon_z, \\ \sigma_y &= C_{12}\varepsilon_x + C_{11}\varepsilon_y + C_{13}\varepsilon_z, \\ \sigma_z &= C_{13}\varepsilon_x + C_{13}\varepsilon_y + C_{33}\varepsilon_z, \\ C_{11} &= C_{22}; C_{12} = C_{21}; C_{13} = C_{31},\end{aligned}\tag{3.1}$$

де C_{jl} - тензор пружних констант матеріалу шару РТС.

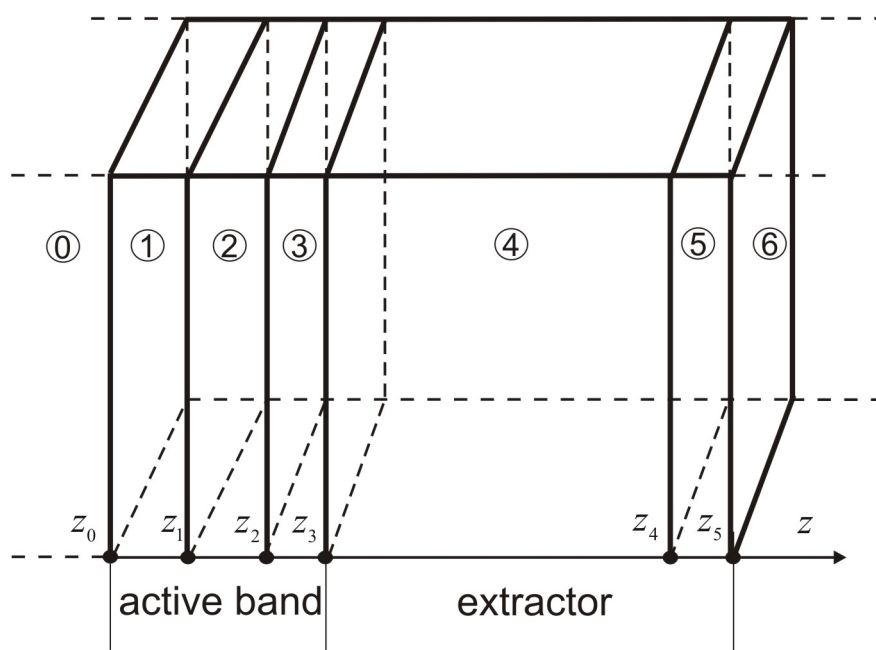


Рис. 3.1. Геометрична схема досліджуваної наносистеми.

У плоских РТС для зміщень маємо: $\varepsilon_x = \varepsilon_y = \varepsilon$, а при цьому $\sigma_z = 0$. Тоді:

$C_{13}\varepsilon_x + C_{13}\varepsilon_y + C_{33}\varepsilon_z = 0$ і звідси випливає:

$$\varepsilon_z = -\frac{C_{13}\varepsilon_x + C_{13}\varepsilon_y}{C_{33}} = -\frac{2C_{13}}{C_{33}}\varepsilon. \quad (3.2)$$

Таким чином, тензор зміщень виникаючих у шарі РТС містить тільки діагональні елементи і має вигляд:

$$[\varepsilon] = \begin{bmatrix} \varepsilon & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{2C_{13}}{C_{33}}\varepsilon \end{bmatrix}, \quad (3.3)$$

де величина відносного зміщення є такою:

$$\varepsilon = \frac{a - a_0}{a_0}, \quad (3.4)$$

тут a_0, a - величини постійних ґраток зовнішнього середовища та шару РТС відповідно.

Підставляючи співвідношення (3.3) в (3.1), з урахуванням (3.2) ми знаходимо компоненти тензора механічних напруг:

$$\begin{aligned}\sigma_x &= C_{11}\varepsilon + C_{12}\varepsilon + C_{13} \cdot \left(-\frac{2C_{13}}{C_{33}}\varepsilon\right) = \varepsilon \left(C_{11} + C_{12} - \frac{2C_{13}^2}{C_{33}}\right); \\ \sigma_y &= C_{12}\varepsilon + C_{11}\varepsilon + C_{13} \cdot \left(-\frac{2C_{13}}{C_{33}}\varepsilon\right) = \varepsilon \left(C_{11} + C_{12} - \frac{2C_{13}^2}{C_{33}}\right) = \sigma_x; \\ \sigma_z &= C_{13}\varepsilon + C_{13}\varepsilon + C_{33} \cdot \left(-\frac{2C_{13}}{C_{33}}\varepsilon\right) = 0.\end{aligned}\quad (3.5)$$

П'єзоелектрична поляризація, виникаюча у анізотропних напівпровідниках з решіткою типу вюрциту:

$$P_{PZ}^{(i)} = \sum_l d_{il}\sigma_l, \quad i = 1, 2, 3; \quad l = 1, \dots, 6 \quad (3.6)$$

де d_{il} - п'єзоелектричні модулі.

П'єзоелектричні модулі у (3.6) зв'язані між собою співвідношеннями:

$$d_{31} = d_{13}, \quad d_{15} = d_{24} \quad (3.7),$$

причому $d_{33} \neq 0$ і решта d_{il} рівні нулю. Тоді з (3.6) з урахуванням (3.7) маємо для компонент поляризації по відношенню до координатних осей:

$$\begin{aligned}P_x^{PZ} &= P_{PZ}^{(1)} = \frac{1}{2}d_{15}\sigma_5 = \frac{1}{2}d_{15}\sigma_x; \\ P_y^{PZ} &= P_{PZ}^{(2)} = \frac{1}{2}d_{24}\sigma_4 = \frac{1}{2}d_{15}\sigma_4 = \frac{1}{2}d_{15}\sigma_y; \\ P_z^{PZ} &= P_{PZ}^{(3)} = d_{31}\sigma_1 + d_{32}\sigma_2 + d_{33}\sigma_3 = d_{31}\sigma_x + d_{31}\sigma_y + d_{33}\sigma_z = d_{31}(\sigma_x + \sigma_y) + d_{33}\sigma_z.\end{aligned}\quad (3.8)$$

Оскільки поперечні напруги є рівними нулю, тобто $\sigma_4 = \sigma_5 = 0$, то з урахуванням виразів (3.5) із (3.8) остаточно маємо:

$$P_z^{PZ} = 2d_{31}\sigma_x = 2d_{31}\varepsilon \left(C_{11} + C_{12} - \frac{2C_{13}^2}{C_{33}}\right). \quad (3.9)$$

П'єзоелектричні константи e_{kj} зв'язані з п'єзоелектричними модулями d_{ij} наступним чином, то:

$$e_{kj} = \sum_l d_{kj}C_{jl}, \quad k = 1, 2, 3; \quad i = 1, \dots, 6, \quad j = 1, \dots, 6. \quad (3.10)$$

Для гексагональних кристалів з решіткою типу вюрциту співвідношення (3.10) для ненульових п'єзоелектричних констант e_{kj} має вигляд:

$$\begin{aligned}
 e_{31} &= C_{11}d_{31} + C_{12}d_{32} + C_{13}d_{33} = (C_{11} + C_{12})d_{31} + C_{13}d_{33}; \\
 e_{32} &= C_{21}d_{31} + C_{22}d_{32} + C_{23}d_{33} = C_{11}d_{31} + C_{12}d_{32} + C_{13}d_{33} = (C_{11} + C_{12})d_{31} + C_{13}d_{33}; \\
 e_{33} &= C_{31}d_{31} + C_{32}d_{32} + C_{33}d_{33} = C_{31}d_{31} + C_{31}d_{31} + C_{33}d_{33} = 2C_{31}d_{31} + C_{33}d_{33}; \\
 e_{15} &= C_{15}d_{15} = C_{44}d_{15}; \\
 e_{24} &= C_{24}d_{24} = C_{44}d_{15} = e_{15}.
 \end{aligned} \tag{3.11}$$

Тепер величина п'єзоелектричної поляризації $P_{PZ}^{(i)}$ як функція від зміщення ε_l отримується у вигляді:

$$P_{PZ}^{(i)} = \sum_l e_{kl} \varepsilon_l, \quad k = 1, 2, 3; \quad l = 1, \dots, 6. \tag{3.12}$$

Тоді із виразів (3.12) і (3.2) для актуальної в подальшому компоненти п'єзоелектричної поляризації P_z^{PZ} маємо:

$$\begin{aligned}
 P_{PZ}^{(i)} &= P_{PZ}^{(3)} = \varepsilon_1 e_{31} + \varepsilon_2 e_{32} + \varepsilon_3 e_{33} = \varepsilon_x e_{31} + \varepsilon_y e_{32} + \varepsilon_z e_{33} = 2\varepsilon e_{31} + \varepsilon_z e_{33} = \\
 &= 2\varepsilon e_{31} + \left(-\frac{2C_{13}}{C_{33}} \varepsilon \right) e_{33} = 2\varepsilon \left(e_{31} - e_{33} \frac{C_{13}}{C_{33}} \right).
 \end{aligned} \tag{3.13}$$

П'єзоелектричну поляризацію для трикомпонентного напівпровідникового шару типу $A_x B_{1-x} N$ у залежності від концентрації x компоненти A будемо визначати у лінійній апроксимації за правилом Вегарда:

$$P_{ABN}^{PZ}(x) = xP_{AN}^{PZ}[\varepsilon(x)] + (1-x)P_{BN}^{PZ}[\varepsilon(x)], \tag{3.14}$$

де $P_{AN}^{PZ}[\varepsilon(x)]$ і $P_{BN}^{PZ}[\varepsilon(x)]$ - залежні від відносного зміщення $\varepsilon(x)$ згідно (3.4) п'єзоелектричні поляризації для відповідних бінарних компонент.

Спонтанна поляризація в гексагональних кристалах з решіткою типу вюрциту задається як:

$$\bar{P}_{SP} = P_{SP} \bar{k}, \tag{3.15}$$

де \bar{k} - одиничний вектор вздовж осі z .

Аналогічно як і в співвідношенні (3.14) для спонтанної поляризації можна записати:

$$P_{ABN}^{SP}(x) = xP_{AN}^{SP}[\varepsilon(x)] + (1-x)P_{BN}^{SP}[\varepsilon(x)], \tag{3.16}$$

В такому разі величина сумарної макроскопічної поляризації P , яка виникає у довільному p -му шарі РТС, виражається сумою спонтанної $P_{SP}^{(p)}$ та п'єзоелектричної $P_{PZ}^{(p)}$ поляризацій:

$$P = P(x) = P_{ABN} = P_{ABN}^{PZ}(x) + P_{ABN}^{SP}(x) = P_{SP}^{(p)}(x) + P_{PZ}^{(p)}(x). \quad (3.17)$$

П'єзоелектрична поляризація для трикомпонентного напівпровідникового шару типу $A_x B_{1-x} N$ у залежності від концентрації x компоненти A визначається у лінійній апроксимації:

$$P_{PZ(SP)}^{(p)}(x) = P_{PZ(SP)}^{AN(p)}[\eta^{(p)}(x)] + (1-x)P_{PZ(SP)}^{BN(p)}[\eta^{(p)}(x)], \quad (3.18)$$

У виразі (3.18) величини $P_{PZ(SP)}^{AN(p)}[\eta^{(p)}(x)]$ і $P_{PZ(SP)}^{BN(p)}[\eta^{(p)}(x)]$ - унаслідок неузгодженості сталих ґраток шарів РТС залежні від величини базальної деформації $\eta^{(p)} = \eta^{(p)}(x) = \frac{a_{\text{subs}} - a(x)}{a(x)}$, де $a(x)$ і a_{subs} - сталі ґраток матеріалу шарів

наноструктури та субстрату відповідно, причому:

$$a(x) = 0.31986 - 0.00891x, \quad a_{\text{buf}} = \frac{\sum_{p=1}^5 A^{(p)} \frac{d_p}{a^{(p)}}}{\sum_{k=1}^5 \frac{d_p}{(a^{(p)})^2}}; \quad A^{(p)} = C_{11}^{(p)} + C_{12}^{(p)} - 2 \frac{(C_{13}^{(p)})^2}{C_{33}^{(p)}}, \quad [13]. \quad (3.19)$$

де $a^{(p)}$ стала ґратки матеріалу, d_p - товщина, $C_{11}^{(p)}, C_{12}^{(p)}, C_{13}^{(p)}, C_{33}^{(p)}$ пружні константи p -го шару РТС.

Величина п'єзоелектричної поляризації для довільного шару РТС визначається як:

$$P_{PZ}^{(p)} = 2\eta^{(p)} e_{31}^{(p)} + \eta_z^{(p)} e_{33}^{(p)} = 2\eta^{(p)} e_{31}^{(p)} + \left(-\frac{2C_{13}^{(p)}}{C_{33}^{(p)}} \eta^{(p)} \right) e_{33}^{(p)} = 2\eta^{(p)} \left(e_{31}^{(p)} - e_{33}^{(p)} \frac{C_{13}^{(p)}}{C_{33}^{(p)}} \right),$$

$$\eta_z^{(p)} = -\frac{2C_{13}^{(p)}}{C_{33}^{(p)}} \eta^{(p)} \quad (3.20)$$

де $e_{31}^{(p)}, e_{33}^{(p)}$ - п'єзоелектричні константи.

Тепер нам необхідно розвинути метод розрахунку напруженостей внутрішнього електричного поля, що зумовлена сумарною величиною поляризації для випадку наносистеми, яка містить N напівпровідникових шарів. Нехай $d_p, p = 1..N$ - товщини шарів РТС, яким відповідають потенціальні ями чи бар'єри.

Для вектора електричного зміщення для p -го шару РТС можна записати:

$$D = \varepsilon_p F_p + P_p \quad (3.21)$$

де величина поляризації визначається згідно (3.17), а ε_p - діелектрична проникність розглядуваного шару наноструктури.

Тоді:

$$F_p = \frac{D - P_p}{\varepsilon_p}. \quad (3.22)$$

При цьому вважається, що сумарна величина спаду потенціальної енергії ΔW , що пов'язана із спадом напруги на усій РТС є набагато меншою від ширини забороненої зони E_g напівпровідникового матеріалу потенціальних ям чи бар'єрів, тобто:

$$\Delta W = \sum_{p=1}^N \Delta E_p = \sum_{p=1}^N e \Delta U_p = e \sum_{p=1}^N F_p d_p \ll E_g. \quad (3.23)$$

Умова (3.23) з урахуванням, що у межах РТС немає вільних зарядів, набуває вигляду: $\Delta W = e \sum_{p=1}^N F_p d_p = 0$, звідки:

$$\sum_{p=1}^N F_p d_p = 0. \quad (3.24)$$

Знайдемо, напруженість електричного поля F_p в довільному p - ому шарі РТС.

Підставляючи (3.22) у (3.24), отримуємо:

$$\sum_{p=1}^N \frac{D - P_p}{\varepsilon_p} d_p = 0, \text{ звідки:} \quad (3.25)$$

$$D \sum_{p=1}^N \frac{d_p}{\varepsilon_p} - \sum_{p=1}^N \frac{P_p}{\varepsilon_p} d_p = 0; \quad D = \frac{\sum_{p=1}^N \frac{P_p}{\varepsilon_p} d_p}{\sum_{p=1}^N \frac{d_p}{\varepsilon_p}}.$$

Тепер з (3.22) і (3.25) отримуємо для напруженості електричного поля в довільному k -ому шарі РТС:

$$F_k = \frac{\frac{\sum_{p=1}^N \frac{P_p}{\varepsilon_p} d_p}{\sum_{p=1}^N \frac{d_p}{\varepsilon_p}} - P_k}{\varepsilon_p} = \frac{\sum_{p=1}^N \frac{P_p}{\varepsilon_p} d_p - P_k \sum_{p=1}^N \frac{d_p}{\varepsilon_p}}{\varepsilon_p \sum_{p=1}^N \frac{d_p}{\varepsilon_p}} = \frac{\sum_{\substack{p=1 \\ p \neq k}}^N (P_p - P_k) \frac{d_p}{\varepsilon_p}}{\varepsilon_p \sum_{p=1}^N \frac{d_p}{\varepsilon_p}}. \quad (3.26)$$

Співвідношення (3.23) можна також отримати з умови неперервності вектора електричного зміщення \bar{D} на всіх гетеромежах РТС, тобто:

$$\bar{D}_p = \bar{D}_{p+1}, \quad (3.27)$$

де $\bar{D}_p = \varepsilon_p \bar{F}_p + \bar{P}_p$ та умови (3.24).

Із співвідношень (3.22) і (3.27) отримаємо систему, що складається із $p+1$ рівнянь:

$$\begin{cases} \varepsilon_1 F_1 + P_1 = \varepsilon_2 F_2 + P_2, \\ \varepsilon_2 F_2 + P_2 = \varepsilon_3 F_3 + P_3, \\ \dots \\ \varepsilon_{i-1} F_{i-1} + P_{i-1} = \varepsilon_i F_i + P_i, \\ \varepsilon_{p-1} F_{p-1} + P_{p-1} = \varepsilon_p F_p + P_p, \\ \sum_{p=1}^N F_p d_p = 0. \end{cases} \quad (3.28)$$

розв'язком якої знову є вираз (3.26).

Застосовуючи для електрона у досліджуваній наносистемі модель ефективних мас маємо:

$$m(z) = m_0 \left\{ \theta(-z) + \theta(z - z_5) + \sum_{p=0}^2 [\theta(z - z_{2p}) - \theta(z - z_{2p+1})] \right\} + m_1 [\theta(z - z_1) + \theta(z - z_2)] + m_2 [\theta(z - z_3) + \theta(z - z_4)], \quad (3.29)$$

де $\theta(z)$ - одинична функція Хевісайда, $z_{-1} \rightarrow -\infty$, $z_6 \rightarrow \infty$, а $m_0 = m^{(0)} = m^{(1)} = m^{(3)} = m^{(5)} = m^{(6)}$, $m_1 = m^{(2)}$ і $m_2 = m^{(4)}$ - ефективні маси електрона в потенціальних бар'єрах та ямах РТС відповідно.

Аналогічно для діелектричної проникності РТС маємо:

$$\begin{aligned} \varepsilon(z) = \varepsilon^{(0)} \left\{ \theta(-z) + \theta(z - z_5) + \sum_{p=0}^2 [\theta(z - z_{2p}) - \theta(z - z_{2p+1})] \right\} + \\ + \varepsilon^{(1)} [\theta(z - z_1) + \theta(z - z_2)] + \varepsilon^{(2)} [\theta(z - z_3) + \theta(z - z_4)], \end{aligned} \quad (3.30)$$

$\varepsilon^{(0)} = \varepsilon^{(1)} = \varepsilon^{(3)} = \varepsilon^{(5)} = \varepsilon^{(6)}$, $\varepsilon_1 = \varepsilon^{(2)}$ і $\varepsilon_2 = \varepsilon^{(4)}$ - діелектричні проникності матеріалу шарів РТС відповідно.

Далі, з урахуванням (3.30) і (3.26) знаходимо напруженості електричних полів, зумовлених п'єзоелектричним ефектом, для кожного із шарів РТС:

$$\begin{aligned} F_1 &= \frac{(P_4 - P_1)d_4\varepsilon_1\varepsilon_2 + (d_2(P_2 - P_1)\varepsilon_1 + (d_3(P_3 - P_1) + d_5(P_5 - P_1))\varepsilon_2)\varepsilon_3}{\varepsilon_1(d_4\varepsilon_1\varepsilon_2 + (d_2\varepsilon_1 + (d_1 + d_3 + d_5)\varepsilon_2)\varepsilon_3)}; \\ F_2 &= \frac{(P_4 - P_2)d_4\varepsilon_1 + (d_1(P_1 - P_2) + (d_3(P_3 - P_2) + d_5(P_5 - P_2))\varepsilon_3)}{d_4\varepsilon_1\varepsilon_2 + (d_2\varepsilon_1 + (d_1 + d_3 + d_5)\varepsilon_2)\varepsilon_3}; \\ F_3 &= \frac{(P_4 - P_3)d_4\varepsilon_1\varepsilon_2 + (d_2(P_2 - P_3)\varepsilon_1 + (d_1(P_1 - P_3) + d_5(P_5 - P_3))\varepsilon_2)\varepsilon_3}{\varepsilon_1(d_4\varepsilon_1\varepsilon_2 + (d_2\varepsilon_1 + (d_1 + d_3 + d_5)\varepsilon_2)\varepsilon_3)}; \\ F_4 &= \frac{(P_2 - P_4)d_2\varepsilon_1 + (d_3P_3 + d_1(P_1 - P_4) - (d_3 + d_5)P_4 + d_5P_5)\varepsilon_2}{d_4\varepsilon_1\varepsilon_2 + (d_2\varepsilon_1 + (d_1 + d_3 + d_5)\varepsilon_2)\varepsilon_3}; \\ F_5 &= \frac{(P_4 - P_5)d_4\varepsilon_1\varepsilon_2 + (d_2(P_2 - P_5)\varepsilon_1 + (d_1P_1 + d_3P_3 - (d_1 + d_3)P_5)\varepsilon_2)\varepsilon_3}{\varepsilon_1(d_4\varepsilon_1\varepsilon_2 + (d_2\varepsilon_1 + (d_1 + d_3 + d_5)\varepsilon_2)\varepsilon_3)}. \end{aligned} \quad (3.31)$$

Ефективний потенціал наносистеми для електрона у загальному вигляді ми будемо визначати як:

$$V(z) = \Delta E_C(z) + V_H(z) + V_{ex}(z) + V_E(z), \quad (3.32)$$

де зміст його складових $\Delta E_C(z)$, $V_H(z)$, $V_{ex}(z)$, $V_E(z)$ буде детально встановлено далі.

Енергетичний спектр електрона E_n та його хвильові функції $\Psi(z)$ визначаються шляхом розв'язування самоузгодженої системи рівнянь Шредінгера та Пуассона:

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left(\frac{1}{m(z)} \frac{d\Psi(z)}{dz} \right) + V(z)\Psi(z) = E\Psi(z), \\ \frac{d}{dz} \left(\varepsilon(z) \frac{dV_H(z)}{dz} \right) = -e\rho(z) \end{cases}, \quad (3.33)$$

де $\rho(z)$ - густина зарядів у межах РТС, а $V_H(z)$ - потенціал, що визначається внеском цих зарядів.

На гетеромежах РТС виконуються умови неперервності хвильової функції $\Psi(z)$ та потоків її ймовірностей

$$\Psi^{(p)}(z_p) = \Psi^{(p+1)}(z_p); \left. \frac{d\Psi_n^{(p)}(z)}{m(z)dz} \right|_{z=z_p-\varepsilon} = \left. \frac{d\Psi_n^{(p+1)}(z)}{m(z)dz} \right|_{z=z_p+\varepsilon}, \quad \varepsilon \rightarrow 0.. \quad (3.34)$$

Аналогічно маємо на гетеромежах РТС маємо умови неперервності потенціалу $V_H(z)$ та вектора електричної індукції:

$$V_H^{(p)}(z_p) = V_H^{(p+1)}(z_p); \left. \frac{\varepsilon^{(p)} d\varphi_H^{(p)}(z)}{dz} \right|_{z=z_p-\varepsilon} - \left. \frac{\varepsilon^{(p+1)} d\varphi_H^{(p+1)}(z)}{dz} \right|_{z=z_p+\varepsilon} = -\sigma(z_p), \quad (3.35)$$

$$\varepsilon \rightarrow +0; \quad p = 0 \div 5,$$

де друга умова у виразі (3.35) враховує наявність вільних зарядів на межах наносистеми з поверхневою густиною $\sigma(z_p)$, які є наслідком різної величини сумарної поляризації у суміжних шарах РТС.

При цьому вважається, що для потенціалу $V_H(z)$ за межами РТС виконуються умови його зникнення:

$$V_H(z)|_{z \rightarrow 0} \rightarrow 0; \quad V_H(z)|_{z \rightarrow z_5} \rightarrow 0. \quad (3.36)$$

У співвідношенні (3.32):

$$\Delta E_C(z) = \begin{cases} 0.765(E_g(\text{AlN}) - E_g(\text{GaN})), & z < 0, 0 \leq z < z_1, z_2 \leq z < z_3, z_4 \leq z < z_5, z > z_5 \\ 0, & z_1 \leq z < z_2 \\ 0.765(E_g(\text{Al}_{0.58}\text{Ga}_{0.42}\text{N}) - E_g(\text{GaN})), & z_3 \leq z < z_4 \end{cases} \quad (3.37)$$

- це потенціальний профіль РТС для електрона, розрахований без урахування електричного поля п'єзоелектричної та спонтанної поляризацій. Залежність ширини забороненої зони для $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ напівпровідника від температури T у (3.37) задається співвідношенням Варшні [120]:

$$E_g(x, T) = E_g(x, 0) - \frac{\alpha(x)T^2}{\beta(x) + T}, \quad (3.38)$$

причому залежності від величини x :

$$E_g(x,0) = x^2 + 1.59x + 3.51; \alpha(x) = (2.15x^2 - 0.46x + 0.94) \cdot 10^{-3},$$

$$\beta(x) = 1561x^2 - 270x + 791. \quad (3.39)$$

Крім того у (3.32):

$$V_{ex}(z) = -\left(\frac{9}{4\pi^2}\right)^{1/3} \left[1 + \frac{0.6213r_s}{21} \ln\left(1 + \frac{21}{r_s(z)}\right)\right] \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_s(z)\epsilon(z)a_B^*(z)} \quad (3.40)$$

обмінно-кореляційний потенціал, розрахований у апроксимації Хедіна-Лундквіста

[121], де $-r_s(z) = \left(\frac{4\pi}{3} a_B^* n(z)\right)^{-1/3}$ безрозмірна функція, що характеризує електронний

газ в РТС, по відношенню до ефективного радіусу Бора $a_B^*(z) = \frac{\epsilon(z)}{m(z)a_B}$, a_B - радіус

Бора, $n(z)$ - концентрація носіїв, що створюють статичний просторовий заряд.

Потенціальна енергія, що характеризує внесок взаємодії електрона $V_E(z)$ з внутрішніми полями спонтанної та п'єзоелектричної поляризацій, визначається виразом:

$$V_E(z) = \begin{cases} 0, & z < 0, \\ eF_1 z; & 0 \leq z < z_1, \\ eF_1 z_1 - eF_2 z, & z_1 \leq z < z_2, \\ -eF_2 z_2 + eF_3 z, & z_2 \leq z < z_3, \\ eF_3 z_3 - eF_4 z, & z_3 \leq z < z_4, \\ -eF_4 z_4 + eF_5 z, & z_4 \leq z < z_5, \\ 0, & z \geq z_5 \end{cases} \quad (3.41)$$

де F_p , $p = 1..5$ - величини напруженостей внутрішніх електричних полів, виникаючих у РТС.

Розв'язки самоузгодженої системи рівнянь Шредінгера та Пуассона (3.33) будемо шукати на рівномірній сітці такого виду:

$$\bar{\omega} = \left\{ z_s = sh, s = 0, 1, \dots, N, h = \frac{l}{N} \right\} \quad (3.42)$$

де $l = d_1 + d_2 + d_3 + d_4 + d_5 = z_5$ - сумарна товщина РТС.

Згідно методу скінченних різниць перша та друга похідні апроксимуються як (для зручності опущено індекс “ n ”):

$$\left. \frac{d\Psi^{(s)}(z)}{dz} \right|_{z=z_s} = \frac{\Psi_{s+1} - \Psi_s}{h}; \quad \left. \frac{d^2\Psi^{(s)}(z)}{dz^2} \right|_{z=z_s} = \frac{\Psi_{s+1} - 2\Psi_s + \Psi_{s-1}}{h^2}. \quad (3.43)$$

Також для хвильових функцій мають виконуватися умови періодичності, аналогічні умовам Борна-Кармана, звідки:

$$\Psi_0 = \Psi_N; \quad \Psi_1 = \Psi_{N+1}. \quad (3.44)$$

Тепер для довільної координати z_p всередині сітки рівняння Шредінгера (3.33) набуває вигляду:

$$\frac{1}{m(E, z_p)} \left. \frac{d^2\Psi(z)}{dz^2} \right|_{z=z_p} - \frac{2V(z_p)}{\hbar^2} \Psi(z_p) = -\frac{2E}{\hbar^2} \Psi(z_p) \quad (3.44)$$

звідки:

$$\left. \frac{d^2\Psi(z)}{dz^2} \right|_{z=z_p} - \frac{2m(E, z_p)V(z_p)}{\hbar^2} \Psi(z_p) = -\frac{2m(E, z_p)E}{\hbar^2} \Psi(z_p),$$

де $m(E, z_p)$ визначається згідно (3.29).

Увівши позначення:

$$\chi_p^2 = \chi^2(E, z_p) = \frac{2m(E, z_p)V(z_p)}{\hbar^2}; \quad k_p^2 = k^2(E, z_p) = \frac{2m(E, z_p)E}{\hbar^2} \quad (3.45)$$

отримуємо рівняння:

$$\left. \frac{d^2\Psi(z)}{dz^2} \right|_{z=z_p} - \chi^2(E, z_p)\Psi(z_p) = -k^2(E, z_p)\Psi(z_p) \quad (3.46)$$

Тоді рівняння (3.46) для триточкової різницевої схеми для сітки $\bar{\omega}$ з порядком $O(h^2)$ набуває вигляду:

$$\frac{\Psi_{p+1} - 2\Psi_p + \Psi_{p-1}}{h^2} - \chi_p^2\Psi_p = -k_p^2\Psi_p = 0$$

або

$$\Psi_{p-1} + ((k_p^2 - \chi_p^2)h^2 - 2)\Psi_p - \Psi_{p+1} = 0. \quad (3.47)$$

Для граничних умов (3.34) зліва і справа від РТС, тобто при $z=0$ і $z=z_s$ з урахуванням (3.43) згідно методу скінченних границь маємо:

при $z = 0$:

$$\left\{ \begin{array}{l} \Psi(z)|_{z=-0} = \Psi(z)|_{z=+0}; \\ \frac{1}{m_1} \frac{d\Psi(z)}{dz} \Big|_{z=-0} = \frac{1}{m_1} \frac{d\Psi(z)}{dz} \Big|_{z=+0} \end{array} \right. ; \left\{ \begin{array}{l} 1 = \Psi(0); \\ -\chi = \frac{d\Psi(z)}{dz} \Big|_{z=+0} \end{array} \right. ; \left\{ \begin{array}{l} 1 = \Psi_0; \\ -\chi = \frac{\Psi_1 - \Psi_0}{h} \end{array} \right. ;$$

$$\Psi_0 - \Psi_1 = \chi h, \quad (3.48)$$

де $\chi = \frac{\sqrt{2m_1(\Delta E_{C_1} - E)}}{\hbar}$; при $z = 0$: $z = z_5$:

$$\left\{ \begin{array}{l} \Psi(z)|_{z=z_5-0} = \Psi(z)|_{z=z_5+0}; \\ \frac{1}{m_1} \frac{d\Psi(z)}{dz} \Big|_{z=z_5-0} = \frac{1}{m_1} \frac{d\Psi(z)}{dz} \Big|_{z=z_5+0} \end{array} \right. ; \left\{ \begin{array}{l} B_6 e^{-\chi z} = \Psi(z_5); \\ -\chi B_6 e^{-\chi z} = \frac{d\Psi(z)}{dz} \Big|_{z=z_5+0} \end{array} \right. ;$$

$$-\chi \Psi(z_5) = \frac{d\Psi(z)}{dz} \Big|_{z=z_5+0} ; -\chi \Psi_{N-1} = \frac{\Psi_N - \Psi_{N-1}}{h};$$

$$(1 - \chi h) \Psi_{N-1} - \Psi_N = 0. \quad (3.49)$$

Граничні умови для довільного шару z_p всередині РТС:

$$\left\{ \begin{array}{l} \Psi(z)|_{z=z_p-0} = \Psi(z)|_{z=z_p+0}; \\ \frac{1}{m_p} \frac{d\Psi(z)}{dz} \Big|_{z=z_p-0} = \frac{1}{m_{p+1}} \frac{d\Psi(z)}{dz} \Big|_{z=z_p+0} \end{array} \right. ; \left\{ \begin{array}{l} \Psi_p = \Psi_{p+1}; \\ \frac{1}{m_p} \frac{\Psi_p - \Psi_{p-1}}{h} = \frac{1}{m_{p+1}} \frac{\Psi_{p+1} - \Psi_p}{h} \end{array} \right. ; \quad (3.50)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \Psi_p = \Psi_{p+1}; \\ \Psi_{p-1} - \left(1 + \frac{m_p}{m_{p+1}}\right) \Psi_p + \frac{m_p}{m_{p+1}} \Psi_{p+1} = 0. \end{array} \right.$$

У подальшому достатньо використати у різницевій схемі друге рівняння (3.50), оскільки воно несе інформацію про ефективні маси електрона у шарах наносистеми.

Таким чином різницева схема набуває вигляду:

$$\left\{ \begin{array}{l} \Psi_{p-1} + ((k_p^2 - \chi_p^2)h^2 - 2)\Psi_p - \Psi_{p+1} = 0, \\ \Psi_{p-1} - \left(1 + \frac{m_p}{m_{p+1}}\right)\Psi_p + \frac{m_p}{m_{p+1}}\Psi_{p+1} = 0, \\ \Psi_0 - \Psi_1 = \chi h, \\ (1 - \chi h)\Psi_{N-1} - \Psi_N = 0. \end{array} \right. \quad \bar{\omega} = \left\{ z_p = ph, p = 0, 1, \dots, N, h = \frac{l}{N} \right\}. \quad (3.51)$$

Рівняння Пуассона (3.33) з граничними умовами (3.35) для нього утворює таку крайову задачу:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial z} \left(\varepsilon(z) \frac{\partial \varphi_H(z)}{\partial z} \right) = -\rho(z), \\ \varphi_H^{(p)}(z_p) = \varphi_H^{(p)}(z_p) \\ \varepsilon^{(p)}(z) \frac{d\varphi_H^{(p)}(z)}{dz} \Big|_{z=z_p} - \varepsilon^{(p+1)}(z) \frac{d\varphi_H^{(p+1)}(z)}{dz} \Big|_{z=z_p} = -\sigma(z_p); \\ p = 0, \dots, 5 \end{array} \right. \quad (3.52)$$

При цьому вважається, що для потенціалу $\varphi_H(z)$ за межами РТС виконуються умови його зникнення:

$$\varphi_H(z) \Big|_{z \rightarrow 0} \rightarrow 0; \quad \varphi_H(z) \Big|_{z \rightarrow z_5} \rightarrow 0. \quad (3.53)$$

Візьмемо рівномірну сітку: $\bar{\omega} = \left\{ z_p = ph, p = 0, 1, \dots, N, h = \frac{l}{N} \right\}$.

Перепишемо рівняння Пуассона у вигляді:

$$\frac{\partial \varepsilon(z)}{\partial z} \frac{\partial \varphi_H(z)}{\partial z} + \varepsilon(z) \frac{\partial^2 \varphi_H(z)}{\partial z^2} = -\rho(z). \quad (3.54)$$

Тепер для довільної координати z_p всередині сітки рівняння Пуассона (3.54) набуває вигляду:

$$\frac{\partial \varepsilon(z)}{\partial z} \Big|_{z=z_p} + \varepsilon(z_p) \frac{d^2 \varphi_H(z)}{dz^2} \Big|_{z=z_p} = -\rho(z_p). \quad (3.55)$$

Згідно методу скінченних різниць:

$$\left. \frac{\partial \varepsilon(z)}{\partial z} \right|_{z=z_p} = \frac{\varepsilon_p - \varepsilon_{p-1}}{h}; \quad \left. \frac{\partial \varphi_H(z)}{\partial z} \right|_{z=z_p} = \frac{\varphi_p - \varphi_{p-1}}{h}; \quad \left. \frac{d^2 \varphi_H(z)}{dz^2} \right|_{z=z_p} = \frac{\varphi_{p+1} - 2\varphi_p + \varphi_{p-1}}{h^2}; \quad \varepsilon(z_p) = \varepsilon^{(p)},$$

звідки:

$$\begin{aligned} \frac{\varepsilon^{(p)} - \varepsilon^{(p-1)}}{h} \cdot \frac{\varphi_p - \varphi_{p-1}}{h} + \varepsilon^{(p)} \frac{\varphi_{p+1} - 2\varphi_p + \varphi_{p-1}}{h^2} &= -\rho_p, \\ \varphi_{p-1} \varepsilon^{(p-1)} - \varphi_p (\varepsilon^{(p-1)} + \varepsilon^{(p)}) + \varphi_{p+1} \varepsilon^{(p)} &= -\rho_p h^2. \end{aligned} \quad (3.56)$$

Для граничних умов (3.52) згідно методу скінченних різниць можна записати:

$$\left\{ \begin{array}{l} \varphi(z)|_{z=z_p-0} = \varphi(z)|_{z=z_p+0} \\ \varepsilon^{(p)} \frac{d\varphi(z)}{dz} \Big|_{z=z_p-0} - \varepsilon^{(p+1)} \frac{d\varphi(z)}{dz} \Big|_{z=z_p+0} \end{array} \right. = -\sigma(z_p); \quad \left\{ \begin{array}{l} \varphi_p = \varphi_{p+1} \\ \varepsilon^{(p)} \frac{\varphi_p - \varphi_{p-1}}{h} - \varepsilon^{(p+1)} \frac{\varphi_{p+1} - \varphi_p}{h} \end{array} \right. = -(P_{p+1} - P_p)h. \quad (3.57)$$

У подальшому використаємо у різницевій схемі друге рівняння (3.57), оскільки воно несе інформацію про діелектричну проникність шарів РТС. Таким чином різницева схема для рівняння Пуассона з урахуванням (3.57) набуває вигляду:

$$\left\{ \begin{array}{l} \varepsilon^{(p-1)} \varphi_{p-1} - (\varepsilon^{(p-1)} + \varepsilon^{(p)}) \varphi_p + \varepsilon^{(p)} \varphi_{p+1} = -\rho_p h^2, \\ \varepsilon^{(p)} \varphi_{p-1} - (\varepsilon^{(p)} + \varepsilon^{(p+1)}) \varphi_p + \varepsilon^{(p+1)} \varphi_{p+1} = (P_{p+1} - P_p) h^2, \\ \varphi_0 = \varphi_{N+1} = 0. \end{array} \right. \quad (3.58)$$

$$\bar{\omega} = \left\{ z_p = ph, p = 0, 1, \dots, N, h = \frac{l}{N} \right\}.$$

Тоді потенціал φ_m у вузлах сітки $\bar{\omega}$ визначається розв'язками матричного рівняння:

$$B_{nm} \varphi_m = F_m \quad (3.59)$$

де B_{nm} - матриця, яка має вигляд:

$$\begin{aligned}
B_{nm} = & \begin{pmatrix} \varepsilon^{(0)} + \varepsilon^{(1)} & \varepsilon^{(1)} & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \varepsilon^{(1)} + \varepsilon^{(2)} & \varepsilon^{(2)} & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \varepsilon^{(1)} & -(\varepsilon^{(1)} + \varepsilon^{(2)}) & \varepsilon^{(2)} & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \varepsilon^{(2)} & -(\varepsilon^{(2)} + \varepsilon^{(3)}) & \varepsilon^{(3)} & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon^{(2)} & -(\varepsilon^{(2)} + \varepsilon^{(3)}) & \varepsilon^{(3)} & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon^{(3)} & -(\varepsilon^{(3)} + \varepsilon^{(4)}) & \varepsilon^{(4)} & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \varepsilon^{(N-1)} & -(\varepsilon^{(N-1)} + \varepsilon^{(N)}) \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \varepsilon^{(N)} & -(\varepsilon^{(N)} + \varepsilon^{(N+1)}) \end{pmatrix}; \\
\varphi_m = & (\varphi_1 \quad \varphi_2 \quad \varphi_3 \quad \varphi_4 \quad \varphi_5 \quad \dots \quad \varphi_N)^T; \\
f_m = & (-\rho_1 h^2 \quad (P_2 - P_1)h^2 \quad -\rho_2 h^2 \quad (P_3 - P_2)h^2 \quad \dots \quad -\rho_N h^2 \quad (P_{N+1} - P_N)h^2)^T,
\end{aligned} \tag{3.60}$$

де символ “Т” – означає операцію транспонування матриці.

Різницева схема (3.60) може бути записана у вигляді:

$$\begin{cases} \varepsilon^{(i-1)} \varphi_{p-1} - (\varepsilon^{(i-1)} + \varepsilon^{(i)}) \varphi_p + \varepsilon^{(i)} \varphi_{p+1} = -\rho_i h^2, \\ \varepsilon^{(i)} \varphi_{p-1} - (\varepsilon^{(i)} + \varepsilon^{(i+1)}) \varphi_p + \varepsilon^{(i+1)} \varphi_{i+1} = (P_{i+1} - P_i) h^2, \quad i = 1, \dots, N \\ \varphi_0 = \varphi_{N+1} = 0. \end{cases} \tag{3.61}$$

її розв’язок φ_m шукається методом прогонки.

Таким чином, в загальному випадку хвильові функції електрона Ψ_s та розв’язки рівняння Пуассона φ_s з урахуванням граничних умов до них при апроксимації похідних згідно (3.43), визначаються розв’язками матричних рівнянь:

$$\sum_{r=1}^N A_{sr} \Psi_s = f_s, ; \sum_{r=1}^N B_{sr} \varphi_s = F_s, \Psi_s = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \Psi_4 \\ \Psi_s \\ \vdots \\ \Psi_N \end{pmatrix}; f_s = \begin{pmatrix} K_s h \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}; \varphi_s = \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \varphi_3 \\ \varphi_4 \\ \varphi_s \\ \vdots \\ \varphi_N \end{pmatrix}; F_s = \begin{pmatrix} -\rho_1 h \\ P_2 - P_1 \\ \vdots \\ -\rho_{s-1} h \\ P_s - P_{s-1} \\ \vdots \\ -\rho_N h \\ P_{N+1} - P_N \end{pmatrix}, (3.62)$$

де $\phi_0 = \phi_{N+1} = 0$, $K_s = \hbar^{-1} \sqrt{2m_1(\Delta E_C(z_s) - E)}$.

У виразі (3.62) A_{sr}, B_{sr} ($s = \overline{1 \dots N}, r = \overline{1 \dots N}$), - матриці, для елементів яких:

$$A_{sr} = \begin{cases} 1, & r = s - 1, \\ -\left(1 + \frac{m_s}{m_{s+1}}\right), & r = s, \\ \frac{m_s}{m_{s+1}}, & r = s + 1, \\ 0, & \text{решта елементів} \end{cases}; B_{sr} = \begin{cases} \varepsilon^{(s-1)}, & r = s - 1, \\ -(\varepsilon^{(s-1)} + \varepsilon^{(s)}), & r = s, \\ \varepsilon^{(s)}, & r = s + 1, \\ 0, & \text{решта елементів} \end{cases}, (3.63)$$

якщо вузли сітки z_s співпадають з гетеромежами РТС і

$$A_{sr} = \begin{cases} 1, & r = s - 1, \\ (k_s^2 - \chi_s^2)h^2 - 2, & r = s \\ -1, & r = s + 1 \\ 0, & \text{решта елементів} \end{cases}; B_{sr} = \begin{cases} \varepsilon^{(s)}, & r = s - 1, \\ -(\varepsilon^{(s)} + \varepsilon^{(s+1)}), & r = s \\ \varepsilon^{(s+1)}, & r = s + 1 \\ 0, & \text{решта елементів} \end{cases} (3.64)$$

в протилежному випадку.

У виразі (3.64):

$$k_s = \hbar^{-1} \sqrt{2m_s E}; \chi_s = \hbar^{-1} \sqrt{2m_s V(z_s)}. (3.65)$$

Стационарний енергетичний спектр $E_n^{(s)}$ електрона визначається із дисперсійного рівняння:

$$\det|A_{sr} - E_n^{(s)}I| = 0, \quad (3.66)$$

де $n = 1, 2, \dots$ - номер енергетичного рівня стаціонарного електронного спектру, I - одинична матриця розмірності $N \times N$.

Знайдена хвильова функція електрона в наносистемі визначається як:

$$\Psi(E_m, z) = \frac{1}{\sqrt{C_m}} \Psi_m(E_m, z) = \sum_{p=1}^N \frac{1}{\sqrt{C_m}} \Psi_m^{(p)}(E_m, z) [\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)], \quad (3.67)$$

де умови нормування хвильової функції маємо:

$$\int_0^l |\Psi_m(E_m, z)|^2 dz = C_m, \quad (3.68)$$

звідки з урахуванням (3.67):

$$\int_0^l |\Psi_m(E_m, z)|^2 dz = \sum_{i=1}^5 \int_{d_{i-1}}^{d_i} |\Psi_m^{(i)}(E_m, z)|^2 dz = \sum_{p=1}^N \int_{z_{p-1}}^{z_p} |\Psi_m^{(p)}(E_m, z)|^2 dz, \quad d_0 = 0; d_5 = l; z_0 = 0; z_N = l,$$

а згідно за формулою Сімпсона отримуємо:

$$\begin{aligned} \int_{z_{p-1}}^{z_p} |\Psi_m^{(p)}(E_m, z)|^2 dz &= \frac{1}{6} \left(|\Psi_m^{(p)}(E_m, z_{p-1})|^2 - 4 \left| \Psi_m^{(p)}(E_m, z_{\frac{p-1}{2}}) \right|^2 + |\Psi_m^{(p)}(E_m, z_{p+1})|^2 \right) (d_p - d_{p-1}) = \\ &= \frac{1}{6} \left(|\Psi_m^{(p)}(E_m, z_{p-1})|^2 - 4 \left| \Psi_m^{(p)}\left(E_m, \frac{z_{p-1} + z_{p+1}}{2}\right) \right|^2 + |\Psi_m^{(p)}(E_m, z_{p+1})|^2 \right) h. \end{aligned}$$

Таким чином, умова нормування хвильової функції виконується:

$$\int_0^l |\Psi(E_m, z)|^2 dz = 1. \quad (3.69)$$

У системі рівнянь (3.33):

$$\begin{aligned} \rho_s = \rho(z) &= \sigma(z_s) \delta(z_{s+1} - z_s) + e \left[N_D^+ - n(z_s) \right] = \\ &= \left[P(z) \Big|_{z=z_s+0} - P(z) \Big|_{z=z_s-0} \right] / h + e \left[N_D^+ - n(z_s) \right] = (P_{s+1} - P_s) / h + e \left[N_D^+ - n(z_s) \right], \end{aligned} \quad (3.70)$$

де концентрація іонізованих донорних домішок:

$$N_D^+ = \frac{N_D}{1 + 2 \exp\left(\frac{E_F - E_n}{kT}\right)}, \quad (3.71)$$

N_D - концентрація донорних домішок.

Концентрація електронів у РТС визначається таким чином:

$$n(z) = n_0(z) \sum_n |\Psi(E_n, z)|^2 \ln \left| 1 + \exp \left(\frac{E_F - E_n}{k_B T} \right) \right|, \quad n_0(z) = \frac{m(z) k_B T}{\pi \hbar^2}. \quad (3.72)$$

Рівень Фермі E_F матеріалу шарів РТС, що визначається з мови зарядової нейтральності наноструктури:

$$\int_0^l [n(z) - N_D^+] dz = 0. \quad (3.73)$$

Сили осциляторів квантових переходів з використанням формули Сімпсона визначаються як:

$$\begin{aligned} f_{m,m'} &= \frac{2(E_m - E_{m'})}{\hbar^2} \sum_{p=1}^N m_p \left| \int_{z_{p-1}}^{z_p} z \Psi_m^{*(p)}(E_m, z) \Psi_{m'}^{(p)}(E_{m'}, z) dz \right|^2 = \\ &= \frac{(E_m - E_{m'})}{3\hbar^2} \sum_{p=1}^N m_p \left| z_{p-1} \Psi_m^{*(p)}(E_m, z_{p-1}) \Psi_{m'}^{(p)}(E_{m'}, z_{p-1}) + \left(\frac{z_{p-1} + z_{p+1}}{2} \right) \Psi_m^{*(p)} \left(E_m, \frac{z_{p-1} + z_{p+1}}{2} \right) \times \right. \\ &\times \left. \Psi_{m'}^{(p)} \left(E_{m'}, \frac{z_{p-1} + z_{p+1}}{2} \right) + z_{p+1} \Psi_m^{*(p)}(E_m, z_{p+1}) \Psi_{m'}^{(p)}(E_{m'}, z_{p+1}) \right|^2 \end{aligned} \quad (3.74)$$

Тепер самоузгоджений розв'язок системи рівнянь Шредінгера та Пуассона (3.33) знаходиться методом послідовних l ітерацій за схемою:

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{m(z)} \frac{\partial \Psi_n^{(l+1)}(z)}{\partial z} \right) + V^{(l+1)}(z) \Psi_n^{(l+1)}(z) = E_n^{(l+1)} \Psi_n^{(l+1)}(z); \\ \frac{\partial}{\partial z} \left(\varepsilon(z) \frac{\partial \varphi_H^{(l)}(z)}{\partial z} \right) = -\rho^{(l)}(z) \end{cases} \quad (3.75)$$

де ефективний потенціал в першому порядку ітерацій розраховується як:

$$V^{(l)}(z) = \Delta E_C(z) + V_E(z). \quad (3.76)$$

Точність обчислень, виконаних за схемою (3.75) задається очевидними умовами:

$$\frac{|\Psi_n^{(l+1)}(z)|^2 - |\Psi_n^{(l)}(z)|^2}{|\Psi_n^{(l)}(z)|^2} \ll 1; \quad \frac{|\varphi_H^{(l)}(z) - \varphi_H^{(l-1)}(z)|}{\varphi_H^{(l)}(z)} \ll 1. \quad (3.77)$$

3.3. Розрахунки та аналіз потенціальних профілів нітридних наноструктур. Властивості стаціонарного електронного спектру та сил осциляторів квантових електронних переходів

На основі розвиненої вище теорії виконувався розрахунок ефективного потенціалу $V(z)$, стаціонарного енергетичного спектру електрона E_n , його хвильових функцій $\Psi_n(E_n, z)$ та сил осциляторів квантових переходів $f_{m,m'}$.

Безпосередні розрахунки виконувались для експериментально реалізованої РТС, що слугувала каскадом ККД [122]. Геометричні параметри наносистеми: товщини потенціальних бар'єрів: $\Delta_1 = 2$ нм; $\Delta_2 = 1$ нм; $\Delta_3 = 1$ нм, ширини потенціальних ям: $d_1 = 2.08$ нм; $d_2 = 15$ нм [10*, 12*].

Фізичні параметри матеріалу шарів РТС (a [нм]; m/m_0 ; ε ; P_{sp} [C/m^2]; e_{31} , e_{33} [C/m^2]; c_{11} , c_{12} , c_{13} , c_{33} [GPa]), які використовувались для розрахунків приведено в Таблиці 3.1, де m_0 - маса вільного електрона.

Таблиця 3.1.

	a (нм)	m/m_0	ε	P_{sp} (Кл/м ²)	e_{31} (Кл/м ²)	e_{33} (Кл/м ²)	c_{11} (ГПа)	c_{12} (ГПа)	c_{13} (ГПа)	c_{33} (ГПа)
AlN	0.311	0.322	8.5	-0.081	-0.53	1.51	396	137	108	373
GaN	0.319	0.186	10	-0.034	-0.34	0.67	390	145	106	398
Al _{0.58} Ga _{0.42} N	0.314	0.265	9.13	-0.061	-0.45	1.15	393.5	140.4	107.2	383.5

Концентрація донорних домішок згідно з працею [122] вибиралась рівною: $N_D = 6 \cdot 10^{17}$ см⁻³.

Точність обчислень, яка задається співвідношеннями (3.77) приймалась рівною 10^{-6} , що забезпечувалося 6-8 ітераціями згідно схеми (3.75).

На Рис. 3.2 зображено енергетичну схему одного каскаду ККД, розрахунок потенціального профілю якої у залежності від величини z виконувався згідно зі співвідношеннями (3.32), (3.37)-(3.41). З рисунка видно, що порівняно з каскадами

ККД, що працюють у середньому та дальньому інфрачервоному діапазонах (яка становить величину порядку 500 меВ), глибини потенціальних ям та висоти потенціальних бар'єрів є набагато більшими та значно деформуються під впливом внутрішніх електричних полів, спричинених спонтанною та п'єзоелектричною поляризаціями. Слід зауважити, що цей факт становить значні перспективи у варіюванні робочими характеристиками наноприладів зміною параметрів геометричного дизайну каскаду РТС.

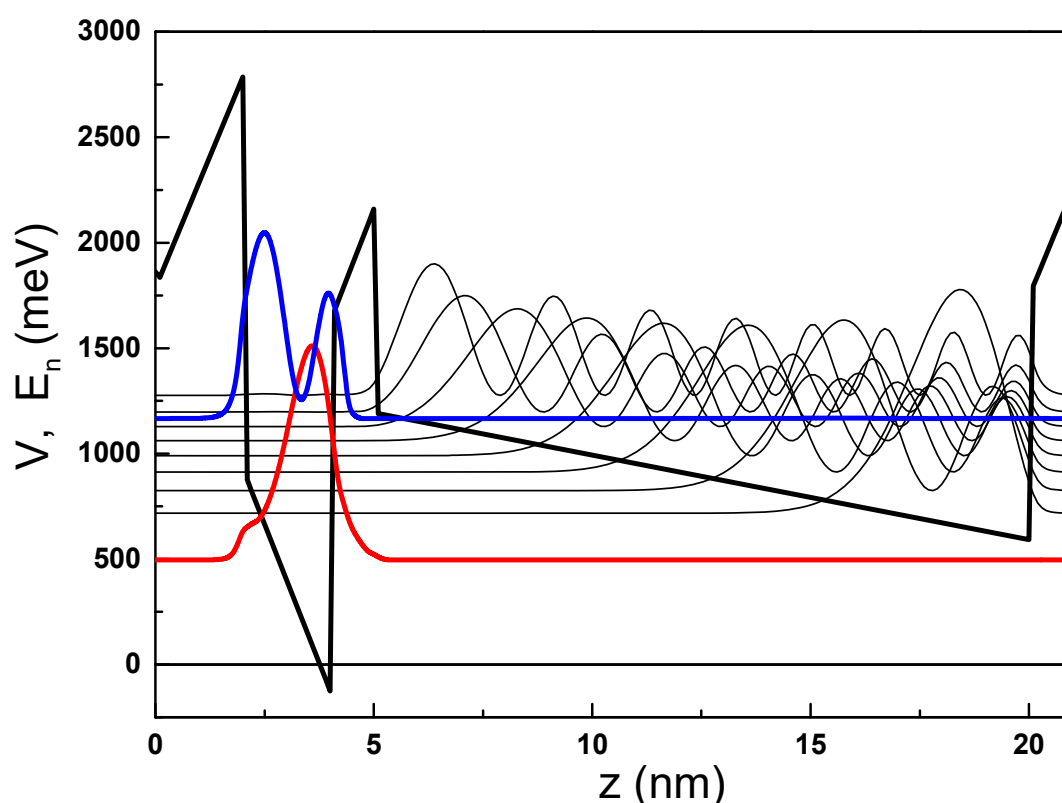


Рис. 3.2. Потенціальний профіль досліджуваної наносистеми $V(z)$ та квадрати модулів хвильових функцій $|\Psi(E_n, z)|^2$, приведені до шкали енергій стаціонарного електронного спектру.

На Рис. 3.2 подано значення резонансних енергій електрона в досліджуваній РТС та відповідні їм розподіли ймовірності знаходження електрона у межах наносистеми $|\Psi(E_n, z)|^2$ (приведені до масштабу шкали енергій). Значення цих енергій наведено у Таблиці 3.2. З рисунка видно, що робочі електронні стани, які локалізовані у вхідній ямі РТС забезпечують вертикальний електронний перехід

1 → 8 з енергією $\Omega^{(theory)} = E_8 - E_1 = 660,3$ меВ. При цьому розраховане значення величини детектованої енергії відрізняється від експериментально отриманого значення $\Omega^{(exp)} = 650,0$ меВ не більше ніж на 2%.

Таблиця 3.2. Значення енергій стаціонарного спектру електрона з закритій РТС каскаду ККД

Значення енергій (меВ)	Локалізація
$E_1=496.6$	активна зона
$E_2=686,6$	Екстрактор
$E_3=793.9$	Екстрактор
$E_4=881.7$	Екстрактор
$E_5=959.3$	Екстрактор
$E_6=1030.3$	Екстрактор
$E_7=1097.6$	Екстрактор
$E_8=1156.8$	активна зона
$E_9=1245.3$	Екстрактор
$E_{10}=1336.0$	Екстрактор

На Рис 3.3 а, б приведено розраховані залежності від положення d ($0 \leq b \leq d_1 + d_2$) внутрішнього потенціального бар'єра у сумарній потенціальній ямі для стаціонарного електронного спектру (E_n) та сил осциляторів квантових переходів ($f_{nn'}$). З Рис. 3.3а видно, що для кожного номера енергетичного рівня залежність $E_n = E_n(d)$ формує n максимумів та $n - 1$ мінімум відповідно. При

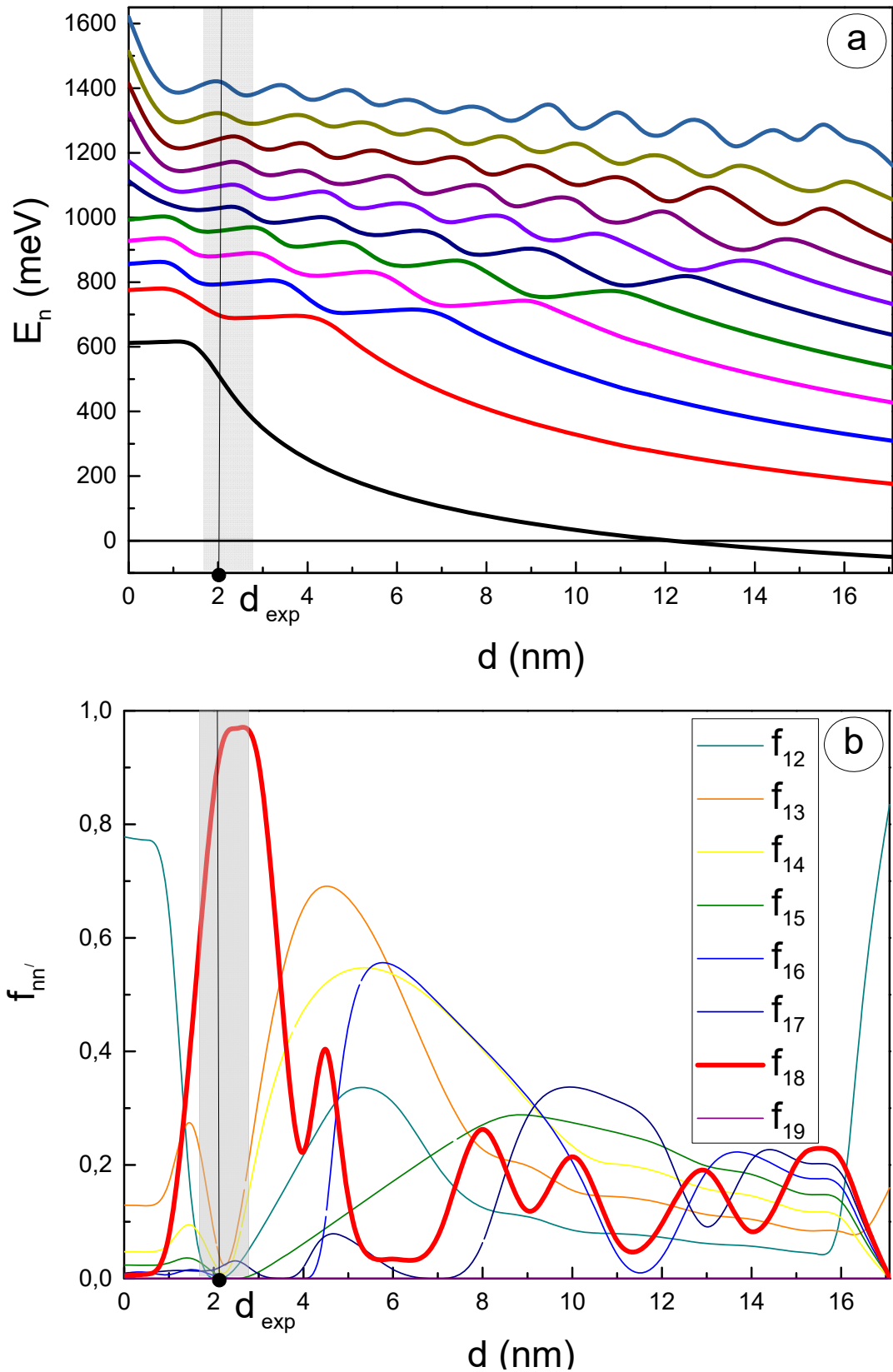


Рис. 3.3. Стаціонарний електронний спектр (а) та сили осциляторів квантових переходів (b) розраховані як функції положення (d) внутрішнього потенціального бар'єра наносистеми у сумарній потенціальній ямі.

цьому умова $E_n(d)|_{d \rightarrow 0} \approx E_n(b)|_{d \rightarrow d_1}$ яка має місце для активних зон ККД арсенідних напівпровідників не виконується. Нова умова має вигляд:

$$E_n(d)|_{d \rightarrow 0} \approx E_n(d)|_{d \rightarrow d_1+d_2} + V_H(d_1 + d_2) + V_{ex}(d_1 + d_2) + V_E(d_1 + d_2). \quad (3.78)$$

Умовою, що визначає оптимальну роботу ККД є формування максимального значення сили осцилятора $f_{m'}$ квантового переходу між електронними станами, що забезпечують необхідну енергію поглинання електромагнітного поля [122] (у нашому випадку це $\Omega_{18} = E_8 - E_1$). Таким чином необхідно, щоб сила осцилятора f_{18} була на порядок більшою за сили осцилятора квантових переходів з першого на решту стаціонарних електронних станів, тобто:

$$f_{18} \gg f_{1n'}, n' = \overline{2..9}, n' \neq 8. \quad (3.79)$$

На Рис. 3.3б, приведено результати розрахунку у залежності від величини b сил осциляторів квантових переходів з першого електронного стаціонарного стану на решту електронних станів, що містяться у РТС. З рисунка видно, що необхідну умову (3.79) задовольняє єдина область $1.7 \text{ нм} \leq d \leq 2.8 \text{ нм}$, що містить експериментально реалізовану конфігурацію активної зони ККД d_{exp} .

Таким чином, розвинена теорія дозволяє встановити геометричні конфігурації активних зон нітридних ККД, що забезпечують оптимальну роботу цих наноприладів, та з хорошою точністю виконувати розрахунок енергій електронного спектру та енергій квантових переходів між ними.

3.4. Теорія аналітичного методу розрахунку потенціальних профілів нітридних наносистем. Підхід до відшукування аналітичних розв'язків системи рівнянь Шредінгера та Пуассона

Побудова послідовної теорії електронних станів та розробка загального методу розрахунку потенціальних профілів плоских анізотропних РТС є досі не вирішеною теоретичною проблемою. Теорія, яка дозволяє виконати розрахунок внутрішніх полів, що виникають у нітридних напівпровідникових наносистемах була розвинена у працях [93-100]. Застосування цієї теорії до плоских

багатошарових РТС не становить значних труднощів, проте для побудови методу розрахунку потенціальних профілів РТС вона не достатня, оскільки наприклад не дозволяє врахувати внеску носіїв заряду у величину ефективного потенціалу. Існуючі на даний момент методи розрахунку потенціальних профілів РТС, що оглядалися вище мають суттєві недоліки як з точки зору повноти опису складових ефективного потенціалу так і з точки зору використовуваних теоретичних підходів.. Загалом, до недоліків більшості чисельних методів розрахунку потенціальних профілів РТС слід віднести лінеаризацію рівнянь на початковому етапі їх розв'язання, а також відсутність урахування граничних умов для хвильової функції та потоків її ймовірності. Крім того, використання таких методів значно ускладнює можливість подальшого дослідження електронних переходів та електронного тунельного транспорту, електрон-фононої взаємодії в таких РТС та інших важливих теоретичних задач.

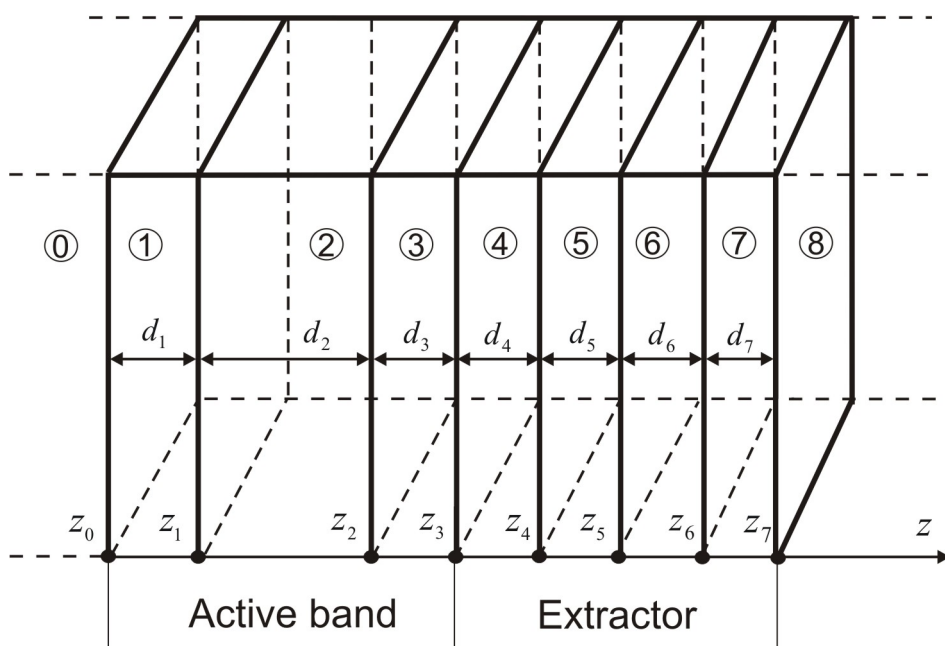


Рис. 3.4. Геометрична схема досліджуваної нітридної наноструктури.

d_1, d_2, \dots, d_7 - це товщини шарів наносистеми, z_1, z_2, \dots, z_7 - координати границь поділу середовищ між цими шарами

Отже, у Декартовій системі координат розглядається триярна РТС – каскад ККД, що складається з активної зони та інжектора (рис. 1). Система координат вибирається так, що її вісь OZ є перпендикулярною до меж поділу середовищ шарів

наносистеми. Відповідно експериментальної праці [123] приймається, що середовища (0) та (8), зліва та справа від РТС відповідають ненапруженому середовищу AlN, середовищу (2) відповідає напівпровідниковий матеріал GaN, середовищам (4), (6) - напівпровідниковий матеріал $Al_{0.25}Ga_{0.75}N$, середовищам (1), (3), (5), (7) – напівпровідниковий матеріал AlN (див. праці автора [10*, 12*, 13*]).

З використанням моделі ефективних мас та моделі діелектричного континууму ефективна маса електрона та діелектрична проникність РТС можуть бути записані у вигляді:

$$m(z) = m_0[\theta(z - z_1) + \theta(z - z_2)] + m_1 \left\{ \theta(-z) + \theta(z - z_7) + \sum_{p=0}^3 [\theta(z - z_{2p}) - \theta(z - z_{2p+1})] \right\} + (3.8) \\ + m_2 \sum_{p=2}^3 [\theta(z - z_{2p-1}) - \theta(z - z_{2p})],$$

0)

$$\varepsilon(z) = \varepsilon_{(0)} \left\{ \theta(-z) + \theta(z - z_7) + \sum_{p=0}^3 [\theta(z - z_{2p}) - \theta(z - z_{2p+1})] \right\} + \varepsilon_{(1)} [\theta(z - z_1) + \theta(z - z_2)] + \\ + \varepsilon_{(2)} \sum_{p=2}^3 [\theta(z - z_{2p-1}) - \theta(z - z_{2p})], (3.81)$$

де $\theta(z)$ - одинична функція Хевісайда, $z_{-1} \rightarrow -\infty$, $z_6 \rightarrow \infty$, а $m_0 = m^{(2)}$; $m_1 = m^{(0)} = m^{(1)} = m^{(3)} = m^{(5)} = m^{(7)} = m^{(8)}$; $m_2 = m^{(4)} = m^{(6)}$ - ефективні маси електрона в потенціальних бар'єрах та ямах РТС відповідно, $\varepsilon_{(0)} = \varepsilon^{(0)} = \varepsilon^{(1)} = \varepsilon^{(3)} = \varepsilon^{(5)} = \varepsilon^{(7)} = \varepsilon^{(8)}$; $\varepsilon_{(1)} = \varepsilon^{(2)}$; $\varepsilon_{(2)} = \varepsilon^{(4)} = \varepsilon^{(6)}$ - діелектричні проникності матеріалу шарів РТС відповідно.

Величина макроскопічної поляризації $P^{(p)}$, яка виникає у довільному p -му шарі РТС, є сумою спонтанної $P_{Sp}^{(p)}$ та п'єзоелектричної $P_{Pz}^{(p)}$ поляризацій, розрахунок яких виконано згідно загальної теорії розвиненої вище:

$$P^{(p)} = P_{Sp}^{(p)} + P_{Pz}^{(p)}, (3.82)$$

де відповідна поляризація ($P_{Pz(Sp)}^{(p)}$) для трикомпонентного напівпровідника $A_x B_{1-x} N$ у залежності від концентрації x компоненти A визначається у лінійній апроксимації:

$$P_{Pz(Sp)}^{(p)}(x) = P_{Pz(Sp)}^{AN(p)}(x) + (1-x)P_{Pz(Sp)}^{BN(p)}(x). \quad (3.83)$$

Напруженості внутрішніх електричних полів F_p , $p = 1..7$, визначаються з умов неперервності вектора електричного зміщення $\bar{D}_p = \varepsilon^{(p)}\bar{F}_p + \bar{P}_p$ на всіх межах РТС:

$$D_p = D_{p+1}, \quad (3.84)$$

а також умови, виконуваної для сумарної величини напруги, прикладеної до РТС:

$$\sum_{p=1}^7 F_p d_p = 0. \quad (3.85)$$

Зі співвідношень (3.84) та (3.85) отримується вираз для напруженості електричного поля у довільному шарі РТС:

$$F_p = \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq p}}^7 (P_k - P_p) \frac{d_k}{\varepsilon^{(k)}} \bigg/ \varepsilon^{(p)} \sum_{k=1}^7 \frac{d_k}{\varepsilon^{(k)}}, \quad (3.86)$$

d_k - товщина відповідного шару РТС.

Аналогічно викладкам, зробленим вище ефективний потенціал РТС для електрона будемо визначати як суму складових:

$$V(z) = \Delta E_C(z) + V_E(z) + V_H(z) + V_{HL}(z), \quad (3.87)$$

У виразі (3.87):

$$\Delta E_C(z) = \begin{cases} 0.765(E_g(\text{AlN}) - E_g(\text{GaN})), & z < 0, 0 \leq z < z_1, z_2 \leq z < z_3, z_4 \leq z < z_5, \\ z_6 \leq z < z_7, & z > z_7 \\ 0, & z_1 \leq z < z_2 \\ 0.765(E_g(\text{Al}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}) - E_g(\text{GaN})), & z_1 \leq z < z_2 \end{cases} \quad (3.88)$$

- потенціальний профіль РТС для електрона, розрахунок якого було виконано без урахування електричного поля п'єзоелектричної та спонтанної поляризацій [10*, 12*, 13*]. Залежність ширини забороненої зони від температури T для $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ напівпровідника у виразі (3.88) розраховується за лінійно-квадратичним співвідношенням Варшні [120]:

$$E_g(x, T) = E_g(x, 0) - \frac{a(x)T^2}{b(x) + T}, \quad (3.89)$$

де ширина забороненої зони при нульовій температурі залежності від величини x може бути подана як:

$$E_g(x,0) = xE_g(\text{AlN}) + (1-x)E_g(\text{GaN}) + \alpha x(1-x). \quad (3.90)$$

У виразі (3.90): $E_g(\text{AlN}) = 6.25 \text{ eV}$, $E_g(\text{GaN}) = 3.51 \text{ eV}$ - ширини заборонених зон AlN та GaN напівпровідників відповідно, $\alpha = 0.7 \text{ eV}$ - підгоночний параметр для нітридів III групи [120],

$a(x) = (1.799x + 0.909(1-x)) \times 10^{-3} \text{ (eV/K)}$, $b(x) = 1462x + 830(1-x) \text{ (K)}$ - параметри Варшні.

Складова $V_E(z)$ ефективного потенціалу - потенціальна енергія, що характеризує внесок взаємодії електрона з виникаючими у РТС внутрішніми полями (F_p , $p=1..5$) спонтанної та п'єзоелектричної поляризацій, визначається таким компактним виразом [10*, 12*, 13*]:

$$V_E(z) = e \sum_{p=1}^7 (-1)^{p-1} (F_p z - F_{p-1} z_{p-1}) [\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)] \quad F_0 = 0. \quad (3.91)$$

Потенціал $V_H(z)$ визначається внеском носіїв заряду у межах РТС, його безпосередній розрахунок буде виконано далі.

Складова:

$$V_{HL}(z) = -\frac{1}{4\pi} \left(\frac{9}{4\pi^2} \right)^{1/3} \left[1 + \frac{0,6213 r_s}{21} \ln \left(1 + \frac{21}{r_s(z)} \right) \right] \frac{e^2}{\varepsilon_0 r_s(z) \varepsilon(z) a_B^*(z)} \quad (3.92)$$

обмінно-кореляційний потенціал Хедіна-Лундквіста, де $r_s(z) = (4\pi a_B^* n(z) / 3)^{-1/3}$ - безрозмірна функція, $a_B^*(z) = \varepsilon(z) / m(z) a_B$, a_B - радіус Бора, $n(z)$ - концентрація носіїв, що створюють статичний просторовий заряд.

Аналітичний метод знаходження самоузгоджених розв'язків системи рівнянь Шредінгера та Пуассона ґрунтується на підході, який викладається нижче.

Енергетичний спектр електрона E_n та його хвильові функції $\Psi(z)$ визначаються шляхом розв'язування самоузгодженої системи рівнянь Шредінгера та Пуассона:

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left[\frac{1}{m(z)} \frac{d\Psi(z)}{dz} \right] + V(z)\Psi(z) = E\Psi(z), \\ \frac{d}{dz} \left[\varepsilon(z) \frac{dV_H(z)}{dz} \right] = -e\rho(z). \end{cases} \quad (3.93)$$

Метод знаходження розв'язків самоузгодженої системи (3.93) полягає у наступному. Спочатку, зберігаючи у ефективному потенціалі найбільш вагомий доданок $V_E(z)$, знаходяться розв'язки рівняння Шредінгера. Розв'язки рівняння Шредінгера є визначеними у кожній області РТС, а тому хвильова функція з урахуванням її скінченності може бути подана у вигляді:

$$\begin{aligned} \Psi_0(E, z) &= \Psi_0^{(0)}(E, z)\theta(-z) + \Psi_0^{(6)}(E, z)\theta(z - z_5) + \sum_{p=1}^7 \Psi_0^{(p)}(E, z) [\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)] = \\ &= A_0^{(0)} e^{\chi^{(0)}z} \theta(-z) + \sum_{p=1}^7 \{A_0^{(p)} Ai[\zeta^{(p)}(z)] + B_0^{(p)} Bi[\zeta^{(p)}(z)]\} [\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)] + \\ &+ B_0^{(6)} e^{-\chi^{(6)}z} \theta(z - z_5) \end{aligned} \quad (3.94)$$

де $A_0^{(0)}$, $A_0^{(6)}$ коефіцієнти у розв'язках рівняння Шредінгера ліворуч та праворуч від РТС відповідно, $A_0^{(p)}$, $B_0^{(p)}$ - усередині неї $Ai(\zeta)$, $Bi(\zeta)$ - функції Ейрі,

$$\zeta^{(p)}(z) = (2m^{(p)}eF_p / \hbar^2)^{1/3} [(\Delta E_c(z) - E) / eF_p - z], \quad \chi^{(0)} = \chi^{(6)} = \hbar^{-1} \sqrt{2m_0(U_1 - E)}, \quad (3.95)$$

Нижній індекс у коефіцієнтах $A_0^{(0)}$, $A_0^{(8)}$, $A_0^{(p)}$, $B_0^{(p)}$ відповідає порядку наближення.

З умов неперервності хвильової функції та потоків густини її ймовірності на усіх межах наносистеми:

$$\Psi^{(p)}(E, z_p) = \Psi^{(p+1)}(E, z_p); \quad \left. \frac{d\Psi_n^{(p)}(E, z)}{m(z)dz} \right|_{z=z_p-\varepsilon} = \left. \frac{d\Psi_n^{(p+1)}(E, z)}{m(z)dz} \right|_{z=z_p+\varepsilon}, \quad (3.96)$$

отримується дисперсійне рівняння з якого визначається енергетичний спектр електрона (E_n), а також знаходяться усі коефіцієнти $A_0^{(0)}$, $A_0^{(6)}$, $A_0^{(p)}$, $B_0^{(p)}$ виражені через один із них. Останній коефіцієнт визначається з умови нормування хвильової функції

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n^*(E_n, z) \Psi_n(E_n, z) dz = 1, \quad (3.97)$$

що однозначно визначає хвильові функції усіх стаціонарних станів електрона.

Густина зарядів у межах РТС визначається як:

$$\rho(z) = e \left[N_D^+ - n(z) \right] + \sum_{p=1}^5 \sigma_p \delta(z - z_p), \quad (3.98)$$

де концентрація іонізованих донорних домішок:

$$N_D^+ = \frac{N_D}{1 + 2 \exp\left(\frac{E_F - E_n}{kT}\right)}, \quad (3.99)$$

N_D - концентрація донорних домішок, а

$$n(z) = n_0(z) \sum_n |\Psi(E_n, z)|^2 \ln \left| 1 + \exp\left(\frac{E_F - E_n}{k_B T}\right) \right|, \quad n_0(z) = \frac{m(z) k_B T}{\pi \hbar^2}. \quad (3.100)$$

концентрація електронів у наноструктурі,

$$\sigma_p = P_{p+1} - P_p \quad (3.101)$$

поверхнева густина носіїв зарядів, виникаючих на межах шарів РТС унаслідок різних величин сумарної поляризації.

Тепер у межах довільного шару РТС рівняння Пуассона може бути записане у вигляді:

$$\frac{d^2 V_H^{(p)}(z)}{dz^2} = -\frac{e}{\varepsilon^{(p)}} \left\{ e \left(N_D^+ - \frac{m^{(p)} k_B T}{\pi \hbar^2} \sum_n |\Psi(E_n, z)|^2 \ln \left| 1 + \exp\left(\frac{E_F - E_n}{k_B T}\right) \right| \right) + \sigma_p \delta(z - z_p) \right\}, \quad (3.102)$$

а його точний аналітичний розв'язок з урахуванням, того що для стаціонарних електронних станів $\Psi(E_n, z) = \Psi^*(E_n, z)$ буде:

$$\begin{aligned}
V_H^{(p)}(z) = & -\frac{e}{\varepsilon^{(p)}} \int_0^{z_1} \int_0^{x_1} \left\{ e \left[N_D^+ - \frac{m^{(p)} k_B T}{\pi \hbar^2} \sum_n |\Psi(E_n, x_2)|^2 \ln \left| 1 + \exp \left(\frac{E_F - E_n}{k_B T} \right) \right| \right] + \right. \\
& \left. + \sigma_p \delta(x_2 - z_p) \right\} dx_1 dx_2 = -\frac{e}{\varepsilon^{(p)}} \left\{ \frac{e N_D^+}{2} (z - z_{p-1})^2 + (z - z_p) \sigma_p \theta(z - z_p) \right\} + \\
& + \frac{1}{3\pi} \left[\frac{em^{(p)}}{4\hbar^4 F_p^2} \right]^{1/3} \frac{k_B T}{\varepsilon^{(p)}} \sum_n \ln \left| 1 + \exp \left(\frac{E_F - E_n}{k_B T} \right) \right| \left(\left\{ 2 [A_0^{(p)}]^2 [\zeta^{(p)}(z)]^2 Ai^2 [\zeta^{(p)}(z)] - \right. \right. \\
& - Ai [\zeta^{(p)}(z)] Ai' [\zeta^{(p)}(z)] - 2 \zeta^{(p)}(z) Ai'^2 [\zeta^{(p)}(z)] \left. \right\} + \left\{ 2 [B_0^{(p)}]^2 [\zeta^{(p)}(z)]^2 Bi^2 [\zeta^{(p)}(z)] - \right. \\
& - Bi [\zeta^{(p)}(z)] Bi' [\zeta^{(p)}(z)] - 2 \zeta^{(p)}(z) Bi'^2 [\zeta^{(p)}(z)] \left. \right\} + A_0^{(p)} B_0^{(p)} Ai [\zeta^{(p)}(z)] \times \\
& \times \left. \left\{ 4 [\zeta^{(p)}(z)]^2 Bi [\zeta^{(p)}(z)] - Bi' [\zeta^{(p)}(z)] \right\} + Ai' [\zeta^{(p)}(z)] \left\{ Bi [\zeta^{(p)}(z)] + 4 \zeta^{(p)}(z) Bi' [\zeta^{(p)}(z)] \right\} \right) + \\
& + C_1^{(p)}(z - z_{p-1}) + C_2^{(p)}. \tag{3.103}
\end{aligned}$$

Коефіцієнти $C_1^{(p)}$, $C_2^{(p)}$ однозначно визначаються граничних умови неперервності потенціалу $V_H(z)$ та відповідного йому вектора електричної індукції на межах РТС:

$$V_H^{(p)}(z_p) = V_H^{(p+1)}(z_p); \quad \left. \frac{\varepsilon^{(p)} dV_H^{(p)}(z)}{dz} \right|_{z=z_p-\varepsilon} - \left. \frac{\varepsilon^{(p+1)} dV_H^{(p+1)}(z)}{dz} \right|_{z=z_p+\varepsilon} = -\sigma(z_p); \tag{3.104}$$

$$\varepsilon \rightarrow +0; \quad p = 0 \div 7$$

та умов того, що для потенціалу $V_H(z)$ за межами РТС виконуються умови його зникнення:

$$V_H(z) \Big|_{z \rightarrow 0} \rightarrow 0; \quad V_H(z) \Big|_{z \rightarrow z_5} \rightarrow 0. \tag{3.105}$$

Тоді потенціал $V_H(z)$ може бути подано у вигляді:

$$V_H(z) = \sum_{p=1}^7 V_H^{(p)}(z) [\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)]. \tag{3.106}$$

Далі для розрахованого згідно співвідношень (3.87), сумарного ефективного потенціалу РТС $U_{\text{eff}}(z) = V(z)$ виконується його лінеаризація. Тоді апроксимований ефективний потенціал РТС для електрона набуває вигляду:

$$\tilde{U}_{\text{eff}}(z) = \sum_{p=1}^7 \sum_{l=0}^N eF(z_{p_l}) z [\theta(z - z_{p_l}) - \theta(z - z_{p_{l+1}})], \tag{3.107}$$

де

$$F(z_{p_l}) = \frac{V(z_{p_{l+1}}) - V(z_{p_l})}{e(z_{p_{l+1}} - z_{p_l})} \quad (3.108)$$

ефективне значення напруженості внутрішнього електричного поля в РТС,

$$z_{p_l} = \frac{l}{2N} (z_p - z_{p-1}), \quad p = 1-7, \quad z_{l_0} = 0, \quad (3.109)$$

N - кількість розбиттів для p -го шару наносистеми.

Підставляючи ефективний потенціал РТС у вигляді (3.107), з урахуванням (3.108) і (3.109) у рівняння Шредінгера у системі (3.93), отримуємо його розв'язок у вигляді:

$$\begin{aligned} \Psi_0(E, z) &= \Psi_0^{(0)}(E, z)\theta(-z) + \Psi_0^{(8)}(E, z)\theta(z - z_5) + \\ &+ \sum_{p=1}^7 \sum_{l=0}^N \Psi_{1l}^{(p)}(E, z) [\theta(z - z_{p_l}) - \theta(z - z_{p_{l+1}})] = \\ &= A_1^{(0)} e^{\chi^{(0)}z} \theta(-z) + \sum_{p=1}^7 \sum_{l=0}^N \{A_1^{(p_l)} Ai[\zeta^{(p_l)}(z)] + B_1^{(p_l)} Bi[\zeta^{(p_l)}(z)]\} [\theta(z - z_{p_l}) - \theta(z - z_{p_{l+1}})] + \\ &+ B_0^{(8)} e^{-\chi^{(6)}z} \theta(z - z_5), \end{aligned} \quad (3.110)$$

де

$$\zeta^{(p_l)}(z) = \left(2m^{(p_l)} eF(z_{p_l}) / \hbar^2\right)^{1/3} [(\Delta E_c(z) - E) / eF(z_{p_l}) - z]. \quad (3.111)$$

$$m^{(p_l)} = \begin{cases} m_0, & z < 0, 0 \leq z < z_1, z_2 \leq z < z_3, z_4 \leq z < z_5, z > z_5; \\ m_1, & z_1 \leq z < z_2; \\ m_2, & z_3 \leq z < z_4. \end{cases} \quad (3.112)$$

Підстановкою співвідношення (3.110) отримується вираз для складової $V_H(z)$ ефективного потенціалу, розрахований у першому порядку ітерацій:

$$\begin{aligned}
V_H(z) &= \sum_{p=1}^7 \sum_{l=0}^N V_H^{(p_l)}(z) [\theta(z - z_{p_l}) - \theta(z - z_{p_{l+1}})] \\
V_H^{(p_l)}(z) &= -\frac{e}{\varepsilon^{(p_l)}} \left\{ \frac{eN_D^+}{2} (z - z_{p_{l-1}})^2 + (z - z_{p_l}) \sigma_{p_l} \theta(z - z_{p_l}) \right\} + \\
&+ \frac{1}{3\pi} \left[\frac{em^{(p_l)}}{4\hbar^4 F_{p_l}^2} \right]^{1/3} \frac{k_B T}{\varepsilon^{(p_l)}} \sum_n \ln \left| 1 + \exp \left(\frac{E_F - E_n}{k_B T} \right) \right| \left\{ \left[2[A_0^{(p_l)}]^2 [\zeta^{(p_l)}(z)]^2 Ai^2[\zeta^{(p_l)}(z)] - \right. \right. \\
&- Ai[\zeta^{(p_l)}(z)] Ai'[\zeta^{(p_l)}(z)] - 2\zeta^{(p_l)}(z) Ai'^2[\zeta^{(p_l)}(z)] \left. \right\} + \left\{ 2[B_0^{(p_l)}]^2 [\zeta^{(p_l)}(z)]^2 Bi^2[\zeta^{(p_l)}(z)] - \right. \\
&- Bi[\zeta^{(p_l)}(z)] Bi'[\zeta^{(p_l)}(z)] - 2\zeta^{(p_l)}(z) Bi'^2[\zeta^{(p_l)}(z)] \left. \right\} + A_0^{(p_l)} B_0^{(p_l)} Ai[\zeta^{(p_l)}(z)] \times \\
&\times \left\{ 4[\zeta^{(p_l)}(z)]^2 Bi[\zeta^{(p_l)}(z)] - Bi'[\zeta^{(p_l)}(z)] \right\} + Ai'[\zeta^{(p_l)}(z)] \left\{ Bi[\zeta^{(p_l)}(z)] + 4\zeta^{(p_l)}(z) Bi'[\zeta^{(p_l)}(z)] \right\} \left. \right\} + \\
&+ C_1^{(p_l)}(z - z_{p_{l-1}}) + C_2^{(p_l)}.
\end{aligned} \tag{3.113}$$

$$\text{де } \sigma_{p_l} = \begin{cases} \sigma_p, & z_{p_l} = z_p, \\ 0, & z_{p_l} \neq z_p. \end{cases}$$

Коефіцієнти $A_1^{(0)}$, $A_1^{(6)}$, $A_1^{(p_l)}$, $B_1^{(p_l)}$ визначаються з граничних умов на межах z_{p_l} , аналогічних умовам (3.96) та умові нормування (3.97), а коефіцієнти $C_1^{(p_l)}$, $C_2^{(p_l)}$ - умов аналогічних граничним умовам (3.104).

Описана ітераційна процедура дозволяє встановити самоузгоджені розв'язки системи рівнянь Шредінгера та Пуассона, а також усі складові ефективного потенціалу РТС для електрона з необхідною точністю, що задається очевидним співвідношенням:

$$\delta = \frac{|n_{v+1}(z) - n_v(z)|}{n_v(z)} \tag{3.114}$$

v - номер наближення (ітерації).

Визначена у довільному порядку ітерацій хвильова функція $\Psi(E, z) = \Psi^{(v)}(E, z)$ дає змогу виконати розрахунок сил осциляторів квантових переходів:

$$f_{n,n'} = \frac{2(E_n - E_{n'})}{\hbar^2} \sum_{p=1}^N m_p \left| \int_{z_{p-1}}^{z_p} z \Psi_n^{*(p)}(E_n, z) \Psi_{n'}^{(p)}(E_{n'}, z) dz \right|^2. \tag{3.115}$$

3.5. Потенціальні профілі нітридних наносистем у двох різних теоретичних моделях. Порівняння застосовності та встановлення ступеня універсальності методів. Електронний спектр та сили осциляторів квантових переходів

З використанням розвиненої вище теорії виконувався розрахунок хвильових функцій $\Psi_n(E_n, z)$ та енергетичного спектру енергетичного спектру електрона E_n стаціонарних електронних станів, локалізованих у РТС, сил осциляторів квантових переходів $f_{n,n'}$ та ефективного потенціалу РТС $V(z)$.

Безпосередні числові розрахунки виконувались для трійної РТС - каскаду експериментально реалізованого ККД [123]. Геометричні параметри наносистеми вибирались такими: товщини потенціальних бар'єрів: $\Delta_1 = \Delta_2 = \Delta_3 = \Delta_4 = 1.04$ нм, ширини потенціальних ям: $d_1 = 1.56$ нм; $d_2 = 1.04$ нм; $d_3 = 1.04$ нм. Фізичні параметри РТС було взято з праць [120, 123].

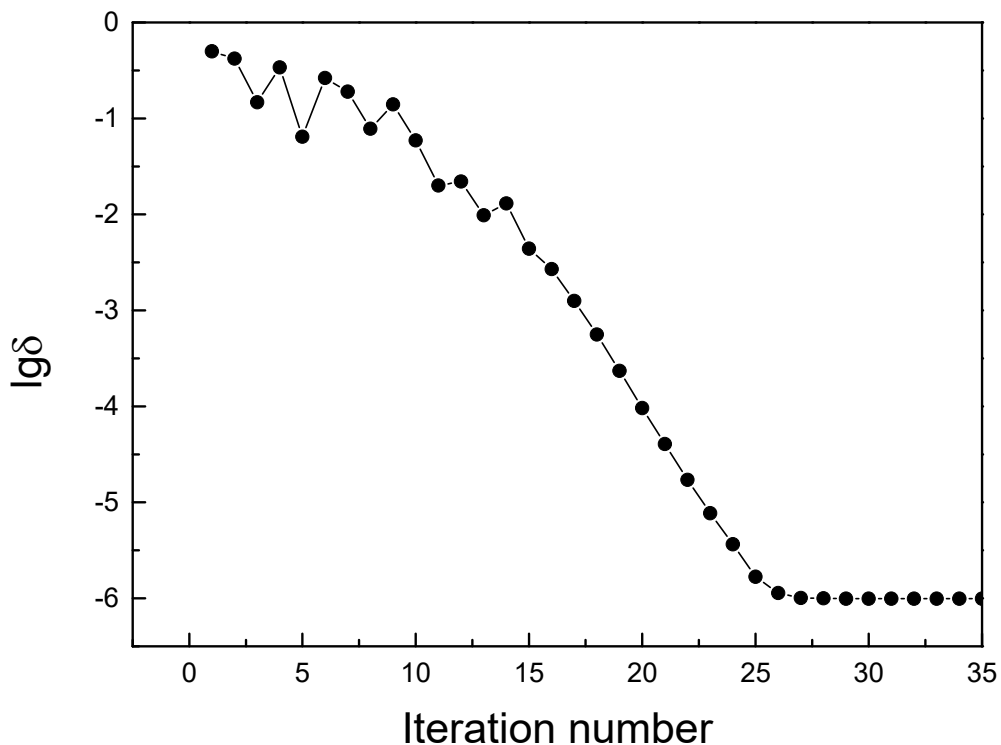


Рис. 3.5. Залежність точності обчислень від кількості ітерацій

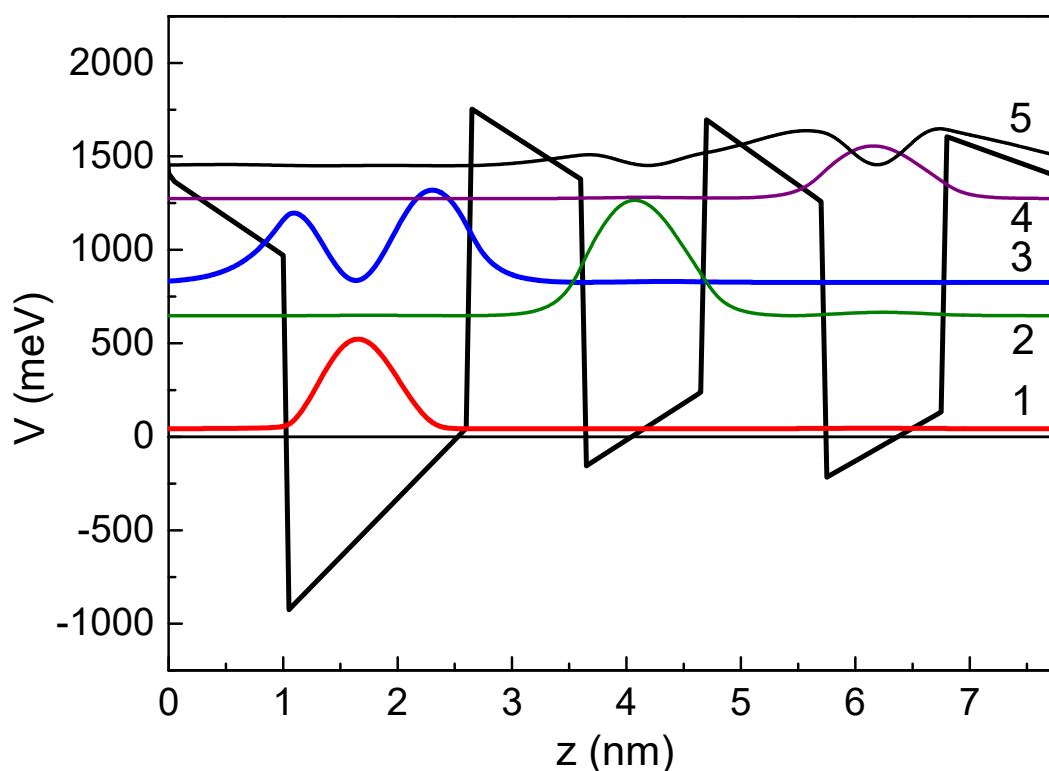


Рис. 3.6. Розрахований потенціальний профіль наносистеми та квадрати модулів хвильових функцій для електронних станів локалізованих у наносистемі, $n = 1, 2, \dots, 5$ - номери цих рівнів

Збіжність ітераційної процедури при знаходженні розв'язків системи рівнянь Шредінгера та Пуассона, точність обчислень за якою описується виразом (3.14) ілюструє Рис. 3.5, де приведено залежність логарифмів точності обчислень δ від числа ітерацій. Як видно з рисунка, прийнята в пропонованій праці точність обчислень, що рівна $\delta = 10^{-6}$ досягається 23-25 ітераціями. Подальші ж ітерації приводять до виходу точності обчислень на насичення, що свідчить про збіжність ітераційної процедури запропонованого методу.

На Рис. 3.6. зображено енергетичну схему одного каскаду ККД, розрахунок потенціального профілю якої у залежності від величини z виконувався згідно з розвиненою в попередньому розділі теорією за співвідношеннями (2.10) - (2.15). Також на рисунку приведені квадрати модулів хвильових функцій $|\Psi_n(E_n, z)|^2$ для усіх стаціонарних електронних станів, що локалізовані у РТС. З рисунка видно, що

детекторний електронний перехід реалізується між першим та третім електронними станами, локалізованими квантовій ямі активної зони каскаду.

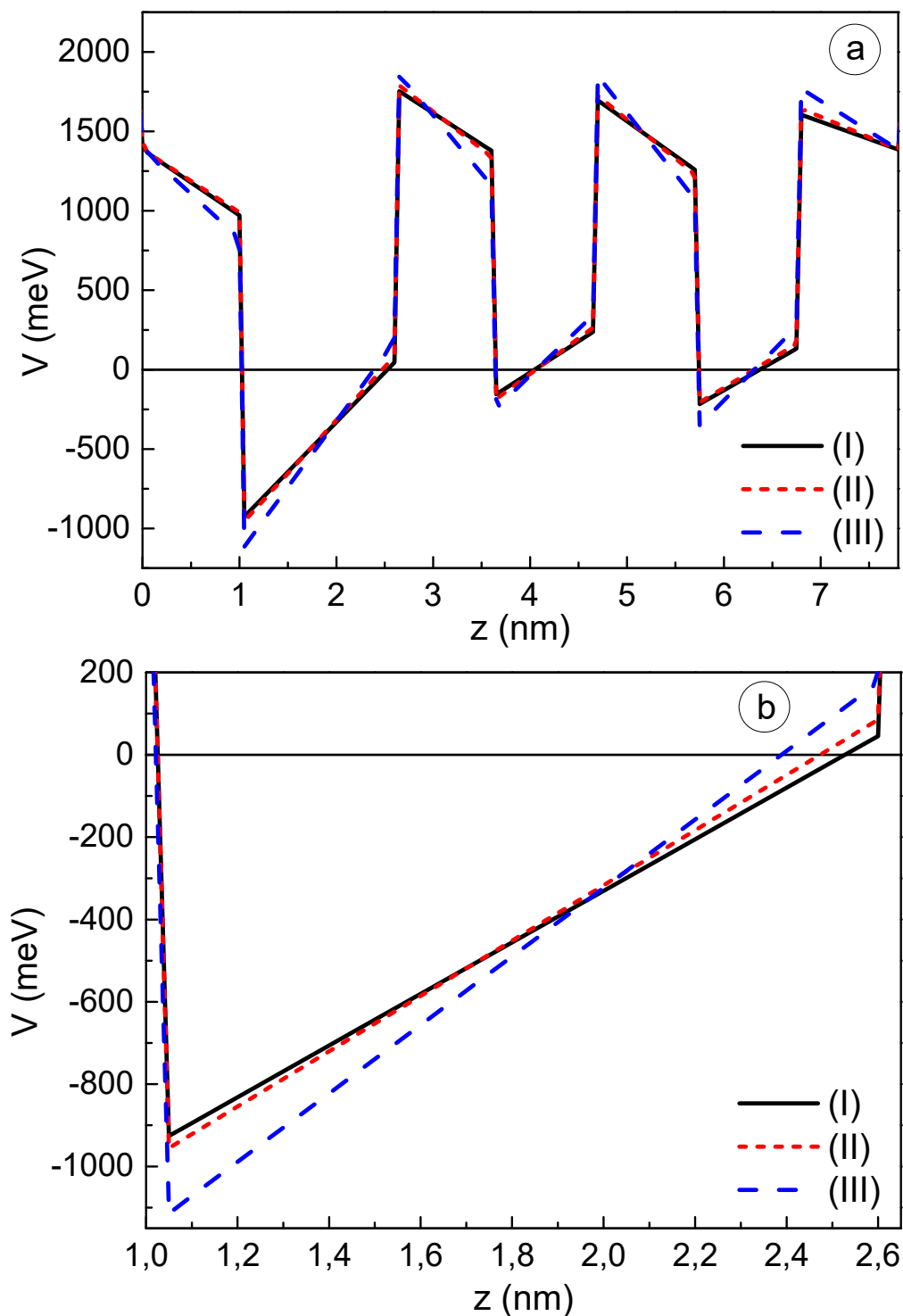


Рис. 3.7. Залежності $V = V(z)$ для ефективного потенціалу наносистеми, що розраховані у трьох моделях (а) та деталізований рисунок потенціальної ями активної зони.

З метою з'ясування ефективності запропонованого методу, а також для порівняння з результатами, отриманими за допомогою інших методів виконувалися розрахунки потенціального профілю РТС (Рис. 3.7.) з застосуванням методу, розвинуеного у в праці [124] (II - штрихова лінія), а також на основі теорії, розвинуеної у праці [108] (III – точкова лінія). З Рис. 3.7. видно, що залежності $V = V(z)$ виконані усіма трьома методами є якісно однаковими. При цьому залежності отримані методами (I) та (II) є дуже близькими між собою, а в залежності (III) глибини потенціальних ям та висоти потенціальних бар'єрів є більшими. Це пов'язано з тим, що у теорії, розвинуеній у праці [108], у величині ефективного потенціалу враховується лише внесок внутрішніх полів, виникаючих у наносистемі, що визначаються за виразом (3.86). Розраховані у всіх трьох підходах величини енергій електронних стаціонарних станів,

локалізованих у активній зоні каскаду, між якими відбувається детекторний перехід такі:

$$E_1^{(I)} = 43.9 \text{ меВ}; E_3^{(I)} = 826.4 \text{ меВ}; E_1^{(II)} = 41.4 \text{ меВ}; E_3^{(II)} = 825.1 \text{ меВ};$$

$$E_1^{(III)} = -104,8 \text{ меВ}; E_3^{(III)} = 802.2 \text{ меВ}.$$

Значення величини детектованої енергії у переході $1 \rightarrow 3$, розраховане на основі розвинуеної теорії $\Omega_{13}^{(I)} = 782,5 \text{ меВ}$ добре корелює з результатом, отриманим на основі методу (II) [124] $\Omega_{13}^{(II)} = 783.7 \text{ меВ}$ та результатом експерименту $\Omega^{(\text{exp})} = 800.0 \text{ меВ}$ відрізняючись від нього не більше ніж на 2.5%. Результат на основі теорії праці [108] дає значення енергії переходу $\Omega^{(III)} = 907.0 \text{ меВ}$, крім того значення енергій стаціонарних електронних станів є заниженими. Тому застосування такої теорії можливе лише для грубих оцінок.

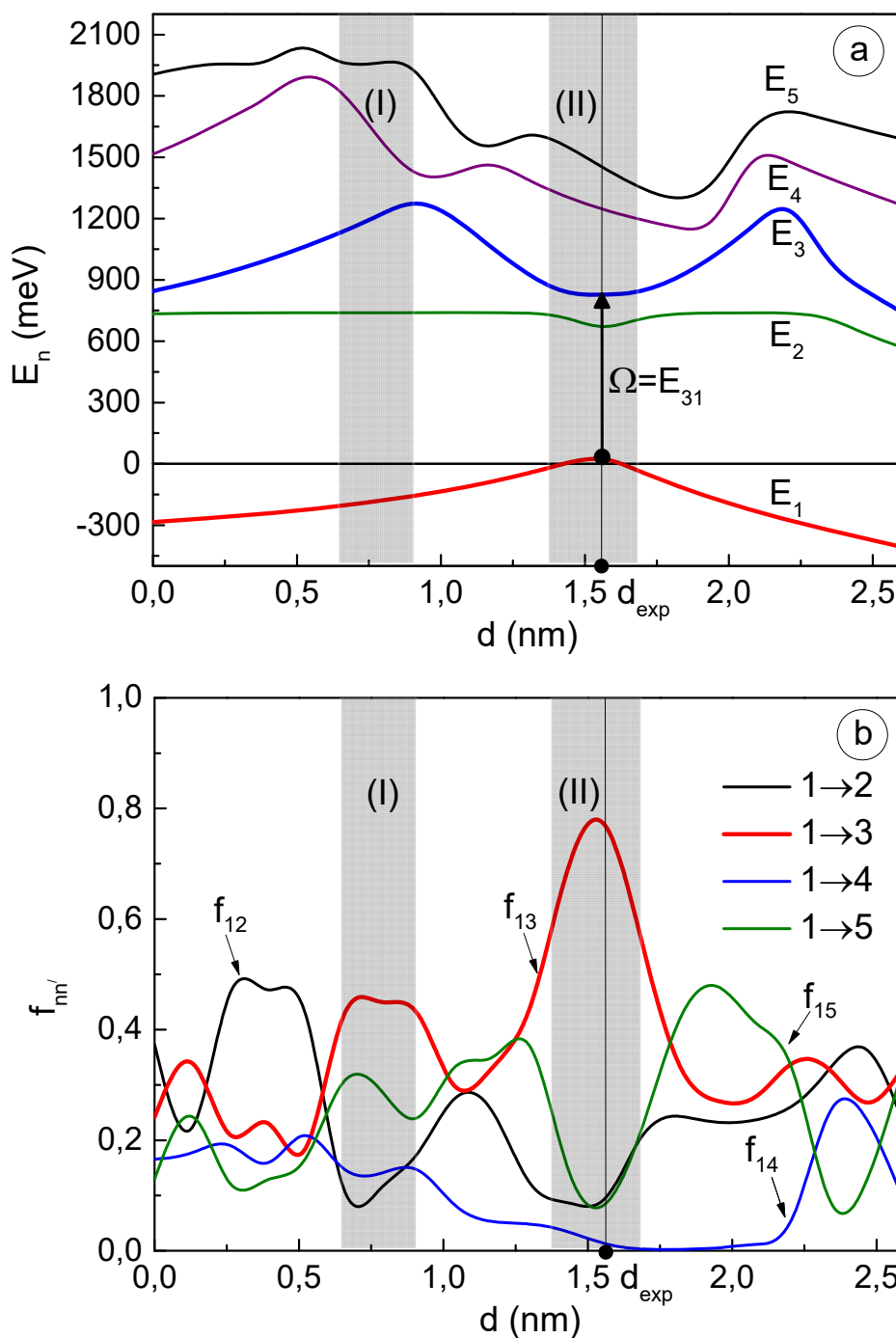


Рис. 3.8. Залежності енергій стаціонарних електронних станів (E_n , $n = 1, 2, \dots, 5$) (а) та сил осциляторів квантових переходів з першого стаціонарного стану о інших електронних станів ($f_{nn'}$) (б) розраховані у залежності від величини $d = d_1 + d_2$

Ефективна робота ККД можлива при забезпеченні найбільшої інтенсивності квантових переходів між електронними станами, локалізованими у активній зоні каскаду, в даному випадку це перехід $1 \rightarrow 3$ з енергією $\Omega_{13} = E_3 - E_1$. Це означає, що для заданої геометричної конфігурації досліджуваної РТС розрахована сила

осцилятора квантових переходів між згаданими станами f_{13} повинна за порядком величини бути більшою від сил осциляторів для переходів з першого на решту електронних станів, тобто

$$f_{13} > f_{1n'}, n' = \overline{2..5}, n' \neq 3, \quad (3.116)$$

а також переважати їх суму:

$$f_{13} > \sum_{n'=1}^5 f_{1n'}, n' \neq 3, \quad (3.117)$$

де умовою (3.117) забезпечується однозначність роботи детектора, при якій унеможлиблюється детектування інших частот, що могло б виводити ККД із робочого стану.

З метою виявлення оптимальних конфігурацій РТС (для яких виконується умова (3.116)) виконувалися розрахунки стаціонарного електронного спектру E_n та сил осциляторів квантових переходів $f_{nn'}$ у залежності від положення d ($0 \leq d \leq d_1 + d_3$) внутрішньої двобар'єрної структури (області (3)-(5) на Рис. 3.4.) по відношенню до вхідного (область (1)) та вихідного (область (7)) бар'єрів каскаду при незмінних решті геометричних параметрах наноструктури. Результати цих розрахунків наведено на Рис. 3.8а, б.

Як видно з Рис. 3.8б, в залежності $f_{nn'} = f_{nn'}(d)$ формується два інтервали для яких величина сили осцилятора f_{13} переважає решту значень розрахованих сил осциляторів. Для першого інтервалу (I) ($0.65 \text{ нм} \leq d \leq 0.91 \text{ нм}$) виконується умова (3.116), та не виконується умова (3.117) оскільки $f_{13}^{(I)} \approx f_{12}^{(I)} + f_{14}^{(I)} + f_{15}^{(I)}$. Тому для розглянутої геометричної конфігурації каскаду робота ККД не буде ефективною. Для другого інтервалу (II) ($1.38 \text{ нм} \leq d \leq 1.69 \text{ нм}$), що містить експериментально реалізовану конфігурацію $d_{\text{exp}} = 1.56 \text{ нм}$ обидві умови (3.116) і (3.117) виконуються, причому для умови (3.116) виконується більш строго: $f_{13}^{(II)} \gg f_{12}^{(II)}, f_{14}^{(II)}, f_{15}^{(II)}$. Зокрема для геометричної конфігурації d_{exp} маємо:

$f_{13}^{(\text{exp})} = 0.782$; $f_{12}^{(\text{exp})} = 0,098$; $f_{14}^{(\text{exp})} = 0,024$; $f_{15}^{(\text{exp})} = 0,096$. Як видно з Рис. 3.8а, для знайденої геометричної конфігурації реалізується можливість ефективних

детектувальних квантових переходів з енергіями близькими експериментально отриманого результату 800 меВ.

Підсумовуючи отримані результати, можна зробити висновок, що розвинена теорія та метод дозволяють ефективно розраховувати потенціальні профілі нітридних резонансно-тунельних структур та встановлювати на основі запропонованих критеріїв їх геометричні конфігурації, що забезпечують ефективне детектування при роботі цих наносистем як активних елементів ККД. При цьому зберігається аналітичний вигляд складових ефективного потенціалу наносистеми та електронних хвильових функцій, що забезпечує подальший логічний розвиток теорії та є перевагою над суто числовими методами.

Головні речі, які слід врахувати, це те що як було встановлено, п'єзоелектричний ефект, що має визначальний вплив на формування внутрішнього електричного поля й відповідно структуру енергетичних схем нітридних наносистем є безпосередньо пов'язаним з пружними деформаціями середовища їх шарів. Це означає, що при низьких температурах слід очікувати досить значного внеску від акустичних фононів у перенормування спектрів електронів, дірок чи екситонів у нітридних наносистемах, причому цей ефект може мати фактично визначальне значення. Теоретичне дослідження згаданих проблем виконується у дисертації далі.

Висновки до розділу 3

1. З використанням розв'язків самоузгодженої системи рівнянь Шредінгера та Пуассона розвинено метод розрахунку потенціальних профілів нітридних РТС при апроксимації складових електронного гамільтоніана. На основі методу розвинена теорія стаціонарних електронних станів та сил осциляторів квантових переходів у анізотропній РТС вюрцитного типу.

2. Розроблено теоретичний метод розрахунку потенціальних профілів багат шарових нітридних РТС на основі відшукування самоузгоджених аналітичних розв'язків системи рівнянь Шредінгера-Пуассона. На основі отриманих розв'язків розвинено електронну теорію стаціонарних електронних станів, хвильових функцій та сил осциляторів квантових електронних переходів у нітридних РТС. На основі

розвиненої теорії виконано дослідження геометричних конфігурацій каскадів наноприладів близького інфрачервоного діапазону з метою виявлення таких, які забезпечують максимальну інтенсивність квантових електронних переходів. Показано, що розрахована величина детектованої енергії відрізняється від експериментально отриманої не більше ніж на 3%. Встановлено, що в околі експериментально реалізованої конфігурації наноструктури найбільшою є інтенсивність квантових переходів між робочими електронними станами, що визначають робочу величину детектованої енергії.

3. Безпосередніми розрахунками потенціальних профілів наносистем та електронних спектрів, виконаними на основі розроблених теоретичних методів розрахунку виконано порівняння їхньої ефективності та варіативності використання у застосуванні до безпосередньо створених наносистем. Встановлено, що аналітичний метод має ряд переваг порівняно з числовим, забезпечуючи більш швидко збіжність до заданої точності обчислень та його результати можуть використовуватись у подальших теоретичних дослідженнях електронних процесів у нітридних наноструктурах.

РОЗДІЛ 4. ТЕОРІЯ АКУСТИЧНИХ ФОНОНІВ У БАГАТОШАРОВИХ НІТРИДНИХ AlGaN/GaN РЕЗОНАНСНО-ТУНЕЛЬНИХ СТРУКТУРАХ

Нітридні напівпровідникові сполуки знайшли своє застосування в сучасних квантових каскадних детекторах (ККД) близького та середнього інфрачервоного діапазону та лазерах (ККЛ) дальнього інфрачервоного та терагерцового діапазону. Каскади цих наноприладів складаються з великої кількості надграток плоских наноструктур – резонансно-тунельних структур (РТС). Теоретичні дослідження нітридних наноструктур часто полягають у розробці методів розрахунку потенціальних профілів таких наноструктур про що йшлося вище, дослідженні електронного транспорту [125-130], спектрів оптичних фононів [131-145] та їх взаємодії з електронами [132, 137, 144-155]. Як було встановлено в попередньому розділі дисертації деформації пружного середовища наносистем відіграють ключову роль у формуванні їх електронної структури за рахунок внутрішнього електричного поля зумовленого п'єзоелектричною та спонтанною поляризаціями. Це безпосередньо приводить до необхідності дослідження акустичних фононів, які також є пов'язаними з деформаціями напівпровідникового середовища наносистем. Проте щодо теорії акустичних фононів, то для нітридних РТС цей напрямок фактично залишається не дослідженим. На даний момент існує лише одна група праць, які стосуються процесів, пов'язаних з акустичними фононами у одноямних нітридних наноструктурах.

До згаданої групи праць слід віднести праці з дослідження спектрів акустичних фононів в одноямних наноструктурах, виконані Покатіловим з колегами [156-159] на основі модифікації теорії запропонованої у ранній праці Ритова [160]. Сюди також слід віднести працю [161] та інші суміжні праці, що є близькими до згаданих праць, але мають кінцевою метою встановлення впливу гетерогенності та полів попереднього стиску, поверхневого та внутрішнього стиску, п'єзоелектричного ефекту, домішкових станів на термальну провідність та фононні властивості одноямних наноструктур та тришарових наноплівки [162-167]. Взаємодія акустичних фононів з електронами також досліджувалась для одноямних структур в єдиній на даний момент праці [157] та близькій до неї праці [168] де

розрахунки виконувались для інших геометричних і фізичних параметрів РТС при аналогічних теоретичних викладках. Головним недоліком даних праць є лінеаризація та чисельне розв'язування виникаючих рівнянь для фононних мод, що ускладнює подальший розвиток теорії електрон-фононної взаємодії. Причому навіть у нещодавніх працях, виконаних у рамках згаданої теоретичної моделі, постулюється неможливість отримання точних розв'язків для рівнянь, що задають компоненти пружного зміщення середовища наноструктури. Також в даних працях відсутні викладки, щодо нормування фононних компонент полів зміщення. Для прикладу у праці [161] приведено залежності фононних мод, виникаючих у квантовій ямі від її геометричних розмірів. Проте в цій праці не вказано розмінностей для компонент полів зміщення та не показано, яким чином виконувалось нормування і чи виконувалось воно взагалі, оскільки результати розрахунків приведено у відносних одиницях.

Для каскадів ККЛ та ККД важливе значення має вплив акустичних фононів на процеси, які відбуваються в їхніх активних зонах, що є часто дво- та три ямними наноструктурами узгодженими з рештою елементів каскаду. Тому моделі одноямних наноструктур у яких компоненти тензора напружень σ_{yz} , σ_{xz} , σ_{zz} рівні нулю на їх межах з зовнішнім напівпровідниковим середовищем, що використовувались у згаданій груп праць та отримані там результати не можуть бути використаними для дослідження акустичних фононів у РТС. Аналогічна ситуація також є і в теорії акустичних фононів у багат шарових арсенідних наноструктурах, хоча є ряд праць, виконаних двобар'єрних та суміжних наносистем [169-179].

З врахуванням зроблених вище аргументів слід зробити висновок, що аналітична теорія спектру та компонент полів зміщення для акустичних фононів, що б могла у подальшому бути застосованою для дослідження електрон-фононної взаємодії у багат шарових надгратках, відсутня для багат шарових нітридних та арсенідних наносистем.

В даному розділі з використанням моделі пружного континууму вперше запропоновано метод отримання аналітичних розв'язків рівнянь руху для

напівпровідникового середовища багатошарових нітридних наносистем. На основі цих розв'язків розвинена теорія спектру та компонент поля зміщення різних типів акустичних фононів. Безпосередніми розрахунками спектру акустичних фононів встановлено його залежності від геометричних параметрів досліджуваної двоямної наноструктури. Отримано нормовані компоненти поля зміщення для акустичних фононів. Розвинена теорія є безпосередньою базою для побудови теорії взаємодії електронів з акустичними фононами у багатошарових нітридних та арсенідних РТС, що і здійснено у даній дисертаційній роботі.

4.1. Теорія спектру та нормалізованих мод акустичних фононів у багатошарових AlGaIn/GaN наноструктурах. Точні аналітичні вирази для компонент зміщення напівпровідникового середовища асоційовані з акустичними фононами

Будемо досліджувати акустичні фононні моди, виникаючі у двоямній AlIn/GaN РТС. Уважається, що досліджувана РТС розміщена таким чином, вісь Oz є перпендикулярною до меж розділу середовищ наносистеми (Рис. 4.1.). Тепер, з урахуванням позначень на Рис.4.1., рівняння руху для пружного зміщення у межах РТС може бути подане у вигляді:

$$\rho(z) \frac{\partial^2 u_i(r,t)}{\partial t^2} = \frac{\partial \sigma_{ik}(r)}{\partial x_k}; i, k = (1; 2; 3); x_1 = x; x_2 = y; x_3 = z, \quad (4.1)$$

де

$$\rho(z) = \sum_{p=1}^5 \rho^{(p)} [\theta(z_p - z_{p-1}) - \theta(z_p - z_{p+1})] \quad (4.2)$$

- залежна від координати z густина p -го середовища РТС, $u_i = u_i(x, y, z, t)$ - компонента вектора зміщення в точці $r = (x_1, x_2, x_3) = (x, y, z)$ в момент часу t ,

$$\sigma_{ik}(r) = C_{iklm}(z) u_{lm}(r), l, m = (1; 2; 3) \quad (4.3)$$

- тензор напружень,

$$C_{iklm}(z) = \sum_{p=1}^5 C_{iklm}^{(p)} [\theta(z_p - z_{p-1}) - \theta(z_p - z_{p+1})] \quad (4.4)$$

унаслідок різних шарів РТС залежні від координати x_3 пружні константи,

$$u_{im}(r) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i(r)}{\partial x_m} + \frac{\partial u_m(r)}{\partial x_i} \right) \quad (4.5)$$

- компоненти тензора деформації.

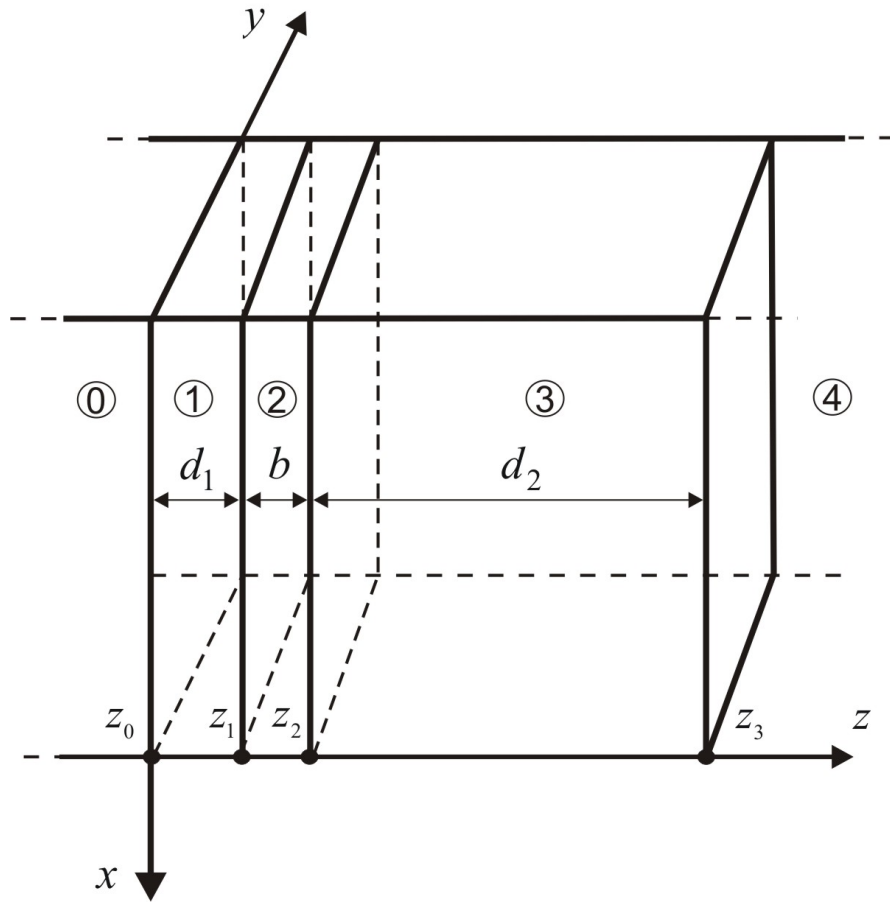


Рис. 4.1. Геометрична схема досліджуваної плоскої резонансно-тунельної наносистеми.

Згідно постановки задачі вважається, що поширення акустичних фоновів відбувається у напрямку осі Ox . В цьому разі у межах довільного p -го шару РТС, вона виявляється однорідною у площині Oxy . Це дозволяє шукати розв'язки рівняння (4.1) у вигляді:

$$\begin{aligned} u_i(r, t) = u_i(x, z, t) &= \sum_{p=1}^5 u_i^{(p)}(x, z, t) [\theta(z_p - z_{p-1}) - \theta(z_p - z_{p+1})] = \\ &= \sum_{p=1}^5 u_i^{(p)}(z) [\theta(z_p - z_{p-1}) - \theta(z_p - z_{p+1})] e^{i(\omega t - qx)}; \quad u_i(z) = \begin{pmatrix} u_1^{(p)}(z) \\ u_2^{(p)}(z) \\ u_3^{(p)}(z) \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (4.6)$$

де $u_1^{(p)}(z)$, $u_2^{(p)}(z)$, $u_3^{(p)}(z)$ - компоненти вектора зміщення у межах вибраного шару p - го РТС.

Тепер рівняння руху (4.1) з урахуванням співвідношень (4.3)-(4.6) набуває такого вигляду:

$$\left[\rho^{(p)} \omega^2 \delta_{ki} - C_{iklm}^{(p)} \frac{\partial^2}{\partial x_k \partial x_l} \right] u_i(z) e^{i(\omega t - qx)} = 0, \quad (4.7)$$

звідки отримується таке матричне рівняння виду:

$$\begin{bmatrix} -C_{44}^{(p)} \frac{d^2}{dz^2} + q^2 C_{11}^{(p)} & 0 & iq(C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(p)}) \frac{d}{dz} \\ 0 & -C_{44}^{(p)} \frac{d^2}{dz^2} + q^2 C_{66}^{(p)} & 0 \\ iq(C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(p)}) \frac{d}{dz} & 0 & -C_{33}^{(p)} \frac{d^2}{dz^2} + q^2 C_{44}^{(p)} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} u_1^{(p)}(z) \\ u_2^{(p)}(z) \\ u_3^{(p)}(z) \end{pmatrix} = \rho^{(p)} \omega^2 \begin{pmatrix} u_1^{(p)}(z) \\ u_2^{(p)}(z) \\ u_3^{(p)}(z) \end{pmatrix} \quad (4.8)$$

При отриманні виразу матричного рівняння (4.8) з рівняння ми врахували той факт, що оскільки шари досліджуваної наносистеми мають гексагональну кристалічну решітку типу вюрциту, то це дає змогу застосовуючи двоіндексні позначення Фойгта, згідно яких справедливі рівності:

$$C_{1111}^{(p)} = C_{11}^{(p)}; C_{1122}^{(p)} = C_{12}^{(p)}; C_{1133}^{(p)} = C_{13}^{(p)}; C_{1313}^{(p)} = C_{44}^{(p)}; C_{2323}^{(p)} = C_{55}^{(p)} = C_{44}^{(p)}; C_{1212}^{(p)} = C_{66}^{(p)};$$

$$C_{3333}^{(p)} = C_{33}^{(p)}. \text{ Тоді унаслідок таких перепозначень індексів тензор пружних констант}$$

$C_{iklm}^{(p)}$ з урахуванням цього має тепер двоіндексний вигляд ($C_{iklm}^{(p)} \rightarrow C_{ik}^{(p)}$) де в явному вигляді :

$$C_{ik}^{(p)} = \begin{pmatrix} C_{11}^{(p)} & C_{12}^{(p)} & C_{13}^{(p)} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12}^{(p)} & C_{11}^{(p)} & C_{13}^{(p)} & 0 & 0 & 0 \\ C_{13}^{(p)} & C_{13}^{(p)} & C_{33}^{(p)} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44}^{(p)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44}^{(p)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{66}^{(p)} \end{pmatrix}. \quad (4.9)$$

Тепер з системи рівнянь на відшукання власних значень (4.8) отримуються рівняння, що описують фононні моди:

$$-C_{44}^{(p)} \frac{d^2 u_1^{(p)}(z)}{dz^2} + iq(C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(p)}) \frac{du_3^{(p)}(z)}{dz} + (q^2 C_{11}^{(p)} - \rho^{(p)} \omega^2) u_1^{(p)}(z) = 0, \quad (4.10)$$

$$-C_{44}^{(p)} \frac{d^2 u_2^{(p)}(z)}{dz^2} + (q^2 C_{66}^{(p)} - \rho^{(p)} \omega^2) u_2^{(p)}(z) = 0, \quad (4.11)$$

$$-C_{33}^{(p)} \frac{d^2 u_3^{(p)}(z)}{dz^2} + iq(C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(p)}) \frac{du_1^{(p)}(z)}{dz} + (q^2 C_{44}^{(p)} - \rho^{(p)} \omega^2) u_3^{(p)}(z) = 0. \quad (4.12)$$

При цьому рівняння (4.11) описує так звані зсувні фононні моди, а система рівнянь (4.10) та (4.11) описує флексуральні та ділататіональні моди виникаючі в межах окремо взятого p -го шару досліджуваної РТС. Ці моди визначаються відповідно як: $u^{FL}(z) = u^{FL}(u_1^A(z), u_3^S(z))$ і $u^{DL}(z) = u^{DL}(u_1^S(z), u_3^A(z))$ відповідно, де індекси “S” та “A” відповідно позначають симетричну та антисиметричну функції від z . Якщо дотримуватись класифікації, що була уведена у ранній праці Вендлера [180], то ці акустичні моди (FL, DL) також можна де-факто називати флексуральними та ділататіональними або ж згинувими та розтягувальними відповідно.

Метод знаходження точних аналітичних розв’язків для флексуральних та ділататіональних акустичних мод полягає в наступному.

Флексуральні та ділататіональні моди в довільному p -му шарі досліджуваної наноструктури описуються системою диференціальних рівнянь:

$$\begin{cases} -C_{44}^{(p)} \frac{d^2 u_1^{(p)}(z)}{dz^2} + iq(C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(p)}) \frac{du_3^{(p)}(z)}{dz} + (q^2 C_{11}^{(p)} - \rho^{(p)} \omega^2) u_1^{(p)}(z) = 0; \\ -C_{33}^{(p)} \frac{d^2 u_3^{(p)}(z)}{dz^2} + iq(C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(p)}) \frac{du_1^{(p)}(z)}{dz} + (q^2 C_{44}^{(p)} - \rho^{(p)} \omega^2) u_3^{(p)}(z) = 0. \end{cases} \quad (4.13)$$

Уведенням позначень:

$$\begin{aligned} a_1^{(p)} &= C_{44}^{(p)}; a_2^{(p)} = a_2^{(p)}(q) = q(C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(p)}); a_3^{(p)} = a_3^{(p)}(q, \omega) = \rho^{(p)} \omega^2 - q^2 C_{11}^{(p)}; \\ a_4^{(p)} &= C_{33}^{(p)}; a_5^{(p)} = a_5^{(p)}(q, \omega) = \rho^{(p)} \omega^2 - q^2 C_{44}^{(p)} \end{aligned} \quad (4.14)$$

система (4.13) приводиться до вигляду:

$$\begin{cases} a_1^{(p)} \frac{d^2 u_1^{(p)}(z)}{dz^2} - i a_2^{(p)} \frac{du_3^{(p)}(z)}{dz} + a_3^{(p)} u_1^{(p)}(z) = 0; \\ a_4^{(p)} \frac{d^2 u_3^{(p)}(z)}{dz^2} - i a_2^{(p)} \frac{du_1^{(p)}(z)}{dz} + a_5^{(p)} u_3^{(p)}(z) = 0. \end{cases} \quad (4.15)$$

Якщо далі ввести такі позначення:

$$A^{(p)} = \begin{pmatrix} a_1^{(p)} & 0 \\ 0 & a_4^{(p)} \end{pmatrix}; B^{(p)} = \begin{pmatrix} 0 & -i a_2^{(p)} \\ -i a_2^{(p)} & 0 \end{pmatrix}; C^{(p)} = \begin{pmatrix} a_3^{(p)} & 0 \\ 0 & a_5^{(p)} \end{pmatrix} \quad (4.16)$$

то отримаємо диференціальне рівняння:

$$A^{(p)} \frac{d^2 u^{(p)}(z)}{dz^2} + B^{(p)} \frac{du^{(p)}(z)}{dz} + C^{(p)} u^{(p)}(z) = 0; u^{(p)}(z) = \begin{pmatrix} u_1^{(p)}(z) \\ u_3^{(p)}(z) \end{pmatrix}. \quad (4.17)$$

Розв'язки рівняння (4.17) будемо шукати у вигляді

$$u^{(p)}(z) = \alpha^{(p)} e^{\lambda z}; \alpha^{(p)} = \begin{pmatrix} \alpha_1^{(p)} \\ \alpha_3^{(p)} \end{pmatrix} \quad (4.18)$$

звідки, отримуємо рівняння на знаходження власних значень λ і функцій $\alpha^{(p)}$:

$$(A^{(p)} \lambda^2 + B^{(p)} \lambda + C^{(p)}) \alpha^{(p)} = 0. \quad (4.19)$$

З виразу (4.19) отримуємо рівняння на відшукування власних значень λ :

$$\left| A^{(p)} \lambda^2 + B^{(p)} \lambda + C^{(p)} \right| = 0; \begin{vmatrix} a_1^{(p)} \lambda^2 + a_3^{(p)} & -i a_2^{(p)} \lambda \\ -i a_2^{(p)} \lambda & a_4^{(p)} \lambda^2 + a_5^{(p)} \end{vmatrix} = 0,$$

що є еквівалентним такому біквдратному рівнянню:

$$\lambda^4 + \left(\frac{a_3^{(p)}}{a_1^{(p)}} + \frac{a_5^{(p)}}{a_4^{(p)}} + \frac{a_2^{(p)2}}{a_1^{(p)} a_4^{(p)}} \right) \lambda^2 + \frac{a_3^{(p)} a_5^{(p)}}{a_1^{(p)} a_4^{(p)}} = 0, \quad (4.20)$$

його розв'язки, з урахуванням позначень (4.14) є такими:

$$\begin{aligned} \lambda_{1,2,3,4} = \lambda_{1,2,3,4}(q, \omega) &= \pm \sqrt{-\frac{1}{2} \left(\frac{a_3^{(p)}}{a_1^{(p)}} + \frac{a_5^{(p)}}{a_4^{(p)}} + \frac{a_2^{(p)2}}{a_1^{(p)} a_4^{(p)}} \right)} \pm \sqrt{\left(\frac{a_3^{(p)}}{a_1^{(p)}} + \frac{a_5^{(p)}}{a_4^{(p)}} + \frac{a_2^{(p)2}}{a_1^{(p)} a_4^{(p)}} \right)^2 - 4 \frac{a_3^{(p)} a_5^{(p)}}{a_1^{(p)} a_4^{(p)}}} \\ &= \pm \left\{ -\frac{q^2 (C_{13}^{(p)2} - C_{11}^{(p)} C_{13}^{(p)} + 2 C_{13}^{(p)} C_{44}^{(p)}) + (C_{33}^{(p)} + C_{44}^{(p)})^2 \omega^2}{2 C_{33}^{(p)} C_{44}^{(p)}} \pm \right. \\ &\quad \left. \left\{ \pm \left(\frac{q^2 (C_{13}^{(p)2} - C_{11}^{(p)} C_{13}^{(p)} + 2 C_{13}^{(p)} C_{44}^{(p)}) + (C_{33}^{(p)} + C_{44}^{(p)})^2 \omega^2}{C_{33}^{(p)} C_{44}^{(p)}} \right)^2 - \frac{4(\rho^{(p)} \omega^2 - q^2 C_{11}^{(p)}) (\rho^{(p)} \omega^2 - q^2 C_{44}^{(p)})}{C_{33}^{(p)} C_{44}^{(p)}} \right\}^{1/2} \right\}^{1/2}, \\ \lambda_1 &= -\lambda_2; \lambda_3 = -\lambda_4. \end{aligned} \quad (4.21)$$

Власні функції $\alpha^{(p)}$ враховуючи (4.21) знаходяться з матричного рівняння:

$$\begin{pmatrix} a_1^{(p)} \lambda_n^2 + a_3^{(p)} & -ia_2^{(p)} \lambda_n \\ -ia_2^{(p)} \lambda_n & a_4^{(p)} \lambda_n^2 + a_5^{(p)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_{1,n}^{(p)} \\ \alpha_{3,n}^{(p)} \end{pmatrix} = 0; \quad n = 1-4. \quad (4.22)$$

Застосовуючи до рівняння (4.22) теорему Гамільтона-Келі будемо мати:

$$\begin{aligned} \alpha_{1,n}^{(p)} &= -ia_2^{(p)} \lambda_n = -iq(C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(p)}) \lambda_n; \\ \alpha_{3,n}^{(p)} &= -(a_1^{(p)} \lambda_n^2 + a_3^{(p)}) = -(C_{44}^{(p)} \lambda_n^2 + \rho^{(p)} \omega^2 - q^2 C_{11}^{(p)}). \end{aligned} \quad (4.23)$$

Нехай тепер $\|\alpha_n^{(p)}\|$ - це норма вектора $\alpha_n^{(p)}$. Тоді, беручи до уваги (4.23) вона буде такою:

$$\|\alpha_n^{(p)}(q)\| = \frac{1}{\sqrt{|\alpha_{1,n}^{(p)}|^2 + |\alpha_{3,n}^{(p)}|^2}} = \frac{1}{\sqrt{(C_{44}^{(p)} \lambda_n^2 + \rho^{(p)} \omega^2 - q^2 C_{11}^{(p)})^2 + q^2 \lambda_n^2 (C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(p)})^2}}. \quad (4.24)$$

Отже, остаточно розв'язки системи диференціальних рівнянь (4.15) будуть такими:

$$\begin{aligned} u_1^{(p)}(z) &= \frac{\alpha_{1,1}^{(p)}}{\|\alpha_1^{(p)}\|} A_1^{(p)} e^{\lambda_1 z} + \frac{\alpha_{1,2}^{(p)}}{\|\alpha_2^{(p)}\|} A_2^{(p)} e^{\lambda_2 z} + \frac{\alpha_{1,3}^{(p)}}{\|\alpha_3^{(p)}\|} A_3^{(p)} e^{\lambda_3 z} + \frac{\alpha_{1,4}^{(p)}}{\|\alpha_4^{(p)}\|} A_4^{(p)} e^{\lambda_4 z} = \\ &= -iq(C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(p)}) \left(\frac{\lambda_1}{\|\alpha_1^{(p)}\|} (A_1^{(p)} e^{\lambda_1 z} - A_2^{(p)} e^{-\lambda_1 z}) + \frac{\lambda_2}{\|\alpha_2^{(p)}\|} (A_3^{(p)} e^{\lambda_2 z} - A_4^{(p)} e^{-\lambda_2 z}) \right) = \\ &= -iq(C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(p)}) \sum_{s=1}^2 \left(\tilde{A}_{2s-1}^{(p)} e^{\lambda_s^{(p)} z} - \tilde{A}_{2s}^{(p)} e^{-\lambda_s^{(p)} z} \right) / \|\alpha_s^{(p)}(q)\|; \\ u_3^{(p)}(z) &= \frac{\alpha_{3,1}^{(p)}}{\|\alpha_1^{(p)}\|} A_1^{(p)} e^{\lambda_1 z} + \frac{\alpha_{3,2}^{(p)}}{\|\alpha_2^{(p)}\|} A_2^{(p)} e^{\lambda_2 z} + \frac{\alpha_{3,3}^{(p)}}{\|\alpha_3^{(p)}\|} A_3^{(p)} e^{\lambda_3 z} + \frac{\alpha_{3,4}^{(p)}}{\|\alpha_4^{(p)}\|} A_4^{(p)} e^{\lambda_4 z} = \\ &= -\frac{(C_{44}^{(p)} \lambda_1^2 + \rho^{(p)} \omega^2 - q^2 C_{11}^{(p)})}{\|\alpha_1^{(p)}\|} (A_1^{(p)} e^{\lambda_1 z} + A_2^{(p)} e^{-\lambda_1 z}) - \\ &= -\frac{(C_{44}^{(p)} \lambda_2^2 + \rho^{(p)} \omega^2 - q^2 C_{11}^{(p)})}{\|\alpha_2^{(p)}\|} (A_3^{(p)} e^{\lambda_2 z} + A_4^{(p)} e^{-\lambda_2 z}) = \\ &= -\sum_{s=1}^2 \left\{ C_{44}^{(p)} (\lambda_s^{(p)})^2 + \rho^{(p)} \omega^2 - q^2 C_{11}^{(p)} \right\} \left(\tilde{A}_{2s-1}^{(p)} e^{\lambda_s^{(p)} z} + \tilde{A}_{2s}^{(p)} e^{-\lambda_s^{(p)} z} \right) / \|\alpha_s^{(p)}(q)\|. \end{aligned} \quad (4.25)$$

Розв'язки рівняння (4.11) мають для усієї РТС такий вигляд:

$$\begin{aligned}
u_2(q, \omega, z) &= u_2^{(0)}(q, \omega, z)\theta(-z) + u_2^{(4)}(q, \omega, z)\theta(z - z_3) + \\
&+ \sum_{p=1}^3 u_2^{(p)}(q, \omega, z)[\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)] = \\
&= B_2^{(0)} e^{\chi_2^{(0)}(q, \omega)z} \theta(-z) + \sum_{p=1}^3 \left[A_2^{(p)} e^{-\chi_2^{(p)}(q, \omega)z} + B_2^{(p)} e^{\chi_2^{(p)}(q, \omega)z} \right] [\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)] + \\
&+ A_2^{(4)} e^{-\chi_2^{(4)}(q, \omega)(z - z_3)} \theta(z - z_3), \quad \chi_2^{(p)}(q, \omega) = \sqrt{q^2 \frac{C_{66}^{(p)}}{C_{44}^{(p)}} - \frac{\rho^{(p)} \omega^2}{C_{44}^{(p)}}},
\end{aligned} \tag{4.26}$$

де у виразі (4.26) враховано, що величини зміщень $u_2(q, \omega, z)$ не можуть необмежено зростати у зовнішніх напівпровідникових середовищах зліва та справа від РТС, що задається умовою:

$$u_2(q, \omega, z) \Big|_{z \rightarrow \pm\infty} \rightarrow 0, \tag{4.27}$$

яка забезпечується підстановкою $B_2^{(0)} = A_2^{(4)} = 0$.

Розв'язки системи диференціальних рівнянь (4.10), (4.12), що отримані з використанням підходу описаному вище мають такий вигляд для всієї наносистеми:

$$\begin{aligned}
u_1(q, \omega, z) &= u_1^{(0)}(q, \omega, z)\theta(-z) + u_1^{(4)}(q, \omega, z)\theta(z - z_3) + \\
&+ \sum_{p=1}^3 u_1^{(p)}(q, \omega, z)[\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)] = \\
&= -iq(C_{13}^{(0)} + C_{44}^{(0)}) \left[\frac{\lambda_1}{\|\alpha_1^{(p)}\|} A_1^{(0)} e^{\lambda_1 z} + \frac{\lambda_2}{\|\alpha_2^{(p)}\|} A_3^{(0)} e^{\lambda_2 z} \right] \theta(-z) + \\
&+ iq(C_{13}^{(4)} + C_{44}^{(4)}) \left[\frac{\lambda_1}{\|\alpha_1^{(p)}\|} A_2^{(4)} e^{-\lambda_1 z} + \frac{\lambda_2}{\|\alpha_2^{(p)}\|} A_4^{(4)} e^{-\lambda_2 z} \right] \theta(z - z_3) - \\
&- iq \sum_{p=1}^3 (C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(p)}) \left[\frac{\lambda_1}{\|\alpha_1^{(p)}\|} (A_1^{(p)} e^{\lambda_1 z} - A_2^{(p)} e^{-\lambda_1 z}) + \frac{\lambda_2}{\|\alpha_2^{(p)}\|} (A_3^{(p)} e^{\lambda_2 z} - A_4^{(p)} e^{-\lambda_2 z}) \right] [\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)]
\end{aligned} \tag{4.28}$$

$$\begin{aligned}
u_3(q, \omega, z) &= u_3^{(0)}(q, \omega, z)\theta(-z) + u_3^{(4)}(q, \omega, z)\theta(z - z_3) + \\
&+ \sum_{p=1}^3 u_3^{(p)}(q, \omega, z) [\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)] = \\
&= \left[-\frac{(C_{44}^{(0)} \lambda_1^2 + \rho^{(0)} \omega^2 - q^2 C_{11}^{(p)})}{\|\alpha_1^{(p)}\|} A_1^{(0)} e^{\lambda_1 z} - \frac{(C_{44}^{(0)} \lambda_2^2 + \rho^{(0)} \omega^2 - q^2 C_{11}^{(0)})}{\|\alpha_2^{(p)}\|} A_3^{(0)} e^{\lambda_2 z} \right] \theta(-z) + \\
&+ \left[-\frac{(C_{44}^{(4)} \lambda_1^2 + \rho^{(4)} \omega^2 - q^2 C_{11}^{(4)})}{\|\alpha_1^{(p)}\|} A_2^{(4)} e^{-\lambda_1 z} - \frac{(C_{44}^{(4)} \lambda_2^2 + \rho^{(4)} \omega^2 - q^2 C_{11}^{(4)})}{\|\alpha_2^{(p)}\|} A_4^{(4)} e^{-\lambda_2 z} \right] \theta(z - z_3) + \\
&+ \sum_{p=1}^3 \left[-\frac{(C_{44}^{(p)} \lambda_1^2 + \rho^{(p)} \omega^2 - q^2 C_{11}^{(p)})}{\|\alpha_1^{(p)}\|} (A_1^{(p)} e^{\lambda_1 z} + A_2^{(p)} e^{-\lambda_1 z}) - \frac{(C_{44}^{(p)} \lambda_2^2 + \rho^{(p)} \omega^2 - q^2 C_{11}^{(p)})}{\|\alpha_2^{(p)}\|} \times \right. \\
&\times \left. (A_3^{(p)} e^{\lambda_2 z} + A_4^{(p)} e^{-\lambda_2 z}) \right] [\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)] \Big\} \\
\|\alpha_n^{(p)}\| &= 1 / \sqrt{(C_{44}^{(p)} \lambda_n^2 + \rho^{(p)} \omega^2 - q^2 C_{11}^{(p)})^2 + q^2 \lambda_n^2 (C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(p)})^2}. \tag{4.29}
\end{aligned}$$

де λ_1, λ_2 - корені характеристичного рівняння системи (4.10), (4.12), а також враховано, що $A_2^{(0)} = A_4^{(0)} = A_1^{(4)} = A_3^{(4)} = 0$, що визначається аналогічно до умови (4.27), а саме:

$$u_{1(3)}(q, \omega, z) \Big|_{z \rightarrow \pm\infty} \rightarrow 0. \tag{4.30}$$

Зв'язок між коефіцієнтами $A_2^{(p)}, B_2^{(p)}$ p -го і $p+1$ -го шарів РТС для розв'язків (4.26) встановлюється за допомогою граничних умов для зміщень $u_2^{(p)}(q, \omega, z)$ та компонент $\sigma_{yz}(q, \omega, z)$ тензора напружень:

$$\left[\begin{aligned} u_2^{(p)}(q, \omega, z) \Big|_{z=z_p-\varepsilon} &= u_2^{(p+1)}(q, \omega, z) \Big|_{z=z_p+\varepsilon} \\ \sigma_{yz}^{(p)}(q, \omega, z) \Big|_{z=z_p-\varepsilon} &= \sigma_{yz}^{(p+1)}(q, \omega, z) \Big|_{z=z_p+\varepsilon} \end{aligned} \right], \tag{4.31}$$

де компоненти тензора напружень такі:

$$\sigma_{yz}^{(p)}(q, \omega, z) = \sigma_{23}^{(p)}(q, \omega, z) = \frac{1}{2} C_{44}^{(p)} \left(\frac{\partial u_z^{(p)}(x, z)}{\partial y} + \frac{\partial u_y^{(p)}(x, z)}{\partial z} \right) = \frac{1}{2} C_{44}^{(p)} \frac{du_2^{(p)}(z)}{dz} e^{i(\omega t - qx)} =$$

$$= \begin{cases} \frac{1}{2} C_{44}^{(0)} \chi_2^{(0)}(q, \omega) B_2^{(0)} e^{\chi_2^{(0)}(q, \omega) z} e^{i(\omega t - qx)}, & z < 0; \\ \frac{1}{2} C_{44}^{(p)} \chi_2^{(p)}(q, \omega) \left(-A_2^{(p)} e^{-\chi_2^{(p)}(q, \omega) z} + B_2^{(p)} e^{\chi_2^{(p)}(q, \omega) z} \right) e^{i(\omega t - qx)}, & \text{всередині РТС}; \\ -\frac{1}{2} C_{44}^{(4)} \chi_2^{(4)}(q, \omega) A_2^{(4)} e^{-\chi_2^{(4)}(q, \omega)(z - z_3)} e^{i(\omega t - qx)}, & z > z_3 \end{cases}$$
(4.32)

Використовуючи граничні умови (4.31) для двох сусідніх шарів наносистеми можемо записати:

$$A_2^{(p)} e^{-\chi_2^{(p)}(q, \omega) z_p} + B_2^{(p)} e^{\chi_2^{(p)}(q, \omega) z_p} = A_2^{(p+1)} e^{-\chi_2^{(p+1)}(q, \omega) z_p} + B_2^{(p+1)} e^{\chi_2^{(p+1)}(q, \omega) z_p};$$

$$C_{44}^{(p)} \chi_2^{(p)}(q, \omega) \left(-A_2^{(p)} e^{-\chi_2^{(p)}(q, \omega) z_p} + B_2^{(p)} e^{\chi_2^{(p)}(q, \omega) z_p} \right) =$$

$$= C_{44}^{(p+1)} \chi_2^{(p+1)}(q, \omega) \left(-A_2^{(p+1)} e^{-\chi_2^{(p+1)}(q, \omega) z_p} + B_2^{(p+1)} e^{\chi_2^{(p+1)}(q, \omega) z_p} \right).$$

Послідовно виражаючи матрицю коефіцієнтів $(A_2^{(p)} B_2^{(p)})^T$ через матрицю $(A_2^{(p+1)} B_2^{(p+1)})^T$ використовуючи співвідношення наведені вище отримаємо трансфер-матрицю для двох сусідніх шарів p і $p+1$. Тоді за допомогою послідовного застосування методу трансфер-матриці отримується:

$$\begin{pmatrix} 0 \\ B_2^{(0)} \end{pmatrix} = T_2^{(0,4)}(q, \omega) \begin{pmatrix} A_2^{(4)} \\ 0 \end{pmatrix}; T_2^{(0,4)}(q, \omega) = T_2^{(0,1)}(q, \omega) T_2^{(1,2)}(q, \omega) T_2^{(2,3)}(q, \omega) T_2^{(3,4)}(q, \omega);$$

$$T_2^{(p,p+1)}(q, \omega) = \begin{bmatrix} t_{11}^{(p,p+1)} & t_{12}^{(p,p+1)} \\ t_{21}^{(p,p+1)} & t_{22}^{(p,p+1)} \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 + \frac{C_{44}^{(p+1)}}{C_{44}^{(p)}} & \left(1 - \frac{C_{44}^{(p+1)}}{C_{44}^{(p)}} \right) e^{2\chi_2^{(0)}(q, \omega) z_p} \\ \left(1 - \frac{C_{44}^{(p+1)}}{C_{44}^{(p)}} \right) e^{-2\chi_2^{(0)}(q, \omega) z_p} & 1 + \frac{C_{44}^{(p+1)}}{C_{44}^{(p)}} \end{bmatrix}. \quad (4.33)$$

Отже, тепер спектр зсувних акустичних фононів $\Omega^{(SH)}(q) = \hbar \omega(q)$ визначається з дисперсійного рівняння:

$$\det(T_2^{(0,4)}(q, \omega)) = 0. \quad (4.34)$$

Діючи аналогічним чином, для коефіцієнтів розв'язків $A_1^{(p)}$, $A_2^{(p)}$, $A_3^{(p)}$, $A_4^{(p)}$ в межах p -го і $p+1$ -го шарів РТС зв'язок встановлюється за допомогою граничних умов для компонент $u_{1(3)}^{(p)}(q, \omega, z)$ та компонент тензора напружень $\sigma_{xz}(q, \omega, z)$, $\sigma_{zz}(q, \omega, z)$ знаходимо:

$$\left[\begin{array}{l} u_1^{(p)}(q, \omega, z)|_{z=z_p-\varepsilon} = u_1^{(p+1)}(q, \omega, z)|_{z=z_p+\varepsilon} \\ u_3^{(p)}(q, \omega, z)|_{z=z_p-\varepsilon} = u_3^{(p+1)}(q, \omega, z)|_{z=z_p+\varepsilon} \\ \sigma_{xz}^{(p)}(q, \omega, z)|_{z=z_p-\varepsilon} = \sigma_{xz}^{(p+1)}(q, \omega, z)|_{z=z_p+\varepsilon} \\ \sigma_{zz}^{(p)}(q, \omega, z)|_{z=z_p-\varepsilon} = \sigma_{zz}^{(p+1)}(q, \omega, z)|_{z=z_p+\varepsilon} \end{array} \right. \quad (4.35)$$

де

$$\begin{aligned} \sigma_{xz}^{(p)}(q, \omega, z) = \sigma_{13}^{(p)}(q, \omega, z) &= \frac{1}{2} C_{44}^{(p)} \left(\frac{\partial u_z^{(p)}(x, z)}{\partial x} + \frac{\partial u_x^{(p)}(x, z)}{\partial z} \right) = \\ &= \frac{1}{2} C_{44}^{(p)} \left(-iqu_3^{(p)}(z) + \frac{du_1^{(p)}(z)}{dz} \right) e^{i(\omega t - qx)} = \\ &= \left[\begin{array}{l} -\frac{1}{2} iq C_{44}^{(0)} \left[\frac{(q^2 C_{11}^{(0)} + C_{13}^{(0)} \lambda_1^2 - \rho^{(0)} \omega^2)}{\|\alpha_1^{(p)}\|} A_1^{(0)} e^{\lambda_1 z} + \frac{(q^2 C_{11}^{(0)} + C_{13}^{(0)} \lambda_2^2 - \rho^{(0)} \omega^2)}{\|\alpha_2^{(p)}\|} A_3^{(0)} e^{\lambda_2 z} \right] e^{i(\omega t - qx)}, z < 0; \\ -\frac{1}{2} iq C_{44}^{(p)} \left[\frac{(q^2 C_{11}^{(p)} + C_{13}^{(p)} \lambda_1^2 - \rho^{(p)} \omega^2)}{\|\alpha_1^{(p)}\|} (A_1^{(p)} e^{\lambda_1 z} + A_2^{(p)} e^{-\lambda_1 z}) + \right. \\ \left. + \frac{(q^2 C_{11}^{(p)} + C_{13}^{(p)} \lambda_2^2 - \rho^{(p)} \omega^2)}{\|\alpha_2^{(p)}\|} (A_3^{(p)} e^{\lambda_2 z} + A_4^{(p)} e^{-\lambda_2 z}) \right], \text{ всередині РТС}; \\ -\frac{1}{2} iq C_{44}^{(4)} \left[\frac{(q^2 C_{11}^{(4)} + C_{13}^{(4)} \lambda_1^2 - \rho^{(4)} \omega^2)}{\|\alpha_1^{(p)}\|} A_2^{(0)} e^{-\lambda_1 z} + \frac{(q^2 C_{11}^{(4)} + C_{13}^{(4)} \lambda_2^2 - \rho^{(0)} \omega^2)}{\|\alpha_2^{(p)}\|} A_4^{(4)} e^{-\lambda_2 z} \right] e^{i(\omega t - qx)}, z > z_3 \end{array} \right] \end{aligned} \quad (4.36)$$

$$\begin{aligned}
\sigma_{zz}^{(p)}(q, \omega, z) &= \sigma_{33}^{(p)}(q, \omega, z) = C_{13}^{(p)} \nabla \cdot \mathbf{u}_i^{(p)}(x, z) + (C_{33}^{(p)} - C_{13}^{(p)}) \frac{\partial u_i^{(p)}(x, z)}{\partial z} = \\
&= -iq C_{13}^{(p)} u_1^{(p)}(z) + C_{33}^{(p)} \frac{du_3^{(p)}(z)}{dz} = \\
&= \left[\begin{aligned}
& - \left\{ \frac{\lambda_1}{\|\alpha_1^{(p)}\|} \left[(C_{13}^{(0)}(C_{13}^{(0)} + C_{44}^{(0)}) - C_{11}^{(0)} C_{33}^{(0)}) q^2 + C_{33}^{(0)} (C_{44}^{(0)} \lambda_1^2 + \rho \omega^2) \right] A_1^{(0)} e^{\lambda_1 z} + \right. \\
& \left. + \frac{\lambda_2}{\|\alpha_2^{(p)}\|} \left[(C_{13}^{(0)}(C_{13}^{(0)} + C_{44}^{(0)}) - C_{11}^{(0)} C_{33}^{(0)}) q^2 + C_{33}^{(0)} (C_{44}^{(0)} \lambda_2^2 + \rho \omega^2) \right] A_3^{(0)} e^{\lambda_2 z} \right\}, \quad z < 0; \\
& \frac{\lambda_1}{\|\alpha_1^{(p)}\|} \left[(C_{13}^{(p)}(C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(p)}) - C_{11}^{(p)} C_{33}^{(p)}) q^2 + C_{33}^{(p)} (C_{44}^{(p)} \lambda_1^2 + \rho \omega^2) \right] (-A_1^{(p)} e^{\lambda_1 z} + A_2^{(0)} e^{-\lambda_1 z}) + \\
& + \frac{\lambda_2}{\|\alpha_2^{(p)}\|} \left[(C_{13}^{(p)}(C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(p)}) - C_{11}^{(p)} C_{33}^{(p)}) q^2 + C_{33}^{(p)} (C_{44}^{(p)} \lambda_2^2 + \rho \omega^2) \right] (-A_3^{(p)} e^{\lambda_2 z} + A_{41}^{(p)} e^{-\lambda_2 z}), \\
& \text{всередині РТС} \\
& \frac{\lambda_1}{\|\alpha_1^{(p)}\|} \left[(C_{13}^{(4)}(C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(4)}) - C_{11}^{(4)} C_{33}^{(4)}) q^2 + C_{33}^{(4)} (C_{44}^{(4)} \lambda_1^2 + \rho \omega^2) \right] A_2^{(4)} e^{-\lambda_1 z} + \\
& + \frac{\lambda_2}{\|\alpha_2^{(p)}\|} \left[(C_{13}^{(4)}(C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(4)}) - C_{11}^{(4)} C_{33}^{(4)}) q^2 + C_{33}^{(4)} (C_{44}^{(4)} \lambda_2^2 + \rho \omega^2) \right] A_4^{(4)} e^{-\lambda_2 z}, \quad z > z_3
\end{aligned} \right]
\end{aligned} \tag{4.37}$$

Послідовно виражаючи матрицю коефіцієнтів $(A_1^{(p)} \ A_2^{(p)} \ A_3^{(p)} \ A_4^{(p)})^T$ через матрицю $(A_1^{(p+1)} \ A_2^{(p+1)} \ A_3^{(p+1)} \ A_4^{(p+1)})^T$ використовуючи співвідношення наведені вище отримаємо трансфер-матрицю для двох сусідніх шарів p і $p+1$:

$$\begin{aligned}
& \left(C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(p)} \right) \left[\frac{\lambda_1}{\|\alpha_1^{(p)}\|} \left(A_1^{(p)} e^{\lambda_1 z_p} - A_2^{(p)} e^{-\lambda_1 z_p} \right) + \frac{\lambda_2}{\|\alpha_2^{(p)}\|} \left(A_3^{(p)} e^{\lambda_2 z_p} - A_4^{(p)} e^{-\lambda_2 z_p} \right) \right] = \\
& = \left(C_{13}^{(p+1)} + C_{44}^{(p+1)} \right) \left[\frac{\lambda_1}{\|\alpha_1^{(p+1)}\|} \left(A_1^{(p+1)} e^{\lambda_1 z_p} - A_2^{(p+1)} e^{-\lambda_1 z_p} \right) + \frac{\lambda_2}{\|\alpha_2^{(p+1)}\|} \left(A_3^{(p+1)} e^{\lambda_2 z_p} - A_4^{(p+1)} e^{-\lambda_2 z_p} \right) \right]; \\
& - \frac{\left(C_{44}^{(p)} \lambda_1^2 + \rho^{(p)} \omega^2 - q^2 C_{11}^{(p)} \right)}{\|\alpha_1^{(p)}\|} \left(A_1^{(p)} e^{\lambda_1 z_p} + A_2^{(p)} e^{-\lambda_1 z_p} \right) - \\
& - \frac{\left(C_{44}^{(p)} \lambda_2^2 + \rho^{(p)} \omega^2 - q^2 C_{11}^{(p)} \right)}{\|\alpha_2^{(p)}\|} \left(A_3^{(p)} e^{\lambda_2 z_p} + A_4^{(p)} e^{-\lambda_2 z_p} \right) = \\
& = - \frac{\left(C_{44}^{(p+1)} \lambda_1^2 + \rho^{(p+1)} \omega^2 - q^2 C_{11}^{(p+1)} \right)}{\|\alpha_1^{(p+1)}\|} \left(A_1^{(p+1)} e^{\lambda_1 z_p} + A_2^{(p+1)} e^{-\lambda_1 z_p} \right) - \\
& - \frac{\left(C_{44}^{(p+1)} \lambda_2^2 + \rho^{(p+1)} \omega^2 - q^2 C_{11}^{(p+1)} \right)}{\|\alpha_2^{(p+1)}\|} \left(A_3^{(p+1)} e^{\lambda_2 z_p} + A_4^{(p+1)} e^{-\lambda_2 z_p} \right); \\
& C_{44}^{(p)} \left[\frac{\left(q^2 C_{11}^{(p)} + C_{13}^{(p)} \lambda_1^2 - \rho^{(p)} \omega^2 \right)}{\|\alpha_1^{(p)}\|} \left(A_1^{(p)} e^{\lambda_1 z_p} + A_2^{(p)} e^{-\lambda_1 z_p} \right) + \right. \\
& \left. + \frac{\left(q^2 C_{11}^{(p)} + C_{13}^{(p)} \lambda_2^2 - \rho^{(p)} \omega^2 \right)}{\|\alpha_2^{(p)}\|} \left(A_3^{(p)} e^{\lambda_2 z_p} + A_4^{(p)} e^{-\lambda_2 z_p} \right) \right] = \\
& C_{44}^{(p+1)} \left[\frac{\left(q^2 C_{11}^{(p+1)} + C_{13}^{(p+1)} \lambda_1^2 - \rho^{(p+1)} \omega^2 \right)}{\|\alpha_1^{(p+1)}\|} \left(A_1^{(p+1)} e^{\lambda_1 z_p} + A_2^{(p+1)} e^{-\lambda_1 z_p} \right) + \right. \\
& \left. + \frac{\left(q^2 C_{11}^{(p+1)} + C_{13}^{(p+1)} \lambda_2^2 - \rho^{(p+1)} \omega^2 \right)}{\|\alpha_2^{(p+1)}\|} \left(A_3^{(p+1)} e^{\lambda_2 z_p} + A_4^{(p+1)} e^{-\lambda_2 z_p} \right) \right]; \\
& \frac{\lambda_1}{\|\alpha_1^{(p)}\|} \left[\left(C_{13}^{(p)} \left(C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(p)} \right) - C_{11}^{(p)} C_{33}^{(p)} \right) q^2 + C_{33}^{(p)} \left(C_{44}^{(p)} \lambda_1^2 + \rho \omega^2 \right) \right] \left(-A_1^{(p)} e^{\lambda_1 z_p} + A_2^{(0)} e^{-\lambda_1 z_p} \right) + \\
& + \frac{\lambda_2}{\|\alpha_2^{(p)}\|} \left[\left(C_{13}^{(p)} \left(C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(p)} \right) - C_{11}^{(p)} C_{33}^{(p)} \right) q^2 + C_{33}^{(p)} \left(C_{44}^{(p)} \lambda_2^2 + \rho \omega^2 \right) \right] \left(-A_3^{(p)} e^{\lambda_2 z_p} + A_{41}^{(p)} e^{-\lambda_2 z_p} \right) =
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{\lambda_1}{\|\alpha_1^{(p+1)}\|} \left[(C_{13}^{(p+1)}(C_{13}^{(p+1)} + C_{44}^{(p+1)}) - C_{11}^{(p)}C_{33}^{(p+1)})q^2 + C_{33}^{(p+1)}(C_{44}^{(p+1)}\lambda_1^2 + \rho^{(p)}\omega^2) \right] \\
& \times \left(-A_1^{(p+1)}e^{\lambda_1 z_p} + A_2^{(p+1)}e^{-\lambda_1 z_p} \right) + \\
& + \frac{\lambda_2}{\|\alpha_2^{(p+1)}\|} \left[(C_{13}^{(p+1)}(C_{13}^{(p+1)} + C_{44}^{(p+1)}) - C_{11}^{(p+1)}C_{33}^{(p+1)})q^2 + C_{33}^{(p+1)}(C_{44}^{(p)}\lambda_2^2 + \rho^{(p)}\omega^2) \right] \\
& \times \left(-A_3^{(p+1)}e^{\lambda_2 z_p} + A_4^{(p+1)}e^{-\lambda_2 z_p} \right).
\end{aligned}$$

Використовуючи тепер послідовно граничні умови (4.35) за допомогою методу трансфер-матриці отримується:

$$\begin{pmatrix} A_1^{(0)} \\ B_1^{(0)} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = T_{1,3}^{(0,4)}(q, \omega) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ C_1^{(4)} \\ D_1^{(4)} \end{pmatrix}; \quad T_{1,3}^{(0,4)}(q, \omega) = T_{1,3}^{(0,1)}(q, \omega) T_{1,3}^{(1,2)}(q, \omega) T_2^{(2,3)}(q, \omega) T_{1,3}^{(3,4)}(q, \omega);$$

$$T_{1,3}^{(p,p+1)} = (t_{1,3}^{(p)})^{-1} t_{1,3}^{(p+1)}; \quad t_{1,3}^{(p)} = \begin{pmatrix} \eta_{1,1}^{(p)} e^{\lambda_1 z} & \eta_{1,2}^{(p)} e^{\lambda_2 z} & -\eta_{1,1}^{(p)} e^{-\lambda_1 z} & -\eta_{1,2}^{(p)} e^{-\lambda_2 z} \\ \eta_{3,1}^{(p)} e^{\lambda_1 z} & \eta_{3,2}^{(p)} e^{\lambda_2 z} & -\eta_{3,1}^{(p)} e^{-\lambda_1 z} & -\eta_{3,2}^{(p)} e^{-\lambda_2 z} \\ \beta_{3,1}^{(p)} e^{\lambda_1 z} & \beta_{3,2}^{(p)} e^{\lambda_2 z} & -\beta_{3,1}^{(p)} e^{-\lambda_1 z} & -\beta_{3,2}^{(p)} e^{-\lambda_2 z} \\ \gamma_{3,1}^{(p)} e^{\lambda_1 z} & \gamma_{3,2}^{(p)} e^{\lambda_2 z} & -\gamma_{3,1}^{(p)} e^{-\lambda_1 z} & -\gamma_{3,2}^{(p)} e^{-\lambda_2 z} \end{pmatrix} \quad (4.38)$$

де уведено такі позначення:

$$\begin{aligned}
\eta_{1,n}^{(p)} &= -iq(C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(p)})\lambda_n / \|\alpha_n^{(p)}\|; \quad \eta_{3,n}^{(p)} = -(C_{44}^{(p)}\lambda_n^2 + \rho^{(p)}\omega^2 - q^2 C_{11}^{(p)}) / \|\alpha_n^{(p)}\|, \\
\beta_{3,n}^{(p)} &= -\frac{1}{2}iqC_{44}^{(p)}(q^2 C_{11}^{(p)} + C_{13}^{(p)}\lambda_n^2 - \rho^{(p)}\omega^2) / \|\alpha_n^{(p)}\|, \\
\gamma_{3,n}^{(p)} &= -\lambda_n \left[(C_{13}^{(p)}(C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(p)}) - C_{11}^{(p)}C_{33}^{(p)})q^2 + C_{33}^{(p)}(C_{44}^{(p)}\lambda_n^2 + \rho\omega^2) \right] / \|\alpha_n^{(p)}\|, \quad n = 1, 2.
\end{aligned} \quad (4.39)$$

Отже, спектр флексуральних та ділататіональних мод акустичних фононів $\Omega^{(SA,AS)}(q) = \hbar\omega(q)$ визначається з дисперсійного рівняння:

$$\det(T_{1,3}^{(0,4)}(q, \omega)) = 0. \quad (4.40)$$

В подальшому введенням коефіцієнтів:

$$\begin{aligned}
a_2^{(4)} &= A_2^{(4)} / B_2^{(0)}; A_2^{(p)} = A_2^{(p)} / B_2^{(0)}; b_2^{(p)} = B_2^{(p)} / B_2^{(0)}; \\
b_1^{(0)} &= B_1^{(0)} / A_1^{(0)}; c_1^{(4)} = C_1^{(4)} / A_1^{(0)}; a_1^{(p)} = A_1^{(p)} / A_1^{(0)}; \\
b_1^{(p)} &= B_1^{(p)} / A_1^{(0)}; c_1^{(p)} = C_1^{(p)} / A_1^{(0)}; d_1^{(p)} = D_1^{(p)} / A_1^{(0)}
\end{aligned} \tag{4.41}$$

вони усі можуть бути виражені для співвідношення (4.26) за допомогою граничних умов (4.31) через коефіцієнт $B_2^{(0)}$, та через коефіцієнт $A_1^{(0)}$ для співвідношень (4.28), (4.29) за допомогою граничних умов (4.35).

Розглянемо окремо гамільтоніан, що відповідає акустичному фонону

$$H_{kq} = \frac{\hbar^2 k_q^2}{2m^*} + \frac{m^* \omega^2(q) u^2(q)}{2},$$

де m^* - ефективна маса, що відповідає фононній моді, u_q - пружне зміщення напівпровідникового середовища, асоційоване з акустичним фононом, k_q - фононний квазіімпульс. Використовуючи стандартний квантово-механічний підхід введемо оператори:

$$a(q) = \sqrt{\frac{m^* \omega(q)}{2\hbar}} u(q) + i \sqrt{\frac{1}{2\hbar m^* \omega(q)}} \hbar k_q; a^+(q) = \sqrt{\frac{m^* \omega(q)}{2\hbar}} u(q) - i \sqrt{\frac{1}{2\hbar m^* \omega(q)}} \hbar k_q,$$

звідки:

$$u(q) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m^* \omega(q)}} [a(q) + a^+(q)].$$

Нехай підсумовування відбувається по всіх значеннях хвильового вектора q у зоні Бріллюена, а в наносистемі міститься N елементарних решіток. Тоді враховуючи обидві можливі поляризації акустичних фононів в будемо мати:

$$\begin{aligned}
u(q, \vec{r}) &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q \sqrt{\frac{\hbar}{2m^* \omega(q)}} [a(q) e^{i(\vec{q} \cdot \vec{r})} + a^+(q) e^{-i(\vec{q} \cdot \vec{r})}] = \\
&= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q \sqrt{\frac{\hbar}{2m^* \omega(q)}} [a(q) + a^+(-q)] e^{i(\vec{q} \cdot \vec{r})} = \sum_q u(q) e^{i(\vec{q} \cdot \vec{r})}.
\end{aligned} \tag{4.42}$$

Інтегруючи (4.42) маємо:

$$\begin{aligned} \int u(q, \vec{r}) u(q', \vec{r}) d^3 \vec{r} &= \frac{\hbar}{2Nm^*} \sum_q \sum_{q'} \frac{1}{\sqrt{\omega(q)\omega(q')}} \int e^{-i(\vec{q}' - \vec{q}) \cdot \vec{r}} d^3 \vec{r} = \\ &= \frac{\hbar V}{2Nm^*} \sum_q \sum_{q'} \frac{1}{\sqrt{\omega(q)\omega(q')}} \delta_{qq'} = \frac{\hbar}{2\rho} \sum_q \frac{1}{\omega(q)}. \end{aligned}$$

Отже у видку однієї фононної моди, при урахуванні співвідношення (4.2) коефіцієнти $B_2^{(0)}$ та $A_1^{(0)}$ відповідно знаходяться з умов нормування [181] для зміщувальних фононів:

$$S \int_0^{z_3} \rho(z) u_2^*(q, \omega, z) u_2(q, \omega, z) dz = \frac{\hbar}{2\omega} \quad (4.43)$$

та флексуральних та ділататіональних акустичних фононів:

$$S \int_0^{z_3} \rho(z) (u_1^*(q, \omega, z) u_1(q, \omega, z) + u_3^*(q, \omega, z) u_3(q, \omega, z)) dz = \frac{\hbar}{2\omega}. \quad (4.44)$$

У співвідношеннях (4.43) і (4.44) величина $S = \Delta L_x \Delta L_y$ - площа поперечного перерізу наноструктури по площині xOy , ΔL_x і ΔL_y - геометричні розміри цього перерізу.

4.2. Властивості спектрів різних типів акустичних фононів виникаючих у плоских нітридних наносистемах та компонент поля зміщення пов'язаних з акустичними фононами

З використаннями розвиненої в попередньому підпункті аналітичній теорії акустичних фононів виникаючих у плоских нітридних наносистемах, виконувались розрахунки спектру різних типів акустичних фононів та відповідних їм нормованих компонент вектора зміщення, що асоційовані з акустичними фононами. Розрахунки виконувались для параметрів експериментально реалізованої наноструктури [182]. Геометричні параметри РТС такі: ширини потенціальних ям: $d_1 = 15$ нм; $d_2 = 2,08$ нм, ширина потенціального бар'єра - $b = 1$ нм. Геометричні параметри перерізу наносистеми вибирались такими: $\Delta L_x = \Delta L_y = 10^{-5}$ м (для прикладу див. працю [183]), ці значення перерізу слід уважати цілком типовими. Значення фізичних параметрів наноструктури, які використовувались у розрахунках наведено у Таблиці 4.1.

Таблиця 4.1.

	GaN	AlN	Al _{0.58} Ga _{0.42} N
ρ (kg/m ³)	6150	3255	4470.9
C_{11} (GPa)	360	397	381.46
C_{12} (GPa)	144	143	143.42
C_{13} (GPa)	113	112	112.42
C_{33} (GPa)	388	371	378.14
C_{44} (GPa)	94	115	106.18
C_{66} (GPa)	108	127	119.02

На Рис. 4.2а приведено залежності спектру акустичних фононів наноструктури від значень хвильового вектора q . З рисунка видно, що зі зміною q формується дві групи залежностей спектру які розміщуються: для першої групи (I) при $\Omega_{\text{GaN}}^{\text{SH}}(q) \leq \Omega_{\text{n}}^{\text{SH}}(q) \leq \Omega_{\text{Al}_{0.58}\text{Ga}_{0.42}\text{N}}^{\text{SH}}(q)$ і при $\Omega_{\text{Al}_{0.58}\text{Ga}_{0.42}\text{N}}^{\text{SH}}(q) \leq \Omega_{\text{n}}^{\text{SH}}(q) \leq \Omega_{\text{AlN}}^{\text{SH}}(q)$ для другої групи (II), де $\Omega_{\text{GaN}}^{\text{SH}}(q)$, $\Omega_{\text{AlN}}^{\text{SH}}(q)$ і $\Omega_{\text{Al}_{0.58}\text{Ga}_{0.42}\text{N}}^{\text{SH}}(q)$ - відповідні залежності енергій зміщувальних акустичних фононів у масивних кристалах. При цьому значення залежностей енергій $\Omega_{\text{n}}^{\text{SH}}(q)$, що формуються у межах кожної з груп зі збільшенням величини q зростають, починаючи від початкових значень, сформованих відповідно при $\Omega_{\text{GaN}}^{\text{SH}}(q)$ і $\Omega_{\text{AlN}}^{\text{SH}}(q)$ досягаючи своїх максимальних значень при $\Omega_{\text{Al}_{0.58}\text{Ga}_{0.42}\text{N}}^{\text{SH}}(q)$.

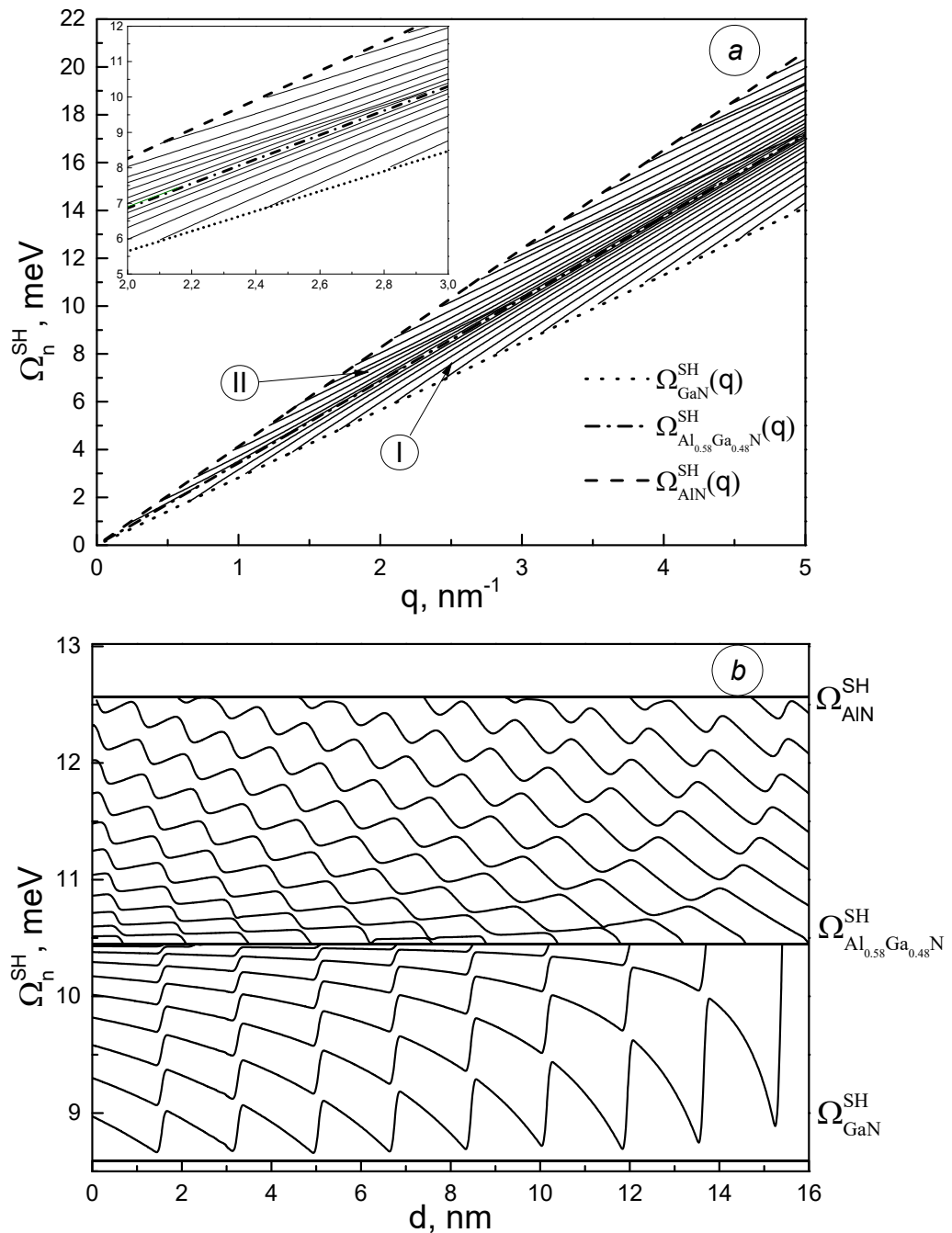


Рис. 4.2. Залежності спектру $\Omega_n^{SH}(q)$ від хвильового вектора q (а), та від положення d потенціального бар'єра у загальній потенціальній ямі при $q = 55/(d_1 + b_1 + d_2)$ (б).

Далі, на Рис 4.2.б приведено залежності спектру Ω_n^{SH} зміщувальних акустичних фонових від положення потенціального бар'єра $0 \leq d \leq d_1 + d_2$ в сумарній потенціальній ямі. З рисунка видно, що залежності $\Omega_n^{SH}(d)$ формують для кожної з груп спектру певну кількість максимумів та мінімумів, що зв'язана з номером рівня. Слід зробити висновок, що нумерація віток залежностей енергій фонових рівнів у

кожній з груп має бути окремою. Зокрема для першої групи (I) нумерація n_1 йде від рівнів з більшими значеннями енергій до значень з меншими значеннями енергій, оскільки для таких рівнів кількість сформованих максимумів у залежностях $\Omega_{n_1}^{SH}(d)$ зі зменшенням значень енергій зростає. Аналогічно з причини зростання кількості максимумів зі зростанням значень енергій нумерація n_2 віток залежностей $\Omega_{n_2}^{SH}(d)$ енергій другої групи (II) починається вже від рівнів з меншими значеннями енергій. На Рис. 4.3 а. б. с. d. е. f. приведено залежності від координати z , нормованих згідно співвідношення (4.26) компонент $u_2(z)$ зміщувальних фононів, розрахованих при фіксованому значенні $q = 55/(d_1 + b_1 + d_2)$ для кількох значень енергії зміщувальних акустичних фононів. При цьому залежності, наведені на Рис. 4.3а, б, с відносяться до першої групи фононних мод, а залежності на Рис. 4.3d, е, f – до другої групи фононних мод. Як видно з представлених залежностей, у межах кожної групи фононних мод зі збільшенням величини енергії Ω_n^{SH} абсолютні величини максимального зміщення $\max(u_2(z))$ формуються в області правої потенціальної ями наносистеми за винятком Рис. 4.3f, де $\max(u_2(z))$ розміщується на межі лівої потенціальної ями і внутрішнього потенціального бар'єра. Крім того, як видно з Рис. 4.3 зі збільшенням Ω_n^{SH} величина зміщення, що формується у межах лівої потенціальної ями зростає.

Далі, на Рис. 4.4а приведено залежності розрахунку спектру флексуральних та діляціональних фононних мод від значень хвильового вектора q . Також на Рис. 4.4 б приведено збільшену частину приведеної залежності. З Рис. 4.4а, б видно, що зі зміною q формується п'ять груп залежностей спектру, утворених чергуванням кривих для флексуральних $\Omega_n^{AS}(q)$ і діляціональних $\Omega_n^{SA}(q)$ мод. При цьому залежності спектру першої групи (I) лежать у межах $\Omega_{\text{GaN}}^T(q) \leq \Omega_n^{(SA,AS)}(q) \leq \Omega_{\text{Al}_{0.58}\text{Ga}_{0.42}\text{N}}^T(q)$, другої (II) - $\Omega_{\text{Al}_{0.58}\text{Ga}_{0.42}\text{N}}^T(q) \leq \Omega_n^{(SA,AS)}(q) \leq \Omega_{\text{AlN}}^T(q)$, третьої (III) - $\Omega_{\text{AlN}}^T(q) \leq \Omega_n^{(SA,AS)}(q) \leq \Omega_{\text{GaN}}^L(q)$, четвертої (IV) - $\Omega_{\text{GaN}}^L(q) \leq \Omega_n^{(SA,AS)}(q) \leq \Omega_{\text{Al}_{0.58}\text{Ga}_{0.42}\text{N}}^L(q)$, п'ятої - (V) - $\Omega_{\text{Al}_{0.58}\text{Ga}_{0.42}\text{N}}^L(q) \leq \Omega_n^{(SA,AS)}(q) \leq \Omega_{\text{AlN}}^L(q)$, де

$\Omega_{\text{GaN}}^T(q)$, $\Omega_{\text{Al}_{0.58}\text{Ga}_{0.42}\text{N}}^T(q)$, $\Omega_{\text{AlN}}^T(q)$ - залежності енергій поперечних акустичних хвиль, а $\Omega_{\text{GaN}}^L(q)$, $\Omega_{\text{Al}_{0.58}\text{Ga}_{0.42}\text{N}}^L(q)$, $\Omega_{\text{AlN}}^L(q)$ - залежності енергій поздовжніх акустичних хвиль від q для масивних кристалів.

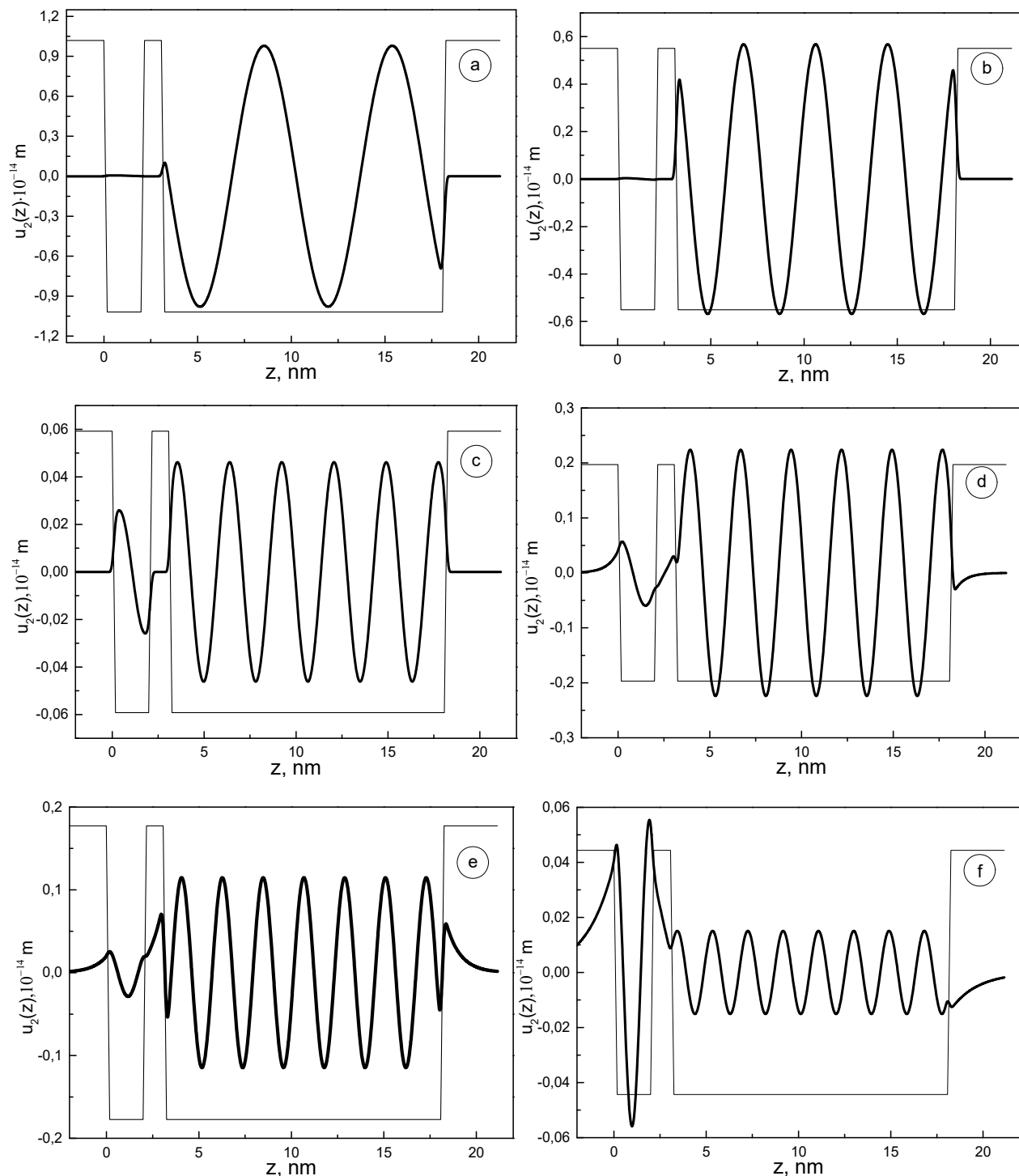


Рис. 4.3. Залежності компонент $u_2(z)$ розрахованих при $q = 55/(d_1 + b_1 + d_2)$ для значень енергії зсувних фононів: 8,933 меВ (а), 9,883 меВ (б), 10,248 меВ (с), 10,645 меВ (д), 11,212 меВ (е), 12,278 меВ (ф).

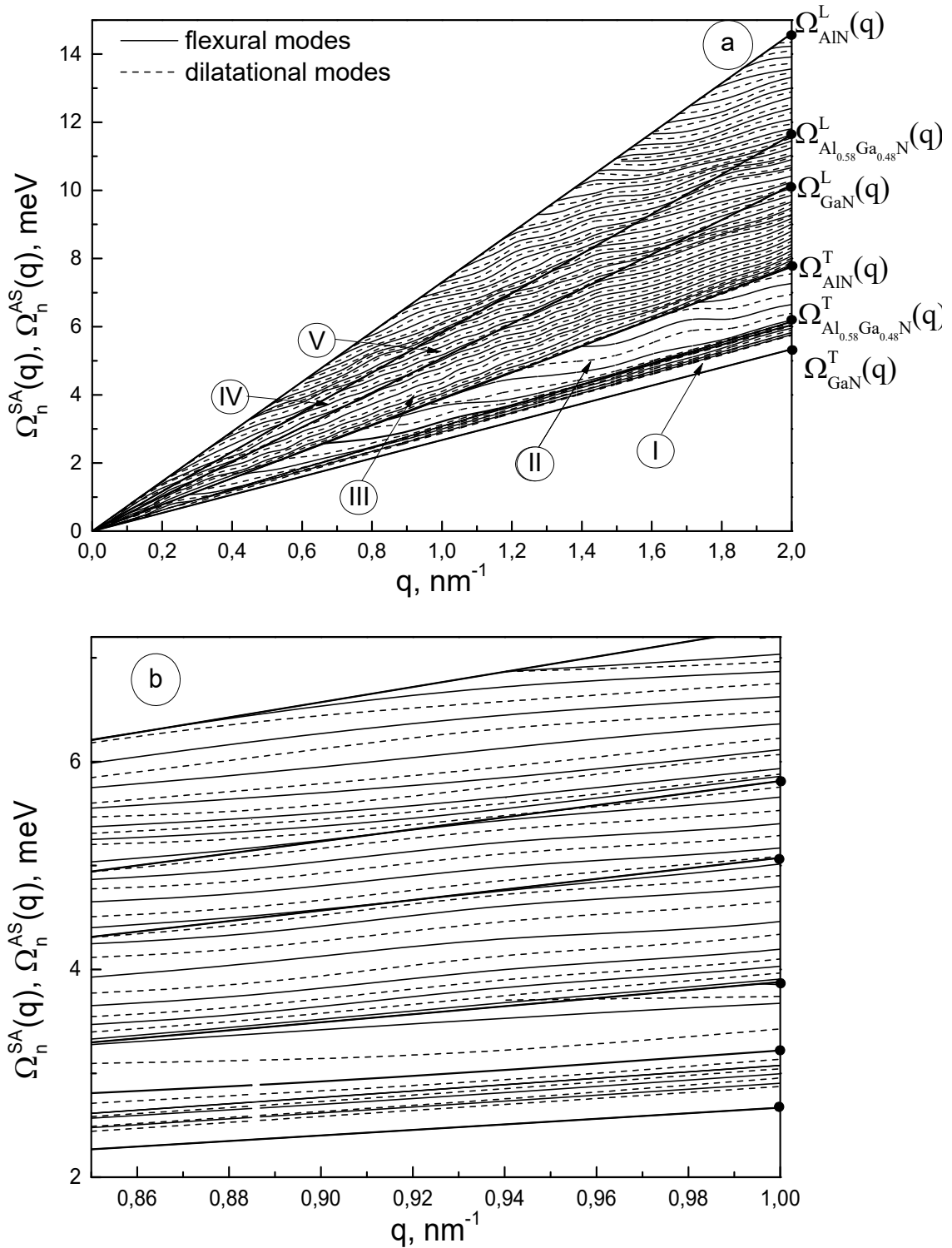


Рис. 4.4. Залежності спектру $\Omega_n^{(FL, DL)}(q)$ від хвильового вектора q (a), та збільшена частина цієї залежності (b).

Крім того з Рис. 4.4а, б видно, що значення залежностей енергій $\Omega_n^{(AS, SA)}(q)$, що формуються у межах кожної з груп зі збільшенням величини q зростають, починаючи від початкових значень, сформованих відповідно при

$\Omega_{\text{Al}_{0.58}\text{Ga}_{0.42}\text{N}}^{\text{T}}(q)$, $\Omega_{\text{AlN}}^{\text{T}}(q)$, $\Omega_{\text{GaN}}^{\text{L}}(q)$, $\Omega_{\text{Al}_{0.58}\text{Ga}_{0.42}\text{N}}^{\text{L}}(q)$, $\Omega_{\text{AlN}}^{\text{L}}(q)$ і досягаючи своїх максимальних значень при $\Omega_{\text{GaN}}^{\text{T}}(q)$, $\Omega_{\text{Al}_{0.58}\text{Ga}_{0.42}\text{N}}^{\text{T}}(q)$, $\Omega_{\text{AlN}}^{\text{T}}(q)$, $\Omega_{\text{GaN}}^{\text{L}}(q)$, $\Omega_{\text{Al}_{0.58}\text{Ga}_{0.42}\text{N}}^{\text{L}}(q)$ відповідно.

На Рис. 4.5 приведено залежності від положення d потенціального бар'єра у загальній потенціальній ямі спектру $\Omega_n^{(\text{SA,AS})}$ флексуральних та діляціональних мод акустичних фононів, розрахованих при для фіксованого значення $q = 55/(d_1 + b_1 + d_2)$. Як видно з рисунка, у межах кожної із встановлених груп фононних мод залежності $\Omega_n^{(\text{SA,AS})} = \Omega_n^{(\text{SA,AS})}(d)$ носять різний характер. Так, для першої групи (I) перший рівень флексуральної моди, який зменшується із збільшенням d , утворює з першим рівнем діляціональної моди ефект аतिकросінгу. Аналогічна ситуація відбувається з рештою рівнів цієї групи. Для другої групи (II) залежності для обох видів фононів зростають попарно формуючи антикросінги на всьому інтервалі їх визначення. Як видно з Рис. 4.5 залежності від d для спектру обох типів фононів у межах (III), (IV) і (V) груп суттєво відрізняються від аналогічних залежностей для (I) і (II) груп. Слід зауважити, що всі розраховані криві є симетричними відносно точки $d = (d_1 + d_2)/2$. Крім того для кривих (III) групи в цій точці формується максимум, для кривих (IV) і (V) групи – мінімум. Також, як видно із рисунка, на межах (III) і (IV) та (IV) і (V) груп залежностей зі зміною d виникають криві, які одночасно належать до обох сусідніх груп: в певному діапазоні значень d ці криві лежать в інтервалі значень енергій інтервалу однієї групи, а в іншому діапазоні d - інтервалі значень енергій інтервалу групи, сусідньої з нею.

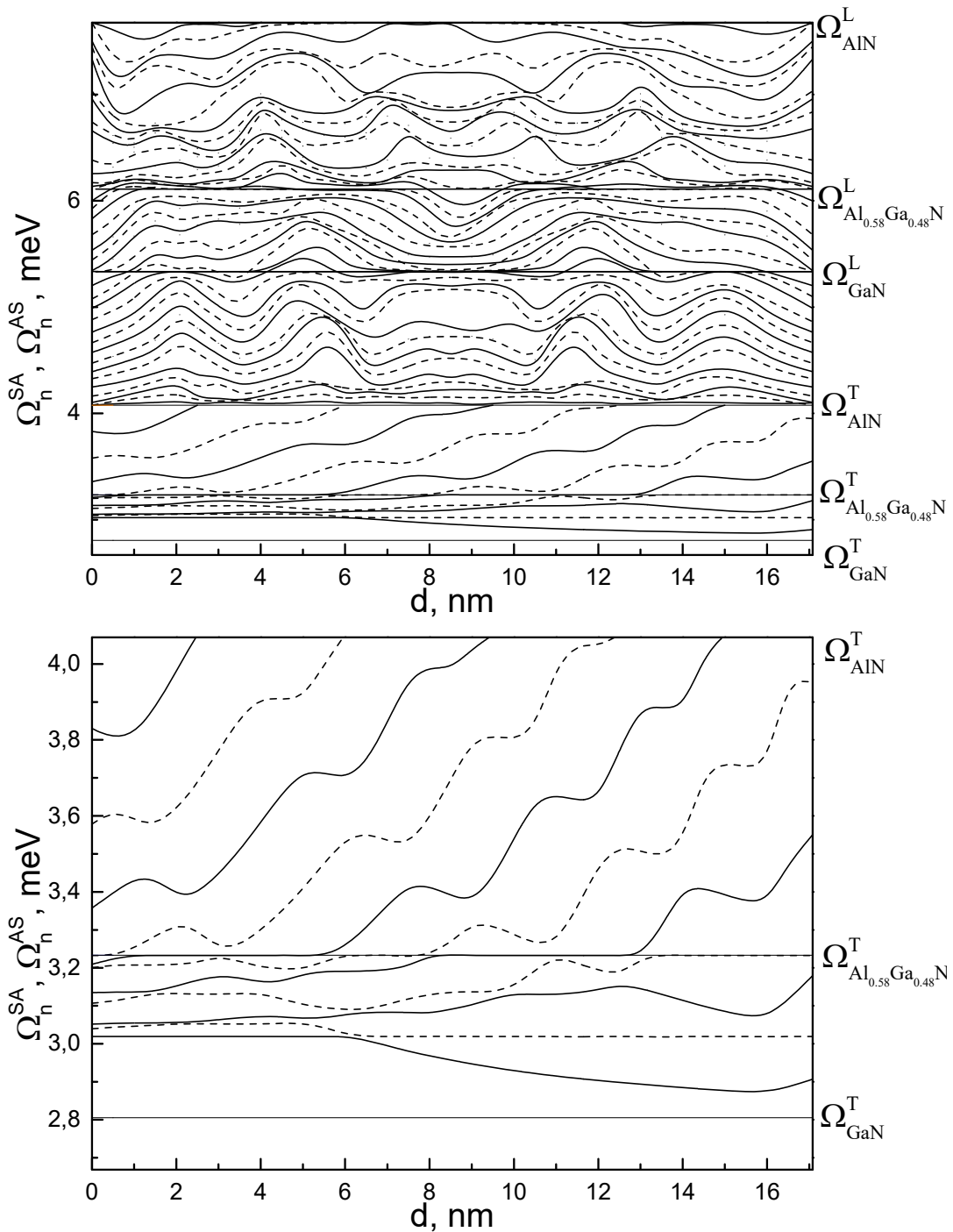


Рис. 4.5. Залежності спектру $\Omega_n^{(SA,AS)}$ від положення d потенціального бар'єра у загальній потенціальній ямі при $q = 55/(d_1 + b_1 + d_2)$ (b).

На Рис. 4.6 приведено залежності від координати z нормованих згідно співвідношень (4.28), (4.29) компонент $u_1(z)$ і $u_3(z)$ поля зміщення відповідно, розрахунок яких виконано при фіксованому значенні $q = 55/(d_1 + b_1 + d_2)$ для трьох значень енергії, що відповідають кожній з установлених п'яти груп спектру флексуральних і діляціональних акустичних фононів.

Наведені залежності демонструють найбільш характерні особливості виникаючі у залежностях компонент полів зміщення $u_1(z)$ і $u_3(z)$. Слід зауважити, що встановлені залежності найбільш виражені в області правої квантової ями РТС та мають характерні особливості для кожної з фононних груп.

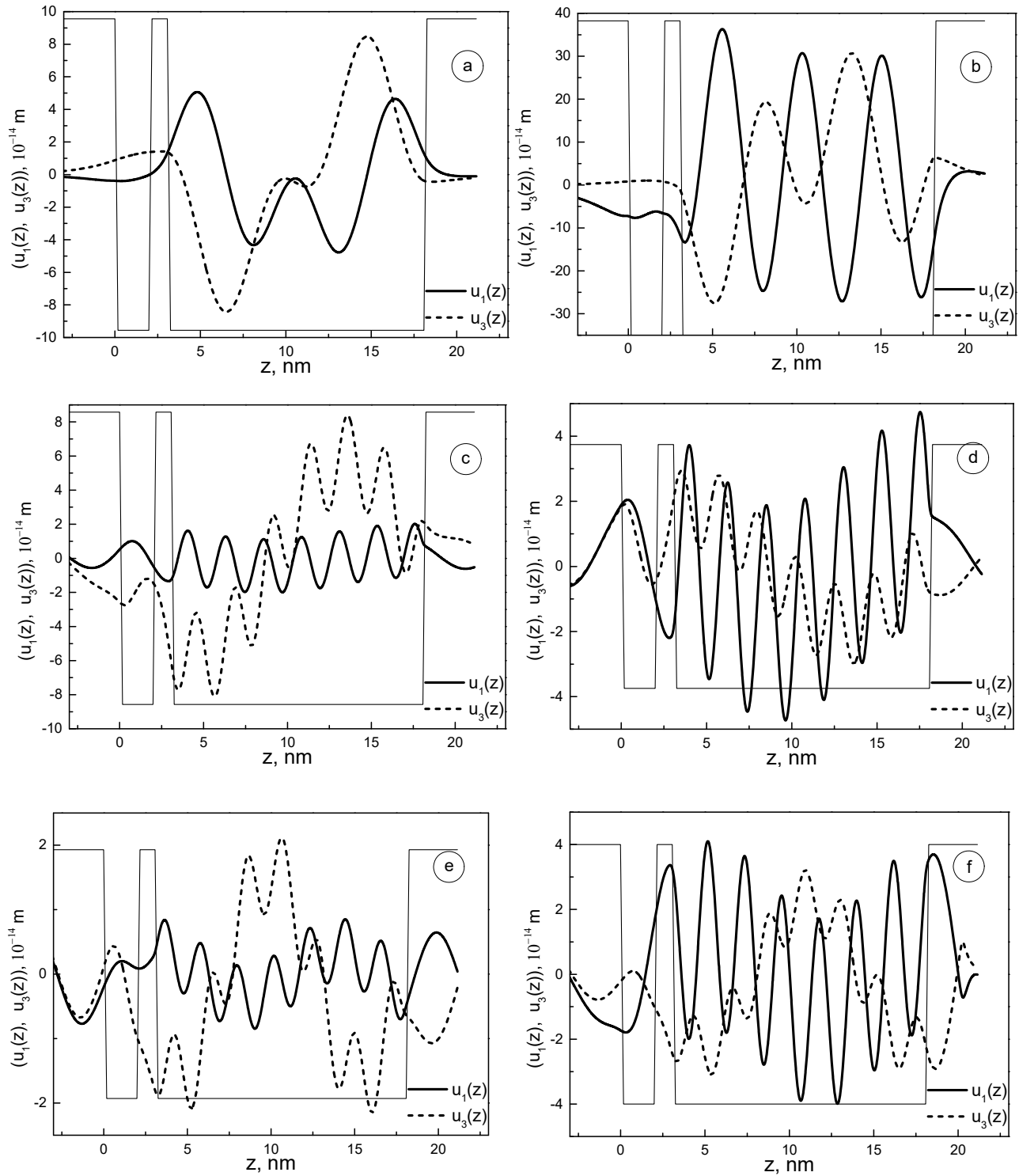
Для першої групи фононів (I), як видно з Рис. 4.6a, b, c залежності $u_1(z)$ є симетричними відносно середини правої квантової ями, а залежності $u_3(z)$ є антисиметричними відносно неї. При цьому формування максимумів функції $u_1(z)$ і відповідних їм мінімумів функції $u_3(z)$ відбувається практично при однакових значеннях z .

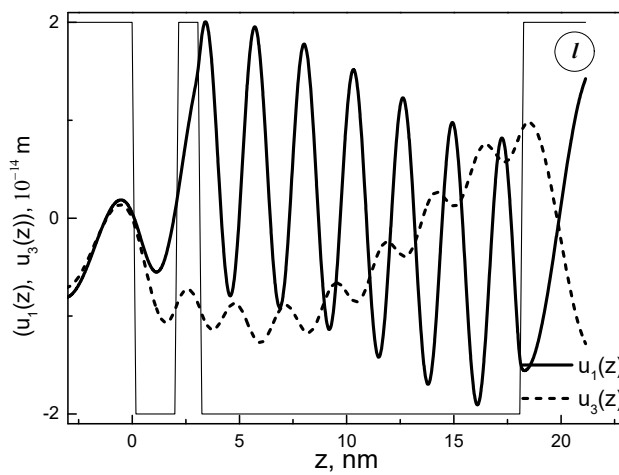
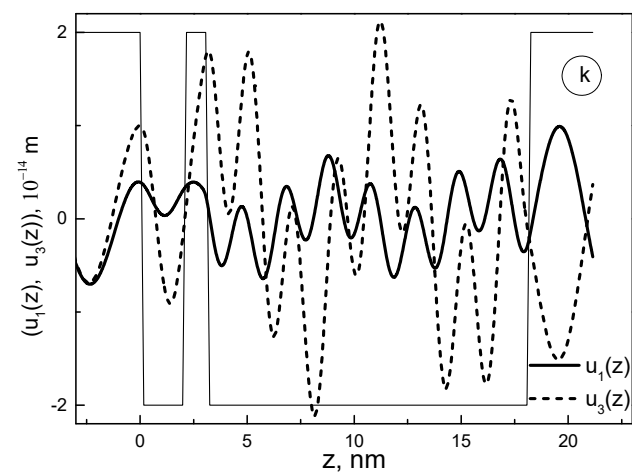
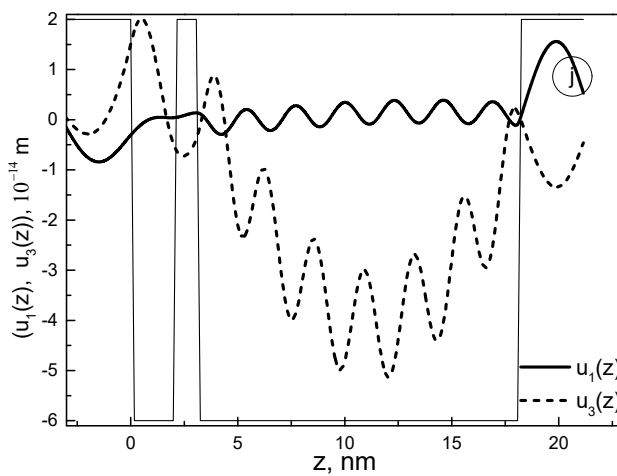
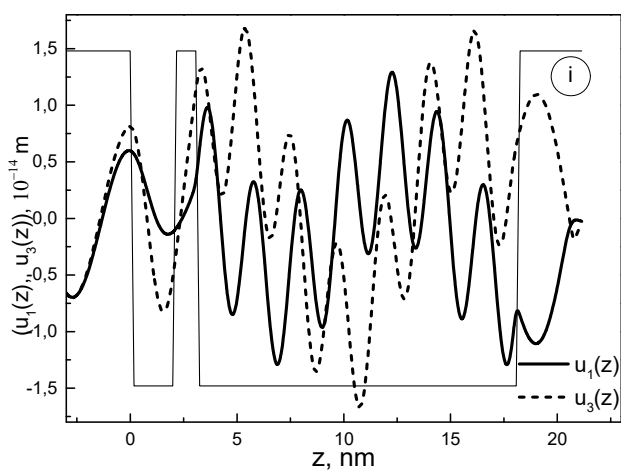
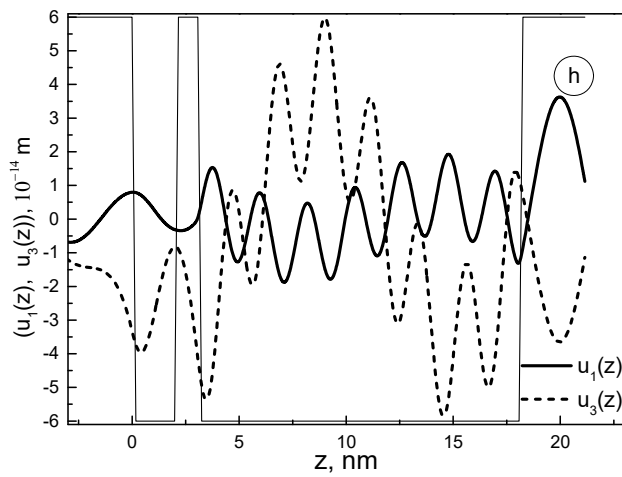
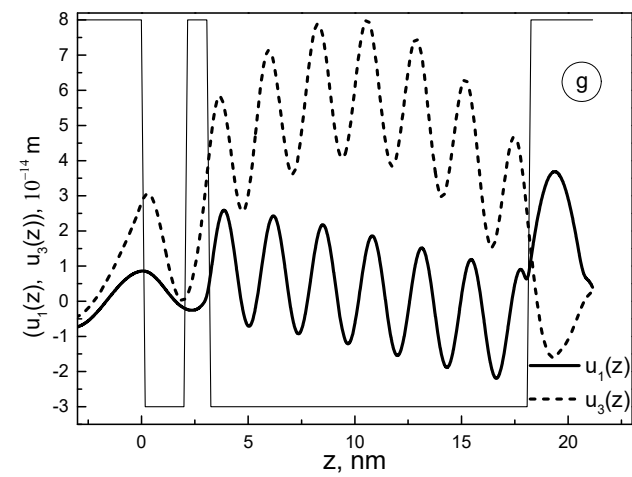
Відповідні залежності групи фононів (II) як видно з Рис. 4.6d, e, f є іншими. Залежності $u_1(z)$ і $u_3(z)$ на Рис. 4.6d характеризуються дещо зміщеними один відносно одного положеннями максимумів та мінімумів, а аналогічні залежності на Рис. 4.6e і Рис. 4.6f є симетричними відносно центра лівої потенціальної ями зі співпадінням положень їх максимумів $u_1(z)$ з положеннями мінімумів $u_3(z)$ і навпаки.

Для групи фононів (III), залежності для якої приведені на Рис. 4.6g, h, і ми маємо такі особливості: Рис. 4.6g $u_3(z) > u_1(z)$ на усій області зміни z , положення максимумів і мінімумів обох кривих співпадають, залежності $u_1(z)$ і $u_3(z)$ на Рис. 4.6h, і відповідно є симетричними і антисиметричними відносно середини правої квантової ями, положення їх максимумів $u_1(z)$ та мінімумів $u_3(z)$ співпадають.

У четвертій групі фононів (IV) слід виділити такі факти: залежності $u_1(z)$ і $u_3(z)$ на Рис. 4.6j є відповідно симетричними і антисиметричними відносно центра лівої потенціальної ями, у області зліва від РТС набувають від'ємних значень, в області справа від РТС - відповідно додатніх та від'ємних значень, наближаючись до нуля при віддаленні від РТС. Залежності $u_1(z)$ і $u_3(z)$ на Рис. 4.6k є відповідно симетричними і антисиметричними відносно центра лівої потенціальної ями, аналогічно як у випадку на Рис. 4.6j поведуть себе при $z < 0$ і $z > z_5$. Для залежностей $u_1(z)$ і $u_3(z)$ на Рис 4.6l в області зміни z співпадають відповідні

положення максимумів та мінімумів і навпаки. Також залежності $u_1(z)$ і $u_3(z)$ на Рис 4.6к, л при $z < 0$ і $z > z_5$ слідує до нуля.





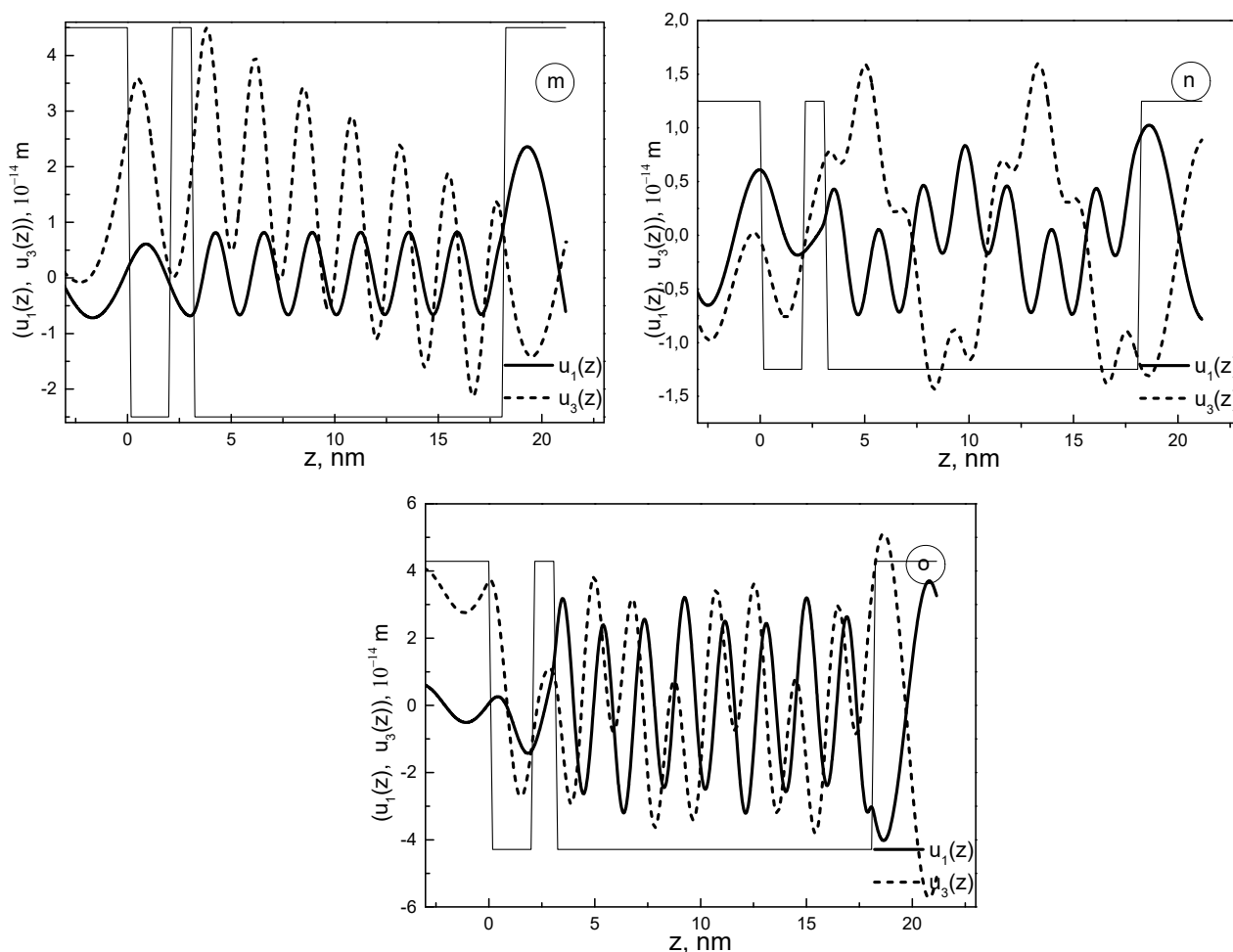


Рис. 4.6. Залежності компонент $u_1(z)$ і $u_3(z)$ полів зміщення для першої (I) (a, b, c), другої (II) (d, e, f), третьої (III) (g, h, i), четвертої (IV) (j, k, l), п'ятої (V) (m, n, o) груп фононних мод, розраховані при $q = 19/(d_1 + b_1 + d_2)$ для енергій: 3.053 меВ; 3.154 меВ; 3,209 меВ; 3,317 меВ; 3,387 меВ; 3,770 меВ; 4,191меВ; 4,371 меВ; 4,928 меВ; 5,384 меВ; 5,749 меВ; 5,881меВ; 6,513 меВ; 7,243 меВ; 7,722 меВ.

Для п'ятої групи фононів (V) слід виділити такі властивості. Залежності $u_1(z)$ і $u_3(z)$ на Рис 6 m характеризуються виконанням умови $u_3(z) > u_1(z)$ на всій області зміни z , окрім невеликого інтервалу при $z > z_5$, коли обидві залежності слідують до нуля. Залежності $u_1(z)$ і $u_3(z)$ на Рис 4.6n є симетричними відносно середини лівої потенціальної ями, положення максимумів $u_1(z)$ співпадають з положеннями мінімумів $u_3(z)$ і навпаки. У залежностях $u_1(z)$ і $u_3(z)$ на Рис 4.6o, положення

максимумів та мінімумів є зміщеними один від одного. Я і у всіх розрахованих залежностях компонент полів зміщення груп фононів для п'ятої групи фононів (V) $u_1(z)$ і $u_3(z)$ також при $z < 0$ і $z > z_5$ слідує до нуля.

4.3. Теорія спектру та мод акустичних фононів у багатошарових наноструктурах на основі арсенідних напівпровідникових сполук. Точні аналітичні вирази для компонент зміщення напівпровідникового середовища асоційовані з зсувними та ділатаційно-флексуральними модами акустичних фононів

4.3.1. Теорія спектру та мод зсувних акустичних фононів в багатошарових арсенідних наносистемах

Спочатку окремо розглянемо випадок зсувних акустичних фононів. Для цього в декартовій системі координат розглядається плоска напівпровідникова РТС, що складається з двох потенціальних $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$ - ям ((1), (3)) та потенціального $\text{In}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ - бар'єра ((2)), поміщена в зовнішнє напівпровідникове середовище $\text{In}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ ((0), (4)). Вісь Oz є перпендикулярною до гетерогеометрії наносистеми (Рис. 4.7) (див. також такі праці автора за темою дисертації [8*, 15*, 16*]).

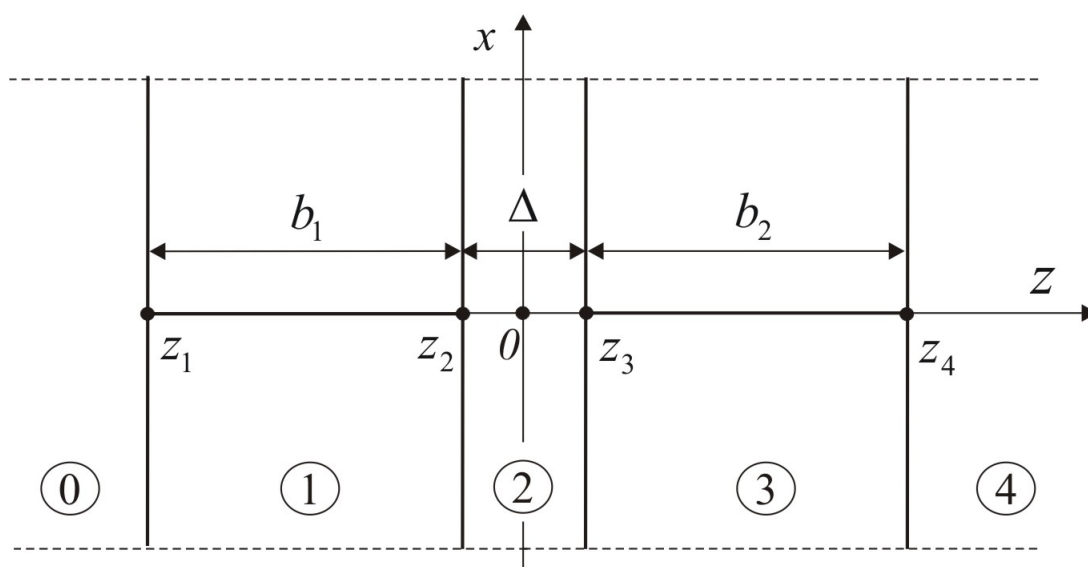


Рис. 4.7. Геометрична схема багатошарової РТС.

У моделі пружного континууму хвильове рівняння для вектора пружного зміщення $\vec{u}(x, y, z)$ в ізотропному середовищі має вигляд [8*]

$$\rho(z) \frac{\partial^2 \bar{u}}{\partial t^2} = (C_{12} + 2C_{44}) \nabla \cdot (\nabla \cdot \bar{u}) - C_{44} \nabla \times (\nabla \times \bar{u}) \quad (4.45)$$

де густина матеріалу РТС визначається як:

$$\rho(z) = \sum_{p=1}^4 \rho^{(p)} [\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)], \quad z_0 = -\infty; \quad z_5 = +\infty, \quad p = \overline{0, 4}, \quad (4.46)$$

а $\rho^{(p)} = \begin{cases} \rho_0, & p = 1, 3, \\ \rho_1, & p = 0, 2, 4. \end{cases}$ - густина матеріалу наносистеми,

$C_{12}^{(p)} = \begin{cases} C_{12_0}, \\ C_{12_1}, \end{cases}$; $C_{44}^{(p)} = \begin{cases} C_{44_0}, & p = 1, 3, \\ C_{44_1}, & p = 0, 2, 4. \end{cases}$ - пружні константи p -го шару РТС, $\theta(z)$ -

одична функція Хевісайда.

Оскільки для поперечних акустичних мод виконуються співвідношення:

$$\nabla \cdot \bar{u} = 0; \quad \nabla \times (\nabla \times \bar{u}) = -\nabla^2 \bar{u}, \quad (4.47)$$

то рівняння (4.45) набуває вигляду:

$$\rho(z) \frac{\partial^2 \bar{u}}{\partial t^2} = C_{44} \nabla^2 \bar{u}. \quad (4.48)$$

Будемо уважати, що поперечні акустичні моди поширюються в напрямку осі Ox й мають хвильовий вектор q , тоді пружне зміщення $\bar{u}(z)$ можна виразити згідно зі співвідношенням:

$$\bar{u}(x, y, z) = \bar{u}(z) e^{i(qx - \omega t)} \quad (4.49)$$

Оскільки зсувні фононні моди мають тільки одну відмінну від нуля компоненту, то:

$$\bar{u}(z) = (0, u_y(z), 0), \quad (4.50)$$

Тоді, шукаючи розв'язок рівняння (4.48) у вигляді: $\bar{u}(z) = u_y(z) e^{i(qx - \omega t)}$, де зміщення середовища зручно можна подати у вигляді:

$$u_y(z) = \sum_{p=1}^4 u_y^{(p)}(z) [\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)], \quad z_0 = -\infty; \quad z_5 = +\infty, \quad p = \overline{0, 4} \quad (4.51)$$

для компонент $u_y^{(p)}(z)$ отримуються рівняння:

$$\frac{d^2 u_y^{(p)}(z)}{dz^2} - \left(q^2 - \frac{\omega^2}{v_t^{(p)2}} \right) u_y^{(p)}(z) = 0, \quad (4.52)$$

де

$$v_t^{(p)} = \sqrt{\frac{C_{44}^{(p)}}{\rho^{(p)}}} \quad (4.53)$$

- поперечна швидкість поширення звуку в p -ому шарі РТС, причому:

$$v_t^{(0)} = v_t^{(2)} = v_t^{(4)}; v_t^{(1)} = v_t^{(3)}.$$

Оскільки акустичні хвилі повинні затухати в середовищі зліва та справа від РТС, тобто при $z < z_1$ і $z > z_4$, то розв'язки рівняння (4.48) мають задовольняти умову:

$$u(z)|_{z \rightarrow \pm\infty} = 0. \quad (4.54)$$

Загальні розв'язки рівняння (4.48) будучи підставленими у вираз (4.51) мають такий компактний вигляд:

$$\begin{aligned} u_y(z) = & A_0 e^{\chi_t^{(0)} z} [\theta(z - z_0) - \theta(z - z_1)] + B_4 e^{-\chi_t^{(4)} z} [\theta(z - z_4) - \theta(z - z_5)] + \\ & + (A_1 \cos k_t^{(1)} z + B_1 \cos k_t^{(1)} z) [\theta(z - z_1) - \theta(z - z_2)] + \\ & + (A_2 e^{\chi_t^{(2)} z} + B_2 e^{-\chi_t^{(2)} z}) [\theta(z - z_2) - \theta(z - z_3)] + \\ & + (A_3 \cos k_t^{(3)} z + B_3 \cos k_t^{(3)} z) [\theta(z - z_3) - \theta(z - z_4)], \end{aligned} \quad (4.55)$$

де уведено позначення:

$$\chi_t^{(0)} = \chi_t^{(2)} = \chi_t^{(4)} = \sqrt{q^2 - \frac{\omega^2}{v_t^{(1)2}}}; \quad k_t^{(1)} = k_t^{(3)} = \sqrt{\frac{\omega^2}{v_t^{(2)2}} - q^2}. \quad (4.56)$$

На гетеромежах наноструктури виконуються умові неперервності компонент вектора зміщення та тензора напружень $\sigma_{yz}^{(p)}(z)$:

$$\begin{cases} u_y^{(p)}(z)|_{z=z_p-0} = u_y^{(p+1)}(z)|_{z=z_p+0}, \\ \sigma_{yz}^{(p)}(z)|_{z=z_p-0} = \sigma_{yz}^{(p+1)}(z)|_{z=z_p+0}, \end{cases} \quad (4.57)$$

де компоненти тензора напруження визначаються як:

$$\sigma_{yz}(z) = C_{44} \left(\frac{\partial \bar{u}(z)}{\partial y} + \frac{\partial \bar{u}(z)}{\partial z} \right) = C_{44} \frac{\partial}{\partial z} (u_y(z) e^{iqx}) = C_{44} \frac{\partial u_y(z)}{\partial z} e^{iqx}. \quad (4.58)$$

З співвідношення (4.58) з урахуванням (4.55) знаходимо:

$$\sigma_{yz}(z) = \begin{cases} \sigma_y^{(0)}(z), & z < z_1, \\ \sigma_y^{(1)}(z), & z_1 \leq z < z_2, \\ \sigma_y^{(2)}(z), & z_2 \leq z < z_3, \\ \sigma_y^{(3)}(z), & z_3 \leq z < z_4, \\ \sigma_y^{(4)}(z), & z > z_4, \end{cases} = \begin{cases} C_{44}^{(0)} \chi_t^{(0)} A_0 e^{\chi_t^{(0)} z}, & z < z_1, \\ C_{44}^{(1)} k_t^{(1)} \left(-A_1 \sin k_t^{(1)} z + A_1 \cos k_t^{(1)} z \right), & z_1 \leq z < z_2, \\ C_{44}^{(2)} \chi_t^{(2)} \left(A_2 e^{\chi_t^{(2)} z} - B_2 e^{-\chi_t^{(2)} z} \right), & z_2 \leq z < z_3, \\ C_{44}^{(3)} k_t^{(3)} \left(-A_1 \sin k_t^{(3)} z + A_1 \cos k_t^{(3)} z \right), & z_3 \leq z < z_4, \\ -C_{44}^{(4)} \chi_t^{(0)} B_4 e^{-\chi_t^{(0)} z}, & z > z_4. \end{cases} \quad (4.59)$$

З застосуванням методу трансфер-матриці, усі невідомі коефіцієнти $A_1, A_2, B_2, A_3, B_3, A_4, B_4, B_5$ однозначно визначаються з умови (4.57) та співвідношень (4.55). При цьому спектр акустичних фононів визначається з дисперсійного рівняння:

$$|T(q, \omega)| = 0, \quad (4.60)$$

де

$$T(q, \omega) = T^{(0,1)}(q, \omega) T^{(1,2)}(q, \omega) T^{(2,3)}(q, \omega) T^{(3,4)}(q, \omega) \quad (4.61)$$

трансфер-матриця досліджуваної РТС.

У виразі (4.61):

$$T^{(p,p+1)}(q, \omega) = \begin{pmatrix} t_{11}^{p,p+1}(q, \omega) & t_{12}^{p,p+1}(q, \omega) \\ t_{21}^{p,p+1}(q, \omega) & t_{22}^{p,p+1}(q, \omega) \end{pmatrix} \quad (4.62)$$

трансфер-матриця між p і $p+1$ шарами РТС, причому елементи трансфер матриці визначаються як:

$$t_{11}^{p,p+1} = \begin{cases} \frac{1}{2} \left(1 - \frac{C_{44}^{(p)} \chi_t^{(p)}}{C_{44}^{(p+1)} k_t^{(p+1)}} \right) e^{-\chi_t^{(0)} z_p} \cos k_t^{(p+1)} z_p; \\ \frac{1}{2} \left(1 - \frac{C_{44}^{(p+1)} k_t^{(p+1)}}{C_{44}^{(p)} \chi_t^{(p)}} \right) e^{\chi_t^{(0)} z_p} \sec k_t^{(p)} z_p \end{cases}$$

$$t_{12}^{p,p+1} = \begin{cases} \frac{1}{2} \left(1 + \frac{C_{44}^{(p)} \chi_t^{(p)}}{C_{44}^{(p+1)} k_t^{(p+1)}} \right) e^{-\chi_t^{(0)} z_p} \sin k_t^{(p+1)} z_p; & p = 0; 2 \\ \frac{1}{2} \left(1 + \frac{C_{44}^{(p+1)} k_t^{(p+1)}}{C_{44}^{(p)} \chi_t^{(p)}} \right) e^{\chi_t^{(0)} z_p} \sec k_t^{(p)} z_p; & p = 1; 3 \end{cases}$$

$$\begin{aligned}
t_{21}^{p,p+1} &= \begin{cases} \frac{1}{2} \left(1 + \frac{C_{44}^{(p)} \chi_t^{(p)}}{C_{44}^{(p+1)} k_t^{(p+1)}} \right) e^{\chi_t^{(0)} z_p} \cos k_t^{(p+1)} z_p; \\ \frac{1}{2} \left(1 + \frac{C_{44}^{(p+1)} k_t^{(p+1)}}{C_{44}^{(p)} \chi_t^{(p)}} \right) e^{\chi_t^{(0)} z_p} \csc k_t^{(p)} z_p \end{cases} \\
t_{22}^{p,p+1} &= \begin{cases} \frac{1}{2} \left(1 - \frac{C_{44}^{(p+1)} k_t^{(p+1)}}{C_{44}^{(p)} \chi_t^{(p)}} \right) e^{\chi_t^{(0)} z_p} \sin k_t^{(p+1)} z_p; & p = 0; 2 \\ \frac{1}{2} \left(1 - \frac{C_{44}^{(p)} \chi_t^{(p)}}{C_{44}^{(p+1)} k_t^{(p+1)}} \right) e^{-\chi_t^{(0)} z_p} \sec k_t^{(p)} z_p; & p = 1; 3 \end{cases} \quad (4.63) \\
t_{12}^{0,1} = t_{21}^{0,1} = t_{11}^{3,4} = t_{22}^{3,4} &= 0.
\end{aligned}$$

Слід зауважити, що спектр акустичних фононів наноструктури $\Omega_{n\bar{q}} = \hbar\omega_{n\bar{q}}$, згідно та (4.62-4.63) визначається усіма елементами трансфер матриці (4.61).

4.3.2. Властивості спектру зсувних акустичних фононів у багатощарових арсенідних наносистемах

На основі розвиненої теорії виконувався розрахунок спектру акустичних фононів для наноструктури, що складається з двох потенціальних $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ - ям та потенціального $\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$ - бар'єра, поміщеної в зовнішнє середовище $\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$. Геометричні параметри РТС такі: потенціальні ями: $b_1 = b_2 = 10$ нм, бар'єр - $\Delta = 5$ нм. Фізичні параметри РТС: густина матеріалу потенціальних ям і бар'єрів $\rho_0 = 5,50 \text{ g/cm}^3$; $\rho_1 = 4,76 \text{ g/cm}^3$, а також пружні константи: $C_{44_0} = 5,96 \cdot 10^{11} \text{ dyn/cm}^2$; $C_{44_1} = 4,76 \cdot 10^{11} \text{ dyn/cm}^2$ (див. також працю [8*]).

На Рис. 4.8 подано залежність енергетичного спектру акустичних фононів від хвильового вектора $q = \frac{1}{a}$, де $a = b_1 + \Delta + b_2$.

З Рис. 4.8 видно, що згадані залежності спектру $\Omega_{n\bar{q}}$ від q розміщені в області енергій, визначеній співвідношеннями: $\Omega_{T_1} \leq \Omega_{n\bar{q}} \leq \Omega_{T_0}$, де Ω_{T_0} і Ω_{T_1} - залежності енергій поперечних акустичних фононів у масивних кристалах $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ і

$\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$ відповідно, для яких $\Omega_{T_0}(q), \Omega_{T_1}(q) \sim q$. При цьому спектр акустичних фононів РТС складається з груп фононних мод, кожна з яких містить по дві моди з від'ємною та додатною дисперсією. Із збільшенням q величини фононних енергій у межах кожної з згаданих груп зростають та зближаються між собою і при цьому $\Omega_{n\bar{q}} \rightarrow \Omega_{T_0}$.

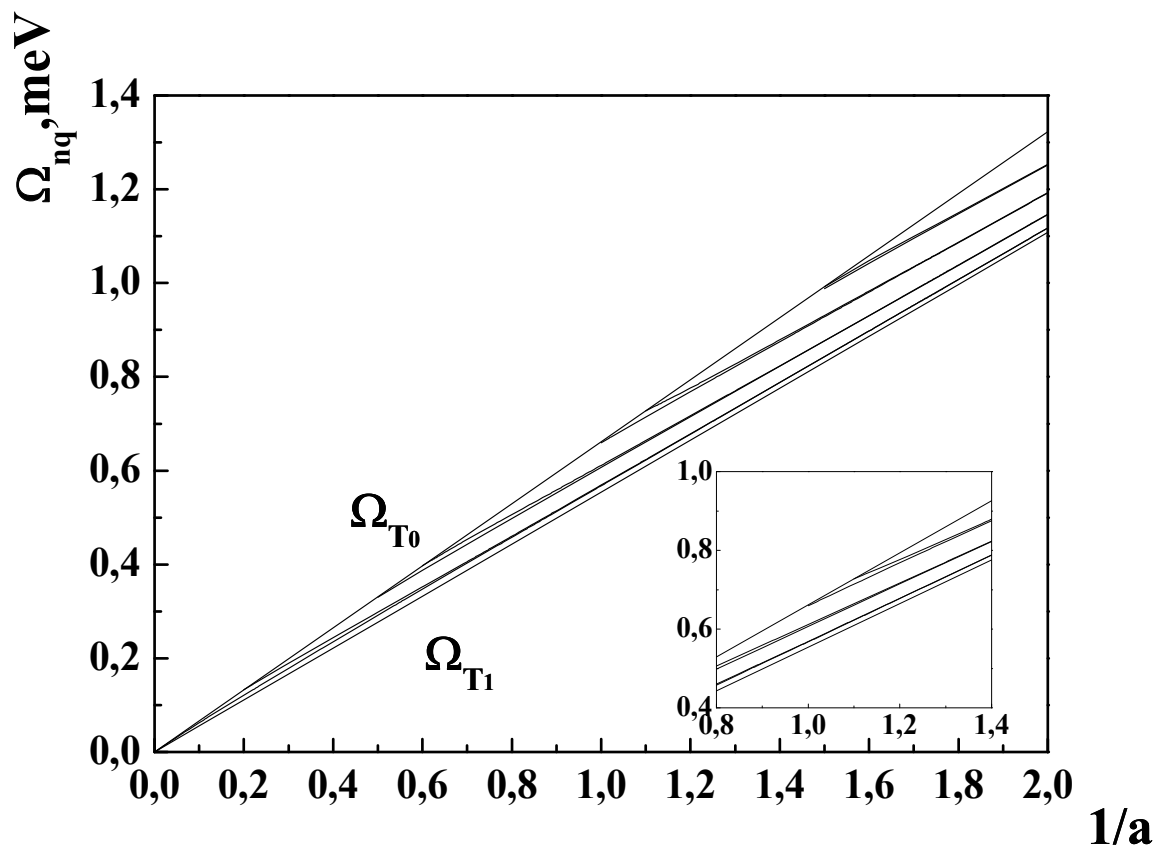


Рис. 4.8. Залежності спектру поперечних акустичних фононів ($\Omega_{n\bar{q}}$) від положення внутрішнього бар'єра (b_1) в загальній потенціальній ямі

На Рис. 4.9. наведено залежність спектру $\Omega_{n\bar{q}}$ акустичних фононів у залежності від положення внутрішнього бар'єра (b) для значення $q = 1.2$.

З рисунка видно, що залежності $\Omega_{n\bar{q}}$ від b лежать в межах: $\Omega_{T_1} = 0,66 \text{ меВ} \leq \Omega_{n\bar{q}} \leq 0,79 \text{ меВ} = \Omega_{T_0}$, причому $\Omega_{n\bar{q}} < \Omega_{n+1\bar{q}}$, $n = 1, 2, \dots, 6$. Зауважимо, що для кожної з фононних мод $\Omega_{n\bar{q}}$, $n = 1, 2, \dots, 6$ на графіку залежності від b формується n максимумів та починаючи з $n = 2$, $n - 1$ - мінімум.

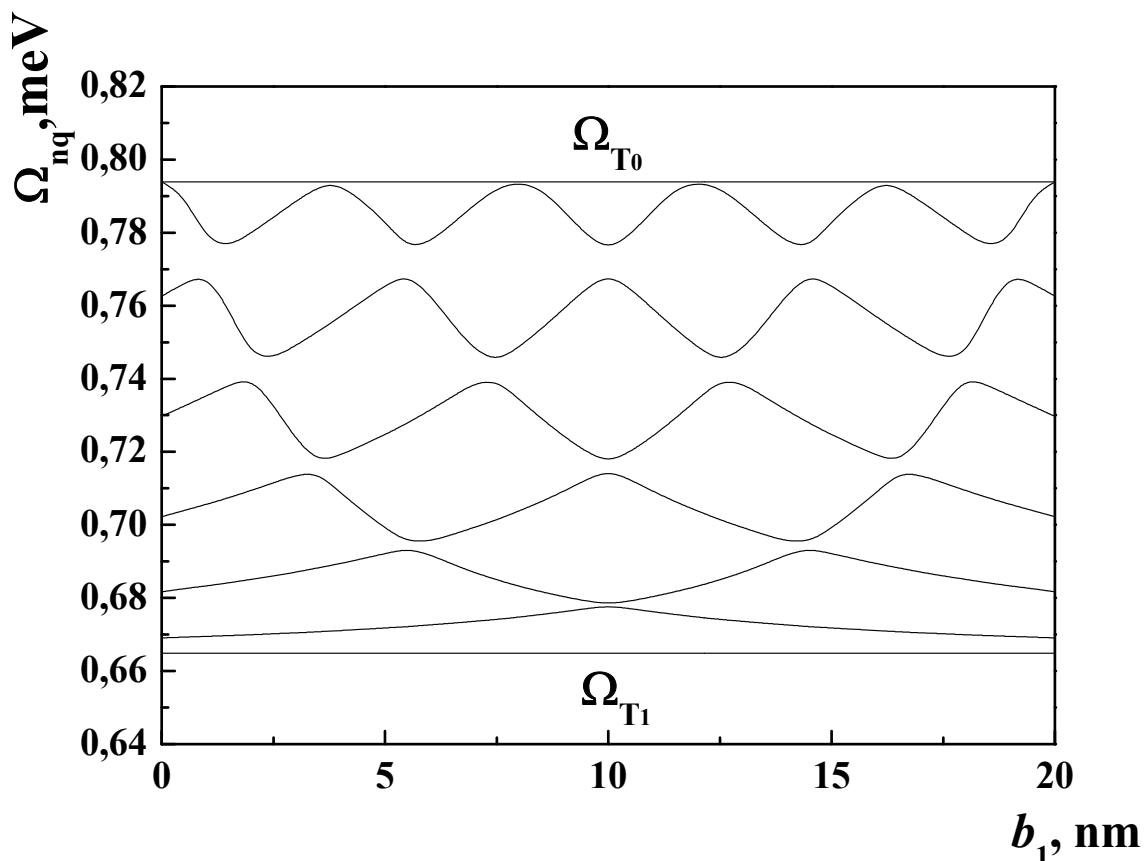


Рис. 4.9. Залежність спектру поперечних акустичних фононів ($\Omega_{n\bar{q}}$) від положення внутрішнього бар'єра (b_1) в загальній потенціальній ямі при $q = 1.2$.

Залежності енергетичного спектру акустичних фононів від товщини внутрішнього потенціального бар'єра при незмінних загальних розмірах наноструктури $a = b_1 + \Delta + b_2$, при $q = 1.2$ подано на Рис. 4.10.

З Рис. 4.10 видно, що аналогічно попередньо розглядуваним залежностям, акустичні фононні моди лежать в межах: $\Omega_{T_1} = 0,66 \text{ meV} \leq \Omega_{n\bar{q}} \leq 0,79 \text{ meV} = \Omega_{T_0}$. Для кожної з трьох груп фононних мод, що містить по дві моди з від'ємною та додатною дисперсією, залежності $\Omega_{n\bar{q}}$ від (Δ) зростають, зближуючись між собою та досягаючи максимальних значень $\Omega_{T_0} = 0,79 \text{ meV}$.

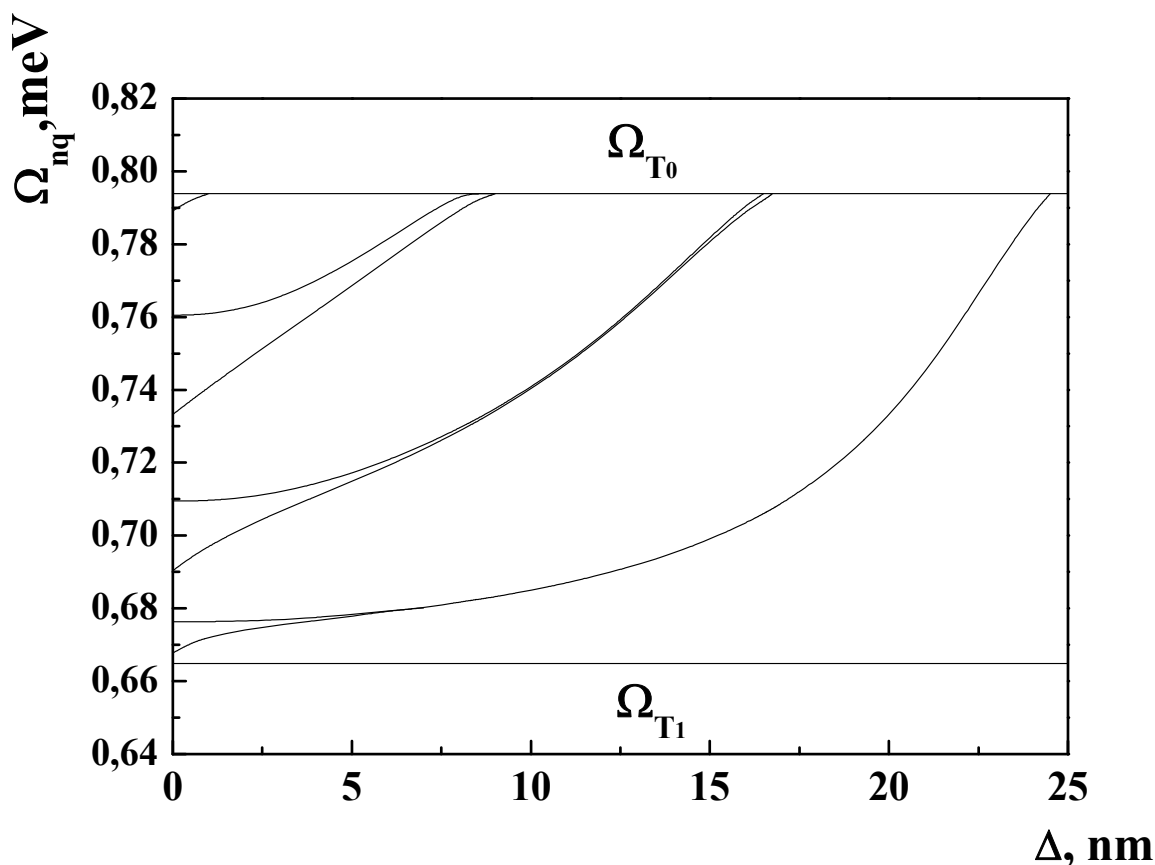


Рис. 4.10. Залежності спектру поперечних акустичних фононів $\Omega_{n\bar{q}}$ від товщини внутрішнього бар'єра в загальній потенціальній ямі при незмінних розмірах наноструктури, розраховані при $q = 1.2$

4.3.3. Теорія спектру та мод флексуально-ділататіональних мод акустичних фононів в багат шарових арсенідних наносистемах

Будемо досліджувати зміщувальні акустичні фонони, виникаючі у РТС, що складається з двох $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$ - потенціальних квантових ям та внутрішнього $\text{In}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ - потенціального бар'єра. Геометрична схема наносистеми подана на Рис. 4.11.

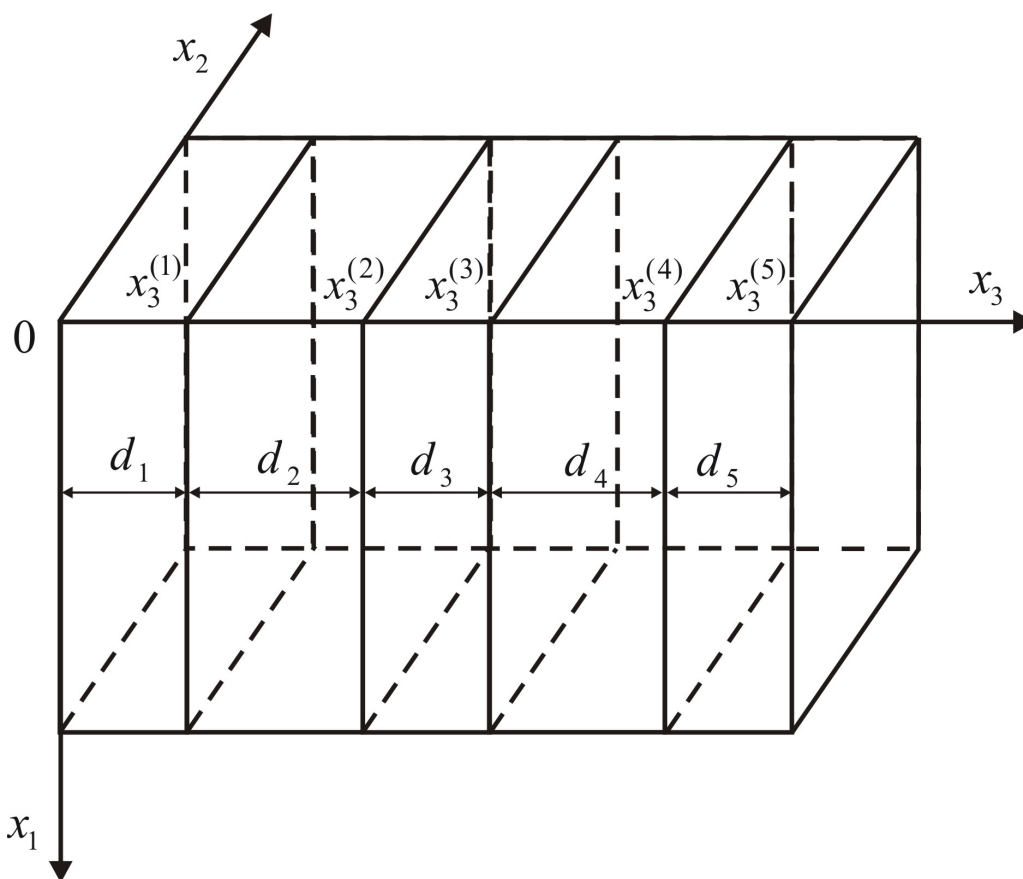


Рис. 4.10. Геометрична схема багатошарової арсенідної наносистеми

Нехай вісь $0x_3$ є напрямленою перпендикулярно по меж поділу середовищ наносистеми. З урахуванням цього та позначень на Рис. 4.10, густина середовища матеріалу наноструктури може бути подана як:

$$\rho(x_3) = \sum_{p=0}^6 \rho^{(p)} \left[\theta(x_3 - x_3^{(p)}) - \theta(x_3 - x_3^{(p+1)}) \right], \quad (4.64)$$

де $x_3^{(0)} = -\infty$; $x_3^{(7)} = +\infty$, $p = \overline{0, 6}$, а $\rho^{(p)} = \begin{cases} \rho_0, & p = 1, 3, 5 \\ \rho_1, & p = 0, 2, 4. \end{cases}$ - густина матеріалу

відповідного шару наносистеми, $\theta(x_3)$ - одинична функція Хевісайда.

Застосовуючи модель еластичного континууму, рівняння руху для вектора пружного зміщення у ізотропному випадку виглядає як:

$$\rho(x_3) \frac{\partial^2 \bar{u}(x_1, x_2, x_3)}{\partial t^2} = \frac{\partial \sigma_{ij}(x_1, x_2, x_3)}{\partial x_j}, \quad j = 1, 2, 3, \quad (4.65)$$

де $\sigma_{ij}(x_1, x_2, x_3)$ - тензор напружень. Рівняння (4.65) може бути приведено до такого вигляду:

$$\rho(x_3) \frac{\partial^2 \bar{u}}{\partial t^2} = (C_{12} + 2C_{44}) \nabla \cdot (\nabla \cdot \bar{u}) - C_{44} \nabla \times (\nabla \times \bar{u}), \quad \bar{u} = \bar{u}(x_1, x_2, x_3), \quad (4.66)$$

де

$$C_{12(44)} = \sum_{p=0}^6 C_{12(44)}^{(p)} [\theta(x_3 - x_3^{(p)}) - \theta(x_3 - x_3^{(p+1)})] = \begin{cases} C_{12(44)_0}, & p = 1, 3, 5 \\ C_{12(44)_1}, & p = 0, 2, 4 \end{cases}, \quad (4.67)$$

- пружні константи для відповідного p -го шару РТС.

У випадку флексурально-ділатаціональних мод акустичних фононів маємо що $\bar{u}(x_1, x_2, x_3) = \bar{u}(x_1, x_3) = \bar{u}(x_1) \bar{u}(x_3)$ де вектор $\bar{u}(x_3)$ має дві відмінні від нуля складові:

$$\bar{u}(x_3) = \bar{u}_{x_1}(x_3) + \bar{u}_{x_3}(x_3) = (u_{x_1}(x_3); 0; u_{x_3}(x_3)), \quad (4.68)$$

Представимо вектори $\bar{u}_{x_1}(x_3)$, $\bar{u}_{x_3}(x_3)$ у вигляді:

$$\bar{u}_{x_1}(x_3) = \bar{u}_{x_1}^t(x_3) + \bar{u}_{x_1}^l(x_3); \quad \bar{u}_{x_3}(x_3) = \bar{u}_{x_3}^t(x_3) + \bar{u}_{x_3}^l(x_3), \quad (4.69)$$

де для компонент $u_{x_1}(x_3)$ і $u_{x_3}(x_3)$ зміщувальних акустичних фононів, виконуються умови:

$$\begin{aligned} \nabla \times \bar{u}_{x_1(3)}^t(x_3) &= 0, \quad \nabla \cdot (\nabla \cdot \bar{u}_{x_1(3)}^l(x_3)) = \nabla^2 \bar{u}_{x_1(3)}^l(x_3); \\ \nabla \cdot \bar{u}_{x_1(3)}^t(x_3) &= 0; \quad \nabla \times (\nabla \times \bar{u}_{x_1(3)}^t(x_3)) = -\nabla^2 \bar{u}_{x_1(3)}^t(x_3). \end{aligned} \quad (4.70)$$

Розв'язки рівняння (4.66) з урахуванням (4.68), (4.69.) будемо шукати у вигляді:

$$\bar{u}(x_1, x_2, x_3) = \bar{u}(x_1, x_3) = \bar{u}(x_3) e^{i(qx_1 - \omega t)}, \quad (4.71)$$

Тоді рівняння (4.66) у межах p -го шару РТС розпадається на такі два рівняння:

$$\frac{d^2 u_{x_1}^{l(p)}(x_3)}{dx_3^2} - \left(q^2 - \frac{\omega^2}{v_{l_p}^2} \right) u_{x_1}^{l(p)}(x_3) = 0; \quad \frac{d^2 u_{x_1}^{t(p)}(x_3)}{dx_3^2} - \left(q^2 - \frac{\omega^2}{v_{t_p}^2} \right) u_{x_1}^{t(p)}(x_3) = 0, \quad (4.72)$$

де

$$v_l^{(p)} = \sqrt{\frac{C_{12}^{(p)} + 2C_{44}^{(p)}}{\rho^{(p)}}}; \quad v_t^{(p)} = \sqrt{\frac{C_{44}^{(p)}}{\rho^{(p)}}}, \quad (4.73)$$

швидкості поширення повздовжніх і поперечних хвиль відповідно.

Розв'язки рівнянь (4.72) такі:

$$u_{x_1}^{l(p)}(x_3) = A_l^{(p)} e^{-\chi_l^{(p)} x_3} + B_l^{(p)} e^{\chi_l^{(p)} x_3}; \quad u_{x_1}^{t(p)}(x_3) = A_t^{(p)} e^{-\chi_t^{(p)} x_3} + B_t^{(p)} e^{\chi_t^{(p)} x_3};$$

$$\chi_l^{(p)} = \sqrt{q^2 - \frac{\omega^2}{v_{lp}^2}}; \quad \chi_t^{(p)} = \sqrt{q^2 - \frac{\omega^2}{v_{tp}^2}}. \quad (4.74)$$

Для знаходження $u_{x_3}^{l(p)}(x_3)$ і $u_{x_3}^{t(p)}(x_3)$ скористаємося умовами (4.70). Оскільки:

$$\nabla \times [\bar{u}_{x_1}^l(x_3) + \bar{u}_{x_3}^l(x_3)] = 0, \quad (4.75)$$

і

$$\nabla \cdot [\bar{u}_{x_1}^t(x_3) + \bar{u}_{x_3}^t(x_3)] = 0, \quad (4.76)$$

то з (4.75), (4.76) відповідно отримується:

$$\frac{\partial \bar{u}_{x_1}^l(x_3)}{\partial x_3} - \frac{\partial \bar{u}_{x_3}^l(x_3)}{\partial x_1} = 0; \quad \frac{\partial \bar{u}_{x_1}^t(x_3)}{\partial x_1} + \frac{\partial \bar{u}_{x_3}^t(x_3)}{\partial x_3} = 0., \quad (4.77)$$

а врахування (4.74) дає:

$$u_{x_3}^l(x_3) = -\frac{i}{q} \frac{\partial u_{x_1}^l(x_3)}{\partial x_3} = i \frac{\chi_l^{(p)}}{q} \left(A_l^{(p)} e^{-\chi_l^{(p)} x_3} - B_l^{(p)} e^{\chi_l^{(p)} x_3} \right), \quad (4.78)$$

$$i q u_{x_1}^t(x_3) + \frac{d u_{x_3}^t(x_3)}{d x_3} = 0; \quad (4.79)$$

$$u_{x_3}^t(x_3) = i \frac{q}{\chi_t^{(p)}} \left(A_t^{(p)} e^{-\chi_t^{(p)} x_3} - B_t^{(p)} e^{\chi_t^{(p)} x_3} \right).$$

Тепер розв'язки рівнянь (4.72) у межах РТС можуть бути подані як:

$$u_{x_1}(x_3) = u_{x_1}^{l(p)}(x_3) + u_{x_1}^{t(p)}(x_3) = \left(B_l^{(0)} e^{\chi_l^{(0)} x_3} + B_t^{(0)} e^{\chi_t^{(0)} x_3} \right) \theta(-z) +$$

$$+ \left(A_l^{(6)} e^{-\chi_l^{(6)} x_3} + A_t^{(6)} e^{-\chi_t^{(6)} x_3} \right) \theta(x_3 - x_3^{(5)}) +$$

$$+ \sum_{p=1}^5 \left(A_l^{(p)} e^{-\chi_l^{(p)} x_3} + B_l^{(p)} e^{\chi_l^{(p)} x_3} + A_t^{(p)} e^{-\chi_t^{(p)} x_3} + B_t^{(p)} e^{\chi_t^{(p)} x_3} \right) \left[\theta(x_3 - x_3^{(p-1)}) - \theta(x_3 - x_3^{(p)}) \right];$$

$$\begin{aligned}
u_{x_3}(x_3) &= u_{x_3}^t(x_3) + u_{x_3}^l(x_3) = -i \left(\frac{\chi_l^{(p)}}{q} B_l^{(p)} e^{\chi_l^{(p)} x_3} + \frac{q}{\chi_t^{(p)}} B_t^{(p)} e^{\chi_t^{(p)} x_3} \right) \theta(-z) + \\
&+ i \left(\frac{\chi_l^{(p)}}{q} \left(A_l^{(p)} e^{-\chi_l^{(p)} x_3} - B_l^{(p)} e^{\chi_l^{(p)} x_3} \right) + \frac{q}{\chi_t^{(p)}} \left(A_t^{(p)} e^{-\chi_t^{(p)} x_3} - B_t^{(p)} e^{\chi_t^{(p)} x_3} \right) \right) \theta(x_3 - x_3^{(5)}) + (4.80) \\
&+ i \sum_{p=1}^5 \left(\frac{\chi_l^{(p)}}{q} A_l^{(6)} e^{-\chi_l^{(p)} x_3} + \frac{q}{\chi_t^{(p)}} A_t^{(6)} e^{-\chi_t^{(p)} x_3} \right) \left[\theta(x_3 - x_3^{(p-1)}) - \theta(x_3 - x_3^{(p)}) \right].
\end{aligned}$$

У виразах (4.80) враховано, що з фізичної точки зору деформація не може безмежно зростати при $x_3 \rightarrow \pm\infty$, що вимагає забезпечення виконання умов:

$$u_{x_{1(3)}}(x_3) \Big|_{x_3 \rightarrow \pm\infty} \rightarrow 0. \quad (4.81)$$

Умова (4.81) забезпечується зануленням коефіцієнтів у виразах (4.80) при $x_3 < 0$ і $x_3 > x_3^{(5)}$, тобто: $A_l^{(0)} = A_t^{(0)} = 0$; $B_l^{(5)} = B_t^{(5)} = 0$.

Для визначення коефіцієнтів $B_l^{(0)}, B_t^{(0)}, A_l^{(6)}, A_t^{(6)}, A_l^{(p)}, B_l^{(p)}, A_t^{(p)}, B_t^{(p)}$ використовуються умови неперервності компонент вектора зміщення $u_{x_1}(x_3), u_{x_3}(x_3)$ та компонент тензора напружень $\sigma_{x_3\alpha}$, $\alpha = (x_1; x_3)$, тобто:

$$\left\{ \begin{aligned}
u_{x_1}^{(p)}(x_3) \Big|_{x_3 \rightarrow x_3^{(p)} - \delta} &= u_{x_1}^{(p)}(x_3) \Big|_{x_3 \rightarrow x_3^{(p)} + \delta}; \\
u_{x_3}^{(p)}(x_3) \Big|_{x_3 \rightarrow x_3^{(p)} - \delta} &= u_{x_3}^{(p)}(x_3) \Big|_{x_3 \rightarrow x_3^{(p)} + \delta}; \\
\sigma_{x_3 x_1}^{(p)}(x_3) \Big|_{x_3 \rightarrow x_3^{(p)} - \delta} &= \sigma_{x_3 x_1}^{(p)}(x_3) \Big|_{x_3 \rightarrow x_3^{(p)} + \delta}; \\
\sigma_{x_3 x_3}^{(p)}(x_3) \Big|_{x_3 \rightarrow x_3^{(p)} - \delta} &= \sigma_{x_3 x_3}^{(p)}(x_3) \Big|_{x_3 \rightarrow x_3^{(p)} + \delta};
\end{aligned} \right. \quad (4.82)$$

$$\delta \rightarrow 0; p = 0 - 5.$$

де у співвідношеннях (4.82):

$$\begin{aligned}
\sigma_{x_3 x_1}^{(p)}(x_3) &= C_{44}^{(p)} \left(\frac{\partial \bar{u}_{x_3}^{(p)}(x_3)}{\partial x_1} + \frac{\partial \bar{u}_{x_1}^{(p)}(x_3)}{\partial x_3} \right) = C_{44}^{(p)} \left(i q u_{x_3}^{(p)}(x_3) + \frac{\partial u_{x_1}^{(p)}(x_3)}{\partial x_3} \right) e^{i q x_1} = \\
&= \left(C_{44}^{(p)} - 2 \chi_l^{(p)} A_l^{(p)} e^{-\chi_l^{(p)} x_3} + 2 \chi_l^{(p)} B_l^{(p)} e^{\chi_l^{(p)} x_3} - \left(\frac{q^2}{\chi_t^{(p)}} + \chi_t^{(p)} \right) A_l^{(p)} e^{-\chi_l^{(p)} x_3} + \right. \\
&\quad \left. + \left(\frac{q^2}{\chi_t^{(p)}} + \chi_t^{(p)} \right) B_l^{(p)} e^{\chi_l^{(p)} x_3} \right) e^{i q x_1}; \\
\sigma_{x_3 x_3}^{(p)}(x_3) &= C_{12}^{(p)} \nabla \bar{u}(x_1, x_3) + 2 C_{44}^{(p)} \frac{\partial \bar{u}_{x_3}^{(p)}(x_3)}{\partial x_3} = \\
&= \left(i q C_{12}^{(p)} u_{x_1}^{(p)}(x_3) + (C_{12}^{(p)} + 2 C_{44}^{(p)}) \frac{\partial u_{x_3}^{(p)}(x_3)}{\partial x_3} \right) e^{i q x_1} = \\
&= \left(i q C_{12}^{(p)} u_{x_1}^{(p)}(x_3) + C_{11}^{(p)} \frac{\partial u_{x_3}^{(p)}(x_3)}{\partial x_3} \right) e^{i q x_1} = i \left(\left(q C_{12}^{(p)} - \frac{(\chi_l^{(p)})^2}{q} C_{11}^{(p)} \right) A_l^{(p)} e^{-\chi_l^{(p)} x_3} + \right. \\
&\quad \left. + \left(q C_{12}^{(p)} - \frac{(\chi_l^{(p)})^2}{q} C_{11}^{(p)} \right) B_l^{(p)} e^{\chi_l^{(p)} x_3} + q (C_{12}^{(p)} - C_{11}^{(p)}) A_l^{(p)} e^{-\chi_l^{(p)} x_3} + q (C_{12}^{(p)} - C_{11}^{(p)}) B_l^{(p)} e^{\chi_l^{(p)} x_3} \right); \\
C_{12}^{(p)} &= C_{11}^{(p)} - 2 C_{44}^{(p)}.
\end{aligned} \tag{4.83}$$

Зв'язок між коефіцієнтами $A_l^{(p)}, B_l^{(p)}, A_t^{(p)}, B_t^{(p)}$ p -го і $p+1$ -го шарів РТС встановлюється за допомогою методу трансфер-матриці []

$$\begin{pmatrix} A_l^{(p)} \\ B_l^{(p)} \\ A_t^{(p)} \\ B_t^{(p)} \end{pmatrix} = T^{(p,p+1)} \begin{pmatrix} A_l^{(p+1)} \\ B_l^{(p+1)} \\ A_t^{(p+1)} \\ B_t^{(p+1)} \end{pmatrix}; \quad T^{(p,p+1)} = M_p^{-1} M_{p+1}. \tag{4.84}$$

де з урахуванням (4.80), (4.83) матриця M_p визначається як:

$$M_p = \begin{pmatrix} e^{-\chi_l^{(p)} x_3^{(p)}} & e^{\chi_l^{(p)} x_3^{(p)}} & e^{-\chi_l^{(p)} x_3^{(p)}} & e^{\chi_l^{(p)} x_3^{(p)}} \\ i \frac{\chi_l^{(p)}}{q} e^{-\chi_l^{(p)} x_3^{(p)}} & -i \frac{\chi_l^{(p)}}{q} e^{\chi_l^{(p)} x_3^{(p)}} & i \frac{q}{\chi_l^{(p)}} e^{-\chi_l^{(p)} x_3^{(p)}} & -i \frac{q}{\chi_l^{(p)}} e^{\chi_l^{(p)} x_3^{(p)}} \\ -2C_{44}^{(p)} \chi_l^{(p)} e^{-\chi_l^{(p)} x_3^{(p)}} & 2C_{44}^{(p)} \chi_l^{(p)} e^{\chi_l^{(p)} x_3^{(p)}} & -\left(\frac{q^2}{\chi_l^{(p)}} + \chi_l^{(p)}\right) e^{-\chi_l^{(p)} x_3^{(p)}} & \left(\frac{q^2}{\chi_l^{(p)}} + \chi_l^{(p)}\right) e^{\chi_l^{(p)} x_3^{(p)}} \\ i \left(qC_{12}^{(p)} - \frac{(\chi_l^{(p)})^2}{q} C_{11}^{(p)} \right) e^{-\chi_l^{(p)} x_3^{(p)}} & i \left(qC_{12}^{(p)} - \frac{(\chi_l^{(p)})^2}{q} C_{11}^{(p)} \right) e^{\chi_l^{(p)} x_3^{(p)}} & iq (C_{12}^{(p)} - C_{11}^{(p)}) e^{-\chi_l^{(p)} x_3^{(p)}} & iq (C_{12}^{(p)} - C_{11}^{(p)}) e^{\chi_l^{(p)} x_3^{(p)}} \end{pmatrix}. \quad (4.85)$$

Тепер коефіцієнти $B_l^{(0)}, B_l^{(0)}$ у середовищі зліва від РТС можуть бути вираженими через коефіцієнти $A_t^{(6)}, A_t^{(6)}$ у середовищі справа від РТС:

$$\begin{pmatrix} 0 \\ B_l^{(0)} \\ 0 \\ B_l^{(0)} \end{pmatrix} = T^{(0,6)} \begin{pmatrix} A_t^{(6)} \\ 0 \\ A_t^{(6)} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (4.86)$$

де

$$T^{(0,6)} = T(q, \omega) = T^{(0,1)} T^{(1,2)} T^{(2,3)} T^{(3,4)} T^{(4,5)} T^{(5,6)}. \quad (4.87)$$

трансфер-матриця наноструктури.

Тоді дисперсійне рівняння, з якого визначається спектр $\Omega_{nq} = \hbar \omega_{n,q}$ зміщувальних акустичних фононів досліджуваної РТС отримується прирівнюванням визначника трансфер-матриці до нуля:

$$|T(q, \omega)| = 0. \quad (4.88)$$

Увівши позначення:

$$\begin{aligned} b_l^{(0)} &= \frac{B_l^{(0)}}{B_l^{(0)}}; a_t^{(6)} = \frac{A_t^{(6)}}{B_l^{(0)}}; a_t^{(6)} = \frac{A_t^{(6)}}{B_l^{(0)}}; a_t^{(p)} = \frac{A_t^{(p)}}{B_l^{(0)}}; \\ b_l^{(p)} &= \frac{B_l^{(p)}}{B_l^{(0)}}; a_t^{(p)} = \frac{A_t^{(p)}}{B_l^{(0)}}; b_t^{(p)} = \frac{B_t^{(p)}}{B_l^{(0)}}. \end{aligned} \quad (4.89)$$

та використовуючи умову нормування амплітуди фононів:

$$(B_l^{(0)})^2 \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x_3) (u_{x_1}(x_3) u_{x_1}^*(x_3) + u_{x_3}(x_3) u_{x_3}^*(x_3)) dx_3 = \frac{\hbar}{2\omega_{\lambda,q} z_5} \quad (4.90)$$

усі коефіцієнти (4.89) виражаються через коефіцієнт $B_l^{(0)}$, що знаходиться із (4.90). Таким чином коефіцієнти (4.89), а значить і акустичні моди $u_{x_1}(x_3)$ і $u_{x_3}(x_3)$ однозначно визначені.

4.3.4. Властивості спектру зсувних флексурально-ділататіональних мод акустичних фононів у багат шарових арсенідних наносистемах

Застосовуючи розвинену вище теорію, виконувались розрахунки спектру зміщувальних акустичних фононів від хвильового вектора q та геометричних параметрів досліджуваної РТС GaAs- квантовими ямами та AlAs - квантовими бар'єрами. Геометричні параметри трибар'єрної РТС вибирались такими: ширини квантових ям - $d_2 = d_4 = 2$ нм, ширини потенціальних бар'єрів $d_1 = 1$ нм. Фізичні параметри наноструктури такі: густина матеріалу потенціальних бар'єрів та ям $\rho_0 = 3,76$ г/см³; $\rho_1 = 5,32$ г/см³ відповідно, пружні константи: $C_{11}^{(0)} = 12,02 \cdot 10^{11}$ дин/см²; $C_{44}^{(1)} = 11,90 \cdot 10^{11}$ дин/см²; $C_{44}^{(0)} = 5,99 \cdot 10^{11}$ дин/см²; $C_{44}^{(1)} = 5,94 \cdot 10^{11}$ дин/см².

На Рис. 4.11 приведено залежності спектру акустичних фононів $\Omega_{nq} = \hbar\omega_{\lambda,q}$ від хвильового вектора $q = 1 / (d_1 + d_2 + d_3 + d_4 + d_5)$

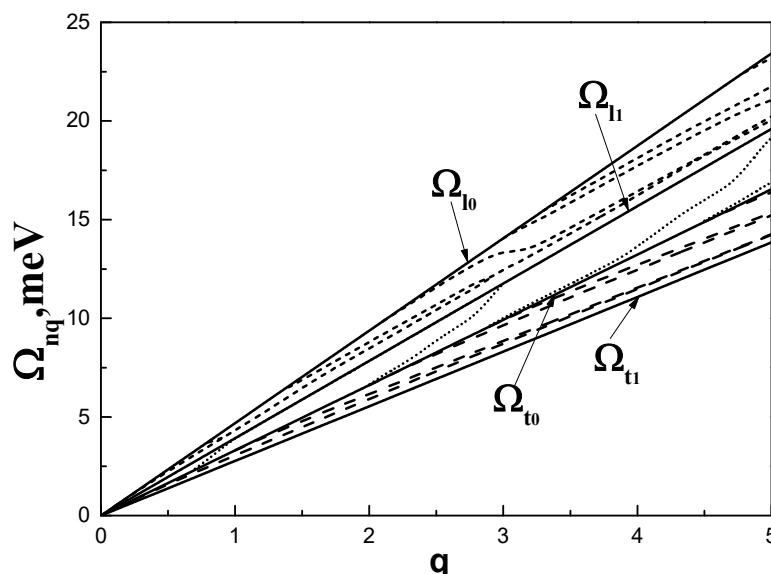


Рис. 4.11. Залежності груп спектру акустичних фононів з різною дисперсією від хвильового вектора q

Як видно з Рис. 4.11, залежності $\Omega_{nq}(q) = \hbar\omega_{\lambda,q}(q)$ формують три різні групи (I, II, III), значення енергій яких лежать у межах: $I(\Omega_{l_1} \leq \Omega \leq \Omega_{l_0})$, $II(\Omega_{l_0} \leq \Omega \leq \Omega_{l_1})$, $III(\Omega_{l_1} \leq \Omega \leq \Omega_{l_0})$, де $\Omega_{l_0}(q) = \Omega_{l_0}^{AlAs}(q)$; $\Omega_{l_0} = \Omega_{l_0}^{AlAs}(q)$; $\Omega_{l_1}(q) = \Omega_{l_1}^{GaAs}(q)$; $\Omega_{l_1} = \Omega_{l_1}^{GaAs}(q)$ - відповідні значення енергій поперечних та поздовжніх акустичних фононів для масивних кристалів AlAs і GaAs відповідно. При цьому для I - ої та III - ої груп спектру дисперсія залежностей є наступною: значення енергій починаються при значеннях $\Omega_{nq}(q) = \Omega_{l_0}(q)$ і $\Omega_{nq}(q) = \Omega_{l_0}$ відповідно, і при збільшенні q вони також зростають, досягаючи значень $\Omega_{nq}(q) = \Omega_{l_1}(q)$ і $\Omega_{nq}(q) = \Omega_{l_1}$. Для II - ої ж групи значення енергії фононів починаються при $\Omega_{nq}(q) = \Omega_{l_0}(q)$, далі зі збільшенням q вони зростають, досягаючи значень $\Omega_{nq}(q) = \Omega_{l_1}$. Слід зауважити, що залежності для I - ої та III - ої груп спектру мають схожу поведінку, що полягає у зближенні кривих для сусідніх рівнів $\Omega_{nq}(q)$ і $\Omega_{n+1q}(q)$, проте для III - ої групи сусідні рівні окрім зближення, як видно з Рис. 4.11 мають тенденцію до зливання зі збільшенням q . За своєю фізичною природою фонони I - ої групи відносяться до поперечних зміщень середовища, а III - ої – до поздовжніх зміщень

Далі на Рис. 4.12 приведено розраховані при значенні хвильового вектора $q = 1.7$ залежності енергії фононів від положення $b = d_2 + d_4$ внутрішнього потенціального бар'єра у сумарній потенціальній ямі, при незмінних решті геометричних параметрів РТС.

При значенні хвильового вектора $q = 1.7$ як видно з Рис. 4.11 існують акустичні фононні моди першої та встановлених груп, значення енергій яких лежать у межах $\Omega_{l_1} \leq \Omega \leq \Omega_{l_0}$ і $\Omega_{l_1} \leq \Omega \leq \Omega_{l_0}$.

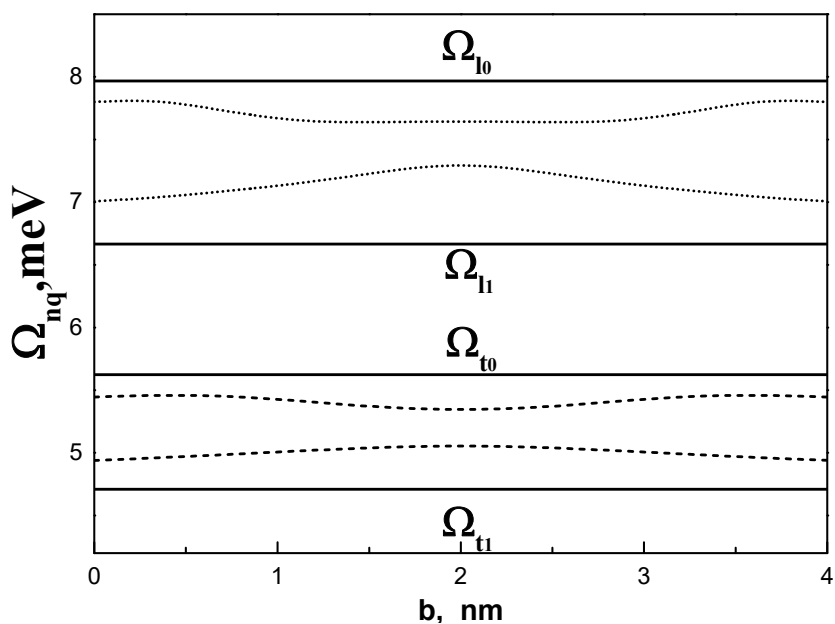


Рис. 4.12. Залежності груп спектру акустичних фононів від величини $b = d_2 + d_4$ при $q = 1.7$

Крім того, як видно Рис. 4.12, у кожній груп залежностей формується по дві криві $\Omega_n = \Omega_n(q)$. Зі зміною b для $n = 1$ і $n = 2$ у обох кривих формується відповідно один та два максимуми. Це свідчить про те, що процеси формування віток для поперечних та поздовжніх складових фононних мод слабо пов'язані між собою.

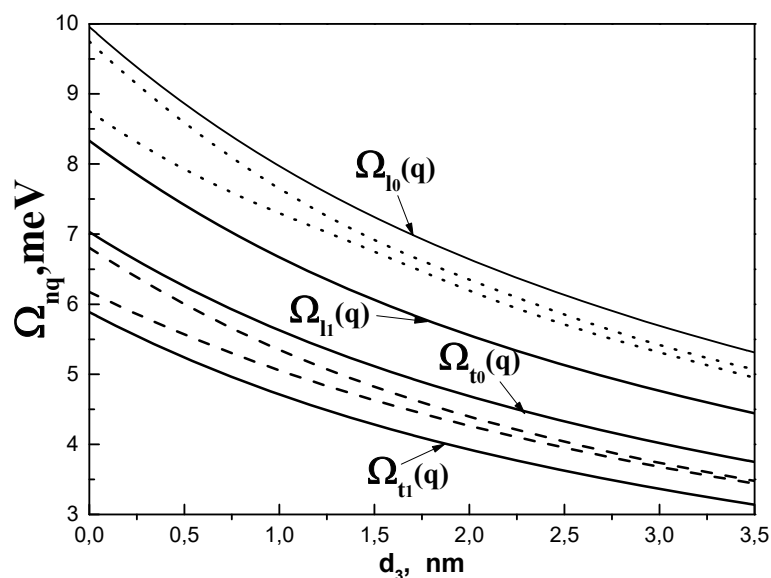


Рис. 4.13. Залежності груп спектру акустичних фононів з різною дисперсією від хвильового вектора q

На Рис. 4.13 приведено залежності від товщини d_3 внутрішнього бар'єра розрахованих при $q = 1.7$ енергій фононних мод для I - ої та III - ої груп. Як видно з

Рис. 4.13 збільшення товщини внутрішнього бар'єра при постійних інших геометричних параметрах наносистеми призводить до сталого зменшення значень енергій фононних енергетичних рівнів. При цьому відбувається поступове зближення першого та другого фононних енергетичних рівнів у кожній з груп.

Висновки до розділу 4

1. Вперше розвинено математичний апарат послідовної аналітичної теорії мод поперечних, флексуральних та ділататіональних мод акустичних фононів, виникаючих у нітридних бінарних AlN/GaN і потрійних AlGaN/GaN багатошарових РТС. На базі розвинутої теорії виконано розрахунки спектру та компонент поля зміщення поперечних, флексуральних та ділататіональних акустичних фононів, їх залежностей від геометричних параметрів РТС та досліджено їх властивості. Встановлено, що спектри акустичних фононів формуються в інтервалах, межі яких визначаються швидкостями поширення поперечних та поздовжніх хвиль у масивних напівпровідниках.

2. Встановлено, що спектр акустичних фононів нітридної наноструктури складається з двох груп зміщувальних та п'яти окремих груп флексуральних та ділататіональних фононів. Встановлено особливості нормованих компонент полів зміщення для кожної з фононних груп.

3. З використанням моделі пружного континууму на основі отриманих точних аналітичних розв'язків рівнянь руху пружного середовища багатошарової AlAs/GaAs РТС вперше розвинено теорію поперечних флексуральних та ділататіональних мод акустичних фононів. Виконано дослідження властивостей спектру та компонент поля зміщення, що визначаються вказаними типами фононів.

РОЗДІЛ 5. ТЕОРІЯ ТА МЕХАНІЗМИ ВЗАЄМОДІЇ ЕЛЕКТРОНІВ З АКУСТИЧНИМИ ФОНОНАМИ ЧЕРЕЗ П'ЄЗОЛЕКТРИЧНИЙ ТА ДЕФОРМАЦІЙНИЙ ПОТЕНЦІАЛИ. ТЕОРІЯ П'ЄЗОЕЛЕКТРИЧНОГО ЕФЕКТУ СТВОРЮВАНОВОГО АКУСТИЧНИМИ ФОНОНАМИ У НІТРИДНИХ НАНОСИСТЕМАХ

В попередньому розділі дисертації було розвинуто послідовну аналітичну теорію акустичних фононів, що виникають у плоских наносистемах, створених на основі нітридних напівпровідникових сполук. Дана теорія безпосередньо може слугувати основою для дослідження актуальних задач, асоційованих з електронним тунельним транспортом у таких наносистемах, зокрема електрон-фононної взаємодії, яка є де-факто взагалі не дослідженою. Отже, метою даного розділу дисертації є побудова теорії взаємодії електронів з акустичними фононами за довільних значень температури. Буде виконано послідовне дослідження електрон-фононної взаємодії через механізми деформаційного потенціалу та п'єзоелектричного потенціалу й порівняння результатів цього дослідження. Для цього буде отримано точний розв'язок загальної задачі для акустичних фононів з п'єзоелектричним ефектом, який ними зумовлюється. Окремо буде розглянуто випадок взаємодії електронів з зсувними акустичними фононами через механізм п'єзоелектричного потенціалу, а також буде показано, що це є єдиний спосіб такої взаємодії, оскільки взаємодія такого типу фононів з акустичними фононами через деформаційний потенціал не є можливою.

5.1. Теорія взаємодії електронів з акустичними фононами в плоских нітридних наносистемах при $T \neq 0K$ через механізм деформаційного потенціалу

Будемо досліджувати стаціонарні електронні стани у плоскій багаточаровій напівпровідниковій AlN/GaN наноструктурі, яка виступає в ролі окремо вибраного каскаду ККД. Слід зауважити, що вибір для дослідження наносистеми бінарного типу зумовлена необхідністю дослідження внеску у електрон-фононну взаємодію фононних мод виникаючих у AlN та GaN без внеску змішаних мод як це розглядалось у Розділі 4, що фактично сильно спотворює фононний спектр. Отже,

Декартову систему координат ми виберемо таким чином, так, що її вісь Oz є перпендикулярною гетерогеж між середовищами заданих N шарів наносистеми (Рис. 5.1). Для забезпечення умови самоузгодженості каскадів ККД й довільності виокремлення окремого каскаду приймається, що середовища (0) та $(N+1)$, відповідно зліва та справа від наносистеми відповідають напівпровідниковому середовищу AlN , а внутрішні шари наноструктури утворені чергуванням напівпровідників GaN і AlN .

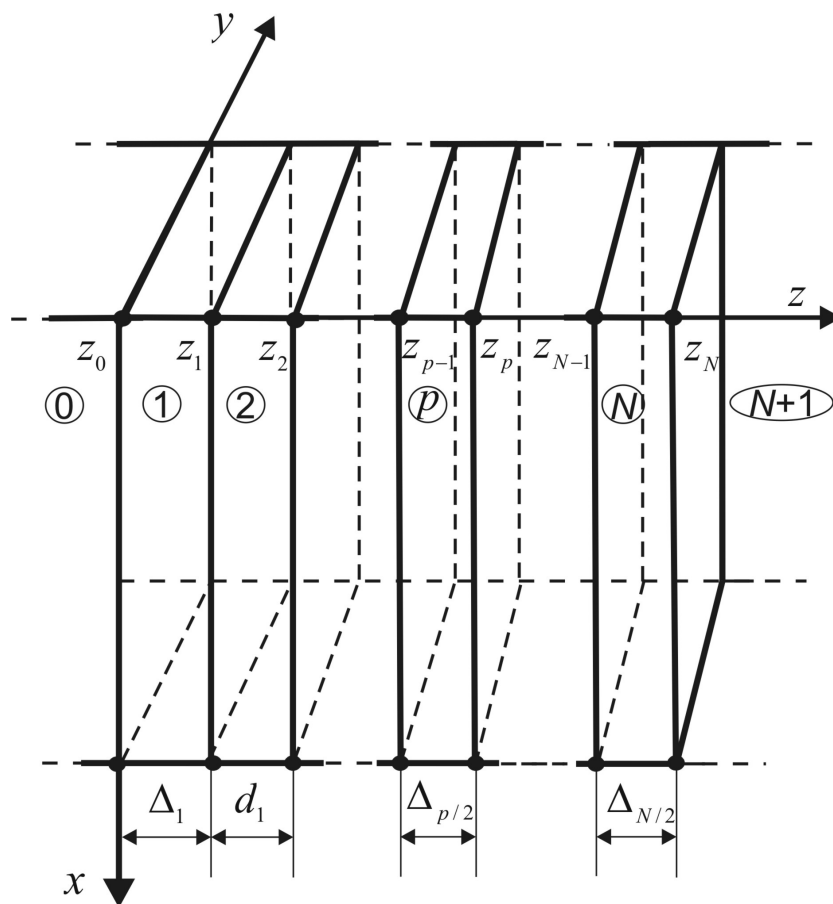


Рис. 5.1. Геометрична схема плоскої багатошарової AlN/GaN наноструктури.

З використанням моделі ефективних мас та моделі діелектричного континууму ефективна маса електрона та діелектрична проникність РТС можуть бути записані у вигляді:

$$m(z) = \sum_{p=0}^N m^{(p)} [\theta(z - z_p) - \theta(z - z_{p+1})]; \quad \varepsilon(z) = \sum_{p=2}^N \varepsilon^{(p)} [\theta(z - z_p) - \theta(z - z_{p+1})],$$

$$z_{N+1} = +\infty; \quad (5.1)$$

$$m^{(p)} = \begin{cases} m_0, & \text{потенціальні ями} \\ m_1, & \text{потенціальні бар'єри} \end{cases}; \quad \varepsilon^{(p)} = \begin{cases} \varepsilon_{(0)}, & \text{потенціальні ями} \\ \varepsilon_{(1)}, & \text{потенціальні бар'єри} \end{cases}$$

де $\theta(z)$ - одинична функція Хевісайда, а m_0, m_1 - значення ефективних мас електрона в потенціальних бар'єрах та ямах відповідно, $\varepsilon_{(0)}, \varepsilon_{(1)}$ - діелектричні проникності напівпровідникових шарів наноструктури відповідно.

Хвильову функцію електрона в досліджуваній РТС представимо у вигляді:

$$\Psi_{E \bar{k}_0}(\bar{r}_0, z) = \frac{1}{\sqrt{l_1 l_2}} e^{i \bar{k} \bar{r}_0} \Psi_E(z), \quad (5.2)$$

де l_x і l_y - задають геометричні розміри перерізу РТС площиною xOy , \bar{r}_0 і \bar{k} - відповідно вектор та квазіімпульс електрона в цій площині.

Стаціонарний електронний спектр E_n та його хвильові функції $\Psi_E(z)$ отримуються шляхом знаходження розв'язків самоузгодженої системи рівнянь Шредінгера-Пуассона:

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left(\frac{1}{m(z)} \frac{d\Psi(z)}{dz} \right) + V(z) \Psi_E(z) = E \Psi_E(z), \\ \frac{d}{dz} \left(\varepsilon(z) \frac{dV_H(z)}{dz} \right) = -e \rho^{(elect)}(z) \end{cases} \quad (5.3)$$

де ефективний потенціал наноструктури для електрона сумою таких парціальних складових:

$$V(z) = \Delta E_C(z) + V_E(z) + V_H(z) + V_{HL}(z). \quad (5.4)$$

Повна енергія електрона в РТС визначається як:

$$E_{n\bar{k}} = E_n + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n^{(eff)}}, \quad (5.5)$$

де другий доданок описує енергію, що відповідає руху електрона у напрямку перпендикулярному до осі Oz , а ефективна маса електрона $m_n^{(eff)}$ отримується з урахуванням (5.1) апроксимуючи внесок усіх шарів РТС [184, 185]:

$$m_n^{(eff)} = \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \left(|\Psi_n(z)|^2 / m(z) \right) dz \right]^{-1} \quad (5.6)$$

Густина зарядів у РТС визначається як:

$$\rho^{(elect)}(z) = e(N_D^+ - n(z)) + \sum_{p=1}^N \sigma_p \delta(z - z_p), \quad (5.7)$$

де N_D^+ - концентрація іонізованих донорних домішок,

$n(z) = \frac{m(z)k_B T}{\pi \hbar^2} \sum_n |\Psi(E_n, z)|^2 \ln \left| 1 + \exp \left(\frac{E_F - E_n}{k_B T} \right) \right|$ - концентрація електронів, що

створюють статичний просторовий заряд в РТС, E_F - рівень Фермі матеріалу наносистеми, E_n - значення енергій стаціонарного електронного спектру, $\sigma_p = P_{p+1} - P_p$ - поверхнева густина зарядів, виникаюча унаслідок різної величини поляризацій в сусідніх шарах РТС, $\delta(z)$ - дельта функція Дірака. Тут $P = P_{Sp} + P_{Pz}$ - сумарна величина поляризації виникаюча в шарах РТС, P_{Sp}, P_{Pz} - спонтанна та п'єзоелектрична поляризації відповідно.

У виразі (5.5):

$$\Delta E_C(z) = \begin{cases} 0, & \text{потенціальні ями} \\ 0.765(E_g(\text{AlN}) - E_g(\text{GaN})), & \text{потенціальні бар'єри} \end{cases} \quad (5.8)$$

- потенціальний профіль наносистеми для електрона, розрахований без урахування внутрішніх електричних полів. Залежність ширини забороненої зони E_g від температури T у співвідношенні (1.5) може бути розрахованою за лінійно-квадратичним співвідношенням Варшні для напівпровідникового сплаву:

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{aT^2}{b+T}, \quad (5.9)$$

де $E_g(0) = E_g^{\text{AlN}}(0)$ - ширини забороненої зони для AlN напівпровідника при $T = 0\text{ K}$, а $a = 1.799 \times 10^{-3}$ (eV/K), $b = 1462$ (K) - параметри Варшні [120].

Складова $V_E(z)$ ефективного потенціалу визначається взаємодією електрона з внутрішніми електричними полями (F_p , $p = 1..N$), виникаючими в РТС унаслідок існування в її шарах спонтанної та п'єзоелектричної поляризацій (3.26):

$$V_E(z) = e \sum_{p=1}^N (-1)^{p-1} (F_p z - F_{p-1} z_{p-1}) [\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)],$$

$$F_0 = 0; F_p = \frac{\sum_{k=1}^N (P_k - P_p)(z_k - z_{k+1}) / \varepsilon^{(k)}}{\varepsilon^{(p)} \sum_{k=1}^N (z_k - z_{k+1}) / \varepsilon^{(k)}}. \quad (5.10)$$

Складова:

$$V_{HL}(z) = -\frac{1}{4\pi} \left(\frac{9}{4\pi^2} \right)^{1/3} \left[1 + \frac{0,6213 r_s}{21} \ln \left(1 + \frac{21}{r_s(z)} \right) \right] \frac{e^2}{\varepsilon_0 r_s(z) \varepsilon(z) a_B^*(z)}, \quad (5.11)$$

$$r_s(z) = \left(4\pi a_B^* n(z) / 3 \right)^{-1/3}, \quad a_B^*(z) = \varepsilon(z) / m(z) a_B$$

обмінно-кореляційний потенціал Хедіна-Лундквіста, де a_B - радіус Бора.

Розв'язки системи рівнянь Шредінгера-Пуассона знаходились за допомогою методу описаного в Розділі 3 дисертації. Тоді потенціал, що визначається внеском носіїв заряду у межах РТС $V_H(z)$ знаходиться в такому вигляді:

$$V_H(z) = \sum_{p=1}^N V_H^{(p)}(z) [\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)];$$

$$V_H^{(p)}(z) = -\frac{e}{\varepsilon_{(p)}} \int_0^z \int_0^{x_1} \left\{ e \left(N_D^+ - \frac{m_{(p)} k_B T}{\pi \hbar^2} \sum_n |\Psi(E_n, x_2)|^2 \ln \left| 1 + \exp \left(\frac{E_F - E_n}{k_B T} \right) \right| \right) + \sigma_p \delta(x_2 - z_p) \right\} dx_1 dx_2. \quad (5.12)$$

Розв'язок системи (5.3) знаходиться методом ітерацій, послідовно знаходячи розв'язки рівняння Шредінгера й кожного апроксимуючи величину знайденого ефективного потенціалу (5.5) величиною $U_{\text{appr}}(z) = V(z)$, де:

$$U_{\text{appr}}(z) = \sum_{p=1}^N \sum_{l=0}^M eF(z_{p_l}) z \left[\theta(z - z_{p_l}) - \theta(z - z_{p_{l+1}}) \right], \quad (5.13)$$

$$F(z_{p_l}) = (V(z_{p_{l+1}}) - V(z_{p_l})) / e(z_{p_{l+1}} - z_{p_l}),$$

$$\Psi(E, z) = A^{(0)} e^{\chi^{(0)} z} \theta(-z) + \sum_{p=1}^N \sum_{l=0}^M \left[A^{(p_l)} Ai(\zeta^{(p_l)}(z)) + B^{(p_l)} Bi(\zeta^{(p_l)}(z)) \right] \left[\theta(z - z_{p_l}) - \theta(z - z_{p_{l+1}}) \right] + \quad (5.14)$$

$$+ B^{(N+1)} e^{-\chi^{(6)} z} \theta(z - z_5), \quad \zeta^{(p_l)}(z) = \left(2m^{(p_l)} eF(z_{p_l}) / \hbar^2 \right)^{1/3} \left[(\Delta E_C(z) - E) / eF(z_{p_l}) - z \right],$$

що задає кусково-неперервну функцію, що отримується розбиттям кожного шару

РТС точками $z_{p_l} = \frac{l}{2M}(z_p - z_{p-1})$, $p = 1 \dots N$, $z_0 = 0$, де M - кількість розбиттів

вибраного p -го шару наносистеми, $Ai x$, $Bi x$ - функції Ейрі.

Стационарний спектр електрона E_n визначається з дисперсійного рівняння, яке в свою чергу отримується з граничних умов на гетеромежах РТС для хвильових функцій та потоків їх ймовірностей:

$$\Psi^{(p)}(E, z_p) = \Psi^{(p+1)}(E, z_p); \quad \left. \frac{d\Psi_n^{(p)}(E, z)}{m(z)dz} \right|_{z=z_p-\varepsilon} = \left. \frac{d\Psi_n^{(p+1)}(E, z)}{m(z)dz} \right|_{z=z_p+\varepsilon}, \quad \varepsilon \rightarrow 0. \quad (5.15)$$

Також, з використанням умов (5.15) та умови нормування для хвильової функції

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi_n(E_n, z)|^2 dz = 1 \quad (5.16)$$

знаходяться усі невідомі коефіцієнти $A^{(0)}$, $B^{(N+1)}$, $A^{(p_l)}$, $B^{(p_l)}$, що повністю визначає хвильову функцію електрона $\Psi_n(E_n, z)$.

Далі, для стаціонарних електронних станів в межах ефективного потенціалу РТС $V(z)$ визначимо квантовану хвильову функцію в представленні вторинного квантування як:

$$\widehat{\Psi}(x, y, z) = \sum_{n\bar{k}} \Psi_{n\bar{k}}(\bar{r}_0, z) \widehat{a}_{n\bar{k}} = \sum_{\bar{k}} \sum_n \Psi_{n\bar{k}_0}(\bar{r}_0, z) \widehat{a}_{n\bar{k}} \quad (5.17)$$

отримаємо гамільтоніан незв'язаних електронів у вигляді:

$$\widehat{H}_e = \sum_{n,\bar{k}} E_{n\bar{k}} \widehat{a}_{n\bar{k}}^+ \widehat{a}_{n\bar{k}}, \quad (5.18)$$

де $E_{n\bar{k}}$ визначається співвідношенням (5.5), а фермівські оператори народження ($\widehat{a}_{n\bar{k}}^+$) та знищення ($\widehat{a}_{n\bar{k}}$) стаціонарних електронних станів задовольняють відоме

антикомутативне співвідношення: $\{\widehat{a}_{n\bar{k}}, \widehat{a}_{m\bar{k}'}^+\} = \delta_{n,m} \delta_{k,k'}$; $\{\widehat{a}_{n\bar{k}}, \widehat{a}_{m\bar{k}'}\} = \{\widehat{a}_{n\bar{k}}^+, \widehat{a}_{m\bar{k}'}^+\} = 0$.

Теорія акустичних фононів у бінарній багатошаровій нітридній резонансно-тунельній структурі будується наступним чином. Спектр та моди акустичних фононів досліджуваної багатошарової РТС отримується шляхом знаходження розв'язків рівняння руху пружного середовища:

$$\rho(z) \frac{\partial^2 u_l(r,t)}{\partial t^2} = \frac{\partial \sigma_{lk}(r)}{\partial x_k}; l, k = (1; 2; 3) \quad (5.19)$$

де $x_1 = x$; $x_2 = y$; $x_3 = z$, $u_l = u_l(x, y, z, t)$ - компонента вектора пружного зміщення в точці $r = (x_1, x_2, x_3) = (x, y, z)$ у момент часу t ,

$\sigma_{ik}(r) = \frac{1}{2} C_{iklm}(z) \left(\frac{\partial u_l(r)}{\partial x_m} + \frac{\partial u_m(r)}{\partial x_l} \right)$, $l, m = (1; 2; 3)$ - тензор напружень, а

$$\rho(z) = \sum_{p=1}^N \rho^{(p)} \left[\theta(z_p - z_{p-1}) - \theta(z_p - z_{p+1}) \right], \quad (5.20)$$

$$C_{iklm}(z) = \sum_{p=1}^N C_{iklm}^{(p)} \left[\theta(z_p - z_{p-1}) - \theta(z_p - z_{p+1}) \right] \quad (5.21)$$

- відповідно густина та пружні константи матеріалу наносистеми та, що є залежними від координати z .

Оскільки напівпровідники AlN та GaN мають кристалічну решітку типу вюрциту, то беручи до уваги явний вигляд тензора пружних констант у представленні Войгта ($C_{\alpha\beta}$) будемо шукати розв'язки рівняння (5.19) у вигляді:

$$u_l(r,t) = \sum_{p=1}^N \begin{pmatrix} u_1^{(p)}(z) \\ u_2^{(p)}(z) \\ u_3^{(p)}(z) \end{pmatrix} \left[\theta(z_p - z_{p-1}) - \theta(z_p - z_{p+1}) \right] e^{i(\omega t - qx)} \quad (5.22)$$

Тоді рівняння (5.19) розпадається на три рівняння, що описують типи акустичних фононів, виникаючих в межах довільного p -го шару РТС:

$$\frac{d^2 u_1^{(p)}(z)}{dz^2} - iq c_1 \frac{du_3^{(p)}(z)}{dz} + k_1^2(q, \omega) u_1^{(p)}(z) = 0; \quad (5.23)$$

$$c_1 = \frac{C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(p)}}{C_{44}^{(p)}}; k_1 = k_1(q, \omega) = \sqrt{\frac{\rho^{(p)} \omega^2 - q^2 C_{11}^{(p)}}{C_{44}^{(p)}}},$$

$$\frac{d^2 u_2^{(p)}(z)}{dz^2} - \chi_2^2(q, \omega) u_2^{(p)}(z) = 0; \quad \chi_2 = \chi_2(q, \omega) = \sqrt{\frac{q^2 C_{66}^{(p)} - \rho^{(p)} \omega^2}{C_{44}^{(p)}}}, \quad (5.24)$$

$$\frac{d^2 u_3^{(p)}(z)}{dz^2} - iq c_3 \frac{du_1^{(p)}(z)}{dz} + k_3^2(q, \omega) u_3^{(p)}(z) = 0; \quad (5.25)$$

$$c_{ю3} = \frac{C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(p)}}{C_{33}^{(p)}}; k_3 = k_3(q, \omega) = \sqrt{\frac{\rho^{(p)} \omega^2 - q^2 C_{44}^{(p)}}{C_{33}^{(p)}}}.$$

Розв'язки рівняння (5.24), що описують зсувні (SH) акустичні фонони є такими:

$$u_2(q, \omega, z) = u_2^{(0)}(q, \omega, z) \theta(-z) + u_2^{(N+1)}(q, \omega, z) \theta(z - z_N) + \sum_{p=1}^N u_2^{(p)}(q, \omega, z) [\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)] =$$

$$= B_2^{(0)} e^{\chi_2^{(0)} z} \theta(-z) + A_2^{(N+1)} e^{-\chi_2^{(4)}(z - z_N)} \theta(z - z_3) +$$

$$+ \sum_{p=1}^N \left[A_2^{(p)} e^{-\chi_2^{(p)}(z - z_{p-1})} + B_2^{(p)} e^{\chi_2^{(p)}(z - z_{p-1})} \right] [\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)]. \quad (5.26)$$

Розв'язки рівнянь (5.23) і (5.25), що утворюють систему мають вигляд:

$$u_{1(3)}(q, \omega, z) = u_{1(3)}^{(0)}(q, \omega, z) \theta(-z) + u_{1(3)}^{(N+1)}(q, \omega, z) \theta(z - z_N) +$$

$$+ \sum_{p=1}^N u_{1(3)}^{(p)}(q, \omega, z) [\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)];$$

$$u_1^{(p)}(q, \omega, z) = -iq c_1 \left(\frac{\lambda_1}{\|\alpha_1^{(p)}\|} (A_1^{(p)} e^{\lambda_1 z} - C_1^{(p)} e^{-\lambda_1 z}) + \frac{\lambda_2}{\|\alpha_2^{(p)}\|} (B_1^{(p)} e^{\lambda_2 z} - D_1^{(p)} \lambda_2 e^{-\lambda_2 z}) \right); \quad (5.27)$$

$$u_3^{(p)}(q, \omega, z) = -\frac{\lambda_1^2 + k_3^2}{\|\alpha_1^{(p)}\|} (A_1^{(p)} e^{\lambda_1 z} + C_1^{(p)} e^{-\lambda_1 z}) - \frac{\lambda_2^2 + k_3^2}{\|\alpha_2^{(p)}\|} (B_1^{(p)} e^{\lambda_2 z} + D_1^{(p)} e^{-\lambda_2 z});$$

де $\|\alpha_n^{(p)}\| = \sqrt{|\alpha_{1,n}^{(p)}|^2 + |\alpha_{3,n}^{(p)}|^2} = \sqrt{q^2 \lambda_n^2 c_1^2 + (\lambda_n^2 + k_3^2)^2}$, $n = 1, 2$ а λ_n визначаються із співвідношення:

$$\lambda_{1,2,3,4} = \lambda_{1,2,3,4}(q, \omega) = \pm \left\{ -\frac{q^2 (C_{13}^{(p)2} - C_{11}^{(p)} C_{13}^{(p)} + 2C_{13}^{(p)} C_{44}^{(p)}) + (C_{33}^{(p)} + C_{44}^{(p)})^2 \omega^2}{2C_{33}^{(p)} C_{44}^{(p)}} \pm \right. \\ \left. \pm \left[\frac{q^2 (C_{13}^{(p)2} - C_{11}^{(p)} C_{13}^{(p)} + 2C_{13}^{(p)} C_{44}^{(p)}) + (C_{33}^{(p)} + C_{44}^{(p)})^2 \omega^2}{2C_{33}^{(p)} C_{44}^{(p)}} \right]^2 - \right. \\ \left. \frac{(\rho^{(p)} \omega^2 - q^2 C_{11}^{(p)}) (\rho^{(p)} \omega^2 - q^2 C_{44}^{(p)})}{C_{33}^{(p)} C_{44}^{(p)}} \right\}^{1/2} \Bigg\}^{1/2}, \quad (5.28)$$

$$\lambda_1 = -\lambda_3; \lambda_2 = -\lambda_4.$$

У виразах (5.26), (5.27) враховано, що $A_2^{(0)} = B_2^{(N+1)} = 0$ і $C_1^{(0)} = B_1^{(0)} = A_1^{(N+1)} = B_1^{(N+1)} = 0$, що є наслідком забезпечення виконання умов того, що значення компонент пружного зміщення не можуть нескінченно зростати у зовнішньому середовищі, в якому розміщена РТС, тобто:

$$u_{l=1,2,3}(q, \omega, z) \Big|_{z \rightarrow \pm\infty} \rightarrow 0. \quad (5.29)$$

Послідовно використовуючи для розв'язків (5.26) у сусідніх шарах РТС граничних умов для компонент $u_2(q, \omega, z)$ та компонент тензора напружень

$$\sigma_{yz}(q, \omega, z) = \frac{1}{2} C_{44} \frac{du_2(q, \omega, z)}{dz} e^{i(\omega t - qx)};$$

$$\begin{cases} u_2^{(p)}(q, \omega, z) \Big|_{z=z_p-\varepsilon} = u_2^{(p+1)}(q, \omega, z) \Big|_{z=z_p+\varepsilon}; \\ \sigma_{yz}^{(p)}(q, \omega, z) \Big|_{z=z_p-\varepsilon} = \sigma_{yz}^{(p+1)}(q, \omega, z) \Big|_{z=z_p+\varepsilon} \end{cases} \quad (5.30)$$

отримується дисперсійне рівняння для визначення спектру $\Omega^{(SH)}(q)$ зміщувальних акустичних фононів.

Схожим чином, використовуючи граничні умови для компонент $u_{1(3)}(q, \omega, z)$ і

компонент тензора напружень $\sigma_{xz}(q, \omega, z) = \frac{1}{2} C_{44} \left(-iqu_3(z) + \frac{du_1(z)}{dz} \right) e^{i(\omega t - qx)}$ і

$\sigma_{zz}(q, \omega, z) = \left(-iqC_{13}u_1(z) + C_{33} \frac{du_3(z)}{dz} \right) e^{i(\omega t - qx)}$:

$$\begin{cases} u_{1(3)}^{(p)}(q, \omega, z) \Big|_{z=z_p-\varepsilon} = u_{1(3)}^{(p+1)}(q, \omega, z) \Big|_{z=z_p+\varepsilon} \\ \sigma_{xz}^{(p)}(q, \omega, z) \Big|_{z=z_p-\varepsilon} = \sigma_{xz}^{(p+1)}(q, \omega, z) \Big|_{z=z_p+\varepsilon}; \sigma_{zz}^{(p)}(q, \omega, z) \Big|_{z=z_p-\varepsilon} = \sigma_{zz}^{(p+1)}(q, \omega, z) \Big|_{z=z_p+\varepsilon} \end{cases} \quad (5.31)$$

отримується дисперсійне рівняння з якого знаходиться змішаний спектр флексуральних (FL) та ділататіональних (DL) фононних мод $\Omega^{(FL,DL)}(q)$, які визначаються з допомогою компонент $u_{1(3)}(q, \omega, z)$ як: $u^{FL}(z) = u^{FL}(u_1^A(z), u_3^S(z))$ і $u^{DL}(z) = u^{DL}(u_1^S(z), u_3^A(z))$, де індекси “S” та “A” використано для позначень симетричної та антисиметричної функції від z відповідно.

Теорія взаємодії електронів з акустичними фононами в багатошарових нітридних резонансно-тунельних структурах базується на прийомі описаному далі. З використанням граничних умов (5.30) і (5.31) коефіцієнти $A_2^{(p)}, B_2^{(p)}$ і $A_1^{(p)}, B_1^{(p)}, C_1^{(p)}, D_1^{(p)}$ у розв'язках (5.26) і (5.27) відповідно можуть бути виражені через один із них, який знаходиться для зсувних фононів з умови нормування

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \rho(z) |u_2(q, \omega, z)|^2 dz = \frac{\hbar}{2l_x l_y \omega} \quad (5.32)$$

і умови нормування для ділатіональних і флексуральних фононів (4.43), (4.44):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \rho(z) \left(|u_1(q, \omega, z)|^2 + |u_3(q, \omega, z)|^2 \right) dz = \frac{\hbar}{2l_x l_y \omega}, \quad (5.33)$$

де величини l_x і l_y - задають геометричні розміри перерізу РТС площиною xOy .

Виконуючи квантування поля пружних зміщень безпосередньо далі отримуються гамільтоніани акустичних фононів у канонічній формі зображення вторинного квантування у вигляді суми двох складових для зміщувальних та флексуральних та ділатіональних фононів відповідно:

$$\widehat{H}_{\text{ac}} = \widehat{H}_{\text{ac}}^{(\text{SH})} + \widehat{H}_{\text{ac}}^{(\text{FL,DL})} = \sum_{n_1} \Omega_{n_1}^{(\text{SH})}(q) \left[b_{n_1}^+(q) b_{n_1}(q) + \frac{1}{2} \right] + \sum_{n_2} \Omega_{n_2}^{(\text{FL,DL})}(q) \left[b_{n_2}^+(q) b_{n_2}(q) + \frac{1}{2} \right]. \quad (5.34)$$

де $b_n^+(q)$ і $b_n(q)$ - відповідно бозонні оператори народження та знищення фононного стану, що задовольняють відомі комутаційні співвідношення:

$$\left[b_n(q), b_m^+(q') \right] = \delta_{n,m} \delta_{q,q'}; \left[b_n(q), b_m(q') \right] = \left[b_n^+(q), b_m^+(q') \right] = 0.$$

З урахуванням умов нормування, а також співвідношень (5.20) вираз для оператора пружного зміщення може бути поданий як:

$$u(q, \omega, r) = \sum_{p=1}^N \sum_{q,n} \sqrt{\frac{\hbar}{2l_x l_y \rho^{(p)} \omega^{(\beta)}}} \left[b_n(q) + b_n^+(-q) \right] \times \\ \times w_l^{(p)}(q, \omega, z) e^{iqr} \left[\theta(z_p - z_{p-1}) - \theta(z_p - z_{p+1}) \right]; \quad (5.35)$$

$$w_n^{(p)}(q, \omega, z) = \sqrt{\rho^{(p)}} u_n^{(p)}(q, \omega, z); \beta = \{(\text{SH}), (\text{FL,DL})\}.$$

В кристалах з ґраткою типу вюрциту величина зміщення зони провідності не визначається єдиною константою деформаційного потенціалу як у працях [175-181], а має вигляд:

$$\Delta E_v = a_1 \varepsilon_{zz} + a_2 \varepsilon_{\perp}, \quad (5.36)$$

де $\varepsilon_{\perp} = \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}$ і ε_{zz} - компоненти тензора напружень, $a_1 = a_{1c} - D_1$, $a_2 = a_{2c} - D_2$, a_{1c} , a_{2c} , D_1 , D_2 - константи зв'язку деформаційного потенціалу (для яких використано позначення як у працях [186, 187]).

Тоді гамільтоніан взаємодії через деформаційний потенціал зображенні вторинного квантування за фононними змінними визначається наступним чином:

$$\widehat{H}_{\text{def}} = \widehat{H}_{\text{def}}^{(\text{FL,DL})}, \quad (5.37)$$

де відповідно складові гамільтоніана для зміщувальних та флексуральних й діляціональних фононів такі:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{def}}^{(\text{FL,DL})} &= \sqrt{\frac{\hbar}{2l_x l_y}} \sum_{q n_1} \sum_{p=1}^N \frac{1}{\sqrt{\rho^{(p)} \omega_{n_2}^{(\text{FL,DL})}}} \left[b_{n_1}(q) - b_{n_1}^+(-q) \right] \times \\ &\times \left(iq(a_{2c} - D_2) u_1^{(p)}(q, \omega_{n_1}^{(\text{FL,DL})}, z) + (a_{1c} - D_1) \frac{\partial u_3^{(p)}(q, \omega_{n_1}^{(\text{FL,DL})}, z)}{\partial z} \right) \times \\ &\times \left[\theta(z_p - z_{p-1}) - \theta(z_p - z_{p+1}) \right] e^{iq \cdot r}, \end{aligned} \quad (5.38)$$

де частота $\omega_{n_1}^{(\text{FL,DL})}$ відноситься до спектру флексуральних і діляціональних фононів, n_1 номер рівня їх спектру.

У гамільтоніані (5.38) відсутній внесок від зміщувальних акустичних фононів, оскільки $\partial(w_l^{(p)}(q, \omega, z) e^{iq \cdot r}) \partial y = (q \cdot w_l^{(p)}(q, \omega, z)) e^{iq \cdot r} = 0$, $q \perp w_l^{(p)}(q, \omega, z)$, аналогічно, як це встановлено в у рамках моделі одноямної наноструктури у праці [157] та невірно обґрунтовується у праці [168].

Тепер гамільтоніан, що описує взаємодію електронів з акустичними фононами має вигляд:

$$\hat{H}_{e\text{-def}} = \hat{H}_{e\text{-def}}^{(\text{FL,DL})} = \sum_{n, n', n_1, \bar{k}, \bar{q}} F_{nn_2}(q) \hat{a}_{n', \bar{k} + \bar{q}}^+ \hat{a}_{n\bar{k}} \left[b_{n_1}(q) + b_{n_1}^+(-q) \right], \quad (5.39)$$

де

$$\begin{aligned} F_{nn_2}(q) &= \sqrt{\frac{\hbar}{2l_x l_y \rho^{(p)} \omega_{n_1}^{(\text{FL,DL})}}} \int_{z_{p-1}}^{z_p} \Psi^{(p)}(E_n, z) \left(iq(a_{2c} - D_2) u_1^{(p)}(q, \omega_{n_1}^{(\text{FL,DL})}, z) + \right. \\ &\left. + (a_{1c} - D_1) \frac{\partial u_3^{(p)}(q, \omega_{n_1}^{(\text{FL,DL})}, z)}{\partial z} \right) e^{iq \cdot r} \Psi_{n'}^{*(p)}(E_{n'}, z) dz. \end{aligned} \quad (5.40)$$

Остаточно гамільтоніан системи електронів з акустичними фононами у багатощаровій РТС:

$$\hat{H} = \hat{H}_e + \hat{H}_{ac} + \hat{H}_{e\text{-def}}. \quad (5.41)$$

Враховуючи те, що електронний спектр досліджуваної РТС містить тільки дискретну компоненту, для його перенормування взаємодією з акустичними фононами необхідно здійснити Фур'є перетворення функції Гріна, яка при $T = 0$ К задовольняє рівняння Дайсона:

$$G_n(\Omega) = \frac{1}{\Omega - E_n - M_n(\Omega)}. \quad (5.42)$$

Масовий оператор у рівнянні Дайсона у наближенні слабого зв'язку визначається як:

$$M_n(\Omega, \bar{k}) = \sum_{qn, n'} |F_{nn, n'}(q)|^2 \left[\frac{1 + \nu_{n_1}^{(FL, DL)}}{\Omega - E_{n', \bar{k} + \bar{q}} - \Omega_{n_1}^{(FL, DL)} + i\eta} + \frac{\nu_{n_1}^{(FL, DL)}}{\Omega - E_{n', \bar{k} + \bar{q}} - \Omega_{n_1}^{(FL, DL)} + i\eta} \right];$$

$$\Omega_{n_1}^{(FL, DL)} = \hbar \omega_{n_1}^{(FL, DL)} \quad (5.43)$$

де $\nu_{n_1}^{(FL, DL)} = \left(e^{\Omega_{n_1}^{(FL, DL)}/kT} - 1 \right)^{-1} = \left(e^{\hbar \omega_{n_1}^{(FL, DL)}/kT} - 1 \right)^{-1}$ - число заповнення рівнів, визначених флексуральними та ділатіональними модами акустичних фононів. Співвідношення (5.43) дає масовий оператор у однофононному наближенні з продовженням на комплексну вісь при $\eta \rightarrow \pm 0$.

З використанням масового оператора (5.43) досліджуються механізми впливу взаємодії електронів з акустичними фононами, тобто зміщення електронний спектру (Δ_n) та швидкості розпаду електронного стану (Γ_n).

Враховуючи, що в ККД рух електронів відбувається у напрямі осі Oz , тобто перпендикулярно до шарів РТС, то в безпосередніх обчислення слід взяти $\bar{k} = 0$, тоді згідно (5.5) $\Omega = E_n$. Тоді перенормована енергія електронного рівня \tilde{E}_n визначається полюсом Фур'є-образу функції Гріна (5.42) з урахуванням (5.39), (5.40), що еквівалентно знаходженню розв'язків дисперсійного рівняння:

$$\Omega - E_n - M_n(\Omega) = 0, \quad (5.44)$$

а при цьому:

$$\Delta_n = \text{Re} M_n(\Omega = E_n, \bar{k} = 0) = \frac{l_x l_y}{(2\pi)^2} \sum_{n_1} \iint \text{P} \left(E_n - E_{n, \bar{q}} - \Omega_{n_1}^{(FL, DL)} \right)^{-1} |F_{nn, n}(q)|^2 dq^2;$$

$$\Gamma_n = -2 \text{Im} M_n(\Omega = E_n, \bar{k} = 0) = \frac{l_x l_y}{2\pi} \sum_{n_1} \iint \delta \left(E_n - E_{n, \bar{q}} - \Omega_{n_1}^{(FL, DL)} \right) |F_{nn, n}(q)|^2 dq^2, \quad (5.45)$$

де у співвідношеннях (5.45) символ P означає, що інтеграл береться смислі головного значення.

Тоді повний зсув n – го енергетичного рівня стаціонарного електронного спектру зумовлюється флексуральними та ділатіональними акустичними фононами $\Delta_n = \Delta_n^{(FL,DL)}$, що дає для величини перенормованої енергії:

$$\tilde{E}_n = E_n + \Delta_n. \quad (5.46)$$

5.2. Властивості взаємодії електронів з акустичними фононами при різних значеннях температури. Температурні залежності зміщень рівнів електронного спектру та їх згасань, що зумовлені електрон-фононною взаємодією

З використанням розвиненої теорії стаціонарного електронного спектру, акустичних фононів та їх взаємодії з електрона в нітридних РТС, виконувався розрахунок спектру цих квазічастинок, а також величин зміщень стаціонарного електронного спектру, зумовлених їхньою взаємодією. Згадані величини розраховувались з використанням геометричних параметрів плоскої двоямної GaN/AlN наносистеми з такими геометричними параметрами: товщини шарів, що відповідають потенціальним бар'ерам $\Delta_1 = \Delta_2 = \Delta_3 = 2$ нм, розміри потенціальних ям - $d_1 = 2$ нм, $d_2 = 4$ нм фізичні параметри напівпровідникових матеріалів, що відповідають шарах середовищу наносистеми приведено у Таблиці. 4.1. Константи деформаційного потенціалу вибиралась у відповідності, до праці [120] такими: для GaN - $a_{1c} = -6.5$ меВ, $a_{2c} = -11.8$ меВ, $D_1 = -3.0$ меВ, $D_2 = 3.6$ меВ; для AlN - $a_{1c} = -9.0$ меВ, $a_{2c} = -9.0$ меВ, $D_1 = -3.1$ меВ, $D_2 = 3.8$ меВ.

На Рис. 5.2 приведено потенціальний профіль досліджуваної наноструктури, розрахований при $T = 300$ К. Також на ньому приведено квадрати хвильових функцій для електронних станів, створених у наносистемі розмірним квантуванням. З метою кращої наочності величини приведені З наведеного рисунка чітко видно ефект електричного поля, сформованого сумарною величиною поляризації ($P = P_{Sp} + P_{Pz}$), а також локалізацію електрона в межах наносистеми у кожному з стаціонарних станів.

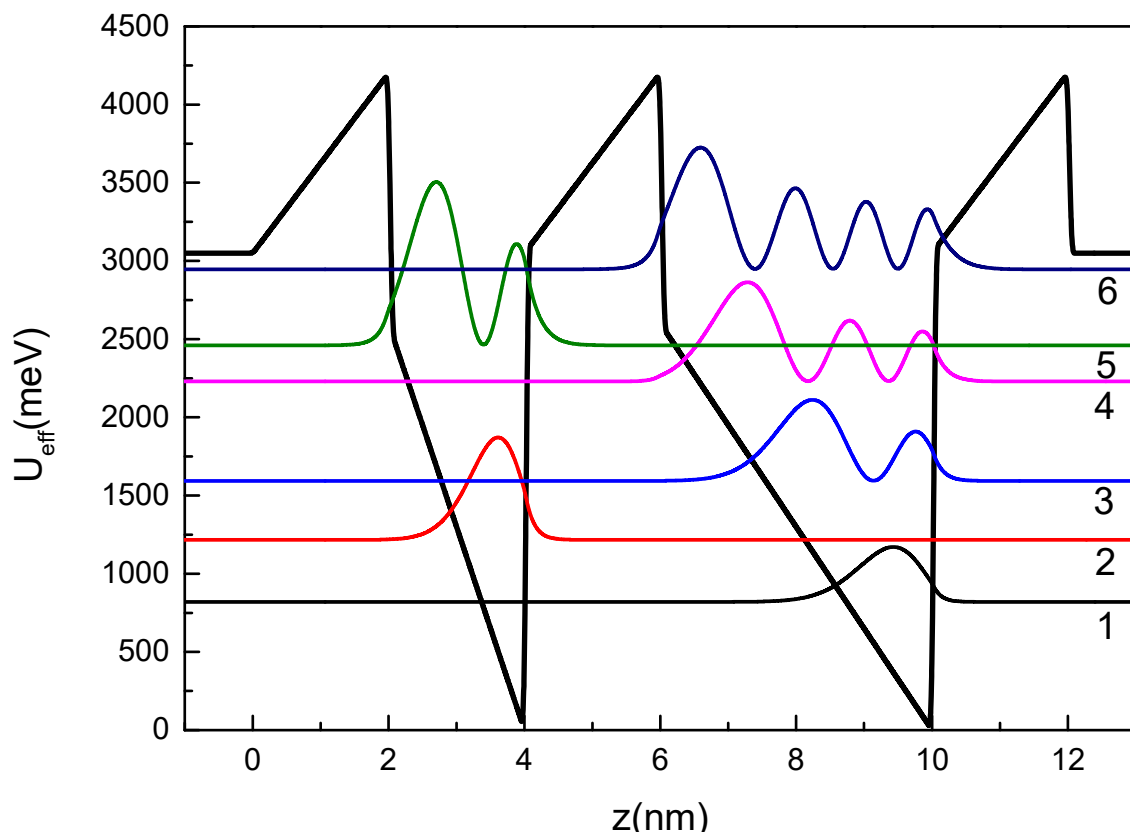
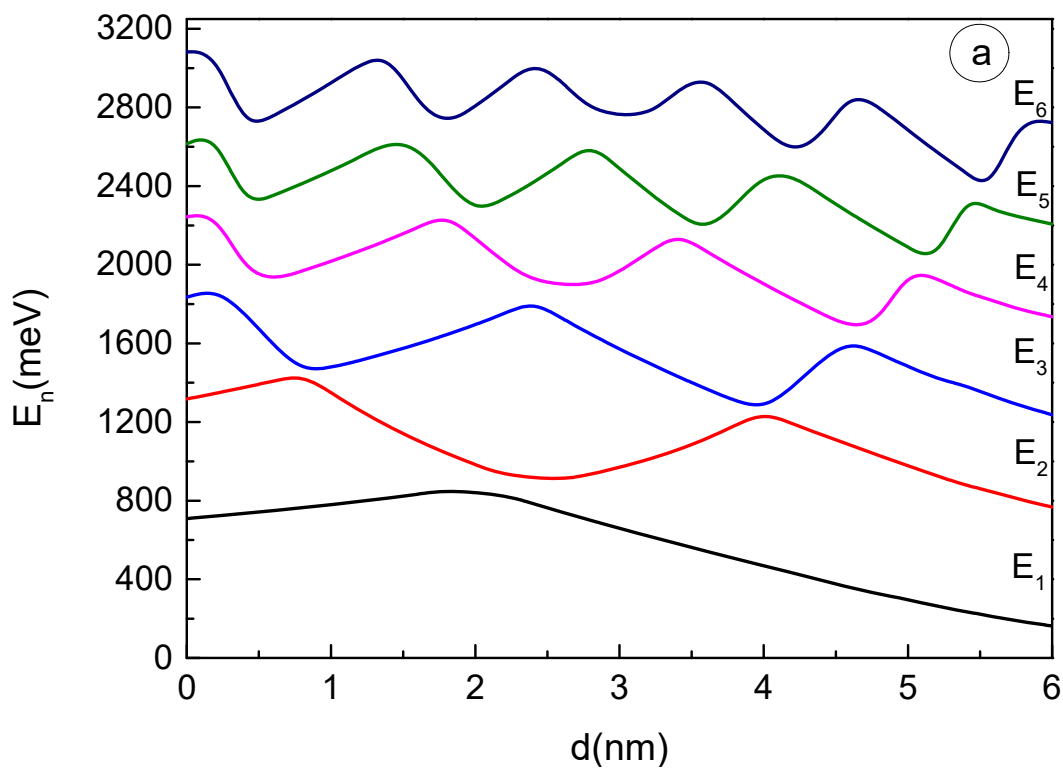


Рис. 5.2. Залежності ефективного потенціалу $U_{eff}(z)$ та квадратів модулів хвильових функцій $|\Psi_n(E_n, z)|^2$ для перших $n = 1, 2, \dots, 6$ стаціонарних електронних станів.



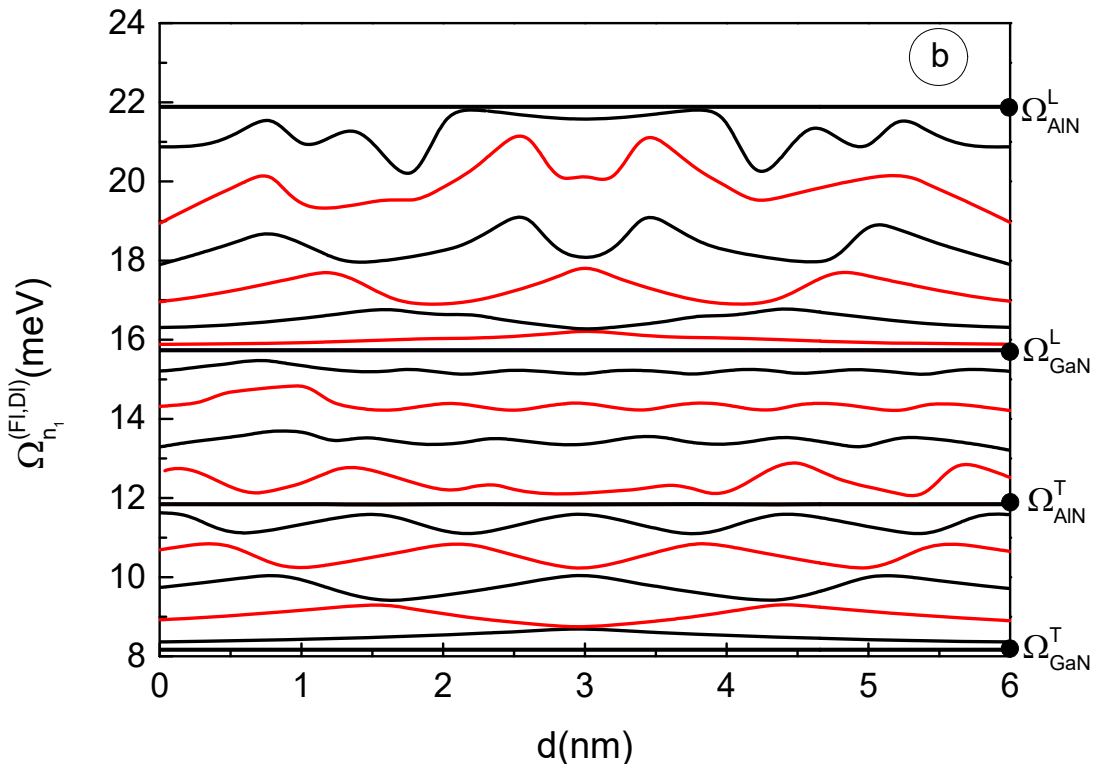


Рис. 5.3. Рівні стаціонарного електронного спектру (E_n , $n = 1, 2, \dots, 6$) (a), а також спектр флексурально-ділататіональних мод акустичних фононів ($\Omega_{n_1}^{(FI,DI)}$) (b) розраховані при $q = 24/(\Delta_1 + \Delta_2 + \Delta_3 + d_1 + d_2)$ як функції від положення ($0 \leq d \leq d_1 + d_2$) внутрішнього потенціального бар'єра у сумарній потенціальній ямі

На Рис. 5.3 а,b приведено відповідно розраховані при $T=300$ К залежності стаціонарного електронного спектру (Рис. 5.3а) та спектру флексуральних та ділататіональних акустичних фононів (Рис. 5.3b) від положення внутрішнього потенціального бар'єра по відношенню до вхідного та вихідного потенціального бар'єрів у сумарній потенціальній ямі, тобто від величини d .

Як можна бачити з Рис. 5.3а, залежності E_n формують для кожного стаціонарного електронного стану з номером n зі зміною d відповідно n максимумів $n-1$. Крім того, для енергій електронного спектру безпосередніми обчислення встановлюється виконання умови:

$$\begin{aligned}
 E_n(d)|_{d \rightarrow 0} - E_n(d)|_{d \rightarrow d_1 + d_2} &\approx \\
 &\approx (V_E(z) + V_{HL}(z) + V_H(z))|_{z \rightarrow 0} - (V_E(z) + V_{HL}(z) + V_H(z))|_{z \rightarrow d_1 + d_2}.
 \end{aligned}
 \tag{5.47}$$

Така залежність пояснюється впливом сильного внутрішнього електричного поля, що сильно деформує потенціальний профіль наносистеми, й таким чином, є визначальним фактором впливу на електронний спектр.

Як видно з Рис 5.3b, спектри ділатіональних та флексуральних акустичних фононів ($\Omega_{n_1}^{(F,L,D)}$) формуються у межах трьох окремих областей, обмежених енергіями $\Omega_{\text{GaN}}^T, \Omega_{\text{AlN}}^T, \Omega_{\text{GaN}}^L, \Omega_{\text{AlN}}^L$, визначеними відповідно груповими швидкостями поширення поперечних ("T") та повздовжніх ("L") акустичних хвиль у масивних кристалах GaN і AlN. Кожна з таких областей залежностей характеризується сукупністю особливостей, що проявляються лише для в такому діапазоні енергій. Так, для першої області, визначеної при $\Omega_{\text{GaN}}^T \leq \Omega \leq \Omega_{\text{AlN}}^T$, вітки спектру акустичних фононів є симетричними відносно положення потенціального бар'єра у сумарній потенціальній ямі, формуючи зі зміною d відповідно n_1 максимумів та n_1-1 мінімум. Дві нижні другої області, визначної при $\Omega_{\text{AlN}}^T \leq \Omega \leq \Omega_{\text{GaN}}^L$, також поводять себе симетрично відносно точки v , проте в обох з них формується по шість максимумів та п'ять мінімумів. В інших двох вітках цієї області симетрія відносно точки d порушується й формується відповідно сім максимумів та шість мінімумів. Вітки третьої області, визначної при $\Omega_{\text{GaN}}^L \leq \Omega \leq \Omega_{\text{AlN}}^L$, ведуть себе схожим чином до віток першої області. Особливо це стосується перших чотирьох віток які ведуть себе практично аналогічним чином. Останні дві вітки, не зважаючи на симетрію відносно точки d , формують вже по шість максимумів та п'ять мінімумів.

На Рис. 5.4a,b,c приведено розраховані при фіксованому значенні $q = 24/(\Delta_1 + \Delta_2 + \Delta_3 + d_1 + d_2)$, компоненти поля зміщення $u_1(z)$ і $u_3(z)$. Значення енергій акустичних фононів, які використовувались при розрахунках, вибирались таким чином, щоб вони відповідали кожній з областей спектру, встановлених вище. Так, залежності приведені на Рис. 5.4a – відповідають першій області залежностей на Рис. 5.3., залежності на Рис. 5.4 b - другій, залежності на Рис. 5.4 c – третій.

З цього Рис. 5.4 a,b,c видно, що зі збільшенням номера вітки спектру n_1 , й відповідно, енергії акустичних фононів, відповідної цим віткам, залежності $u_1(z)$ і $u_3(z)$ демонструють тенденцію до збільшення числа максимумів та мінімумів, що

формуються розрахованими залежностями на заданому діапазоні зміни z . Крім того, слід зауважити, ефект, який полягає у одночасному формуванні максимумів функції $u_1(z)$ та відповідно мінімумів функції $u_3(z)$, встановлений у працях [188, 189] в основному спостерігається і для залежностей, приведених на Рис. 5.4, проте в даному випадку, формування цих екстремумів відбувається в довільних точках всередині окремо взятих шарів наносистеми й вони є дещо зміщеними один від одного, а не посередині цих шарів, як встановлено у працях [188, 189], де досліджувались акустичні фонони в наноструктурах з однаковими геометричними параметрами потенціальних ям. У середовищах зліва та справа від досліджуваної наносистеми компоненти зміщень монотонно спадають згідно співвідношень (5.29). На Рис. 5.5 приведено розраховані залежності від положення внутрішнього потенціального бар'єра у сумарній потенціальній ямі досліджуваної наноструктури величин зміщень перших стаціонарних електронних станів та згасань цих енергетичних рівнів, зумовлених взаємодією електронів з акустичними фононами. Розрахунки виконувались для трьох різних значень температури T : 0К, 80К, 300К. Такий вибір значень температури зумовлений наступними причинами: значення 0К відповідає найбільш тривіальному випадку, а значення 80К відповідає наноприладам для роботи яких використовується охолодження рідким азотом, значення 300К відповідає наноприладам, які мають змогу працювати за кімнатної температури.

Перш ніж аналізувати залежності, приведені на Рис. 5.5, слід також зауважити, що значення розрахованих енергій акустичних фононів для вюрцитних напівпровідників AlN та GaN, відповідає першій зоні Брілюена, тобто обмежена максимальними значеннями порядку 25-30 меВ [188]. В такому випадку виконуються умови при 0К:

$$E_{m_1} > \Omega_{n_1}^{(FL,DL)}, \delta \left(E_n - E_{n_1} - \Omega_{n_1 \bar{q}}^{(FL,DL)} - \hbar^2 \bar{q}^2 / 2m_n^{(eff)} \right) \neq 0 \quad (5.48)$$

звідки в силу властивостей дельта-функції та залежностей на Рис. 5.3а впливає, що швидкості розпаду відмінні від нуля на всьому діапазоні зміни d для усіх номерів n електронних рівнів.

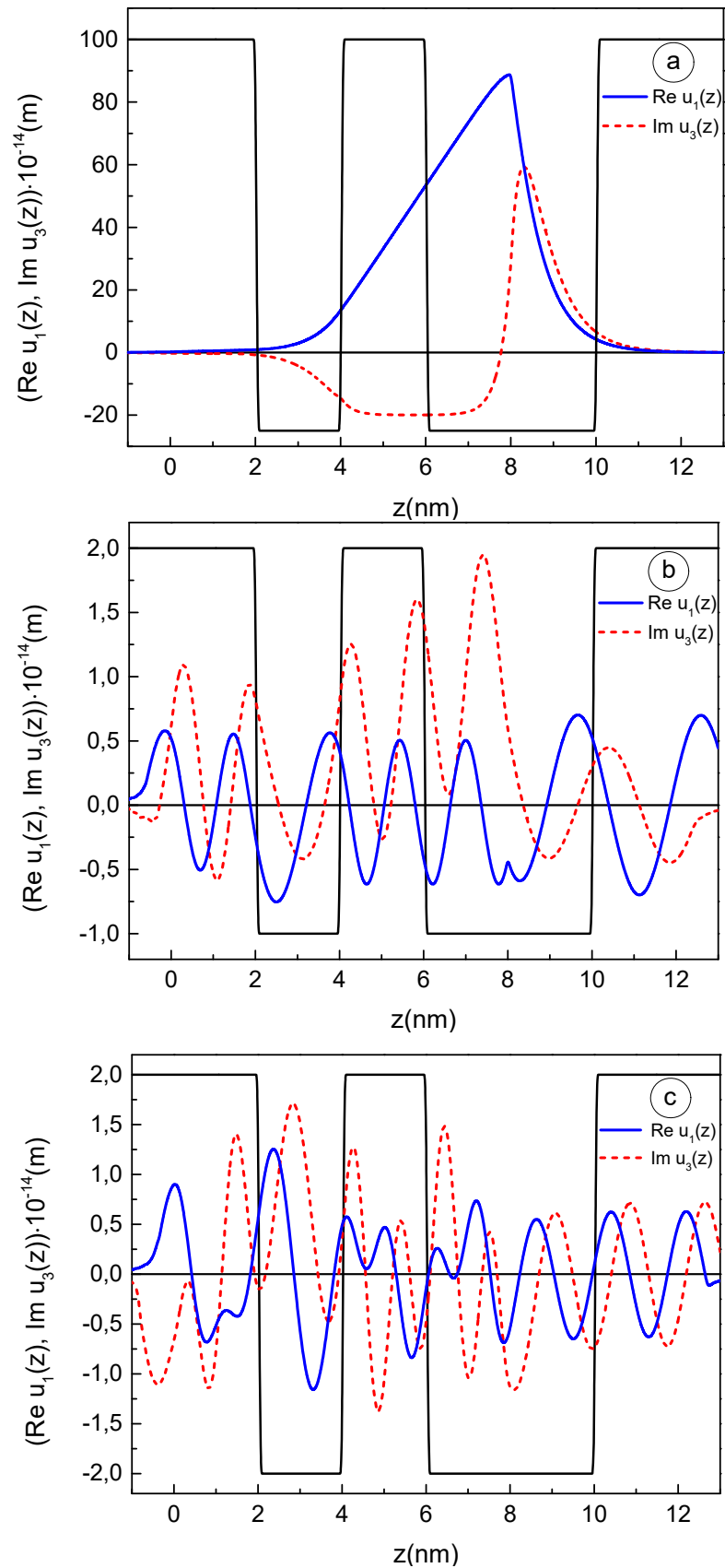
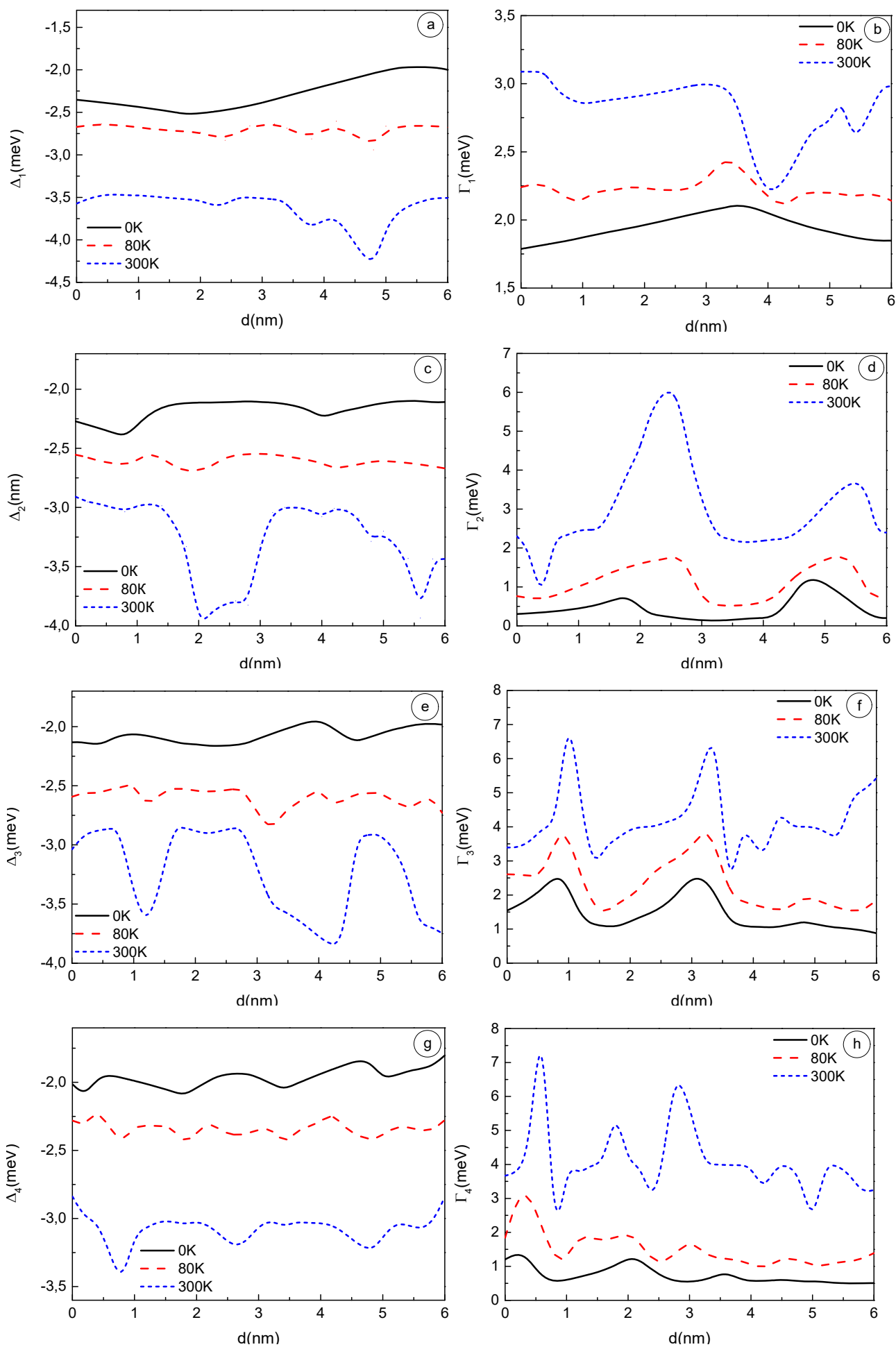


Рис. 5.4. Залежності компонент поля пружного зміщення від z , розраховані при $q = 24/(\Delta_1 + \Delta_2 + \Delta_3 + d_1 + d_2)$ розраховані для значень енергій акустичних фоновів

$$\Omega^{(Fl, DL)} = (5.561; 13.327; 19.556) \text{ меВ.}$$

На Рис. 5.5а, приведені залежності зміщень $\Delta_n(d)$ для кожного з шести енергетичних рівнів, зумовлених взаємодією з акустичними фононами при різних температурах. Як видно, у нижній межі кріогенної температури ($T = 0\text{K}$) приведені залежності зміщень енергетичних рівнів ведуть себе схожим чином до залежностей енергетичного спектру, приведених на Рис. 4., проте при для верхньої межі кріогенної температури ($T = 80\text{K}$) уже починають проявляються ефекти, що полягають у формуванні додаткових мінімумів в залежностях $\Delta_n(d)$. Такі ефекти пов'язані з поведінкою функцій зв'язку при відмінній від нуля температурі. В більшості випадків, у околі значень величини d , що відповідає антикросінгам утвореним залежностями $E_n(d)$ і $E_{n+1}(d)$ сусідніх енергетичних рівнів, величини зміщень цих рівнів також мають тенденцію до зближення їхніх значень. При $T \neq 0$ такий ефект вже не загальним, а проявляється лиш частково. Залежності $\Delta_n(d)$, розраховані при кімнатній температурі ($T = 300\text{K}$) показують значне збільшення абсолютних величин зміщень, що почали формуватись при $T = 80\text{K}$, і також значну деформацію залежностей, порівняно з кріогенними температурами. Слід зауважити, що зміщення всіх електронних станів є від'ємними, що приводить до переміщення кожного з енергетичних рівнів у більш низькоенергетичну область. Також з Рис. 5.5 видно, що зі збільшення номера енергетичного рівня n абсолютні величини їх зміщень зменшуються, причому дана властивість є справедливою для всіх значень температури, які використовувались у розрахунках. Таким чином, взаємодія електронів з акустичними фононами зумовлює зменшення генерованої чи детектованої частоти електромагнітного поля відповідно у випадку ККЛ та ККД.

Далі, на Рис. 5.5 приведено залежності від величини d швидкостей розпаду електронних станів, що розраховані при тих же значеннях температури, що ж електронні енергетичні зсуви. Як видно з приведених залежностей $\Gamma(d)$, швидкості розпаду швидко зростають зі збільшенням температури. При цьому, як видно з залежностей, розрахованих при $T=0\text{K}$, вони формують таку кількість максимумів яка відповідає номеру електронного рівня n .



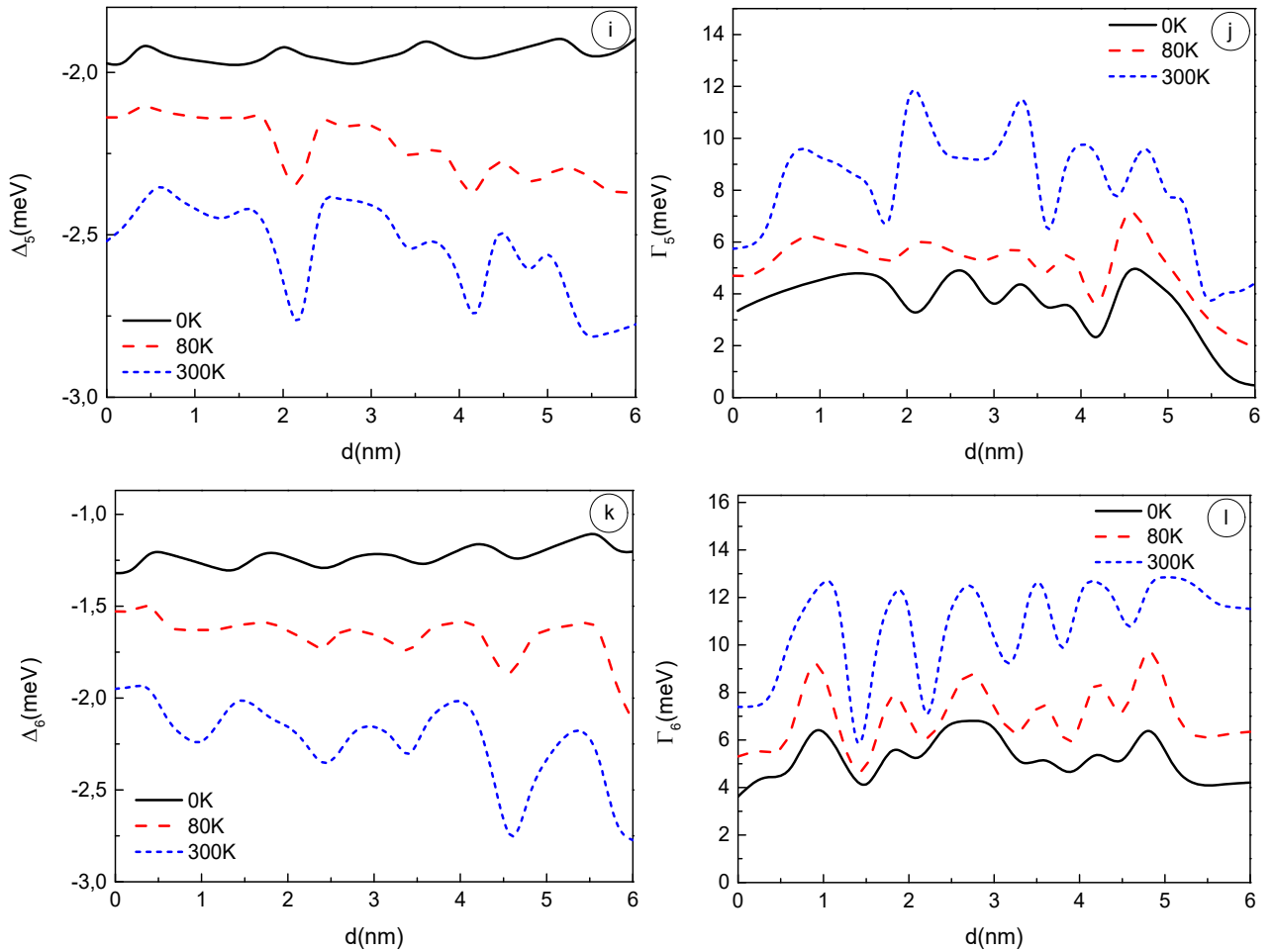


Рис. 5.5. Залежності зміщень рівнів електронного спектру $\Delta_n(d)$ та їх згасань $\Gamma_n(d)$ розраховані при $q = 24/(\Delta_1 + \Delta_2 + \Delta_3 + d_1 + d_2)$ для значень температури T : 0K (суцільна чорна лінія), 80K (штрихована червона лінія), 300K (точкова синя лінія)

З ростом температури відбувається така трансформація залежностей $\Gamma(d)$: екстремуми, сформовані при $T=0K$ залишаються, їх абсолютні величини збільшуються в 2-4 рази при $T=300K$, а їх положення d дещо зміщується. Крім того, при $T \neq 0K$, у залежностях $\Gamma(d)$ з'являються додаткові екстремуми, пов'язані з поведінкою функції $\text{Im}M_n$. Слід також зауважити, що зі зміною n не відбувається монотонної зміни абсолютних величин $\Gamma(d)$, так як це було у випадку $\Delta_n(d)$ (які зменшуються з ростом n), а в даному випадку: $\max|\Gamma_2(d)| \approx \max|\Gamma_3(d)| \approx \max|\Gamma_4(d)|, \max|\Gamma_5(d)| \approx \max|\Gamma_6(d)|$.

5.3. Теорія взаємодії електронів з зсувними акустичними фононами через механізм п'єзоелектричного потенціалу. Вплив п'єзоелектричного ефекту на спектр акустичних фононів нітридних наносистем

В пункті 5.1 цього розділу було показано, що взаємодія зсувних акустичних фононів з електронами через механізм деформаційного потенціалу є неможливою. Крім того теорія зсувних акустичних фононів була розвинена безпосередньо у цьому ж розділі, що відповідає працям автора [188, 189]. На даний момент існує фактично лише дві праці [190, 191] в яких спектр зсувних акустичних фононів розраховувався з коефіцієнта прозорості багат шарової Фібоначчі-наноструктури в певному діапазоні частот електромагнітного поля. Оскільки автори цих праць переслідували дещо інші цілі, то залежності спектру акустичних фононів фактично не досліджувались, не говорячи вже про електрон-фононну взаємодію. Крім того дослідження коефіцієнта прозорості відповідає випадку коли досліджувана наноструктура поміщена в середовище, в якому хвилі можуть поширюватися вільно. В такій моделі наноструктура не може вважатися складовою частиною окремого каскаду наприклад, бо умова слідування до нуля компонент тензорів пружного зміщення та напружень не буде виконуватись. Плив п'єзоелектричного потенціалу на фононний спектр є детально не з'ясованим, як і такий механізм взаємодії електронів з фононами. Далі на базі моделі пружного континууму розвинена теорія акустичних фононів та п'єзоелектричного потенціалу, виникаючих у шарах п'єзоелектричної AlN/GaN наноструктури. З використанням цих результатів буде розвинено послідовну теорію взаємодії електронів з акустичними фононами через п'єзоелектричний потенціал для довільних температур з використанням температурних функцій Гріна та рівняння Дайсона на базі розв'язків системи стаціонарного рівняння Шредінгера та Пуассона.

Отже, досліджувану наноструктуру будемо розглядати у декартовій системі координат, вісь z якої спрямована перпендикулярно до меж поділу середовищ її шарів. В силу необхідності забезпечення довільності вибору даної наноструктури, як окремого елемента каскаду наноприладу будемо уважати її поміщеною у зовнішнє ненапружене середовище AlN – яке відповідає потенціальним бар'єрам.

Відповідно потенціальним ямам наноструктури відповідає напівпровідникове середовище GaN. З урахуванням різних типів напівпровідників, утворюючих наноструктуру її густина ρ , компоненти тензорів пружних констант C_{iklm} , п'єзоелектричних констант e_{ikl} та діелектричних констант ε_{ik} є залежними від координати z наступним чином:

$$\Phi(z) = \Phi^{(0)}(z)\theta(-z) + \sum_{p=1}^N \Phi^{(p)}(z) [\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)] + \Phi^{(N+1)}(z)\theta(z - z_N),$$

$$\Phi = \{\rho, C_{iklm}, e_{ikl}, \varepsilon_{ik}\}. \quad (5.49)$$

Компоненти поля пружного зміщення середовища досліджуваної наносистеми є розв'язками рівняння:

$$\rho(z) \frac{\partial^2 u_i(\bar{r}, t)}{\partial t^2} = \frac{\partial \sigma_{ik}(\bar{r})}{\partial x_k}, \quad u_i(\bar{r}, t) = u_i(x, y, z, t) = (u_{i1} \quad u_{i2} \quad u_{i3})^T, \quad (5.50)$$

де в (5.49) і (5.50): $i, k, l, m = (1; 2; 3)$, $x_1 = x$, $x_2 = y$; $x_3 = z$ - у відповідності до вибраної системи координат (Рис. 5.1).

Компоненти тензора напруженості за наявності п'єзоелектричного ефекту зручно подати як:

$$\sigma_{ik}(\bar{r}) = C_{iklm}(z)u_{lm}(\bar{r}) - e_{ikl}(z)E_l(\bar{r}), \quad (5.51)$$

де компоненти тензора деформації такі:

$$u_{lm}(\bar{r}) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_l(\bar{r})}{\partial x_m} + \frac{\partial u_m(\bar{r})}{\partial x_l} \right). \quad (5.52)$$

Підставляючи (5.52) в рівняння (5.50) з урахуванням (5.51) маємо рівняння другого порядку:

$$\rho(z) \frac{\partial^2 u_i(\bar{r}, t)}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(C_{iklm}(z) \frac{\partial u_l(\bar{r})}{\partial x_m} + e_{ikl}(z) \frac{\partial \phi(\bar{r})}{\partial x_l} \right), \quad (5.53)$$

оскільки електричне поле $E_l(\bar{r})$ пов'язане з потенціалом як $E_l(\bar{r}) = -\frac{\partial \phi(\bar{r})}{\partial x_l}$.

Оскільки вектор електричної індукції визначений як:

$$D_i(\mathbf{r}) = e_{ikl}(z)u_{kl}(\bar{\mathbf{r}}) + \varepsilon_{ik}(\omega, z)E_k(\bar{\mathbf{r}}) = e_{ikl}(z)u_{kl}(\bar{\mathbf{r}}) - \varepsilon_{ik}(\omega, z)\frac{\partial\phi(\bar{\mathbf{r}})}{\partial x_k}, \quad (5.54)$$

де компоненти тензора діелектричної проникності, які відомо [181], утворюють матрицю:

$$\varepsilon_{ik}(\omega, z) = \begin{pmatrix} \varepsilon_{11}(\omega, z) & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{11}(\omega, z) & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{33}(\omega, z) \end{pmatrix}, \quad (5.55)$$

де в для бінарних напівпровідників у залежності від частоти маємо:

$$\varepsilon_{11}(\omega, z) = \varepsilon_{\infty}(z)\frac{\omega^2 - \omega_{LO(E_1)}^2(z)}{\omega^2 - \omega_{TO(E_1)}^2(z)}, \quad \varepsilon_{33}(\omega, z) = \varepsilon_{\infty}(z)\frac{\omega^2 - \omega_{LO(A_1)}^2(z)}{\omega^2 - \omega_{TO(A_1)}^2(z)}, \quad (5.56)$$

де ε_{∞} - високочастотна діелектрична константа, а ω_{LO} і ω_{TO} - відповідно частоти повздовжніх та поперечних оптичних фононів, визначених в околі Γ -точки як неприводимі представлення $A_1(z)$ та $E_1(xy)$.

Далі, вважаючи, що в наноструктурі відсутні вільні заряди, то, отримуємо:

$$\text{div}D = \frac{\partial D}{\partial x_k} = 0, \quad (5.57)$$

звідки:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(e_{ikl}(z) \frac{\partial u_k(\bar{\mathbf{r}})}{\partial x_l} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\varepsilon_{ik}(\omega, z) \frac{\partial \phi(\bar{\mathbf{r}})}{\partial x_k} \right) = 0. \quad (5.58)$$

Розписуючи рівняння (5.53) та (5.58) для довільно вибраного p -го шару наносистеми маємо систему пов'язаних диференціальних рівнянь:

$$\begin{cases} \rho^{(p)} \frac{\partial^2 u_i(\bar{\mathbf{r}}, t)}{\partial t^2} - C_{iklm}^{(p)} \frac{\partial^2 u_l(\bar{\mathbf{r}})}{\partial x_k \partial x_m} - e_{ikl}^{(p)} \frac{\partial^2 \phi(\bar{\mathbf{r}})}{\partial x_k \partial x_l} = 0, \\ e_{ikl}^{(p)} \frac{\partial^2 u_k(\bar{\mathbf{r}})}{\partial x_i \partial x_l} - \varepsilon_{ik}^{(p)}(\omega) \frac{\partial^2 \phi(\bar{\mathbf{r}})}{\partial x_i \partial x_k} = 0. \end{cases} \quad (5.59)$$

Систему рівнянь (5.59) зручно розв'язувати попередньо виконавши перехід до позначень Фойгта: $C_{iklm}^{(p)} \rightarrow C_{sn}^{(p)}$; $e_{ikl}^{(p)} \rightarrow e_{sn}^{(p)}$. З урахуванням симетрії задачі вважається, що деформація наноструктури у площині xy та уздовж осі z є

ізотропною, тоді п'єзоелектричний ефект повністю описується зміщенням $(0, u_2(\bar{r}), 0) = (0, u_2(x, z), 0)$ та потенціалом $\phi(\bar{r}) = \phi(x, z)$. Враховуючи вигляд тензорів $C_{sn}^{(p)}$, $e_{sn}^{(p)}$ для кристалів з решіткою типу вюрциту [120], з системи (5.59) отримуємо рівняння для u_2 і ϕ :

$$\begin{cases} \rho^{(p)} \frac{\partial^2 u_2(x, z, t)}{\partial t^2} - C_{44}^{(p)} \left(\frac{\partial^2 u_2(x, z)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_2(x, z)}{\partial z^2} \right) - e_{15}^{(p)} \left(\frac{\partial^2 \phi(x, z)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi(x, z)}{\partial z^2} \right) = 0, \\ e_{15}^{(p)} \left(\frac{\partial^2 u_2(x, z)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_2(x, z)}{\partial z^2} \right) - \varepsilon_{11}^{(p)}(\omega) \frac{\partial^2 \phi(x, z)}{\partial x^2} - \varepsilon_{33}^{(p)}(\omega) \frac{\partial^2 \phi(x, z)}{\partial z^2} = 0. \end{cases} \quad (5.60)$$

Розв'язки системи (5.60) знаходяться методом, описаним далі. Залежність зміщення від часу можна уважати гармонічною, тобто: $u_2(x, z, t) = u_2(x, z)e^{-i\omega t}$. Далі, представимо шуканий розв'язок у вигляді матриці-стовбця:

$$U(x, z) = \begin{pmatrix} u_2(x, z) \\ \phi(x, z) \end{pmatrix} = U(z)e^{iqx} = \begin{pmatrix} u_2(z) \\ \phi(z) \end{pmatrix} e^{iqx}, \quad (5.61)$$

що після підстановки в (5.60) дає:

$$\begin{cases} -C_{44}^{(p)} \frac{d^2 u_2(z)}{dz^2} + (q^2 C_{44}^{(p)} - \rho^{(p)} \omega^2) u_2(z) + q^2 e_{15}^{(p)} \phi(z) - e_{15}^{(p)} \frac{d^2 \phi(z)}{dz^2} = 0, \\ e_{15}^{(p)} \frac{d^2 u_2(z)}{dz^2} - q^2 e_{15}^{(p)} u_2(z) + q^2 \varepsilon_{11}^{(p)}(\omega) \phi(z) - \varepsilon_{33}^{(p)}(\omega) \frac{d^2 \phi(z)}{dz^2} = 0. \end{cases} \quad (5.62)$$

З першого рівняння (5.62) видно, що акустичні фонони, пов'язані з зміщенням $u_2(z)$ мають таку ж природу, як і зсувні фонони (SH), крім того це рівняння при $\phi(z) \rightarrow 0$, переходить у рівняння для цих фононів, отримане у працях [190, 191] або ж див. рівняння (5.24).

Уведемо тепер такі позначення:

$$\begin{aligned} a^{(p)} &= -C_{44}^{(p)}; \quad b^{(p)} = b^{(p)}(q, \omega) = q^2 C_{44}^{(p)} - \rho^{(p)} \omega^2, \quad c^{(p)} = c^{(p)}(q) = q^2 e_{15}^{(p)}, \quad d^{(p)} = -e_{15}^{(p)}, \\ e^{(p)} &= e^{(p)}(q, \omega) = q^2 \varepsilon_{11}^{(p)}(\omega), \quad f^{(p)} = f^{(p)}(\omega) = -\varepsilon_{33}^{(p)}(\omega). \end{aligned} \quad (5.63)$$

Тоді система (5.62) виявляється рівносильною такому рівнянню:

$$A^{(p)} \frac{d^2 U^{(p)}(z)}{dz^2} - B^{(p)} U^{(p)}(z) = 0, \quad (5.64)$$

де

$$A^{(p)} = \begin{pmatrix} a^{(p)} & d^{(p)} \\ -d^{(p)} & f^{(p)} \end{pmatrix}; B^{(p)} = \begin{pmatrix} -b^{(p)} & -c^{(p)} \\ c^{(p)} & -e^{(p)} \end{pmatrix}. \quad (5.65)$$

Розв'язки рівняння (5.64) доцільно шукати у такому вигляді:

$$U^{(p)}(z) = \mu^{(p)} e^{\lambda z}; \mu^{(p)} = \begin{pmatrix} \mu_1^{(p)} \\ \mu_2^{(p)} \end{pmatrix}. \quad (5.66)$$

Тоді це приводить до рівняння на знаходження власних значень λ і функцій $a^{(p)}$:

$$\left(A^{(p)} \lambda^2 - B^{(p)} \right) \mu^{(p)} = 0. \quad (5.67)$$

Рівняння на знаходження власних значень приводить до бікватратного рівняння відносно λ :

$$\begin{aligned} \left| A^{(p)} \lambda^2 - B^{(p)} \right| = 0; & \left| \begin{array}{cc} a^{(p)} \lambda^2 + b^{(p)} & d^{(p)} \lambda^2 + c^{(p)} \\ -d^{(p)} \lambda^2 - c^{(p)} & f^{(p)} \lambda^2 + e^{(p)} \end{array} \right| = 0; \\ & \lambda^4 + \frac{2c^{(p)}d^{(p)} + a^{(p)}e^{(p)} + b^{(p)}f^{(p)}}{(d^{(p)})^2 + a^{(p)}f^{(p)}} \lambda^2 + \frac{(c^{(p)})^2 + b^{(p)}e^{(p)}}{(d^{(p)})^2 + a^{(p)}f^{(p)}} = 0. \end{aligned} \quad (5.68)$$

Його розв'язки з урахуванням (5.63) такі:

$$\begin{aligned} \lambda_{1,2,3,4} = \pm & \left\{ -\frac{2c^{(p)}d^{(p)} + a^{(p)}e^{(p)} + b^{(p)}f^{(p)}}{2\left\{(d^{(p)})^2 + a^{(p)}f^{(p)}\right\}} \pm \left[\frac{2c^{(p)}d^{(p)} + a^{(p)}e^{(p)} + b^{(p)}f^{(p)}}{2\left\{(d^{(p)})^2 + a^{(p)}f^{(p)}\right\}} \right]^2 - \right. \\ & \left. - \frac{(c^{(p)})^2 + b^{(p)}e^{(p)}}{(d^{(p)})^2 + a^{(p)}f^{(p)}} \right\}^{1/2} \end{aligned} =$$

$$\begin{aligned}
&= \pm \left\{ \frac{2(qe_{15}^{(p)})^2 + C_{44}^{(p)} q^2 \varepsilon_{11}^{(p)}(\omega) - (q^2 C_{44}^{(p)} - \rho^{(p)} \omega^2) \varepsilon_{33}^{(p)}(\omega)}{2 \left\{ (e_{15}^{(p)})^2 + \varepsilon_{33}^{(p)}(\omega) C_{44}^{(p)} \right\}} \pm \right. \\
&\quad \left. \pm \left[\frac{2(qe_{15}^{(p)})^2 + C_{44}^{(p)} q^2 \varepsilon_{11}^{(p)}(\omega) + (q^2 C_{44}^{(p)} - \rho^{(p)} \omega^2) \varepsilon_{33}^{(p)}(\omega)}{2 \left\{ (e_{15}^{(p)})^2 + \varepsilon_{33}^{(p)}(\omega) C_{44}^{(p)} \right\}} \right]^2 - \right. \\
&\quad \left. - \frac{(q^2 e_{15}^{(p)})^2 + (q^2 C_{44}^{(p)} - \rho^{(p)} \omega^2) q^2 \varepsilon_{11}^{(p)}(\omega)}{(e_{15}^{(p)})^2 + \varepsilon_{33}^{(p)}(\omega) C_{44}^{(p)}} \right\}^{1/2} \Bigg\}^{1/2},
\end{aligned}$$

$$\lambda_1 = -\lambda_2; \lambda_3 = -\lambda_4. \quad (5.69)$$

де індекс “ p ” для зручності опущено.

Власні функції $a^{(p)}$ знаходяться (5.67) з рівняння за теоремою Гамільтона-Келі:

$$\begin{pmatrix} a^{(p)} \lambda_n^2 + b^{(p)} & d^{(p)} \lambda_n^2 + c^{(p)} \\ -d^{(p)} \lambda_n^2 - c^{(p)} & f^{(p)} \lambda_n^2 + e^{(p)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{1,n}^{(p)} \\ a_{2,n}^{(p)} \end{pmatrix} = 0; \quad n = 1-4, \quad (5.70)$$

звідки:

$$a_{1,n}^{(p)} = d^{(p)} \lambda_n^2 + c^{(p)} = e_{15}^{(p)} (q^2 - \lambda_n^2), \quad a_{2,n}^{(p)} = -(a^{(p)} \lambda_n^2 + b^{(p)}) = C_{44}^{(p)} \lambda_n^2 - q^2 C_{44}^{(p)} + \rho^{(p)} \omega^2. \quad (5.71)$$

Отже, остаточно розв’язки системи (5.62):

$$\begin{aligned}
u_2^{(p)}(z) &= \|V_1^{(p)}\| a_{1,1}^{(p)} A_1^{(p)} e^{\lambda_1 z} + \|V_2^{(p)}\| a_{1,2}^{(p)} B_1^{(p)} e^{\lambda_2 z} + \|V_3^{(p)}\| a_{1,3}^{(p)} C_1^{(p)} e^{\lambda_3 z} + \|V_4^{(p)}\| a_{1,4}^{(p)} D_1^{(p)} e^{\lambda_4 z} = \\
&= e_{15}^{(p)} \left(\|V_1^{(p)}\| (q^2 - \lambda_1^2) (A_1^{(p)} e^{\lambda_1 z} + B_1^{(p)} e^{-\lambda_1 z}) + \|V_2^{(p)}\| (q^2 - \lambda_2^2) (C_1^{(p)} e^{\lambda_2 z} + D_1^{(p)} \lambda_2 e^{-\lambda_2 z}) \right); \\
\phi^{(p)}(z) &= \|V_1^{(p)}\| a_{2,1}^{(p)} A_1^{(p)} e^{\lambda_1 z} + \|V_2^{(p)}\| a_{2,2}^{(p)} B_1^{(p)} e^{\lambda_2 z} + \|V_3^{(p)}\| a_{2,3}^{(p)} C_1^{(p)} e^{\lambda_3 z} + \|V_4^{(p)}\| a_{2,4}^{(p)} D_1^{(p)} e^{\lambda_4 z} = \\
&= \|V_1^{(p)}\| \left((C_{44}^{(p)} \lambda_1^2 - q^2 C_{44}^{(p)} + \rho^{(p)} \omega^2) (A_1^{(p)} e^{\lambda_1 z} + B_1^{(p)} e^{-\lambda_1 z}) + \right. \\
&\quad \left. + \|V_2^{(p)}\| \left((C_{44}^{(p)} \lambda_2^2 - q^2 C_{44}^{(p)} + \rho^{(p)} \omega^2) (C_1^{(p)} e^{\lambda_2 z} + D_1^{(p)} e^{-\lambda_2 z}) \right) \right)
\end{aligned} \quad (5.72)$$

де

$$\|V_n^{(p)}\| = 1/\sqrt{|a_{1,n}^{(p)}|^2 + |a_{2,n}^{(p)}|^2} = \left\{ |e_{15}^{(p)}(q^2 - \lambda_n^2)|^2 + |C_{44}^{(p)}\lambda_n^2 - q^2 C_{44}^{(p)} + \rho^{(p)}\omega^2|^2 \right\}^{-1/2}. \quad (5.73)$$

Очевидно, що у зовнішньому середовищі пружне зміщення та потенціал мають слідувати до нуля, тобто:

$$\lim_{z \rightarrow \pm\infty} \begin{pmatrix} u_2(z) \\ \phi(z) \end{pmatrix} = 0, \quad (5.74)$$

звідки: $A_1^{(0)} = C_1^{(0)} = B_1^{(N+1)} = D_1^{(N+1)} = 0$.

Для визначення усіх невідомих коефіцієнтів, скористаємося граничними умовами на межах усіх шарів наноструктури, що виконуються для пружного зміщення $u_2^{(p)}(z)e^{i(qx-\omega t)}$, потенціалу $\phi^{(p)}(z)e^{i(qx-\omega t)}$, компоненти $\sigma_{zy}^{(p)}(z) = \sigma_{32}^{(p)}(z)$ тензора напружень, визначеної як:

$$\begin{aligned} \sigma_{32}^{(p)}(z) &= \frac{1}{2} C_{44}^{(p)} \cdot 2 \left(\frac{\partial u_z^{(p)}(x,z)}{\partial y} + \frac{\partial u_y^{(p)}(x,z)}{\partial z} \right) + e_{15}^{(p)} E_2^{(p)}(\omega, x, z) = \\ &= C_{44}^{(p)} \frac{du_2^{(p)}(z)}{dz} e^{i(\omega t - qx)} + e_{15}^{(p)} \frac{\partial(\phi^{(p)}(z)e^{i(qx-\omega t)})}{\partial y} = \\ &= e_{15}^{(p)} C_{44}^{(p)} \left(\|V_1^{(p)}\| (q^2 - \lambda_1^2) \lambda_1 (A_1^{(p)} e^{\lambda_1 z} - B_1^{(p)} e^{-\lambda_1 z}) + \right. \\ &\quad \left. + \|V_2^{(p)}\| (q^2 - \lambda_2^2) \lambda_2 (C_1^{(p)} e^{\lambda_2 z} - D_1^{(p)} \lambda_2 e^{-\lambda_2 z}) \right), \end{aligned} \quad (5.75)$$

а також з нормальної компоненти вектора електричного зміщення:

$$\begin{aligned} D_3^{(p)}(z) &= e_{31}^{(p)} \frac{\partial(0 \cdot e^{i(qx-\omega t)})}{\partial x} + e_{31}^{(p)} \frac{\partial(u_2^{(p)}(z)e^{i(qx-\omega t)})}{\partial y} + e_{33}^{(p)} \frac{\partial(0 \cdot e^{i(qx-\omega t)})}{\partial z} + \\ &+ \varepsilon_{33}^{(p)}(\omega) \frac{\partial(\phi^{(p)}(z)e^{i(qx-\omega t)})}{\partial z} = \\ &= \varepsilon_{33}^{(p)}(\omega) \left\{ \|V_1^{(p)}\| \lambda_1 (C_{44}^{(p)} \lambda_1^2 - q^2 C_{44}^{(p)} + \rho^{(p)} \omega^2) (A_1^{(p)} e^{\lambda_1 z} - B_1^{(p)} e^{-\lambda_1 z}) + \right. \\ &\quad \left. + \|V_2^{(p)}\| \lambda_2 (C_{44}^{(p)} \lambda_2^2 - q^2 C_{44}^{(p)} + \rho^{(p)} \omega^2) (B_1^{(p)} e^{\lambda_2 z} + D_1^{(p)} e^{-\lambda_2 z}) \right\} e^{i(qx-\omega t)}. \end{aligned} \quad (5.76)$$

Ці граничні умови такі:

$$\left\{ \begin{array}{l} u_2^{(p)}(z) \Big|_{z \rightarrow z_p - 0} = u_2^{(p+1)}(z) \Big|_{z \rightarrow z_p + 0}, \\ \phi^{(p)}(z) \Big|_{z \rightarrow z_p - 0} = \phi^{(p+1)}(z) \Big|_{z \rightarrow z_p + 0}, \\ \sigma_{32}^{(p)}(z) \Big|_{z \rightarrow z_p - 0} = \sigma_{32}^{(p+1)}(z) \Big|_{z \rightarrow z_p + 0}, \\ D_3^{(p)}(z) \Big|_{z \rightarrow z_p - 0} = D_3^{(p+1)}(z) \Big|_{z \rightarrow z_p + 0}. \end{array} \right. \quad (5.77)$$

Уведемо такі кет-вектори:

$$|f^{(p)}\rangle = \left(A_1^{(p)} \quad B_1^{(p)} \quad C_1^{(p)} \quad D_1^{(p)} \right)^T, \quad (5.78)$$

тоді згідно методу трансфер-матриці отримується:

$$|f^{(0)}\rangle = \prod_{p=0}^N T^{(p,p+1)}(q, \omega) |f^{(N+1)}\rangle, \quad T^{(p,p+1)}(q, \omega) = \left(t^{(p)}(q, \omega) \right)^{-1} t^{(p+1)}(q, \omega),$$

$$t^{(p)}(q, \omega) = \begin{pmatrix} \alpha_1^{(p)}(q, \omega) & \alpha_1^{(p)}(q, \omega) & \alpha_2^{(p)}(q, \omega) & \alpha_2^{(p)}(q, \omega) \\ \beta_1^{(p)}(q, \omega) & \beta_1^{(p)}(q, \omega) & \beta_2^{(p)}(q, \omega) & \beta_2^{(p)}(q, \omega) \\ \gamma_1^{(p)}(q, \omega) & -\gamma_1^{(p)}(q, \omega) & \gamma_2^{(p)}(q, \omega) & -\gamma_2^{(p)}(q, \omega) \\ \delta_1^{(p)}(q, \omega) & -\delta_1^{(p)}(q, \omega) & \delta_2^{(p)}(q, \omega) & -\delta_2^{(p)}(q, \omega) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{\lambda_1 z^{(p)}} \\ e^{-\lambda_1 z^{(p)}} \\ e^{\lambda_2 z^{(p)}} \\ e^{-\lambda_2 z^{(p)}} \end{pmatrix},$$

$$\alpha_1^{(p)}(q, \omega) = e_{15}^{(p)} \|V_1^{(p)}\| (q^2 - \lambda_1^2), \quad \alpha_2^{(p)}(q, \omega) = e_{15}^{(p)} \|V_2^{(p)}\| (q^2 - \lambda_2^2),$$

$$\beta_1^{(p)}(q, \omega) = \|V_1^{(p)}\| \left(C_{44}^{(p)} \lambda_1^2 - q^2 C_{44}^{(p)} + \rho^{(p)} \omega^2 \right),$$

$$\beta_2^{(p)}(q, \omega) = \|V_2^{(p)}\| \left(C_{44}^{(p)} \lambda_2^2 - q^2 C_{44}^{(p)} + \rho^{(p)} \omega^2 \right),$$

$$\gamma_1^{(p)}(q, \omega) = e_{15}^{(p)} C_{44}^{(p)} \|V_1^{(p)}\| (q^2 - \lambda_1^2) \lambda_1, \quad \gamma_2^{(p)}(q, \omega) = e_{15}^{(p)} C_{44}^{(p)} \|V_2^{(p)}\| (q^2 - \lambda_2^2) \lambda_2,$$

$$\delta_1^{(p)}(q, \omega) = \varepsilon_{33}^{(p)}(\omega) \|V_1^{(p)}\| \lambda_1 \left(C_{44}^{(p)} \lambda_1^2 - q^2 C_{44}^{(p)} + \rho^{(p)} \omega^2 \right), \quad (5.79)$$

$$\delta_2^{(p)}(q, \omega) = \varepsilon_{33}^{(p)}(\omega) \|V_2^{(p)}\| \lambda_2 \left(C_{44}^{(p)} \lambda_2^2 - q^2 C_{44}^{(p)} + \rho^{(p)} \omega^2 \right).$$

Спектр акустичних фононів $\omega_{n_1} = \omega_{n_1}(q)$ тепер визначається з дисперсійного рівняння:

$$\det \left\{ \prod_{p=0}^N T^{(p,p+1)}(q, \omega) \right\} = 0. \quad (5.80)$$

З використанням граничних умов (5.77) виразимо коефіцієнти $A_1^{(p)}, B_1^{(p)}, C_1^{(p)}, D_1^{(p)}$ через один із них. Цей коефіцієнт отримується з умови нормування для величин зміщень u_2 , що є такою:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \rho(z) u_2^*(q, \omega_q, z) u_2(q', \omega_{q'}, z) dz = \frac{\hbar}{2\Delta l_x \Delta l_y \omega} \delta_{qq'}, \quad (5.81)$$

де $\Delta l_x \Delta l_y$ - площа перерізу наноструктури площиною xu , причому $\Delta l_x, \Delta l_y \gg z_N$.

Виконаємо для зміщення $u_2(q, \omega_q, z)$ та потенціал $\phi(q, \omega_q, z)$ розклад у ряд Фур'є:

$$\begin{pmatrix} u_2(q, \omega_{nq}, r) \\ \phi(q, \omega_q, z) \end{pmatrix} = \sum_{nq} \begin{pmatrix} u_2(q, \omega_{nq}, z) \\ \phi(q, \omega_{nq}, z) \end{pmatrix} e^{iqr}, \quad (5.82)$$

де функції $u_2(q, \omega_{nq}, z)$ і $\phi(q, \omega_{nq}, z)$, що відіграють роль коефіцієнтів розкладу, містять усі можливі моди акустичних фононів ω_{nq} .

Переходячи тепер від фур'є-компонент до узагальнених координат й імпульсів, далі до операторів чисел заповнення, отримаємо оператор пружного зміщення у представленні чисел заповнення:

$$\begin{aligned} \hat{u}_2(q, \omega_{nq}, r) &= \sum_{p=0}^N \sum_{nq} \sqrt{\frac{\hbar}{2\Delta l_x \Delta l_y \rho^{(p)} \omega_{nq}}} [\hat{b}_{n_1}(-q) + \hat{b}_{n_1}(q)] \times \\ &\times \hat{w}_2^{(p)}(q, \omega_{nq}, z) e^{iqr} [\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)], \end{aligned} \quad (5.83)$$

$$\hat{w}_2^{(p)}(q, \omega_{nq}, z) = \sqrt{\rho^{(p)}} \hat{u}_2^{(p)}(q, \omega_{nq}, z), \quad z_1 = -\infty.$$

Щоб визначити $\phi(q, \omega_{nq}, z)$ підставимо розклад (5.82) з урахуванням (5.83) у друге рівняння системи (5.62). Після спрощень, отримуємо диференціальне рівняння:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \phi^{(p)}(q, \omega_{nq}, z)}{dz^2} - q^2 \frac{\varepsilon_{11}^{(p)}(\omega)}{\varepsilon_{33}^{(p)}(\omega)} \phi^{(p)}(q, \omega_{nq}, z) = \\ = \frac{e_{15}^{(p)}}{\varepsilon_{33}^{(p)}(\omega)} \sqrt{\frac{\hbar}{2\Delta l_x \Delta l_y \rho^{(p)} \omega_{nq}}} \left[\frac{d^2 \hat{w}_2^{(p)}(q, \omega_{nq}, z)}{dz^2} - q^2 \hat{w}_2^{(p)}(q, \omega_{nq}, z) \right], \end{aligned} \quad (5.84)$$

його розв'язки є такими:

$$\begin{aligned}
\phi^{(p)}(q, \omega_{n,q}, z) &= A^{(p)} e^{\tilde{\chi}z} + B^{(p)} e^{-\tilde{\chi}z} - \frac{e_{15}^{(p)}}{\varepsilon_{33}^{(p)}(\omega)} \sqrt{\frac{\hbar}{2\Delta l_x \Delta l_y \rho^{(p)} \omega_{n,q}}} \times \\
&\times \left\{ e^{\tilde{\chi}z} \int_0^z e^{-\tilde{\chi}\xi} \Phi^{(p)}(q, \xi) d\xi - e^{-\tilde{\chi}z} \int_0^z e^{\tilde{\chi}\xi} \Phi^{(p)}(q, \xi) d\xi \right\}; \\
\Phi_s^{(p)}(q, z) &= \frac{d^2 \widehat{w}_2^{(p)}(q, \omega_{n,q}, z)}{dz^2} - q^2 \widehat{w}_2^{(p)}(q, \omega_{n,q}, z); \\
\tilde{\chi} &= \tilde{\chi}(q, \omega) = q \sqrt{\frac{\varepsilon_{11}^{(p)}(\omega)}{\varepsilon_{33}^{(p)}(\omega)}}.
\end{aligned} \tag{5.85}$$

Тепер, гамільтоніан акустичних фононів у представленні вторинного квантування має вигляд:

$$\widehat{H}_{ac} = \sum_{n,q} \hbar \omega_{n,q} \left(\widehat{b}_{n,q} \widehat{b}_{n,q} + \frac{1}{2} \right). \tag{5.86}$$

Компоненти ефективного потенціалу досліджуваної системи ми визначаємо цілком аналогічно як це робилось вище, тобто згідно із співвідношеннями (5.4)-(5.14)

В загальному випадку, уважаючи, що геометричні розміри перерізу наноструктури є значно більшими за її повздовжні розміри, тобто $\Delta l_x, \Delta l_y \gg z_N$, хвильова функція електрона може бути подана у вигляді Блох-подібної функції :

$$\Psi_{E \bar{k}_0}(R) = \Psi_{E \bar{k}_0}(\bar{r}, z) = \frac{1}{\sqrt{\Delta l_x \Delta l_y}} e^{i\bar{k}\bar{r}} \Psi_E(z), \quad R = (x, y, z), \tag{5.87}$$

де \bar{r} - вектор в площині xOy , \bar{k} - квазіімпульс електрона.

В такому випадку повна енергія, що описує повздовжній та поперечний рух електрона є такою:

$$E_{n\bar{k}} = E_n + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n^{(\text{eff})}}, \tag{5.88}$$

де уведено усереднену за всіма шарами наноструктури ефективну масу, яка визначається виразом:

$$\frac{1}{m_n^{(\text{eff})}} = \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ |\Psi_n(E_n, z)|^2 / m(z) \right\} dz. \tag{5.89}$$

Хвильова функція електрона є нормованою з умовою:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi_n(E_n, z)|^2 dz = 1 \quad (5.90)$$

тоді застосовуючи граничні умови також можна визначити коефіцієнти $A^{(0)}, B^{(6)}, A^{(p_i)}, B^{(p_i)}$ й у такий спосіб повністю задати саму хвильову функцію $\Psi_n(E_n, z)$.

Виконаємо перехід від координатного зображення до зображення вторинного квантування увівши квантовану хвильову функцію:

$$\widehat{\Psi}(R) = \sum_{n\bar{k}} \Psi_{n\bar{k}}(r, z) \widehat{a}_{n\bar{k}} = \sum_{\bar{k}} \sum_n \Psi_{n\bar{k}}(\bar{r}, z) \widehat{a}_{n\bar{k}}. \quad (5.91)$$

В такому випадку гамільтоніан не взаємодіючих електронів у зображенні вторинного квантування буде:

$$\widehat{H}_e = \int \widehat{\Psi}(R) \widehat{H}_e(R) \widehat{\Psi}^+(R) dR = \sum_{n, \bar{k}} E_{n\bar{k}} \widehat{a}_{n\bar{k}}^+ \widehat{a}_{n\bar{k}}, \quad (5.92)$$

де повна енергія $E_{n\bar{k}}$ визначається у відповідності до виразу (5.88), $\widehat{a}_{n\bar{k}}^+$ і $\widehat{a}_{n\bar{k}}$ - відповідно ферміонні оператори народження та знищення електронних станів.

Деформаційний потенціал через компоненти тензора напружень ε_{ij} та константи деформаційного потенціалу a_{1c}, a_{2c} визначається для кристалічної решітки типу вюрциту як: $\Delta E^{def} = a_{1c} \varepsilon_{zz} + a_{1c} (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}) = 0$, оскільки як для компонент $(0, u_2(x, z), 0)$ з урахуванням (5.72) слідує, що $\varepsilon_{yy} = 0$, а $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{zz}$ - з постановки задачі. Таким чином за наявності п'єзоефекту електрони та акустичні фонони зміщення через деформаційний потенціал також не взаємодіють як і у випадку арсенідних наносистем [192]. Проте така взаємодія можлива через п'єзоелектричний потенціал. Гамільтоніан такої взаємодії описується виразом:

$$\widehat{H}^{pz} = \sum_{q, n_1} \sum_{p=1}^N \phi^{(p)}(q, \omega_{n_1 q}, z) \left[b_{n_1}(q) + b_{n_1}^+(-q) \right] e^{iqr} \left[\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_{p+1}) \right], \quad (5.93)$$

Тоді, гамільтоніан, що описує взаємодію електронів з акустичними фононами через п'єзоелектричний потенціал має такий вигляд:

$$\widehat{H}_{e-pz} = \sum_{n, n', n_1, \bar{k}, \bar{q}} F_{nn_2}(q) \widehat{a}_{n', \bar{k} + \bar{q}}^+ \widehat{a}_{n\bar{k}} \left[b_{n_1}(q) + b_{n_1}^+(-q) \right], \quad (5.94)$$

де функція зв'язку така:

$$F_{m_1 n_1'}(q) = \int_{z_{p-1}}^{z_p} \Psi^{(p)}(E_n, z) \phi^{(p)}(q, \omega_{n_1 q}, z) e^{iqz} \Psi_{n_1'}^{*(p)}(E_n, z) dz. \quad (5.95)$$

Отже, гамільтоніан системи електрона з акустичними фононами за наявності п'єзоефекту є таким:

$$\hat{H} = \hat{H}_e + \hat{H}_{ac} + \hat{H}_{e-pz}. \quad (5.96)$$

Будемо приймати до уваги лише рівні стаціонарного електронного спектру. Тоді, щоб виконати їх перенормування взаємодією з акустичними фононами через п'єзоелектричний потенціал, слід виконати перетворення Фур'є для функції Гріна, що отримується з рівняння Дайсона :

$$G_n(\Omega) = 1/\Omega - E_{n\bar{k}} - M_n(\Omega). \quad (5.97)$$

Застосовуючи одно фононне наближення, подамо масовий оператор у рівнянні Дайсона як:

$$M_n(\Omega, \bar{k}) = \sum_{q n_1 n_1'} |F_{m_1 n_1'}(q)|^2 \left[\frac{1 + \nu_{n_1}}{\Omega - E_{n_1', \bar{k} + \bar{q}} - \hbar \omega_{n_1} + i\eta} + \frac{\nu_{n_1}}{\Omega - E_{n_1', \bar{k} + \bar{q}} + \hbar \omega_{n_1} + i\eta} \right], \eta \rightarrow \pm 0, \quad (5.98)$$

де $\nu_{n_1} = 1/e^{\hbar \omega_{n_1}/k_B T} - 1$ - число заповнення для акустичних фононних мод.

В реально існуючих наноприладах електронний потік спрямовують таким чином, щоб рухався майже строго вздовж осі Oz , перпендикулярно шарам наноструктури. Такому випадку задовольняє значення $\bar{k} = 0$, тоді отримуємо, що згідно (5.88): $\Omega = E_n$. Взаємодія електронів з акустичними фононами через п'єзоелектричний потенціал визначається перенормованими значення енергії електронного спектру \tilde{E}_n що характеризуються температурними зміщеннями (Δ_n) та згасаннями (Γ_n). Останні величини отримуються з плюсів з Фур'є-перетворення функції Гріна (5.97). Оскільки тепер:

$$M_n(\Omega = E_n, \bar{k} = 0) = \Delta_n - i \frac{\Gamma_n}{2}, \quad (5.99)$$

то розв'язки дисперсійного рівняння:

$$E_n - E_{n,\bar{q}} - M_n(\Omega = E_n, \bar{k} = 0) = 0, \quad (5.100)$$

такі

$$\begin{aligned} \Delta_n &= \text{Re} M_n(\Omega = E_n, \bar{k} = 0) = \\ &= \frac{\Delta I_x \Delta I_y}{4\pi^2} \sum_{n_1, \pm} \left(\nu_{n_1} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \text{P} \iint (E_n - E_{n,\bar{q}} \mp \Omega_{n_1})^{-1} |F_{mn_1}(q)|^2 d^2 q; \\ \Gamma_n &= -2 \text{Im} M_n(\Omega = E_n, \bar{k} = 0) = \\ &= \frac{\Delta I_x \Delta I_y}{2\pi} \sum_{n_1, \pm} \left(\nu_{n_1} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \iint \delta(E_n - E_{n,\bar{q}} \mp \Omega_{n_1}) |F_{mn_1}(q)|^2 d^2 q, \end{aligned} \quad (5.101)$$

де перший інтеграл у виразах (5.101) береться в розумінні головних значень Коші.

5.4. Властивості взаємодії електронів із зсувними акустичними фононами при різних значеннях температури. Температурні залежності зміщень рівнів електронного спектру та їх згасань, що зумовлені електрон-фононою взаємодією через механізм п'єзоелектричного потенціалу

Безпосередні розрахунки на основі теорії, розвиненої вище виконувались на прикладі двоямної (ширини ям: $w_1 = w_2 = 5 \text{ нм}$, товщини бар'єрів $b_1 = b_2 = b_3 = 2 \text{ нм}$) наноструктури з фізичними параметрами, приведеними у Таблиці 5.1.

Таблиця 5.1.

	m/m_e	ϵ_∞	$\rho(\text{kg/m}^3)$	$C_{44}(\text{GPa})$	$e_{15}(\text{C/m}^2)$	$P_{\text{Sp}}(\text{C/m}^2)$
GaN	0.186	10	6150	105	0.33	-0.029
AlN	0.322	8.5	3255	116	-0.42	-0.081
	$\omega_{LO(E_1)}(\text{meV})$	$\omega_{TO(E_1)}(\text{meV})$	$\omega_{LO(A_1)}(\text{meV})$	$\omega_{TO(A_1)}(\text{meV})$		
GaN	91.83	69.25	90.97	65.91		
AlN	113.02	83.13	110.3	75.72		

На Рис. 5.6а приведено результати розрахунку залежностей спектру зміщувальних акустичних фононів від хвильового вектора. Як видно з рисунка спектру зміщувальних акустичних фононів за наявності п'єзоелектричного ефекту

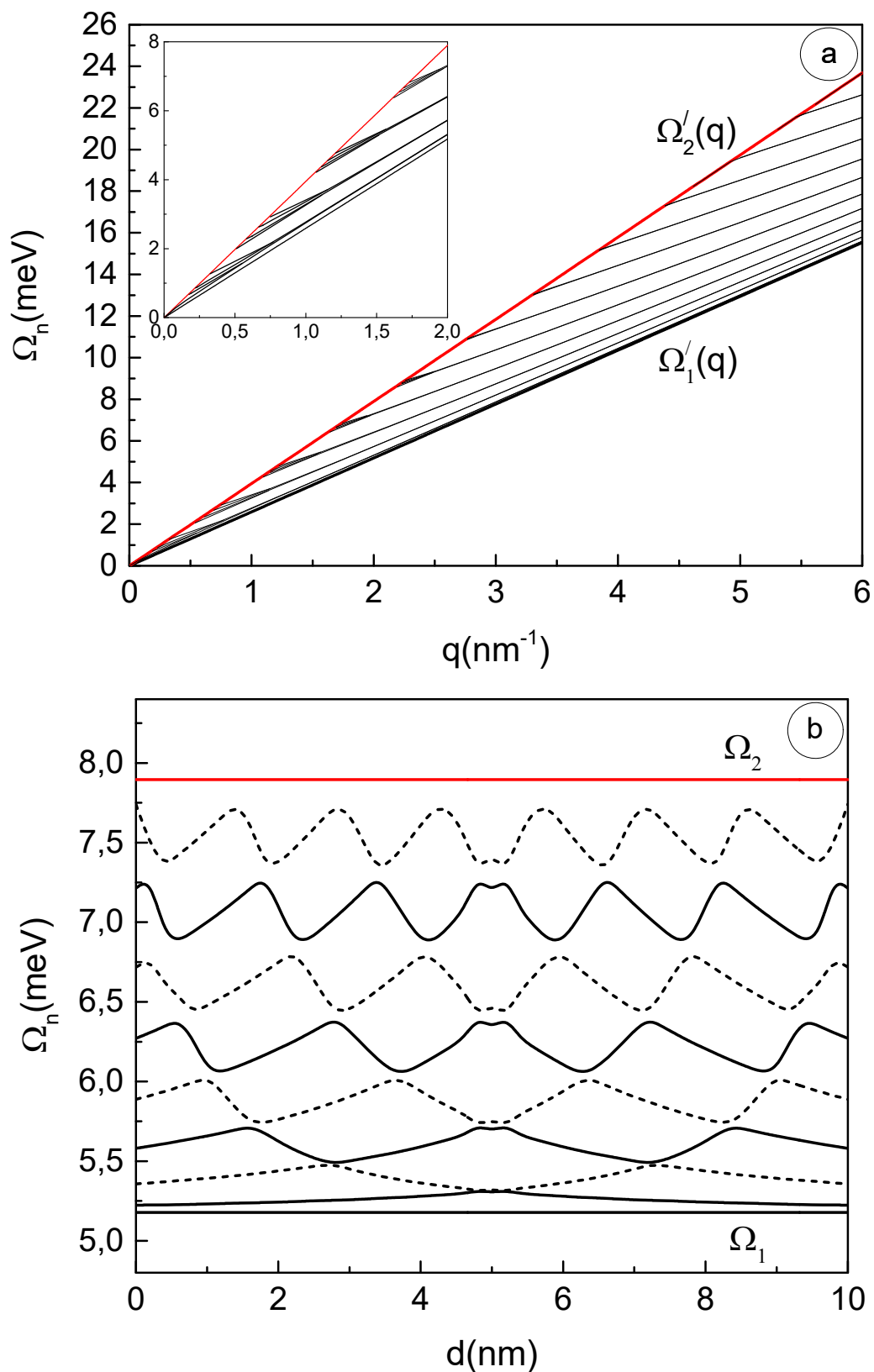


Рис. 5.6. Залежності спектру зміщувальних акустичних фононів від хвильового вектора q (a) та від сумарної ширини потенціальної ями ($0 \leq d \leq d_1 + d_2$) (b) при

$$q=24/z_3.$$

складається з сукупності віток залежностей $\Omega_{n_1}(q)$, розміщених у межах від $\Omega_2(q)$ до $\Omega_1(q)$, причому ці межі визначаються розв'язками рівняння:

$$\left(q^2 e_{15}^{(p)}\right)^2 + \varepsilon_{\infty}^{(p)} q^2 \frac{\left(q^2 C_{44}^{(p)} - \rho^{(p)} \omega^2\right) \left(\omega^2 - \left(\omega_{LO(E_1)}^{(p)}\right)^2\right)}{\omega^2 - \left(\omega_{TO(E_1)}^{(p)}\right)^2} = 0 \quad (5.102)$$

та умов, накладених на можливі значення енергій акустичних фононів [188, 189]:

$$\Omega_{ac}(q) \leq 25 \div 30 \text{ меВ}, \quad (5.103)$$

що й відповідно визначає значення $\Omega_1(q)$ і $\Omega_2(q)$, відкидаючи значення Ω , що не задовольняють умові (5.103).

Розраховані залежності $\Omega_{n_1}(q)$ формуються при відповідних значеннях $\Omega'_1(q)$ і $\Omega'_2(q)$ й квазілінійно зростають проявляючи незначні квадратичні тенденції при невеликому зростанні величини q поблизу точки їх формування. Основною особливістю залежностей спектру $\Omega_{n_1}(q)$ є те, що спочатку для кожної групи віток спочатку формується по чотири вітки залежностей – по дві вітки з різною дисперсією від q . Зі зростанням значень q , як видно з виноска на Рис. 5.6а відбувається спочатку зближення і злиття двох віток з однаковою дисперсією, а далі ці вітки також зливаються - утворюється одна вітка, значення енергій у якій повільно зближаються з залежністю $\Omega'_1(q)$. Слід зауважити, що для кожної з утворюваних віток є справедливим такий ефект: з ростом номера n_1 , відстань між сусідніми вітками енергій акустичних фононів зростає.

Далі, на Рис. 5.6b приведено залежності спектру зміщувальних акустичних фононів від величини сумарної потенціальної ями ($0 \leq d \leq d_1 + d_2$). З рисунка видно, що в розрахованих залежностях для перших віток чітко формується відповідно для кожної вітки $\Omega_{n_1}(d)$ n_1 максимум та n_1-1 мінімум. В подальшому ж для кожної з віток має місце n_1+1 максимум та n_1 мінімумів. Крім того екстремум (мінімум для непарних n_1 та максимум для парних значень n_1), розташований, в околі точки, що відповідає симетричному положенню внутрішнього потенціального бар'єра ($d \rightarrow (d_1 + d_2) / 2$) є слабо вираженим.

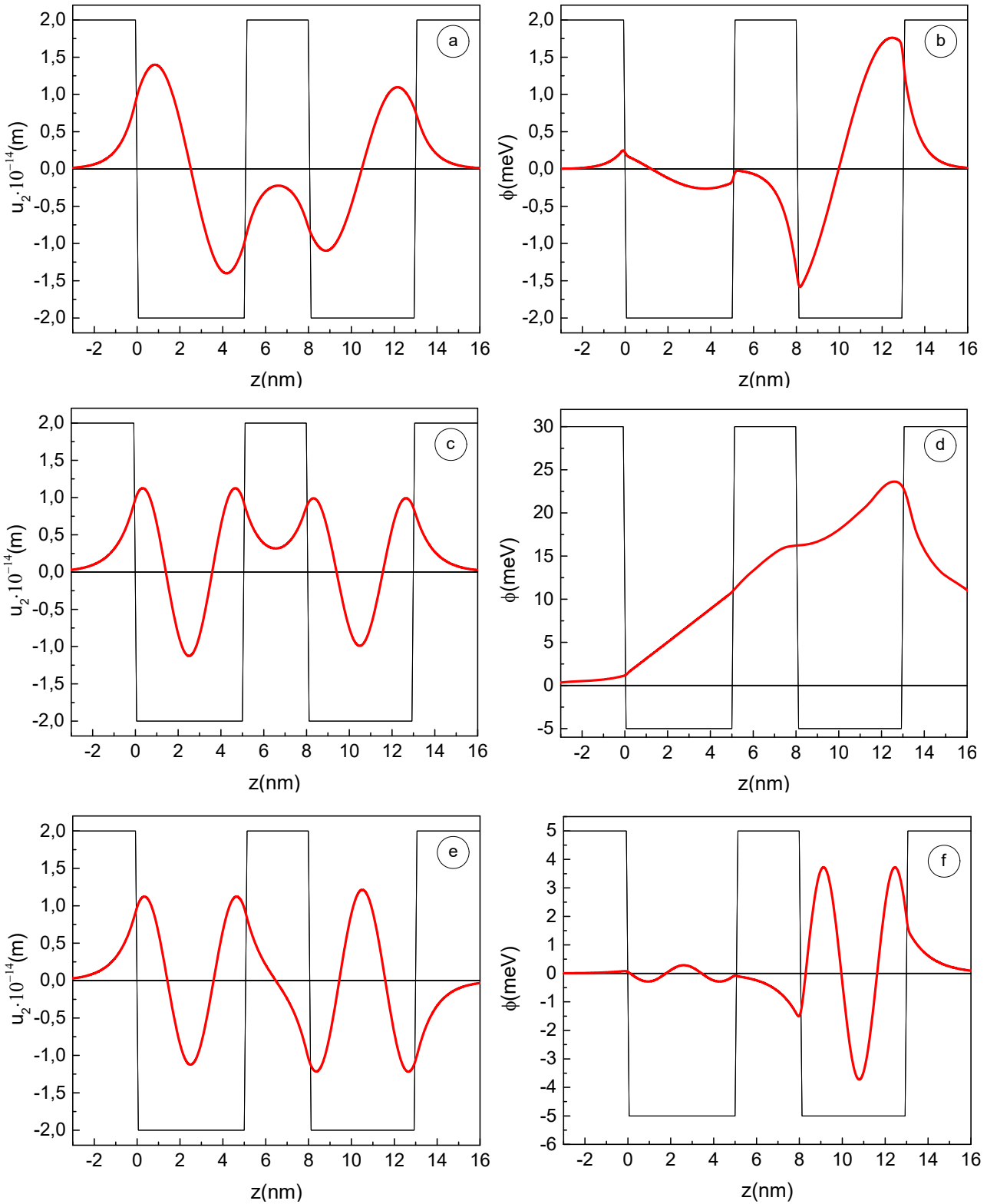


Рис. 5.7. Залежності пружного зміщення $u_2(z)$ (а, с, е) і потенціалу $\phi(z)$ (b, d, f) розраховані при $q=24/z_3$ для енергій акустичних фононів: (5,312; 6,401; 7,287) меВ

На Рис. 5.7а, b, с, d, е, f приведено приклади розрахованих для фіксованого значення q та відповідних значень енергій акустичних фононів $\hbar\omega_q$ величини пружного зміщення $u_2(z)$ та потенціалу $\phi(z)$. Як видно з Рис. 5.7а, с, е залежності

пружного зміщення $u_2(z)$ можуть вести себе по різному у різних шарах наноструктури. Так у лівому та правому потенціальних бар'єрах та зовнішньому напівпровідниковому середовищі, у відповідності до співвідношення (26) величини зміщення слідує до нуля при цьому набуваючи додатніх значень Рис. 5.7а, с, або ж набуваючи від'ємних значень в середовищі справа від наноструктури як на Рис. 5.7е. Встановлений ефект не має місця у залежностях для потенціалів, що подані на Рис. 5.7b, d, f.

Слід зауважити, що у потенціальних ямах залежності пружного зміщення поводять себе як антисиметричні функції відносно центра цих шарів наноструктури (Рис. 3а) або ж симетричні функції відносно цієї точки (Рис. 5.7с, е). Для таких випадків відповідні залежності для потенціалів (Рис. 5.7 b, d): в першому випадку потенціал з ліва направо спочатку спадає, а потім зростає, а в другому випадку зростає практично на всій області наноструктури. Для випадку на Рис. 5.7е та Рис. 5.7f маємо, що максимумам функції $u_2(z)$ відповідають мінімуми функції $\varphi(z)$ і навпаки.

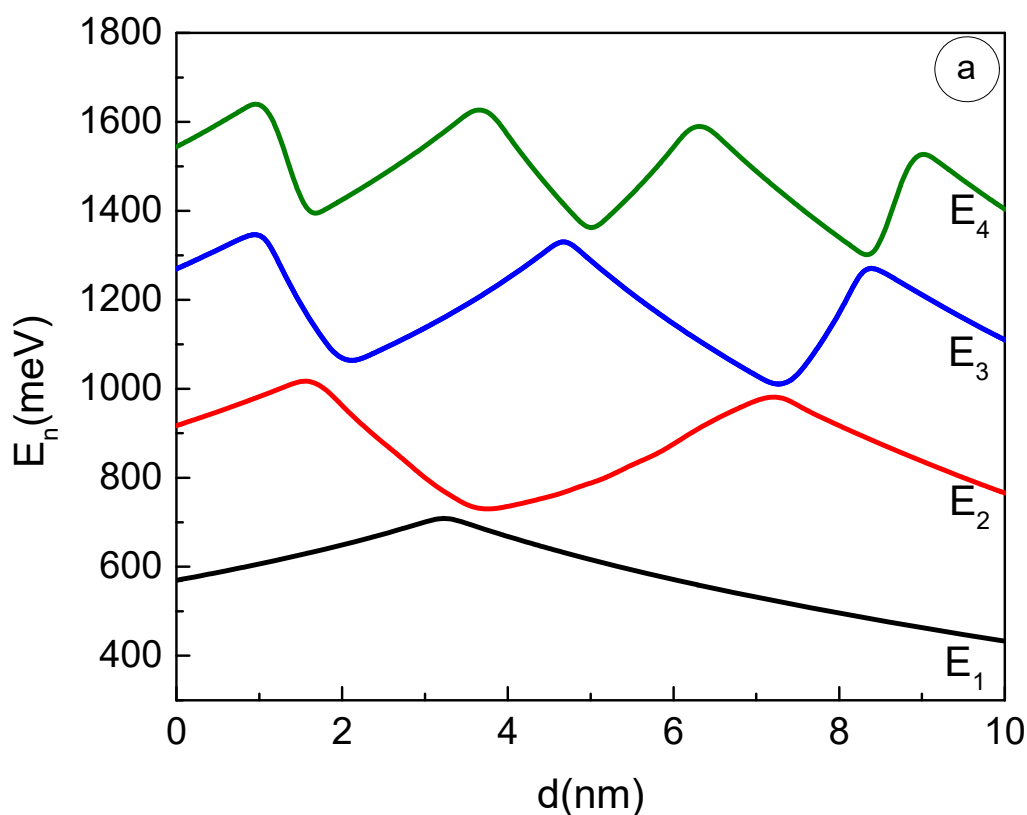
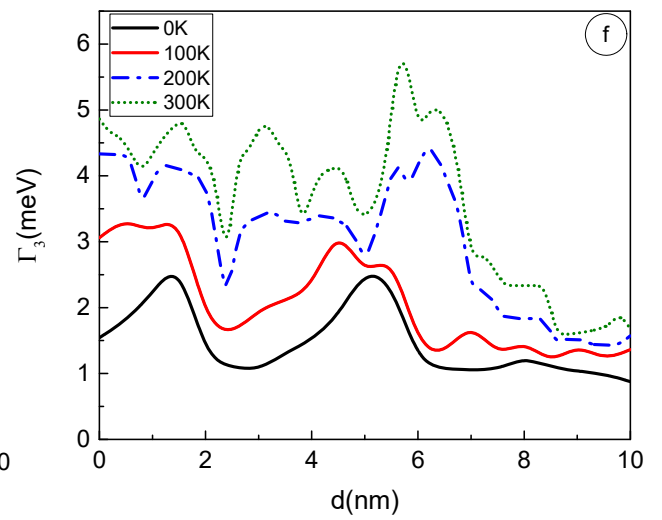
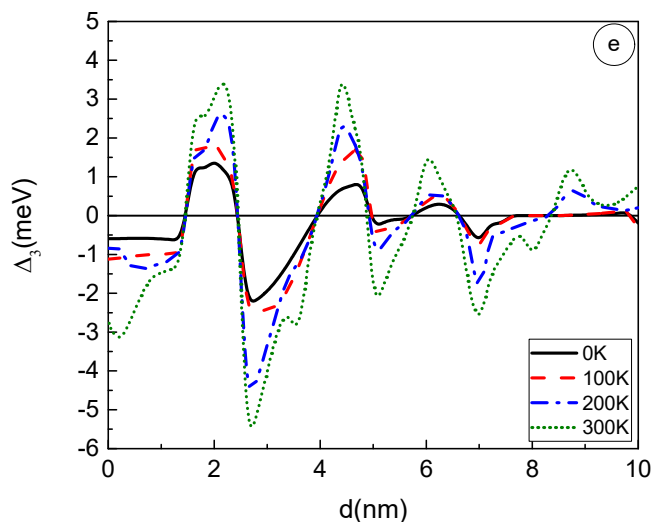
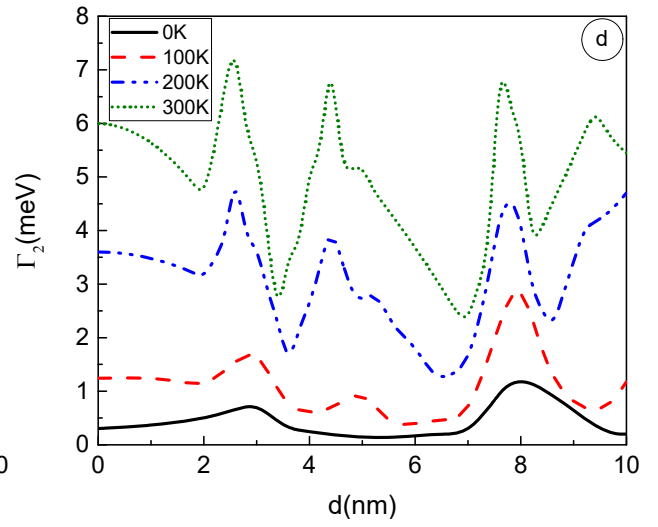
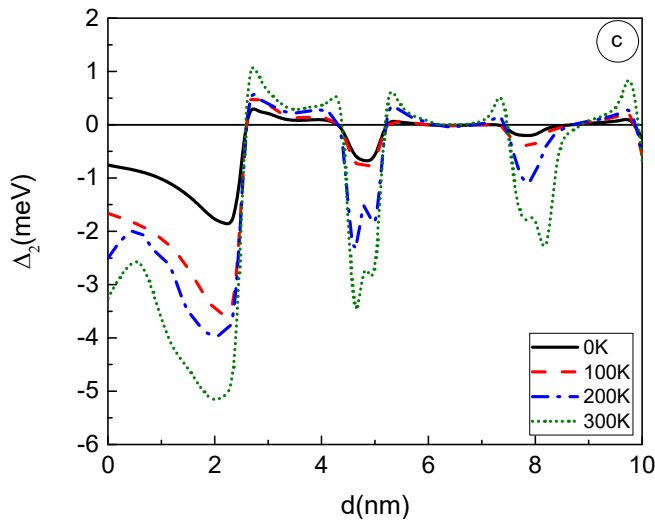
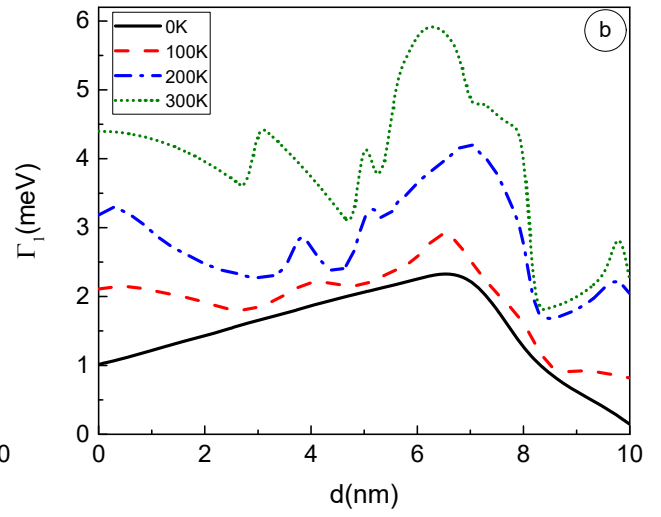
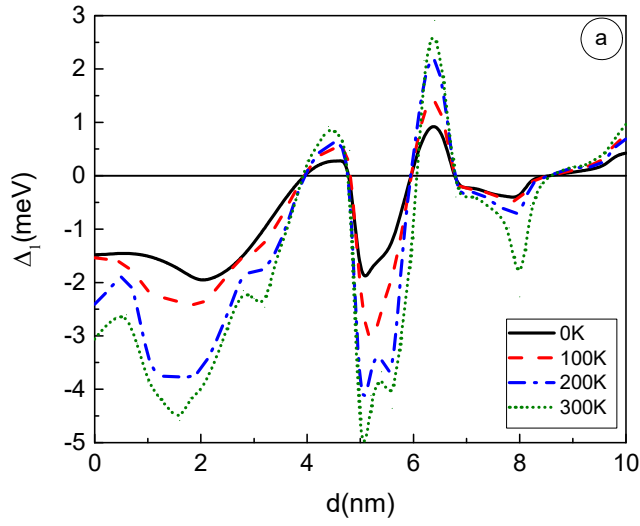


Рис. 5.8. Залежності перших чотирьох рівнів електронного спектру від сумарної ширини потенціальної ями ($0 \leq d \leq d_1 + d_2$) при $T=300\text{K}$



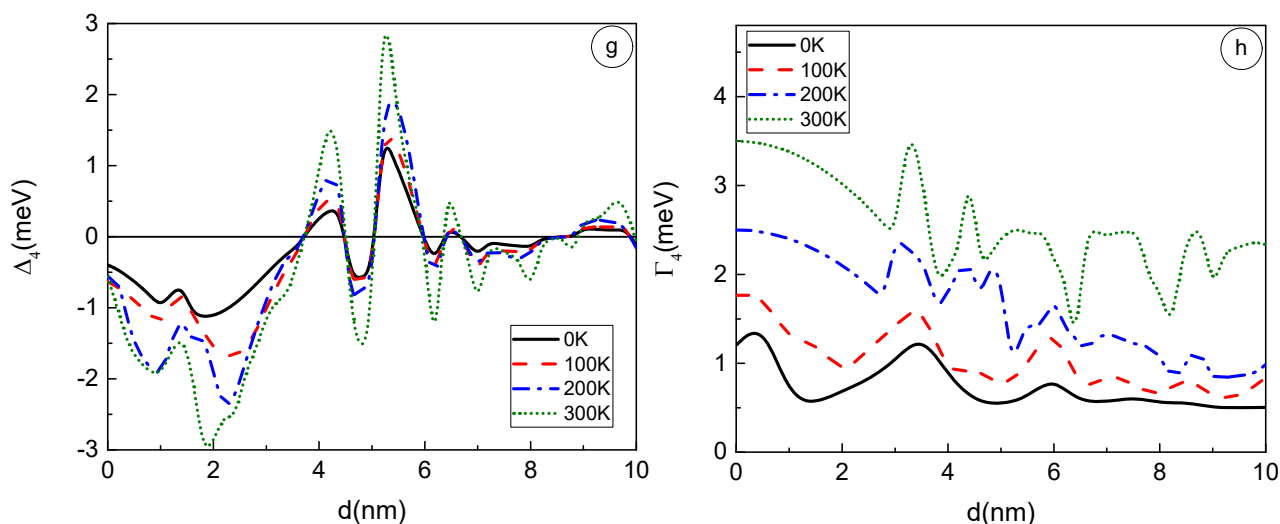


Рис. 5.9. Залежності для зміщень перших ($n=4$) рівнів електронного спектру та їхні згасання від ширини сумарної потенціальної ями d ($0 \leq d \leq d_1 + d_2$) (b) розраховані для $q=24/z_3$, при різних значеннях температури T : 0К (чорна суцільна лінія), 100К (червона штрихова лінія), 200 К (синя штрих-точкова лінія), 300К (зелена точкова лінія)

У випадку коли у шару, що відповідає внутрішньому бар'єру наноструктури формується максимум (Рис. 5.7а) чи мінімум (Рис. 5.7b) функції $u_2(z)$, то залежність $\varphi(z)$ у цій області відповідно спадає (Рис. 5.7b) та зростає (Рис. 5.7d). Для випадку на Рис 5.7е та Рис. 5.7f обидві функції $u_2(z)$ і $\varphi(z)$ в області внутрішнього бар'єра спадають.

На Рис. 5.8 приведено залежності для перших чотирьох електронних рівнів досліджуваної наноструктури, розраховані при кімнатній температурі ($T=300\text{K}$) від положення внутрішнього потенціального бар'єра у сумарній потенціальній ямі (d). Як видно рисунка, розраховані залежності характеризуються наявністю n максимумів та $n-1$ мінімуму для кожного номера енергетичного рівня n . Зауважимо, що має місце формування антикросінгів для залежностей сусідніх енергетичних рівнів. Крім того, у залежностях $E_n(d)$ відсутня їх симетрія по відношенню до симетричного положення внутрішнього потенціального бар'єра, що зумовлюється наявністю сильних внутрішніх електричних полів, згідно із співвідношенням (5.10). На Рис. 5.9а, b, c, d, e, f, g, h приведено залежності від положення внутрішнього потенціального бар'єра у сумарній потенціальній ямі для розрахованих при різних

значеннях температури величин зміщень рівнів стаціонарного електронного спектру та їх згасань. Для наочності отриманих результатів, усі розрахунки виконувались для значень температури починаючи від 0К (найбільш тривіальний випадок) до 300К (випадок кімнатної температури) з інкрементом у 100К, охоплюючи значення 100К (відповідає діапазону температур, для роботи яких використовується охолодження рідким азотом). Як видно з Рис. 5.9а, с, е, g величини зміщень рівнів електронного спектру у залежності від величини d набувають значень, що мають як додатній так і від'ємний знак, чого нема у випадку взаємодії електронів з флексуральними та ділатаціональними акустичними фононами [197, 198] (в цьому випадку температурні зміщення завжди від'ємні). Цей ефект визначається властивостями симетрії та знаком функцій $\phi^{(p)}(q, \omega_{nq}, z)$ входячих у співвідношення (5.85). Слід зауважити, що у більшості конфігурацій сумарної потенціальної ями наноструктури абсолютні величини зміщень $\Delta_n(d)$ збільшуються з ростом температури, причому відсутня кореляція між максимальною величиною зміщення та номером електронного рівня n . З ростом температури, залежність, сформована при $T=0K$ деформується, екстремуми сформовані при зміні d , стають більш вираженими набуваючи більших абсолютних значень, їх положення може дещо мінятись. Як видно з приведених залежностей для зміщень $\Delta_n(d)$ існує закономірність по відношенню до симетричного положення внутрішнього потенціального бар'єра ($d \rightarrow (d_1 + d_2) / 2$). У цій точці у всіх залежностях формується мінімум, що належить до інтервалу в якому зміщення рівня від'ємне. Ширина цього інтервалу зменшується з ростом номера електронного рівня n . Зліва та справа від згаданого інтервалу формується два інтервали з додатнім зміщенням енергетичних рівнів, причому це зміщення стає значним із ростом температури для усіх рівнів, окрім при $n=3$. В цьому випадку інтервали з додатнім зміщенням є найбільшими (~ 1.5 нм), проте саме зміщення слабо зростає з температурою, досягаючи максимальних значень на кінцях цих інтервалів. Також значним є зміщення енергетичних рівнів при малих розмірах лівої потенціальної ями (інтервал $0 \sim (d_1 + d_2) / 3$), при цьому при $n=3$, воно в цьому інтервалі встигає поміняти знак і

сформувані додатній максимум. Загалом слід зробити висновок, що в областях при $d > (d_1 + d_2) / 2$ (для більшої лівої потенціальної ями) величини температурних зміщень є меншими ніж при $d < (d_1 + d_2) / 2$.

Далі, на Рис. 5.9b, d, f, h наведено залежності від величини d , згасань електронних станів, розраховане для тих же значень температури, що й температурні зміщення. Як видно з приведених залежностей при $T=0\text{K}$ в наведених залежностях $\Gamma_n(d)$ формується кількість максимумів, що рівна номеру електронного рівня n , та відповідно $n-1$ мінімум. З ростом значень температури T відбувається також збільшення значень розсіювання для електронних рівнів: якщо при температурі 100K ці величини збільшуються в 1.5-2 рази, а при температурі 300K – в 5-6 раз. При цьому слід зауважити, що екстремуми в залежностях $\Gamma_n(d)$, що виникають при $T=0\text{K}$ наявні також і при 100K , 200K та 300K , але при цьому має місце поступова деформація цих залежностей з виникненням нових екстремумів, цей ефект найбільш виражений для третього ($n=3$) та четвертого ($n=4$) електронних рівнів. Для двох перших електронних рівнів деформація залежностей $\Gamma_n(d)$ є порівняно незначною. Підсумовуючи, слід зробити висновок, що взаємодія електронів з акустичними фононами через п'єзоелектричний потенціал призводить до перенормування рівнів електронного спектру, таким чином, безпосередньо впливаючи на енергію електронних переходів $\Omega_{nm} = E_m - E_n, n \neq m$. При цьому також відбувається перенормування смуги поглинання $\Gamma_{nm} = \Gamma_m + \Gamma_n, n \neq m$ (для електронних переходів з детектуванням енергії електромагнітного поля) чи смуги лазерного випромінювання (для випромінювальних квантових переходів). З ростом температури розширення $\Delta\Gamma_{nm} = \Delta\Gamma_{nm}(T) - \Delta\Gamma_{nm}(0)$ цих смуг збільшується, що потребує практичного урахування таких ефектів.

5.5. Теорія електрон-фононої взаємодії через механізми деформаційного та п'єзоелектричного потенціалів за наявності п'єзоелектричного ефекту – загальний випадок

Аналітична теорія взаємодії електронів з акустичними фононами через деформаційний потенціал може бути послідовно побудованою на основі знайдених точних рівнянь для фононних мод, як це було зроблено нами вище, хоча досі існує ряд робіт, де фактично постулюється відсутність можливості знайти такі точні розв'язки. Цілком аналогічна ситуація з розглядом задачі з побудови теорії п'єзоелектричного ефекту та взаємодії електронів з акустичними фононами через п'єзоелектричний потенціал, яка для нітридних напівпровідникових наноструктур взагалі залишається не дослідженою. Суміжна задача для GaAs квантової ями розглядалась в праці [192]. П'єзоелектричний потенціал в цій праці розраховувався фактично в першому порядку теорії збурень, нехтуючи ефектами впливу п'єзоелектричного поля на компоненти поля пружного зміщення для акустичних фононів. Безпосередні числові розрахунки в цій праці не виконувались.

Як буде показано в даному розділі теорія акустичних фононних мод з урахуванням п'єзоелектричного ефекту може побудованою на основі точних розв'язків рівнянь руху для пружного напівпровідникового середовища. Це робиться за допомогою методу, який викладено далі. Отже, ми будемо досліджувати акустичні фонони у багат шаровій наноструктурі геометрична форма якої у декартовій системі координат Oxy має вигляд, приведений на Рис. 5.10. Шари наноструктури, що відповідають квантовим ямам є з GaN напівпровідника, а шари, що є потенціальними бар'єрами з AlN напівпровідника. Тоді акустичні фононні моди визначаються шляхом знаходження розв'язків рівняння руху для пружного середовища наносистеми, що має вигляд:

$$\rho(z) \frac{\partial^2 u_i(\vec{r}, t)}{\partial t^2} = \frac{\partial \sigma_{ik}(\vec{r}, t)}{\partial x_k}; \quad x_1 = x; \quad x_2 = y; \quad x_3 = z; \quad i, k = (1; 2; 3), \quad (5.104)$$

де $u_i(\vec{r}, t) = u_i(x, y, z, t)$ - вектор поля пружного зміщення віднесений до точки $r = (x_1, x_2, x_3) = (x, y, z)$, у момент часу t .

Густина напівпровідникового матеріалу наносистеми унаслідок її шаруватої AlN/GaN природи є залежною від координати z , тобто:

$$\rho = \rho(z) = \sum_{p=0}^N \rho^{(p)} [\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)],$$

$$\rho^{(p)} = \begin{cases} \rho_0 = \rho_{\text{AlN}}, & p - \text{even} \\ \rho_1 = \rho_{\text{GaN}}, & p - \text{odd} \end{cases}, \quad z_{-1} = -\infty; \quad z_N = +\infty. \quad (5.105)$$

- де $\rho^{(p)}$ - густина матеріалу p -го шару наносистеми (ρ_{AlN} і ρ_{GaN} відповідно густини напівпровідників AlN і GaN), $\theta(z)$ - одинична функція Хевісайда.

Врахування впливу п'єзоелектричного ефекту полягає у представленні тензора напружень у наступному вигляді:

$$\sigma_{ik}(\vec{r}) = C_{iklm}(z)u_{lm}(\vec{r}) - e_{ikl}(z)E_l(\vec{r}), \quad l, m = (1; 2; 3) \quad (5.106)$$

де другий доданок у співвідношенні (5.106), відповідає за п'єзоелектричний ефект з електричним полем напруженістю $E_k(\vec{r})$. Очевидно, що пружні $C_{iklm}(z)$ та п'єзоелектричні константи $e_{ikl}(z)$ також залежать від координати z як:

$$C_{iklm}(z) = \sum_{p=1}^N C_{iklm}^{(p)} [\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)]; \quad e_{ikl}(z) = \sum_{p=1}^N e_{ikl}^{(p)} [\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)] \quad (5.107)$$

де $C_{iklm}^{(p)}$ і $e_{ikl}^{(p)}$ - їхні відповідні значення в p -ому шарі наносистеми.

Компоненти тензора деформації визначені як:

$$u_{lm}(\vec{r}) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_l(\vec{r})}{\partial x_m} + \frac{\partial u_m(\vec{r})}{\partial x_l} \right), \quad (5.108)$$

тоді рівняння, що описує зв'язок між електричним полем та пружним зміщенням середовища має вигляд:

$$D_i(\vec{r}, t) = e_{ilm}(z)u_{lm}(\vec{r}) + \varepsilon_{ik}(\omega, z)E_k(\vec{r}, t), \quad (5.109)$$

де діелектричний тензор $\varepsilon_{ik}(\omega, z)$ в межах наносистеми визначається аналогічно до співвідношень (5.107).

Будемо уважати, що досліджувана наносистема є електрично нейтральною, то нехтуючи густиною вільних зарядів $\rho_{\text{charges}} = 0$, отримаємо з рівняння Максвела:

$$\text{div} D_i(\vec{r}, t) = \vec{\nabla} \cdot D_i(\vec{r}, t) = 0. \quad (5.110)$$

Далі, вважаючи, що компоненти пружного зміщення й відповідно пов'язане цим зміщенням електричне поле мають гармонічну залежність від часу

$$u_i(\bar{r}, t) = u_i(\bar{r})e^{i\omega t}; E_i(\bar{r}, t) = E_i(\bar{r})e^{i\omega t} \quad (5.111)$$

то, система пов'язаних рівнянь (5.104) і (5.106) з урахуванням (5.107), (5.109) і (5.111) тепер набуває вигляду:

$$\begin{cases} \rho(z)\omega^2 u_i(\bar{r})\delta_{ki} - \frac{\partial}{\partial x_k} \left[C_{iklm}(z) \frac{\partial u_l(\bar{r})}{\partial x_m} \right] + \frac{\partial}{\partial x_k} [e_{ikl}(z)E_l(\bar{r})] = 0; \\ \frac{\partial}{\partial x_i} \left[e_{ikl}(z) \frac{\partial u_k(\bar{r})}{\partial x_l} \right] + \frac{\partial}{\partial x_i} [\varepsilon_{ik}(\omega, z)E_k(\bar{r})] = 0. \end{cases} \quad (5.112)$$

Оскільки досліджувана наносистема є однорідною при перерізі площиною xOy й поширення акустичних хвиль відбувається вздовж осі Ox , то це дає змогу представити шукану величину пружного зміщення у вигляді функції від x і z :

$$\begin{aligned} u_i(\bar{r}) = u_i(x, z) &= \sum_{p=1}^N u_i^{(p)}(x, z) [\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)] = \\ &= \sum_{p=1}^N u_i^{(p)}(z) [\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)] e^{iqx}; u_i(z) = \left(u_1^{(p)}(z) \quad u_2^{(p)}(z) \quad u_3^{(p)}(z) \right)^T, \end{aligned} \quad (5.113)$$

де $u_1^{(p)}(z), u_2^{(p)}(z), u_3^{(p)}(z)$ - визначені у межах довільного p -го шару наносистеми компоненти вектора пружного зміщення, а символ "T" - позначає операцію транспонування.

Зважаючи на співвідношення (5.111) та (5.113) напруженість електричного поля $E_i(\bar{r})$ будемо шукати у вигляді:

$$\begin{aligned} E_i(\bar{r}) = E_i(x, z) &= \sum_{p=1}^N E_i^{(p)}(x, z) [\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)] = \\ &= \sum_{p=1}^N E_i^{(p)}(z) [\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)] e^{-iqx}; E_i^{(p)}(z) = \left(E_x^{(p)}(z) \quad 0 \quad 0 \right)^T, \end{aligned} \quad (5.114)$$

оскільки електричне поле має в нашому випадку лише одну відмінну від нуля компоненту.

З урахуванням співвідношень (5.113), (5.114) система диференціальних рівнянь (5.112) для довільного p -го шару наносистеми має вигляд:

$$\left[\begin{array}{l} \left(\rho^{(p)} \omega^2 \delta_{ki} - C_{iklm}^{(p)} \frac{\partial^2}{\partial x_l \partial x_m} \right) u_k(x, z) - e_{ikl}^{(p)} \frac{\partial^2 \phi(x, z)}{\partial x_k \partial x_l} = 0; \\ e_{ikl}^{(p)} \frac{\partial^2 u_k(x, z)}{\partial x_i \partial x_l} - \varepsilon_{ik}^{(p)} \frac{\partial^2 \phi(x, z)}{\partial x_i \partial x_k} = 0. \end{array} \right. , \quad (5.115)$$

де враховано, що $\bar{E}_k(\bar{r}) = -\frac{\partial \phi(\bar{r})}{\partial x_k}$, де $\phi(\bar{r}, t) = \phi(x, z, t) = \phi(z) e^{i(\omega t - qx)}$ -

п'єзоелектричний потенціал.

Враховуючи, те що напівпровідникові шари наносистеми мають кристалічну решітку типу вюрциту зручним є перехід до двоідексних позначень Фойгта $C_{iklm} \rightarrow C_{\alpha\beta}$, $e_{ikl} \rightarrow e_{\alpha\beta}$, тоді тензори пружних та п'єзоелектричних констант та діелектричної проникності можуть бути представленими як:

$$C_{\alpha\beta}^{(p)} = \begin{pmatrix} C_{11}^{(p)} & C_{12}^{(p)} & C_{13}^{(p)} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12}^{(p)} & C_{11}^{(p)} & C_{13}^{(p)} & 0 & 0 & 0 \\ C_{13}^{(p)} & C_{13}^{(p)} & C_{33}^{(p)} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44}^{(p)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44}^{(p)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{66}^{(p)} \end{pmatrix}; e_{\alpha\beta}^{(p)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & e_{15}^{(p)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e_{15}^{(p)} & 0 & 0 \\ e_{31}^{(p)} & e_{31}^{(p)} & e_{33}^{(p)} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix};$$

$$\varepsilon_{\alpha\beta}^{(p)} = \varepsilon_{\alpha\beta}^{(p)}(\omega) = \begin{pmatrix} \varepsilon_{11}^{(p)}(\omega) & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{11}^{(p)}(\omega) & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{33}^{(p)}(\omega) \end{pmatrix}, \quad (5.116)$$

де діелектричні проникності визначаються у високочастотному випадку згідно співвідношення Ліддена-Сакса-Теллера:

$$\varepsilon_{11}(\omega, z) = \varepsilon_{\infty}(z) \frac{\omega^2 - \omega_{LO(E_1)}^2(z)}{\omega^2 - \omega_{TO(E_1)}^2(z)}, \quad \varepsilon_{33}(\omega, z) = \varepsilon_{\infty}(z) \frac{\omega^2 - \omega_{LO(A_1)}^2(z)}{\omega^2 - \omega_{TO(A_1)}^2(z)}, \quad (5.117)$$

де ε_∞ - високочастотна діелектрична константа, а ω_{LO} і ω_{LO} - відповідно частоти повздовжніх та поперечних мод оптичних фононів, визначених в околі Г-точки як неприводимі представлення $A_1(z)$ та $E_1(xy)$.

Приймаючи до уваги (5.116), (5.117) з системи рівнянь (5.115) отримуємо:

$$\begin{pmatrix} -C_{44}^{(p)} \frac{d^2}{dz^2} + q^2 C_{11}^{(p)} & 0 & iq(C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(p)}) \frac{d}{dz} & iq(e_{31} + e_{15}) \frac{d}{dz} \\ 0 & -C_{44}^{(p)} \frac{d^2}{dz^2} + q^2 C_{66}^{(p)} & 0 & 0 \\ iq(C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(p)}) \frac{d}{dz} & 0 & -C_{33}^{(p)} \frac{d^2}{dz^2} + q^2 C_{44}^{(p)} & -e_{33} \frac{d^2}{dz^2} + e_{15} q^2 \\ 0 & 0 & -e_{33} \frac{d^2}{dz^2} + e_{15} q^2 & iq(e_{31} + e_{15}) \frac{d}{dz} + \varepsilon_{33} \frac{d^2}{dz^2} \end{pmatrix} \times$$

$$\times \begin{pmatrix} u_1^{(p)}(z) \\ u_2^{(p)}(z) \\ u_3^{(p)}(z) \\ \phi_x^{(p)}(z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho^{(p)} \omega^2 u_1^{(p)}(z) \\ \rho^{(p)} \omega^2 u_2^{(p)}(z) \\ \rho^{(p)} \omega^2 u_3^{(p)}(z) \\ \varepsilon_{11} q^2 \end{pmatrix} \quad (5.118)$$

Система диференціальних рівнянь у матричному виді є еквівалентною таким рівнянням:

$$-C_{44}^{(p)} \frac{d^2 u_1^{(p)}}{dz^2} + iq(C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(p)}) \frac{du_3^{(p)}}{dz} + (q^2 C_{11}^{(p)} - \rho^{(p)} \omega^2) u_1^{(p)} + iq(e_{31} + e_{15}) \frac{d\phi_x^{(p)}}{dz} = 0, \quad (5.119)$$

$$-C_{44}^{(p)} \frac{d^2 u_2^{(p)}(z)}{dz^2} + (q^2 C_{66}^{(p)} - \rho^{(p)} \omega^2) u_2^{(p)}(z) = 0, \quad (5.120)$$

$$-C_{33}^{(p)} \frac{d^2 u_3^{(p)}}{dz^2} + iq(C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(p)}) \frac{du_1^{(p)}}{dz} + (q^2 C_{44}^{(p)} - \rho^{(p)} \omega^2) u_3^{(p)} + e_{15} q^2 \phi_x^{(p)} - e_{33} \frac{d^2 \phi_x^{(p)}}{dz^2} = 0; \quad (5.121)$$

$$iq(e_{31} + e_{15}) \frac{d\phi_x^{(p)}}{dz} + e_{15} q^2 u_3^{(p)} - \varepsilon_{11} q^2 \phi_x^{(p)} - e_{33} \frac{d^2 u_3^{(p)}}{dz^2} + \varepsilon_{33} \frac{d^2 \phi_x^{(p)}}{dz^2} = 0. \quad (5.122)$$

Рівняння (5.120) описує зсувні акустичні фонони. Властивості їх спектру та компонент поля пружного зміщення детально проаналізовані як для одноямних так і для багатошарових наноструктур. З вигляду рівняння (5.120) видно, що в нашому випадку зсувні фонони не дають внеску у спричинений п'єзоелектричний ефект. В подальшому це рівняння не згадується.

Розв'язок пов'язаної між собою системи рівнянь (5.119), (5.121), (5.122) може бути знайдений точно а аналітичному виді, з використанням методу, описаного далі. Система диференціальних рівнянь, що описують компоненти полів зміщення та електричне поле спричинене п'єзоелектричним ефектом у окремому p -ому шарів наносистеми має вигляд:

$$\left[\begin{array}{l} C_{44}^{(p)} \frac{d^2 u_1^{(p)}}{dz^2} - iq \left(C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(p)} \right) \frac{du_3^{(p)}}{dz} - \left(q^2 C_{11}^{(p)} - \rho^{(p)} \omega^2 \right) u_1^{(p)} - iq \left(e_{31} + e_{15} \right) \frac{d\phi_x^{(p)}}{dz} = 0; \\ C_{33}^{(p)} \frac{d^2 u_3^{(p)}}{dz^2} - iq \left(C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(p)} \right) \frac{du_1^{(p)}}{dz} - \left(q^2 C_{44}^{(p)} - \rho^{(p)} \omega^2 \right) u_3^{(p)} - e_{15} q^2 \phi_1^{(p)} + e_{33} \frac{d^2 \phi_x^{(p)}}{dz^2} = 0; \\ iq \left(e_{31} + e_{15} \right) \frac{d\phi_x^{(p)}}{dz} + e_{15} q^2 u_3^{(p)} - e_{33} \frac{d^2 u_3^{(p)}}{dz^2} - \varepsilon_{11} q^2 \phi_1^{(p)} + \varepsilon_{33} \frac{d^2 \phi_x^{(p)}}{dz^2} = 0. \end{array} \right. \quad (5.123)$$

При введенні наступних позначень:

$$\begin{aligned} a_1^{(p)} &= C_{44}^{(p)}; a_2^{(p)} = a_2^{(p)}(q) = q \left(C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(p)} \right); a_3^{(p)} = a_3^{(p)}(q, \omega) = \rho^{(p)} \omega^2 - q^2 C_{11}^{(p)}; \\ a_4^{(p)} &= q \left(e_{31} + e_{15} \right); a_5^{(p)} = C_{33}^{(p)}; a_6^{(p)} = a_6^{(p)}(q, \omega) = \rho^{(p)} \omega^2 - q^2 C_{44}^{(p)}; a_7^{(p)} = e_{15} q^2; \\ a_8^{(p)} &= e_{33}; a_9^{(p)} = \varepsilon_{11} q^2; a_{10}^{(p)} = \varepsilon_{33}. \end{aligned} \quad (5.124)$$

то тоді система (5.123) приводиться до вигляду:

$$\left[\begin{array}{l} a_1^{(p)} \frac{d^2 u_1^{(p)}}{dz^2} - ia_2^{(p)} \frac{du_3^{(p)}}{dz} + a_3^{(p)} u_1^{(p)} - ia_4^{(p)} \frac{d\phi_x^{(p)}}{dz} = 0; \\ a_5^{(p)} \frac{d^2 u_3^{(p)}}{dz^2} - ia_2^{(p)} \frac{du_1^{(p)}}{dz} + a_6^{(p)} u_3^{(p)} - a_7^{(p)} \phi_x^{(p)} + a_8^{(p)} \frac{d^2 \phi_x^{(p)}}{dz^2} = 0; \\ ia_4^{(p)} \frac{d\phi_x^{(p)}}{dz} + a_7^{(p)} u_3^{(p)} - a_8^{(p)} \frac{d^2 u_3^{(p)}}{dz^2} - a_9^{(p)} E_x^{(p)} + a_{10}^{(p)} \frac{d^2 \phi_x^{(p)}}{dz^2} = 0. \end{array} \right. \quad (5.125)$$

Як ввести позначення:

$$A^{(p)} = \begin{pmatrix} a_1^{(p)} & 0 & 0 \\ 0 & a_5^{(p)} & a_8^{(p)} \\ 0 & -a_8^{(p)} & a_{10}^{(p)} \end{pmatrix}; B^{(p)} = \begin{pmatrix} 0 & -ia_2^{(p)} & -ia_4^{(p)} \\ -ia_2^{(p)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & ia_4^{(p)} \end{pmatrix};$$

$$C^{(p)} = \begin{pmatrix} a_3^{(p)} & 0 & 0 \\ 0 & a_6^{(p)} & -a_7^{(p)} \\ 0 & a_7^{(p)} & -a_9^{(p)} \end{pmatrix}. \quad (5.126)$$

то отримаємо диференціальне рівняння:

$$A^{(p)} \frac{d^2 U^{(p)}}{dz^2} + B^{(p)} \frac{dU^{(p)}}{dz} + C^{(p)} U^{(p)} = 0; U^{(p)} = U^{(p)}(z) = \begin{pmatrix} u_1^{(p)}(z) \\ u_3^{(p)}(z) \\ \phi_x^{(p)}(z) \end{pmatrix}. \quad (5.127)$$

Розв'язки рівняння (5.127) шукаємо у вигляді:

$$U^{(p)}(z) = \alpha^{(p)} e^{\lambda z}; \alpha^{(p)} = \begin{pmatrix} \alpha_1^{(p)} \\ \alpha_2^{(p)} \\ \alpha_3^{(p)} \end{pmatrix} \quad (5.128)$$

звідки отримуємо рівняння, з якого визначаються власні значення λ та функції $\alpha_n^{(p)}$:

$$\left(A^{(p)} \lambda^2 + B^{(p)} \lambda + C^{(p)} \right) \alpha^{(p)} = 0. \quad (5.129)$$

З (5.129) отримуємо рівняння на власні значення λ :

$$\left| A^{(p)} \lambda^2 + B^{(p)} \lambda + C^{(p)} \right| = 0; \begin{vmatrix} a_1^{(p)} \lambda^2 + a_3^{(p)} & -ia_2^{(p)} \lambda & 0 \\ -ia_2^{(p)} \lambda & a_5^{(p)} \lambda^2 + a_6^{(p)} & a_8^{(p)} \lambda^2 - a_7^{(p)} \\ 0 & -a_8^{(p)} \lambda^2 + a_7^{(p)} & a_{10}^{(p)} \lambda^2 - a_9^{(p)} \end{vmatrix} = 0.$$

Воно має вигляд бікубічного рівняння:

$$\lambda^6 + \tilde{a}^{(p)} \lambda^4 + \tilde{b}^{(p)} \lambda^2 + \tilde{c}^{(p)} = 0. \quad (5.130)$$

де

$$\begin{aligned}\tilde{a}^{(p)} &= \frac{a_{10}^{(p)} \left[\left(a_2^{(p)} \right)^2 + a_3^{(p)} a_5^{(p)} + a_1^{(p)} a_6^{(p)} \right] + a_3^{(p)} \left(a_8^{(p)} \right)^2 - a_1^{(p)} \left(2a_7^{(p)} a_8^{(p)} + a_5^{(p)} a_9^{(p)} \right)}{a_1^{(p)} \left[a_5^{(p)} a_{10}^{(p)} + \left(a_8^{(p)} \right)^2 \right]}; \\ \tilde{b}^{(p)} &= \frac{a_3^{(p)} a_6^{(p)} a_{10}^{(p)} + a_7^{(p)} \left(a_1^{(p)} a_7^{(p)} - 2a_3^{(p)} a_8^{(p)} \right) - a_9^{(p)} \left[\left(a_2^{(p)} \right)^2 + a_3^{(p)} a_5^{(p)} + a_1^{(p)} a_6^{(p)} \right]}{a_1^{(p)} \left[a_5^{(p)} a_{10}^{(p)} + \left(a_8^{(p)} \right)^2 \right]}; \\ \tilde{c}^{(p)} &= \frac{a_3^{(p)} \left[\left(a_7^{(p)} \right)^2 - a_6^{(p)} a_9^{(p)} \right]}{a_1^{(p)} \left[a_5^{(p)} a_{10}^{(p)} + \left(a_8^{(p)} \right)^2 \right]}.\end{aligned}\tag{5.131}$$

Введенням заміни змінних

$$\lambda^2 = \mu - \frac{\tilde{a}^{(p)}}{3}\tag{5.132}$$

воно приводиться до канонічного виду

$$\mu^3 + P^{(p)}\mu + Q^{(p)} = 0.\tag{5.133}$$

де

$$P^{(p)} = \tilde{b}^{(p)} - \frac{\left(\tilde{a}^{(p)} \right)^2}{3}; \quad Q^{(p)} = \frac{2\left(\tilde{a}^{(p)} \right)^3}{27} - \frac{\tilde{a}^{(p)}\tilde{b}^{(p)}}{3} + \tilde{c}^{(p)}.\tag{5.134}$$

Тоді розв'язки рівняння (5.130), знайдені з використанням формул Кардано, мають вигляд:

$$\lambda_{1,2} = \pm\sqrt{\alpha^+ + \alpha^-}; \quad \lambda_{3,4} = \pm\sqrt{\alpha^+ \varepsilon + \alpha^- \varepsilon^2}; \quad \lambda_{5,6} = \pm\sqrt{\alpha^+ \varepsilon^2 + \alpha^- \varepsilon},\tag{5.135}$$

де

$$\begin{aligned}\alpha^{+(-)} &= \sqrt[3]{-\frac{Q^{(p)}}{2} \pm \sqrt{\frac{\left(Q^{(p)} \right)^2}{4} + \frac{\left(P^{(p)} \right)^3}{27}}} = \\ &= \sqrt[3]{-\frac{\left(\tilde{a}^{(p)} \right)^3}{27} + \frac{\tilde{a}^{(p)}\tilde{b}^{(p)}}{6} - \frac{\tilde{c}^{(p)}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\left(\tilde{a}^{(p)} \right)^3}{27} - \frac{\tilde{a}^{(p)}\tilde{b}^{(p)}}{6} + \frac{\tilde{c}^{(p)}}{2} \right)^2 + \left(\frac{\tilde{b}^{(p)}}{3} - \frac{\left(\tilde{a}^{(p)} \right)^2}{6} \right)^3}}; \quad \varepsilon = \sqrt[3]{1}.\end{aligned}$$

(5.136)

Власні функції $\alpha^{(p)}$ знаходяться з рівняння:

$$\begin{pmatrix} a_1^{(p)}\lambda_n^2 + a_3^{(p)} & -ia_2^{(p)}\lambda_n & 0 \\ -ia_2^{(p)}\lambda_n & a_5^{(p)}\lambda_n^2 + a_6^{(p)} & a_8^{(p)}\lambda_n^2 - a_7^{(p)} \\ 0 & -a_8^{(p)}\lambda_n^2 + a_7^{(p)} & a_{10}^{(p)}\lambda_n^2 - a_9^{(p)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_{1,n}^{(p)} \\ \alpha_{2,n}^{(p)} \\ \alpha_{3,n}^{(p)} \end{pmatrix} = 0; n = 1-6, \quad (5.137)$$

звідки за теоремою Гамільтона-Келі отримуємо:

$$\alpha_{1,n}^{(p)} = ia_2^{(p)}\lambda_n = iq(C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(p)})\lambda_n; \alpha_{2,n}^{(p)} = a_1^{(p)}\lambda_n^2 + a_3^{(p)} = C_{44}^{(p)}\lambda_n^2 + \rho^{(p)}\omega^2 - q^2C_{11}^{(p)};$$

$$\alpha_{3,n}^{(p)} = \frac{a_2^{(p)2}\lambda_n^2 + (a_1^{(p)}\lambda_n^2 + a_3^{(p)})(a_5^{(p)}\lambda_n^2 + a_6^{(p)})}{-a_8^{(p)}\lambda_n^2 + a_7^{(p)}} = \quad (5.138)$$

$$= \frac{q^2(C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(p)})^2\lambda_n^2 + (C_{44}^{(p)}\lambda_n^2 + \rho^{(p)}\omega^2 - q^2C_{11}^{(p)})(C_{33}^{(p)}\lambda_n^2 + \rho^{(p)}\omega^2 - q^2C_{44}^{(p)})}{e_{15}^{(p)}q^2 - e_{33}^{(p)}\lambda_n^2}.$$

Норма вектора $\alpha_n^{(p)}$, тобто величина $\|\alpha_n^{(p)}\|$ визначена як:

$$\begin{aligned} \|\alpha_n^{(p)}\| &= \frac{1}{\sqrt{|\alpha_{1,n}^{(p)}|^2 + |\alpha_{2,n}^{(p)}|^2 + |\alpha_{3,n}^{(p)}|^2}} = \\ &= \left\{ q^2(C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(p)})^2\lambda_n^2 + (C_{44}^{(p)}\lambda_n^2 + \rho^{(p)}\omega^2 - q^2C_{11}^{(p)})^2 + \right. \\ &\quad \left. + \left| \frac{q^2(C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(p)})^2\lambda_n^2 + (C_{44}^{(p)}\lambda_n^2 + \rho^{(p)}\omega^2 - q^2C_{11}^{(p)})(C_{33}^{(p)}\lambda_n^2 + \rho^{(p)}\omega^2 - q^2C_{44}^{(p)})}{e_{15}^{(p)}q^2 - e_{33}^{(p)}\lambda_n^2} \right|^2 \right\}^{-1/2} \end{aligned} \quad (5.139)$$

Отже, остаточно розв'язки системи (5.125):

$$\begin{aligned}
u_1^{(p)}(z) &= \frac{\alpha_{1,1}^{(p)}}{\|\alpha_1^{(p)}\|} A_1^{(p)} e^{\lambda_1^{(p)} z} + \frac{\alpha_{1,2}^{(p)}}{\|\alpha_2^{(p)}\|} B_1^{(p)} e^{\lambda_2^{(p)} z} + \frac{\alpha_{1,3}^{(p)}}{\|\alpha_3^{(p)}\|} C_1^{(p)} e^{\lambda_3^{(p)} z} + \frac{\alpha_{1,4}^{(p)}}{\|\alpha_4^{(p)}\|} D_1^{(p)} e^{\lambda_4^{(p)} z} + \frac{\alpha_{1,5}^{(p)}}{\|\alpha_5^{(p)}\|} E_1^{(p)} e^{\lambda_5^{(p)} z} + \\
&+ \frac{\alpha_{1,6}^{(p)}}{\|\alpha_6^{(p)}\|} F_1^{(p)} e^{\lambda_6^{(p)} z} = -iq(C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(p)}) \left(\frac{\lambda_1}{\|\alpha_1^{(p)}\|} (A_1^{(p)} e^{\lambda_1^{(p)} z} - B_1^{(p)} e^{-\lambda_1^{(p)} z}) + \frac{\lambda_2}{\|\alpha_2^{(p)}\|} (C_1^{(p)} e^{\lambda_2^{(p)} z} - D_1^{(p)} \lambda_2 e^{-\lambda_2^{(p)} z}) + \right. \\
&\left. + \frac{\lambda_3}{\|\alpha_3^{(p)}\|} (E_1^{(p)} e^{\lambda_3^{(p)} z} - F_1^{(p)} \lambda_2 e^{-\lambda_3^{(p)} z}) \right) = -iq(C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(p)}) \sum_{s=1}^3 \left(\tilde{A}_{2s-1}^{(p)} e^{\lambda_s^{(p)} z} - \tilde{A}_{2s}^{(p)} e^{-\lambda_s^{(p)} z} \right) / \|\alpha_s^{(p)}(q)\|;
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
u_3^{(p)}(z) &= \frac{\alpha_{2,1}^{(p)}}{\|\alpha_1^{(p)}\|} A_1^{(p)} e^{\lambda_1 z} + \frac{\alpha_{2,2}^{(p)}}{\|\alpha_2^{(p)}\|} B_1^{(p)} e^{\lambda_2 z} + \frac{\alpha_{2,3}^{(p)}}{\|\alpha_3^{(p)}\|} C_1^{(p)} e^{\lambda_3 z} + \frac{\alpha_{2,4}^{(p)}}{\|\alpha_4^{(p)}\|} D_1^{(p)} e^{\lambda_4 z} + \frac{\alpha_{2,5}^{(p)}}{\|\alpha_5^{(p)}\|} E_1^{(p)} e^{\lambda_4 z} + \\
&+ \frac{\alpha_{2,6}^{(p)}}{\|\alpha_5^{(p)}\|} F_1^{(p)} e^{\lambda_4 z} = -\frac{(C_{44}^{(p)} \lambda_1^2 + \rho^{(p)} \omega^2 - q^2 C_{11}^{(p)})}{\|\alpha_1^{(p)}\|} (A_1^{(p)} e^{\lambda_1^{(p)} z} + B_1^{(p)} e^{-\lambda_1^{(p)} z}) - \\
&\frac{(C_{44}^{(p)} \lambda_2^2 + \rho^{(p)} \omega^2 - q^2 C_{11}^{(p)})}{\|\alpha_2^{(p)}\|} (C_1^{(p)} e^{\lambda_2^{(p)} z} + D_1^{(p)} e^{-\lambda_2^{(p)} z}) - \\
&\frac{(C_{44}^{(p)} \lambda_3^2 + \rho^{(p)} \omega^2 - q^2 C_{11}^{(p)})}{\|\alpha_3^{(p)}\|} (E_1^{(p)} e^{\lambda_3^{(p)} z} + F_1^{(p)} e^{-\lambda_3^{(p)} z}) = \\
&= -\sum_{s=1}^3 \left\{ C_{44}^{(p)} (\lambda_s^{(p)})^2 + \rho^{(p)} \omega^2 - q^2 C_{11}^{(p)} \right\} \left(\tilde{A}_{2s-1}^{(p)} e^{\lambda_s^{(p)} z} + \tilde{A}_{2s}^{(p)} e^{-\lambda_s^{(p)} z} \right) / \|\alpha_s^{(p)}(q)\|;
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\phi_x^{(p)}(z) &= \frac{\alpha_{3,1}^{(p)}}{\|\alpha_1^{(p)}\|} A_1^{(p)} e^{\lambda_1 z} + \frac{\alpha_{3,2}^{(p)}}{\|\alpha_2^{(p)}\|} B_1^{(p)} e^{\lambda_2 z} + \frac{\alpha_{3,3}^{(p)}}{\|\alpha_3^{(p)}\|} C_1^{(p)} e^{\lambda_3 z} + \frac{\alpha_{3,4}^{(p)}}{\|\alpha_4^{(p)}\|} D_1^{(p)} e^{\lambda_4 z} + \frac{\alpha_{3,5}^{(p)}}{\|\alpha_5^{(p)}\|} E_1^{(p)} e^{\lambda_4 z} + \\
&+ \frac{\alpha_{3,6}^{(p)}}{\|\alpha_5^{(p)}\|} F_1^{(p)} e^{\lambda_4 z} = \\
&= \frac{q^2 (C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(p)})^2 \lambda_1^2 + (C_{44}^{(p)} \lambda_1^2 + \rho^{(p)} \omega^2 - q^2 C_{11}^{(p)}) (C_{33}^{(p)} \lambda_1^2 + \rho^{(p)} \omega^2 - q^2 C_{44}^{(p)})}{(e_{15}^{(p)} q^2 - e_{33}^{(p)} \lambda_1^2) \|\alpha_1^{(p)}\|} \times
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \times \left(A_1^{(p)} e^{\lambda_1^{(p)} z} + B_1^{(p)} e^{-\lambda_1^{(p)} z} \right) + \\
& + \frac{q^2 \left(C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(p)} \right)^2 \lambda_2^2 + \left(C_{44}^{(p)} \lambda_2^2 + \rho^{(p)} \omega^2 - q^2 C_{11}^{(p)} \right) \left(C_{33}^{(p)} \lambda_2^2 + \rho^{(p)} \omega^2 - q^2 C_{44}^{(p)} \right)}{\left(e_{15}^{(p)} q^2 - e_{33}^{(p)} \lambda_2^2 \right) \left\| \alpha_2^{(p)} \right\|} \times \\
& \left(C_1^{(p)} e^{\lambda_2^{(p)} z} + D_1^{(p)} e^{-\lambda_2^{(p)} z} \right) + \\
& + \frac{q^2 \left(C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(p)} \right)^2 \lambda_3^2 + \left(C_{44}^{(p)} \lambda_3^2 + \rho^{(p)} \omega^2 - q^2 C_{11}^{(p)} \right) \left(C_{33}^{(p)} \lambda_3^2 + \rho^{(p)} \omega^2 - q^2 C_{44}^{(p)} \right)}{\left(e_{15}^{(p)} q^2 - e_{33}^{(p)} \lambda_3^2 \right) \left\| \alpha_3^{(p)} \right\|} \times \\
& \times \left(E_1^{(p)} e^{\lambda_3^{(p)} z} + F_1^{(p)} e^{-\lambda_3^{(p)} z} \right) = \\
& = \sum_{s=1}^3 \left\{ \frac{q^2 \left(C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(p)} \right)^2 \left(\lambda_s^{(p)} \right)^2 + \left(C_{44}^{(p)} \left(\lambda_s^{(p)} \right)^2 + \rho^{(p)} \omega^2 - q^2 C_{11}^{(p)} \right) \left(C_{33}^{(p)} \left(\lambda_s^{(p)} \right)^2 + \rho^{(p)} \omega^2 - q^2 C_{44}^{(p)} \right)}{\left[e_{15}^{(p)} q^2 - e_{33}^{(p)} \left(\lambda_s^{(p)} \right)^2 \right] \left\| \alpha_s^{(p)}(q) \right\|} \right\} \times \\
& \times \left(\tilde{A}_{2s-1}^{(p)} e^{\lambda_s^{(p)} z} + \tilde{A}_{2s}^{(p)} e^{-\lambda_s^{(p)} z} \right).
\end{aligned} \tag{5.140}$$

Отримані розв'язки в межах досліджуваної наноструктури такі:

$$\begin{aligned}
\begin{pmatrix} u_1(q, \omega, z) \\ u_3(q, \omega, z) \\ \phi(q, \omega, z) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} u_1^{(0)}(q, \omega, z) \\ u_3^{(0)}(q, \omega, z) \\ \phi^{(0)}(q, \omega, z) \end{pmatrix} \theta(-z) + \begin{pmatrix} u_1^{(N+1)}(q, \omega, z) \\ u_3^{(N+1)}(q, \omega, z) \\ \phi^{(N+1)}(q, \omega, z) \end{pmatrix} \theta(z - z_3) + \\
& + \sum_{p=1}^N \begin{pmatrix} u_1^{(p)}(q, \omega, z) \\ u_3^{(p)}(q, \omega, z) \\ \phi^{(p)}(q, \omega, z) \end{pmatrix} \left[\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p) \right]
\end{aligned}, \tag{5.141}$$

де компоненти поля зміщення та потенціал у кожному окремому p -ому шарі наноструктури визначені згідно співвідношень (5.140).

Крім того у співвідношеннях (5.141) має бути враховано, що у відповідності до вимоги монотонного спадання функцій $u_1(q, \omega, z)$, $u_3(q, \omega, z)$, $\phi(q, \omega, z)$ при $z \rightarrow \pm\infty$ має виконуватися умова:

$$\lim_{z \rightarrow \pm\infty} \left(u_1(q, \omega, z), u_3(q, \omega, z), \phi(q, \omega, z) \right)^T = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^T, \tag{5.142}$$

Звідки

$$B_1^{(0)} = D_1^{(0)} = F_1^{(0)} = A_1^{(N+1)} = C_1^{(N+1)} = E_1^{(N+1)} = 0. \quad (5.143)$$

Решта невідомих коефіцієнтів однозначно визначається граничних умов для компонент поля зміщення акустичних фононів $u_{1(3)}^{(p)}(q, \omega, z)$, компонент $\sigma_{xz}(q, \omega, z)$, $\sigma_{zz}(q, \omega, z)$ тензора напружень, а також п'єзоелектричних потенціалів $\phi_z^{(p)}(q, \omega, z)$ та нормальних компонент вектора електричної індукції:

$$\left[\begin{array}{l} u_1^{(p)}(q, \omega, z) \Big|_{z=z_p-\varepsilon} = u_1^{(p+1)}(q, \omega, z) \Big|_{z=z_p+\varepsilon} ; \\ u_3^{(p)}(q, \omega, z) \Big|_{z=z_p-\varepsilon} = u_3^{(p+1)}(q, \omega, z) \Big|_{z=z_p+\varepsilon} ; \\ \sigma_{xz}^{(p)}(q, \omega, z) \Big|_{z=z_p-\varepsilon} = \sigma_{xz}^{(p+1)}(q, \omega, z) \Big|_{z=z_p+\varepsilon} ; \\ \sigma_{zz}^{(p)}(q, \omega, z) \Big|_{z=z_p-\varepsilon} = \sigma_{zz}^{(p+1)}(q, \omega, z) \Big|_{z=z_p+\varepsilon} ; \\ \phi_z^{(p)}(q, \omega, z) \Big|_{z=z_p-\varepsilon} = \phi_z^{(p+1)}(q, \omega, z) \Big|_{z=z_p+\varepsilon} ; \\ D_z^{(p)}(q, \omega, z) \Big|_{z=z_p-\varepsilon} = D_z^{(p+1)}(q, \omega, z) \Big|_{z=z_p+\varepsilon} ; \end{array} \right. \quad (5.144)$$

де

$$\begin{aligned} \sigma_{xz}^{(p)}(q, \omega, z) &= \sigma_{13}^{(p)}(q, \omega, z) - e_{15}^{(p)} E_x^{(p)}(q, \omega, x, z) = \\ &= \frac{1}{2} C_{44}^{(p)} \left(\frac{\partial u_z^{(p)}(x, z)}{\partial x} + \frac{\partial u_x^{(p)}(x, z)}{\partial z} \right) - e_{15}^{(p)} \frac{\partial}{\partial x} \left(E_x^{(p)}(z) e^{i(\omega t - qx)} \right) = \\ &= \left\{ \frac{1}{2} C_{44}^{(p)} \left(-iq u_3^{(p)}(z) + \frac{du_1^{(p)}(z)}{dz} \right) + iq e_{15}^{(p)} \frac{d\phi^{(p)}(z)}{dz} \right\} e^{i(\omega t - qx)}; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sigma_{zz}^{(p)}(q, \omega, z) &= \sigma_{33}^{(p)}(q, \omega, z) = C_{13}^{(p)} \nabla \cdot u_i^{(p)}(x, z) + (C_{33}^{(p)} - C_{13}^{(p)}) \frac{\partial u_i^{(p)}(x, z)}{\partial z} = \\ &= \left(-iq C_{13}^{(p)} u_1^{(p)}(z) + C_{33}^{(p)} \frac{du_3^{(p)}(z)}{dz} \right) e^{i(\omega t - qx)}; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
D_z(z) &= e_{31}^{(p)} \left(\frac{\partial u_x^{(p)}(x, z)}{\partial x} + \frac{\partial u_y^{(p)}(x, z)}{\partial x} \right) + e_{33}^{(p)} \frac{\partial u_z^{(p)}(x, z)}{\partial z} = \\
&= \left(-iqe_{31}^{(p)} u_1^{(p)}(z) + e_{33}^{(p)} \frac{du_3^{(p)}(z)}{dz} \right) e^{i(\omega t - qx)}.
\end{aligned} \tag{5.145}$$

Використовуючи умови (5.144) за допомогою методу трансфер-матриці для сусідніх шарів наноструктури з індексами “ p ” та “ $p+1$ ” отримується:

$$|a^{(p)}\rangle = T^{(p,p+1)}(q, \omega) |a^{(p+1)}\rangle; \quad |a^{(p)}\rangle = \begin{pmatrix} A_1^{(p)} & B_1^{(p)} & C_1^{(p)} & D_1^{(p)} & E_1^{(p)} & F_1^{(p)} \end{pmatrix}^T;$$

$$T^{(p,p+1)}(q, \omega) = \left(t^{(p)}(q, \omega) \right)^{-1} t^{(p+1)}(q, \omega);$$

$$t_{1,3}^{(p)} = \begin{pmatrix} \alpha_{11}^{(p)} & -\alpha_{11}^{(p)} & \alpha_{12}^{(p)} & -\alpha_{12}^{(p)} & \alpha_{13}^{(p)} & -\alpha_{13}^{(p)} \\ \beta_{11}^{(p)} & \beta_{11}^{(p)} & \beta_{12}^{(p)} & \beta_{12}^{(p)} & \beta_{13}^{(p)} & \beta_{13}^{(p)} \\ \gamma_{11}^{(p)} & \gamma_{11}^{(p)} & \gamma_{12}^{(p)} & \gamma_{12}^{(p)} & \gamma_{13}^{(p)} & \gamma_{13}^{(p)} \\ \delta_{11}^{(p)} & -\delta_{11}^{(p)} & \delta_{12}^{(p)} & -\delta_{12}^{(p)} & \delta_{13}^{(p)} & -\delta_{13}^{(p)} \\ \varsigma_{11}^{(p)} & \varsigma_{11}^{(p)} & \varsigma_{12}^{(p)} & \varsigma_{12}^{(p)} & \varsigma_{13}^{(p)} & \varsigma_{13}^{(p)} \\ \eta_{11}^{(p)} & -\eta_{11}^{(p)} & \eta_{12}^{(p)} & -\eta_{12}^{(p)} & \eta_{13}^{(p)} & -\eta_{13}^{(p)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{\lambda_1^{(p)} z_p} \\ e^{-\lambda_1^{(p)} z_p} \\ e^{\lambda_2^{(p)} z_p} \\ e^{-\lambda_2^{(p)} z_p} \\ e^{\lambda_3^{(p)} z_p} \\ e^{-\lambda_3^{(p)} z_p} \end{pmatrix} \tag{5.146}$$

де

$$\alpha_{1s}^{(p)} = -iq \left(C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(p)} \right) \lambda_s / \left\| \alpha_s^{(p)} \right\|;$$

$$\beta_{1s}^{(p)} = - \left(C_{44}^{(p)} \lambda_s^2 + \rho^{(p)} \omega^2 - q^2 C_{11}^{(p)} \right) / \left\| \alpha_s^{(p)} \right\|,$$

$$\begin{aligned}
\gamma_{1s}^{(p)} &= \frac{iq}{2 \left\| \alpha_s^{(p)} \right\|} \left[C_{44}^{(p)} \left(C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(p)} \right) \lambda_s^2 - C_{44}^{(p)} \left(C_{44}^{(p)} \lambda_s^2 + \rho^{(p)} \omega^2 - q^2 C_{11}^{(p)} \right) + \right. \\
&+ \left. \frac{2e_{15}^{(p)} \lambda_n \left(q^2 \left(C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(p)} \right)^2 \lambda_s^2 \right) + \left(C_{44}^{(p)} \lambda_s^2 + \rho^{(p)} \omega^2 - q^2 C_{11}^{(p)} \right) \left(C_{33}^{(p)} \lambda_s^2 + \rho^{(p)} \omega^2 - q^2 C_{44}^{(p)} \right)}{e_{15}^{(p)} q^2 - e_{33}^{(p)} \lambda_s^2} \right],
\end{aligned}$$

$$\delta_{1s}^{(p)} = -\lambda_n \left[\left(C_{13}^{(p)} \left(C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(p)} \right) - C_{11}^{(p)} C_{33}^{(p)} \right) q^2 + C_{33}^{(p)} \left(C_{44}^{(p)} \lambda_n^2 + \rho \omega^2 \right) \right] / \left\| \alpha_s^{(p)} \right\|,$$

$$\varsigma_{1s}^{(p)} = - \frac{q^2 \left(C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(p)} \right)^2 \lambda_s^2 + \left(C_{44}^{(p)} \lambda_s^2 + \rho^{(p)} \omega^2 - q^2 C_{11}^{(p)} \right) \left(C_{33}^{(p)} \lambda_s^2 + \rho^{(p)} \omega^2 - q^2 C_{44}^{(p)} \right)}{\left\| \alpha_s^{(p)} \right\| \left(e_{15}^{(p)} q^2 - e_{33}^{(p)} \lambda_s^2 \right)},$$

$$\eta_{1s}^{(p)} = \frac{\lambda_n}{\|\alpha_s^{(p)}\|} \left[\left(C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(p)} \right) e_{31}^{(p)} q^2 - e_{33}^{(p)} \left(C_{44}^{(p)} \lambda_s^2 + \rho^{(p)} \omega^2 - q^2 C_{11}^{(p)} \right) \right] \quad (5.147)$$

$$s = 1, 2, 3.$$

Тоді, послідовно застосовуючи (5.146) для усієї РТС, отримуємо її трансфер-матрицю:

$$\left| a^{(0)} \right\rangle = T(q, \omega) \left| a^{(N+1)} \right\rangle, \quad T(q, \omega) = \prod_{p=1}^N T^{(p,p+1)}(q, \omega), \quad (5.148)$$

отже, спектр акустичних фононів $\Omega_{n_1}(q)$ отримується з такого дисперсійного рівняння:

$$\left| T(q, \omega) \right| = \left| \prod_{p=1}^N \left(t^{(p)}(q, \omega) \right)^{-1} t^{(p+1)}(q, \omega) \right| = 0. \quad (5.149)$$

З використанням граничних умов (5.144) виразимо коефіцієнти $A_1^{(p)}$, $B_1^{(p)}$, $C_1^{(p)}$, $D_1^{(p)}$ через один із них. Цей коефіцієнт отримується з умови нормування для величин зміщень u_1 , u_3 , що є такою:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \rho(z) \left[u_1(q, \omega_q, z) u_1^*(q', \omega_{q'}, z) + u_3(q, \omega_q, z) u_3^*(q', \omega_{q'}, z) \right] dz = \frac{\hbar}{2\Delta l_x \Delta l_y \omega} \delta_{qq'}, \quad (5.150)$$

де $\Delta l_x \Delta l_y$ - площа перерізу наноструктури площиною xu , причому $\Delta l_x, \Delta l_y \gg z_N$.

Для компонент відносного пружного зміщення $u_1(q, \omega_q, r)$, $u_3(q, \omega_q, r)$ пов'язаного з акустичними фононами та потенціалу $\phi(q, \omega_q, r)$ виконаємо розклад у ряд Фур'є:

$$\begin{pmatrix} u_1(q, \omega_{n_q}, r) \\ u_3(q, \omega_{n_q}, r) \\ \phi(q, \omega_q, r) \end{pmatrix} = \sum_{n_q} \begin{pmatrix} u_1(q, \omega_{n_q}, z) \\ u_3(q, \omega_{n_q}, z) \\ \phi(q, \omega_{n_q}, z) \end{pmatrix} e^{iqr}, \quad (5.151)$$

де функції $u_1(q, \omega_{n_q}, z)$, $u_3(q, \omega_q, z)$ і $\phi(q, \omega_{n_q}, z)$, що відіграють роль коефіцієнтів розкладу, містять весь спектр частот флексуральних та діляціональних мод акустичних фононів ω_{n_q} .

Використовуючи тепер перехід від отриманих фур'є-компонент до узагальнених координат й імпульсів, а потім до операторів чисел заповнення, знаходимо оператор для компонент пружного зміщення у представленні чисел заповнення:

$$\begin{aligned} \widehat{u}_{1(3)}(q, \omega_{nq}, r) = & \sum_{p=0}^N \sum_{n_1 q} \sqrt{\frac{\hbar}{2\Delta l_x \Delta l_y \rho^{(p)} \omega_{nq}}} \left[\widehat{b}_{n_1}(-\bar{q}) + \widehat{b}_{n_1}(\bar{q}) \right] \widehat{w}_{1(3)}^{(p)}(q, \omega_{nq}, z) e^{i\bar{q}r} \times \\ & \times \left[\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p) \right], \end{aligned} \quad (5.152)$$

$$\widehat{w}_{1(3)}^{(p)}(q, \omega_{nq}, z) = \sqrt{\rho^{(p)}} \widehat{u}_{1(3)}^{(p)}(q, \omega_{nq}, z), \quad z_1 = -\infty.$$

Далі, для визначення $\phi(q, \omega_{nq}, z)$ підставимо розклад (5.151) з урахуванням (5.152) у рівняння (5.121). Після перетворень та спрощень будемо мати:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \phi^{(p)}(q, \omega_{nq}, z)}{dz^2} - \frac{e_{15}^{(p)} q^2}{e_{33}^{(p)}} \phi(q, \omega_{nq}, z) = & \frac{1}{e_{33}^{(p)}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\Delta l_x \Delta l_y \rho^{(p)} \omega_{nq}}} \left[-C_{33}^{(p)} \frac{d^2 \widehat{w}_3^{(p)}(q, \omega_{nq}, z)}{dz^2} - \right. \\ & \left. - q^2 (C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(p)}) \frac{d\widehat{w}_1^{(p)}(q, \omega_{nq}, z)}{dz} + (q^2 C_{44}^{(p)} - \rho^{(p)} \omega^2) \widehat{w}_3^{(p)}(q, \omega_{nq}, z) \right] \end{aligned} \quad (5.153)$$

Його розв'язки у загальному вигляді такі:

$$\begin{aligned} \phi^{(p)}(q, \omega_{nq}, z) = & A_{n_1}^{(p)} e^{-\chi_{n_1}^{(p)} z} + B_{n_1}^{(p)} e^{\chi_{n_1}^{(p)} z} + \\ & + \frac{1}{2\chi_{n_1}^{(p)} e_{33}^{(p)}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\Delta l_x \Delta l_y \rho^{(p)} \omega_{nq}}} \left(e^{-\chi_{n_1}^{(p)} z} \int_0^z e^{\chi_{n_1}^{(p)} X} F(q, \omega_{nq}, X) dX - \right. \\ & \left. - e^{\chi_{n_1}^{(p)} z} \int_0^z e^{-\chi_{n_1}^{(p)} X} F(q, \omega_{nq}, X) dX \right), \\ F(q, \omega_{nq}, X) = & -C_{33}^{(p)} \frac{d^2 \widehat{w}_3^{(p)}(q, \omega_{nq}, X)}{dz^2} - q^2 (C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(p)}) \frac{d\widehat{w}_1^{(p)}(q, \omega_{nq}, X)}{dz} + \\ & + (q^2 C_{44}^{(p)} - \rho^{(p)} \omega^2) \widehat{w}_3^{(p)}(q, \omega_{nq}, X), \\ \chi_{n_1}^{(p)} = & q \sqrt{e_{15}^{(p)} / e_{33}^{(p)}}. \end{aligned} \quad (5.154)$$

де коефіцієнти $A_{n_1}^{(p)}$ і $B_{n_1}^{(p)}$ визначені з двох останніх граничних умов (5.144).

Тепер, гамільтоніан для акустичних фононів у представленні вторинного квантування є таким:

$$\hat{H}_{ac} = \sum_{n,q} \hbar \omega_{n,q} \left(\hat{b}_{n,q}^+ \hat{b}_{n,q} + \frac{1}{2} \right). \quad (5.155)$$

де $\hat{b}_{n,q}^+$ і $\hat{b}_{n,q}$ - відповідно оператори народження та знищення фононного стану у представленні Бозе.

Для побудови теорії взаємодії електронів з акустичними фононами спочатку знайдемо розв'язки електронної задачі – електронні хвильові функції та енергії. В загальному випадку є необхідним відділити важливий для наноприладів рух електронів вздовж осі Oz від їхнього руху в площині xOy . Врахування того, що поперечні розміри наноструктури є набагато меншими від її поздовжніх розмірів ($\Delta l_x, \Delta l_y \gg d, d = b_1 + w_1 + \dots + b_n$), то це дозволяє представити електронну хвильову функцію, слідуючи працям [184, 185] у такому вигляді:

$$\Psi_{Ek}(r, z) = \frac{1}{\sqrt{\Delta x \Delta y}} e^{i\vec{k}\vec{r}} \Psi_E(z), \quad (5.156)$$

де \vec{k} - квазіімпульс електрона, а \vec{r} - вектор у площині xOy .

Отже, в цьому випадку ми вже можемо досліджувати електронні стани в досліджуваній наноструктурі, відшукуючи розв'язки системи рівнянь Шредінгера та Пуассона:

$$\left\{ \begin{aligned} & \left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m(z)} \frac{d}{dz} + V_{\text{eff}}(z) - E_{n\vec{k}} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \right] \Psi(z) = 0, \\ & \left[\frac{d}{dz} \left[\varepsilon_\infty(z) \frac{dV_H(z)}{dz} \right] \right] = -\frac{e}{\varepsilon_0} \left\{ e \left[N_D^+(z) - n(z) \right] + \sum_{p=1}^N \sigma_p(z_p) \delta(z - z_p) \right\} \end{aligned} \right. \quad (5.157),$$

де $E_{n\vec{k}}$ - повна енергія електрона в наноструктурі, а

$$m_n^* = \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \left(|\Psi_n(z)|^2 / m(z) \right) dz \right]^{-1}, \quad \Psi_n(z) = \Psi_{Ek}(r, z)|_{k=0} \quad (5.158)$$

ефективна маса електрона, скорельована за всіма шарами наноструктури для n -го рівня електронного спектру, причому

$$m = m(z) = \sum_{p=0}^N m^{(p)} \left[\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p) \right], \quad (5.159)$$

$$m^{(p)} = \begin{cases} m_0 = m_{\text{AlN}}, & p - \text{even} \\ m_1 = m_{\text{GaN}}, & p - \text{odd} \end{cases}, \quad z_{-1} = -\infty; \quad z_4 = +\infty$$

- де $m^{(p)}$ - густина матеріалу p -го шару наносистеми (m_{AlN} і m_{GaN} - відповідно ефективні маси електрона для напівпровідників AlN і GaN),

Необхідність знаходити самоузгоджені розв'язки системи (5.157) зумовлена врахуванням внеску компонент ефективного потенціалу наноструктури для електрона, $V_{\text{eff}}(z) = \Delta E_C(z) + V_H(z) + V_{HL}(z) + V_E(z)$, фізичний зміст, кожного з доданків детально описано нами вище.

Методологія знаходження розв'язків системи (5.157) є відомою Розділу 3 дисертації, тому ми не будемо детально зупинятися на цьому питанні, знаходячи розв'язки системи (5.157) з необхідною точністю, використовуючи розвинений в цьому розділі аналітичний метод. Розв'язуючи систему (5.157) ми апроксимуємо ефективний потенціал наноструктури для електрона, представляючи його у вигляді кусково-неперервної функції:

$$U_{\text{appr}}(z) = \sum_{p=1}^N \sum_{l=0}^M e F_{\text{eff}}(z_{p_l}) z \left[\theta(z - z_{p_l}) - \theta(z - z_{p_{l+1}}) \right], \quad (5.160)$$

де еквівалентна апроксимованому потенціалу напруженість електричного поля визначається як:

$$F_{\text{eff}}(z_{p_l}) = \left[V_{\text{eff}}(z_{p_{l+1}}) - V_{\text{eff}}(z_{p_l}) \right] / e(z_{p_{l+1}} - z_{p_l}), \quad (5.161)$$

де координати точок розбиття шарів p -го шару наноструктури такі: $z_{p_l} = l(z_p - z_{p-1}) / 2M$, $p = 1 \dots N$, $z_0 = 0$, а де M - кількість цих розбиттів.

Враховуючи (5.160) і (5.161), розв'язки рівняння Шредінгера у системі (5.157) є лінійними комбінаціями функцій Ейрі $A_i z$ і $B_i z$ всередині наноструктури, та спадаючі експоненти у зовнішньому середовищі зліва та справа від неї. Загалом хвильова функція електрона може бути подана як:

$$\begin{aligned}
\Psi_{Ek}(E, z) &= A^{(0)} e^{\chi^{(0)} z} \theta(-z) + B^{(N+1)} e^{-\chi^{(N+1)} z} \theta(z - z_5) + \\
&+ \sum_{p=1}^N \sum_{l=0}^M \left[A^{(p_l)} Ai(\zeta^{(p_l)}(z)) + B^{(p_l)} Bi(\zeta^{(p_l)}(z)) \right] \left[\theta(z - z_{p_l}) - \theta(z - z_{p_{l+1}}) \right], \\
\zeta^{(p_l)}(z) &= \left(2m^{(p_l)} eF(z_{p_l}) / \hbar^2 \right)^{1/3} \left[\left(\Delta E_C(z) - E_{n\bar{k}} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \right) / eF(z_{p_l}) - z \right], \\
\chi^{(0)} = \chi^{(N+1)} &= \sqrt{2m_1 \left(\Delta E_C(z) - E_{n\bar{k}} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \right)} / \hbar.
\end{aligned} \tag{5.162}$$

Використовуючи граничні умови для хвильової функції $\Psi_{Ek}(E, z)$ та потоків її ймовірності межах шарів наноструктури:

$$\Psi_{Ek}^{(p)}(E_{n\bar{k}}, z_p) = \Psi_{Ek}^{(p+1)}(E_{n\bar{k}}, z_p); \quad \left. \frac{d\Psi_{Ek}^{(p)}(E_{n\bar{k}}, z)}{m(z)dz} \right|_{z=z_p-\varepsilon} = \left. \frac{d\Psi_{Ek}^{(p+1)}(E_{n\bar{k}}, z)}{m(z)dz} \right|_{z=z_p+\varepsilon}, \quad \varepsilon \rightarrow 0 \tag{5.163}$$

отримуємо дисперсійне рівняння, з якого визначається електронний спектр $E_{n\bar{k}}$. Крім того, використовуючи граничні умови (5.163) та умову нормування для хвильової функції $\Psi_{Ek}(E_{n\bar{k}}, r, z) = \Psi_{nk}(E_{n\bar{k}}, r, z)$ згідно (5.156):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_{nk}(E_{n\bar{k}}, r, z) \Psi_{n'k'}^*(E_{n'\bar{k}'}, r, z) dr dz = \frac{1}{2\pi} \delta(k - k') \delta_{nn'}. \tag{5.164}$$

остання є цілком визначеною, оскільки таким чином отримуємо усі коефіцієнти $A^{(0)}$, $B^{(N+1)}$, $A^{(p_l)}$, $B^{(p_l)}$ в розв'язках (5.162).

Тепер для електронних станів існуючих в ефективному потенціалі наноструктури $V_{\text{eff}}(z)$ їх хвильову функцію подамо, використовуючи метод вторинного квантування наступним чином :

$$\widehat{\Psi}(r, z) = \sum_{\bar{k}} \sum_n \Psi_{n\bar{k}}(\bar{r}, z) \widehat{a}_{n\bar{k}} \tag{5.165}$$

а гамільтоніан невзаємодіючих електронів тоді набуде добре відомого вигляду:

$$\widehat{H}_e = \sum_{n, \bar{k}} E_{n\bar{k}} \widehat{a}_{n\bar{k}}^+ \widehat{a}_{n\bar{k}}, \tag{5.166}$$

де $E_{n\bar{k}} = E_n + \hbar^2 k^2 / 2m_n^*$, а $\hat{a}_{n\bar{k}}^+$ і $\hat{a}_{n\bar{k}}$ - відповідно оператори народження та зниження електронних станів у досліджуваній наноструктурі.

Врахуємо тепер, що у напівпровідниках з решіткою типу вюрциту величина зміщення зони провідності визначеною як:

$$\Delta E_v = a_{1c} \varepsilon_{zz} + a_{2c} (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}), \quad (5.167)$$

де $\varepsilon_{xx}, \varepsilon_{yy}, \varepsilon_{zz}$ - компоненти тензора напружень, a_{1c}, a_{2c} - константи зв'язку деформаційного потенціалу для зони провідності.

Тепер гамільтоніани взаємодії з акустичними фононами через деформаційний та п'єзоелектричний потенціали, поданий у зображенні вторинного квантування за фононними змінними визначається наступним чином:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{def}} &= \sum_{q n_1} \sum_{p=1}^N \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho^{(p)} \omega_{n_1 q} \Delta l_x \Delta l_y}} \left[b_{n_1}(\bar{q}) + b_{n_1}^+(-\bar{q}) \right] \times \\ &\times \left(i q a_{2c} u_1^{(p)}(q, \omega_{n_1 q}, z) + a_{1c} \frac{\partial u_3^{(p)}(q, \omega_{n_1 q}, z)}{\partial z} \right) e^{i\bar{q}r} \left[\theta(z_p - z_{p-1}) - \theta(z_p - z_{p+1}) \right]; \quad (5.168) \\ \hat{H}_{pz} &= \sum_{q n_1} \sum_{p=1}^N \phi^{(p)}(q, \omega_{n_1 q}, z) \left[b_{n_1}(\bar{q}) + b_{n_1}^+(-\bar{q}) \right] e^{i\bar{q}r} \left[\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_{p+1}) \right] \end{aligned}$$

де частота ω_{n_1} спектру акустичних фононів отримується з дисперсійного рівняння (5.149), а n_1 номер вітки цього спектру.

Таким чином, взаємодія електронів з акустичними фононами через деформаційний потенціал та п'єзоелектричний потенціал визначається гамільтоніаном:

$$\hat{H}_{e\text{-def}(e\text{-pz})} = \sum_{n, n', n_1, \bar{k}, \bar{q}} F_{nkn_1 n'}^{\text{def}(pz)}(q) \hat{a}_{n'}^+ \hat{a}_{n\bar{k}} \left[b_{n_1}(\bar{q}) + b_{n_1}^+(-\bar{q}) \right], \quad (5.169)$$

де функції зв'язку такі:

$$\begin{aligned} F_{nkn_1 n'}^{\text{def}}(q) &= \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho^{(p)} \omega_{n_1} \Delta l_x \Delta l_y}} \int_{z_{p-1}}^{z_p} \Psi_{n\bar{k}}^{(p)}(E_{n\bar{k}}, z) \left(i q a_{2c} u_1^{(p)}(q, \omega_{n_1 q}, z) + a_{1c} \frac{\partial u_3^{(p)}(q, \omega_{n_1 q}, z)}{\partial z} \right) e^{i\bar{q}r} \Psi_{n'k}^{*(p)}(E_{n'k}, z) dz, \\ F_{nkn_1 n'}^{\text{pz}}(q) &= \int_{z_{p-1}}^{z_p} \Psi_{n\bar{k}}^{(p)}(E_{n\bar{k}}, z) \phi^{(p)}(q, \omega_{n_1 q}, z) e^{i\bar{q}r} \Psi_{n'k}^{*(p)}(E_{n'k}, z) dz. \end{aligned} \quad (5.170)$$

Остаточо гамільтоніан системи електронів з акустичними фононами у плоскій наноструктурі за наявності п'єзоелектричного ефекту:

$$\hat{H} = \hat{H}_e + \hat{H}_{ac} + \hat{H}_{e-def} + \hat{H}_{e-pz}. \quad (5.171)$$

Тепер, що виконати перенормування електронного спектру взаємодією з акустичними фононами за наявності п'єзоелектричного ефекту виконаємо Фур'є перетворення температурної функції Гріна, що отримується з рівняння Дайсона:

$$G_{n\bar{k}}(\Omega) = 1 / (\Omega - E_{n\bar{k}} - M_{n\bar{k}}(\Omega)). \quad (5.172)$$

Застосовуючи наближення слабкого зв'язку, для масового оператора $M_{n\bar{k}}(\Omega)$ у рівнянні (5.172) маємо:

$$M_{n\bar{k}}^{def(pz)}(\Omega) = \sum_{qn, n'} |F_{nkn, n'}^{def(pz)}(q)|^2 \left[\frac{1 + v_{n_1}}{\Omega - E_{n', \bar{k}-\bar{q}} - \Omega_{n_1} + i\eta} + \frac{v_{n_1}}{\Omega - E_{n', \bar{k}+\bar{q}} - \Omega_{n_1} + i\eta} \right], \quad (5.173)$$

де $\Omega_{n_1} = \hbar\omega_{n_1}$, а величина $v_{n_1} = (e^{\hbar\omega_{n_1}/k_B T} - 1)^{-1}$ - число заповнення рівнів для спектру акустичних фононів, причому перший доданок у (5.1737) описує народження акустичних фононів, а другий – знищення акустичних фононів. Масовий оператор, поданий у вигляді (5.173), при продовженні на комплексну вісь при $\eta \rightarrow \pm 0$, описує однофононне наближення.

Далі, використовуючи рівняння (5.172) та оператор (5.173) досліджуються ефекти впливу на електронний спектр взаємодії електронів з акустичними фононами через деформаційний та п'єзоелектричний потенціали. Такий ефект доцільно досліджуваний, виконавши розрахунок зміщень рівнів електронних станів спектру (Δ_n) та відповідних їм швидкостей розпаду (Γ_n).

В більшості експериментально реалізованих ККД, зокрема в ККД в недавній праці [193], параметри якого використовуються нами в подальших розрахунках, функціонально важливим є позовжній рух електронів паралельно осі Oz , тобто перпендикулярно до шарів наноструктури. Таким чином в безпосередніх обчислення доцільно буде прийняти, що поперечний квазіімпульс $\bar{k} = 0$, тоді отримуємо, що $\Omega = E_{n\bar{k}}|_{\bar{k}=0} = E_n$. Величину енергії електронного рівня \tilde{E}_n , що перенормована взаємодією з акустичними фононами, отримаємо з полюса Фур'є-

образу функції Гріна (5.172) з урахуванням (5.173), що еквівалентно знаходженню розв'язків дисперсійного рівняння:

$$\Omega - E_n - M_n(\Omega) = 0, \quad (5.174)$$

а оскільки $\tilde{E}_n = \Delta_n - \Gamma_n/2$, то звідси знаходимо:

$$\begin{aligned} \Delta_n^{\text{def(pz)}} &= \text{Re} M_n(\Omega = E_n, \bar{k} = 0) = \frac{\Delta l_x \Delta l_y}{(2\pi)^2} \sum_{n_1} \text{P} \iint \frac{F_{nn_1n'}^{\text{def(pz)}}(q) F_{nn_1n'}^{*\text{def(pz)}}(q) dq^2}{E_n - E_{n,\bar{q}} - \Omega_{n_1}}, \\ \Gamma_n^{\text{def(pz)}} &= -2 \text{Im} M_n(\Omega = E_n, \bar{k} = 0) = \\ &= \frac{\Delta l_x \Delta l_y}{2\pi} \sum_{n_1} \iint \delta(E_n - E_{n,\bar{q}} - \Omega_{n_1}^{\text{(FL,DL)}}) F_{nn_1n'}^{\text{def(pz)}}(q) F_{nn_1n'}^{*\text{def(pz)}}(q) dq^2, \end{aligned} \quad (5.175)$$

де у першому інтегралі (5.175) символ P означає, що інтеграл обчислюється розумінні головного значення.

Отриманий повний зсув n -го електронного енергетичного рівня \tilde{E}_n , що зумовлюється обома розглянутими типами взаємодії з акустичними фононами та швидкість розпаду такі:

$$\tilde{E}_n = E_n + \Delta_n^{\text{def}} + \Delta_n^{\text{pz}}, \Gamma_n = \Gamma_n^{\text{def}} + \Gamma_n^{\text{pz}}. \quad (5.176)$$

5.6. Спектр флексурально-ділататіональних мод акустичних фононів за наявності п'єзоелектричного ефекту. Властивості електрон-фононної взаємодії через деформаційний та п'єзоелектричний потенціали наявності п'єзоелектричного ефекту при різних значеннях температури

З використанням результатів викладеної вище теорії електрон-фононної взаємодії, виконувались розрахунки на прикладі геометричних та фізичних параметрів (взяті з праць [120, 194, 195]) каскаду недавно експериментально реалізованого ККД [193], що може працювати в межах від середнього інфрачервоного до видимого діапазону електромагнітних хвиль. Геометричні параметри шарів каскаду такі: потенціальні бар'єри: (1.04; 1.56; 1.56; 1.56; 1.56; 1.04) нм, потенціальні ями (3.38; 3.64; 3.64; 3.64; 3.64) нм. Крім того вхідна потенціальна яма шириною $w_1=3.38$ нм n -допована з концентрацією носіїв заряду: $n=2 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$.

На Рис. 5.10 приведено розраховані залежності від геометричних розмірів z для квадратів модулів хвильових функцій перших п'яти електронних станів, локалізованих у кожній з потенціальних ям досліджуваної РТС. Залежності $W_n(z)$ для рівнів, локалізованих у активній зоні каскаду подано суцільними

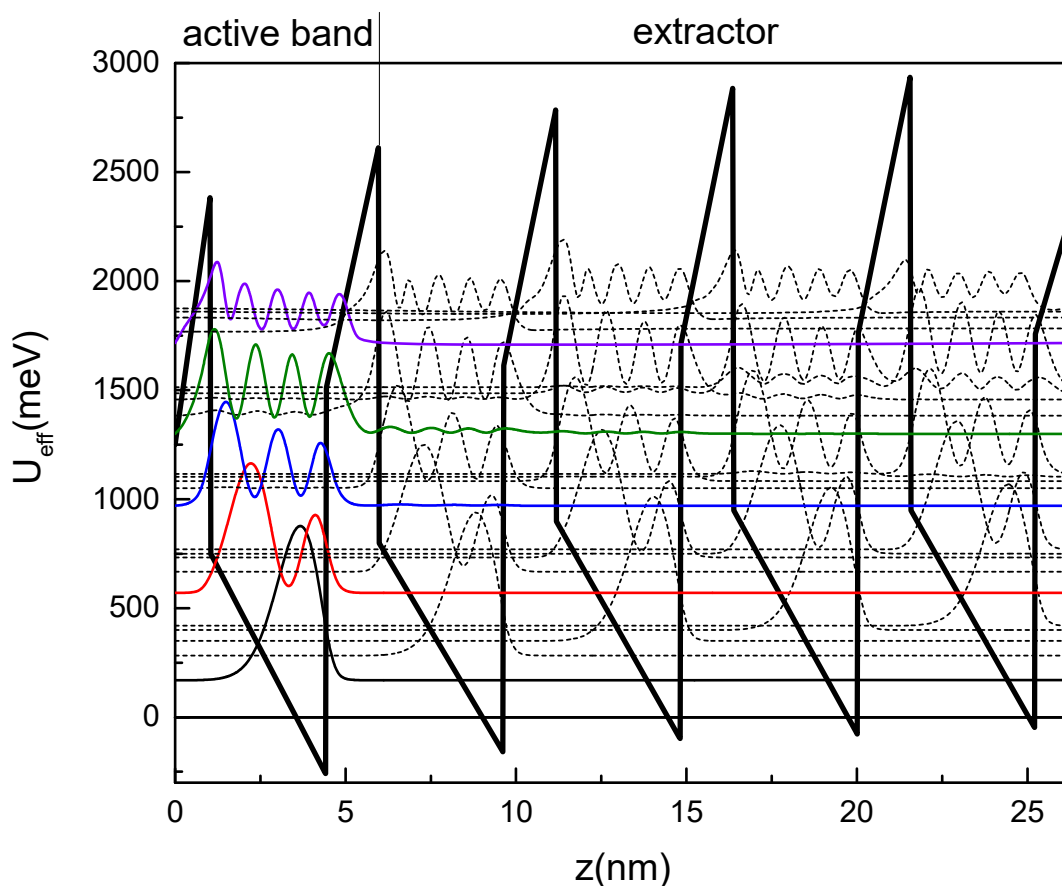


Рис. 5.10. Ефективний потенціал окремого каскаду квантового каскадного детектора із статті [193] із побудованими квадратами модулів хвильових функцій для перших ($n=5$) електронних станів, локалізованих в кожній із квантових ям ($|\Psi_n(E_n, z)|^2$ приведені до відповідних значень енергій E_n)

лініями, для електронних станів екстрактора – штрихованими. Усі залежності приведені до шкали енергій, відображаючи значення енергії $E_n^{(s)}$ відповідного n -го рівня, де s - номер потенціальної ями. Для кожного номера рівня n у кожній з потенціальних ям s сформовані залежності $W_n(z)$ є фактично ідентичними між собою за локалізацією s потенціальної ями та значеннями $\max W_n(z)$ і $\min W_n(z)$. З Рис. 5.10 також видно, що для енергетичних рівнів завжди виконується умова: $E_n^{(s)} < E_n^{(s+1)}$,

тобто значення енергій з однаковим номером n зростають у потенціальних ямах зліва направо.

На Рис. 5.11. приведено залежності віток спектру флексуральних та ділататіональних акустичних фононів від хвильового вектора q за наявності п'єзоелектричного ефекту. Аналогічно, як і у випадку відсутності п'єзоелектричного ефекту, спектральні залежності для акустичних фононів формуються у межах чотирьох інтервалів, проте в даному випадку межі цих інтервалів не визначаються модами поперечних та повздовжніх акустичних фононів у масивних кристалах AlN та GaN [188, 189]. Межі інтервалів темпер отримуються з умови

$$\left[\left(\frac{\tilde{a}^{(p)}(\omega)}{3} \right)^3 - \frac{\tilde{a}^{(p)}(\omega)\tilde{b}^{(p)}(\omega)}{6} + \frac{\tilde{c}^{(p)}(\omega)}{2} \right]^2 + \left(\frac{\tilde{b}^{(p)}(\omega)}{3} - \frac{(\tilde{a}^{(p)}(\omega))^2}{6} \right)^3 = 0, \quad (5.177)$$

яка слідує з рівняння (5.136). Записуючи умову (5.177) для GaN і AlN напівпровідника, чисельно знаходячи розв'язки (5.177) для фіксованого значення q , отримуємо щоразу по чотири значення $\omega(q)$ для GaN і AlN. З триманих значень $\omega(q)$ завжди по два значення для GaN і AlN задовольняють умові:

$$\Omega_{ac}^{(\text{GaN, AlN})}(q) \leq 25 - 30 \text{ меВ}, \quad (5.178)$$

яка є відомою з праць [188, 189, 196], інші два значення для GaN і AlN перевищують значення енергії акустичних фононів в кілька разів й таким чином ці значення можуть бути відкинутими. Також зрозуміло, що ліве значення першого інтервалу, отримується при значенні $q=0$, тобто $\Omega_{n_1}^{(0)} = \Omega_{n_1}(q)|_{q \rightarrow 0}$.

Як видно з Рис. 5.11 у межах першого інтервалу $(\Omega_{n_1}^{(0)}, \Omega_1(q))$ при $q=0$ відбувається формування віток ділататіональних та флексуральних мод акустичних фононів, їх подальша із зміною q еволюція має ряд особливостей, знакових для кожного з встановлених інтервалів. Для кожного типу акустичних фононів одночасно формується по дві вітки, які із зростанням значень хвильового вектора q зближаються між собою. Особливо добре наявність парних віток видно в області значень енергій акустичних фононів $\Omega_{n_1}(q) < 10 \text{ меВ}$ де даний ефект фактично

спостерігається у діапазоні від $\Omega_{n_1}^{(0)}$ до значень дещо більших від $\Omega_3(q)$. Фізичний зміст віток, поданих штриховими лініями буде встановлено нижче, досліджуючи залежності спектру акустичних фононів від геометричних параметрів досліджуваної наноструктури. Це зумовлено тим, що залежності від q для спектру обох типів фононів є фактично однаковими. Також можна бачити, що для першого інтервалу вітки залежностей $\Omega_{n_1}(q)$ для флексуральних та ділататіональних акустичних фононів можуть зближуватись між собою, формуючи антикросінги, а в області значень $\Omega_{n_1}(q) > 15$ меВ ці вітки можуть багатократно перетинатись між собою.

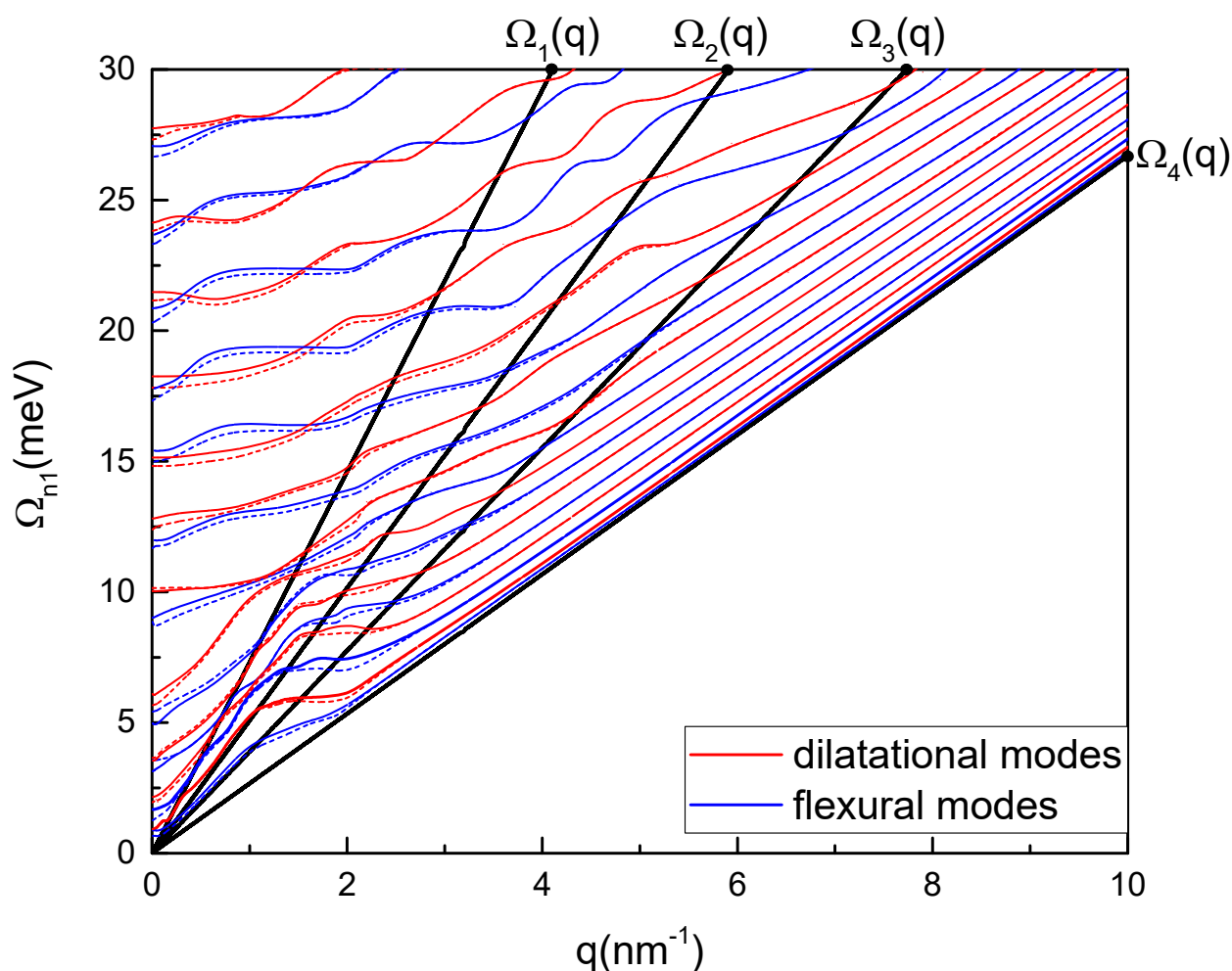


Рис. 5.11. Ділататіональні (суцільні та штрихові червоні лінії) та флексуральні (суцільні та штрихові сині лінії) моди спектру акустичних фононів Ω_{n_1} як функції від хвильового вектора q , а також межі $\Omega_1(q)$, $\Omega_2(q)$, $\Omega_3(q)$, $\Omega_4(q)$ (чорні суцільні лінії) інтервалів, у яких вони утворюються за співвідношенням (5.177)

Залежності $\Omega_{n1}(q)$ енергій акустичних фононів у другому інтервалі $(\Omega_1(q), \Omega_2(q))$ формуються вітками, які із збільшенням значення q перетинають граничне значення $\Omega_1(q)$. У цьому інтервалі спостерігається подальше зближення більшості парних віток та формування антикросінгів між вітками флексуральних та ділататіональних фононів.

Залежності $\Omega_{n1}(q)$ енергій акустичних фононів у третьому інтервалі $(\Omega_2(q), \Omega_3(q))$ є сформовані вітками, які із збільшенням значення q перетинають граничне значення $\Omega_2(q)$. В цьому інтервалі при $\Omega_{n1}(q) < 10$ меВ ще досить чітко видно різницю в значеннях енергії парних віток. Також з Рис. 5.11 видно, що в цьому інтервалі при $\Omega_{n1}(q) > 10$ меВ фактично всі парні вітки вже зливаються між собою повністю, а самі залежності енергій $\Omega_{n1}(q)$ стають квазілінійними.

Залежності віток енергій акустичних фононів у четвертому інтервалі $(\Omega_3(q), \Omega_4(q))$ суттєво відрізняються від їх залежностей у інших трьох інтервалах. Після досягнення значень залежностями $\Omega_{n1}(q)$ значень, співпадаючих з $\Omega_3(q)$ поведінка як віток флексуральних так і ділататіональних акустичних фононів стає однаковою. Вітки $\Omega_{n1}(q)$ зростають із ростом q , при цьому залишаючись фактично паралельними до залежності $\Omega_4(q)$ й будучи при цьому еквідистантними між собою ($\Omega_{n1+1}(q) - \Omega_{n1}(q) = const$).

Важливим аспектом є необхідність дослідити залежності спектру акустичних фононів та електронний спектр досліджуваної наноструктури від її геометричних параметрів. Для наносистеми, що фактично є окремим каскадом ККД доцільно досліджувати залежності спектральних параметрів електронів та акустичних фононів не від ширини потенціальної ями активної зони, а від відносного положення самої активної зони та екстрактора в досліджуваному каскаді. В результаті було прийнято рішення досліджувати згадані спектральні параметри у залежності від сумарної величини вхідної та вихідної ям каскаду, тобто від величини $0 \leq d \leq d_1 + d_5$, що характеризує загальну ширину потенціальних ям активної зони та вихідної потенціальної ями екстрактора.

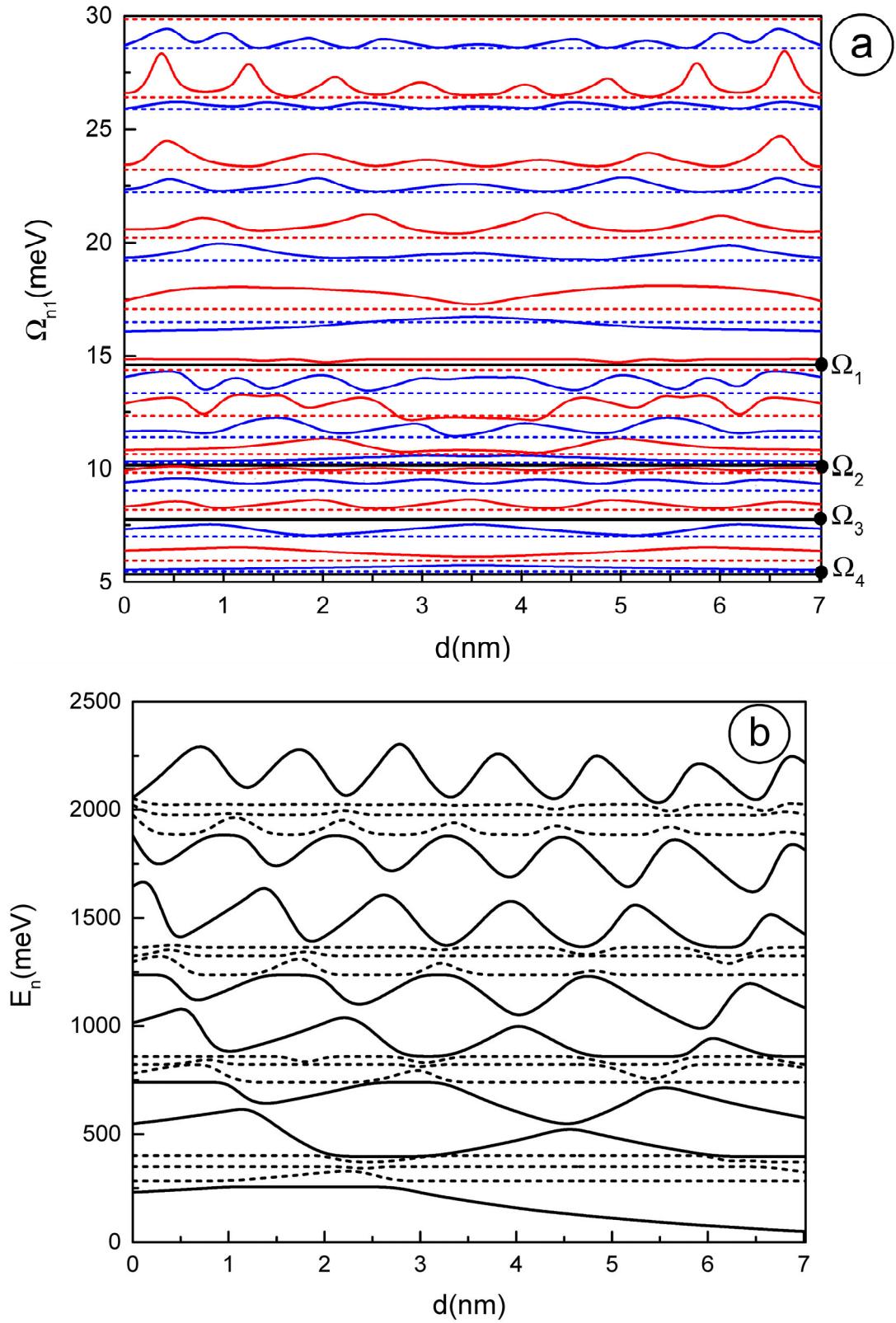


Рис. 5.12. Спектр акустичних фононів Ω_{n_1} (а) розрахований при $q = 2 \text{ nm}^{-1}$ та електронний спектр E_n (б) як функції відносного положення активної зони та екстрактора у окремому каскаді ($0 \leq d_1 \leq d_1^{(\text{exp})} + d_5^{(\text{exp})}$)

Результати розрахунків спектрів акустичних фононів та електронів від згаданої величини d , подано на Рис. 5.12. Як видно з Рис. 5.12а, залежності спектру акустичних фононів $\Omega_{n_1}(d)$ формуються у межах трьох інтервалів, межі, яких встановлено вище. У кожному з даних інтервалів формуються вітки залежностей спектру які як залежать від величини d так і не залежать від неї (такі вітки подано штриховими лініями). Очевидно, що вітки, які не залежать від d відносяться до шарів наносистеми, геометричні значення яких не міняються, тобто фактично вони є внеском від усіх шарів каскаду без потенціальних ям d_1 і d_5 . Як видно з Рис. 5.12а вітки, не залежні від d у всіх інтервалах залежностей розміщені в основному між двома вітками, залежними від d . Вийняток становлять дві вітки відповідно флексуральних та ділататіональних акустичних фононів, що перетинаються з двома іншими вітками у своїй парі, вони розміщені відповідно в першому та другому інтервалах. В подальшому будемо обговорювати лише залежні від d вітки фононного спектру.

Для першого інтервалу ($\Omega \geq \Omega_1$) чітко видно, що в цьому інтервалі залежності $\Omega_{n_1}(d)$ формують n_1 максимум та n_1-1 мінімум, причому слід зауважити, що такий ефект спостерігається також і для четвертого інтервалу ($\Omega_3 \leq \Omega \leq \Omega_4$), проте не має місця для решти інтервалів. Для другого інтервалу ($\Omega_1 \leq \Omega \leq \Omega_2$) та третього ($\Omega_2 \leq \Omega \leq \Omega_3$) інтервалів чіткого зв'язку між кількістю максимумів та мінімумів не спостерігається: в деяких вітках кількість мінімумів може переважати кількість максимумів, в інших їхня кількість є рівною. Слід зауважити, що залежності $\Omega_{n_1}(d)$, що формуються на інтервалі зміни d є фактично симетричними відносно значення $d \approx (d_1 + d_5) / 2$.

На Рис. 5.12b приведено залежності електронного спектру досліджуваної наноструктури. Суцільні лінії відповідають електронним, станам, локалізованим у вхідній та вихідній ямах каскаду, штрихові лінії – електронним станам, локалізованих у решті потенціальних ям. Як видно з Рис. 5.12.b, залежності рівнів електронного спектру $E_n(d)$ містять як рівні, що сильно залежать від d так і рівні, що порівняно слабо залежать від d . На відміну від випадку для акустичних фононів

де частина рівнів не проявляла залежності від d , у випадку електронного спектру усі рівні залежать від d . Для електронних рівнів, локалізованих у вхідній та вихідній ямах наноструктури формується послідовно n максимумів та $n-1$ мінімум. При цьому в силу того, що електронні рівні є локалізовані з відмінною від нуля ймовірністю у всіх потенціальних ямах наноструктури у формованих своєрідних антикросінгах з п'яти рівнів беруть також рівні, локалізовані в ямах d_2, d_3, d_4 каскаду, які в околі цих антикросінгів і проявляють найбільш суттєву залежність від d .

На Рис. 5.13а, б наведено приклади залежностей зумовлених акустичними фононами компонент пружного зміщення $u_1(z)$ і $u_3(z)$ та п'єзоелектричного потенціалу $\phi(z)$, виникаючого у шарах наноструктури, які розраховані для фіксованого значення хвильового вектора q .

Як видно з Рис. 5.13а, компоненти пружного зміщення $u_1(z)$ і $u_3(z)$ є гармонічними функціями, зміщеними у фазі, одна відносно одної. При цьому обидві функції набувають як додатних так і від'ємних значень в обласні наноструктури й слідує до нуля у напівпровідниковому середовищі зовні від неї. В результаті можна помітити, що дані функції в межах окремо взятого шару наноструктури можуть вести себе відповідно як симетричні ($u_1(z)$) та антисиметричні ($u_3(z)$) функції відносно центра даного шару. Слід також зауважити, що даний ефект не має загального характеру, і проявляється в області екстрактора каскаду.

Далі, на Рис. 5.13б приведено залежності $\phi(z)$ для п'єзоелектричного потенціалу, зумовленого флексуральними та діляціональними акустичними фононами. Як видно з рисунка, п'єзоелектричний потенціал також може набувати додатних та від'ємних значень, при чому абсолютні максимальні значення функції $|\phi(z)|$ досягаються в межах потенціальних ям, та на границях з потенціальними бар'єрами. Як і випадку зміщень $u_1(z)$ і $u_3(z)$ п'єзоелектричний потенціал слідує до нуля при $z \rightarrow \pm\infty$.

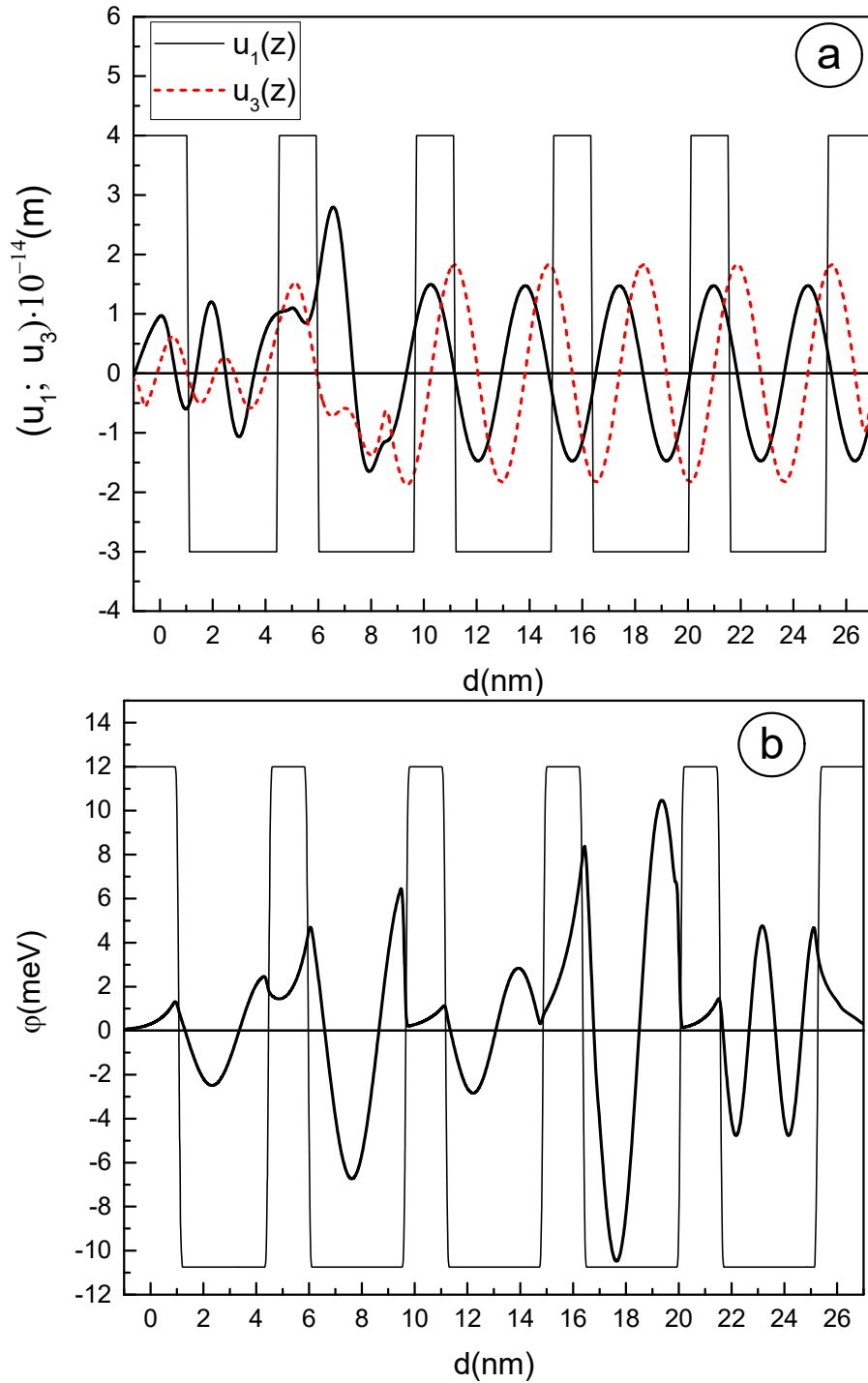


Рис. 5.13. Залежності компонент пружного зміщення $u_1(z)$ і $u_3(z)$, що зумовлені акустичними фононами (а) та п'єзоелектричний потенціал $\phi(z)$, виникаючий в наноструктурі при $q = 2 \text{ nm}^{-1}$

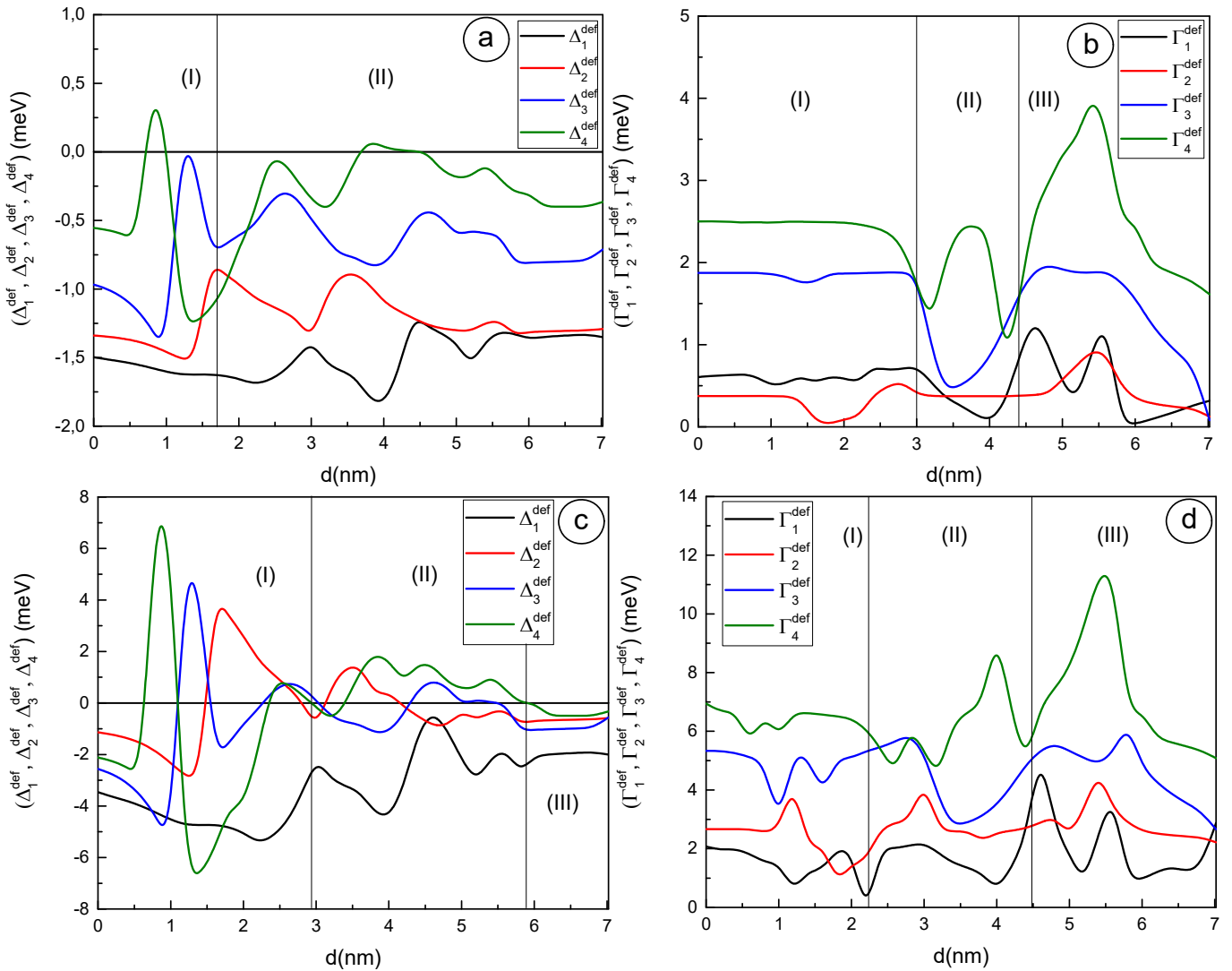


Рис. 5.14. Температурні зміщення та загасання, зумовлені взаємодією електронів з акустичними фононами через деформаційний потенціал, як функції d_1 , розраховані при $q = 2 \text{ nm}^{-1}$ для значень температури $T=77\text{K}$ (a, b) $T=300\text{K}$ (c, d)

Основною й кінцевою метою нашого дослідження є встановлення властивостей взаємодії електронів з флексуральними та ділататіональними акустичними фононами через два розглянуті нами можливі механізми: через деформаційний потенціал та через п'єзоелектричний потенціал. Оскільки досліджувана нами наноструктура виступала в якості каскаду ККД, який в праці [196] досліджувався при температурі рідкого азоту (77K) та кімнатній температурі (300K), то будемо виконувати безпосередні розрахунки температурних зсувів для електронних рівнів та їх затухань саме при цих температурах. З метою більш наочного порівняння

згадані характеристики електрон-фононої взаємодії розраховувались як і електронний спектр у залежностях на Рис. 5.14 від величини d .

На Рис. 5.14а, b, c, d подано залежності від d величин температурних зміщень рівнів перших чотирьох рівнів електронного спектру локалізованих в активній зоні та їх згасань (див. рівняння 1 і 2), які зумовлені взаємодією електронів з акустичними фононами через деформаційний потенціал при температурах $T=77\text{K}$ (Рис. 5.14 а, b) та 300K (Рис. 5.14 с, d). Як видно з Рис. 5.14а залежності $\Delta_n^{def}(d)$ можуть перетинатись між собою, як це видно з області (I) ($0\text{nm} \leq d \leq 1.7\text{nm}$). Проте для залежностей $\Delta_n^{def}(d)$ в основному виконується умова: $\Delta_1^{def}(d) > \Delta_2^{def}(d) > \Delta_3^{def}(d) > \Delta_4^{def}(d)$, тобто нижні електронні рівні зміщуються більше, як це має місце в області (II) ($1.7\text{nm} \leq d \leq 7.02\text{nm}$). Слід зауважити, що залежності температурних зміщень $\Delta_n^{def}(d)$ мають від'ємний знак на всьому діапазоні зміни d , окрім невеликих інтервалів в околі точок $d \approx 1\text{nm}$ та $d \approx 4\text{nm}$ в (I) (II) областях відповідно для яких: $\Delta_4^{def}(d) > 0$. Залежності зміщень $\Delta_n^{def}(d)$, які розраховані при температурі $T=300\text{K}$ й приведені на Рис. 5.14с суттєво відрізняються від залежностей на Рис. 5.14а. Як видно з цього рисунка екстремуми, які мали місце при $T=77\text{K}$ стають більш вираженими, абсолютні значення зміщень збільшуються в кілька разів. При цьому зміщення першого електронного рівня $\Delta_1^{def}(d) < 0$ на всьому діапазоні зміни d . Залежності $\Delta_2^{def}(d)$, $\Delta_3^{def}(d)$, $\Delta_4^{def}(d)$ стають більш симетричними відносно осі абсцис, при цьому в області (I) ($0\text{nm} \leq d \leq 2.9\text{nm}$) формуються як найбільші додатні так і від'ємні значення цих зміщень. Положення цих екстремумів на шкалі значень d практично збігаються з їх положеннями на залежностях, розрахованих при $T=77\text{K}$. В області (I) ($2.9\text{nm} \leq d \leq 5.8\text{nm}$) зміщення $\Delta_2^{def}(d)$, $\Delta_3^{def}(d)$ також вже формують інтервали із додатнім зміщенням рівнів, при цьому зміщення $\Delta_4^{def}(d) > 0$ в цій області. В області (III) ($2.9\text{nm} \leq d \leq 5.8\text{nm}$) всі маємо, що $\Delta_n^{def}(d) < 0$.

Далі, на Рис. 5.14b приведено залежності від величини d затухань електронних рівнів, розрахунок яких виконувався при температурі $T=77\text{K}$. Як видно з рисунка, можна виділити три різні області в діапазоні зміни d з характерною поведінкою величин $\Gamma_n^{def}(d)$. Так, в області (I) ($0\text{nm} \leq d \leq 3\text{nm}$) величини затухань $\Gamma_1^{def}(d), \Gamma_3^{def}(d), \Gamma_4^{def}(d)$ слабо залежать від d , при цьому $\Gamma_2^{def}(d)$ формує в цій області мінімум. В області (II) ($3\text{nm} \leq d \leq 4.4\text{nm}$) величина $\Gamma_2^{def}(d)$ слабо залежить від d , $\Gamma_1^{def}(d), \Gamma_3^{def}(d)$ формують мінімуми, а $\Gamma_4^{def}(d)$ - два мінімуми на границі області і один максимум. В третій області (III) ($4.4\text{nm} \leq d \leq 7.02\text{nm}$) формуються найбільші значення для всіх залежностей $\Gamma_n^{def}(d)$. На границі цієї області залежності $\Gamma_n^{def}(d)$ різко спадають. Як видно з Рис. 5.14d збільшення температури до значення $T=300\text{K}$ спричиняє суттєву деформацію залежностей $\Gamma_n^{def}(d)$. Максимальні значення затухань $\Gamma_n^{def}(d)$ суттєво збільшуються, від майже 1.5-2 для перших трьох рівнів, і більш ніж вдвічі для четвертого електронного рівня. В області (I) ($0\text{nm} \leq d \leq 2.3\text{nm}$) усі величини $\Gamma_n^{def}(d)$ вже проявляють залежність від d , формуючи виражені екстремуми, в області (II) ($2.3\text{nm} \leq d \leq 4.3\text{nm}$) залежність $\Gamma_2^{def}(d)$ вже формує чіткий максимум, екстремуми залежностей затухань $\Gamma_1^{def}(d), \Gamma_3^{def}(d), \Gamma_4^{def}(d)$, які сформувались при $T=77\text{K}$ тепер зміщуються вліво. В області (III) ($4.3\text{nm} \leq d \leq 7.02\text{nm}$), яка при $T=300\text{K}$ має фактично такі ж розміри як і при $T=77\text{K}$, екстремуми залежностей $\Gamma_n^{def}(d)$ не змінюють свого положення, фактично лише збільшуючи свої значення. Слід також зауважити, що $T=300\text{K}$ значення залежності $\Gamma_n^{def}(d)$ впорядковані за ростом номера електронного рівня n ($\Gamma_n^{def}(d) < \Gamma_{n+1}^{def}(d)$), за виключенням двох малих інтервалів d між областями (I) і (II) та (II) і (III) для яких $\Gamma_1^{def}(d) > \Gamma_2^{def}(d)$.

На Рис. 5.15a, b, c, d приведено залежності для зміщень електронних рівнів та їх згасань за рахунок взаємодії з акустичними фононами через п'єзоелектричний потенціал. Як видно з Рис. 5.15a, де приведено залежності від d для температурних

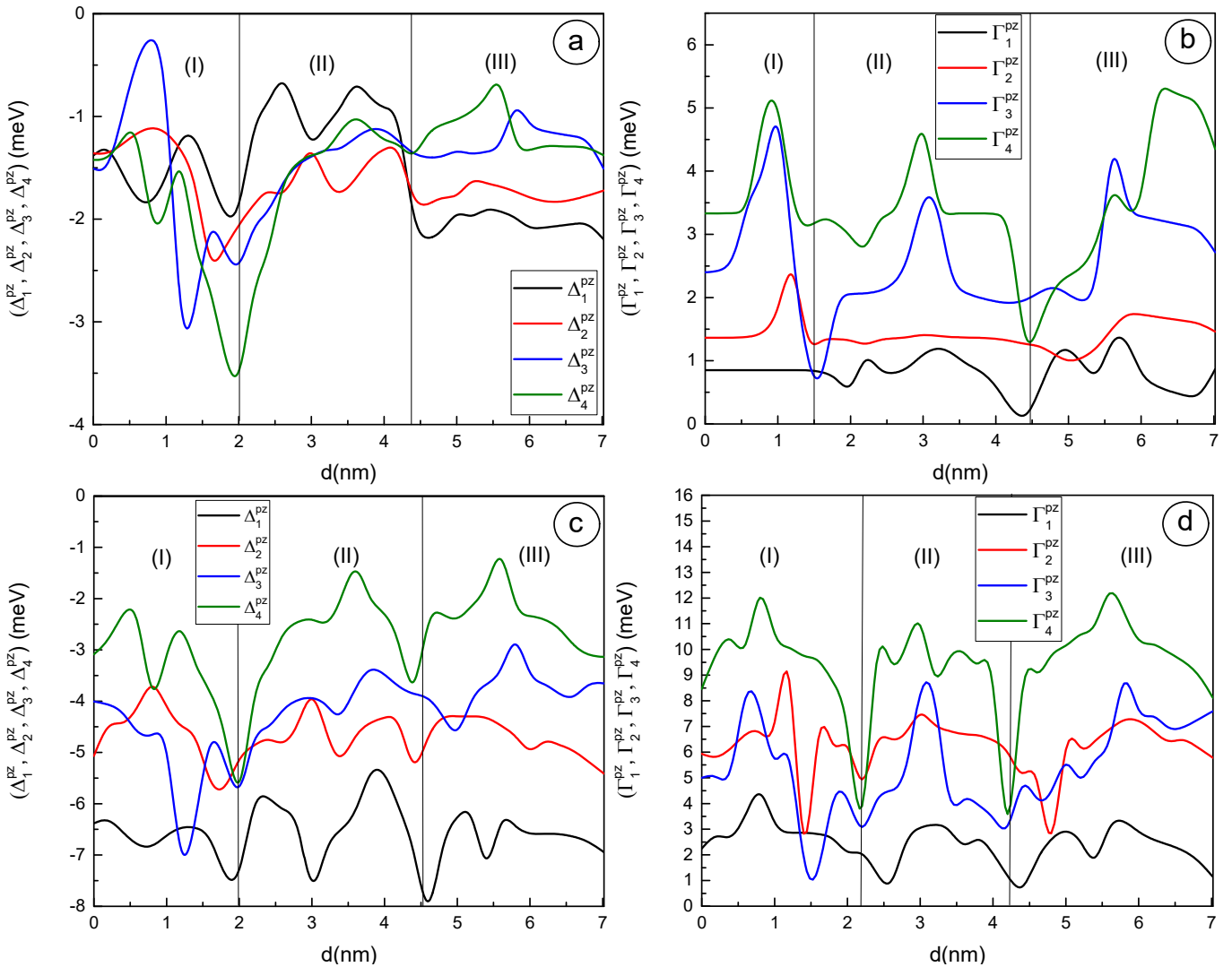


Рис. 5.15. Температурні зміщення та загасання, зумовлені взаємодією електронів з акустичними фононами через п'єзоелектричний потенціал, як функції d_1 , розраховані при $q = 2 \text{ nm}^{-1}$ для значень температури $T=77\text{K}$ (a, b) $T=300\text{K}$ (c, d)

зміщень електронних рівнів при $T=77\text{K}$ залежності $\Delta_n^{pz}(d)$ мають тільки від'ємний знак та мають вигляд кривих, які багатократно перетинаються між собою. Для прикладу в першій області (I) ($0\text{nm} \leq d \leq 2\text{nm}$) формуються одночасно максимальні та мінімальні значення для $\Delta_3^{pz}(d)$ на всьому інтервалі зміни d . На границі цієї області мінімальних значень набувають відповідно $\Delta_2^{pz}(d)$ і $\Delta_4^{pz}(d)$. В другій області (II) ($2\text{nm} \leq d \leq 4.4\text{nm}$) слід виділити, що значення $\Delta_1^{pz}(d)$ переважають значення величин згасання для інших рівнів, причому всі залежності досягають своїх мінімальних значень на границях цієї області. В третій області (II)

($4.4\text{ нм} \leq d \leq 7.02\text{ нм}$) як видно з рисунка $\Delta_1^{pz}(d)$ і $\Delta_2^{pz}(d)$ слабо залежать від d , зваженості $\Delta_4^{pz}(d)$ і $\Delta_3^{pz}(d)$ послідовно формують по одному максимуму.

Вплив зростання температури на зміщення електронних рівнів чітко видно з Рис. 5.15с, де приведенні залежності $\Delta_n^{pz}(d)$, розраховані при температурі $T=300\text{К}$. Як видно з цього рисунка, зростання температури спричиняє збільшення абсолютних величин зміщень $\Delta_n^{pz}(d)$, проте насамперед слід відмітити, що на відміну від зміщень, які зумовлені електрон-фононою взаємодією через деформаційний потенціал, ці зміщення мають виключно від'ємний знак. Слід відмітити, що із збільшенням температури в областях (II) ($2\text{ нм} \leq d \leq 4.5\text{ нм}$) і (III) ($4.5\text{ нм} \leq d \leq 7.02\text{ нм}$) починає виконуватися умова $|\Delta_n^{pz}(d)| > |\Delta_{n+1}^{pz}(d)|$ за виключенням першої області (I) ($0\text{ нм} \leq d \leq 4.5\text{ нм}$) де в вузьких діапазонах d реалізуються умови $|\Delta_3^{pz}(d)| > |\Delta_1^{pz}(d)|$ і $|\Delta_2^{pz}(d)| > |\Delta_3^{pz}(d)|$. Усі залежності $\Delta_n^{pz}(d)$ досягають мінімумів на границях згаданих трьох областей.

Далі, на Рис. 5.15b наведено залежності $\Gamma_n^{pz}(d)$ згасань електронних рівнів при $T=77\text{К}$. Як можна побачити з рисунка, залежності $\Gamma_n^{pz}(d)$ формують три області, для яких можна виділити такі особливості. Для області (I) ($0\text{ нм} \leq d \leq 1.5\text{ нм}$) формуються зліва направо максимуми згасань для четвертого, третього та другого електронного рівнів, $\Gamma_1^{pz}(d)$ слабо залежить від d . В області (II) ($1.5\text{ нм} \leq d \leq 4.5\text{ нм}$) вже $\Gamma_2^{pz}(d)$ слабо залежить від d , а решта залежностей формують чітко виражені максимуми. В області (III) ($4.5\text{ нм} \leq d \leq 7.02\text{ нм}$) є невеликі інтервали для яких $\Gamma_2^{pz}(d) < \Gamma_1^{pz}(d)$ і $\Gamma_4^{pz}(d) < \Gamma_3^{pz}(d)$. Загалом в основному всьому діапазоні зміни d : $\Gamma_n^{pz}(d) < \Gamma_{n+1}^{pz}(d)$. Зростання температури до $T=300\text{К}$, як видно з Рис. 5.15d викликає збільшення значень $\Gamma_n^{pz}(d)$ у кілька разів, при цьому залежності $\Gamma_2^{pz}(d)$ і $\Gamma_3^{pz}(d)$ зближаються між собою багатократно перетинаючись. Аналогічно, як і для залежностей на Рис. 5.15b є три області зміни d , границі яких визначаються практично одночасним формуванням мінімумів залежностей $\Gamma_n^{pz}(d)$. В кожній з цих

областей значення залежності $\Gamma_4^{pz}(d)$ переважають значення інших залежностей. Розміри області (III) ($4.2 \text{ нм} \leq d \leq 7.02 \text{ нм}$) є маже такими ж як і при $T=77\text{К}$. Область (I) ($0 \text{ нм} \leq d \leq 2.2 \text{ нм}$) є більшою ніж при $T=77\text{К}$, а область (II) ($2.2 \text{ нм} \leq d \leq 4.2 \text{ нм}$). В усіх цих областях екстремуми залежностей $\Gamma_n^{pz}(d)$, які сформовані при $T=77\text{К}$ є більш вираженими, також слід зауважити формування додаткових екстремумів й деяку деформацію самих залежностей $\Gamma_n^{pz}(d)$.

Розраховані величини енергій квантових переходів між електронними рівнями активної зони, що перенормовані взаємодією з акустичними фононами за рахунок обох розглянутих вище механізмів такі: ($\tilde{\Omega}_{nn'} = \Omega_{nn'} + \Delta_n^{def} + \Delta_{n'}^{def} + \Delta_n^{pz} + \Delta_{n'}^{pz}$).

При $T=77\text{К}$ маємо: $\tilde{\Omega}_{12} = 390.7 \text{ меВ}$; $\tilde{\Omega}_{13} = 771.8 \text{ меВ}$; $\tilde{\Omega}_{14} = 1039.9 \text{ меВ}$. При $T=300\text{К}$ маємо, що $\tilde{\Omega}_{12} = 396.5 \text{ меВ}$; $\tilde{\Omega}_{13} = 776.4 \text{ меВ}$; $\tilde{\Omega}_{14} = 1047.4 \text{ меВ}$. Ці дані добре корелюють з значення, отриманими у праці [193].

Підсумовуючи, слід сказати, що обидва механізми взаємодії електронів з акустичними фононами із ростом температури спричиняють досить суттєве перенормування електронного спектру \tilde{E}_n й відповідно енергій електронних переходів ($\tilde{\Omega}_{nn'} = \tilde{E}_{n'} - \tilde{E}_n$) та смуги поглинання ($\Gamma_{nn'} = \Gamma_n + \Gamma_{n'}$). Цікавим ефектом є теплове розширення величини смуги поглинання ($\Delta\Gamma_{nn'} = \Gamma_{nn'}(T)|_{T=300\text{К}} - \Gamma_{nn'}(T)|_{T=77\text{К}}$). Виявлені ефекти безпосередньо впливають на інтенсивність квантових переходів між електронними рівнями та електронну провідність наноструктури, фактично зменшуючи їх за рахунок збільшення резонансних ширин цих електронних рівнів та порушуючи когерентність електронних станів.

Висновки до розділу 5

1. Побудовано аналітичну теорію взаємодії електронів з флексуральними та ділататіональними акустичними фононами у багатошарових арсенідних РТС за довільних значень температури.

2. Розвинено аналітичну теорію п'єзоелектричного ефекту, зумовленого флексуральними та ділататіональними акустичними фононами в багат шарових нітридних РТС. Виконано дослідження спектру флексуральних та ділататіональних акустичних фононів за наявності п'єзоелектричного ефекту.
3. Розвинено аналітичну теорію зсувних акустичних фононів у багат шарових нітридних РТС у врахуванням створюваного ними п'єзоелектричного ефекту. Досліджено властивості спектру та компонент поля зміщення поперечних акустичних фононів та виявити їх особливості, що пов'язані з п'єзоелектричним ефектом.
4. Показано, що взаємодія зсувних акустичних фононів з електронами можлива тільки через п'єзоелектричний потенціал. Розвинено теорію взаємодії електронів з поперечними акустичними фононами у нітридних РТС через п'єзоелектричний потенціал за довільних значень температури. Досліджено властивості температурних зміщень рівнів електронного спектру та їх згасань, які зумовлені даним механізмом взаємодії електронів з акустичними фононами.
5. Розвинено теорію взаємодії електронів з флексуральними та ділататіональними в багат шарових нітридних РТС через деформаційний та п'єзоелектричний потенціали для довільних значень температури за наявності п'єзоелектричного ефекту. На основі розвиненої теорії виконано розрахунки та досліджено температурні зміщення енергетичних рівнів електронних станів та їх згасань зумовлені обома механізмами взаємодії та встановити їхні закономірності й особливості.
6. Встановлено, що теплові зміщення рівнів електронного спектру, які зумовлені взаємодією електронів з акустичними фононами через деформаційний потенціал при температурах 77К і 300 К набувають як від'ємних так і додатнім значень, а при цьому теплові зміщення рівнів електронного спектру, що зумовлені взаємодією електронів з акустичними фононами через п'єзоелектричний потенціал набувають лише від'ємних значень. При цьому абсолютні величини зміщень для електронних рівнів та їх згасання зростають із збільшенням температури в кілька разів, що приводить до суттєвого перенормування смуги поглинання.

РОЗДІЛ 6. ТЕОРІЯ ТУНЕЛЬНОГО ТРАСПОРТУ У СИСТЕМАХ ЕЛЕКТРОННИХ КВАЗІСТАЦІОНАРНИХ СТАНІВ З АКУСТИЧНИМИ ФОННАМИ ТА МУЛЬТИЧАСТОТНИМИ ЕЛЕКТРОМАГНІТНИМИ ПОЛЯМИ

6.1. Теорія системи квазістаціонарних електронних станів разом з акустичними фононами при збереженні балістичного режиму тунелювання. Теорія варіаційного методу для відкритих плоских наносистем з довільним ефективним потенціалом

Будемо досліджувати електронні КСС у відкритій двобар'єрній наноструктурі, що складається з AlN – потенціальних бар'єрів та GaN потенціальної ями.

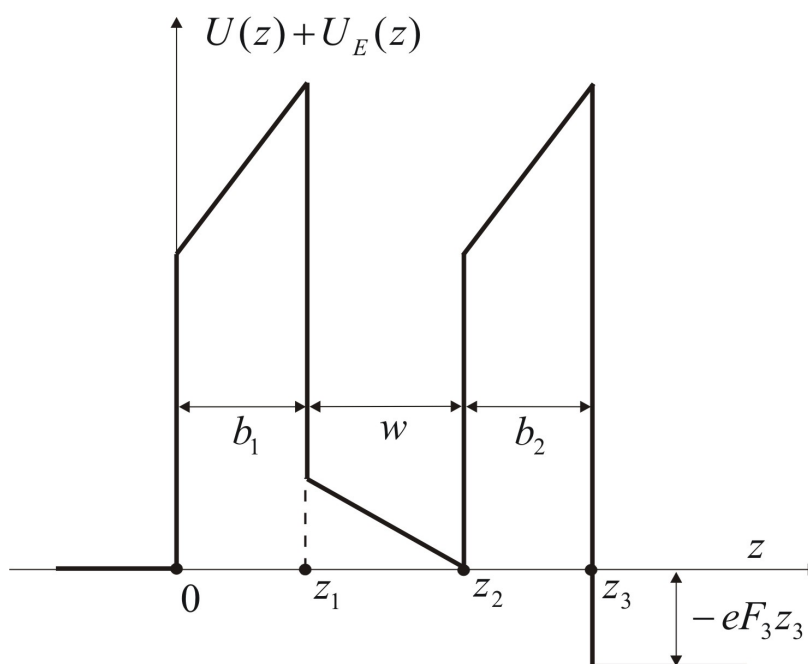


Рис. 6.1. Геометрична та енергетична схема досліджуваної відкритої AlN/GaN наноструктури

Геометрична схема наноструктури приведена на Рис. 6.1. Згідно позначень на Рис. 6.1 ефективну масу електрона та діелектричну проникність наноструктури можна подати у вигляді:

$$\begin{pmatrix} m(z) \\ \varepsilon(z) \end{pmatrix} = \sum_{p=0}^4 \begin{pmatrix} m^{(p)} \\ \varepsilon^{(p)} \end{pmatrix} \left[\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p) \right], \quad z_{-1} = -\infty, \quad z_4 = +\infty; \quad (6.1)$$

$$m^{(0)} = m^{(2)} = m^{(4)} = m_{\text{GaN}}; \quad m^{(1)} = m^{(3)} = m_{\text{AlN}};$$

де m_{GaN} , m_{AlN} і ε_{GaN} , ε_{AlN} відповідно ефективні маси електрона та діелектричні проникності AlN і GaN напівпровідників.

Потенціальна енергія електрона в досліджуваній наноструктурі визначається як:

$$U(z) = \begin{cases} 0, & z < 0, \quad z_1 < z < z_2, \quad z > z_3, \\ 0.765(E_g^{\text{AlN}} - E_g^{\text{GaN}}), & 0 \leq z \leq z_1, \quad z_2 \leq z \leq z_3. \end{cases} \quad (6.2)$$

де E_g - заборонена зона, температурна залежність для якої розрахована згідно із співвідношенням Варшні [120].

У постановці задачі приймається, що наноструктуру зліва падає пучок моноенергетичних електронів з енергією, близькою до значення енергій одного з енергетичних рівнів наноструктури утворених розмірним квантуванням. Приймається, що електрони можуть здійснювати квантові переходи як з випромінюванням так із поглинанням енергії електромагнітного поля. Для описання процесу електронного тунелювання будемо враховувати вплив наступних факторів. Величина внутрішнього електричного поля F_p , визначеного сумарною величиною ($P = P_{sp} + P_{pz}$) спонтанної P_{sp} та п'єзоелектричної поляризацій P_{pz} знаходиться з використанням умов неперервності для вектора електричного зміщення $\bar{D}_p = \varepsilon^{(p)} \bar{F}_p + \bar{P}_p$ на межах внутрішніх шарів наноструктури товщина яких Δz_p :

$$\bar{D}_p = \bar{D}_{p+1}, \quad p = 1, 2, \quad (6.3)$$

а також умови, що накладається на сумарний спад напруги:

$$\sum_{p=0}^3 F_p \Delta z_p = 0, \quad F_0 = 0, \quad \Delta z_p = z_p - z_{p-1}. \quad (6.4)$$

З рівнянь (6.3), (6.4) відразу знаходимо:

$$F_p = \frac{1}{\varepsilon_p} \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq p}}^3 \frac{\left[(P_{sp}^{(k)} + P_{pz}^{(k)}) - (P_{sp}^{(p)} + P_{pz}^{(p)}) \right] \Delta z_p}{\varepsilon^{(\alpha)}_{(k)}} \bigg/ \sum_{k=1}^3 \frac{\Delta z_k}{\varepsilon^{(k)}}, \quad (6.5)$$

тоді потенціал для електронів, взаємодіючих постійним електричним полем буде такий:

$$U_E(z) = e \sum_{p=1}^2 (-1)^{p-1} (F_p z - F_{p-1} z) \left[\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p) \right] - e F_3 z \theta(z - z_3). \quad (6.6)$$

Взаємодія електрона зі змінним електромагнітним полем з амплітудою ξ описується таким гамільтоніаном:

$$U_{e-em}(z, t) = -2e\xi \left[z\theta(z) + (z_3 - z)\theta(z - z_3) \right] \cos \omega t, \quad (6.7)$$

де ω частота електромагнітного поля.

Зміщення валентної зони для нітридних напівпровідників визначається виразом:

$$\Delta E_v = a_{1c} \varepsilon_{zz} + a_{2c} (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}), \quad (6.8)$$

де a_{1c}, a_{2c} - константи зв'язку деформаційного потенціалу для валентної зони, а

$\varepsilon_{xx} = \frac{\partial u_1}{\partial x}$, $\varepsilon_{yy} = \frac{\partial u_2}{\partial y}$; $\varepsilon_{xy} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_1}{\partial x} + \frac{\partial u_2}{\partial y} \right)$, $\varepsilon_{zz} = \frac{\partial u_3}{\partial z}$ - компоненти тензора деформації, а

$$u_l = u_l(x, z) = u_l(z) e^{-iqx}, \quad l = \overline{1..3}.$$

Для того, щоб отримати моди різних типів акустичних фононів необхідно спочатку знайти розв'язки рівняння, що описує зміщення середовища шарів наносистеми:

$$\rho(z) \frac{\partial^2 u_l(r, t)}{\partial t^2} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_k} \left\{ C_{iklm}(z) \left[\frac{\partial u_l(r)}{\partial x_m} + \frac{\partial u_m(r)}{\partial x_l} \right] \right\}; \quad l, k, m = (1; 2; 3); \quad (6.9)$$

$$x_1 = x; \quad x_2 = y; \quad x_3 = z; \quad r = (x_1, x_2, x_3) = (x, y, z),$$

- де густину та пружну константи AlN та GaN шарів наносистеми у залежності від координати z можна подати у вигляді.

$$\left[\rho(z) C_{iklm}(z) \right]^T = \sum_{p=1}^3 \left[\rho^{(p)} C_{iklm}^{(p)} \right]^T \left[\theta(z_p - z_{p-1}) - \theta(z_p - z_{p+1}) \right]. \quad (6.10)$$

Виконавши перехід у рівнянні (6.9) та співвідношенні (6.10) до двоіндексного представлення Войгта ($C_{\alpha\beta}$) розв'язки (6.9) шукаються у вигляді:

$$u_l(r, t) = \sum_{p=1}^3 \left[u_1^{(p)}(z) u_2^{(p)}(z) u_3^{(p)}(z) \right]^T \left[\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p) \right] e^{i(\omega t - qx)} \quad (6.11)$$

При цьому ми не будемо розглядати компоненту зміщувальних фононів $u_2(z)$, які як було встановлено у попередньому розділі, не дають внеску у створюваний деформаційний потенціал, зосередившись на флексуральних та ділататіональних фононах, які його безпосередньо визначають згідно уже отриманих нами співвідношень (5.27) і (5.28).

З урахуванням необхідності забезпечення умови відкритості наноструктури на її зовнішніх межах для компонент тензора напружень σ_{13} і σ_{23} мають використовуватись жорсткі граничні умови, які отримують з вимоги того, що:

$$\sigma_{13(23)} \Big|_{z \rightarrow 0(z \rightarrow z_3)} (z) \rightarrow 0, \quad (6.12)$$

звідки:

$$\left[\left(-iqu_3(z) + \frac{du_1(z)}{dz} \right) \Big|_{z \rightarrow 0(z \rightarrow \infty)} = 0, \right. \\ \left. \left(-iqC_{13}u_1(z) + C_{33} \frac{du_3(z)}{dz} = 0 \right) \Big|_{z \rightarrow 0(z \rightarrow \infty)} = 0. \right. \quad (6.13)$$

Для внутрішніх шарів наноструктури виконуються умови неперервності для компонент поля зміщення та тензора напружень:

$$\left[u_{1(3)}^{(p)}(z) \Big|_{z=z_p-0} = u_{1(3)}^{(p+1)}(z) \Big|_{z=z_p+0} \right. \\ \left. \sigma_{13(33)}^{(p)}(z) \Big|_{z=z_p-0} = \sigma_{13(33)}^{(p+1)}(z) \Big|_{z=z_p+0}. \right. \quad (6.14)$$

Послідовно застосовуючи граничні умови (6.13) та (6.14) для всієї наноструктури отримаємо дисперсійне рівняння з якого визначається спектр акустичних фононів ($\Omega_n(q)$). Крім того, виражаючи послідовно усі коефіцієнти в розв'язках (6.11) через один із них вкупі з умовою нормування:

$$l_x l_y \int_0^{z_3} \rho(z) \left[u_1(q', \omega, z) u_1^*(q, \omega, z) + u_3(q', \omega, z) u_3^*(q, \omega, z) \right] dz = \frac{\hbar}{2\omega} \delta_{qq'} \quad (6.15)$$

де величини $l_x l_y$ - площа поперечного перерізу наноструктури.

Тоді деформаційний потенціал для акустичних фононів з урахуванням співвідношень (6.8), (5.27), (5.28). отримується у координатній формі:

$$\begin{aligned} \Phi_{def}(z,t) &= \Phi_{def}(z)e^{i\omega_{ac}^{(n_1)}(q)t} = \\ &= \sum_{p=1}^3 \sum_{s=1}^2 \left[A_{2s-1}^{(p)} \phi_{2s-1}^{(p)} e^{\lambda_s^{(p)}(z-z_p)} + A_{2s}^{(p)} \phi_{2s}^{(p)} e^{-\lambda_s^{(p)}(z-z_p)} \right] e^{i\omega_{ac}^{(n_1)}(q)t} \left[\theta(z-z_{p-1}) - \theta(z-z_p) \right]. \end{aligned} \quad (6.16)$$

де $\omega_{ac}^{(n_1)}(q)$ - частота вітки спектру акустичних фононів з номером n_1 , а також уведено таке позначення:

$$\phi_s^{(p)} = -\frac{\lambda_s^{(p)} \left\{ a_{2c}^{(p)} c_1^{(p)} q^2 + a_{1c}^{(p)} \left[\left(k_1^{(p)} \right)^2 + \left(\lambda_s^{(p)} \right)^2 \right] \right\}}{\left\| \alpha_s^{(p)} \right\|}. \quad (6.17)$$

Враховуючи співвідношення (6.5)-(6.7), електронні хвильові функції знаходяться, розв'язуючи повне рівняння Шредінгера:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(z,t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} + U(z) + U_E(z) + U_{e-em}(z,t) + \Phi_{def}(z,t) \right] \Psi(z,t). \quad (6.18)$$

Оскільки процес електронного тунельного транспорту є когерентним, то вираз (6.16) актуально застосовувати в часових інтервалах, для яких час життя електрона в КСС τ_n буде не більшим ніж час релаксації для акустичних фононів τ_{ph} ($\tau_n \leq \tau_{ph}$). Очевидно, що в такому випадку КСС не будуть зруйнованими за рахунок електрон-фононної взаємодії.

Час фононної релаксації, приймаючи до уваги процеси перекиду, розсіювання гетеромежах обчислюється за співвідношенням Маттісена [199]:

$$\tau_{ph}(q) = \left[\tau_U^{-1}(q) + \tau_B^{-1}(q) \right]^{-1}. \quad (6.19)$$

У виразі (6.19):

$$\tau_U^{-1}(q) = \frac{2\gamma^2 kT \left[\omega_{ac}^{(n_1)}(q) \right]^2}{\mu_{SH} V_0 \omega_D} \quad (6.20)$$

де γ – параметр Грюнгайзена, $V_0 = \sqrt{3}a^3c/8$ - середній об'єм, що припадає на один атом у кристалічній решітці типу вюрциту (a і c – постійні решітки), μ_{SH} - модуль зсуву, а ω_D - частота Дебая [199, 200].

Наступний доданок в (6.19) характеризує час розсіювання на гетеромежах наноструктури [199, 200]:

$$\tau_B^{-1}(q) = \frac{v_g(q)}{l}, \quad l = \Delta_1 + \Delta_2 + b, \quad (6.21)$$

де $v_g(q) = d\omega_{ac}^{(n_1)}(q) / dq$ - групова швидкість для ділататіональних та флексуральних акустичних фононів.

Зважаючи на необхідність забезпечення умови $\tau_n \leq \tau_{ph}$ будемо розглядати у рівнянні (6.18), величину $\Phi_{def}(z, t)$ усереднену за час τ_{ph} , тобто:

$$\bar{\Phi}_{def}(z) = \frac{1}{\tau_{ph}} \int_0^{\tau_{ph}} \Phi_{def}(z, t) dt = \frac{i \left(1 - e^{i\omega_{ac}^{(n_1)}(q)\tau_{ph}} \right)}{\omega_{ac}^{(n_1)}(q)\tau_{ph}} \Phi_{def}(z). \quad (6.22)$$

Спочатку представимо шукану хвильову функцію електрона у вигляді:

$$\Psi(z, t) = \Psi_0(z)e^{-i\omega_0 t} + \Psi_{\pm}(z)e^{-i(\omega_0 \pm \Omega)t}, \quad \omega_0 = E / \hbar, \quad (6.23)$$

тоді, підставляючи в (6.18) й враховуючи (6.21) отримуємо рівняння для $\Psi_0(z)$ і $\Psi_{\pm}(z)$:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} + U(z) + U_E(z) + \bar{\Phi}_{def}(z) - E \right] \Psi_0(z) = 0, \quad (6.24)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} + U(z) + U_E(z) + \bar{\Phi}_{def}(z) - (E \pm \Omega) \right] \Psi_{\pm}(z) =$$

$$= -2e\xi [z\theta(z) + (z_3 - z)\theta(z - z_3)] \Psi_0(z).$$

У зв'язку із аналітичною складністю складової гамільтоніана (6.16) рівняння (6.24), (6.25) не можуть бути розв'язаними точно. Враховуючи це застосуємо варіаційний метод, основи якого подаємо далі.

Спершу ми виконаємо розрахунок електронної функції Гріна для багатошарової відкритої наноструктури. Ми почнемо з рівняння Шредінгера у загальному вигляді:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} + U(z) + U_E(z) \right] \Psi(z) = E\Psi(z), \quad (6.26)$$

якому відповідає рівняння для функції Гріна:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} + U(z) + U_E(z) - E \right] G(z, z') = \delta(z - z'). \quad (6.27)$$

Проінтегруємо рівняння (6.27) в інтервалі $(z' + z_p - \varepsilon; z' + z_p + \varepsilon)$:

$$\int_{z'+z_p-\varepsilon}^{z'+z_p+\varepsilon} \left\{ \left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} + U(z) + U_E(z) - E \right] G(z, z') - \delta(z - z') \right\} dz = 0 \quad (6.28)$$

після чого знайдемо границю отриманого виразу при $\varepsilon \rightarrow 0$. Оскільки:

$$\begin{aligned} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{z'+z_p-\varepsilon}^{z'+z_p+\varepsilon} [U(z) + U_E(z) - E] G(z, z') dz &= 0, \quad \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{z'+z_p-\varepsilon}^{z'+z_p+\varepsilon} \delta(z - z') dz = 1, \\ \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{z'+z_p-\varepsilon}^{z'+z_p+\varepsilon} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} G(z, z') dz &= \frac{1}{m^{(p+1)}} \frac{\partial G^{(p+1)}(z = z' + z_p, z')}{\partial z} - \frac{1}{m^{(p)}} \frac{\partial G^{(p)}(z = z' + z_p, z')}{\partial z} \end{aligned} \quad (6.29)$$

то звідси отримуються такі граничні умови для функцій Гріна:

$$\begin{cases} G^{(p)}(z = z' + z_p, z') = G^{(p+1)}(z = z' + z_p, z') \\ \frac{1}{m^{(p+1)}} \frac{\partial G^{(p+1)}(z = z' + z_p, z')}{\partial z} - \frac{1}{m^{(p)}} \frac{\partial G^{(p)}(z = z' + z_p, z')}{\partial z} = -\frac{2}{\hbar^2}. \end{cases} \quad (6.30)$$

Знайдемо тепер аналітичний вигляд розв'язків рівняння (6.27). В області зліва від наноструктури вони такі:

$$G^{(0)}(z, z') = e^{ikz} + B^{(0)}(z, z') e^{-ikz}, \quad (6.31)$$

для шарів наноструктури:

$$\begin{aligned} G^{(p)}(z, z') &= A^{(p)}(z, z') \text{Ai}[\zeta^{(p)}(z)] + B^{(p)}(z, z') \text{Bi}[\zeta^{(p)}(z)], \\ \zeta^{(p)}(z) &= \left(2m^{(p)} eF(z_{p_i}) / \hbar^2 \right)^{1/3} \left[(\Delta E_C(z) - E) / eF(z_{p_i}) - z \right], \end{aligned} \quad (6.32)$$

в області справа від наноструктури:

$$G^{(4)}(z, z') = A^{(4)}(z, z') e^{ikz}. \quad (6.33)$$

Далі, з урахуванням отриманих граничних умов (6.30) отримуються усі коефіцієнти $A^{(p)}(z, z')$, $B^{(p)}(z, z')$, що повністю однозначно визначає функцію Гріна.

Розглянемо перше рівняння системи (6.24). У випадку розгляду його для окремого шару наноструктури, в подальшому для зручності опускаємо індекс “ p ”:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + U(z) + U_E(z) + \bar{\Phi}_{def}(z) - E \right] \Psi_0(z) = 0. \quad (6.34)$$

Будемо приймати до уваги, що у зовні наноструктури вплив деформаційного потенціалу акустичних фононів відсутня. Складність побудови варіаційного методу для рівняння (6.34) полягає у тому, що хвильова функція у відкритій системі визначена для всієї області ($-\infty < z < +\infty$), а не тільки у області наноструктури як моделі закритої наноструктури. В такому випадку стандартні варіаційні підходи (для прикладу широко застосовні у теорії екситона [201]), засновані на варіації повної енергії електронної системи для пробної функції $\tilde{\Psi}_0(z)$ не взагалі в нашому випадку є не застосовними, оскільки при цьому виникатимуть інтеграли виду $\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi_0(z)|^2 dz \rightarrow \infty$, які є розбіжними.

Також очевидно, що шукана хвильова функція $\Psi_0(z)$ в областях зліва та справа від наноструктури має мати поведінку, яка описується такими умовами:

$$\begin{cases} \Psi_0(z)|_{z \rightarrow -\infty} = e^{ik_1 z} + B e^{-ik_1 z}, & k_1 = \sqrt{2m^{(0)}E} / \hbar, \\ \Psi_0(z)|_{z \rightarrow +\infty} = A e^{ik_2 z}, & k_2 = \sqrt{2m^{(0)}(E + eF_3 l)} / \hbar. \end{cases} \quad (6.35)$$

Будемо розглядати процес розсіювання електронного потоку на ефективному потенціалі наноструктури $U_{\text{eff}}(z) = U(z) + U_E(z) + \bar{\Phi}_{def}(z)$. В такому випадку рівняння (6.34) приводиться до вигляду:

$$\frac{d^2 \Psi_0(z)}{dz^2} + [k^2 - V_{\text{eff}}(z)] \Psi_0(z) = 0, \quad V_{\text{eff}}(z) = 2m U_{\text{eff}}(z) / \hbar^2. \quad (6.36)$$

Очевидно, що загальний розв'язок рівняння (6.36) може бути поданий у вигляді:

$$\Psi_0(z) = e^{ikz} - \int_{-\infty}^{+\infty} G(z, z') V_{\text{eff}}(z') \Psi_0(z') dz' \quad (6.37)$$

де інтегрування відбувається як у областях $(-\infty; 0)$ і $(z_3; +\infty)$ рух електрона можна уважати вільним, також і в області наноструктури $(0; z_3)$. Зрозуміло, що розв'язок (В4) задовольняє асимптотику (6.35) в чому можна безпосередньо переконатись,

виділяючи у виразі (6.37) доданки, які відповідають областям $(-\infty; 0)$ і $(z_3; +\infty)$ відповідно.

Для розв'язання даної задачі ми застосуємо варіаційний метод для амплітуди проходження, модифікуючи його наступним чином.

Спочатку розглянемо рівняння для хвильової функції, що відповідає хвилі, що падає на наноструктуру з $-\infty$ з амплітудою A :

$$\Psi(z) = Ae^{ik_1z} + \frac{1}{4\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} G(z, z')V_{\text{eff}}(z')\Psi(z')dz'. \quad (6.38)$$

Виділимо у виразі (6.38) доданки, що відповідають простору зліва та праворуч від наноструктури та її локалізації всередині неї відповідно, з урахуванням співвідношень (6.2) та (6.6):

$$\begin{aligned} \Psi(z) &= Ae^{ik_1z} + \int_{-\infty}^0 G(z, z')V_{\text{eff}}(z')\Psi(z')dz' + \int_0^{z_3} G(z, z')V_{\text{eff}}(z')\Psi(z')dz' + \\ &+ \int_{z_3}^{+\infty} G(z, z')V_{\text{eff}}(z')\Psi(z')dz' = \\ &= Ae^{ik_1z} + \int_0^{z_3} G(z, z') \cdot 0 \cdot \Psi(z')dz' + \int_0^{z_3} G(z, z')V_{\text{eff}}(z')\Psi(z')dz' + \int_{z_3}^{+\infty} G(z, z')V_{\text{eff}}(z')\Psi(z')dz' = \\ &= Ae^{ik_1z} + \int_0^{z_3} G(z, z')V_{\text{eff}}(z')\Psi(z')dz' + eF_3lA^{(4)}(z, z')e^{ik_2z} \int_{z_3}^{+\infty} e^{-ik_2z'}\Psi(z')dz'. \end{aligned} \quad (6.39)$$

Тоді амплітуда хвилі, що пройшла через ефективний потенціал наноструктури, розрахована на одиницю амплітуди хвилі, що падає, визначається наступним чином:

$$f = 1 + \frac{1}{A} \left[e^{-ik_1z} \int_0^{z_3} G(z, z')V_{\text{eff}}(z')\Psi(z')dz' + eF_3lA^{(4)}(z, z')e^{i(k_2-k_1)z} \int_{z_3}^{+\infty} e^{-ik_2z'}\Psi(z')dz' \right], \quad (6.40)$$

звідки ми отримуємо:

$$A = \frac{1}{f-1} \left[e^{-ik_1z} \int_0^{z_3} G(z, z')V_{\text{eff}}(z')\Psi(z')dz' + eF_3lA^{(4)}(z, z')e^{i(k_2-k_1)z} \int_{z_3}^{+\infty} e^{-ik_2z'}\Psi(z')dz' \right]. \quad (6.41)$$

Підставляючи значення амплітуди A у вираз (6.39), отримуємо:

$$\begin{aligned}
\Psi(z) &= \frac{e^{ik_1 z}}{f-1} \left[e^{-ik_1 z} \int_0^{z_3} G(z, z') V_{\text{eff}}(z') \Psi(z') dz' + eF_3 l A^{(4)}(z, z') e^{i(k_2 - k_1)z} \int_{z_3}^{+\infty} e^{-ik_2 z'} \Psi(z') dz' \right] + \\
&+ \frac{1}{4\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} G(z, z') V_{\text{eff}}(z') \Psi(z') dz' = \\
&= \frac{1}{f-1} \left[\int_0^{z_3} G(z, z') V_{\text{eff}}(z') \Psi(z') dz' + eF_3 l A^{(4)}(z, z') e^{ik_2 z} \int_{z_3}^{+\infty} e^{-ik_2 z'} \Psi(z') dz' \right] + \\
&+ \frac{1}{4\pi} \int_0^{z_3} G(z, z') V_{\text{eff}}(z') \Psi(z') dz' + \frac{eF_3 l A^{(4)}(z, z')}{4\pi} e^{ik_2 z} \int_{z_3}^{+\infty} e^{-ik_2 z'} \Psi(z') dz'.
\end{aligned} \tag{6.42}$$

Помножуючи на величину $V_{\text{eff}}(z)\Psi^*(z)$, де $\Psi^*(z)$ це спряжена хвильова функція та інтегруючи, ми будемо мати:

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(z) V_{\text{eff}}(z) \Psi(z) dz &= \frac{1}{f-1} \left\{ \int_0^{z_3} \int_0^{z_3} \Psi^*(z) V_{\text{eff}}(z) G(z, z') V_{\text{eff}}(z') \Psi(z') dz' + \right. \\
&+ \left. \left[eF_3 l A^{(4)}(z, z') \right]^2 \int_{z_3}^{+\infty} \Psi^*(z) e^{ik_2 z} dz \int_{z_3}^{+\infty} e^{-ik_2 z'} \Psi(z') dz' \right\} + \\
&+ \frac{1}{4\pi} \int_0^{z_3} \int_0^{z_3} \Psi^*(z) V_{\text{eff}}(z) G(z, z') V_{\text{eff}}(z') \Psi(z') dz' + \\
&+ \frac{(eF_3 l A^{(4)}(z, z'))^2}{4\pi} \int_{z_3}^{+\infty} \Psi^*(z) e^{ik_2 z} dz \int_{z_3}^{+\infty} e^{-ik_2 z'} \Psi(z') dz'
\end{aligned} \tag{6.43}$$

чи, після зміни порядку інтегрування:

$$\begin{aligned}
(f-1)^{-1} &= \frac{4\pi \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(z) V_{\text{eff}}(z) \Psi(z) dz - I}{4\pi I}; \\
I &= \int_0^{z_3} \int_0^{z_3} \Psi^*(z) V_{\text{eff}}(z) G(z, z') V_{\text{eff}}(z') \Psi(z') dz' + \left[eF_3 l A^{(4)}(z, z') \right]^2 \int_{z_3}^{+\infty} \Psi^*(z) e^{ik_2 z} dz \int_{z_3}^{+\infty} e^{-ik_2 z'} \Psi(z') dz.
\end{aligned} \tag{6.44}$$

Отже, варіаційний принцип формулюється для величини функціоналу:

$$\mathcal{U}[f] = [(f-1)^{-1}].$$

Знайдемо вид допустимих функцій, що задовольняють варіаційний принцип для амплітуди проходження f . Оскільки:

$$\bar{\Phi}_{def}(z) = \frac{i \left(1 - e^{i\omega_{ac}^{(n_1)}(q)\tau_{ph}}\right)}{\omega_{ac}^{(n_1)}(q)\tau_{ph}} \times \\ \times \sum_{p=1}^3 \sum_{s=1}^2 \left[A_{2s-1}^{(p)} \phi_{2s-1}^{(p)} e^{\lambda_s^{(p)}(z-z_p)} + A_{2s}^{(p)} \phi_{2s}^{(p)} e^{-\lambda_s^{(p)}(z-z_p)} \right] \left[\theta(z-z_{p-1}) - \theta(z-z_p) \right],$$

Тоді цей вираз перетворюється наступним чином:

$$\begin{aligned} A_{2s-1}^{(p)} \phi_{2s-1}^{(p)} e^{\lambda_s^{(p)}(z-z_p)} + A_{2s}^{(p)} \phi_{2s}^{(p)} e^{-\lambda_s^{(p)}(z-z_p)} &= A_{2s-1}^{(p)} \phi_{2s-1}^{(p)} e^{i\Lambda_s^{(p)}(z-z_p)} + A_{2s}^{(p)} \phi_{2s}^{(p)} e^{-i\Lambda_s^{(p)}(z-z_p)} = \\ &= A_{2s-1}^{(p)} \phi_{2s-1}^{(p)} \left[\cos \Lambda_s^{(p)}(z-z_p) + i \sin \Lambda_s^{(p)}(z-z_p) \right] + \\ &+ A_{2s}^{(p)} \phi_{2s}^{(p)} \left[\cos \Lambda_s^{(p)}(z-z_p) - i \sin \Lambda_s^{(p)}(z-z_p) \right] = \quad (6.45) \\ &= i \left[A_{2s-1}^{(p)} \phi_{2s-1}^{(p)} - A_{2s}^{(p)} \phi_{2s}^{(p)} \right] \sin \Lambda_s^{(p)}(z-z_p) + \left[A_{2s-1}^{(p)} \phi_{2s-1}^{(p)} + A_{2s}^{(p)} \phi_{2s}^{(p)} \right] \cos \Lambda_s^{(p)}(z-z_p) = \\ &= a_{2s-1}^{(p)} \cos \left(\Lambda_s^{(p)}(z-z_p) - \delta_{2s-1}^{(p)} \right), \end{aligned}$$

де зроблено такі позначення:

$$\Lambda_s^{(p)} = i\lambda_s^{(p)};$$

$$a_{2s-1}^{(p)} = \sqrt{\left(i \left[A_{2s-1}^{(p)} \phi_{2s-1}^{(p)} - A_{2s}^{(p)} \phi_{2s}^{(p)} \right] \right)^2 + \left[A_{2s-1}^{(p)} \phi_{2s-1}^{(p)} + A_{2s}^{(p)} \phi_{2s}^{(p)} \right]^2} = 2\sqrt{A_{2s-1}^{(p)} A_{2s}^{(p)} \phi_{2s-1}^{(p)} \phi_{2s}^{(p)}}; \quad (6.46)$$

$$\delta_{2s-1}^{(p)} = \operatorname{arctg} \frac{i \left[A_{2s-1}^{(p)} \phi_{2s-1}^{(p)} - A_{2s}^{(p)} \phi_{2s}^{(p)} \right]}{A_{2s-1}^{(p)} \phi_{2s-1}^{(p)} + A_{2s}^{(p)} \phi_{2s}^{(p)}}.$$

Для побудови пробних функцій зробимо таке. Спочатку знаходяться розв'язки диференціального рівняння, що містять нелінійний член - внесок деформаційного потенціалу акустичних фононів:

$$-f''(z) + \frac{2m^{(p)}}{\hbar^2} a_{2s-1}^{(p)} \cos \left(\Lambda_s^{(p)}(z-z_p) - \delta_{2s-1}^{(p)} \right) f(z) = 0. \quad (6.47)$$

Розв'язками цього рівняння є лінійна комбінація функцій Мат'є $\operatorname{se}(z)$ і $\operatorname{ce}(z)$:

$$f(z) = C_1 \operatorname{ce} \left[\frac{4m^{(p)} a_{2s-1}^{(p)}}{\hbar^2 \Lambda_s^{(p)2}}, \frac{1}{2} \left(\delta_{2s-1}^{(p)} - \Lambda_s^{(p)}(z-z_p) \right) \right] + C_2 \operatorname{se} \left[\frac{4m^{(p)} a_{2s-1}^{(p)}}{\hbar^2 \Lambda_s^{(p)2}}, \frac{1}{2} \left(\delta_{2s-1}^{(p)} - \Lambda_s^{(p)}(z-z_p) \right) \right] \quad (6.48)$$

Вважатимемо, що для функцій $f(z)$ виконується умова їхнього згасання на зовнішніх межах наноструктури:

$$f(z) \Big|_{\substack{z \rightarrow 0 \\ z \rightarrow z_3}} \rightarrow 0, \quad (6.49)$$

а також виконання умов їх зшивання на її межах:

$$\begin{cases} f^{(p)}(z) \Big|_{z=z_p} = f^{(p+1)}(z) \Big|_{z=z_p}, \\ \frac{1}{m^{(p)}} f'^{(p)}(z) \Big|_{z=z_p} = \frac{1}{m^{(p+1)}} f'^{(p+1)}(z) \Big|_{z=z_p}. \end{cases} \quad (6.50)$$

Надалі ми використовуватимемо функції $f(z)$ як координатні функції, а також враховуватимемо, що пробна хвильова функція повинна задовольняти граничним умовам типу (6.50), еквівалентним умовам неперервності хвильової функції потоку ймовірності на межах наноструктури. Тоді пробна функція в межах окремого шару наноструктури представляється у такому вигляді:

$$\Psi^{(p)}(z) = \sum_{i=1}^n \alpha_i \psi_i^{(p)}(z) + \psi^{(p)}(z) \sum_{j=1}^m \beta_j f_j^{(p)}(z) = \psi^{(p)}(z) \left\{ \sum_{i=1}^n \alpha_i + \sum_{j=1}^m \beta_j f_j^{(p)}(z) \right\}, \quad (6.51)$$

де функції $\Psi_i^{(p)}(z)$ вибираються те щоб вони задовольняли граничним умовам для сусідніх шарів наноструктури. Їх можна вибрати, наприклад, у такому вигляді:

$$\begin{aligned} \psi^{(p)}(z) &= a^{(p)} \text{Ai}[\zeta^{(p)}(z)] + b^{(p)} \text{Bi}[\zeta^{(p)}(z)]; \\ \zeta^{(p)}(z) &= \left(2m^{(p)} eF(z_{p_i}) / \hbar^2 \right)^{1/3} \left[(\Delta E_C(z) - E) / eF(z_{p_i}) - z \right]. \end{aligned} \quad (6.52)$$

Таким чином, розв'язки рівняння (6.24) є такими:

$$\begin{aligned} \Psi_0(z) &= \left(e^{ik_1 z} + B_0 e^{-ik_1 z} \right) \theta(-z) + A_4^{(0)} e^{ik_2 z} \theta(z - z_3) + \\ &+ \sum_{p=1}^2 \psi^{(p)}(z) \left\{ \sum_{i=1}^n \alpha_i + \sum_{j=1}^m \beta_j f_j^{(p)}(z) \right\} \left[\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p) \right]. \end{aligned} \quad (6.53)$$

Далі використовуючи функції (6.53) у функціоналі (6.44), множини значень коефіцієнтів $\{\alpha_i\}$ і $\{\beta_j\}$ отримуються з умов існування екстремуму:

$$\frac{\partial v}{\partial \alpha_i} = 0; \quad \frac{\partial v}{\partial \beta_j} = 0, \quad i = \overline{1..n}, \quad j = \overline{1..m}, \quad (6.54)$$

при цьому значення n береться довільним, а значення m вибирається рівним числу гілок фононного спектра при заданому значенні хвильового вектора q .

Розв'язки рівняння (6.25) наступні:

$$\Psi_{\pm}(z) = \psi_{\pm}(z) + \tilde{\Psi}_{\pm}(z), \quad (6.55)$$

де розв'язки однорідних рівнянь (6.25):

$$\begin{aligned} \psi_{\pm}(z) = & B_0^{\pm} e^{-ik_1^{\pm}z} \theta(-z) + A_4^{\pm} e^{ik_2^{\pm}z} \theta(z - z_3) + \\ & + \sum_{p=1}^2 \psi^{(p)}(z) \left\{ \sum_{i=1}^n \alpha_i + \sum_{j=1}^m \beta_j f_j^{\pm(p)}(z) \right\} \left[\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p) \right]; \\ \psi^{\pm(p)}(z) = & a^{\pm(p)} \text{Ai} \left[\zeta^{\pm(p)}(z) \right] + b^{\pm(p)} \text{Bi} \left[\zeta^{\pm(p)}(z) \right]; \end{aligned} \quad (6.56)$$

$$k_1^{\pm} = \sqrt{2m^{(0)}(E \pm \Omega) / \hbar}; \quad k_2 = \sqrt{2m^{(0)}(E + eF_3l \pm \Omega) / \hbar};$$

$$\zeta^{\pm(p)}(z) = \left(2m^{(p)} eF(z_{p_1}) / \hbar^2 \right)^{1/3} \left[(\Delta E_C(z) - E \mp \Omega) / eF(z_{p_1}) - z \right].$$

а частинні розв'язки неоднорідних рівнянь $\tilde{\Psi}_{\pm}(z)$ (не показані через їх громіздкість) отримуються з використанням методу Лагранжа з урахуванням співвідношення (6.45) та функцій виду (6.48) як фундаментальні розв'язки.

Тунельний струм через наноструктуру при скінченних значеннях температури розраховується за співвідношенням Есакі:

$$J(E) = \frac{e\tilde{m}k_B T}{2\pi^2 \hbar^3} \int_0^{\infty} D(E) \ln \left\{ \frac{1 + e^{(E_F - E)/k_B T}}{1 + e^{(E_F - E - eV)/k_B T}} \right\} dE, \quad (6.57)$$

де \tilde{m} - усереднена ефективна маса електрона в наноструктурі, E_F - рівень Фермі, коефіцієнт прозорості визначається наступним чином:

$$D(E) = \left| A_4^{(0)}(E) \right|^2. \quad (6.58)$$

Парціальні складові динамічної провідності наноструктури, що зумовлені потоками електронів, спрямованими на її вхід та вихід, розраховувалися з використанням співвідношень (6.55), (6.56):

$$G^+(\Omega) = \frac{e^2 \hbar \Omega l n_0}{2m^{(0)} U^2} \left(k_2^+ |A_4^+|^2 - k_2^- |A_4^-|^2 \right) \exp\left(-\frac{E_n - E_F}{kT}\right);$$

$$G^-(\Omega) = \frac{e^2 \hbar \Omega l n_0}{2m^{(0)} U^2} \left(k_{+1}^{(0)} |B_0^+|^2 - k_{-1}^{(0)} |B_0^-|^2 \right) \exp\left(-\frac{E_n - E_F}{kT}\right),$$
(6.59)

де n_0 – початкова концентрація електронів, $\Omega = \hbar\omega$, $U = e\xi z_3$.

6.2. Вплив акустичних фононів на спектральні характеристики електронних квазістаціонарних станів у відкритих нітридних наносистемах при різних температурах. Імплементція розвиненого варіаційного методу

Застосування результатів розвиненої нами теорії та варіаційного методу до безпосередніх обчислень виконувалось з використанням фізичних та геометричних параметрів двобар'єрної наноструктури, досліджуваної експериментально у праці [202]. Геометричні параметри РТС у відповідності до позначень на Рис. 6.1 такі: потенціальні бар'єри: $b_1 = b_2 = 2$ нм, ширина потенціальної ями - $w = 3$ нм. Ефективні маси електрона в наноструктурі:

$m^{(0)} = m(\text{GaN}) = 0.228m_e$; $m^{(1)} = m(\text{AlN}) = 0.4m_e$, m_e - маса вільного електрона. Перш ніж виконувати дослідження впливу акустичних фононів на електронні КСС, тунельний струм і т.д., спершу встановимо необхідні для цього спектр цих фононів та їхню групову швидкість як функції хвильового вектора q . Значення межі енергій, що відповідають акустичним фононами знаходяться в районі значення ~ 35 меВ, що накладає обмеження на максимально можливі значення хвильового вектора ~ 8 нм⁻¹. Як видно з Рис. 6.2а спектр акустичних фононів досліджуваної наноструктури складається із двох груп віток утворених залежностями для флексуральних (суцільні лінії) та ділататіональних (штрихові лінії) мод. Безпосередньо вдаватись до аналізу різниці між цими типами фононів ми не будемо, лише посилаючись до попереднього розділу дисертації, де це питання розглядалось більш детально. Отже, спектр віток першої групи (подані лініями червоного кольору) є розміщений в інтервалі $\Omega_{\text{GaN}}^T \leq \Omega_n \leq \Omega_{\text{AlN}}^T$, де $\Omega_{\text{GaN}}^T, \Omega_{\text{AlN}}^T$ - відповідні залежності спектру поперечних акустичних фононів від q для масивних кристалів.

Враховуючи, що вітки Ω_n беруть свій початок при відповідних значеннях Ω_{GaN}^T , квазілінійно зростають в межах згаданого інтервалу, маючи таким чином обмежений характер. Розраховані групові швидкості для цих фононів подано на Рис. 6.2b аналогічним кольором (зліва направо у порядку зростання відповідних енергій) і також деталізовано на цьому ж рисунку. Початкові значення групової швидкості співпадають із значенням групової швидкості поперечних акустичних хвиль у масивному кристалі AlN (v_{AlN}^T), далі із зміною q перетинають межу значення групової швидкості у масивному кристалі GaN (v_{GaN}^T).

Зазначимо, що залежності енергій другої групи віток мають ряд певних особливостей. Вони починаються при $q \rightarrow 0$, мають спочатку квазіквадратичну залежність. При досягненні залежностями Ω_n значень Ω_{AlN}^L всередині інтервалу $\Omega_{\text{GaN}}^L \leq \Omega_n \leq \Omega_{\text{AlN}}^L$ ($\Omega_{\text{GaN}}^L, \Omega_{\text{AlN}}^L$ - відповідні залежності спектру поздовжніх акустичних фононів від q для масивних кристалів) вони ведуть себе аналогічно до раніше розглянутих залежностей першої групи. Залежності групових швидкостей цих акустичних фононів (зліва направо у порядку зростання відповідних енергій) також подано на Рис. 6.2b лініями синього кольору. Як видно з рисунка, залежності групових швидкостей виникаючих при $q \rightarrow 0$ мають своєю верхньою межею групову швидкість поздовжніх хвиль v_{AlN}^L перетинаючи значення $v_{\text{GaN}}^L, v_{\text{GaN}}^T, v_{\text{GaN}}^T$.

Встановлені обчисленнями енергетичний спектр та групові швидкості акустичних фононів дозволяють тепер виконати розрахунок часів фононної релаксації згідно за співвідношеннями (6.19)-(6.21). На Рис. 6.3 приведено залежності від ширини потенціальної ями для складових $\tau_U, \tau_B, \tau_{ph}$, крім того на цьому ж рисунку наведено залежності від w для часів життя для перших двох електронних КСС τ_1, τ_2 . Слід зауважити, що залежності $\tau_U, \tau_B, \tau_{ph}$ мають в загальному випадку обернено пропорційну тенденцію для зменшення із ростом значень w . Проте на цих залежностях можна спостерігати формування максимумів, поява яких зумовлена внеском від фононних рівнів, які виникають при значеннях w , відповідних цим

максимумам. Як видно з Рис. 6.3, умова $\tau_n \leq \tau_{ph}$ виконується на всьому діапазоні зміни w . Це є підтвердженням легітимності розгляду усередненої величини $\bar{\Phi}_{def}(z)$.

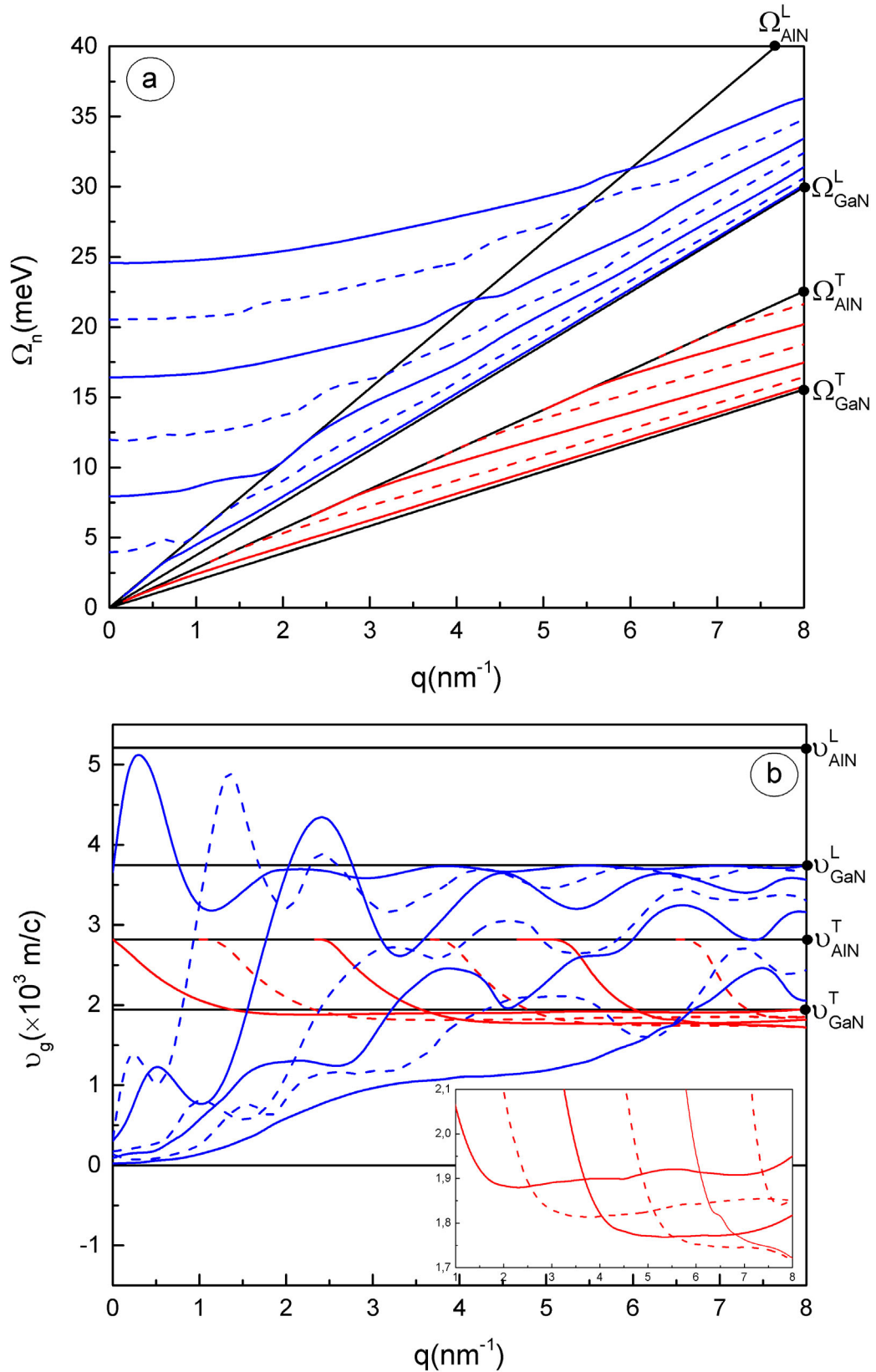


Рис. 6.2. Спектр акустичних фононів (а) та їх групові швидкості (б) розраховані як функції хвильового вектора q .

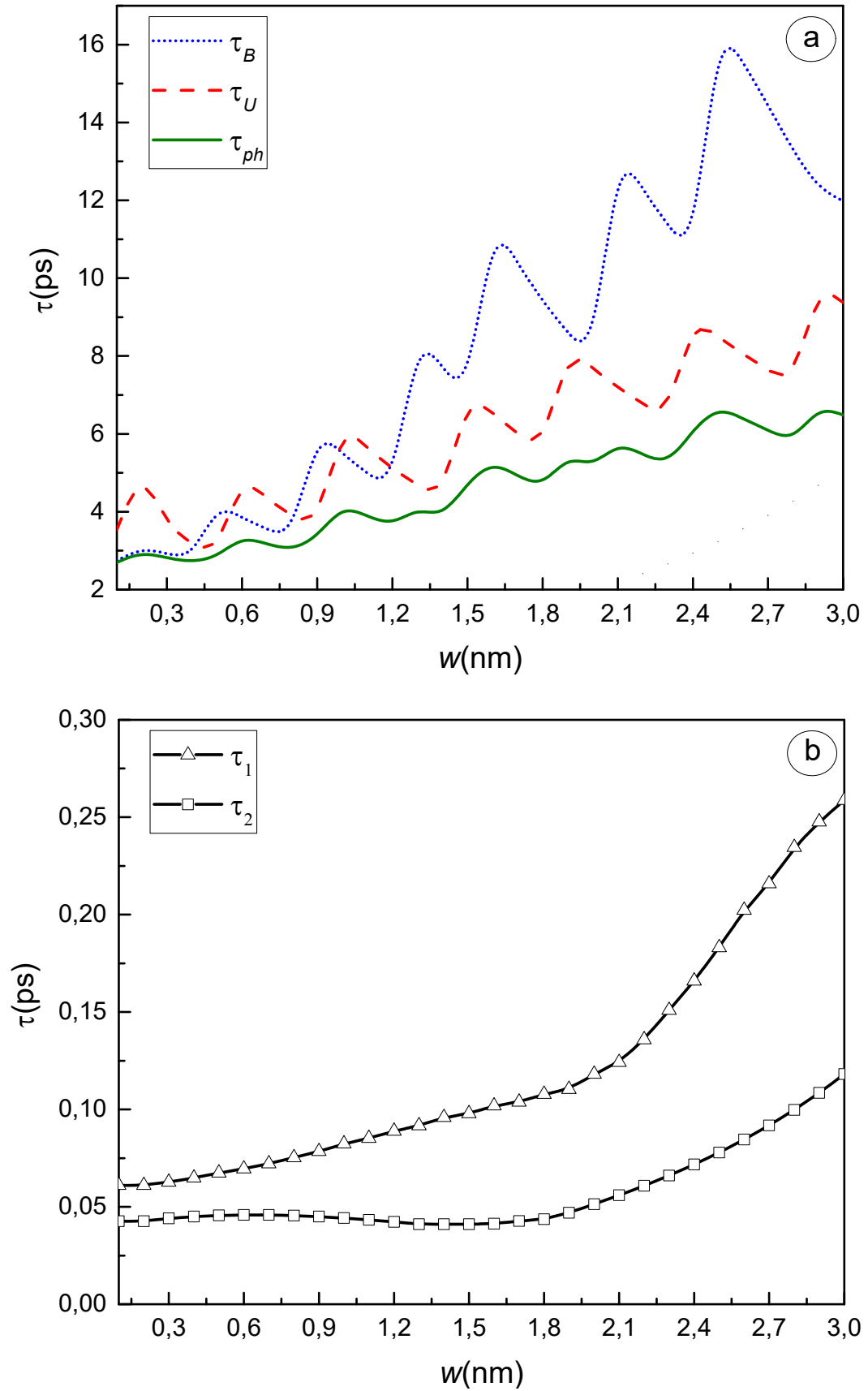


Рис. 6.3. Компоненти часу релаксації фононів (а) та часів життя перших двох електронних КСС (б) розраховані як функції ширини ями w .

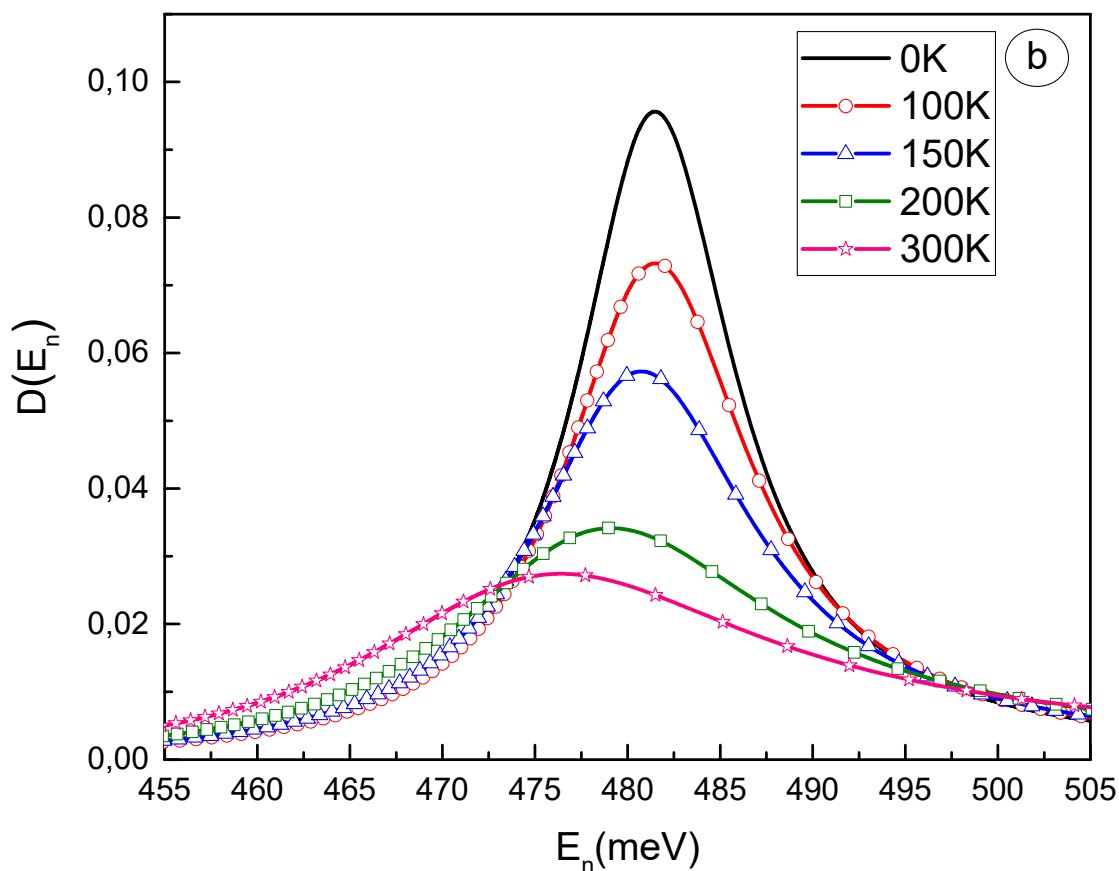
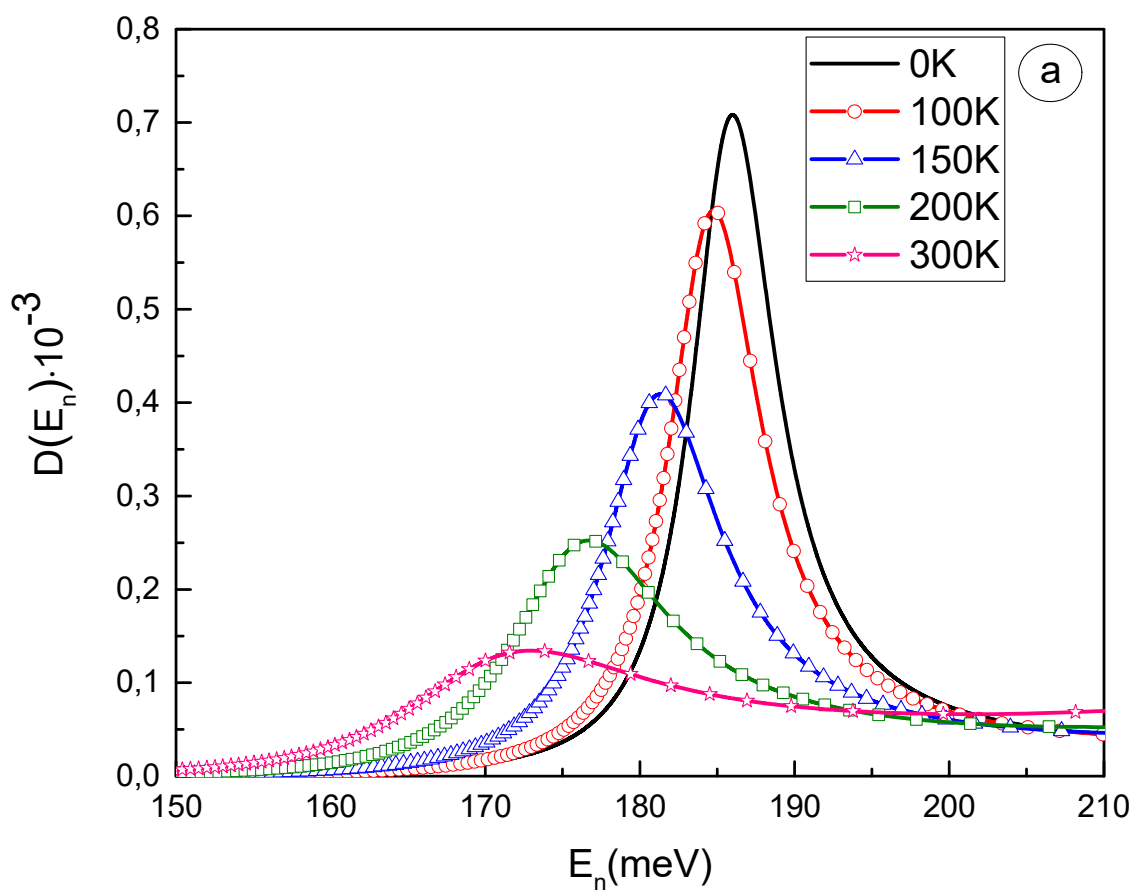


Рис. 6.4. Коефіцієнт прозорості наноструктури в залежності від енергії електронів, розрахований в околі першого (а) та другого (б) КСС за різних температур.

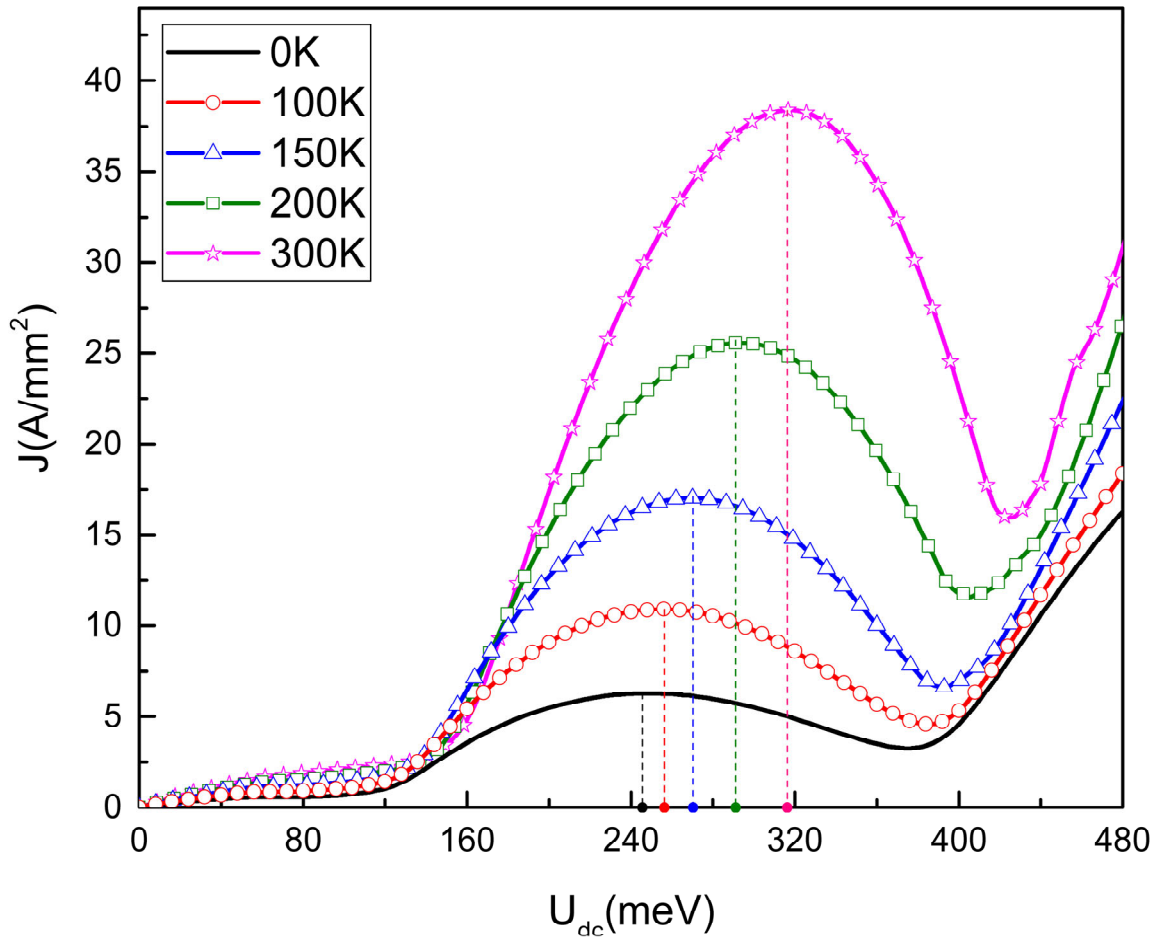


Рис. 6.5. Густина тунельного струму через наноструктуру в залежності від величини прикладеного постійного поздовжнього електричного поля, розрахована при різних температурах.

Тепер можна безпосередньо приступити до реалізації варіаційного методу. Застосування співвідношень (6.54) до функціонала (6.44) дає систему рівнянь, розв'язки якої відшукалися з використанням методів бібліотеки NumPy для мови Python. Отримана множина значень мінімізуючих функціонал (6.44) варіаційних коефіцієнтів $\left\{ a = \sum_{i=1}^n \alpha_i; \beta_1, \beta_2, \dots, \beta_m \right\}$ встановлюється щоразу для заданих значень температури, зовнішнього постійного електричного поля та геометричної конфігурації наносистеми. Розраховані хвильові функції (6.53) дозволяють розрахувати коефіцієнт прозорості наноструктури згідно співвідношення (6.58). Результати таких розрахунків коефіцієнта прозорості в околі перших двох електронних КСС для різних значень температури наведено на Рис. 6.4а, б. Як видно з Рис. 6.4 із збільшенням значень температури коефіцієнт прозорості еволюціонує

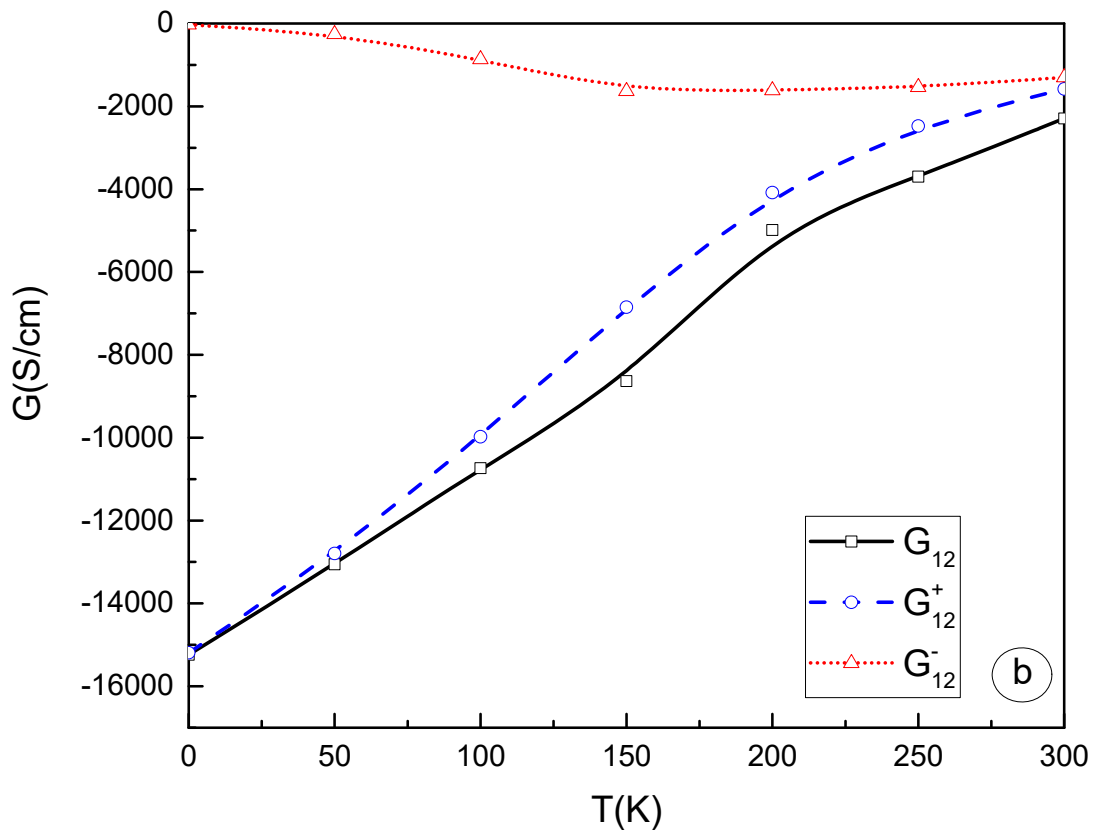
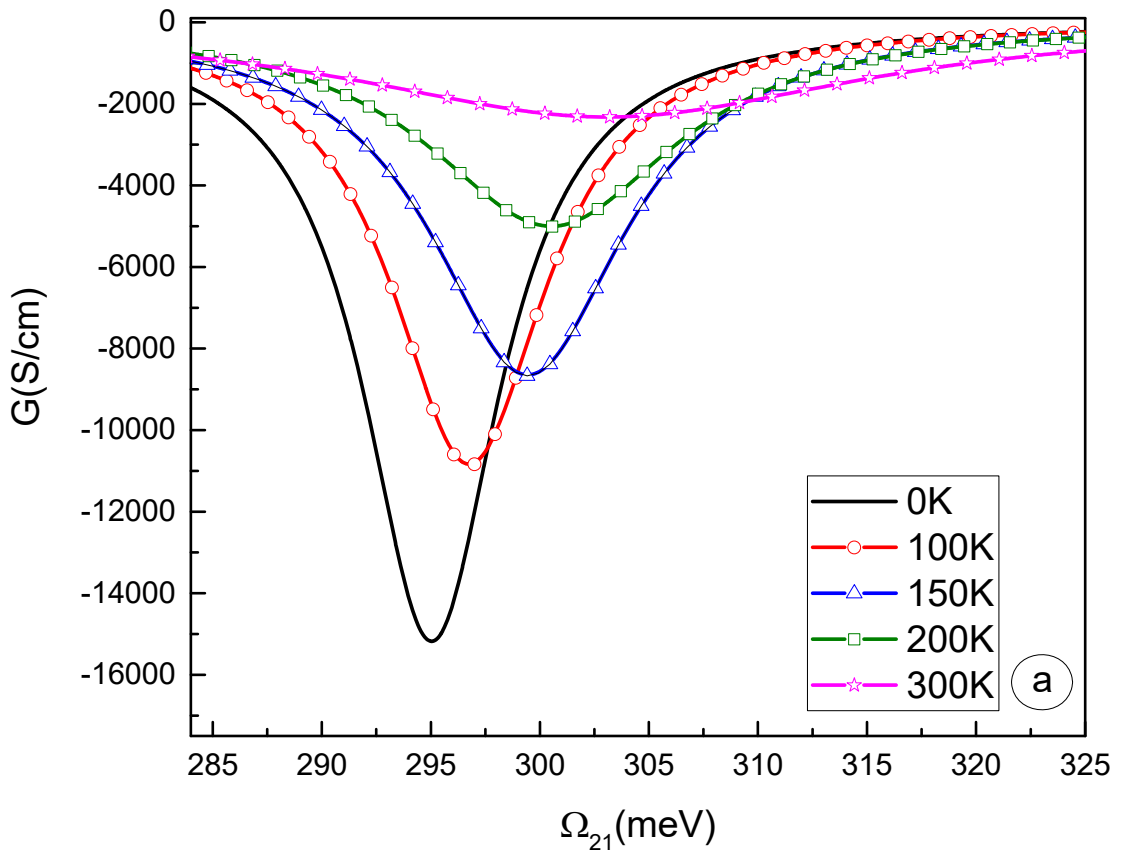


Рис. 6.6. Активна динамічна провідність G_{21} в залежності від енергії квантового переходу, розрахована за різних температур (a), а також температурна залежність повної провідності та її парціальних складових (b).

таким чином, що його максимуми зміщуються в енергетичній шкалі вліво, величини цих максимумів зменшуються. Для прикладу перший електронний КСС при $T=100\text{K}$ зміщується на величину $\Delta E_1 = 1.093\text{ meV}$, то при $T=300\text{K}$ ця величина вже складає $\Delta E_1 = 11.592\text{ meV}$. Для другого електронного КСС ці значення дещо менші: при $T=100\text{K}$ ми маємо $\Delta E_2 = 0.094\text{ meV}$, а при $T=300\text{K}$ отримуємо, що $\Delta E_2 = 6.769\text{ meV}$. Таким чином із зростанням температури збільшується величина енергії квантового переходу $1 \rightarrow 2$. Крім того, важливим ефектом, який в даному випадку спостерігається є те, що має місце збільшення резонансних ширин Γ_n електронних КСС. Так, наприклад резонансна ширина Γ_1 першого електронного КСС, розрахована при $T=300\text{K}$ перевищує резонансну ширину, розраховану при $T=0\text{K}$ більш майже в чотири рази, а резонансна ширина Γ_2 для другого електронного КСС більш ніж у три рази. Оскільки як відомо $\tau_n \sim \Gamma_n^{-1}$, то підсумовуючи слід зробити висновок, що вплив фононної підсистеми полягає у зменшенні часів життя для електронних КСС. Крім того встановлені вище ефекти дещо більше виражені для першого КСС ніж для другого.

На Рис. 6.5 наведено результати розрахунків густини тунельного струму у залежності від напруженості постійного поздовжнього електричного поля U_{dc} .

Розрахунки виконувались для тих самих значень температури, що і коефіцієнти проходження. Аналогічно також розглянуто і тривіальний випадок, коли $T=0\text{K}$ і вплив фононної підсистеми відсутній. Рівень Фермі E_F розраховувався з умови зарядової нейтральності наносистеми для концентрації носіїв заряду 10^{18} cm^{-3} , що для нашого випадку дає значення 160 meV . Як видно з Рис. 6.5, залежності $J(U_{dc})$ представляє собою однопікові криві, максимуми яких збільшуються із ростом температури. Слід зауважити, що вплив фононної підсистеми проявляється зміщенні положень цих максимумів вправо: при $T=0\text{K}$ величина прикладеної напруженості електричного поля, яка відповідає максимуму густини тунельного струму відповідає енергії 246 meV , а при $T=300\text{K}$ ця величина складає вже 316 meV . Таким чином в ситуації з прямим практичним застосуванням наноструктур для врахування впливу акустичних фононів й забезпечення оптимальної величини тунельного струму

необхідно враховувати факт необхідності збільшення величини прикладеного електричного поля.

Зазвичай, найбільш загальним способом встановлення характеристик електронних КСС та тунельного транспорту є дослідження властивостей активної провідності наноструктури. З цією метою виконувався розрахунок провідності досліджуваної наносистеми, сформованої у випромінювальному квантовому переході $2 \rightarrow 1$ за різних значень температури, а також температурні залежності складових провідності. Результати цих розрахунків подано на Рис. 6.6а, б. Як можна бачити з Рис. 6.6а, залежності провідності від частоти квантового переходу для заданих значень температури мають форму квазілоренцових кривих з такими ж резонансними ширинами як для першого електронного КСС, розрахованими для цих же значень температури. Слід звернути увагу, що за рахунок фононної підсистеми спостерігається зменшення величин максимумів залежностей G_{21} з ростом температури, провідність розрахована при 300К виявляється меншою ніж розрахована при 0К практично в 7 разів. Зауважимо, що в даному випадку нема розбіжностей з вище розглядуваним випадком зростання величини тунельного струму, так як струм через наносистему на практиці безпосередньо визначається інтегральною величиною динамічної провідності: $G_{21} = \left(\int_0^{\infty} G_{21}(E_n, \Omega) d\Omega \right) / \Omega_{21}$, яка

буде зростати із збільшенням температури в силу “розмитості” підінтегральної функції по мінізоні, ширина якої при цьому також збільшується. Проте найголовніший ефект, який ми встановили, демонструють залежності електронної провідності на її парціальних складових від температури, які подано на Рис. 6.6б.

Умовою оптимального функціонування наноприладу є перевага провідності G_{12}^+ , що задається електронним потоком, спрямованим на вихід з наноструктури, над складовою G_{12}^- , що задається електронним потоком у протилежному напрямку ($G_{12}^+ \gg G_{12}^-$). Як видно із цих залежностей, із збільшенням температури відбувається перерозподіл парціальних складових провідності у її сумарній величині: складова

G_{12}^- зростає, а G_{12}^+ зменшується. При температурі 300К парціальні складові провідності фактично вирівнюються. Це ставить безпосередню перешкоду ефективній роботі наноприладу й потребує коректування його характеристик, зокрема геометричного дизайну та величини прикладеного електричного поля.

6.3. Теорія електронного тунельного транспорту в багатошарових нітридних системах при незалежній генерації електромагнітних хвиль у всіх квантових ямах. Класи точних розв'язків повного рівняння Шредінгера для залежного від часу електронного гамільтоніана

У сучасній фізиці низьковимірних систем важливим предметом досліджень є фізичні процеси, що відбуваються багатошарових напівпровідникових надгратках – резонансно-тунельних структурах. Це пов'язано з фактом того, що генерація чи поглинання електромагнітного поля внаслідок квантових електронних переходів разом з із тунелюванням утворюваних електронних потоків є основною роботи квантових каскадних лазерів (ККЛ) та детекторів (ККД). Найбільш повним описом таких процесів є можливим на основі моделі відкритої наносистеми, згідно якої електронні стани є квазістаціонарними й виникає необхідність описувати взаємодію електронів з електромагнітним полем залежним від часу гамільтоніаном. Для резонансно-тунельних структур, що створені на основі сполук арсеніду галію, що виступають у якості каскадів ККЛ чи ККД принципова енергетична схема є організованою таким чином, що лише один квантовий електронний перехід є випромінювальним (поглинальним), а решта квантових переходів є безвипромінювальними з енергіями рівними енергіям оптичних фононів в GaAs чи AlAs напівпровідниках. Це дозволяє забезпечувати електронний транспорт через наноструктуру за рахунок так-званого механізму “фононної драбини” [203-205]. Для такого випадку ефективні результати дає застосування однофотонного наближення, згідно якого хвильова функція, що є розв'язком повного рівняння Шредінгера подається у вигляді: $\Psi(z,t) = \Psi_0(z)e^{-i\omega_0 t} + \Psi_{+1}(z)e^{-i(\omega_0+\omega)t} + \Psi_{-1}(z)e^{-i(\omega_0-\omega)t}$, де $\Psi_0(z)$ - розв'язок стаціонарної задачі з незбуреним гамільтоніаном, $\Psi_{+1}(z)$ і $\Psi_{-1}(z)$ -

поправки, які видно із множників при них, враховують однофотонні процеси поглинання та випромінювання електромагнітного поля. Для нітридних квантових каскадних приладів фізичні процеси мають більш складний характер з точки зору взаємодії тунельованого електронного потоку з електромагнітним полем, оскільки всі електронні переходи в силу широкої зони провідності є пов'язаними з випромінюванням чи поглинанням електромагнітного поля [205-208]. Зрозуміло, що такі процеси слід відрізнити від випадків так-званого фотон-супровідного тунелювання [209, 210], які мають цілком іншу фізичну природу. Як буде продемонстровано далі це приводить до цілком нової теоретичної задачі з відшукування розв'язків повного рівняння Шредінгера з залежним від часу потенціалом в якому враховується внесок від взаємодії електронного потоку з суперпозицією від електромагнітних полів з різними частотами та амплітудами.

Щодо теоретичних робіт, які стосуються відшукування розв'язків рівняння Шредінгера з часозалежними потенціалами, то слід виділити ряд чудових праць [211-218], які беруть свій початок від фундаментальної праці Lewis та Riesenfeld [219] та в основному пов'язані із дослідженням динамічних інваріантів у застосуванні до гармонічних та ангармонічних осциляторів, проблем, що виникають при дослідженні функцій потенціальної енергії молекул в представленні Морзе, Пешля-Теллера та ін. [211-218, 220-223]. Хоча тематика цих праць і є віддаленою від задач, що виникають у теорії тунельного електронного транспорту, про де-факто є дві роботи [224, 225], що є своєрідним містком між згаданими напрямками досліджень. В цих працях метод Льюїса та Різенфілда застосовано до задачі з відшукування розв'язків рівняння Шредінгера для частинки, що локалізована у потенціальній ямі з безмежно високими стінками. Зрозуміло, що в силу іншого роду завдань, які ставили автори цих робіт, ці результати не можуть бути застосованими до випадку електронного тунельного транспорту з ряду причин. Це насамперед той факт, що у випадку тунельного транспорту наносистеми є відкритими із скінченним часом життя електрона у квазістаціонарних станах. Для моделі закритої наносистеми з безмежно високими стінками електронні стани є стаціонарними, тому важливі для нас характеристики квазістаціонарних станів, коефіцієнт прозорості,

тунельний струм не можуть бути розрахованими апіорі. Відповідно проблема повного описання поведінки електронної хвильової функції в області відкритої наносистеми з довільною кількістю квантових переходів з генерацією чи поглинанням електромагнітного поля залишається відкритою. Послідовне розв'язання цієї проблеми, актуальної для тунельного транспорту і нітридних та суміжних наносистемах подано далі.

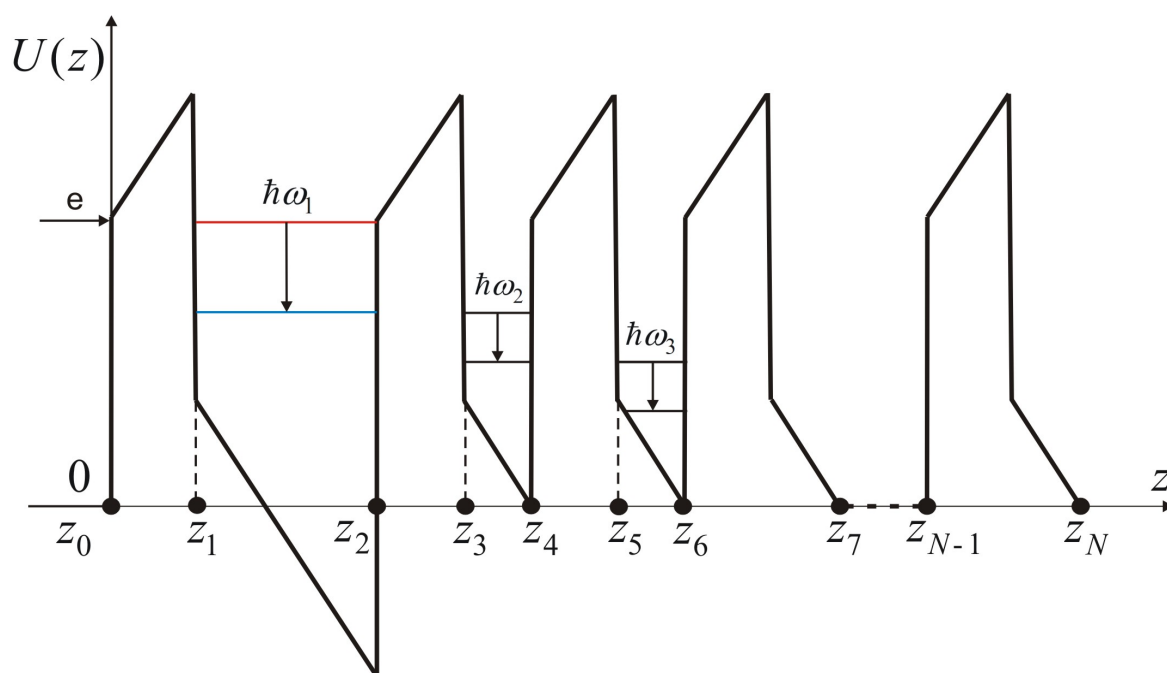


Рис. 6.7. Геометрична та енергетична схема багатоямкової нітридної наноструктури в кожній потенціальній ямі якої відбуваються квантові переходи з генерацією електромагнітного поля

Модель тунельного електронного транспорту для повного рівняння Шредінгера з часозалежним потенціалом будується так як показано далі. Розглядається тунелювання електронного потоку через відкриту багатоямкову наносистему, що містить M потенціальних ям. Геометрична схема цієї наносистеми показана на Рис. 6.7. Приймається, що енергія електронів, що потрапляють на наносистему зліва є близькою до енергії довільного із її енергетичних рівнів, що утворені розмірним квантуванням. При цьому ми вважаємо, що в кожній з квантових ям наносистеми відбувається квантовий перехід з генерацією електромагнітного поля з амплітудою ξ_l та частотою ω_l , де $l(0 < l \leq M)$ - номер

квантової ями. Ми будемо уважати, що перша квантова яма відповідає активній зоні каскаду, а електронний квантовий перехід у ній генерує робочу частоту наноприладу. Решта наносистеми відповідає за релаксацію та тунелювання електронного потоку, проте як вказано вище ми приймаємо всі квантові переходи випромінювальними. Таким чином, в загальному випадку приймається, що тунельований електронний потік взаємодіє з суперпозицією генерованих електромагнітних полів. Гамільтоніан такої взаємодії у дипольному наближенні має вигляд:

$$\begin{aligned}
 U_{e-em}(z,t) &= -\sum_{l=1}^M e \left\{ z [\theta(z) + \theta(z - z_N)] + z_N \theta(z - z_N) \right\} \xi_l \left(e^{i\omega_l t} + e^{-i\omega_l t} \right) = \\
 &= -2e \left\{ z [\theta(z) + \theta(z - z_N)] + z_N \theta(z - z_N) \right\} \sum_{l=1}^M \xi_l \cos \omega_l t.
 \end{aligned} \tag{6.60}$$

Крім того в моделі прямокутних потенціалів без урахування того, як деформується потенціальний профіль наносистеми під впливом внутрішніх чи зовнішніх полів він може бути поданим у вигляді:

$$U(z) = U_0 \sum_{p=0}^N \left[\theta(z - z_{2p}) - \theta(z - z_{2p+1}) \right]. \tag{6.61}$$

Для нітридних наносистем важливе значення має внутрішнє електричне поле, яке має різний знак у сусідніх шарах наносистеми унаслідок різного знака сумарної величини поляризації, що його визначає (більш детально про розрахунок цих полів див. Розділ 3 дисертації). Взаємодія тунельованого електрона з таким електричним полем у випадку відкритої наносистеми визначається виразом:

$$\begin{aligned}
 U_e(z) &= e \sum_{p=0}^N (-1)^p (F_{p+1} z - F_p z_p) \left[\theta(z - z_p) - \theta(z - z_{p+1}) \right], \quad F_0 = F_{N+1} = 0; \\
 U_e(z)|_{z < 0} &= 0; \quad U_e(z)|_{z > z_N} = e(-1)^{N+1} F_N z_N.
 \end{aligned} \tag{6.62}$$

Таким чином рух електрона в наносистемі описується повним рівнянням Шредінгера з сумарним ефективним потенціалом, що явно залежить від часу в силу співвідношення (6.60):

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(z,t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{\mu(z)} \frac{\partial}{\partial z} + U(z) + U_e(z) + U_{e-em}(z,t) \right] \Psi(z,t), \tag{6.63}$$

де ефективна маса електрона така:

$$\mu(z) = \mu_0 [\theta(-z) + \theta(z - z_N)] + \sum_{p=1}^N \mu_p [\theta(z - z_p) - \theta(z - z_{p+1})]; \mu_p = \begin{cases} \mu_0, & \text{ями} \\ \mu_p, & \text{бар'єри} \end{cases} \quad (6.64)$$

Для подальшого нам є доцільним отримати рівняння Шредінгера, записане для окремого шару. Для цього ми скористаємось співвідношеннями (6.60)-(6.62) та (6.64), а також властивістю функції Хевісайда $\theta(z)$. Тоді для шару наносистеми, який для визначення відповідає потенціальному бар'єру отримується таке рівняння:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_p(z, t)}{\partial t} = \left[\frac{P^2}{2\mu_p} + U_0 + (-1)^p e(F_{p+1}z - F_p z_p) - 2ez \sum_{l=1}^M \xi_l \cos \omega_l t \right] \Psi_p(z, t); \quad (6.65)$$

$$\frac{P^2}{2\mu_p} = -\frac{\hbar^2}{2\mu_p} \frac{\partial^2}{\partial z^2}.$$

Оскільки гамільтоніан у рівнянні (6.65) можна подати, виділивши його складові як:

$$H_p(t) = \frac{P^2}{2\mu_p} + U_0 + (-1)^{p+1} eF_p z_p + T_p(t)z; \quad (6.66)$$

$$T_p(t) = (-1)^p eF_{p+1} - 2e \sum_{l=1}^M \xi_l \cos \omega_l t,$$

то звідси тепер легко бачити, що він є ермітовим, оскільки кожна із його складових є ермітовою.

Це дає підстави шукати квантово-механічний інваріант згідно методу Льюїса-Різенфілда [219]. Для цього використовується рівняння:

$$\frac{dI_p(t)}{dt} = \frac{\partial I_p(t)}{\partial t} - \frac{i}{\hbar} [I_p(t), H_p(t)] = 0, \quad (6.67)$$

З урахуванням структури гамільтоніана (6.66) ми прийmemo до розгляду такий лінійний інваріант:

$$I_p(t) = \alpha^{(p)}(t)P + \beta^{(p)}(t)z + \gamma^{(p)}(t). \quad (6.68)$$

Маємо:

$$\frac{\partial I_p(t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} [\alpha^{(p)}(t)P + \beta^{(p)}(t)z + \gamma_p(t)] = \frac{\partial \alpha^{(p)}}{\partial t} P + \frac{\partial \beta^{(p)}}{\partial t} z + \frac{\partial \gamma_{(p)}}{\partial t}. \quad (6.69)$$

Звідси, використавши (6.68) у рівнянні (6.67), отримуємо:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial \alpha^{(p)}}{\partial t} P + \frac{\partial \beta^{(p)}}{\partial t} z + \frac{\partial \gamma^{(p)}}{\partial t} - \\
& - \frac{i}{\hbar} \left[\alpha^{(p)}(t) P + \beta^{(p)}(t) z + \gamma^{(p)}(t), \frac{P^2}{2\mu_p} + U_0 + (-1)^{p+1} e F_p z_p + T_p(t) z \right] = \\
& = \left[\alpha(t) P, \frac{P^2}{2\mu} \right] + [\alpha(t) P, U_0] + [\alpha(t) P, T(t) z] + \\
& + \left[\beta(t) z, \frac{P^2}{2\mu} \right] + [\beta(t) z, U_0] + [\beta(t) z, T(t) z] + \\
& + \left[\gamma(t), \frac{P^2}{2\mu} \right] + [\gamma(t), U_0] + [\gamma(t), T(t) z].
\end{aligned} \tag{6.70}$$

Обчислимо тепер усі комутатори у співвідношенні (6.70):

$$\begin{aligned}
& \left[\alpha(t) P, \frac{P^2}{2\mu} \right] = \frac{\alpha(t)}{2\mu} [P, P^2] = 0; \\
& [\alpha(t) P, U_0] = 0; \\
& [\alpha(t) P, T(t) z] = \alpha(t) T(t) [P, z] = -i\hbar \alpha(t) T(t); \\
& \left[\beta(t) z, \frac{P^2}{2\mu} \right] = \frac{\beta(t)}{2\mu} [z, P^2] = i \frac{\beta(t)}{\mu} \hbar P \\
& [\beta(t) z, U_0] = \beta(t) [z, U_0] = 0; \\
& [\beta(t) z, T(t) z] = \beta(t) T(t) [z, z] = 0; \\
& \left[\gamma(t), \frac{P^2}{2\mu} \right] = \frac{\gamma(t)}{2\mu} [1, P^2] = 0; \\
& [\gamma(t), U_0] = \gamma(t) [1, U_0] = 0; \\
& [\gamma(t), T(t) z] = \gamma(t) T(t) [1, z] = 0.
\end{aligned} \tag{6.71}$$

Після обчислення комутаторів та збирання коефіцієнтів при P та z маємо таке рівняння:

$$\left[\frac{\partial \alpha^{(p)}}{\partial t} + \frac{\beta^{(p)}(t)}{\mu_p} \right] P + \frac{\partial \beta^{(p)}}{\partial t} z + \left[\frac{\partial \gamma^{(p)}}{\partial t} - \alpha^{(p)}(t) T_p(t) \right] = 0. \tag{6.72}$$

Це рівняння має зміст, якщо рівні нулю кожен із трьох його доданків. Це дає таку систему пов'язаних між собою диференціальних рівнянь:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \alpha^{(p)}}{\partial t} + \frac{\beta^{(p)}(t)}{\mu_p} = 0; \\ \frac{\partial \beta^{(p)}}{\partial t} = 0; \\ \frac{\partial \gamma^{(p)}}{\partial t} - \alpha^{(p)}(t) T_p(t) = 0 \end{array} \right. \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \alpha^{(p)} = \alpha_0^{(p)} - \frac{\beta_0^{(p)}}{\mu_p} t; \\ \beta^{(p)} = \beta_0^{(p)}; \\ \frac{\partial \gamma^{(p)}}{\partial t} - \left(\alpha_0 - \frac{\beta_0}{\mu_p} t \right) T_p(t) = 0. \end{array} \right. \quad (6.73)$$

У працях [2014-218, 220-225] константи інтегрування, що з'являються в результаті інтегрування систем рівнянь при визначенні квантово-механічного інваріанта є такими, що набувають довільних значень. Проте для нашої задачі електронного тунелювання цим константам інтегрування слід в подальшому надати конкретного фізичного змісту. Обчислюючи $\gamma = \gamma(t)$ отримуємо:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \gamma^{(p)}}{\partial t} &= e \left(\alpha_0^{(p)} - \frac{\beta_0^{(p)}}{\mu_p} t \right) \left[(-1)^p F_{p+1} - 2 \sum_{l=1}^M \xi_l \cos \omega_l t \right]; \\ \gamma^{(p)} &= \gamma_0^{(p)} + e \int \left(\alpha_0^{(p)} - \frac{\beta_0^{(p)}}{\mu_p} t \right) \left[(-1)^p F_{p+1} - 2 \sum_{l=1}^M \xi_l \cos \omega_l t \right] dt = \gamma_0^{(p)} + \\ &+ \frac{e}{2\mu_p} \left\{ (-1)^{p+1} F_{p+1} t (t\beta_0^{(p)} - 2\alpha_0^{(p)}\mu_p) + 4 \sum_{l=1}^M \frac{\xi_l \left[\beta_0^{(p)} \cos \omega_l t + (t\beta_0^{(p)} - \alpha_0^{(p)}\mu_p) \omega_l \sin \omega_l t \right]}{\omega_l^2} \right\} \end{aligned} \quad (6.74)$$

Із структури співвідношення (6.74) видно, що $\alpha_0^{(p)}$ має розмірність оберненої маси, а $\beta_0^{(p)}$ - має розмірність частоти. Враховуючи особливості задачі електронного тунелювання візьмемо:

$$\alpha_0^{(p)} = \frac{1}{2\mu_p}, \quad (6.75)$$

а для $\beta_0^{(p)}$ покладемо:

$$\beta_0^{(p)} = \Omega_m = (E_m - i\Gamma_m/2)/\hbar, \quad (6.76)$$

де частота Ω_m відповідає квантовому переходу з найбільшим значенням енергії, E_m - енергія квазістаціонарного електронного стану, що йому відповідає, Γ_m - резонансна ширина цього квазістаціонарного стану.

Для величини $\gamma_0^{(p)}$ слід звернути увагу на той факт, що вона є різною у залежності від того який шар наносистеми розглядається – потенціальна яма чи бар'єр. Також вона має характеризувати величину потенціальної енергії (6.61). В такому разі ми задамо $\gamma_0^{(p)}$ з врахуванням її розмірності таки чином:

$$\gamma_0^{(p)} = \begin{cases} 0, & \text{квантові ями} \\ (z_p - z_{p-1})U_0 / \hbar, & \text{квантові бар'єри.} \end{cases} \quad (6.77)$$

де величина $z_p - z_{p-1}$ характеризує товщину шару наносистеми.

Отже, тепер:

$$\begin{cases} \alpha^{(p)} = \frac{1}{2\mu_p}(1 - 2\Omega_m t); \\ \beta^{(p)} = \Omega_m; \\ \gamma^{(p)} = \gamma_0^{(p)} + \frac{e}{2\mu_p} \left\{ (-1)^{p+1} F_{p+1} t (t\Omega_m - 1) + \sum_{l=1}^M \frac{2\xi_l [2\Omega_m \cos \omega_l t + (2t\Omega_m - 1)\omega_l \sin \omega_l t]}{\omega_l^2} \right\}. \end{cases} \quad (6.78)$$

Згідно із методом Льюїса-Різенфілда хвильова функція електрона у напівпровідниковому шарі всередині наносистеми може бути подана у такому вигляді:

$$\Psi_{\lambda p}(z, t) = \exp[i\delta_\lambda(t)] \Phi_\lambda(z, t), \quad (6.79)$$

причому вона задовольняє рівняння:

$$\hbar \frac{d\delta_\lambda(t)}{dt} = \langle \Phi_\lambda(z, t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_p(t) | \Phi_\lambda(z, t) \rangle, \quad (6.80)$$

де $\delta_\lambda(t)$ - фазова функція. Функція $\Phi_\lambda(z, t)$ ж знаходиться розв'язуючи рівняння на власні значення λ оператора (6.68):

$$I_p(t) \Phi_\lambda(z, t) = \lambda \Phi_\lambda(z, t), \quad (6.81)$$

яке після підстановки (6.78) у вираз для інваріанта (6.68) та виконання деяких математичних перетворень набуває такого вигляду:

$$\begin{aligned}
& \left[-\frac{i\hbar}{2\mu_p}(1-2\Omega_m t)\frac{\partial}{\partial z} + \Omega_m z + \gamma_0^{(p)} + \right. \\
& \left. + \frac{e}{2\mu_p} \left\{ (-1)^{p+1} F_{p+1} t(t\Omega_m - 1) + \sum_{l=1}^M \frac{2\xi_l [2\Omega_m \cos \omega_l t + (2t\Omega_m - 1)\omega_l \sin \omega_l t]}{\omega_l^2} \right\} \right] \Phi_\lambda(z, t) = \\
& = \lambda \Phi_\lambda(z, t); \\
& \frac{\partial \Phi_\lambda(z, t)}{\Phi_\lambda(z, t)} = -\frac{i}{\hbar} \left[\frac{e}{1-2\Omega_m t} \left\{ (-1)^{p+1} F_{p+1} t(t\Omega_m - 1) + \frac{2\mu_p(\gamma_0^{(p)} - \lambda)}{e} + \right. \right. \\
& \left. \left. + \sum_{l=1}^M \frac{2\xi_l [2\Omega_m \cos \omega_l t + (2t\Omega_m - 1)\omega_l \sin \omega_l t]}{\omega_l^2} \right\} + \frac{2\mu_p \Omega_m}{1-2\Omega_m t} z \right] \partial z
\end{aligned} \tag{6.82}$$

Розв'язки цього рівняння мають такий вигляд:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial \Phi_\lambda(z, t)}{\Phi_\lambda(z, t)} = -\frac{i}{\hbar} \left[\frac{e}{1-2\Omega_m t} \left\{ (-1)^{p+1} F_{p+1} t(t\Omega_m - 1) + \frac{2\mu_p(\gamma_0^{(p)} - \lambda)}{e} + \right. \right. \\
& \left. \left. + \sum_{l=1}^M \frac{2\xi_l [2\Omega_m \cos \omega_l t + (2t\Omega_m - 1)\omega_l \sin \omega_l t]}{\omega_l^2} \right\} + \frac{2\mu_p \Omega_m}{1-2\Omega_m t} z \right] \partial z; \\
& \Phi_\lambda(z, t) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} [\varphi_\lambda(t)z + \phi(t)z^2] \right\}, \\
& \varphi_\lambda(t) = \frac{e}{1-2\Omega_m t} \left\{ (-1)^{p+1} F_{p+1} t(t\Omega_m - 1) + \frac{2\mu_p(\gamma_0^{(p)} - \lambda)}{e} + \right. \\
& \left. + \sum_{l=1}^M \frac{2\xi_l [2\Omega_m \cos \omega_l t + (2t\Omega_m - 1)\omega_l \sin \omega_l t]}{\omega_l^2} \right\}; \\
& \phi(t) = \frac{2\mu_p \Omega_m}{1-2\Omega_m t}.
\end{aligned} \tag{6.83}$$

де $\Phi_\lambda^{(0)}$ - це константа інтегрування. Цікавий результат отримується із умови ортогональності функцій $\Phi_\lambda(z, t)$. Ми отримуємо, що вони є нормовані з величиною яка має такий вигляд:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Phi_{\lambda}(z, t) \Phi_{\lambda'}(z, t) dz = \delta_{\lambda\lambda'}; \quad (6.84)$$

$$\Phi_{\lambda}^{(0)}(t) = \frac{1}{2\sqrt{-2\operatorname{Im}[\phi(t)]}} \left(1 + \operatorname{erf} \left\{ \frac{\operatorname{Im}[\varphi_{\lambda}(t)]}{\sqrt{-2\operatorname{Im}[\phi(t)]}} \right\} \right) \exp \left(-\frac{\operatorname{Im}[\varphi_{\lambda}(t)]^2}{2\operatorname{Im}[\phi(t)]} \right), \operatorname{Im}[\phi(t)] \leq 0,$$

де $\operatorname{erf}(x)$ - це функція помилок, причому слід зауважити, що з урахуванням (6.76) та (6.83) умова $\operatorname{Im}\phi(t) \leq 0$ виконується, оскільки безпосереднє обчислення дає:

$$\operatorname{Im}\phi(t) = -\frac{\mu_p \Gamma_m}{\hbar \left[\left(1 - \frac{2E_m t}{\hbar} \right)^2 + \left(\frac{t\Gamma_m}{\hbar} \right)^2 \right]} \leq 0.$$

Звідси видно, що частковий випадок, коли $\operatorname{Im}\phi(t) = 0$ відповідає ситуації, коли електронні стани є стаціонарними, це фактично є положення задачі, розглядуваної у праці [224].

З рівняння (6.80), враховуючи умову ортогональності функцій (6.83) отримується рівняння, яке визначає фазову функцію:

$$\frac{d\delta_{\lambda}(t)}{dt} = \frac{i\hbar}{2\mu_p} \left\{ [\varphi_{\lambda}(t)]^2 + 2\phi(t) \right\} \quad (6.85)$$

або ж

$$\delta_{\lambda}(t) = \frac{i\hbar}{2\mu_p} \int_0^t \left\{ [\varphi_{\lambda}(\tau)]^2 + 2\phi(\tau) \right\} d\tau. \quad (6.86)$$

Зауважимо, що для прикладу у працях [224, 226, 227] приймалось, що $\phi(t) = 0$, що б значно спростило вирази (6.83) і (6.86). Проте в нашому випадку навіть з самого виду виразу для $\phi(t)$ видно, що $\phi(t) \neq 0, \forall t$, щоб привело до явної некоректності такого припущення.

Отже, розв'язки, що задовольняють рівняння Шредінгера (6.65) при урахуванні (6.79), є такими:

$$\Psi_{\lambda p}(z, t) = \exp \left[-\frac{i\hbar}{2\mu_p} \int_0^t \left\{ [\varphi_{\lambda}(\tau)]^2 + 2\phi(\tau) \right\} d\tau \right] \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} [\varphi_{\lambda}(t)z + \phi(t)z^2] \right\}, \quad (6.87)$$

Загальні розв'язки рівняння (6.65) у випадку неперервного спектру отримуються при інтегруванні (6.87) за всіма можливими значеннями λ , тобто:

$$\Psi_p(z, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(\lambda) \Psi_{\lambda p}(z, t) d\lambda, \quad (6.88)$$

де $g(\lambda)$ - постійна величина амплітуди. Ми візьмемо з метою збереження розмірності $g(\lambda) = \exp(i\mu_p \Delta z_p \lambda / \hbar)$ (у праці [227] брали $g(\lambda) = \exp(i\lambda^3 / 3)$) проте слід зауважити наявність неточності при використанні інтегральної форму для функції Ейрі) й покажемо, що у випадку електронного тунелювання є два можливих розв'язки. Це є ключовою особливістю отриманих нами результатів.

Маємо:

$$\begin{aligned} \Psi_p(z, t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(i\mu_p \Delta z_p \lambda / \hbar) \exp\left[-\frac{i\hbar}{2\mu_p} \int_0^t \{[\varphi_\lambda(\tau)]^2 + 2\phi(\tau)\} d\tau\right] \times \\ &\times \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} [\varphi_\lambda(t)z + \phi(t)z^2]\right\} d\lambda = \\ &= \exp\left[-\frac{i\hbar}{\mu_p} \int_0^t \phi(\tau) d\tau\right] \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \phi(t)z^2\right\} \times \\ &\times \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(i\lambda^3 / 3) \exp\left[-\frac{i\hbar}{2\mu_p} \int_0^t [\varphi_\lambda(\tau)]^2 d\tau\right] \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \varphi_\lambda(t)z\right\} d\lambda. \end{aligned} \quad (6.89)$$

Спростимо підінтегральні вирази окремо:

$$\begin{aligned} &\exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \varphi_\lambda(t)z\right\} = \\ &= \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \frac{e}{1 - 2\Omega_m t}\right\} \left\{(-1)^{p+1} F_{p+1} t (t\Omega_m - 1) + \frac{2\mu_p (\gamma_0^{(p)} - \lambda)}{e}\right\} + \\ &\sum_{l=1}^M \frac{2\xi_l [2\Omega_m \cos \omega_l t + (2t\Omega_m - 1)\omega_l \sin \omega_l t]}{\omega_l^2} \left\{z\right\} = \\ &= \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \frac{e}{1 - 2\Omega_m t}\right\} \left\{(-1)^{p+1} F_{p+1} t (t\Omega_m - 1) + \frac{2\mu_p \gamma_0^{(p)}}{e}\right\} + \\ &+ \sum_{l=1}^M \frac{2\xi_l [2\Omega_m \cos \omega_l t + (2t\Omega_m - 1)\omega_l \sin \omega_l t]}{\omega_l^2} \left\{z\right\} \times \\ &\times \exp\left\{\frac{2i}{\hbar} \frac{\mu_p}{1 - 2\Omega_m t} \lambda z\right\} = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \varphi^{(1)} z\right\} \exp\left\{\frac{2i}{\hbar} \frac{\mu_p}{1 - 2\Omega_m t} \lambda z\right\}; \end{aligned}$$

$$\varphi^{(1)}(t) = \frac{e}{1-2\Omega_m t} \left\{ (-1)^{p+1} F_{p+1} t (t\Omega_m - 1) + \frac{2\mu_p \gamma_0^{(p)}}{e} + \sum_{l=1}^M \frac{2\xi_l [2\Omega_m \cos \omega_l t + (2t\Omega_m - 1)\omega_l \sin \omega_l t]}{\omega_l^2} \right\}. \quad (6.90)$$

$$\begin{aligned} \int_0^t [\varphi_\lambda(\tau)]^2 d\tau &= \int_0^t \left[\frac{e}{1-2\Omega_m \tau} \left\{ (-1)^{p+1} F_{p+1} \tau (\tau\Omega_m - 1) + \frac{2\mu_p \gamma_0^{(p)}}{e} + \sum_{l=1}^M \frac{2\xi_l [2\Omega_m \cos \omega_l \tau + (2\tau\Omega_m - 1)\omega_l \sin \omega_l \tau]}{\omega_l^2} \right\} - \frac{2\mu_p \lambda}{1-2\Omega_m \tau} \right]^2 d\tau = \\ &= \int_0^t \left[\varphi_1(\tau) - \frac{2\mu_p \lambda}{1-2\Omega_m \tau} \right]^2 d\tau = \int_0^t \varphi_1^2(\tau) d\tau - 4\mu_p \lambda \int_0^t \frac{\varphi_1(\tau)}{1-2\Omega_m \tau} d\tau + 4\mu_p^2 \lambda^2 \int_0^t \frac{d\tau}{(1-2\Omega_m \tau)^2} = \\ &= \int_0^t \varphi_1^2(\tau) d\tau - 4\mu_p \lambda \int_0^t \frac{\varphi_1(\tau)}{1-2\Omega_m \tau} d\tau + \frac{4\mu_p^2 \lambda^2 t}{1-2\Omega_m t}. \end{aligned} \quad (6.91)$$

Отже,

$$\begin{aligned} \Psi_p(z, t) &= \exp \left[-\frac{i\hbar}{\mu_p} \int_0^t \phi(\tau) d\tau \right] \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} [\varphi^{(1)} z + \phi(t) z^2] \right\} \times \\ &\times \int_0^{+\infty} \exp \left\{ -\frac{i\hbar}{2\mu_p} \left[\int_0^t \varphi_1^2(\tau) d\tau - 4\mu_p \lambda \int_0^t \frac{\varphi_1(\tau)}{1-2\Omega_m \tau} d\tau + \frac{4\mu_p^2 \lambda^2 t}{1-2\Omega_m t} \right] \right\} \times \\ &\times \exp(i\mu_p \Delta z_p \lambda / \hbar) \exp \left\{ \frac{2i}{\hbar} \frac{\mu_p \lambda}{1-2\Omega_m t} z \right\} d\lambda = \\ &= \exp \left[-\frac{i\hbar}{2\mu_p} \int_0^t [\varphi_1^2(\tau) + 2\phi(\tau)] d\tau \right] \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} [\varphi^{(1)} z + \phi(t) z^2] \right\} \times \\ &\times \int_0^{+\infty} \exp(i\mu_p \Delta z_p \lambda / \hbar) \exp \left\{ -\frac{i\hbar}{2\mu_p} \left[-4\mu_p \lambda \int_0^t \frac{\varphi_1(\tau)}{1-2\Omega_m \tau} d\tau + \frac{4\mu_p^2 \lambda^2 t}{1-2\Omega_m t} \right] \right\} \exp \left\{ \frac{2i}{\hbar} \frac{\mu_p \lambda}{1-2\Omega_m t} z \right\} d\lambda = \\ &= \exp \left[-\frac{i\hbar}{2\mu_p} \int_0^t [\varphi_1^2(\tau) + 2\phi(\tau)] d\tau \right] \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} [\varphi^{(1)} z + \phi(t) z^2] \right\} \times \\ &\times \int_0^{+\infty} \exp \left\{ 2i\lambda \left[\frac{\hbar}{1-2\Omega_m \tau} \int_0^t \frac{\varphi_1(\tau)}{1-2\Omega_m \tau} d\tau + \frac{\mu_p \Delta z_p}{\hbar} + \frac{\mu_p}{\hbar(1-2\Omega_m t)} z \right] \right\} \exp \left\{ -\frac{2i\hbar \mu_p \lambda^2 t}{1-2\Omega_m t} \right\} d\lambda \end{aligned} \quad (6.92)$$

Якщо зробити заміну:

$\Lambda = \lambda \sqrt{\frac{2\hbar\mu_p t}{1-2\Omega_m t}}$; $\lambda = \Lambda \sqrt{\frac{1-2\Omega_m t}{2\hbar\mu_p t}}$; $d\lambda = \sqrt{\frac{1-2\Omega_m t}{2\hbar\mu_p t}} d\Lambda$, то останній вираз набуває

вигляду:

$$\begin{aligned} \Psi_p(z, t) = & \sqrt{\frac{1-2\Omega_m t}{2\hbar\mu_p t}} \exp\left[-\frac{i\hbar}{2\mu_p} \int_0^t [\varphi_1^2(\tau) + 2\phi(\tau)] d\tau\right] \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} [\varphi^{(1)}z + \phi(t)z^2]\right\} \times \\ & \times \int_0^{+\infty} \exp\left\{i\Lambda \sqrt{\frac{2(1-2\Omega_m t)}{\hbar\mu_p t}} \left[\hbar \int_0^t \frac{\varphi_1(\tau)}{1-2\Omega_m \tau} d\tau + \frac{\mu_p \Delta z_p}{\hbar} + \frac{\mu_p}{\hbar(1-2\Omega_m t)} z\right]\right\} \exp\{-i\Lambda^2\} d\Lambda \end{aligned} \quad (6.93)$$

Далі, скориставшись формулою Муавра-Лапласа $e^{ix} = \cos x + i \sin x$ та приймаючи до уваги такі інтеграли:

$$\begin{aligned} f(z) = & \sqrt{\frac{2(1-2\Omega_m t)}{\hbar\mu_p t}} \left[\hbar \int_0^t \frac{\varphi_1(\tau)}{1-2\Omega_m \tau} d\tau + \frac{\mu_p \Delta z_p}{\hbar} + \frac{\mu_p}{\hbar(1-2\Omega_m t)} z \right] \\ \int_0^{+\infty} \cos\{\Lambda f(z) - \Lambda^2\} d\Lambda = & \frac{1}{2\sqrt{2}} \left(\cos\left[\frac{f^2(z)}{4}\right] \left\{1 + 2C\left[\frac{f(z)}{\sqrt{2\pi}}\right]\right\} + \sin\left[\frac{f^2(z)}{4}\right] \left\{1 + 2S\left[\frac{f(z)}{\sqrt{2\pi}}\right]\right\} \right); \\ \int_0^{+\infty} \sin\{\Lambda f(z) - \Lambda^2\} d\Lambda = & -\frac{1}{2\sqrt{2}} \left(\cos\left[\frac{f^2(z)}{4}\right] \left\{1 + 2S\left[\frac{f(z)}{\sqrt{2\pi}}\right]\right\} + \sin\left[\frac{f^2(z)}{4}\right] \left\{1 + 2C\left[\frac{f(z)}{\sqrt{2\pi}}\right]\right\} \right); \end{aligned} \quad (6.94)$$

де $C(x)$, $S(x)$ - це інтеграли Френеля, після спрощень отримаємо:

$$\begin{aligned} \int_0^{+\infty} \exp\left\{i\Lambda \sqrt{\frac{2(1-2\Omega_m t)}{\hbar\mu_p t}} \left[\hbar \int_0^t \frac{\varphi_1(\tau)}{1-2\Omega_m \tau} d\tau + \frac{\mu_p \Delta z_p}{\hbar} + \frac{\mu_p}{\hbar(1-2\Omega_m t)} z\right]\right\} \exp\{-i\Lambda^2\} d\Lambda = \\ = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left(\frac{1}{2} - \frac{i}{2}\right) \exp\left[i\frac{f^2(z)}{4}\right] \left(1 + (1+i)C\left[\frac{f(z)}{\sqrt{2\pi}}\right] + (1-i)S\left[\frac{f(z)}{\sqrt{2\pi}}\right]\right). \end{aligned} \quad (6.95)$$

Враховуючи, що у випадку тунелювання електронів ми маємо багат шарову наносистему, то в такому разі найбільш підходящим розв'язком буде такий, що містить лінійну комбінацію інтегралів Френеля $C(x)$, $S(x)$, як двох можливих лінійно-незалежних розв'язків тобто:

$$\begin{aligned}
\Psi_p(z, t) &= \sqrt{\frac{1-2\Omega_m t}{2\hbar\mu_p t}} \exp\left[-\frac{i\hbar}{2\mu_p} \int_0^t [\varphi_1^2(\tau) + 2\phi(\tau)] d\tau\right] \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} [\varphi^{(1)}z + \phi(t)z^2]\right\} \times \\
&\times \exp\left[i\frac{1-2\Omega_m t}{2\hbar\mu_p t} \left[\hbar \int_0^t \frac{\varphi_1(\tau)}{1-2\Omega_m \tau} d\tau + \frac{\mu_p \Delta z_p}{\hbar} + \frac{\mu_p}{\hbar(1-2\Omega_m t)} z\right]^2\right] \times \\
&\times \left(A_p C \left[\sqrt{\frac{2(1-2\Omega_m t)}{\pi\hbar\mu_p t}} \left[\hbar \int_0^t \frac{\varphi_1(\tau)}{1-2\Omega_m \tau} d\tau + \frac{\mu_p \Delta z_p}{\hbar} + \frac{\mu_p}{\hbar(1-2\Omega_m t)} z \right] \right] + \right. \\
&\left. + B_p S \left[\sqrt{\frac{2(1-2\Omega_m t)}{\pi\hbar\mu_p t}} \left[\hbar \int_0^t \frac{\varphi_1(\tau)}{1-2\Omega_m \tau} d\tau + \frac{\mu_p \Delta z_p}{\hbar} + \frac{\mu_p}{\hbar(1-2\Omega_m t)} z \right] \right] \right).
\end{aligned} \tag{6.96}$$

Нам необхідно також отримати розв'язки рівняння (6.65) в областях $z < 0$ і $z > z_N$, що відповідають зовнішньому середовищу по відношенню до наносистеми. За відсутності внеску внутрішніх електричних полів це рівняння значно спрощується і набуває такого вигляду:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_p(z, t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu_p} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - 2ez \sum_{l=1}^M \xi_l \cos \omega_l t \right] \Psi_p(z, t). \tag{6.97}$$

Будемо шукати розв'язки цього рівняння у вигляді такої пробної хвильової функції:

$$\begin{aligned}
\Psi_p(z, t) &= e^{ikz} \prod_{l=1}^M \exp\left[\frac{2ie\xi_l z \sin \omega_l t}{\hbar} + \frac{2ie\xi_l k \cos \omega_l t}{m_p \omega_l^2} + \eta(t) \right] = \\
&= \exp\left\{ ikz + \sum_{l=1}^M \left[\frac{2ie\xi_l z \sin \omega_l t}{\hbar} + \frac{2ie\xi_l k \cos \omega_l t}{m_p \omega_l^2} + \eta(t) \right] \right\},
\end{aligned} \tag{6.98}$$

де $\eta(t)$ - це функція, що підлягає визначенню.

Підставляючи (6.98) у рівняння (6.97) після спрощень отримуємо рівняння для визначення $\eta(t)$:

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial \Psi_p(z,t)}{\partial t} &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(\exp \left\{ ikz + \sum_{l=1}^M \left[\frac{2ie\xi_l z \sin \omega_l t}{\hbar \omega_l} + \frac{2ie\xi_l k \cos \omega_l t}{m_p \omega_l^2} + \eta(t) \right] \right\} \right) = \\
&= \left[2e \sum_{l=1}^M \left(-\xi_l z \cos \omega_l t + \frac{\xi_l \hbar k \sin \omega_l t}{m_p \omega_l} \right) + i\hbar \frac{d\eta(t)}{dt} \right] \Psi_p(z,t); \\
\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu_p} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - 2ez \sum_{l=1}^M \xi_l \cos \omega_l t \right] \Psi_p(z,t) &= \sum_{l=1}^M \left[\frac{\hbar^2}{2\mu_p} \left(k + \frac{2e\xi_l \sin \omega_l t}{\hbar \omega_l} \right)^2 - 2ez\xi_l \cos \omega_l t \right] \Psi_p(z,t); \\
\left[2e \sum_{l=1}^M \left(-\xi_l z \cos \omega_l t + \frac{\xi_l \hbar k \sin \omega_l t}{m_p \omega_l} \right) + \frac{d\eta(t)}{dt} \right] \Psi_p(z,t) &= \\
= \sum_{l=1}^M \left[\frac{\hbar^2}{2\mu_p} \left(k + \frac{2e\xi_l \sin \omega_l t}{\hbar \omega_l} \right)^2 - 2ez\xi_l \cos \omega_l t \right] \Psi_p(z,t); \\
i\hbar \frac{d\eta(t)}{dt} &= \sum_{l=1}^M \left[\frac{\hbar^2}{2\mu_p} \left(k + \frac{2e\xi_l \sin \omega_l t}{\hbar \omega_l} \right)^2 - \frac{2e\xi_l \hbar k \sin \omega_l t}{m_p \omega_l} \right]; \\
\eta(t) &= -\frac{i}{\hbar} \int_0^t \sum_{l=1}^M \left[\frac{\hbar^2}{2\mu_p} \left(k + \frac{2e\xi_l \sin \omega_l \tau}{\hbar \omega_l} \right)^2 - \frac{2e\xi_l \hbar k \sin \omega_l \tau}{m_p \omega_l} \right] d\tau \\
&= -\frac{i}{\hbar} \int_0^t \sum_{l=1}^M \left[\frac{\hbar^2}{2\mu_p} \left(k + \frac{2e\xi_l \sin \omega_l \tau}{\hbar \omega_l} \right)^2 - \frac{2e\xi_l \hbar k \sin \omega_l \tau}{m_p \omega_l} \right] d\tau = \\
&= -\frac{i\hbar k^2}{2m_p} t - \frac{ie^2}{2\hbar m_p} \sum_{l=1}^M \frac{\xi_l^2 (2\omega_l t - \sin 2\omega_l t)}{\omega_l^3}.
\end{aligned} \tag{6.99}$$

Очевидно, що в області $z < 0$ існують розв'язки рівняння (6.97), що відповідають відповідно падаючій хвилі та відбитій хвилі. Цим розв'язкам відповідають значення $+k$ і $-k$ відповідно, тому в цій області слід подати у вигляді лінійної комбінації таких розв'язків, тобто:

$$\begin{aligned}
\Psi_0(z,t) &= e^{i\left(kz + \frac{\hbar k^2}{2m_p} t\right)} \prod_{l=1}^M \exp \left[\frac{2ie\xi_l z \sin \omega_l t}{\hbar \omega_l} + \frac{2ie\xi_l k \cos \omega_l t}{m_p \omega_l^2} - \frac{ie^2}{2\hbar m_p} \sum_{l=1}^M \frac{\xi_l^2 (2\omega_l t - \sin 2\omega_l t)}{\omega_l^3} \right] + \\
&+ B_0(t) e^{-i\left(kz - \frac{\hbar k^2}{2m_p} t\right)} \prod_{l=1}^M \exp \left[\frac{2ie\xi_l z \sin \omega_l t}{\hbar \omega_l} - \frac{2ie\xi_l k \cos \omega_l t}{m_p \omega_l^2} - \frac{ie^2}{2\hbar m_p} \sum_{l=1}^M \frac{\xi_l^2 (2\omega_l t - \sin 2\omega_l t)}{\omega_l^3} \right].
\end{aligned} \tag{6.100}$$

У області $z > z_N$ є тільки розв'язок, який відповідає хвилі, що пройшла наносистему, а саме:

$$\Psi_{N+1}(z, t) = A_{N+1}(t) e^{i\left(kz + \frac{\hbar k^2}{2m_p} t\right)} \times \prod_{l=1}^M \exp \left[\frac{2ie\xi_l z \sin \omega_l t}{\hbar \omega_l} + \frac{2ie\xi_l k \cos \omega_l t}{m_p \omega_l^2} - \frac{ie^2}{2\hbar m_p} \sum_{l=1}^M \frac{\xi_l^2 (2\omega_l t - \sin 2\omega_l t)}{\omega_l^3} \right]. \quad (6.101)$$

В довільний момент часу t для хвильових функцій (6.96), (6.100), (6.101) та потоків їх ймовірностей є справедливими виконання граничних умов на межах шарів наносистеми:

$$\begin{cases} \Psi_p(z, t)|_{z=z_p} = \Psi_{p+1}(z, t)|_{z=z_p}; \\ \frac{1}{m_p} \frac{\partial \Psi_p(z, t)}{\partial z} \Big|_{z=z_p} = \frac{1}{m_{p+1}} \frac{\partial \Psi_{p+1}(z, t)}{\partial z} \Big|_{z=z_p}. \end{cases} \quad (6.102)$$

Ці граничні умови вкупі з умовою нормування:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_m^*(z, t) \Psi_n(z, t) dz = \delta(n - m) \quad (6.103)$$

в будь-який момент часу повністю визначають електронну хвильову функції та дозволяють виконати розрахунок коефіцієнта прозорості наносистеми:

$$D(E, t) = |A_{N+1}(E, t)|^2. \quad (6.104).$$

6.4. Властивості спектральних параметрів електрона в багат шарових нітридних системах за умови незалежної генерації електромагнітних хвиль у всіх квантових ямах

Для виконання розрахунків на основі розвиненої теорії використовувались фізичні та геометричні параметри триямної наносистеми з AlN – потенціальними ямами та GaN – потенціальними ямами. Розміри вхідної потенціальної ями, в якій відбувається основний квантовий перехід складають 8 нм, розміри решти потенціальних ям рівні – 3 нм. Товщини всіх потенціальних бар'єрів однакові – 2 нм. Фізичні параметри використовуваних напівпровідників є добре відомі з літератури [228]. Також в безпосередніх розрахунках слід прийняти до уваги, що

хвильові функції та відповідно коефіцієнт прозорості наносистеми є функціями від часу. Тому є важливим вибрати значення часу, які будуть використовуватись для таких розрахунків. Характеристичною величиною при тунелюванні з використанням квазістаціонарних електронних станів є час релаксації τ_r , що може бути визначеним при використанні співвідношенням Маттісена [199]:

$$\frac{1}{\tau_r} = \frac{1}{\tau_B} + \frac{1}{\tau_U} + \frac{1}{\tau_M} + \frac{1}{\tau_{ph-e}}, \quad (6.105)$$

де τ_B - час розсіювання на сумарній товщині $d = \sum_i \Delta d_i$ наноструктури; τ_U - час, що відповідає одномодовій релаксації за рахунок U – процесів; τ_M - час розсіювання за рахунок різномасовго розсіювання; τ_{ph-e} - час розсіювання за рахунок електрон-фононної взаємодії (більш детально щодо цих складових див. наприклад такі праці [199, 200]). Для нас важливим є той факт, що при когерентному тунелюванні електронного потоку для часів життя електронних квазістаціонарних станів τ_n у порівнянні з величиною τ_r виконується умова: $\tau_n \leq \tau_r$, яка виражає той факт, що квазістаціонарні стани не є зруйнованими за рахунок згаданих вище факторів. Нас безпосередньо цікавить поведінка коефіцієнта прозорості наносистеми у різні моменти часу. Тому в розрахунках ми будемо брати для наочності такі значення часу: $t = \left(\frac{\tau_r}{4}; \frac{\tau_r}{2}; \frac{3\tau_r}{4}; \tau_r; 2\tau_r \right)$.

Величини резонансних енергій та ширин квазістаціонарних станів за якими розраховувались значення виразів (6.76) отримувались шляхом розв'язування незбуреного рівняння Шредінгера (6) такого виду:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu_p} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + U_0 + (-1)^p e(F_{p+1}z - F_p z_p) \right] \Psi_p(z, t) = E \Psi_p(z, t) \quad (6.106)$$

з граничними умовами (6.102) та умовою нормування (6.103). Підхід до розв'язання такого рівняння у відкритих наносистемах є широко відомим і ми не будемо на ньому зупинятись посилаючись на відповідні викладки Розділу 3 дисертації Розрахунок амплітуд електричних складових змінного електромагнітного поля

розраховувались за принципом: $\xi_l \propto \Delta E_l / ed$, де ΔE_l - енергія квантового переходу у l -тій квантовій ямі, що супроводжується випромінюванням (поглинанням електромагнітного поля).

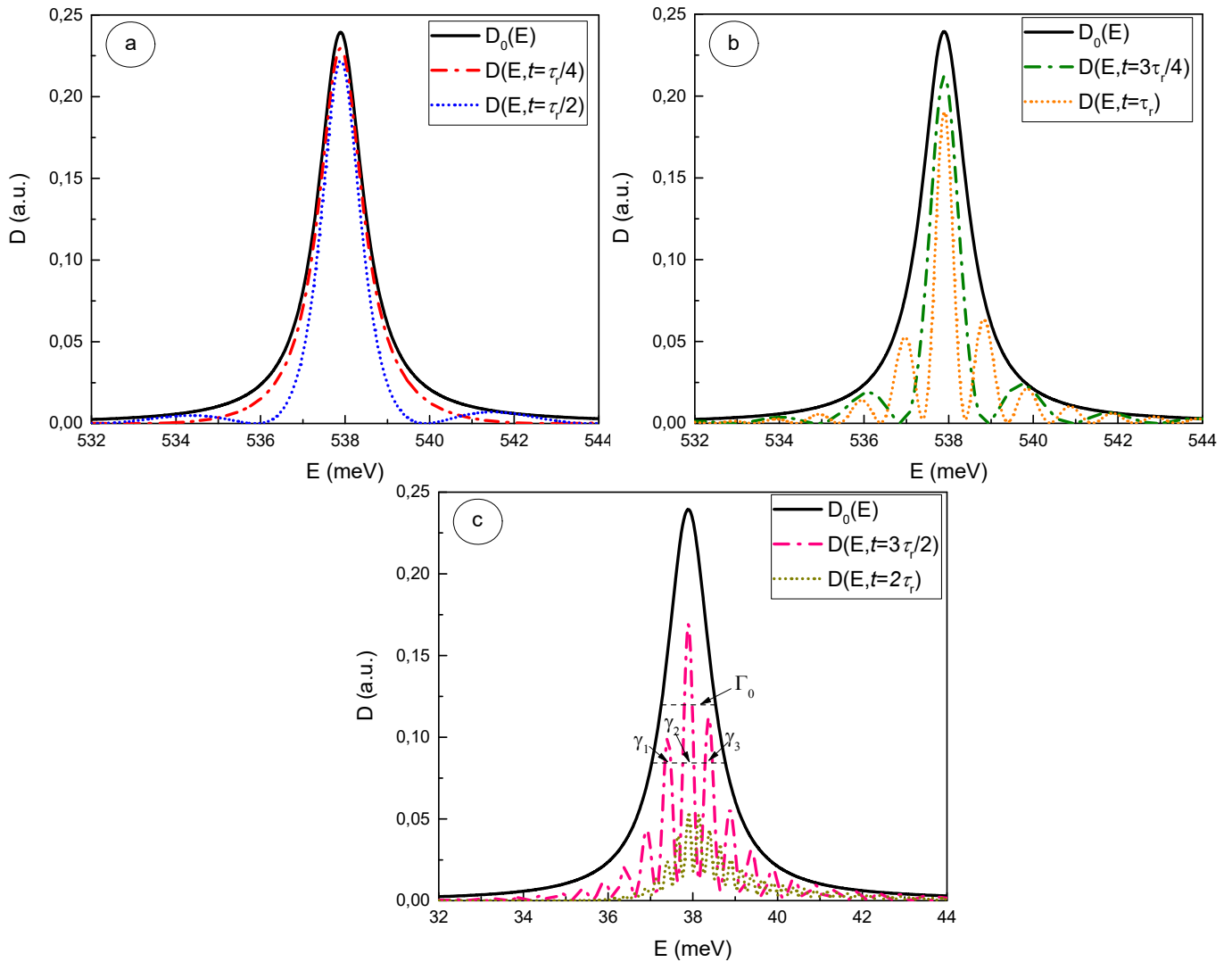


Рис. 6.8. Коефіцієнт прозорості наносистеми як функція енергії електрона (E) в околі першого квазістаціонарного стану локалізованого у вхідній квантовій ямі, розраховані при різних значеннях часу t , які пропорційні часу релаксації τ_r . Тут D_0 – коефіцієнт прозорості наносистеми, розрахований на основі стаціонарної задачі, Γ_0 – ширина резонансу цього квазістаціонарного стану. $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ – резонансні ширини квазістаціонарних станів, що розраховані з використанням запропонованої теорії.

Наша мета дослідити як впливає факт наявності одночасно кількох випромінювальних переходів на коефіцієнт прозорості наносистеми та встановити його особливості у різні актуальні моменти часу. З цією метою нами спочатку

виконувався розрахунок коефіцієнта прозорості у околі значень енергії першого квазістаціонарного рівня, що локалізований у вхідній потенціальній ямі наноструктури. Значення амплітуд електричних складових змінного електромагнітного поля вибирались такими:

$\xi_1 = 10^{-2} \Delta E_1 / ed$; $\xi_2 = 10^{-3} \Delta E_2 / ed$; $\xi_3 = 10^{-3} \Delta E_3 / ed$, де енергії квантових переходів такі: $\Delta E_1 = 380$ меВ; $\Delta E_2 = 62$ меВ; $\Delta E_3 = 56$ меВ. Ці значення амплітуд фактично відповідають так-званому наближенню слабого сигналу. Розраховане значення часу релаксації становить 20 пс. Відповідні залежності коефіцієнта прозорості при різних значеннях часу наведено на Рис. 6.8а, б, с разом із залежністю $D_0(E)$ для коефіцієнта прозорості, що розрахований із незбуреної задачі. Як видно із Рис. 6.8а при $t = t_r / 4$ і $t = t_r / 2$ має місце слабке зменшення величини максимуму функції $D(E, t)$, проте значення резонансної енергії E_n , яку він визначає своїм положенням у енергетичній шкалі залишається незмінним. Також слід зауважити зменшення величини резонансної ширини Γ_n , розрахованої на половині максимальної висоти залежності $D(E, t)$. Далі, як видно з Рис. 6.8б, у залежності $D(E, t)$ при $t = 3t_r / 4$ відбувається спочатку утворення областей з слабкими осциляціями, а далі при $t = t_r$ ці осциляції набувають більш вираженого характеру. Слід зауважити, що положення основного центрального максимуму в шкалі енергій залишається далі незмінним. Але щодо резонансної ширини, то про цю характеристику квазістаціонарного стану однозначно вже говорити не можна. Для залежностей при $t = t_r$ і $t = 3t_r / 2$ ще формально можна ввести величину $\Gamma_n \approx \gamma_1 + \gamma_2 + \gamma_3$ як це показано на Рис. 6.8с, проте фізика процесів квантових переходів тут суттєво міняється. Слід розуміти, що кожен з нових резонансів при $t = 3t_r / 2$ і $t = 2t_r$ має свою окрему резонансну ширину γ та резонансну енергію, що близька до енергії основного центрального максимуму, проте оскільки $\tau \ll 1/\Gamma$, то часи життя цих утворених резонансів є значно більшими за час життя звичайного електронного квазістаціонарного стану, а при $\tau \geq t_r$ згідно з (6.105) це постає суттєвим фактором, який виводить систему з когерентного стану. З розрахованої залежності при $t = 2t_r$ видно, що квазістаціонарний стан вже є

фактично зруйнованим, для його опису такі його характеристики як резонансна енергія та ширина не можуть бути адекватно описаними.

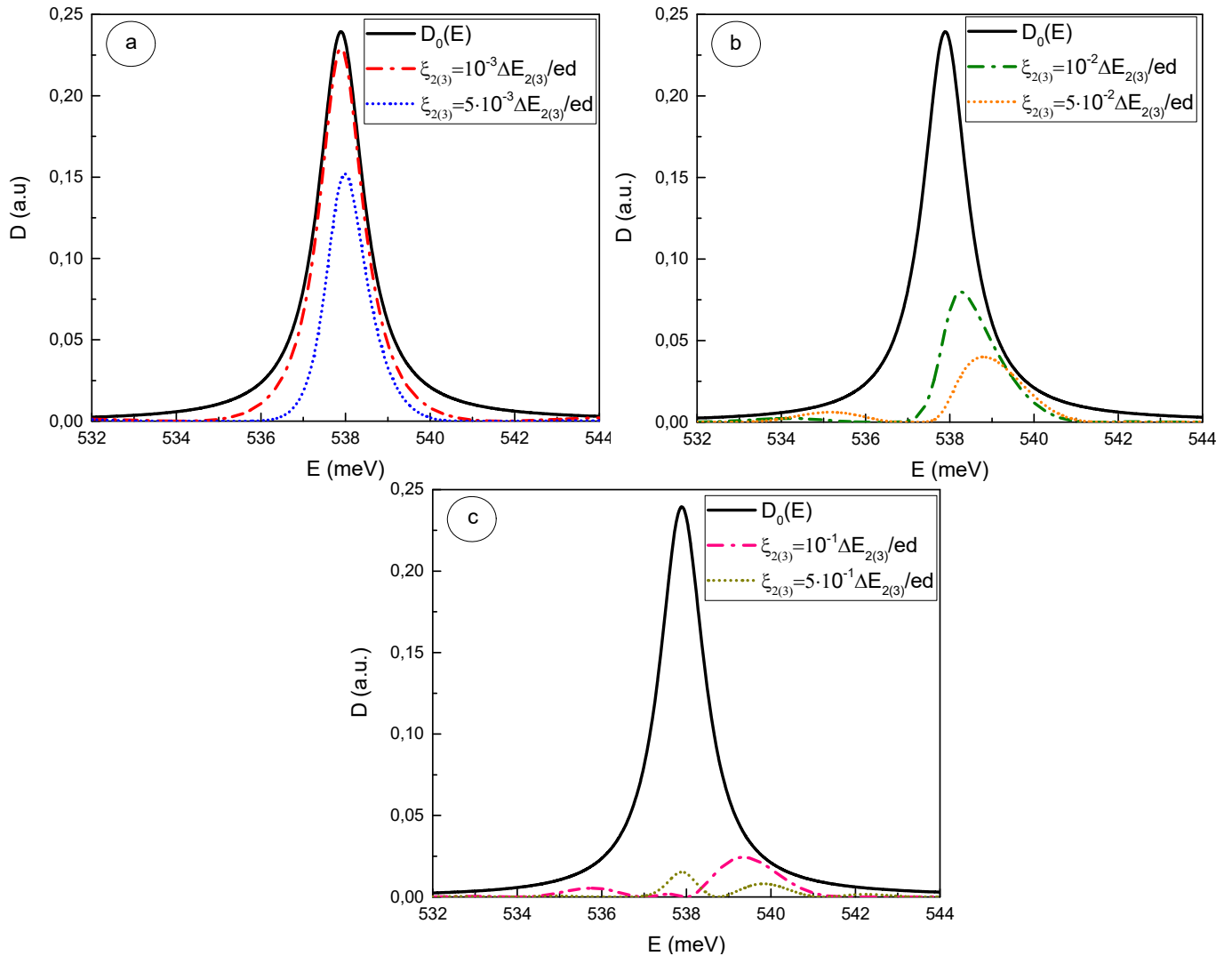


Рис. 6.9. Коефіцієнт прозорості наносистеми як функція енергії електрона (E) в околі першого квазістаціонарного стану локалізованого у вхідній квантовій ямі, розраховану для фіксованого значення часу та різних значень амплітуд (ξ) електричних складових електромагнітного поля, які пропорційні енергіям квантових переходів. Амплітуда ξ_1 , що відповідає квантовому переходу у вхідному потенціалі, фіксується. Тут D_0 – коефіцієнт прозорості наносистеми, розрахований на основі стаціонарної задачі.

Тепер дослідимо як впливають величини амплітуд електричної складової електромагнітного поля на коефіцієнт прозорості наносистеми. Для цього зафіксуємо значення часу взявши $t = t_r / 2$ та амплітуду, що відповідає квантовому

переходу у вхідній потенціальній ямі, взявши її рівною $\xi_1 = 0,5 \cdot 10^{-1} \Delta E_1 / ed$. Далі будемо збільшувати значення ξ_2 та ξ_3 таким чином, щоб в результаті всі величини амплітуд ξ_1, ξ_2, ξ_3 мали однаковий порядок величини. Результати таких розрахунків подано на Рис. 6.9а, б, с. Як видно з Рис. 6.9а, коли генеровані у центральній та вихідній ямах каскаду електромагнітні поля мають амплітуди ξ_2 та ξ_3 , що на два порядки менші від амплітуди електромагнітного поля генерованого у вхідній потенціальній ямі коефіцієнт прозорості наносистеми змінюється так, що величина його максимуму зменшується, а сам цей максимум слабо зміщується у енергетичній шкалі вправо. У випадку коли амплітуди ξ_2 та ξ_3 , що на порядок менші від амплітуди ξ_1 відбувається значне зменшення величини максимуму коефіцієнта прозорості, сам максимум ще більше зміщується вправо. Зокрема слід зауважити, що коли $\xi_{1(2)} = 0,5 \cdot 10^{-2} \Delta E_{1(2)} / ed$ має місце формування ще одного невеликого максимуму, локалізованого у шкалі енергій зліва від основного. Як видно з Рис. 6.9с, коли амплітуди ξ_1, ξ_2, ξ_3 є близькими між собою, то в такому випадку значення коефіцієнта прозорості дуже сильно зменшуються, поява невеликих максимумів знову ж таки приводить до сильного спотворення форми залежності коефіцієнта прозорості та руйнування квазістаціонарного стану.

6.5. Теорія тунелювання електронів взаємодіючих із залежним від часу електромагнітним полем у плоских наносистемах при наявності постійних електричного та магнітного полів: точний підхід до розв'язанні задачі для повного рівняння Шредінгера

Сучасні оптоелектронні прилади, за своїми функціональними особливостями ґрунтуються на електронних переходах в межах зони провідності багаточарових наноструктур, що утворені чергуванням напівпровідникових плівок різної товщини. Для прикладу, когерентний електронний транспорт в квантових каскадних лазерах чи детекторах приводить до необхідності врахування взаємодії тунельованого потоку з із електромагнітним полем, що є має гармонічну залежність від часу так як це розглядалось вище. Іншим важливим аспектом є наявність постійних полів, що

безпосередньо впливають на процес електронного тунелювання. Переважно має місце застосування постійних електричних полів: зовнішнє постійне електричне поле виступає у ролі коректуючого механізму, що забезпечує узгодженість сусідніх каскадів квантових каскадних лазерів на основі арсенідних напівпровідників між собою. Для нітридних наноструктур важливим фактором є внутрішнє електричне поле спричинене п'єзоелектрикою та спонтанною поляризаціями, його врахування необхідне для розрахунку спектральних параметрів електронів.. Загалом методологія відшукування розв'язків повного рівняння Шредінгера з залежним від часу гамільтоніаном налічує кілька основних напрямів. До першого напрямку слід віднести групи праць [211-218, 229-238], які беруть свій початок від фундаментальної праці Льюїса та Різенфілда [219]. Ці праці часто стосуються відшукування квантово-механічних інваріантів у задачах дослідження когерентних станів у дисипативних системах, залежних від часу гармонічних осциляторів, обернених гармонічних осциляторів, квантування електромагнітного поля в залежних від часу лінійних середовищах. Зокрема в цих працях також розвиваються підходи до застосування унітарних перетворень, що виникають при роботі з отримуваними інваріантами. Другий напрям пов'язаний також з дослідженням систем з гамільтоніанами, що містять квадратичні та лінійні як за імпульсом за координатою доданки [239, 240]. Знаковим в цих працях є різноманітне застосування методу алгебр Лі разом з унітарними перетвореннями [241-245], перетворення Крамерса—Геннебергера [246], спеціальних конструкцій для еволюційних операторів [223]. Третім окремим напрямком є дослідження так званих Ейрі-пакетів [247-249], в яких часто застосовуються згадані вище методи. З цього напрямку дотично походить ряд дуже актуальних праць, що ґрунтуються на застосуванні до періодичних гамільтоніанів залежного від часу квантового осцилятора методології інтегралів за траєкторіями уведених Фейнманом й класичних рівнянь руху [248, 250-256]. З цієї групи праць слід виділити працю [248], в якій з використанням цих методів в поєднанні з унітарним перетворенням досліджено частинку у лінійному потенціалі. Також слід виділити праці, що часто поєднують згадані вище напрями. Ці знакові праці безпосередньо спрямовані на

розширення застосування методу Льюїса-Різенфілда, зокрема до задач з неермітовими гамільтоніанами, та задач PT -симетрично пов'язаних осциляторів [212, 213, 257-259], чи залежних від часу оптичних потенціалів [260] та ін. Згадані праці слугують своєрідним містком, що дозволяє змінювати вже напрацьовані теоретичні методи для застосування у фізиці наносистем, і що особливо важливо при наявності зовнішніх змінних та постійних полів, які мають місце в оптоелектронних приладах. Для квантових каскадних лазерів та детекторів випадки використання магнітного поля є доволі поодинокими, проте для слід зауважити, що в цих випадках вектори напруженостей електричного та магнітного полів були взаємно перпендикулярними [261-263]. Також слід виділити клас задач [264-267], які спрямовані на дослідження впливу магнітного поля на електронний спектр в закритих наносистемах, шляхом відшукування розв'язків стаціонарної задачі для рівняння Шредінгера. Щодо відкритих наносистем, то є декілька праць [268, 269] де досліджувався вплив магнітного поля на коефіцієнт прозорості наносистем та електронний спектр. Таким чином слід зробити висновок, що теоретична проблема опису процесу тунелювання електронів взаємодіючих із електромагнітним полем при наявності прикладених до наносистеми постійних електричного та магнітного полів досі залишається відкритою, що в свою чергу гальмують можливості практичного використання таких механізмів. Розв'язання цієї цікавої теоретичної проблеми, що полягає у відшуванні розв'язків повного рівняння Шредінгера для залежного від часу гамільтоніана, описуючого взаємодію електронів.

6.5.1. Гамільтоніан електрона взаємодіючого із змінним електромагнітним полем при наявності постійного електричного та магнітного полів всередині наносистеми. Повне рівняння Шредінгера.

Будемо розглядати процес електронного тунелювання у відкритій наносистемі, яка містить N напівпровідникових шарів, причому середовищу в яке поміщена наносистема та середовищу потенціальних ям відповідає напівпровідник GaN, а потенціальні бар'єри утворені з напівпровідника AlN (див. енергетичну та геометричну схему на Рис. 6.10). У постановці задачі приймається, що унаслідок

електронних квантових переходів між енергетичними рівнями наноструктури виникає змінне електромагнітне поле з яким взаємодіє тунельований через наноструктуру електронний потік. Така взаємодія описується виразом:

$$U_{e-em}(z,t) = -e \left\{ z [\theta(z) + \theta(z - z_N)] + z_N \theta(z - z_N) \right\} \xi (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) =$$

$$= -2e \left\{ z [\theta(z) + \theta(z - z_N)] + z_N \theta(z - z_N) \right\} \xi \cos \omega t. \quad (6.107)$$

При відсутності впливу постійних внутрішніх та зовнішніх полів, потенціальна схема наносистеми визначається у моделі прямокутних потенціалів:

$$U(z) = U_0 \sum_{p=0}^N \left[\theta(z - z_{2p}) - \theta(z - z_{2p+1}) \right], \quad (6.108)$$

тут U_0 - висота потенціального бар'єра, що розрахована у моделі з прямокутними потенціалами.

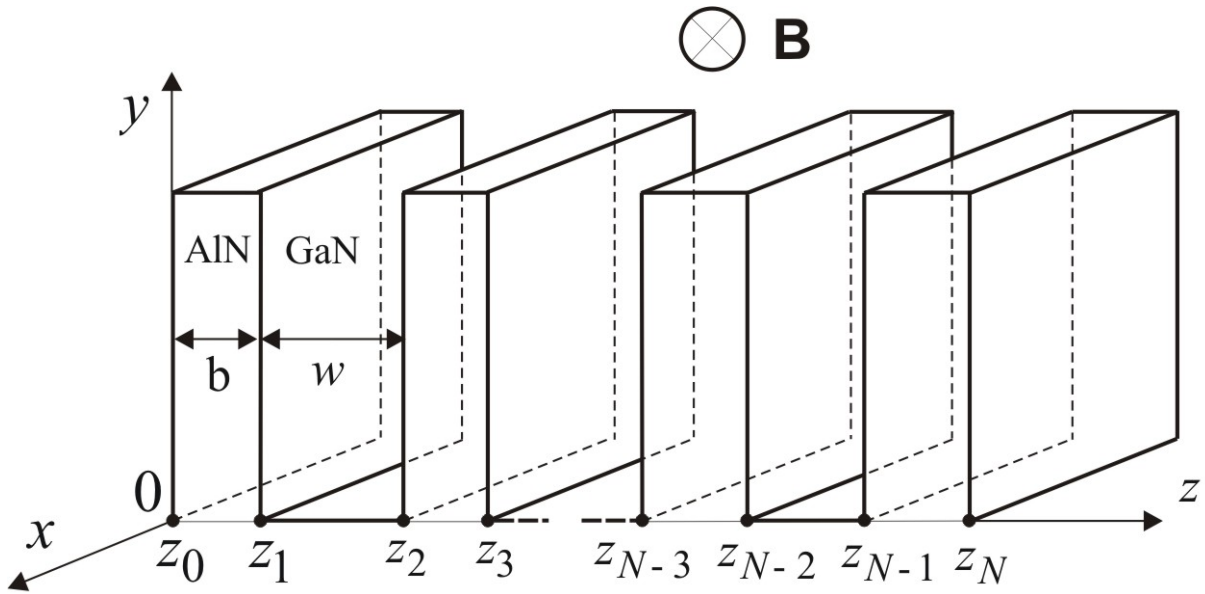


Рис. 6.10. Геометрична та енергетична схема багатошарової GaN/AlN наноструктури.

Постійне внутрішнє електричне поле напруженість якого F спрямована вздовж наносистеми має природу, що пов'язана з виникненням у напівпровідникових шарах спонтанної та п'єзоелектричної поляризації, сумарна величина яких має різний знак у потенціальних ямах та бар'єрах наносистеми. Більш детально про цей факт обговорюється у в Розділі 3. Взаємодія електрона з таким полем описується наступним виразом :

$$U_e(z) = e \sum_{p=0}^N (-1)^p F_{p+1} \left(z - \frac{F_p}{F_{p+1}} z_p \right) \left[\theta(z - z_p) - \theta(z - z_{p+1}) \right], F_0 = F_{N+1} = 0; \quad (6.109)$$

$$U_e(z) \Big|_{z < 0} (z > z_N) = 0.$$

де враховано, що в зовнішньому середовищі електричне поле відсутнє.

Також прийmemo до уваги, що в межах наносистеми ($0 \leq z \leq z_N$) існує постійне магнітне поле напруженості B . Магнітне поля є напрямлене вздовж осі Ox , тобто таким чином, що вектори внутрішнього електричного поля \vec{F} та магнітного поля \vec{B} є взаємно перпендикулярними. Такий випадок відповідає ситуації наноприладів досліджуваних у експериментальних працях [261-263]. В такому разі відповідний векторний потенціал магнітного поля може бути поданий у такому вигляді:

$$\vec{A} = (Bz, 0, 0). \quad (6.110)$$

Отже, часозалежна задача, що описує тунелювання електронів в загальному випадку потребує відшукування повного рівняння Шредінгера виду:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(r,t)}{\partial t} = H(r,t) \Psi(r,t), r = (x, y, z), \quad (6.111)$$

де електронний гамільтоніан має такий вигляд:

$$\hat{H}(r,t) = \frac{1}{2m(z)} \left[\left(\hat{p}_x - \frac{e}{c} \hat{A}_x \right)^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2 \right] + U(z) + U_e(z) + U_{e-em}(z,t). \quad (6.112)$$

причому ефективна маса електрона в наносистемі для зручності може бути подана у такому вигляді:

$$m(z) = m_w \left[\theta(-z) + \theta(z - z_N) \right] + \sum_{p=1}^N m_p \left[\theta(z - z_p) - \theta(z - z_{p+1}) \right]; m_p = \begin{cases} m_w, & \text{ями} \\ m_b, & \text{бар'єри} \end{cases} \quad (6.113)$$

де m_w і m_b - ефективні маси електрона у матеріалі потенціальних ям та бар'єрів відповідно, $\theta(z)$ - одинична функція Хевісайда.

У рівнянні (6.111) доцільним є попередньо виконати розділення змінних для чого шукану хвильову функцію ми подамо у такому вигляді:

$$\Psi(r,t) = \exp(ik_x x) \exp(ik_y y) \psi(z,t). \quad (6.114)$$

Після підстановки (6.114) у рівняння (6.111) з урахуванням (6.110), (6.112) і (6.113) ми отримуємо:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi(z,t)}{\partial t} &= \left(\frac{P_z^2}{2m_p} + \frac{\hbar^2}{2m_p} \left[\left(k_x - \frac{eBz}{\hbar} \right)^2 + k_y^2 \right] \right) + \\ &+ U_0 + (-1)^p e (F_{p+1}z - F_p z_p) - 2ez\xi \cos \omega t \psi(z,t); \end{aligned} \quad (6.115)$$

$$\frac{P_z^2}{2m_p} = -\frac{\hbar^2}{2m_p} \frac{d^2}{dz^2}.$$

Для рівнянь виду (6.115) зручно увести стандартні для них величини – магнітну довжину L та центр циклотронної орбіти $Z_0^{(p)}$ (різної для різних шарів наносистеми):

$$L = \sqrt{\hbar/eB}; Z_0^{(p)} = m_p F_p / eB^2. \quad (6.116)$$

Маємо тепер:

$$\begin{aligned} &\frac{\hbar^2}{2m_p} \left[\left(k_x - \frac{eBz}{\hbar} \right)^2 + k_y^2 \right] + U_0 + (-1)^p e (F_{p+1}z - F_p z_p) = \\ &= \frac{\hbar^2}{2m_p} \left[\left(k_x - \frac{z}{L^2} \right)^2 + k_y^2 \right] + U_0 + (-1)^p e (F_{p+1}z - F_p z_p) = \\ &= \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_p} - \frac{\hbar^2}{2m_p} \cdot 2k_x \frac{z}{L^2} + \frac{\hbar^2}{2m_p} \frac{z^2}{L^4} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_p} + U_0 + (-1)^p e (F_{p+1}z - F_p z_p) = \\ &= \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_p} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_p} + (-1)^{p+1} e F_p z_p + \frac{\hbar^2}{2m_p} \frac{z^2}{L^4} + U_0 + \left[(-1)^p e F_{p+1} - \frac{\hbar^2 k_x}{m_p L^2} \right] z = \\ &= \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_p} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_p} + (-1)^{p+1} e F_p z_p + U_0 + \frac{\hbar^2}{2m_p L^4} \left\{ z^2 + \frac{2m_p L^4}{\hbar^2} \left[(-1)^p e F_{p+1} - \frac{\hbar^2 k_x}{m_p L^2} \right] z \right\} = \\ &= \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_p} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_p} + (-1)^{p+1} e F_p z_p + U_0 + \\ &+ \frac{\hbar^2}{2m_p L^4} \left\{ z^2 + 2 \left[(-1)^p \frac{m_p F_{p+1}}{e^2 B^2} - 2k_x L^2 \right] z + \left[(-1)^p \frac{m_p}{m_{p+1}} Z_0^{(p+1)} - 2k_x L^2 \right]^2 - \right. \\ &\left. - \left[(-1)^p \frac{m_p}{m_{p+1}} Z_0^{(p+1)} - 2k_x L^2 \right] \right\} = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_p} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_p} + (-1)^{p+1} eF_p z_p - \frac{\hbar^2}{2m_p L^4} \left[(-1)^p \frac{m_p}{m_{p+1}} Z_0^{(p+1)} - 2k_x L^2 \right] + U_0 + \\
&+ \frac{\hbar^2}{2m_p L^4} \left\{ \left(z + \left[(-1)^p \frac{m_p}{m_{p+1}} Z_0^{(p+1)} - 2k_x L^2 \right] \right)^2 \right\}.
\end{aligned} \tag{6.117}$$

Позначимо тепер:

$$\tilde{Z}_0^{(p)} = (-1)^p \frac{m_p}{m_{p+1}} Z_0^{(p+1)} - 2k_x L^2, \tag{6.118}$$

тоді будемо мати:

$$\begin{aligned}
&i\hbar \frac{\partial \psi(z,t)}{\partial t} = \\
&= \left[\frac{P_z^2}{2m_p} + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_p} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_p} + U_0 + (-1)^{p+1} eF_p z_p - \frac{\hbar^2 \tilde{Z}_0^{(p)}}{2m_p L^4} + \frac{\hbar^2}{2m_p L^4} \left(z + \tilde{Z}_0^{(p)} \right)^2 - 2ez\xi \cos \omega t \right] \psi(z,t)
\end{aligned} \tag{6.119}$$

Далі доцільно зробити таку заміну:

$$\begin{aligned}
v &= \frac{z - \tilde{Z}_0^{(p)}}{L}; \quad \frac{d}{dz} = \frac{d}{dv} \frac{dv}{dz} = \frac{1}{L} \frac{d}{dv}; \quad \frac{d^2}{dz^2} = \frac{d}{dz} \left(\frac{1}{L} \frac{d}{dv} \right) = \frac{1}{L^2} \frac{d^2}{dv^2}; \\
\frac{P_z^2}{2m_p} &= \frac{P_v^2}{2m_p L^2}; \quad P_v = -i\hbar \frac{d}{dv}.
\end{aligned} \tag{6.120}$$

Тоді будемо мати:

$$\begin{aligned}
&i\hbar \frac{\partial \psi(v,t)}{\partial t} = \left[\frac{P_v^2}{2m_p L^2} + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_p} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_p} + U_0 + (-1)^{p+1} eF_p z_p - \right. \\
&\left. - \frac{\hbar^2 \tilde{Z}_0^{(p)}}{2m_p L^4} + \frac{\hbar^2}{2m_p L^2} v^2 - 2e(vL + \tilde{Z}_0^{(p)}) \xi \cos \omega t \right] \psi(v,t).
\end{aligned} \tag{6.121}$$

Електронний гамільтоніан в рівнянні (6.121) далі є доцільним подати згруповуючи його компоненти, які явно залежать від координати v та часу t :

$$\begin{aligned}
H_p(t) &= \frac{P_v^2}{2m_p L^2} + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_p} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_p} + U_0 + (-1)^{p+1} e F_p z_p - \frac{\hbar^2 \tilde{Z}_0^{(p)}}{2m_p L^4} - 2e\tilde{Z}_0^{(p)} \xi \cos \omega t + \\
&+ \frac{\hbar^2}{2m_p L^2} v^2 - 2evL\xi \cos \omega t = \frac{P_v^2}{2m_p L^2} + W(t) + \frac{\hbar^2}{2m_p L^2} v^2 - 2evL\xi \cos \omega t; \\
W(t) &= \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_p} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_p} + U_0 + (-1)^{p+1} e F_p z_p - \frac{\hbar^2 \tilde{Z}_0^{(p)}}{2m_p L^4} - 2e\tilde{Z}_0^{(p)} \xi \cos \omega t = \\
&= W_0 - 2e\tilde{Z}_0^{(p)} \xi \cos \omega t; \\
W_0 &= \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_p} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_p} + U_0 + (-1)^{p+1} e F_p z_p - \frac{\hbar^2 \tilde{Z}_0^{(p)}}{2m_p L^4}.
\end{aligned} \tag{6.122}$$

то звідси тепер легко можна бачити, що він є ермітовим, тому що це впливає з того, що кожна з його складових ермітова. Такий гамільтоніан не зважаючи на наявність квадратичних доданків за координатою та імпульсом не є схожим з гамільтоніанами, які розглядалися при наявності магнітного поля у вихідній праці [219] (де залежність від часу вносилась через векторний потенціал магнітного поля $A = A(t)$) чи працях [229-236] (де залежність від часу вносилась для прикладу через залежність від часу маси $m = m(t)$ чи частоти $\omega = \omega(t)$). Як можна бачити із виразу (6.122) в нашому випадку залежна від часу складова гамільтоніана є пропорційною величині: $\xi \cos \omega t$.

Для нашого випадку також цікавим моментом є можливість отримати класичні рівняння руху електрона виходячи із співвідношень:

$$\begin{aligned}
\dot{P}_v &= -\frac{\partial H_p(t)}{\partial v} = -\frac{\partial}{\partial v} \left\{ \frac{P_v^2}{2m_p L^2} + W(t) + \frac{\hbar^2}{2m_p L^2} v^2 - 2evL\xi \cos \omega t \right\} = \\
&= \frac{\hbar^2}{m_p L^2} v - 2eL\xi \cos \omega t; \\
\dot{v} &= \frac{\partial H_p(t)}{\partial P_v} = \frac{\partial}{\partial P_v} \left\{ \frac{P_v^2}{2m_p L^2} + W(t) + \frac{\hbar^2}{2m_p L^2} v^2 - 2evL\xi \cos \omega t \right\} = \frac{P_v}{m_p L^2}; \\
\ddot{v} &= \frac{\dot{P}_v}{m_p L^2} = \frac{1}{m_p L^2} \left(\frac{\hbar^2}{m_p L^2} v - 2eL\xi \cos \omega t \right) = \left(\frac{\hbar}{m_p L^2} \right)^2 v - \frac{2e\xi}{m_p L} \cos \omega t.
\end{aligned} \tag{6.123}$$

Розв'язки рівняння руху (6.123) такі:

$$\nu(t) = C_1 \exp\left(\frac{\hbar t}{m_p L^2}\right) + C_2 \exp\left(-\frac{\hbar t}{m_p L^2}\right) + \frac{2em_p L^3 \xi}{\hbar^2 + (m_p \omega L^2)^2}. \quad (6.124)$$

Для заходження розв'язків повного рівняння Шредінгера (6.121) враховуючи вигляд гамільтоніана (6.122) будемо шукати квантово-механічний інваріант застосовуючи метод Lewis-Riesenfeld. Для цього використовується таке рівняння:

$$\frac{dI(t)}{dt} = \frac{\partial I(t)}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [I(t), H(t)] = 0. \quad (6.125)$$

Оскільки гамільтоніан (6.122) містить доданки лінійні та квадратичні за координатою так і квадратичні за імпульсом P_v , то інваріант слід шукати у найбільш загальній його формі, а саме:

$$I(t) = \alpha(t)P_v^2 + \beta(t)\nu + \gamma(t)\nu^2 + \delta(t)(\nu P_v + P_v \nu) + \Delta(t). \quad (6.126)$$

Маємо:

$$\frac{\partial I(t)}{\partial t} = \frac{\partial \alpha(t)}{\partial t} P_v^2 + \frac{\partial \beta(t)}{\partial t} \nu + \frac{\partial \gamma(t)}{\partial t} \nu^2 + \frac{\partial \delta(t)}{\partial t} (\nu P_v + P_v \nu) + \frac{\partial \Delta(t)}{\partial t}. \quad (6.127)$$

$$\begin{aligned} [I(t), H(t)] &= \left[\alpha(t)P_v^2 + \beta(t)\nu + \gamma(t)\nu^2 + \delta(t)(\nu P_v + P_v \nu) + \Delta(t), \frac{P_v^2}{2m_p L^2} + W(t) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\hbar^2}{2m_p L^2} \nu^2 - 2e\nu L \xi \cos \omega t \right] = \\ &= \frac{\alpha(t)}{2m_p L^2} [P_v^2, P_v^2] + \alpha(t) [P_v^2, W(t)] + \frac{\hbar^2 \alpha(t)}{2m_p L^2} [P_v^2, \nu^2] - 2eL\xi \alpha(t) \cos \omega t [P_v^2, \nu] + \\ &\quad + \frac{\beta(t)}{2m_p L^2} [\nu, P_v^2] + \beta(t) [\nu, W(t)] + \frac{\hbar^2 \beta(t)}{2m_p L^2} [\nu, \nu^2] - 2eL\xi \beta(t) \cos \omega t [\nu, \nu] + \\ &\quad + \frac{\gamma(t)}{2m_p L^2} [\nu^2, P_v^2] + \gamma(t) [\nu^2, W(t)] + \frac{\hbar^2 \gamma(t)}{2m_p L^2} [\nu^2, \nu^2] - 2eL\xi \gamma(t) \cos \omega t [\nu^2, \nu] + \\ &\quad + \frac{\delta(t)}{2m_p L^2} [\nu P_v + P_v \nu, P_v^2] + \delta(t) [\nu P_v + P_v \nu, W(t)] + \frac{\hbar^2 \delta(t)}{2m_p L^2} [\nu P_v + P_v \nu, \nu^2] - \\ &\quad - 2eL\xi \delta(t) \cos \omega t [\nu P_v + P_v \nu, \nu] + \\ &\quad + \frac{\Delta(t)}{2m_p L^2} [1, P_v^2] + [\Delta(t), W(t)] + \frac{\Delta(t) \hbar^2}{2m_p L^2} [1, \nu^2] - 2eL\xi \Delta(t) \cos \omega t [1, \nu]. \end{aligned} \quad (6.128)$$

Обчислимо тепер усі комутатори:

$$\begin{aligned}
\frac{\alpha(t)}{2m_p L^2} [P_v^2, P_v^2] &= 0; \alpha(t) [P_v^2, W(t)] = 0; \frac{\hbar^2 \alpha(t)}{2m_p L^2} [P_v^2, v^2] = \frac{i\hbar^3 \alpha(t)}{m_p L^2} (vP_v + P_v v); \\
-2eL\xi\alpha(t) \cos \omega t [P_v^2, v] &= 4ie\hbar L\xi\alpha(t) P_v \cos \omega t; \\
\frac{\beta(t)}{2m_p L^2} [v, P_v^2] &= i\frac{\hbar\beta(t)}{m_p L^2} P_v; \beta(t) [v, W(t)] = 0; \frac{\hbar^2 \beta(t)}{2m_p L^2} [v, v^2] = 0; -2eL\xi\beta(t) \cos \omega t [v, v] = 0; \\
\frac{\gamma(t)}{2m_p L^2} [v^2, P_v^2] &= -\frac{i\hbar\gamma(t)}{m_p L^2} (vP_v + P_v v); \gamma(t) [v^2, W(t)] = 0; \frac{\hbar^2 \gamma(t)}{2m_p L^2} [v^2, v^2] = 0; \\
-2eL\xi\gamma(t) \cos \omega t [v^2, v] &= 0; \frac{\delta(t)}{2m_p L^2} [vP_v + P_v v, P_v^2] = \frac{\delta(t)}{2m_p L^2} 4i\hbar P_v^2 = \frac{2i\hbar\delta(t)}{m_p L^2} P_v^2; \\
\delta(t) [vP_v + P_v v, W(t)] &= 0; \\
\frac{\hbar^2 \delta(t)}{2m_p L^2} [vP_v + P_v v, v^2] &= -\frac{\hbar^2 \delta(t)}{2m_p L^2} \cdot 4i\hbar v^2 = -\frac{2i\hbar^3 \delta(t)}{m_p L^2} v^2; \\
-2eL\xi\delta(t) \cos \omega t [vP_v + P_v v, v] &= (4ie\hbar L\xi\delta(t) \cos \omega t) v; \\
\frac{\Delta(t)}{2m_p L^2} [1, P_v^2] &= 0; [\Delta(t), W(t)] = 0; \frac{\Delta(t)\hbar^2}{2m_p L^2} [1, v^2] = 0; -2eL\xi\Delta(t) \cos \omega t [1, v] = 0.
\end{aligned} \tag{6.129}$$

Отримуємо:

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial \alpha(t)}{\partial t} P_v^2 + \frac{\partial \beta(t)}{\partial t} v + \frac{\partial \gamma(t)}{\partial t} v^2 + \frac{\partial \delta(t)}{\partial t} (vP_v + P_v v) + \frac{\partial \Delta(t)}{\partial t} - \\
&-\frac{i}{\hbar} \left\{ \frac{i\hbar^3 \alpha(t)}{m_p L^2} (vP_v + P_v v) + 4ie\hbar L\xi\alpha(t) P_v \cos \omega t + i\frac{\hbar\beta(t)}{m_p L^2} P_v - \frac{i\hbar\gamma(t)}{m_p L^2} (vP_v + P_v v) + \right. \\
&+ \left. \frac{2i\hbar\delta(t)}{m_p L^2} P_v^2 - \frac{2i\hbar^3 \delta(t)}{m_p L^2} v^2 + (4ie\hbar L\xi\delta(t) \cos \omega t) v \right\} = 0; \\
&\frac{\partial \alpha(t)}{\partial t} P_v^2 + \frac{\partial \beta(t)}{\partial t} v + \frac{\partial \gamma(t)}{\partial t} v^2 + \frac{\partial \delta(t)}{\partial t} (vP_v + P_v v) + \frac{\partial \Delta(t)}{\partial t} + \\
&+ \frac{\hbar^2 \alpha(t)}{m_p L^2} (vP_v + P_v v) + 4eL\xi\alpha(t) P_v \cos \omega t + \frac{\beta(t)}{m_p L^2} P_v - \frac{\gamma(t)}{m_p L^2} (vP_v + P_v v) + \\
&+ \frac{2\delta(t)}{m_p L^2} P_v^2 - \frac{2\hbar^2 \delta(t)}{m_p L^2} v^2 + (4eL\xi\delta(t) \cos \omega t) v;
\end{aligned} \tag{6.130}$$

Після обчислення $\partial I(t)/\partial t$ та усіх комутаторів й підстановки результатів у співвідношення (6.125) отримується таке рівняння:

$$\begin{aligned} & \left[\frac{\partial \alpha(t)}{\partial t} + \frac{2\delta(t)}{m_p L^2} \right] P_v^2 + \left[\frac{\partial \beta(t)}{\partial t} + 4eL\xi\delta(t)\cos\omega t \right] \nu + \left[\frac{\partial \gamma(t)}{\partial t} - \frac{2\hbar^2\delta(t)}{m_p L^2} \right] \nu^2 + \\ & + \left[\frac{\partial \delta(t)}{\partial t} + \frac{\hbar^2\alpha(t)}{m_p L^2} - \frac{\gamma(t)}{m_p L^2} \right] (\nu P_v + P_v \nu) + \left[4eL\xi\alpha(t)\cos\omega t + \frac{\beta(t)}{m_p L^2} \right] P_v + \frac{\partial \Delta(t)}{\partial t} = 0. \end{aligned} \quad (6.131)$$

Рівність (6.131) задовольняється у тому випадку, якщо всі вирази в дужках, що є коефіцієнтами при P_v ; P_v^2 ; ν ; ν^2 ; $\nu P_v + P_v \nu$, а також величина $\partial \Delta(t)/\partial t$ мають бути рівними нулю. Це приводить до такої системи диференціальних рівнянь першого порядку:

$$\begin{aligned} & \left[\begin{array}{l} \frac{\partial \alpha(t)}{\partial t} + \frac{2\delta(t)}{m_p L^2} = 0; \\ \frac{\partial \beta(t)}{\partial t} + 4eL\xi\delta(t)\cos\omega t = 0; \\ \frac{\partial \gamma(t)}{\partial t} - \frac{2\hbar^2\delta(t)}{m_p L^2} = 0; \\ \frac{\partial \delta(t)}{\partial t} + \frac{\hbar^2\alpha(t)}{m_p L^2} - \frac{\gamma(t)}{m_p L^2} = 0; \\ 4eL\xi\alpha(t)\cos\omega t + \frac{\beta(t)}{m_p L^2} = 0; \\ \frac{\partial \Delta(t)}{\partial t} = 0. \end{array} \right. \Rightarrow \left[\begin{array}{l} \frac{\partial \alpha(t)}{\partial t} + \frac{2\delta(t)}{m_p L^2} = 0; \\ \frac{\partial \beta(t)}{\partial t} + 4eL\xi\delta(t)\cos\omega t = 0; \\ \frac{\partial \gamma(t)}{\partial t} - \frac{2\hbar^2\delta(t)}{m_p L^2} = 0; \\ \frac{\partial \delta(t)}{\partial t} + \frac{\hbar^2\alpha(t)}{m_p L^2} - \frac{\gamma(t)}{m_p L^2} = 0; \\ \alpha(t) = -\frac{\beta(t)}{4em_p\xi L^3 \cos\omega t}; \\ \Delta(t) = \Delta_0. \end{array} \right. \end{aligned} \quad (6.132)$$

З останніх двох рівнянь відразу слідує:

$$\alpha(t) = -\frac{\beta(t)}{4em_p\xi L^3 \cos\omega t}; \quad \Delta(t) = \Delta_0. \quad (6.133)$$

Враховуючи розмірність інваріанта (6.126) величину Δ_0 виберемо в такому вигляді:

$$\Delta_0 = \begin{cases} 0, & \text{ями} \\ W_0, & \text{бар'єри} \end{cases} \quad (6.134)$$

Диференціюючи четверте рівняння системи (6.132) й використовуючи в ньому перше та третє рівняння, щоб виключити з нього $\partial\alpha(t)/\partial t$ і $\partial\gamma(t)/\partial t$ будемо мати:

$$\begin{aligned} \frac{\partial\delta(t)}{\partial t} + \frac{\hbar^2\alpha(t)}{m_p L^2} - \frac{\gamma(t)}{m_p L^2} = 0 &\Rightarrow \frac{\partial^2\delta(t)}{\partial t^2} + \frac{\hbar^2}{m_p L^2} \frac{\partial\alpha(t)}{\partial t} - \frac{1}{m_p L^2} \frac{\partial\gamma(t)}{\partial t}; \\ \frac{\partial\gamma(t)}{\partial t} = \frac{2\hbar^2\delta(t)}{m_p L^2}; \quad \frac{\partial\alpha(t)}{\partial t} = -\frac{2\delta(t)}{m_p L^2} &\Rightarrow \frac{\partial^2\delta(t)}{\partial t^2} + \frac{\hbar^2}{m_p L^2} \left(-\frac{2\delta(t)}{m_p L^2}\right) - \frac{1}{m_p L^2} \frac{2\hbar^2\delta(t)}{m_p L^2} = 0 \Rightarrow \\ \frac{\partial^2\delta(t)}{\partial t^2} - \left(\frac{2\hbar}{m_p L^2}\right)^2 \delta(t) = 0. & \end{aligned} \quad (6.135)$$

Розв'язки останнього рівняння мають такий вигляд:

$$\delta(t) = A \exp\left(-\frac{2\hbar}{m_p L^2} t\right) + B \exp\left(\frac{2\hbar}{m_p L^2} t\right). \quad (6.136)$$

Повертаючись до перших двох рівнянь у (6.132) з урахуванням (6.136) отримуємо:

$$\begin{aligned} \frac{\partial\alpha(t)}{\partial t} = -\frac{2}{m_p L^2} \left[A \exp\left(-\frac{2\hbar}{m_p L^2} t\right) + B \exp\left(\frac{2\hbar}{m_p L^2} t\right) \right]; \\ \frac{\partial\gamma(t)}{\partial t} = \frac{2\hbar^2}{m_p L^2} \left[A \exp\left(-\frac{2\hbar}{m_p L^2} t\right) + B \exp\left(\frac{2\hbar}{m_p L^2} t\right) \right], \end{aligned} \quad (6.137)$$

звідки з урахуванням (6.133) будемо мати такі загальні розв'язки:

$$\begin{aligned} \alpha(t) &= \frac{1}{\hbar} \left[A \exp\left(-\frac{2\hbar}{m_p L^2} t\right) - B \exp\left(\frac{2\hbar}{m_p L^2} t\right) \right] + \alpha_0; \\ \beta(t) &= -4em_p \xi L^3 \cos \omega t \alpha(t) = -4em_p \xi L^3 \left\{ \frac{1}{\hbar} \left[A \exp\left(-\frac{2\hbar}{m_p L^2} t\right) - B \exp\left(\frac{2\hbar}{m_p L^2} t\right) \right] + \alpha_0 \right\} \cos \omega t; \\ \gamma(t) &= \hbar \left[-A \exp\left(-\frac{2\hbar}{m_p L^2} t\right) + B \exp\left(\frac{2\hbar}{m_p L^2} t\right) \right] + \gamma_0. \end{aligned} \quad (6.138)$$

де $\alpha_0; \gamma_0$ - довільні константи.

Оскільки розв'язки (6.136) і (6.138) є обмеженими, тобто $[\alpha(t), \beta(t), \gamma(t), \delta(t), \Delta(t)] < +\infty, t \in (0, +\infty)$, то в цих співвідношеннях слід прийняти, що $B = 0$.

Отже:

$$\left[\begin{array}{l} \alpha(t) = \frac{A}{\hbar} \exp\left(-\frac{2\hbar}{m_p L^2} t\right) + \alpha_0; \\ \beta(t) = -4em_p \xi L^3 \left\{ \frac{A}{\hbar} \exp\left(-\frac{2\hbar}{m_p L^2} t\right) + \alpha_0 \right\} \cos \omega t; \\ \gamma(t) = -\hbar A \exp\left(-\frac{2\hbar}{m_p L^2} t\right) + \gamma_0; \\ \delta(t) = A \exp\left(-\frac{2\hbar}{m_p L^2} t\right); \\ \Delta(t) = \Delta_0. \end{array} \right. \quad (6.139)$$

Підставляючи отриманий результат (6.139) у вираз для інваріанта (6.126) знаходимо:

$$\begin{aligned} I(t) = & \left[\frac{A}{\hbar} \exp\left(-\frac{2\hbar}{m_p L^2} t\right) + \alpha_0 \right] P_v^2 - 4em_p \xi L^3 \cos \omega t \left[\frac{A}{\hbar} \exp\left(-\frac{2\hbar}{m_p L^2} t\right) + \alpha_0 \right] v + \\ & + \left[-\hbar A \exp\left(-\frac{2\hbar}{m_p L^2} t\right) + \gamma_0 \right] v^2 + \left[A \exp\left(-\frac{2\hbar}{m_p L^2} t\right) \right] (v P_v + P_v v) + \Delta_0. \end{aligned} \quad (6.140)$$

Підставимо у (6.140), дотримуючись збереження розмірності всіх доданків інваріанта, такі значення:

$$\alpha_0 = \frac{1}{2m_p L^2}; \quad A = \frac{\hbar}{2m_p L^2} = \hbar \alpha_0; \quad \gamma_0 = \frac{\hbar^2}{2m_p L^2}. \quad (6.141)$$

Тоді після спрощень отримуємо шуканий інваріант у такому вигляді:

$$\begin{aligned}
I(t) &= \left[\frac{1}{2m_p L^2} \exp\left(-\frac{2\hbar}{m_p L^2} t\right) + \frac{1}{2m_p L^2} \right] P_v^2 - \\
&- 4em_p \xi L^3 \cos \omega t \left[\frac{1}{2m_p L^2} \exp\left(-\frac{2\hbar}{m_p L^2} t\right) + \frac{1}{2m_p L^2} \right] v + \\
&+ \left[-\frac{\hbar^2}{2m_p L^2} \exp\left(-\frac{2\hbar}{m_p L^2} t\right) + \frac{\hbar^2}{2m_p L^2} \right] v^2 + \left[\frac{\hbar}{2m_p L^2} \exp\left(-\frac{2\hbar}{m_p L^2} t\right) \right] (vP_v + P_v v) + W_0 = \\
&= \frac{1}{2m_p L^2} \left[\exp\left(-\frac{2\hbar}{m_p L^2} t\right) + 1 \right] P_v^2 - 2e\xi L v \cos \omega t \left[\exp\left(-\frac{2\hbar}{m_p L^2} t\right) + 1 \right] + \\
&+ \frac{\hbar^2}{2m_p L^2} \left[1 - \exp\left(-\frac{2\hbar}{m_p L^2} t\right) \right] v^2 + \frac{\hbar}{2m_p L^2} \exp\left(-\frac{2\hbar}{m_p L^2} t\right) (vP_v + P_v v) + W_0. \tag{6.142}
\end{aligned}$$

Далі ми розглянемо рівняння на власні значення λ оператора $I(t)$:

$$I_p(t)\Phi_\lambda(v,t) = \lambda\Phi_\lambda(v,t);$$

$$\begin{aligned}
&\left\{ \frac{1}{2m_p L^2} \left[1 + \exp\left(-\frac{2\hbar}{m_p L^2} t\right) \right] P_v^2 - 2e\xi L v \cos \omega t \left[1 + \exp\left(-\frac{2\hbar}{m_p L^2} t\right) \right] + \right. \\
&+ \left. \frac{\hbar^2}{2m_p L^2} \left[1 - \exp\left(-\frac{2\hbar}{m_p L^2} t\right) \right] v^2 + \frac{\hbar}{2m_p L^2} \exp\left(-\frac{2\hbar}{m_p L^2} t\right) (vP_v + P_v v) + W_0 \right\} \Phi_\lambda(v,t) = \\
&= \lambda\Phi_\lambda(v,t); \\
&\left[\frac{P_v^2}{2m_p L^2} - 2e\xi L v \cos \omega t + \frac{\hbar^2}{2m_p L^2} \frac{1 - \exp\left(-\frac{2\hbar}{m_p L^2} t\right)}{1 + \exp\left(-\frac{2\hbar}{m_p L^2} t\right)} v^2 + \right. \\
&\left. + \frac{\hbar(vP_v + P_v v)}{2m_p L^2 \left[1 + \exp\left(-\frac{2\hbar}{m_p L^2} t\right) \right]} + \frac{W_0 - \lambda}{1 + \exp\left(-\frac{2\hbar}{m_p L^2} t\right)} \right] \Phi_\lambda(v,t) = 0;
\end{aligned}$$

$$\left[\frac{P_v^2}{2m_p L^2} - 2e\xi L v \cos \omega t + \frac{\hbar^2}{2m_p L^2} \operatorname{Tanh} \left(\frac{\hbar}{m_p L^2} t \right) v^2 + \right. \\ \left. + \frac{\hbar(vP_v + P_v v)}{2m_p L^2 \left[1 + \exp \left(\frac{2\hbar}{m_p L^2} t \right) \right]} + \frac{W_0 - \lambda}{1 + \exp \left(-\frac{2\hbar}{m_p L^2} t \right)} \right] \Phi_\lambda(v, t) = 0. \quad (6.143)$$

Після досить громіздких перетворень будемо мати таке рівняння:

$$\frac{\hbar(vP_v + P_v v)}{2m_p L^2 \left[1 + \exp \left(\frac{2\hbar}{m_p L^2} t \right) \right]} = - \frac{i\hbar^2}{2m_p L^2 \left[1 + \exp \left(\frac{2\hbar}{m_p L^2} t \right) \right]} \left(v \frac{\partial}{\partial v} + \frac{\partial}{\partial v} v \right); \\ - \frac{i\hbar^2}{2m_p L^2 \left[1 + \exp \left(\frac{2\hbar}{m_p L^2} t \right) \right]} \left(v \frac{\partial}{\partial v} + \frac{\partial}{\partial v} v \right) \Phi_\lambda(v, t) = \\ = - \frac{i\hbar^2}{m_p L^2 \left[1 + \exp \left(\frac{2\hbar}{m_p L^2} t \right) \right]} v \frac{\partial \Phi_\lambda}{\partial v} - \frac{i\hbar^2}{2m_p L^2 \left[1 + \exp \left(\frac{2\hbar}{m_p L^2} t \right) \right]} \Phi_\lambda; \\ \left[- \frac{\hbar^2}{2m_p L^2} \frac{\partial^2}{\partial v^2} - 2e\xi L v \cos \omega t + \frac{\hbar^2}{2m_p L^2} \operatorname{Tanh} \left(\frac{\hbar}{m_p L^2} t \right) v^2 + \right. \\ \left. + \frac{\hbar(vP_v + P_v v)}{2m_p L^2 \left[1 + \exp \left(\frac{2\hbar}{m_p L^2} t \right) \right]} + \frac{W_0 - \lambda}{1 + \exp \left(-\frac{2\hbar}{m_p L^2} t \right)} \right] \Phi_\lambda(v, t) = 0; \\ - \frac{\partial^2 \Phi_\lambda}{\partial v^2} - \frac{4em_p \xi L^3}{\hbar^2} v \Phi_\lambda \cos \omega t - \frac{2i}{1 + \exp \left(\frac{2\hbar}{m_p L^2} t \right)} v \frac{\partial \Phi_\lambda}{\partial v} + \\ + \operatorname{Tanh} \left(\frac{\hbar}{m_p L^2} t \right) v^2 \Phi_\lambda + \left\{ \frac{2m_p L^2 (W_0 - \lambda)}{\hbar^2 \left[1 + \exp \left(-\frac{2\hbar}{m_p L^2} t \right) \right]} - \frac{i}{1 + \exp \left(\frac{2\hbar}{m_p L^2} t \right)} \right\} \Phi_\lambda = 0;$$

$$\frac{\partial^2 \Phi_\lambda}{\partial v^2} + \frac{2i}{1 + \exp\left(\frac{2\hbar}{m_p L^2} t\right)} v \frac{\partial \Phi_\lambda}{\partial v} + \left(-\text{Tanh}\left(\frac{\hbar}{m_p L^2} t\right) v^2 + \frac{4em_p \xi L^3}{\hbar^2} v \cos \omega t - \left[\frac{2m_p L^2 (W_0 - \lambda)}{\hbar^2 \left[1 + \exp\left(-\frac{2\hbar}{m_p L^2} t\right)\right]} - \frac{i}{1 + \exp\left(\frac{2\hbar}{m_p L^2} t\right)} \right] \right) \Phi_\lambda = 0. \quad (6.144)$$

Порівняємо це рівняння з таким:

$$y'' + (av + b)y' + (\tilde{\alpha}v^2 + \tilde{\beta}v + \tilde{\gamma})y = 0. \quad (6.145)$$

Перепишемо це рівняння у більш зручному вигляді, увівши такі позначення:

$$a = a(t) = 2i / \left[1 + \exp\left(\frac{2\hbar}{m_p L^2} t\right) \right]; \quad b = 0; \quad \tilde{\alpha} = \tilde{\alpha}(t) = -\text{Tanh}\left(\frac{\hbar}{m_p L^2} t\right);$$

$$\tilde{\beta} = \tilde{\beta}(t) = \frac{4em_p \xi L^3}{\hbar^2} \cos \omega t; \quad \tilde{\gamma} = \tilde{\gamma}(t) = - \left\{ \frac{2m_p L^2 (W_0 - \lambda)}{\hbar^2 \left[1 + \exp\left(-\frac{2\hbar}{m_p L^2} t\right) \right]} - \frac{i}{1 + \exp\left(\frac{2\hbar}{m_p L^2} t\right)} \right\}.$$

$$\Phi_\lambda'' + av\Phi_\lambda' + (\tilde{\alpha}v^2 + \tilde{\beta}v + \tilde{\gamma})\Phi_\lambda = 0. \quad (6.146)$$

Далі ми розглянемо таке допоміжне рівняння і його розв'язки:

$$4s^2 + 2as + \tilde{\alpha} = 0; \quad 4s^2 + 4is - \text{Tanh}\left(\frac{\hbar}{m_p L^2} t\right) = 0; \quad s = \frac{1}{2} \left(-i \pm \sqrt{\text{Tanh}\left(\frac{\hbar}{m_p L^2} t\right) - 1} \right). \quad (6.147)$$

Візьмемо тепер в якості розв'язку рівняння (6.146) такий вираз:

$$\Phi_\lambda(v) = u_\lambda(v) \exp(sv^2), \quad (6.148)$$

тоді будемо мати:

$$u_\lambda''(v) + (a + 4s)v u_\lambda'(v) + [\tilde{\beta}v + \tilde{\gamma} + 2s] u_\lambda(v) = 0. \quad (6.149)$$

Візьмемо тепер:

$$u_\lambda(v) = \eta_\lambda(\psi) \exp\left(-\frac{\tilde{\beta}}{a+4s}v\right); \quad (6.150)$$

$$\psi = \sqrt{|a+4s|} \left(v + \frac{(a+4s) \cdot 0 - 2\tilde{\beta}}{(a+4s)^2} \right) = \sqrt{|a+4s|} \left(v - \frac{2\tilde{\beta}}{(a+4s)^2} \right).$$

Тоді, після підстановки (6.150) у рівняння (6.149) отримуємо диференціальне рівняння у канонічній формі:

$$\frac{d^2\eta_\lambda}{dv^2} + \psi \frac{d\eta_\lambda}{dv} + \frac{\tilde{\beta}^2 + (a+4s)^2(\tilde{\gamma}+2s)}{(a+4s)^3} \eta_\lambda = 0. \quad (6.151)$$

Розв'язки цього рівняння мають вигляд лінійної комбінації полінома Ерміта $H_n(x) = H(n, x)$ та виродженої гіпергеометричної функції Куммера ${}_1F_1(a, b, z) = M(a, b, z)$ і є такими:

$$\eta_\lambda(\psi) = \exp\left(-\frac{\psi^2}{2}\right) \times$$

$$\times \left[C_1 H\left(\frac{\tilde{\beta}^2 + (a+4s)^2(\tilde{\gamma}+2s)}{(a+4s)^3} - 1, \frac{\psi}{\sqrt{2}}\right) + C_2 M\left(\frac{1}{2} - \frac{\tilde{\beta}^2 + (a+4s)^2(\tilde{\gamma}+2s)}{2(a+4s)^3}, \frac{1}{2}, \frac{\psi^2}{2}\right) \right]. \quad (6.152)$$

Повертаючись тепер до (6.146) і (6.148) знаходимо вираз для геометричної фази:

$$\Phi_\lambda(v) = \exp(sv^2) \exp\left(-\frac{\tilde{\beta}}{a+4s}v\right) \exp\left(-\frac{\psi^2}{2}\right)$$

$$\times \left[C_1 H\left(\frac{\tilde{\beta}^2 + (a+4s)^2(\tilde{\gamma}+2s)}{(a+4s)^3} - 1, \frac{\psi}{\sqrt{2}}\right) + C_2 M\left(\frac{1}{2} - \frac{\tilde{\beta}^2 + (a+4s)^2(\tilde{\gamma}+2s)}{2(a+4s)^3}, \frac{1}{2}, \frac{\psi^2}{2}\right) \right] =$$

$$= \exp(sv^2) \exp\left(-\frac{\tilde{\beta}}{a+4s}v\right) \exp\left[-\frac{(a+4s)}{2} \left(v - \frac{2\tilde{\beta}}{(a+4s)^2} \right)^2\right]$$

$$\times \left\{ C_1 H\left[\frac{\tilde{\beta}^2 + (a+4s)^2(\tilde{\gamma}+2s)}{(a+4s)^3} - 1, \sqrt{\frac{|a+4s|}{2}} \left(v - \frac{2\tilde{\beta}}{(a+4s)^2} \right) \right] \right.$$

$$\left. + C_2 M\left[\frac{1}{2} - \frac{\tilde{\beta}^2 + (a+4s)^2(\tilde{\gamma}+2s)}{2(a+4s)^3}, \frac{1}{2}, \frac{(a+4s)}{2} \left(v - \frac{2\tilde{\beta}}{(a+4s)^2} \right)^2\right] \right\} =$$

$$\begin{aligned}
&= \exp \left[- \left(\frac{a}{2} + s \right) \nu^2 + \frac{\tilde{\beta}}{a+4s} \nu - \frac{2\tilde{\beta}^2}{(a+4s)^3} \right] \\
&\times \left\{ C_1 H \left[\frac{\tilde{\beta}^2 + (a+4s)^2 (\tilde{\gamma} + 2s)}{(a+4s)^3} - 1, \sqrt{\frac{|a+4s|}{2}} \left(\nu - \frac{2\tilde{\beta}}{(a+4s)^2} \right) \right] \right. \\
&\left. + C_2 M \left[\frac{1}{2} - \frac{\tilde{\beta}^2 + (a+4s)^2 (\tilde{\gamma} + 2s)}{2(a+4s)^3}, \frac{1}{2}, \frac{(a+4s)}{2} \left(\nu - \frac{2\tilde{\beta}}{(a+4s)^2} \right)^2 \right] \right\}. \quad (6.153)
\end{aligned}$$

де коефіцієнти C_1 та C_2 у розв'язках (6.153) слід знайти.

Нам слід чітко роз'яснити ситуацію з діями, які ми будемо виконувати далі. Ми безпосередньо приймаємо до уваги той факт, що згідно теорії методу Льюїса-Різенфілда електронна хвильова функція в довільному p -ому шарі наносистеми може бути подана у такому вигляді:

$$\Psi_{\lambda}^{(p)}(\nu, t) = \exp \left[i \delta_{\lambda}^{(p)}(t) \right] \Phi_{\lambda}^{(p)}(\nu, t), \quad (6.154)$$

де $\delta_{\lambda}^{(p)}(t)$ - це фазовий множник, який отримується шляхом підстановки (6.154) у повне рівняння Шредінгера (6.119), що дає таке рівняння:

$$\hbar \frac{d\delta_{\lambda}^{(p)}(t)}{dt} = \left\langle \Phi_{\lambda}^{(p)}(\nu, t) \left| i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_p(t) \right| \Phi_{\lambda}^{(p)}(\nu, t) \right\rangle. \quad (6.155)$$

У переважній більшості праць, пов'язаних з квантовим осцилятором [211-218, 229-238], а також у працях де розглядались задачі з гамільтоніанами, що гомологічні гамільтоніану (6.122) зазвичай приймалось, що система функцій $\{\Phi_{\lambda}(\nu, t)\}$ є ортогональною, а спектр значень λ - є стаціонарним та дискретним. Це значно спрощувало отримання самого спектру λ (зазвичай він визначався як $\lambda = n + 1/2$, $n \in \mathbb{Z}$) та виконання обчислення фазового множника $\delta_{\lambda}(t)$. В нашому ж випадку досліджувана наносистема є відкритою, що апріорі означає, що спектр є квазістаціонарним, а самі числа λ є комплексними. В такому разі, крім того ми не вважаємо систему функцій $\{\Phi_{\lambda}(\nu, t)\}$ в загальному випадку ортогональною й прийmemo до уваги факт того, що повна електронна хвильова функція у відкритій наносистемі є нормованою на дельта-функцію Дірака, тобто:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_{\lambda}(v,t) \Psi_{\lambda'}^*(v,t) dv = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp[i\delta_{\lambda}(t)] \Phi_{\lambda}(v,t) \exp[-i\delta_{\lambda'}(t)] \Phi_{\lambda'}^*(v,t) dv = \delta(\lambda' - \lambda), \quad (6.156)$$

причому інтегрування в (6.156) відбувається по всіх шарах наноструктури: $[z_{p-1}, z_p]$, $p \in \overline{1..N}$. Зокрема в (6.155) ми не інтегруємо не просто в безкінечних межах, а також в межах окремого шару наносистеми товщиною $\Delta_p = z_p - z_{p-1}$ та в областях середовища зліва та справа від наносистеми.

Для того, щоб продовжити нам необхідно мати усі коефіцієнти C_1 та C_2 в розв'язках (6.153). Це можливо зробити лише встановивши асимптотичну поведінку геометричної фази хвильової функції в областях зліва та справа від наносистеми де електронний гамільтоніан спрощується та має такий вигляд:

$$H(t) = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - 2ez\xi \cos \omega t. \quad (6.157)$$

Схожу задачу ми вирішували у пункті 6.3 цього розділу проте ми отримали необхідний розв'язок не прибігаючи до відшукування квантово-механічного інваріанта. Зовні наносистеми магнітне поле відсутнє, то в такому разі електронний гамільтоніан значно спрощується і має такий вигляд:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(z,t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - 2ez\xi \cos \omega t \right] \Psi(z,t). \quad (6.158)$$

Розв'язок цього рівняння можна встановити і без відшукування квантово-механічного інваріанта, проте для знаходження геометричної фази це необхідно зробити. Шукаємо інваріант у такому вигляді:

$$I(t) = a(t)P + b(t)z + c(t) \quad (6.159)$$

Електронний гамільтоніан тут, як можна бачити має такий вигляд:

$$H(t) = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - 2ez\xi \cos \omega t = \frac{p^2}{2m_0} + f(t)z; \quad p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}; \quad f(t) = -2e\xi \cos \omega t. \quad (6.160)$$

Підставляючи у рівняння (6.125) вирази (6.157) і (6.159) й обчисливши усі комутатори отримуємо:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial a}{\partial t} p + \frac{\partial b}{\partial t} z + \frac{\partial c}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} \left[ap + bz + c, \frac{p^2}{2m_0} + f(t)z \right] = 0; \\
& \left[ap + bz + c, \frac{p^2}{2m_0} + f(t)z \right] = \left[ap, \frac{p^2}{2m_0} \right] + [ap, f(t)z] + \left[bz, \frac{p^2}{2m_0} \right] + [bz, f(t)z] + \\
& + \left[c, \frac{p^2}{2m_0} \right] + [c, f(t)z]; \\
& \left[ap, \frac{p^2}{2m_0} \right] = \frac{a}{2m_0} [p, p^2] = 0; [ap, f(t)z] = af(t)[p, z] = -i\hbar af(t); \\
& \left[bz, \frac{p^2}{2m_0} \right] = \frac{b}{2m_0} [z, p^2] = i\hbar \frac{b}{m_0} p; [bz, f(t)z] = bf(t)[z, z] = 0; \\
& \left[c, \frac{p^2}{2m_0} \right] = \frac{c}{2m_0} [1, p^2] = 0; [c, f(t)z] = cf(t)[1, z] = 0.
\end{aligned} \tag{6.161}$$

$$\left(\frac{\partial a}{\partial t} + \frac{b}{m_0} \right) p + \frac{\partial b}{\partial t} z + \frac{\partial c}{\partial t} - af(t) = 0, \tag{6.162}$$

звідки отримується така систем рівнянь:

$$\begin{aligned}
& \begin{cases} \frac{\partial a}{\partial t} + \frac{b}{m_0} = 0; \\ \frac{\partial b}{\partial t} = 0; \\ \frac{\partial c}{\partial t} - af(t) = 0. \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \frac{\partial a}{\partial t} + \frac{b_0}{m_0} = 0; \\ b = b_0; \\ \frac{\partial c}{\partial t} - af(t) = 0. \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} a = -\frac{b_0}{m_0} t + a_0; \\ b = b_0; \\ c = \int \left(-\frac{b_0}{m_0} t + a_0 \right) f(t) dt + c_0. \end{cases} \\
& c = \int \left(-\frac{b_0}{m_0} t + a_0 \right) f(t) + c_0 = -2e\xi \int \left(-\frac{b_0}{m_0} t + a_0 \right) \cos \omega t dt + c_0 = \tag{6.163} \\
& = \frac{2e\xi}{m_0 \omega^2} [b_0 \cos \omega t + (b_0 t - a_0 m_0) \omega \sin \omega t] + c_0.
\end{aligned}$$

Не обмежуючи загальності ми візьмемо в якості констант інтегрування такі величини:

$$a_0 = \frac{1}{2m_0}; b_0 = \Omega; c_0 = 0, \tag{6.164}$$

де $\Omega = (E_n - i\Gamma_n/2)/\hbar$ - частота, що відповідає енергії енергетичного рівня, утвореного розмірним квантуванням у наноструктурі, на який потрапляють електрони моноенергетичного пучка.

Отже,

$$\begin{cases} a = -\frac{\Omega}{m_0}t + \frac{1}{2m_0} = \frac{1}{2m_0}(1 - 2\Omega t); \\ b = \Omega/\hbar; \\ c = \frac{e\xi}{m_0\omega^2} [2\Omega \cos \omega t + (2\Omega t - 1)\omega \sin \omega t]. \end{cases} \quad (6.165)$$

Повертаючись до (6.159) знаходимо:

$$I(t) = \frac{P}{2m_0} + \Omega z + \frac{e\xi}{m_0\omega^2} [2\Omega \cos \omega t + (2\Omega t - 1)\omega \sin \omega t]. \quad (6.166)$$

Тепер геометрична фаза $\Phi_\lambda(z, t)$ отримується шляхом розв'язання рівняння на власні значення λ інваріанта (6.159) з урахуванням (6.160):

$$\left\{ -\frac{i\hbar}{2m_0} \frac{\partial}{\partial z} + \Omega z + \frac{e\xi}{m_0\omega^2} [2\Omega \cos \omega t + (2\Omega t - 1)\omega \sin \omega t] - \lambda \right\} \Phi_\lambda(z, t) = 0. \quad (6.167)$$

Звідси:

$$\begin{aligned} & \left\{ \frac{\partial}{\partial z} + \frac{2im_0\Omega}{\hbar} z + \frac{2ie\xi}{\hbar\omega^2} [2\Omega \cos \omega t + (2\Omega t - 1)\omega \sin \omega t] - \frac{2im_0\lambda}{\hbar} \right\} \Phi_\lambda(z, t) = 0; \\ & \frac{\partial \Phi_\lambda(z, t)}{\Phi_\lambda(z, t)} = - \left\{ \frac{2im_0\Omega}{\hbar} z + \frac{2ie\xi}{\hbar\omega^2} [2\Omega \cos \omega t + (2\Omega t - 1)\omega \sin \omega t] - \frac{2im_0\lambda}{\hbar} \right\} dz; \\ & \Phi_\lambda(z, t) = \exp \left(-\frac{im_0\Omega}{\hbar} z^2 - \left\{ \frac{2ie\xi}{\hbar\omega^2} [2\Omega \cos \omega t + (2\Omega t - 1)\omega \sin \omega t] - \frac{2im_0\lambda}{\hbar} \right\} z \right) = \\ & = \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \left\{ m_0\Omega z^2 - \left\{ \frac{2e\xi}{\omega^2} [2\Omega \cos \omega t + (2\Omega t - 1)\omega \sin \omega t] - 2m_0\lambda \right\} z \right\} \right) = \\ & = \exp \left(-\frac{i}{\hbar} [\varphi_1 z^2 + \varphi_2(t) z] \right); \\ & \varphi_1 = m_0\Omega; \varphi_2(t) = -\frac{2e\xi}{\omega^2} [2\Omega \cos \omega t + (2\Omega t - 1)\omega \sin \omega t] + 2m_0\lambda. \end{aligned} \quad (6.168)$$

Скористаємось тепер співвідношенням (6.168) згідно якого:

$$\Phi_\lambda(z, t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}[\varphi_1 z^2 + \varphi_2(t)z]\right); \quad (6.169)$$

$$\varphi_1 = m_0 \Omega; \quad \varphi_2(t) = -\frac{2e\xi}{\omega^2} [2\Omega \cos \omega t + (2\Omega t - 1)\omega \sin \omega t] + 2m_0 \lambda.$$

Розглянемо область зліва від наноструктури. Тоді підставивши тепер (6.169) у вираз (6.155) й врахувавши, що інтегрування за координатою z відбувається в області $(-\infty, 0)$ будемо мати:

$$\begin{aligned} \hbar \frac{d\delta_\lambda^{(0)}(t)}{dt} &= \langle \Phi_\lambda^{(0)}(\nu, t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) | \Phi_\lambda^{(0)}(\nu, t) \rangle \\ &= \langle \Phi_\lambda^{(0)}(\nu, t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) | \Phi_\lambda^{(0)}(\nu, t) \rangle = \\ &= \int_{-\infty}^0 \exp\left(\frac{i}{\hbar}[\varphi_1^* z^2 + \varphi_2^*(t)z]\right) \left| i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + 2ez\xi \cos \omega t \right| \exp\left(-\frac{i}{\hbar}[\varphi_1 z^2 + \varphi_2(t)z]\right) dz = \\ &= I_1^{(0)}(t) \frac{\partial \varphi_2(t)}{\partial t} + \frac{1}{2m_0} I_2^{(0)}(t) + 2e\xi I_3^{(0)}(t) \cos \omega t, \end{aligned} \quad (6.170)$$

де

$$\begin{aligned} I_1^{(0)}(t) &= \int_{-\infty}^0 \exp\left(\frac{i}{\hbar}\{(\varphi_1^* - \varphi_1)z^2 + [\varphi_2^*(t) - \varphi_2(t)]z\}\right) dz = \\ &= \int_{-\infty}^0 \exp\left(\frac{2i}{\hbar}\{\text{Im}(\varphi_1)z^2 + \text{Im}[\varphi_2(t)]z\}\right) dz = \\ &= \frac{1}{2i} \sqrt{\frac{\pi\hbar}{2\text{Im}(\varphi_1)}} \exp\left(-\frac{\text{Im}[\varphi_2(t)]^2}{2\hbar\text{Im}(\varphi_1)}\right) \text{erfc}\left(-i \frac{\text{Im}[\varphi_2(t)]}{\sqrt{2\hbar\text{Im}(\varphi_1)}}\right); \\ I_2^{(0)}(t) &= -\int_{-\infty}^0 \frac{2i\hbar\varphi_1 + [2z\varphi_1 + \varphi_2(t)]^2}{\hbar^2} \exp\left(\frac{2i}{\hbar}\{\text{Im}(\varphi_1)z^2 + \text{Im}[\varphi_2(t)]z\}\right) dz = \\ &= \frac{1}{8} \sqrt{\frac{\pi\hbar}{2[\text{Im}(\varphi_1)]^5}} \exp\left(-\frac{\text{Im}[\varphi_2(t)]^2}{2\hbar\text{Im}(\varphi_1)}\right) \left\{ 1 + \text{erf}\left(i \sqrt{\frac{\text{Im}(\varphi_1)}{2\hbar}} \frac{\text{Im}[\varphi_2(t)]}{\text{Im}(\varphi_1)}\right) \right\} \times \\ &\times \left\{ [\varphi_2(t)\varphi_1^* - \varphi_1\varphi_2^*(t)]^2 + 4\hbar|\varphi_1|^2 \text{Im}(\varphi_1) \right\} + \frac{\hbar\varphi_1 \{ \varphi_1 \text{Im}[\varphi_2(t)] - 2\varphi_2(t) \text{Im}(\varphi_1) \}}{2[\text{Im}(\varphi_1)]^2}; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I_3^{(0)}(t) &= \int_{-\infty}^0 z \exp\left(\frac{2i}{\hbar}\{\operatorname{Im}(\varphi_1)z^2 + \operatorname{Im}[\varphi_2(t)]z\}\right) dz = \\
&= \frac{\hbar}{4\operatorname{Im}(\varphi_1)} - \frac{\operatorname{Im}[\varphi_2(t)]}{4i\operatorname{Im}(\varphi_1)} \sqrt{\frac{\pi\hbar}{2\operatorname{Im}(\varphi_1)}} \exp\left(-\frac{\operatorname{Im}[\varphi_2(t)]^2}{2\hbar\operatorname{Im}(\varphi_1)}\right) \left\{1 + \operatorname{erf}\left(i\sqrt{\frac{\operatorname{Im}(\varphi_1)}{2\hbar}} \frac{\operatorname{Im}[\varphi_2(t)]}{\operatorname{Im}(\varphi_1)}\right)\right\}.
\end{aligned} \tag{6.171}$$

Тут $\operatorname{erf}(x)$ і $\operatorname{erfc}(x)$ відповідно функція помилок та доповнювальна функція помилок.

Отже:

$$\delta_\lambda^{(0)}(t) = \int \hbar^{-1} \left(I_1^{(0)}(t) \frac{\partial \varphi_2(t)}{\partial t} + \frac{1}{2m_0} I_2^{(0)}(t) + 2e\xi I_3^{(0)}(t) \cos \omega t \right) dt. \tag{6.172}$$

Аналогічно розглянемо область справа від наноструктури. Далі, підставивши тепер (6.169) у вираз (6.155) й врахувавши, що інтегрування за координатою z тепер відбувається в області $(d, +\infty)$ де d - це товщина наноструктури. Тоді будемо мати:

$$\begin{aligned}
\hbar \frac{d\delta_\lambda^{(N+1)}(t)}{dt} &= \langle \Phi_\lambda^{(N+1)}(\nu, t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) | \Phi_\lambda^{(N+1)}(\nu, t) \rangle \\
\langle \Phi_\lambda^{(N+1)}(\nu, t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) | \Phi_\lambda^{(N+1)}(\nu, t) \rangle &= \\
&= \int_d^{+\infty} \exp\left(\frac{i}{\hbar}[\varphi_1^* z^2 + \varphi_2^*(t)z]\right) \left| i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + 2ez\xi \cos \omega t \right| \exp\left(-\frac{i}{\hbar}[\varphi_1 z^2 + \varphi_2(t)z]\right) dz = \\
&= I_1^{(N+1)}(t) \frac{\partial \varphi_2(t)}{\partial t} + \frac{1}{2m_0} I_2^{(N+1)}(t) + 2e\xi I_3^{(N+1)}(t) \cos \omega t.
\end{aligned} \tag{6.173}$$

Тут

$$\begin{aligned}
I_1^{(N+1)}(t) &= \int_d^{+\infty} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\{(\varphi_1^* - \varphi_1)z^2 + [\varphi_2^*(t) - \varphi_2(t)]z\}\right) dz \\
&= -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi\hbar}{2\operatorname{Im}(\varphi_1)}} \exp\left(-\frac{\operatorname{Im}[\varphi_2(t)]^2}{2\hbar\operatorname{Im}(\varphi_1)}\right) \left(i + \operatorname{erfi}\left\{\frac{2d\operatorname{Im}(\varphi_1) + \operatorname{Im}[\varphi_2(t)]}{\sqrt{2\hbar\operatorname{Im}(\varphi_1)}}\right\} \right); \\
I_2^{(N+1)}(t) &= -\int_d^0 \frac{2i\hbar\varphi_1 + [2z\varphi_1 + \varphi_2(t)]^2}{\hbar^2} \exp\left(\frac{2i}{\hbar}\{\operatorname{Im}(\varphi_1)z^2 + \operatorname{Im}[\varphi_2(t)]z\}\right) dz = \\
&= \frac{1}{4\operatorname{Im}^{5/2}(\varphi_1)} \exp\left(-\frac{\operatorname{Im}[\varphi_2(t)]^2}{2\hbar\operatorname{Im}(\varphi_1)}\right) \left\{ 2\hbar \exp\left(\frac{\{2d\operatorname{Im}(\varphi_1) + \operatorname{Im}[\varphi_2(t)]\}^2}{2\hbar\operatorname{Im}(\varphi_1)}\right) \varphi_1 \sqrt{\operatorname{Im}(\varphi_1)} \times \right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \times \left\{ 2[d\varphi_1 + \varphi_2(t)] \operatorname{Im}(\varphi_1) - \varphi_1 \operatorname{Im}[\varphi_2(t)] + i\sqrt{2\pi} \left(\sqrt{\hbar} \operatorname{Im}(\varphi_1) \left[\hbar\varphi_1^2 + [2i\hbar\varphi_1 + \varphi_2^2(t)] \operatorname{Im}(\varphi_1) \right] - \right. \right. \\
& \left. \left. - 2\varphi_1\varphi_2(t) \operatorname{Im}(\varphi_1) \operatorname{Im}[\varphi_2(t)] + \sqrt{\hbar}\varphi_1^2 \operatorname{Im}^2[\varphi_2(t)] \right) + \right. \\
& \left. + \sqrt{2\pi\hbar} \operatorname{erfi} \left\{ \frac{2d \operatorname{Im}(\varphi_1) + \operatorname{Im}[\varphi_2(t)]}{\sqrt{2\hbar} \operatorname{Im}(\varphi_1)} \right\} \left\{ [2i\hbar\varphi_1 + \varphi_2^2(t)] \operatorname{Im}^2(\varphi_1) + \varphi_1^2 \operatorname{Im}^2[\varphi_2(t)] - \right. \right. \\
& \left. \left. - \varphi_1 \operatorname{Im}(\varphi_1) [\hbar\varphi_1 + 2\varphi_2(t) \operatorname{Im}[\varphi_2(t)]] \right\}. \right. \\
I_3^{(N+1)}(t) &= \int_d^{+\infty} z \exp\left(\frac{2i}{\hbar} \{ \operatorname{Im}(\varphi_1) z^2 + \operatorname{Im}[\varphi_2(t)] z \}\right) dz = \frac{1}{8 \operatorname{Im}^{3/2}(\varphi_1)} \exp\left(-\frac{\operatorname{Im}[\varphi_2(t)]^2}{2\hbar \operatorname{Im}(\varphi_1)}\right) \\
& \times \left(-2\hbar \sqrt{\operatorname{Im}(\varphi_1)} \exp\left(\frac{\{2d \operatorname{Im}(\varphi_1) + \operatorname{Im}[\varphi_2(t)]\}^2}{2\hbar \operatorname{Im}(\varphi_1)}\right) + \right. \\
& \left. + \sqrt{2\pi\hbar} \operatorname{Im}[\varphi_2(t)] \operatorname{erfi} \left\{ \frac{2d \operatorname{Im}(\varphi_1) + \operatorname{Im}[\varphi_2(t)]}{\sqrt{2\hbar} \operatorname{Im}(\varphi_1)} \right\} \right). \tag{6.174}
\end{aligned}$$

Тут $\operatorname{erfi}(x)$ це уявна частина функції помилок.

Отже:

$$\delta_\lambda^{(N+1)}(t) = \int \hbar^{-1} \left(I_1^{(N+1)}(t) \frac{\partial \varphi_2(t)}{\partial t} + \frac{1}{2m_0} I_2^{(N+1)}(t) + 2e\xi I_3^{(N+1)}(t) \cos \omega t \right) dt. \tag{6.175}$$

Для довільного моменту часу будемо вимагати від функцій $\Phi_\lambda^{(p)}(z, t)$ виконання граничних умов, що виражають їх неперервність та неперервність їх потоку ймовірності на усіх межах наносистеми, тобто:

$$\Phi_\lambda^{(p)}(z, t) \Big|_{z \rightarrow z_p - 0} = \Phi_\lambda^{(p)}(z, t) \Big|_{z \rightarrow z_p + 0}; \quad \frac{1}{m_p} \frac{\partial \Phi_\lambda^{(p)}(z, t)}{\partial z} \Big|_{z \rightarrow z_p - 0} = \frac{1}{m_{p+1}} \frac{\partial \Phi_\lambda^{(p+1)}(z, t)}{\partial z} \Big|_{z \rightarrow z_p + 0}. \tag{6.176}$$

Записуючи тепер функції $\Phi_\lambda^{(0)}(z, t)$ і $\Phi_\lambda^{(N+1)}(z, t)$ у такому вигляді:

$$\Phi_\lambda^{(0)}(z, t) = a_\lambda^{(0)}(t) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} [\varphi_1 z^2 + \varphi_2(t) z]\right); \quad \Phi_\lambda^{(N+1)}(z, t) = a_\lambda^{(N+1)}(t) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} [\varphi_1 z^2 + \varphi_2(t) z]\right) \tag{6.177}$$

застосовуючи послідовно граничні умови (6.176) згідно методу трансфер матриці будемо мати:

$$\begin{aligned}
\begin{bmatrix} a_\lambda^{(0)}(t) \\ 0 \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} T_{11}^{(0,N+1)}(t) & T_{12}^{(0,N+1)}(t) \\ T_{21}^{(0,N+1)}(t) & T_{22}^{(0,N+1)}(t) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_\lambda^{(N+1)}(t) \\ 0 \end{bmatrix} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}[\varphi_1 d^2 + \varphi_2(t)d]\right); \\
\begin{bmatrix} T_{11}^{(0,N+1)}(t) & T_{12}^{(0,N+1)}(t) \\ T_{21}^{(0,N+1)}(t) & T_{22}^{(0,N+1)}(t) \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \tau_{11}^{(0,1)}(t) & \tau_{12}^{(0,1)}(t) \\ \tau_{21}^{(0,1)}(t) & \tau_{22}^{(0,1)}(t) \end{bmatrix} \\
&\times \prod_{i=2}^{N-1} \begin{bmatrix} \tau_{11}^{(i-1,i)}(t) & \tau_{12}^{(i-1,i)}(t) \\ \tau_{21}^{(i-1,i)}(t) & \tau_{22}^{(i-1,i)}(t) \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \tau_{11}^{(i,i+1)}(t) & \tau_{12}^{(i,i+1)}(t) \\ \tau_{21}^{(i,i+1)}(t) & \tau_{22}^{(i,i+1)}(t) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tau_{11}^{(N,N+1)}(t) & \tau_{12}^{(N,N+1)}(t) \\ \tau_{21}^{(N,N+1)}(t) & \tau_{22}^{(N,N+1)}(t) \end{bmatrix}.
\end{aligned} \tag{6.178}$$

Тут:

$$\begin{aligned}
\tau_{11}^{(0,1)}(t) &= H \left[\frac{\tilde{\beta}^2 + (a+4s)^2(\tilde{\gamma}+2s)}{(a+4s)^3} - 1, -\sqrt{\frac{|a+4s|}{2}} \left(\frac{\tilde{Z}_0^{(0)}}{L} + \frac{2\tilde{\beta}}{(a+4s)^2} \right) \right] \\
\tau_{12}^{(0,1)}(t) &= M \left[\frac{1}{2} - \frac{\tilde{\beta}^2 + (a+4s)^2(\tilde{\gamma}+2s)}{2(a+4s)^3}, \frac{1}{2}, \frac{(a+4s)}{2} \left(\frac{\tilde{Z}_0^{(0)}}{L} + \frac{2\tilde{\beta}}{(a+4s)^2} \right)^2 \right] \\
\tau_{21}^{(0,1)}(t) &= \frac{1}{m_0} \left\{ \left[-\left(\frac{a+2s}{L} \right) + \frac{\tilde{\beta}}{a+4s} \right] \times \right. \\
&\times H \left[\frac{\tilde{\beta}^2 + (a+4s)^2(\tilde{\gamma}+2s)}{(a+4s)^3} - 1, -\sqrt{\frac{|a+4s|}{2}} \left(\frac{\tilde{Z}_0^{(p)}}{L} + \frac{2\tilde{\beta}}{(a+4s)^2} \right) \right] + \\
&+ \frac{1}{L} \sqrt{\frac{|a+4s|}{2}} \left[\frac{\tilde{\beta}^2 + (a+4s)^2(\tilde{\gamma}+2s)}{(a+4s)^3} - 1 \right] \times \\
&\times H \left[\frac{\tilde{\beta}^2 + (a+4s)^2(\tilde{\gamma}+2s)}{(a+4s)^3} - 2, -\sqrt{\frac{|a+4s|}{2}} \left(\frac{\tilde{Z}_0^{(p)}}{L} + \frac{2\tilde{\beta}}{(a+4s)^2} \right) \right] \left. \right\} \times \\
&\times \exp \left[-\left(\frac{a}{2} + s \right) \left(\frac{\tilde{Z}_0^{(p)}}{L} \right)^2 - \frac{\tilde{\beta}}{a+4s} \frac{\tilde{Z}_0^{(p)}}{L} - \frac{2\tilde{\beta}^2}{(a+4s)^3} \right]; \\
\tau_{22}^{(0,1)}(t) &= \frac{1}{m_0} \left\{ \left[-\left(\frac{a+2s}{L} \right) + \frac{\tilde{\beta}}{a+4s} \right] \times \right. \\
&\times M \left[\frac{1}{2} - \frac{\tilde{\beta}^2 + (a+4s)^2(\tilde{\gamma}+2s)}{2(a+4s)^3}, \frac{1}{2}, \frac{(a+4s)}{2} \left(\frac{\tilde{Z}_0^{(0)}}{L} + \frac{2\tilde{\beta}}{(a+4s)^2} \right)^2 \right] + \\
&+ \frac{(a+4s)}{L} \left(\frac{\tilde{Z}_0^{(p)}}{L} + \frac{2\tilde{\beta}}{(a+4s)^2} \right) \left[\frac{1}{2} - \frac{\tilde{\beta}^2 + (a+4s)^2(\tilde{\gamma}+2s)}{2(a+4s)^3} \right] \times
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \times M \left[\frac{3}{2} - \frac{\tilde{\beta}^2 + (a+4s)^2(\tilde{\gamma}+2s)}{2(a+4s)^3}, \frac{3}{2}, \frac{(a+4s)}{2} \left(\frac{\tilde{Z}_0^{(0)}}{L} + \frac{2\tilde{\beta}}{(a+4s)^2} \right)^2 \right] \\ & \times \exp \left[- \left(\frac{a}{2} + s \right) \left(\frac{\tilde{Z}_0^{(p)}}{L} \right)^2 - \frac{\tilde{\beta}}{a+4s} \frac{\tilde{Z}_0^{(p)}}{L} - \frac{2\tilde{\beta}^2}{(a+4s)^3} \right]. \end{aligned} \quad (6.179)$$

Аналогічним чином маємо:

$$\begin{aligned} \tau_{11}^{(i,i+1)}(t) &= \exp \left[- \left(\frac{a}{2} + s \right) \left(\frac{z_i - \tilde{Z}_0^{(p)}}{L} \right)^2 + \frac{\tilde{\beta}}{a+4s} \frac{z_i - \tilde{Z}_0^{(p)}}{L} - \frac{2\tilde{\beta}^2}{(a+4s)^3} \right] \\ & \times H \left[\frac{\tilde{\beta}^2 + (a+4s)^2(\tilde{\gamma}+2s)}{(a+4s)^3} - 1, \sqrt{\frac{|a+4s|}{2}} \left(\frac{z_i - \tilde{Z}_0^{(p)}}{L} - \frac{2\tilde{\beta}}{(a+4s)^2} \right) \right]; \\ \tau_{12}^{(i,i+1)}(t) &= \exp \left[- \left(\frac{a}{2} + s \right) \left(\frac{z_i - \tilde{Z}_0^{(p)}}{L} \right)^2 + \frac{\tilde{\beta}}{a+4s} \frac{z_i - \tilde{Z}_0^{(p)}}{L} - \frac{2\tilde{\beta}^2}{(a+4s)^3} \right] \\ & \times M \left[\frac{1}{2} - \frac{\tilde{\beta}^2 + (a+4s)^2(\tilde{\gamma}+2s)}{2(a+4s)^3}, \frac{1}{2}, \frac{(a+4s)}{2} \left(\frac{z_i - \tilde{Z}_0^{(p)}}{L} - \frac{2\tilde{\beta}}{(a+4s)^2} \right)^2 \right]; \\ \tau_{21}^{(i,i+1)}(t) &= \frac{1}{m_0} \left\{ \left[- (a+2s) \frac{z_i - \tilde{Z}_0^{(p)}}{L} + \frac{\tilde{\beta}}{a+4s} \right] \times \right. \\ & \times H \left[\frac{\tilde{\beta}^2 + (a+4s)^2(\tilde{\gamma}+2s)}{(a+4s)^3} - 1, \sqrt{\frac{|a+4s|}{2}} \left(\frac{z_i - \tilde{Z}_0^{(p)}}{L} - \frac{2\tilde{\beta}}{(a+4s)^2} \right) \right] - \\ & \left. - \frac{\tilde{Z}_0^{(p)}}{L} \sqrt{\frac{|a+4s|}{2}} \left[\frac{\tilde{\beta}^2 + (a+4s)^2(\tilde{\gamma}+2s)}{(a+4s)^3} - 1 \right] \times \right. \\ & \left. \times H \left[\frac{\tilde{\beta}^2 + (a+4s)^2(\tilde{\gamma}+2s)}{(a+4s)^3} - 2, \sqrt{\frac{|a+4s|}{2}} \left(\frac{z_i - \tilde{Z}_0^{(p)}}{L} - \frac{2\tilde{\beta}}{(a+4s)^2} \right) \right] \right\} \times \\ & \times \exp \left[- \left(\frac{a}{2} + s \right) \left(\frac{z_i - \tilde{Z}_0^{(p)}}{L} \right)^2 + \frac{\tilde{\beta}}{a+4s} \frac{z_i - \tilde{Z}_0^{(p)}}{L} - \frac{2\tilde{\beta}^2}{(a+4s)^3} \right]; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\tau_{22}^{(i,i+1)}(t) = & \frac{1}{m_0} \left\{ \left[- (a+2s) \frac{z_i - \tilde{Z}_0^{(p)}}{L} + \frac{\tilde{\beta}}{a+4s} \right] \times \right. \\
& \times M \left[\frac{1}{2} - \frac{\tilde{\beta}^2 + (a+4s)^2(\tilde{\gamma} + 2s)}{2(a+4s)^3}, \frac{1}{2}, \frac{(a+4s)}{2} \left(\frac{z_i - \tilde{Z}_0^{(p)}}{L} - \frac{2\tilde{\beta}}{(a+4s)^2} \right)^2 \right] + \\
& + \frac{(a+4s)}{L} \left(\frac{z_i - \tilde{Z}_0^{(p)}}{L} - \frac{2\tilde{\beta}}{(a+4s)^2} \right) \left[\frac{1}{2} - \frac{\tilde{\beta}^2 + (a+4s)^2(\tilde{\gamma} + 2s)}{2(a+4s)^3} \right] \\
& \times M \left[\frac{3}{2} - \frac{\tilde{\beta}^2 + (a+4s)^2(\tilde{\gamma} + 2s)}{2(a+4s)^3}, \frac{3}{2}, \frac{(a+4s)}{2} \left(\frac{z_i - \tilde{Z}_0^{(p)}}{L} - \frac{2\tilde{\beta}}{(a+4s)^2} \right)^2 \right] \left. \right\} \\
& \times \exp \left[- \left(\frac{a}{2} + s \right) \left(\frac{z_i - \tilde{Z}_0^{(p)}}{L} \right)^2 + \frac{\tilde{\beta}}{a+4s} \frac{z_i - \tilde{Z}_0^{(p)}}{L} - \frac{2\tilde{\beta}^2}{(a+4s)^3} \right].
\end{aligned} \tag{6.180}$$

Тепер згідно методу трансфер-матриці коефіцієнти $C_1^{(p)}$ та $C_2^{(p)}$ є визначеними повністю, як функції $\Phi_\lambda^{(p)}(\nu, t)$. Це дозволяє виконати розрахунок фазового множника $\delta_\lambda^{(p)}(t)$ у розв'язку $\Psi_\lambda^{(p)}(\nu, t)$ відповідаючому довільному шару всередині наносистеми:

$$\begin{aligned}
\hbar \frac{d\delta_\lambda^{(p)}(t)}{dt} = & \left\langle \Phi_\lambda^{(p)} \left(\frac{z_i - \tilde{Z}_0^{(p)}}{L}, t \right) \left| i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) \right| \Phi_\lambda^{(p)} \left(\frac{z_i - \tilde{Z}_0^{(p)}}{L}, t \right) \right\rangle \\
\delta_\lambda^{(p)}(t) = & \hbar^{-1} \int \left\langle \Phi_\lambda^{(p)} \left(\frac{z_i - \tilde{Z}_0^{(p)}}{L}, t \right) \left| i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) \right| \Phi_\lambda^{(p)} \left(\frac{z_i - \tilde{Z}_0^{(p)}}{L}, t \right) \right\rangle dt \\
& \left\langle \Phi_\lambda^{(p)} \left(\frac{z_i - \tilde{Z}_0^{(p)}}{L}, t \right) \left| i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) \right| \Phi_\lambda^{(p)} \left(\frac{z_i - \tilde{Z}_0^{(p)}}{L}, t \right) \right\rangle = \\
= & \int_{z_p}^{z_{p+1}} \left(\Phi_\lambda^{(p)} \left(\frac{z - \tilde{Z}_0^{(p)}}{L}, t \right) \right)^* \left| i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m_p} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - W_0 + 2e\tilde{Z}_0^{(p)}\xi \cos \omega t - \frac{\hbar^2}{2m_p L^2} \left(\frac{z - \tilde{Z}_0^{(p)}}{L} \right)^2 \right. \\
& \left. + 2e \left(\frac{z - \tilde{Z}_0^{(p)}}{L} \right) L\xi \cos \omega t \right| \Phi_\lambda^{(p)} \left(\frac{z - \tilde{Z}_0^{(p)}}{L}, t \right) dz,
\end{aligned} \tag{6.181}$$

де інтегрування у (6.181) може бути виконане точно, проте отримані вирази ми не наводимо через їх надзвичайно громіздкий вигляд.

Наступним кроком є визначення електронного спектру. Для цього ми виконаємо розрахунок S -матриці. Щоб зробити це ми подамо розв'язки повного рівняння

Шредінгера у зовнішніх областях по відношенню до наноструктури у такому вигляді:

$$\Psi(z,t) = \exp\left\{\pm ikz + \frac{2ie\xi z \sin \omega t}{\hbar \omega} + \frac{2ie\xi k \cos \omega t}{m_0 \omega^2} + f(t)\right\}, \quad (6.182)$$

де $f(t)$ - це невідома функція, а знак “ \pm ” відноситься до розв’язку (6.182) відповідаючому падаючій (відбитій) хвилі по відношенню до наносистеми.

Підставляючи вираз (6.182) у повне рівняння Шредінгера з гамільтоніаном (6.158) маємо:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\eta(t)}{dt} &= \frac{\hbar^2}{2m_0} \left(k + \frac{2e\xi \sin \omega t}{\hbar \omega}\right)^2 - \frac{2e\hbar k \xi \sin \omega t}{m_p \omega_l}; \\ \eta(t) &= -\frac{i\hbar k^2}{2m_0} t - \frac{ie^2 \xi^2 (2\omega t - \sin 2\omega t)}{2\hbar m_0 \omega^3}. \end{aligned} \quad (6.183)$$

Область, яка відповідає середовищу зліва від наносистеми допускає розв’язки, які відповідають як значенню $+k$ так і $-k$, відповідно загальний розв’язок в цій області можна подати так як далі:

$$\begin{aligned} \Psi^{(0)}(z,t) &= A^{(0)}(\lambda,t) \left(\exp\left[i \left(k + \frac{2e\xi \sin \omega t}{\hbar \omega} \right) z \right] \times \right. \\ &\times \exp\left\{ i \left[\frac{\hbar k^2}{2m_p} t + \frac{2e\xi k \cos \omega t}{m_0 \omega^2} - \frac{e^2 \xi^2 (2\omega t - \sin 2\omega t)}{2\hbar m_0 \omega^3} \right] \right\} - \\ &- S(\lambda,t) \exp\left[-i \left(k - \frac{2e\xi \sin \omega t}{\hbar \omega} \right) z \right] \times \\ &\times \exp\left\{ i \left[\frac{\hbar k^2}{2m_p} t - \frac{2e\xi k \cos \omega t}{m_0 \omega^2} - \frac{e^2 \xi^2 (2\omega t - \sin 2\omega t)}{2\hbar m_0 \omega^3} \right] \right\} \Bigg). \end{aligned} \quad (6.184)$$

Діючи аналогічним чином, хвильова функція у середовищі справа від наносистеми отримується у такому вигляді:

$$\begin{aligned} \Psi_\lambda^{(N+1)}(z,t) &= A^{(N+1)}(\lambda,t) \left(\exp\left[-i \left(k - \frac{2e\xi \sin \omega t}{\hbar \omega} \right) z \right] \times \right. \\ &\times \exp\left\{ i \left[\frac{\hbar k^2}{2m_p} t - \frac{2e\xi k \cos \omega t}{m_0 \omega^2} - \frac{e^2 \xi^2 (2\omega t - \sin 2\omega t)}{2\hbar m_0 \omega^3} \right] \right\} - \end{aligned}$$

$$-S(\lambda, t) \exp \left[i \left(k + \frac{2e\xi \sin \omega t}{\hbar \omega} \right) z \right] \exp \left\{ i \left[\frac{\hbar k^2}{2m_p} t + \frac{2e\xi k \cos \omega t}{m_0 \omega^2} - \frac{e^2 \xi^2 (2\omega t - \sin 2\omega t)}{2\hbar m_0 \omega^3} \right] \right\} \Bigg) \Bigg) \quad (6.185)$$

Застосовуючи до хвильових функцій $\Psi_\lambda^{(0)}(z, t)$, $\Psi_\lambda^{(p)}(z, t)$, $\Psi_\lambda^{(N+1)}(z, t)$ граничні умови аналогічні умовам (6.176) після застосування методу трансфер-матриці отримуємо:

$$\begin{bmatrix} A^{(0)}(\lambda, t) \exp \left\{ \frac{2ie\xi k \cos \omega t}{m_0 \omega^2} \right\} \\ -A^{(0)}(\lambda, t) S(\lambda, t) \exp \left\{ -\frac{2ie\xi k \cos \omega t}{m_0 \omega^2} \right\} \end{bmatrix} = e^{i[\delta_\lambda^{(N)}(t) - \delta_\lambda^{(1)}(t)]} \begin{bmatrix} T_{11}^{(1, N+1)}(t) & T_{12}^{(1, N+1)}(t) \\ T_{21}^{(1, N+1)}(t) & T_{22}^{(1, N+1)}(t) \end{bmatrix} \quad (6.186)$$

$$\times \begin{bmatrix} -A^{(N+1)}(\lambda, t) S(\lambda, t) \exp \left[i \left(k + \frac{2e\xi \sin \omega t}{\hbar \omega} \right) z_N \right] \exp \left\{ \frac{2ie\xi k \cos \omega t}{m_0 \omega^2} \right\} \\ A^{(N+1)}(\lambda, t) \exp \left[-i \left(k - \frac{2e\xi \sin \omega t}{\hbar \omega} \right) z_N \right] \exp \left\{ -\frac{2ie\xi k \cos \omega t}{m_0 \omega^2} \right\} \end{bmatrix};$$

де множники $e^{i \left[\frac{\hbar k^2}{2m_p} t - \frac{e^2 \xi^2 (2\omega t - \sin 2\omega t)}{2\hbar m_0 \omega^3} \right]}$ скоротились в обох частинах рівності. Крім того наявність множника $e^{i[\delta_\lambda^{(1)}(t) - \delta_\lambda^{(N)}(t)]}$ вказує на те, що трансфер-матриця залежить від лише від фазового множника у першому і останньому шарах наносистеми. Це більше видно із перетворення добутку матриць, що утворюють загальну трансфер-матрицю:

$$\prod_{i=2}^{N-1} e^{-i\delta_\lambda^{(i-1)}(t)} \begin{bmatrix} \tau_{11}^{(i-1, i)}(t) & \tau_{12}^{(i-1, i)}(t) \\ \tau_{21}^{(i-1, i)}(t) & \tau_{22}^{(i-1, i)}(t) \end{bmatrix}^{-1} e^{i\delta_\lambda^{(i)}(t)} \begin{bmatrix} \tau_{11}^{(i, i+1)}(t) & \tau_{12}^{(i, i+1)}(t) \\ \tau_{21}^{(i, i+1)}(t) & \tau_{22}^{(i, i+1)}(t) \end{bmatrix} = \quad (6.187)$$

$$= e^{i[\delta_\lambda^{(N)}(t) - \delta_\lambda^{(1)}(t)]} \begin{bmatrix} T_{11}^{(1, N+1)}(t) & T_{12}^{(1, N+1)}(t) \\ T_{21}^{(1, N+1)}(t) & T_{22}^{(1, N+1)}(t) \end{bmatrix},$$

де елементи $\tau_{11}^{(i, i+1)}(t)$; $\tau_{12}^{(i, i+1)}(t)$; $\tau_{21}^{(i, i+1)}(t)$; $\tau_{22}^{(i, i+1)}(t)$ розраховуються за співвідношеннями (6.180.)

З матричного рівняння (6.186) отримуємо квадратне рівняння для визначення S-матриці:

$$\begin{aligned}
& \begin{bmatrix} A^{(0)}(\lambda, t) e^{\frac{2ie\xi k \cos \omega t}{m_0 \omega^2}} \\ -A^{(0)}(\lambda, t) S(\lambda, t) e^{-\frac{2ie\xi k \cos \omega t}{m_0 \omega^2}} \end{bmatrix} = e^{i[\delta_\lambda^{(N)}(t) - \delta_\lambda^{(1)}(t)]} \begin{bmatrix} T_{11}^{(1, N+1)}(t) & T_{12}^{(1, N+1)}(t) \\ T_{21}^{(1, N+1)}(t) & T_{22}^{(1, N+1)}(t) \end{bmatrix} \\
& \times \begin{bmatrix} -A^{(N+1)}(\lambda, t) S(\lambda, t) e^{i\left(k + \frac{2e\xi \sin \omega t}{\hbar} \frac{z_N}{\omega}\right)} e^{\frac{2ie\xi k \cos \omega t}{m_0 \omega^2}} \\ A^{(N+1)}(\lambda, t) e^{-i\left(k - \frac{2e\xi \sin \omega t}{\hbar} \frac{z_N}{\omega}\right)} e^{-\frac{2ie\xi k \cos \omega t}{m_0 \omega^2}} \end{bmatrix}; \\
& A^{(0)}(\lambda, t) e^{\frac{2ie\xi k \cos \omega t}{m_0 \omega^2}} \\
& = e^{i[\delta_\lambda^{(N)}(t) - \delta_\lambda^{(1)}(t)]} A^{(N+1)}(\lambda, t) \left[-T_{11}^{(1, N+1)}(t) S(\lambda, t) e^{i\left(k + \frac{2e\xi \sin \omega t}{\hbar} \frac{z_N}{\omega}\right)} e^{\frac{2ie\xi k \cos \omega t}{m_0 \omega^2}} + \right. \\
& \left. + T_{12}^{(1, N+1)}(t) e^{-i\left(k - \frac{2e\xi \sin \omega t}{\hbar} \frac{z_N}{\omega}\right)} e^{-\frac{2ie\xi k \cos \omega t}{m_0 \omega^2}} \right]; \\
& -T_{11}^{(1, N+1)}(t) S^2(\lambda, t) e^{i\left(k + \frac{2e\xi \sin \omega t}{\hbar} \frac{z_N}{\omega}\right)} z_N + T_{12}^{(1, N+1)}(t) S(\lambda, t) e^{-i\left(k - \frac{2e\xi \sin \omega t}{\hbar} \frac{z_N}{\omega}\right)} z_N e^{\frac{4ie\xi k \cos \omega t}{m_0 \omega^2}} = \\
& = T_{21}^{(1, N+1)}(t) S(\lambda, t) e^{i\left(k + \frac{2e\xi \sin \omega t}{\hbar} \frac{z_N}{\omega}\right)} z_N e^{\frac{4ie\xi k \cos \omega t}{m_0 \omega^2}} - T_{22}^{(1, N+1)}(t) e^{-i\left(k - \frac{2e\xi \sin \omega t}{\hbar} \frac{z_N}{\omega}\right)} z_N; \quad (6.187) \\
& S^2(\lambda, t) + \frac{\left[T_{21}^{(1, N+1)}(t) e^{\frac{4ie\xi k \cos \omega t}{m_0 \omega^2}} - T_{12}^{(1, N+1)}(t) e^{-2ikz_N} e^{\frac{4ie\xi k \cos \omega t}{m_0 \omega^2}} \right]}{T_{11}^{(1, N+1)}(t)} S(\lambda, t) - \frac{T_{22}^{(1, N+1)}(t)}{T_{11}^{(1, N+1)}(t)} e^{-2ikz_N} = 0; \\
& S(\lambda, t) = - \frac{\left[T_{21}^{(1, N+1)}(t) e^{\frac{4ie\xi k \cos \omega t}{m_0 \omega^2}} - T_{12}^{(1, N+1)}(t) e^{-2ikz_N} e^{\frac{4ie\xi k \cos \omega t}{m_0 \omega^2}} \right]}{2T_{11}^{(1, N+1)}(t)} \\
& \pm \left\{ \frac{\left[T_{21}^{(1, N+1)}(t) e^{\frac{4ie\xi k \cos \omega t}{m_0 \omega^2}} - T_{12}^{(1, N+1)}(t) e^{-2ikz_N} e^{\frac{4ie\xi k \cos \omega t}{m_0 \omega^2}} \right]^2}{4 \left[T_{11}^{(1, N+1)}(t) \right]^2} + \frac{T_{22}^{(1, N+1)}(t)}{T_{11}^{(1, N+1)}(t)} e^{-2ikz_N} \right\}^{1/2}. \quad (6.188)
\end{aligned}$$

Визначення електронного квазістаціонарного спектру $\lambda_n = E_n - i\Gamma_n/2$ згідно теорії розсіювання полягає у відшуканні розв'язків дисперсійного рівняння у комплексній площині для будь-якого моменту часу t :

$$S^{-1}(E_n - i\Gamma_n/2, t) = 0, \quad (6.189)$$

що повністю визначає резонансні енергії E_n та резонансні ширини Γ_n електронних квазістаціонарних станів. Цим нами завершується виклад запропонованої теорії.

Теорія електронної провідності наносистеми з прикладеним постійним магнітним та залежним від часу електромагнітним полем

Отримані вирази для електронних хвильових функцій дозволяють виконати розрахунок електронної провідності наносистеми. Для цього ми виконаємо розрахунок струму ймовірності в середовищах зліва та справа від наносистеми виходячи із співвідношення:

$$J(E, z, t) = \frac{\hbar}{2im_w} \left[\Psi^*(z, t) \frac{\partial \Psi(z, t)}{\partial z} - \Psi(z, t) \frac{\partial \Psi^*(z, t)}{\partial z} \right]. \quad (6.190)$$

Використовуючи співвідношення (6.184) і (6.185) отримуємо:

$$\begin{aligned} j(z, t)|_{z=0} &= \frac{\hbar}{m_w} |A^{(0)}(\lambda, t)|^2 \left[k \left(1 - |S(\lambda, t)|^2 \right) + \frac{2e\xi}{\hbar} \frac{\sin \omega t}{\omega} \left[S^*(\lambda, t) - \exp \left(-\frac{4e\xi k \cos \omega t}{m_w \omega^2} \right) \right] \right] \times \\ &\times \left[\exp \left(\frac{4e\xi k \cos \omega t}{m_w \omega^2} \right) - S(\lambda, t) \right]; \\ j(z, t)|_{z=z_N} &= \frac{\hbar}{2m_w} |A^{(N+1)}(\lambda, t)|^2 \left\{ 2k - \frac{4e\xi}{\hbar} \frac{\sin \omega t}{\omega} - \frac{3e\xi}{\hbar} \frac{\sin \omega t}{\omega} \times \right. \\ &\exp \left[-i \left(\frac{4e\xi k \cos \omega t}{m_w \omega^2} + \left(k + \frac{2e\xi}{\hbar} \frac{\sin \omega t}{\omega} \right) z_N \right) \right] \times \\ &\left. \left\{ \exp \left(\frac{2ie\xi}{\hbar} \frac{\sin \omega t}{\omega} z_N \right) S^*(\lambda, t) + \exp \left[2i \left(\frac{4e\xi k \cos \omega t}{m_w \omega^2} + \left(k + \frac{2e\xi}{\hbar} \frac{\sin \omega t}{\omega} \right) z_N \right) \right] \right\} \right\} \\ &- 2|S(\lambda, t)|^2 \left(k + \frac{e\xi}{\hbar} \frac{\sin \omega t}{\omega} \right). \end{aligned} \quad (6.191)$$

Виконаємо розрахунок енергії E_{e-em} , яка протягом часу t , що близький до періоду $T = 2\pi/\omega$ може бути отриманою чи переданою електрону шляхом його взаємодії з електромагнітним полем. Застосування класичної електродинаміки дає вираз:

$$E_{e-em} = \int_0^t dt \int_0^{z_N} J(E, z, t) \mathcal{E}(z, t) dz = z_N \int_0^T \mathcal{E}(t) j(E, t) dt, \quad (6.192)$$

де величина густини змінного струму визначається виразом:

$$j(E, t) = \frac{1}{z_N} \int_0^{z_N} J(E, z, t) dz, \quad (6.193)$$

Стосовно фази густини наведеного струму: у загальному випадку вона є зміщена відносно фази електричної складової електромагнітного поля $\xi(t)$ на величину $\Delta\phi$. В такому разі слід запровадити комплексну динамічну провідність:

$$\sigma = \text{Re} \sigma + i \text{Im} \sigma, \quad (6.194)$$

яка є дозволяє виконати розрахунок змінного струму через наноструктуру:

$$i(E, t) = \text{Re}(\sigma) \xi(t) = 2\xi \text{Re}(\sigma) \cos(\omega t). \quad (6.195)$$

Тепер з (6.192) з урахуванням (6.193) отримується

$$E_{e-em} = 4z_N \xi^2 \text{Re}(\sigma) \int_0^t \cos^2 \omega t = z_N \xi^2 \left(2t + \frac{\sin 2\omega t}{\omega} \right) \text{Re}(\sigma) \quad (6.196)$$

З іншого боку, енергія E_{e-em} електрона, що зазнає впливу електромагнітного полем може бути знайдена так. Розрахуємо величину енергій кожного із електронних потоків, що в результаті виникнення струму у наносистемі покидають її зліва та справа:

$$E_{e-em} = \frac{\hbar \omega t}{e} \left\{ [J(E + \hbar \omega, z = z_N, t) - J(E - \hbar \omega, z = z_N, t)] - [J(E + \hbar \omega, z = 0, t) - J(E - \hbar \omega, z = 0, t)] \right\}. \quad (6.197)$$

Прирівнюючи (6.196) та (6.197) знаходимо вираз для електронної провідності:

$$\sigma^{(e)} = \text{Re}(\sigma) = \frac{\hbar \omega n_0 t}{2\xi^2 z_N m_w (2\omega t + \sin 2\omega t)} \left\{ [J(E + \hbar \omega, z = z_N, t) - J(E - \hbar \omega, z = z_N, t)] - [J(E + \hbar \omega, z = z_0, t) - J(E - \hbar \omega, z = z_0, t)] \right\}. \quad (6.198)$$

де величини $E \pm \hbar \omega$ таку заміну: $k \rightarrow k_{\pm} = \sqrt{2m_w (E \pm \hbar \omega)} / \hbar$ у виразах (6.191).

6.6. Властивості спектральних параметрів та електронної провідності наносистем з прикладеним магнітним полем у різних часових режимах тунелювання

Оптоелектронні прилади, які використовують досліджувані в даній праці типи наноструктур базуються на балістичному транспорті електронного потоку. Це означає, що врахування скінченності часів життя електронних квазістаціонарних станів є важливим для збереження когерентності тунельованого потоку.

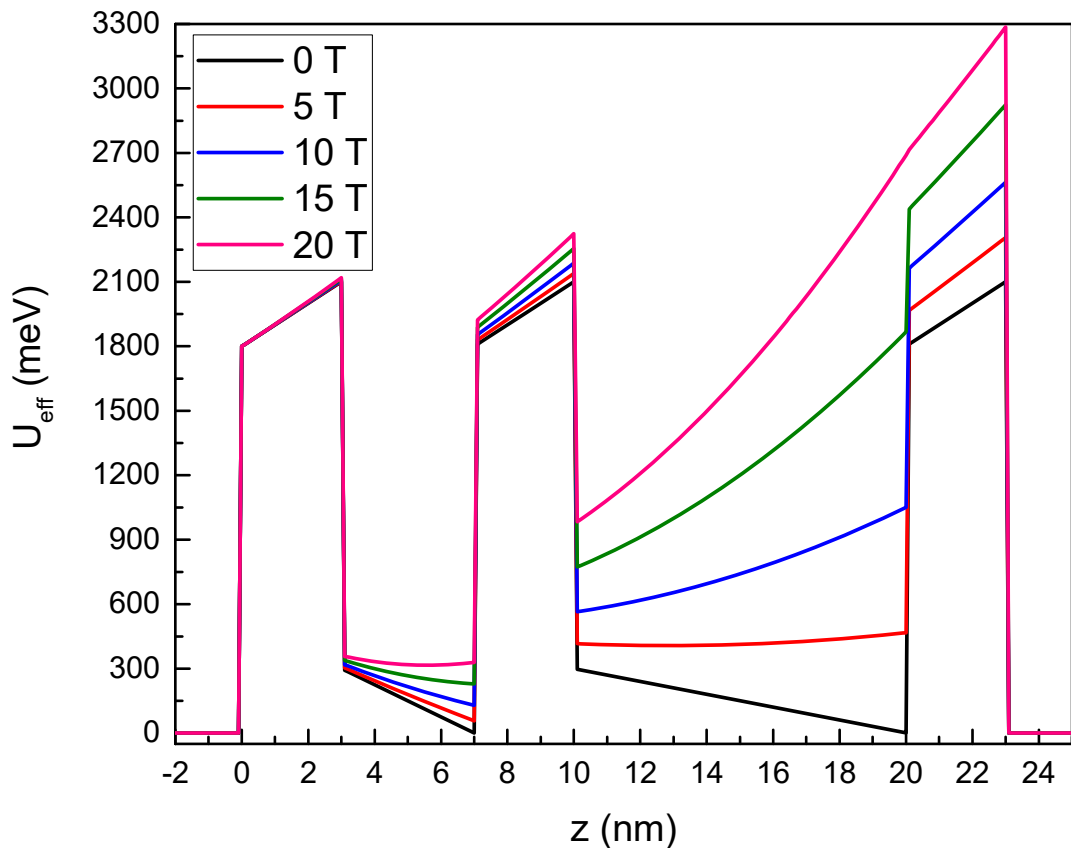


Рис. 6.11. Потенціальна електронна схема досліджуваної наноструктури ($U_{eff}(z) = U(z) + U_e(z) + U_m(z)$), розрахована для різних значень прикладеного до неї

постійного магнітного поля ($U_m(z) = \frac{\hbar^2}{2m(z)} \left(k_x - \frac{eBz}{\hbar} \right)^2$ - складова, що характеризує внесок постійного магнітного поля).

Запропонована нами теорія дозволяє виконувати розрахунки спектру та резонансних ширин електронних квазістаціонарних станів у довільному часовому інтервалі, зокрема й і актуальному інтервалі значень співмірних з часом релаксації τ_{rel} , що не можливо зробити в рамках теорії, що базується на стаціонарних розв'язках рівняння Шредінгера насамперед в силу відсутності врахування внеску електромагнітного поля. У зв'язку з цим ми скористались розвиненою теорією для того, щоб виконати розрахунок електронних спектральних параметрів для різних моментів часу: $t < \tau_{rel}$

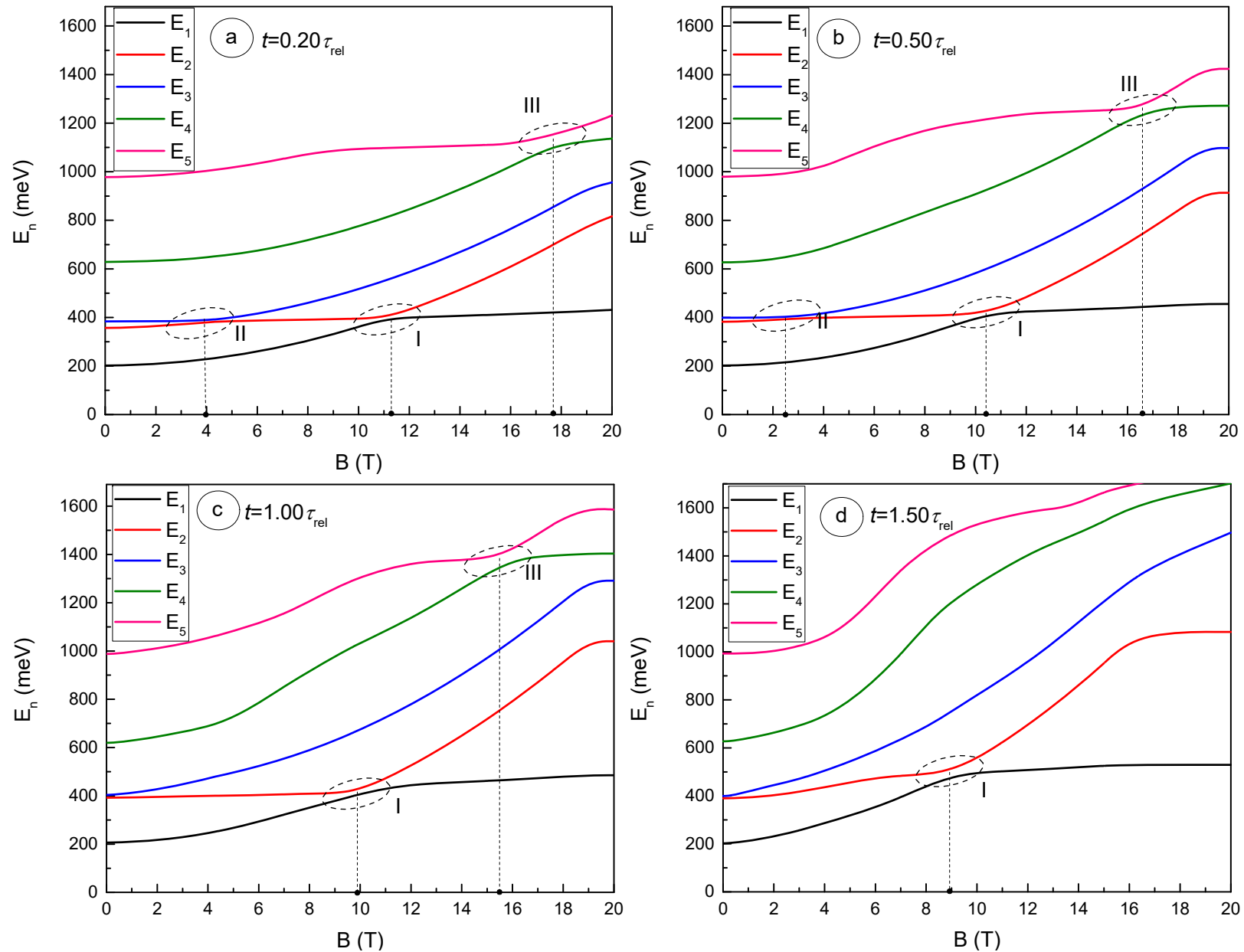


Рис. 6.12. Енергії перших п'яти електронних рівнів E_n , локалізованих у наноструктурі, розрахованих як функції індукції магнітного поля B . Розрахунки проводились для різних значень часу t , вираженого у величинах часу релаксації τ_{rel} .

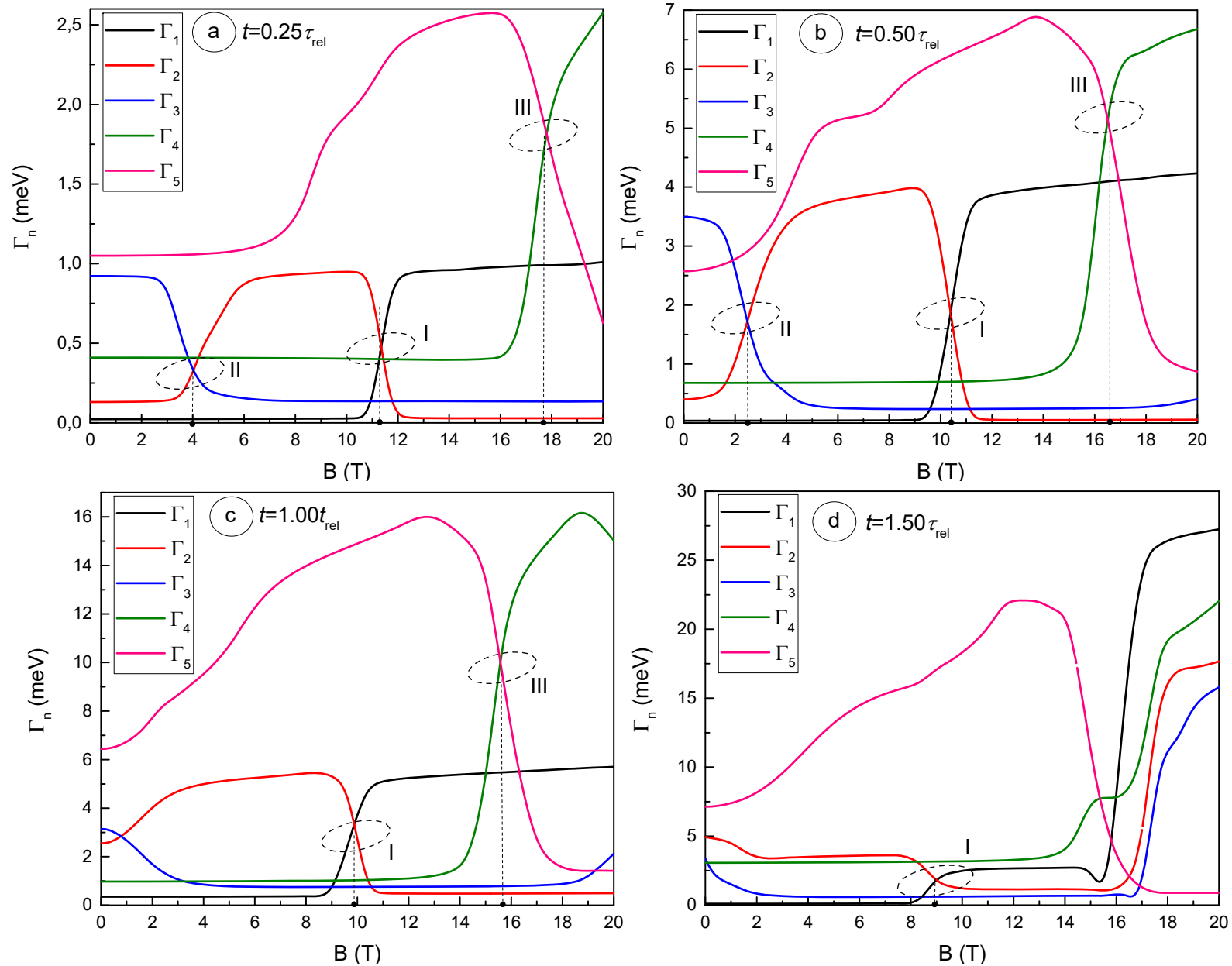


Рис. 6.13. Резонансні ширини перших п'яти електронних рівнів Γ_n , локалізованих у наноструктурі, розрахованих як функції індукції магнітного поля B . Розрахунки проводились для різних значень часу t , вираженого у величинах часу релаксації τ_{rel} .

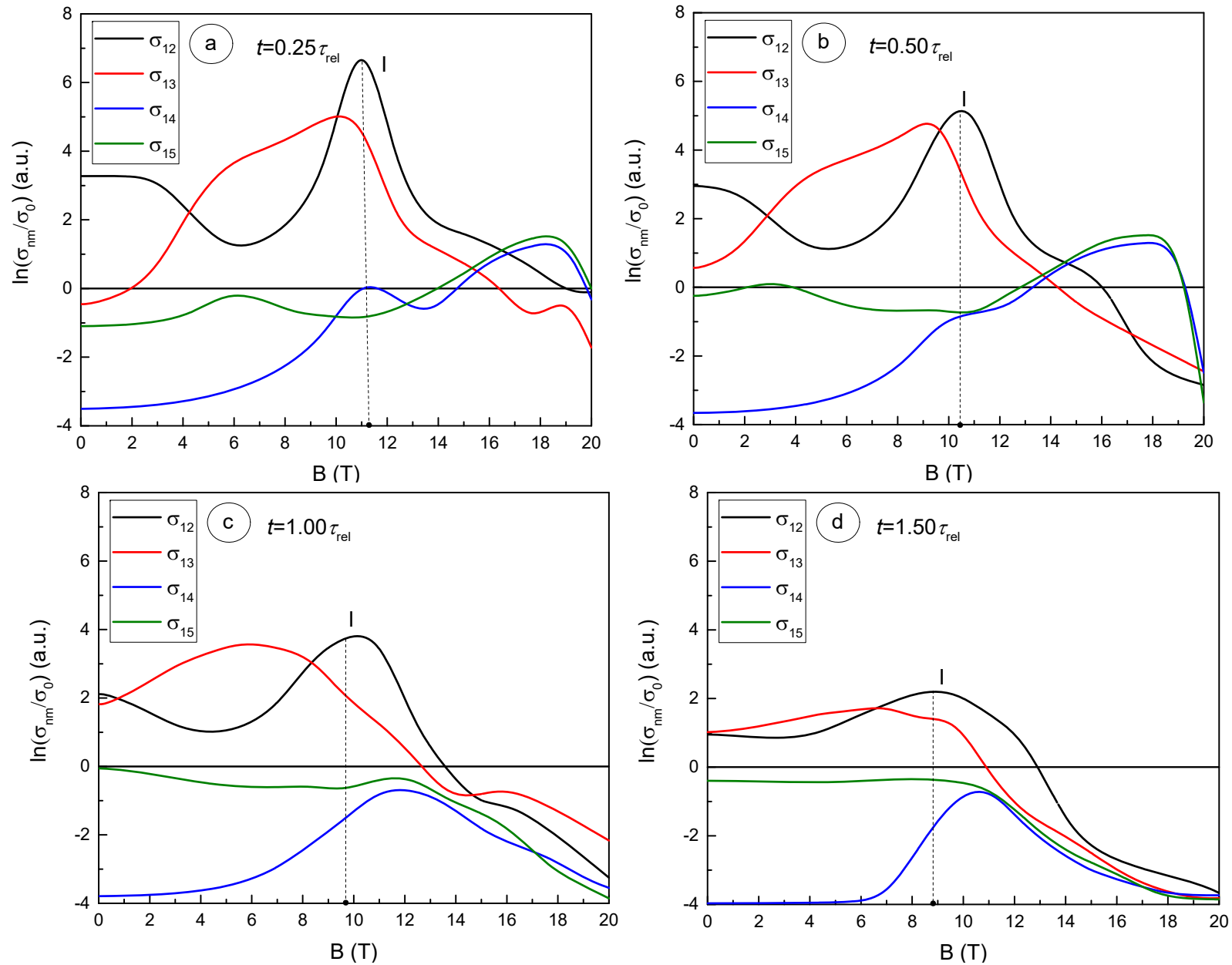


Рис. 6.14. Логарифми безрозмірних величин електронної провідності, що виникають при квантових переходах $1\rangle \rightarrow m\rangle$, $m = 2; 3; 4; 5$, розраховані як функції індукції магнітного поля B . Розрахунки проводились для різних значень часу t , вираженого у величинах часу релаксації τ_{rel} . Тут $\sigma_0 = 1\text{C}/\text{см}$.

(когерентний режим тунелювання); $t > \tau_{rel}$ (випадок коли квазістаціонарні стани руйнуються за рахунок механізмів дисипації). Для розрахунків ми взяли двобар'єрну наносистему з GaN – потенціальними ямою шириною 4 nm та 8 nm, та AlN – потенціальними бар'єрами товщиною 3 nm кожний. Ефективні маси електрона у потенціальній ямі та бар'єрах рівні $m_w = 0.2m_e$ і $m_b = 0.4m_e$ відповідно, де m_e – маса вільного електрона. Потенціальна схема наносистеми розраховувалась згідно загальних принципів відомих з Розділу 3. Величина часу релаксації розраховувалась з використанням співвідношення Маттісена:

$$\tau_{rel} = \left(\tau_{ph-e}^{-1} + \tau_B^{-1} + \tau_U^{-1} + \tau_M^{-1} \right)^{-1}. \quad (6.199)$$

У виразі (6.199) враховується внесок від таких величин: τ_{ph-e} - час розсіювання зумовлений електрон-фононою взаємодією, τ_B - час розсіювання на ефективній товщині z_N наносистеми; τ_U - це час, що відповідає одномодовій релаксації за рахунок U – процесів; τ_M - час розсіювання за рахунок різномасового розсіювання. Розрахунки показують, що для досліджуваної наносистеми величина часу релаксації складає 8.2 пс. Приклади розрахунків потенціальних схем досліджуваної наносистеми при урахуванні внеску внутрішнього електричного поля для різних значень індукції магнітного поля подано на Рис. 6.11. З Рис. 6.11 видно, що внутрішні електричні поля мають різні знаки у потенціальних ямах на бар'єрах наносистеми, а вплив магнітного поля приводить до квадратичної залежності потенціалу від координати.

Як показують розрахунки резонансних енергій та ширин електронних квазістаціонарних станів у залежності величини індукції магнітного поля B для різних моментів часу t виражених в одиницях часу релаксації τ_{rel} за допомогою магнітного поля можна здійснювати коригування робочої частоти наноприладів, працюючих на квантових переходах між електронними станами наносистеми. Проте є ряд особливостей, які не могли б бути встановленими в межах стаціонарної задачі. Як видно з Рис. 6.12а, б, с, d резонансні енергії електронних рівнів мають квадратичну залежність від індукції магнітного поля. Характерною особливістю цих залежностей є формування антикросінгів (ефектів пляшкового горла) між сусідніми

енергетичними рівнями, що позначені як (I), (II) та (III). Наявність антикросінгів свідчить про зміну локалізації електронів в наносистемі у їх квазістаціонарних станах під дією магнітного поля. Як видно з Рис. 3 залежності енергій від магнітного поля відрізняються для різних значень часу t . Так, антикросінги, які виникають при $t = 0.20\tau_{rel}$ для часу $t = 0.50\tau_{rel}$ зміщуються в шкалі значень індукції магнітного поля вліво; при $t = 1.00\tau_{rel}$ антикросінги між другим та третім електронними рівнями зникає, антикросінги (I) та (III) зміщуються вліво; при $t = 1.50\tau_{rel}$ залишається лише антикросінги (I) між першим та другим електронними рівнями. Таким чином локалізація електрона в наносистемі залежить не тільки від індукції магнітного поля, а є різною в різні моменти часу t , що є наслідком впливу залежного від часу електромагнітного поля. Крім того слід зауважити значення енергій, які при $B=0$ є однаковими, досягають при збільшенні величини B тим більших значень, чим більшим є розрахункове значення моменту часу t (допустимі значення яких менші або сів мірні з часом релаксації τ_{rel}). Таким чином магнітне поле дає змогу керувати робочою частотою наноприладів, працюючих на квантових електронних переходах, проте для цього дуже важливим аспектом врахування часу релаксації і часу тунелювання електронного потоку в порівнянні з цією величиною.

Додаткову інформацію можна отримати із розрахованих резонансних ширин електронних квазістаціонарних станів, залежності яких від індукції магнітного поля подано на Рис. 6.13а, б, с, d. Як видно з Рис. 4. для значень B , для яких у залежностях електронних енергій $E_n(B)$, що подані на Рис. 6.12 мають місце антикросінги, в залежностях $\Gamma_n(B)$ спостерігаються кросінги (перетини) кривих для сусідніх рівнів. Загалом поведінка резонансних ширин від величини індукції магнітного поля є складнішою ніж відповідних резонансних енергій і не обов'язково полягає у збільшенні їх величин у всьому інтервалі зміни B . Так, для всіх розрахункових значень t , резонансна ширина першого квазістаціонарного стану до по утворення кросінгу з резонансною шириною другого квазістаціонарного стану слабо залежить від магнітного поля, після кросінгу вона різко зростає досягаючи свого максимального значення. Резонансна ширина другого квазістаціонарного

стану навпаки при $t \leq \tau_{rel}$ досягає своїх максимальних значень до утворення кросінгу з резонансною шириною першого квазістаціонарного стану в подальшому слабко залежачи від B . Резонансна ширина третього квазістаціонарного стану при $t \leq \tau_{rel}$ має максимальні значення при малих значеннях індукції магнітного поля. При $t > \tau_{rel}$ як Γ_2 так і Γ_3 досягають максимальних значень при $B = 20\text{T}$. Схожим чином поводить себе резонансна ширина четвертого квазістаціонарного стану Γ_4 , яка слабко залежить від індукції магнітного поля для всіх значень t , різко зростаючи фактично в кінці інтервалу значень B . І навпаки, резонансна ширина п'ятого квазістаціонарного стану Γ_5 зростає майже на всьому інтервалі значень B , різко зменшуючись на його кінці.

Отримані результати свідчать, що впливом магнітного поля можна коригувати ще дві важливі характеристики наноприладів: час життя електронів у робочому квазістаціонарному стані, що пов'язаний з резонансною шириною як $\tau_n = \hbar^{-1}\Gamma_n$, а також змінювати ширину смуги випромінювання чи поглинання $\Gamma_{nm} = \Gamma_n + \Gamma_m$ у переході $n \rangle \rightarrow m \rangle$.

У наноприладах таких як квантові каскадні детектори та лазери їх функціонування полягає у інжектуванні електронного пучка в наносистему, причому енергія електронів має збігатись з енергією одного з електронних квазістаціонарних станів цієї наносистеми. В подальших електронних переходах має місце формування тунельного струму, пов'язаного з електронною провідністю. В наших розрахунках електронної провідності ми розглядатимемо квантові переходи з першого квазістаціонарного електронного стану на решту досліджуваних квазістаціонарних станів, щоб такі розрахунки максимально можливо відповідали суті актуальних фізичних процесів у багат шарових наносистемах. Розрахунки електронної провідності виконувались для тих же моментів часу, що ж розрахунки резонансних енергій та ширин. Результати цих розрахунків подано на Рис. 6.14а, b, c, d. Для зручності величини провідностей подано у відносних одиницях, й з метою зручності масштабування взято натуральні логарифми цих величин. Як видно з Рис. 6.14 магнітне поле може бути застосованим для збільшення електронної провідності

наносистеми для розрахункових моментів часу $t \leq \tau_{rel}$. Проте слід зауважити, що для досягнення цієї мети допустимими є різні діапазони значень індукції B . Наприклад для провідності σ_{12} актуально застосовувати околиці значень індукції (від 8 Т до 13 Т), в якому мають місце антикросінги енергій першого та другого квазістаціонарних станів та кросінги із резонансних ширин (відмічені на рисунках як (I)). Провідність σ_{13} збільшується із величиною індукції B в діапазоні від 4 Т до 11 Т при $t = 0.25\tau_{rel}$; в діапазоні від 4 Т до 9 Т при $t = 0.50\tau_{rel}$; в діапазоні від 2 Т до 7 Т при $t = 1.00\tau_{rel}$. Щодо використання магнітного поля для провідностей σ_{14} і σ_{15} , то не зважаючи на те, збільшення індукції B фактично на всьому діапазоні розрахунків приводить до зростання значень цих провідностей проте вони є набагато меншими за провідності σ_{12} і σ_{13} , що зводить нанівець можливість їхнього застосування. З цієї причини, є недоцільним застосування магнітного поля у випадку коли $t = 1.50\tau_{rel}$, оскільки в такому разі величини провідностей σ_{12} , σ_{13} , σ_{14} , σ_{15} малі або ж усі вони є співмірними між собою (це також справедливо великих значень індукції $B > 14$ Т при $t \leq \tau_{rel}$). Таким чином, підсумовуючи слід виділити той факт, що застосування магнітного поля для збільшення електронної провідності є доцільним лише для квантових переходів $1 \rangle \rightarrow 2 \rangle$ і $1 \rangle \rightarrow 3 \rangle$ і лише при умові, що $t \leq \tau_{rel}$.

Висновки до розділу 6

1. Запропоновано варіаційний метод для рівняння Шредінгера, з використанням якого виконано теоретичні дослідження квазістаціонарних станів електронів разом з підсистемою акустичних фононів.
2. Розвинена квантова тунельного транспорту електронів в плоских нітридних наноструктурах з урахуванням підсистеми акустичних фононів за довільних значень температури.
3. Виконано розрахунки часів фононної релаксації, коефіцієнта прозорості наноструктури та густини тунельного струму з урахуванням фононної підсистеми

для різних температурних значень. Встановлено, що вплив підсистеми акустичних фонів зумовлює температурне збільшення частот квантових переходів та резонансних ширин електронних КСС та збільшує величину напруженості електричного поля необхідну для досягнення пікового значення тунельного струму.

4. У результаті виконання розрахунків електронної провідності наноструктури встановлено, що вплив фонної підсистеми полягає у зменшенні із ростом температури складової провідності, яка відповідає за прямий електронний потік з наноструктури та збільшенні конкуруючої складової потоку у протилежному напрямку.

5. Шляхом застосування методу Льюїса-Різенфілда до залежного від часу рівняння Шредінгера розвинено теорію електронного тунельного транспорту у відкритій багат шаровій наноструктурі в кожній з квантових ям якої є можливою генерація електромагнітних хвиль з різними амплітудами.

6. Розрахунки залежного від часу коефіцієнта прозорості досліджуваної наносистеми дозволили встановити, що на досліджуваний процес електронного тунелювання впливають такі основні чинники. При фіксованих значеннях амплітуд електричної складової електромагнітного поля розраховані залежності коефіцієнта прозорості для значень часу, що менші за час релаксації поводять себе так: зменшується величина максимуму коефіцієнта прозорості, значення резонансної енергії залишається незмінним, значення резонансної ширини зменшується.

7. Встановлено, що для значень часу близьких до часу релаксації та більших від нього у залежностях коефіцієнта прозорості з'являються осциляції які приводять до неможливості однозначного визначення спектральних характеристик квазістаціонарного стану і його фактичного руйнування. Для фіксованих значень часу, що менші за час релаксації встановлено таке: якщо амплітуди електричних складових електромагнітних полів менші на два порядки від амплітуди електромагнітного поля, що генерується в основному квантовому переході, то має місце слабке зменшення максимуму коефіцієнта прозорості та зміщення його у шкалі енергій вправо. Подальше зростання амплітуд приводить до різкого зменшення коефіцієнта прозорості наносистеми та руйнування квазістаціонарного

стану. Отримані нами результати будуть корисними для дослідників електронного транспорту в наносистемах та впливу різноманітних чинників на цей процес.

8. Розвинено теорію тунельного транспорту електронів крізь відкриту багатошарову наносистему за умови наявності впливу постійного внутрішнього електричного поля, постійного магнітного поля спрямованого перпендикулярно до напрямку руху електронів й з урахуванням взаємодії тунельованих електронів із змінним електромагнітним полем. Для цього розглянуто повне рівняння Шредінгера з залежним від часу потенціалом. Розв'язки цього рівняння з отримано шляхом застосування методу Льюїса-Різенфілда разом з представленням хвильової функції у вигляді характерному для теорії розсіювання. Використання граничних умов для хвильової функції та потоку її ймовірності на межах шарів наносистеми дозволило однозначно визначити електронну хвильову функцію та S - матрицю з полюсів якою визначався електронний квазістаціонарний спектр – резонансні енергії та ширини. Використання отриманих хвильових функції дозволило виконати аналітичні розрахунки електронної провідності наносистеми.

9. Розрахунки спектральних характеристик квазістаціонарних станів та електронної провідності, що були виконані з використанням пропонованої теорії для параметрів трибар'єрної нітридної наноструктури дозволили встановити такі основні результати:

- зі збільшенням величини індукції магнітного поля, значення енергій електронних рівнів також зростають, формуючи антикросінги між сусідніми енергетичними рівнями. Положення цих антикросінгів із наближенням величини моменту часу t до значення відповідному часу релаксації τ_{tel} зміщуються в шкалі значень індукції магнітного поля вліво, частина цих антикросінгів взагалі зникає при $t \geq \tau_{tel}$. Як результат це дозволяє застосовувати магнітне поле, для зміни енергії квантових переходів між електронними рівнями;

- зі збільшенням величини індукції магнітного поля, залежності резонансних ширин формують кросінги для тих же значень індукції, що й мало місце формування антикросінгів у залежностях резонансних енергій. Дані кросінги зміщуються та зникають аналогічним чином, як антикросінги резонансних енергій – це

відбувається для тих же значень індукції магнітного поля та моменту часу t . Наявність у залежностях резонансних ширин інтервалів для яких має місце зростання їх значень дає змогу впливати зміною індукції магнітного поля на час життя електронних квазістаціонарних станів, а також змінювати ширини смуг поглинання та випромінювання в функціонуючих наноприладах;

- розрахунки електронної провідності наносистеми у залежності від індукції магнітного поля показали, що зміною величини індукції можна отримати збільшення величини електронної провідності, що формується в електронних переходах $1\langle \rightarrow 2\langle$ і $1\langle \rightarrow 3\langle$, проте це буде ефективним лише за умови, що режим тунелювання відбувається в часовому інтервалі не перевищуючому час релаксації.

10. Отримані нами теоретичні та розрахункові результати будуть корисними для як дослідників, які займаються теоретичними дослідженнями задач для залежних від часу потенціалів у повному рівнянні Шредінгера так і для дослідників, діяльність яких зосереджена на вивченні тунельного транспорту в багат шарових наносистемах при наявності впливу зовнішніх та внутрішніх полів, а також факторів дисипативного характеру.

РОЗДІЛ 7. ТЕОРІЯ ЕКСИТОНІВ У БАГАТОШАРОВИХ НІТРИДНИХ НАНОСИСТЕМАХ ТА ПЕРЕНОРМУВАННЯ ЇХ СПЕКТРУ ЗА РАХУНОК ВЗАЄМОДІЇ З АКУСТИЧНИМИ ФОНОНАМИ ПРИ РІЗНИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

Електронні процеси, що відбуваються в багатошарових плоских нітридних наноструктурах, мають пряме практичне застосування в роботі квантових каскадних лазерів (ККЛ) і детекторів (ККД) [271-273]. Слід підкреслити важливість впливу фононів на ці процеси, а саме на безвипромінювальні переходи з енергіями, близькими до енергій оптичних фононів, що застосовуються для забезпечення транспортування тунельного електронного пучка від одного каскаду нанопристрою до іншого. Для моно- або двошарових наноструктур і багатошарових каскадів ККЛ і ККД, створених на основі арсенідних або нітридних напівпровідникових сполук, спектри оптичних фононів і їх взаємодія з електронами були досліджені раніше [274-279]. Для акустичних фононів проблема дослідження їх спектру та взаємодії з електронами розглядалася досить давно на основі методу кінцевих різниць для одноямних наносистем і нещодавно з використанням аналогічного підходу для багатошарових нітридних наноструктур (Розділ 4 дисертації та праці [188, 189, 196-198]). Крім того, розглядалися випадки такої взаємодії як через деформацію, так і через п'єзоелектричний потенціал [157, 159]. При цьому взаємодія екситонів з акустичними фононами в багатошарових низькорозмірних системах теоретично ще послідовно не вивчена. Це пов'язано з низкою причин, головною з яких була аналітичної теорії акустичних фононів у нітридних наносистемах та довільна кількість напівпровідникових шарів (ця теорія вперше була запропонована дисертантом у Розділі 4 та публікаціях за тематикою цього розділу дисертації). У результаті теоретичні моделі, застосовувались переважно для вивчення теплопровідності наноструктур та факторів, що супроводжують ці явища, розроблені в [163-166, 199], базуються на чисельному розв'язанні рівнянь, що описують фононні моди.

Другою проблемою є відсутність розробленого підходу до перенормування спектру екситонів. Проте слід виділити низку експериментальних робіт, у яких

досліджується екситон-фононна взаємодія в наноструктурах AlN/GaN з різною геометричною симетрією [280–284]. Крім того, слід звернути увагу на дві теоретичні роботи [285, 286], де досліджено екситон-фононну взаємодію в анізотропних неполярних кристалах 6H-SiC.

Безпосередній акцент на дослідженні акустичних фононів у даному розділі зумовлений причинами актуальності розвитку теорії електрон-фононної та екситон-фононної взаємодії, а також практичного застосування такої теорії до реальних наноструктур, через такі основні причини. Плоскі резонансні тунельні структури, які є прецизійними елементами квантових каскадних лазерів або детекторів, повинні забезпечувати когерентний тунельний транспорт електронів. Незважаючи на те, що робота квантових каскадних лазерів і детекторів базується лише на електронних переходах, існує ряд робіт [287–290], присвячених наносистемам за своїми геометричними та фізичними параметрами, подібним до активних елементів цих нанопристроїв, але предметом дослідження в них є екситонні стани. Такі теоретичні дослідження мотивовані необхідністю розуміння когерентності в резонансному тунельному транспорті плоских наноструктур, що вимагає розуміння екситон-фононної взаємодії. Ці взаємодії проявляються у температурному зсуві та швидкості розпаду квантованих рівнів. Серед різноманітних ефектів електрон-фононного та екситон-фононного розсіювання ми тут зосереджуємося саме на взаємодії з акустичними фононами, оскільки теорія для цього була найменш детально розроблена для нітридів і тому, що вони є найбільш актуальними при низьких температурах.

7.1. Теорія екситонних станів у багат шарових нітридних наноструктурах. Електронні, діркові та екситонні спектри у випадку напівпровідників з кристалічною решіткою типу вюрциту та типу цинкової обманки

Насамперед розвинемо теорію електронного та діркового екситонний спектру багат шарової нітридної наносистеми. Її енергетична схема для електрона та дірки разом з координатною системою й позначеними меж бар'єрами і потенціальними

ямами для такого типу наносистем є такі як на Рис. 7.1. Екситонний гамільтоніан має такий вигляд:

$$H_{ex}(\rho, z_e, z_h) = E_g + \hat{H}_{(e)}(z_e) + \hat{H}_{(h)}(z_h) + \hat{H}_r(\rho, z_e, z_h) + V(|z_e - z_h|), \quad (7.1)$$

де заборонена зона як функція температури T розраховується виходячи із формули Варшні:

$$E_g^{(*)}(T) = E_0^{(*)} - a^{(*)}T^2 / (b^{(*)} + T), \quad E_0^{(*)} = E_g^{(*)}(T)|_{T=0}, \quad * = \{\text{AlN}, \text{GaN}\}, \quad (7.2)$$

де $a^{(\alpha)}$, $b^{(\alpha)}$ - параметри Варшні для AlN і GaN напівпровідників.

Оскільки в досліджуваній нами наносистемі частина її шарів є з трикомпонентного напівпровідникового сплаву, то величина забороненої зони у залежності від вмісту x напівпровідника AlN розраховувалась за таким співвідношенням:

$$E_g(x) = xE_g^{(\text{AlN})} + (1-x)E_g^{(\text{GaN})} + cx(1-x), \quad (7.3)$$

де c - підгоночний параметр, що є різним для шарів з кристалічною решіткою типу вюрциту і типу цинкової обманки. Тепер з використанням (7.2) та (7.3) виконується розрахунок енергетичної схеми наносистеми без урахування впливу внутрішніх полів:

$$U^{(e)}(z_e) = \begin{cases} 0, & \text{у GaN потенціальних ямах} \\ 0.765(E_g^{(\text{AlGa})} - E_g^{(\text{GaN})}), & \text{у AlGaN потенціальних бар'єрах} \end{cases} \quad (7.4)$$

$$U^{(h)}(z_h) = \begin{cases} 0, & \text{у GaN потенціальних ямах,} \\ 0.235(E_g^{(\text{AlGa})} - E_g^{(\text{GaN})}), & \text{у AlGaN потенціальних бар'єрах.} \end{cases}$$

Далі виконаємо розрахунок напруженості внутрішнього електричного поля, що виникає в шарах наноструктури унаслідок виникаючих спонтанної та п'єзоелектричної поляризації. Для цього використаємо граничні умови для поля електричного зміщення на границях наноструктури ($D_k = D_{k+1}$; $D_k = \varepsilon_k F_k + P_{total}^{(k)}$) та умову, накладену на загальне падіння потенціалу на всій наносистемі ($\sum_{k=1}^N F_k \Delta z^{(k)} = 0$)

(див. також [41]). Це дає таке співвідношення, яке є відоме з Розділу 3 дисертації:

$$F_p = \sum_{k=1; k \neq p}^N \frac{[P_{total}^{(k)} - P_{total}^{(p)}] \Delta z_{\alpha}^{(p)}}{\epsilon_{(p)}^{(\alpha)} \epsilon_{(k)}^{(\alpha)}} \bigg/ \sum_{k=1}^N \frac{\Delta z_{\alpha}^{(k)}}{\epsilon_{(k)}^{(\alpha)}}, \quad (7.5)$$

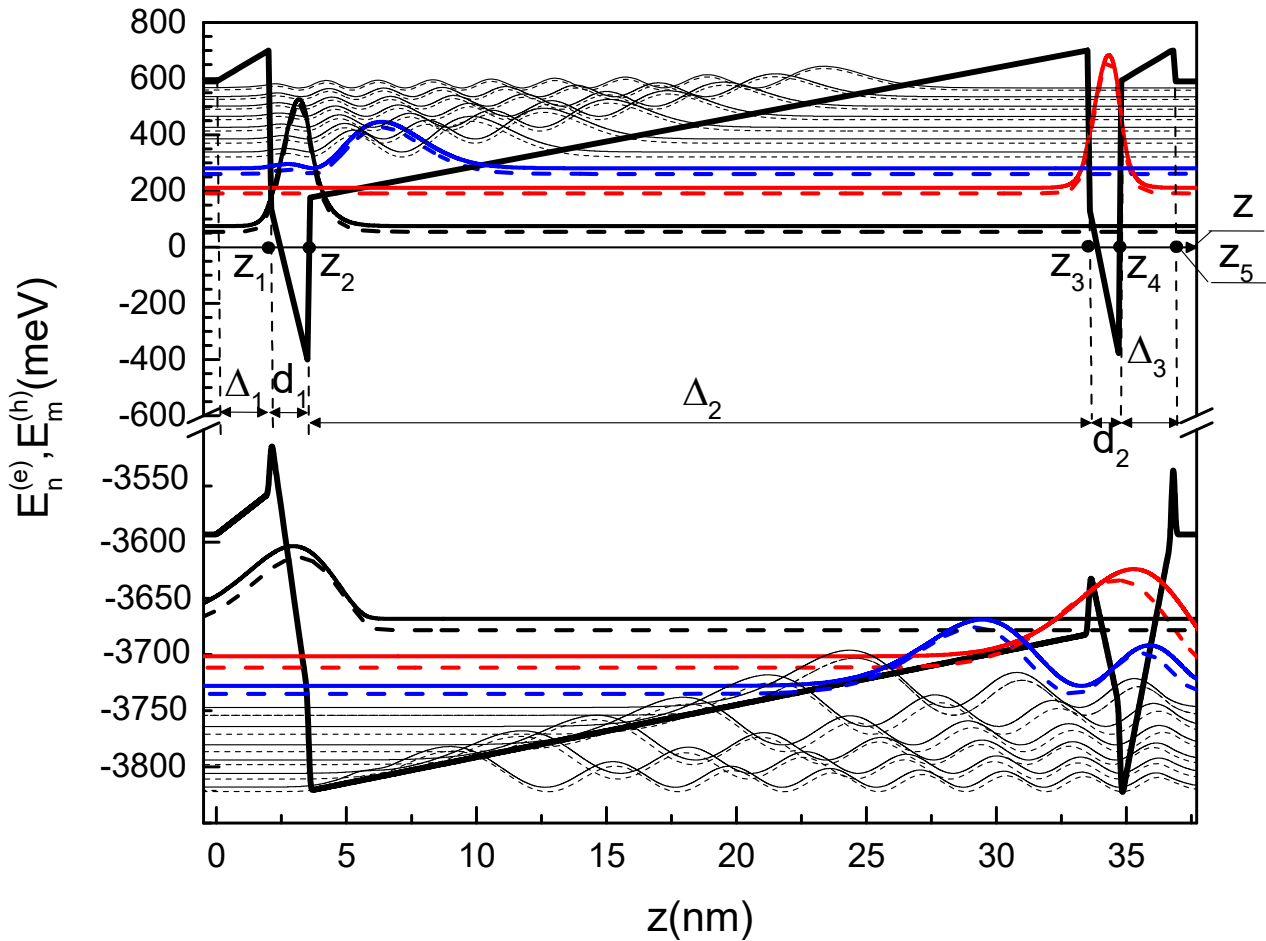


Рис. 7.1. Енергетичні схеми досліджуваної наносистеми, розраховані для електрона та дірки відповідно разом з поданими квадратами їх хвильових функцій, що приведені до шкали енергій електронного та діркового спектрів. суцільні лінії відповідають вюрцитним напівпровідникам, штрихові лінії відповідають напівпровідникам типу цинкової обманки). Графік має розрив від -600 меВ до -3500 меВ.

де індекси p і k задають мітки шарів наносистеми і, крім того, p задає номер шару, в якому розраховується електричне поле, а підсумовування відбувається за індексом k . Сумарна поляризація є така: $P_{total}^{(p)} = P_{pz}^{(p)} + P_{sp}^{(p)}$, а $\Delta z_{\alpha}^{(p)} = z_{\alpha}^{(p-1)} - z_{\alpha}^{(p)}$ - розміри шару наносистеми в якому розраховується величина напруженості електричного поля, а величини $\epsilon_{(p)}^{(\alpha)}$ задають діелектричну проникність цього шару. У загальному вигляді

діелектрична проникність наноструктури, щільність наноструктури, ефективна маса електронів і дірок і тензор жорсткості можуть бути представлені таким чином::

$$A^{(\alpha)}(z_\alpha) = \sum_{p=0}^N A_p^{(\alpha)} \left[\theta(z_\alpha - z_\alpha^{(p)}) - \theta(z_\alpha - z_\alpha^{(p+1)}) \right];$$

$$A_p^{(\alpha)} = \left\{ \varepsilon^{(\alpha)}(z_\alpha) \quad m^{(\alpha)}(z_\alpha) \quad C_{iklm}(z) \quad \rho(z) \right\}^T; \quad (7.6)$$

$$\alpha = \{e, h\}; \quad z_\alpha^{(N+1)} = +\infty.$$

де $\varepsilon_0^{(\alpha)}$, $\varepsilon_1^{(\alpha)}$ - відповідно діелектричні проникності AlN і AlGaN напівпровідників, $\theta(z)$ - функція Хевісайда.

Отже, тепер складові $\hat{H}_{(e)}(z_e)$ і $\hat{H}_{(h)}(z_h)$, що відповідають вільним електрону та дірці, враховуючи (7.4), (7.5) є такими:

$$\hat{H}^{(\alpha)}(z_\alpha) = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z_\alpha} \frac{1}{m^{(\alpha)}(z_\alpha)} \frac{\partial}{\partial z_\alpha} + U^{(\alpha)}(z_\alpha) + U_E^{(\alpha)}(z_\alpha), \quad (7.7)$$

де

$$U_E^{(\alpha)}(z_\alpha) = \sum_{p=1}^N (-1)^{p-1} q^{(\alpha)} F_p \left(z_\alpha - \frac{F_{p-1} z_\alpha^{(p-1)}}{F_p} \right) \left[\theta(z_\alpha - z_\alpha^{(p-1)}) - \theta(z_\alpha - z_\alpha^{(p)}) \right], \quad (7.8)$$

причому $F_0 = 0$, $q^{(\alpha)} = \begin{cases} q^{(e)} = -e, \\ q^{(h)} = e. \end{cases}$, а ефективні маси електрона на дірки можуть бути

подані таким чином:

$$m_0^{(\alpha)} = m_{\text{GaN}}^{(\alpha)}; m_1^{(\alpha)} = m_{\text{AlGaN}}^{(\alpha)} \quad (7.9)$$

Кулонівська взаємодія між електроном та діркою у виразі (7.1) описується складовою гамільтоніана, що визначена як:

$$V(|z_e - z_h|) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 \varepsilon^{(\alpha)}(z_\alpha) \sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}}, \quad (7.10)$$

Для того, щоб описати відносний рух електрона та дірки слід розглянути їхній рух у системі координат, яка віднесена до їхнього центра мас. Такий рух визначається наступною складовою гамільтоніана:

$$\hat{H}_r(\rho, z_e, z_h) = -\frac{\hbar^2}{2\mu(z_e, z_h)} \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \right), \quad (7.11)$$

де приведена маса екситона:

$$\mu(z_e, z_h) = \frac{m^{(e)}(z_e)m^{(h)}(z_h)}{m^{(e)}(z_e) + m^{(h)}(z_h)}, \quad (7.12)$$

а ρ – це відносна відстань між електроном та діркою у площині, що перпендикулярна до осі Oz.

Отже, для отримання спектру та хвильових функцій екситона слід знайти розв'язки стаціонарного рівняння Шредінгера:

$$\hat{H}_{ex}(\rho, z_e, z_h)\Psi(\rho, z_e, z_h) = E_{ex}\Psi(\rho, z_e, z_h). \quad (7.13)$$

Спершу знайдемо окремо спектр та хвильові функції вільних електрона та дірки. Для цього знайдемо розв'язки стаціонарного рівняння Шредінгера:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z_\alpha} \frac{1}{m^{(\alpha)}(z_\alpha)} \frac{\partial}{\partial z_\alpha} + U^{(\alpha)}(z_\alpha) + U_E^{(\alpha)}(z_\alpha) \right] \Psi^{(\alpha)}(z_\alpha) = E^{(\alpha)}\Psi^{(\alpha)}(z_\alpha), \quad (7.14)$$

які є затухаючими функціями у зовнішніх областях по відношенню до наносистеми та лінійними комбінаціями функцій Ейрі $Ai(z)$, $Bi(z)$ всередині неї. Отже:

$$\begin{aligned} \Psi^{(\alpha)}(z_\alpha) &= A_{(0)}^\alpha e^{\chi_{(0)}^\alpha z_\alpha} \theta(-z_\alpha) + B_{(N+1)}^\alpha e^{-\chi_{(N+1)}^\alpha z_\alpha} \theta(z_\alpha - z_\alpha^{(N+1)}) + \\ &+ \sum_{p=1}^N \left\{ A_{(p)}^\alpha Ai[\zeta_{(p)}^\alpha(z_\alpha)] + B_{(p)}^\alpha Bi[\zeta_{(p)}^\alpha(z_\alpha)] \right\} \left[\theta(z_\alpha - z_\alpha^{(p-1)}) - \theta(z_\alpha - z_\alpha^{(p)}) \right]; \\ \zeta_{(p)}^\alpha(z_\alpha) &= \sqrt[3]{\frac{2(-1)^{p-1} m_p^{(\alpha)} q^{(\alpha)} F_p}{\hbar^2} \left[\frac{U^{(\alpha)}(z_\alpha) - E}{q^{(\alpha)}} + (-1)^{p-1} (F_p z_\alpha - F_{p-1} z_\alpha^{(p-1)}) \right]}, \\ \chi_{(0)}^\alpha = \chi_{(N+1)}^\alpha &= \hbar^{-1} \sqrt{2m_0^{(\alpha)} \left(U^{(\alpha)}(z_\alpha) \Big|_{z_\alpha < 0, z_\alpha > z_\alpha^{(N+1)}} - E \right)}, \end{aligned} \quad (7.15)$$

Використаємо граничні умови, що описують неперервність хвильової функції та потоків густини її ймовірності на усіх межах наноструктури:

$$\Psi_{(p)}^\alpha(E, z_\alpha^{(p)}) = \Psi_{(p+1)}^\alpha(E, z_\alpha^{(p)}); \quad \frac{d\Psi_{(p)}^\alpha(E, z_\alpha)}{m^{(\alpha)}(z_\alpha) dz_\alpha} \Big|_{z=z_\alpha^{(p)}-0} = \frac{d\Psi_{(p+1)}^\alpha(E, z_\alpha)}{m^{(\alpha)}(z_\alpha) dz_\alpha} \Big|_{z=z_\alpha^{(p)}+0} \quad (7.16)$$

тоді з системи (7.16) отримується дисперсійне рівняння з якого визначається дискретні електронний та дірковий спектри ($E_s^\alpha, s=(n,m)$, де індекси n та m – номери рівнів дискретного спектра електрона та дірки відповідно).

Застосовуючи граничні умови (7.16) будемо послідовно виражати коефіцієнти $A_{(0)}^\alpha, B_{(N+1)}^\alpha, A_{(\rho)}^\alpha, B_{(0)}^\alpha$ у розв'язках (7.15) через один із них, вибраний довільним чином. Цей коефіцієнт отримується з використанням умови нормування для

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_s^{(\alpha)*}(E_s^\alpha, z_\alpha) \Psi_{s'}^{(\alpha)}(E_{s'}^\alpha, z_\alpha) dz_\alpha = \delta_{ss'}, \quad (7.17)$$

й у такий спосіб хвильові функції вільних електрона та дірки є цілком визначеними.

Рівняння (7.14) загальному випадку не має точного аналітичного розв'язку, що зумовлено видом гамільтоніана (7.1) із внеском, що описує взаємодію електрона та дірки. В такому разі, для того, щоб виконати розрахунок енергії зв'язку екситона, ми подамо екситонну хвильову функцію у такому вигляді:

$$\Psi_{nm}(\rho, z_e, z_h) = \Psi_n^{(e)}(z_e) \Psi_m^{(h)}(z_h) \Phi(\rho), \quad (7.18)$$

де функції $\Phi(\rho)$ вибираються у такому вигляді [201]:

$$\Phi(\rho) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{e^{-\rho/\lambda}}{\lambda}, \quad (7.19)$$

а λ - варіаційний параметр. Тепер енергія зв'язку екситона в основному стані буде визначатися з умови мінімізації для функціоналу за цим параметром:

$$E_{nm}^{ex} = \min_{\lambda} \frac{\langle \Psi_n^{(e)}(z_e) \Psi_m^{(h)}(z_h) \Phi(\rho) | \hat{H}_{ex}(\rho, z_e, z_h) | \Psi_n^{(e)}(z_e) \Psi_m^{(h)}(z_h) \Phi(\rho) \rangle}{\langle \Psi_n^{(e)}(z_e) \Psi_m^{(h)}(z_h) \Phi(\rho) | \Psi_n^{(e)}(z_e) \Psi_m^{(h)}(z_h) \Phi(\rho) \rangle}. \quad (7.20)$$

Отже, враховуючи тепер (7.20) енергія зв'язку екситона E_{nm}^b й енергія переходу

$E_{ph} = E_{nm}^{(e,h)}$ між електроном та діркою знаходяться так:

$$\begin{aligned} E_{nm}^b &= E_n^{(e)} + E_m^{(h)} - E_{nm}^{ex}; \\ E_{nm}^{(e,h)} &= E_n^{(e)} + E_m^{(h)} + E_g - E_{nm}^{ex}. \end{aligned} \quad (7.21)$$

Інтенсивність міжпідзонних переходів розраховується із використанням виразів для хвильових функцій електрона та дірки (7.15) за таким виразом:

$$I_{nm}^{(e-h)} = \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n^{(e)}(z) \Psi_m^{(h)}(z) dz \right|^2. \quad (7.22)$$

Уведемо тепер для екситона квантовану хвильову функцію виду:

$$\hat{\Psi}(\rho, z_e, z_h) = \sum_{\vec{k}\vec{k}_e\vec{k}_h} \Psi_{\vec{k}\vec{k}_e\vec{k}_h}(\rho, z_e, z_h) \hat{a}_{\vec{k}\vec{k}_e\vec{k}_h}, \quad (7.23)$$

де

$$k_\alpha = \begin{cases} \chi_{(0)}^\alpha, z_\alpha < 0, z_\alpha > z_\alpha^{(N+1)} \\ \sqrt{2m_p^{(\alpha)} [U^{(\alpha)}(z_\alpha^{(p)}) + U_E^{(\alpha)}(z_\alpha^{(p)})]} / \hbar^2, \\ 0 \leq z_\alpha \leq z_\alpha^{(N)}. \end{cases} \quad (7.24)$$

Тут $\hat{a}_{\vec{k}\vec{k}_e\vec{k}_h}$ - бозонний оператор знищення стану з комутаційним співвідношенням:

$$[\hat{a}_{\vec{k}\vec{k}_e\vec{k}_h}, \hat{a}_{\vec{k}'\vec{k}'_e\vec{k}'_h}^\dagger] = \delta_{\vec{k}_e, \vec{k}'_e} \delta_{\vec{k}_h, \vec{k}'_h} \delta_{\vec{k}, \vec{k}'}, \quad \text{тоді екситонний гамільтоніан набуває канонічного}$$

вигляду:

$$\hat{H}_{ex} = \int dz_e dz_h \hat{\Psi}^\dagger(\rho, z_e, z_h) H_{ex}(\rho, z_e, z_h) \hat{\Psi}(\rho, z_e, z_h) = \sum_{\vec{k}\vec{k}_e\vec{k}_h} \tilde{E}_{\vec{k}\vec{k}_e\vec{k}_h}(\vec{k}_e, \vec{k}_h) \hat{a}_{\vec{k}\vec{k}_e\vec{k}_h}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}\vec{k}_e\vec{k}_h}, \quad (7.25)$$

де $\tilde{E}_{\vec{k}\vec{k}_e\vec{k}_h}(\vec{k}_e, \vec{k}_h) = E_{\vec{k}\vec{k}_e\vec{k}_h}(\vec{k}_e, \vec{k}_h) + \hbar^2 k^2 / 2\mu(z_e, z_h)$ - це закон дисперсії для екситонів у стані (k_e, k_h) , що визначений з дисперсійного рівняння, визначеного умовами (7.16),

\vec{k} - це квазіімпульс екситона, набуваючий усіх значень у зоні Бріллюена.

7.2. Спектр акустичних фононів двоямної наноструктури. Деформаційний та п'єзоелектричний потенціали акустичних фононів у випадку напівпровідників з кристалічною структурою типу вюрциту та цинкової обманки.

П'єзоелектричний ефект, що зумовлюється поперечними, а також флексуральними та ділататіональними типами акустичних фононів ми досліджували у Розділі 4 Розділі 5 дисертації. В даному розділі ми феноменологічно будемо слідувати нашим викладкам, де було отримано аналітичні вирази для деформаційного та п'єзоелектричного потенціалів акустичних фононів, що виникають у багатошаровій наносистемі середовище якої приймається неоднорідним. Оскільки дана аналітична

теорія акустичних фононів у багатошарових викладок згаданих попередніх розділів, то ми не будемо повторювати викладок нашої недавньої роботи. Проте наші дослідження до цього виконувались лише для нітрідних наносистем з кристалічною структурою типу вюрциту, а для випадку кристалічної ґратки типу цинкової обманки такі дослідження не мали місця. Тому ми зосередимось лише основних моментах розрахунку компонент акустичних фононів для різного типу кристалічних ґраток та створюваними ними деформаційного та п'єзоелектричного потенціалів.

Скористаємося рівнянням руху для пружного напівпровідникового континууму, що записується у такому вигляді:

$$\rho(z) \frac{\partial^2 u_i(\vec{r}, t)}{\partial t^2} = \frac{\partial \sigma_{ik}(\vec{r}, t)}{\partial x_k}; \vec{r} = \vec{r}_{\parallel} + \vec{e}_z z \quad i, k = (1; 2; 3) \quad (7.26)$$

де тензор напружень такий: $\sigma_{ik}(\vec{r}) = \frac{1}{2} C_{iklm}(z) \left[\frac{\partial u_i(\vec{r})}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k(\vec{r})}{\partial x_i} \right]$.

Це дає рівняння:

$$\rho(z) \frac{\partial^2 u_i(\vec{r}, t)}{\partial t^2} - \frac{\partial}{\partial x_k} \left\{ \frac{C_{iklm}(z)}{2} \left[\frac{\partial u_i(\vec{r})}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k(\vec{r})}{\partial x_i} \right] \right\} = 0. \quad (7.27)$$

Щодо для нітрідних наноструктур з кристалічної решіткою типу цинкової обманки, то теорія як акустичних фононів, так і п'єзоелектричного потенціалу є для них відсутньою. Оскільки тензор жорсткості та п'єзоелектричний тензор

$$C_{ij}^{ZB(p)} = \begin{pmatrix} C_{11}^{(p)} & C_{12}^{(p)} & C_{12}^{(p)} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12}^{(p)} & C_{11}^{(p)} & C_{12}^{(p)} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12}^{(p)} & C_{12}^{(p)} & C_{11}^{(p)} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44}^{(p)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44}^{(p)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44}^{(p)} \end{pmatrix}; e_{ij}^{ZB(p)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & e_{14}^{(p)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & e_{14}^{(p)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e_{14}^{(p)} \end{pmatrix} \quad (7.28)$$

є кардинально відмінними від аналогічних тензорів для решітки типу вюрциту, то слід очікувати відмінностей у формуванні деформаційних та п'єзоелектричних потенціалів і їх впливі на екситонний спектр.

Розв'язки рівняння (7.26) з урахуванням (7.28) будемо шукати у вигляді:

$$u_\ell(r, t) = u_\ell(q, z) e^{i(\bar{q}\bar{r} - \omega t)}, \ell = 1, 2, 3, q = \sqrt{q_x^2 + q_y^2}, \quad (7.29)$$

що після простих перетворень приводить до такого матричного рівняння:

$$\rho^{(p)} \omega^2 u_\ell^{(p)}(q, z) - D^{(p)}(q, z) u_\ell^{(p)}(q, z) = 0, \quad (7.30)$$

з диференціальним оператором виду:

$$D(q, z) = \begin{bmatrix} -C_{44}^{(p)} \frac{d^2}{dz^2} + q^2 C_{11}^{(p)} & 0 & iq(C_{12}^{(p)} + C_{44}^{(p)}) \frac{d}{dz} \\ 0 & -C_{44}^{(p)} \frac{d^2}{dz^2} + q^2 C_{44}^{(p)} & 0 \\ iq(C_{12}^{(p)} + C_{44}^{(p)}) \frac{d}{dz} & 0 & -C_{11}^{(p)} \frac{d^2}{dz^2} + q^2 C_{44}^{(p)} \end{bmatrix}. \quad (7.31)$$

Тепер із рівняння (7.30), враховуючи (7.31) отримуємо рівняння, які описують флексуральні та ділататіональні фононні моди:

$$-\frac{d^2 u_{1(3)}^{(p)}(z)}{dz^2} + iq c_{1(3)}^{(p)} \frac{du_{3(1)}^{(p)}(z)}{dz} + (\chi_{1(3)}^{(p)})^2 u_{1(3)}^{(p)}(z) = 0; \quad (7.32)$$

$$c_{1(3)}^{(p)} = (C_{12}^{(p)} + C_{44}^{(p)}) / C_{44(11)}^{(p)}; \chi_{1(3)}^{(p)} = \sqrt{(q^2 C_{11}^{(p)} - \rho^{(p)} \omega^2) / C_{44(11)}^{(p)}}$$

а також моди зсувних фононів

$$\frac{d^2 u_2^{(p)}(z)}{dz^2} - \left(q^2 - \frac{\rho^{(p)} \omega^2}{C_{44}^{(p)}} \right) u_2^{(p)}(z) = 0. \quad (7.33)$$

Система (7.32) є структурно аналогічною системі, що виникає у теорії акустичних фононів у нітридних наносистемах з решіткою типу вюрциту, розв'язки якої ми детально описували в Розділі 4 та Розділі 5, в тому числі ми модифікували цю систему на випадок врахування доданків, що описують п'єзоелектричний ефект, а також для випадку розгляду моделі відкритої наносистеми. Тому ми далі подамо остаточний результат:

$$\begin{aligned}
u_1^{(p)}(z) &= -iqc_1^{(p)} \sum_{s=1}^2 \left(A_{2s-1}^{(p)} e^{\lambda_s^{(p)} z} - A_{2s}^{(p)} e^{-\lambda_s^{(p)} z} \right) / \|u_s^{(p)}(q)\|; \\
u_3^{(p)}(z) &= -\sum_{s=1}^2 \left\{ \left(\lambda_s^{(p)} \right)^2 + \left(\chi_1^{(p)} \right)^2 \right\} \left(A_{2s-1}^{(p)} e^{\lambda_s^{(p)} z} + A_{2s}^{(p)} e^{-\lambda_s^{(p)} z} \right) / \|u_s^{(p)}(q)\| \\
\|u_s^{(p)}(q)\| &= \sqrt{\left| qc_1^{(p)} \lambda_s^{(p)} \right|^2 + \left| \left(\lambda_s^{(p)} \right)^2 + \left(\chi_1^{(p)} \right)^2 \right|^2} \\
u_2^{(p)}(z) &= A_2^{(p)} e^{-\chi z} + B_2^{(p)} e^{\chi z}, \quad \chi = \sqrt{q^2 - \frac{\rho^{(p)} \omega^2}{C_{44}^{(p)}}}.
\end{aligned} \tag{7.34}$$

де $\lambda_s^{(p)}$ - це корені біквадратного рівняння

$$\lambda^4 + \left[\left(\chi_1^{(p)} \right)^2 + \left(\chi_3^{(p)} \right)^2 + q^2 c_1^{(p)} c_3^{(p)} \right] \lambda^2 + \left(\chi_1^{(p)} \chi_3^{(p)} \right)^2 = 0, \quad \text{причому тут}$$

$$\lambda_1^{(p)} = -\lambda_3^{(p)}; \quad \lambda_2^{(p)} = -\lambda_4^{(p)}.$$

Коефіцієнти в розв'язках (7.34) знаходяться з граничних умов:

$$\begin{cases}
u_{1(3)}^{(p)}(q, z) \Big|_{z=z_p-0} = u_{1(3)}^{(p+1)}(q, z) \Big|_{z=z_p+0}; \\
\sigma_{13(33)}^{(p)}(q, z) \Big|_{z=z_p-0} = \sigma_{13(33)}^{(p+1)}(q, z) \Big|_{z=z_p+0}.
\end{cases} \tag{7.35}$$

де відповідно:

$$\begin{aligned}
\sigma_{13}^{(p)}(q, z) &= \frac{1}{2} C_{44}^{(p)} \left(-iqu_3^{(p)}(z) + \frac{du_1^{(p)}(z)}{dz} \right) e^{i(\vec{q} \cdot \vec{r} - \omega t)}; \\
\sigma_{33}^{(p)}(q, z) &= \left(-iqC_{12}^{(p)} u_1^{(p)}(z) + C_{11}^{(p)} \frac{du_3^{(p)}(z)}{dz} \right) e^{i(\vec{q} \cdot \vec{r} - \omega t)}
\end{aligned}$$

в поєднанні з умовою нормування:

$$\frac{2S_{\perp} \omega}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(z) \left[u_1(q, \omega_q, z) u_1^*(q', \omega_{q'}, z) + u_3(q, \omega_q, z) u_3^*(q', \omega_{q'}, z) \right] dz = \delta_{qq'}; \quad S_{\perp} = \Delta l_x \Delta l_y. \tag{7.36}$$

Крім того, умови (7.35) дають дисперсійне рівняння, що визначає фононний спектр $\Omega_{n_1}^{ac} = \hbar \omega_{n_1}$. Аналогічним чином використовуючи граничні умови для компонент $u_2(q, z); \sigma_{23}(q, z)$ знаходимо спектр зміщувальних фононів.

Тепер наша мета отримати рівняння для визначення п'єзоелектричного потенціалу.

Для цього скористаємося тим, що вектор зміщення визначається як:

$$\vec{D}(\vec{r}, t) = -\varepsilon_0 \varepsilon(z) \nabla \phi_{pz}^{ZB}(\vec{r}, t) + \vec{P}_{pz}^{ZB}(\vec{r}, t) + \vec{P}_{sp}. \quad (7.37)$$

Враховуючи, що спонтанна поляризація спрямована вдовж осі z ($\vec{P}_{sp} = P_{sp} \vec{k}$), а п'єзоелектрична поляризація визначається як (ми відразу переходимо до нотації Войгта так як у (7.28)):

$$P_{pz}^{ZB} = e_{klm} \varepsilon_{lm} = e_{ij}^{ZB}(z) (\varepsilon_{11} \varepsilon_{22} \varepsilon_{33} 2\varepsilon_{23} 2\varepsilon_{13} 2\varepsilon_{12})^T = 2e_{14}(z) (\varepsilon_{23} \varepsilon_{13} \varepsilon_{12})^T, \quad \varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ij}(\vec{r}, t). \quad (7.38)$$

Тепер ми скористаємося явним виглядом для фононних мод (7.34), щоб розрахувати величини компонент тензора деформацій ε_{ij} . Крім того, ми будемо приймати до уваги той факт, що у наносистемі відсутній вплив від зовнішніх розподілених зарядів, що згідно рівняння Максвелла дає:

$$\rho_{ext} = (\nabla \cdot \vec{D}) = 0. \quad (7.39)$$

Підставляючи вирази (7.37) і (7.38) у рівняння (7.39) ми будемо мати рівняння для визначення п'єзоелектричного потенціалу:

$$-\varepsilon_0 \nabla \left[\varepsilon(z) \nabla \phi_{pz}^{ZB}(\vec{r}, t) \right] + \nabla \left[2e_{14}(z) (\varepsilon_{23} \varepsilon_{13} \varepsilon_{12})^T \right] = 0. \quad (7.40)$$

Зауважимо, що у рівнянні (7.40) нема внеску від спонтанної поляризації. Якщо тепер розписати це рівняння для окремо взятого шару наносистемі, та виконати тепер Фур'є-перетворення для компонент фононний мод, а також для створюваних ними деформаційного та п'єзоелектричного потенціалів згідно із співвідношеннями:

$$u_\ell(q, \omega_{nq}, \vec{r}, t) = \sum_{nq} u_\ell(q, \omega_{nq}, z) e^{i(\vec{q} \cdot \vec{r}_\parallel - \omega_{nq} t)}; \quad \phi_{pz}^{ZB}(q, \omega_q, \vec{r}, t) = \sum_{nq} \phi_{pz}^{ZB}(q, \omega_{nq}, z) e^{i(\vec{q} \cdot \vec{r}_\parallel - \omega_{nq} t)}, \quad (7.41)$$

то будемо мати:

$$-\varepsilon_0 \varepsilon^{(p)} \nabla^2 \phi_{pz}^{ZB}(\vec{r}, t) + 4e_{14}^{(p)} \left(\frac{\partial^2 u_1(\vec{r}, t)}{\partial y \partial z} + \frac{\partial^2 u_2(\vec{r}, t)}{\partial x \partial z} + \frac{\partial^2 u_3(\vec{r}, t)}{\partial x \partial y} \right) = 0, \quad (7.42)$$

Далі зручно виконати перехід від отриманих компонент Фур'є до узагальнених координат та імпульсів, а потім до операторів чисел заповнення так як це ми робили до цього, то отримаємо оператор для фононних мод у представленні чисел заповнення:

$$\begin{aligned}
\widehat{u}_\ell(q, \omega_{nq}, r) &= \sum_{p=0}^N \sum_{nq} \sqrt{\frac{\hbar}{2S_\perp \rho^{(p)} \omega_{nq}}} \left[\widehat{b}_{n_1}^+(-\vec{q}) + \widehat{b}_{n_1}(\vec{q}) \right] \times \\
&\times \widehat{w}_\ell^{(p)}(q, \omega_{nq}, z) e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_\parallel} \left[\theta(z - z_p) - \theta(z - z_{p+1}) \right]; \\
\widehat{w}_\ell^{(p)}(q, \omega_{nq}, z) &= \sqrt{\rho^{(p)}} \widehat{u}_\ell^{(p)}(q, \omega_{nq}, z), \quad z_0 = 0; \quad z_N = +\infty.
\end{aligned} \tag{7.43}$$

Тоді використовуючи (7.34), (7.43) та виділяючи у (7.42) рівняння для складової $\phi_{pz}^{ZB}(z) = \phi_{pz}^{ZB}(q, \omega_q, z)$ знаходимо:

$$\frac{d^2 \phi_{pz}^{ZB}(z)}{dz^2} - q^2 \phi_{pz}^{ZB}(z) - \frac{e_{14}^{(p)}}{\varepsilon_0 \varepsilon^{(p)}} \sqrt{\frac{8\hbar}{S_\perp \rho^{(p)} \omega_{nq}}} \left[q_x q_y w_3^{(p)}(z) - i \left(q_y \frac{dw_1^{(p)}(z)}{dz} + q_x \frac{dw_2^{(p)}(z)}{dz} \right) \right] = 0. \tag{7.44}$$

Розв'язки рівняння (7.44) такі:

$$\begin{aligned}
\phi_{pz}^{ZB}(z) &= A^{(p)} e^{qz} + B^{(p)} e^{-qz} - \\
&- \frac{e_{14}^{(p)}}{\varepsilon_0 \varepsilon^{(p)} q} \sqrt{\frac{2\hbar}{S_\perp \rho^{(p)} \omega_{nq}}} \left\{ e^{qz} \int_0^z e^{-q\xi} \Phi^{(p)}(q, \xi) d\xi - e^{-qz} \int_0^z e^{q\xi} \Phi^{(p)}(q, \xi) d\xi \right\}; \\
\Phi_s^{(p)}(q, \xi) &= q_x q_y w_3^{(p)}(z) - i \left(q_y \frac{dw_1^{(p)}(z)}{dz} + q_x \frac{dw_2^{(p)}(z)}{dz} \right) = \\
&= -\sqrt{\rho^{(p)}} \left\{ q_x q_y \sum_{s=1}^2 \left\{ (\lambda_s^{(p)})^2 + (\chi_1^{(p)})^2 \right\} \left(A_{2s-1}^{(p)} e^{\lambda_s^{(p)} z} + A_{2s}^{(p)} e^{-\lambda_s^{(p)} z} \right) / \|u_s^{(p)}(q)\| - \right. \\
&- i \left(q_y \frac{d}{dz} \left(-iqc_1^{(p)} \sum_{s=1}^2 \left(A_{2s-1}^{(p)} e^{\lambda_s^{(p)} z} - A_{2s}^{(p)} e^{-\lambda_s^{(p)} z} \right) / \|u_s^{(p)}(q)\| \right) + \right. \\
&+ \left. q_x \frac{d}{dz} \left(A_2^{(p)} e^{-\chi z} + B_2^{(p)} e^{\chi z} \right) \right\} = \\
&= \left\{ -\sqrt{\rho^{(p)}} q_x q_y \sum_{s=1}^2 \left\{ (\lambda_s^{(p)})^2 + (\chi_1^{(p)})^2 \right\} \left(A_{2s-1}^{(p)} e^{\lambda_s^{(p)} z} + A_{2s}^{(p)} e^{-\lambda_s^{(p)} z} \right) / \|u_s^{(p)}(q)\| - \right. \\
&- q_y q c_1^{(p)} \sum_{s=1}^2 \lambda_s^{(p)} \left(A_{2s-1}^{(p)} e^{\lambda_s^{(p)} z} + A_{2s}^{(p)} e^{-\lambda_s^{(p)} z} \right) / \|u_s^{(p)}(q)\| + \\
&+ \left. iq_x \chi \left(A_2^{(p)} e^{-\chi z} - B_2^{(p)} e^{\chi z} \right) \right\} =
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{\sqrt{\rho^{(p)}} q_y}{\|u_s^{(p)}(q)\|} \sum_{s=1}^2 \left[q c_1^{(p)} \lambda_s^{(p)} + q_x \left\{ (\lambda_s^{(p)})^2 + (\chi_1^{(p)})^2 \right\} \right] \left(A_{2s-1}^{(p)} e^{\lambda_s^{(p)} z} + A_{2s}^{(p)} e^{-\lambda_s^{(p)} z} \right) + \\
&+ i q_x \chi \left(A_2^{(p)} e^{-\chi z} - B_2^{(p)} e^{\chi z} \right)
\end{aligned} \tag{7.45}$$

Для визначення коефіцієнтів $A^{(p)}, B^{(p)}$ використовуються граничні умови для потенціалів $\phi_{pz}^{ZB}(z)$ та величин електричного зміщення $D_{pz}^{ZB}(z) = \varepsilon_0 \varepsilon(z) d \phi_{pz}^{ZB}(z) / dz$:

$$\begin{cases} \phi_{pz}^{ZB(p)}(z) \Big|_{z \rightarrow z_p - 0} = \phi_{pz}^{ZB(p+1)}(z) \Big|_{z \rightarrow z_p + 0}, \\ \varepsilon(z) d \phi_{pz}^{ZB(p)}(z) / dz \Big|_{z \rightarrow z_p + 0} = \varepsilon(z) d \phi_{pz}^{ZB(p+1)}(z) / dz \Big|_{z \rightarrow z_p + 0}. \end{cases} \tag{7.46}$$

Таким чином, як видно з (7.45) п'єзоелектричний потенціал складається з дійсної та уявної частин. Їхній вплив на електронно-діркові стани встановлюється далі.

Розраховуючи також деформаційний потенціал для усієї валентної зони, ми отримуємо:

$$\begin{aligned}
\phi_{def}^{ZB}(q, \omega_q, \vec{r}, t) &= \Delta E_C^{ZB}(\vec{r}, t) = a_C^{ZB} [\varepsilon_{11}(\vec{r}, t) + \varepsilon_{22}(\vec{r}, t) + \varepsilon_{33}(\vec{r}, t)] = \\
&= a_C^{ZB} \left[\frac{\partial u_1(\vec{r}, t)}{\partial x} + \frac{\partial u_2(\vec{r}, t)}{\partial y} + \frac{\partial u_3(\vec{r}, t)}{\partial z} \right] = \\
&= a_C^{ZB} \sqrt{\frac{\hbar}{2S_{\perp} \omega_{nq}}} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(-i q c_1^{(p)} \sum_{s=1}^2 \left(A_{2s-1}^{(p)} e^{\lambda_s^{(p)} z} - A_{2s}^{(p)} e^{-\lambda_s^{(p)} z} \right) / \|u_s^{(p)}(q)\| \right) + \right. \\
&+ q_y \left(A_2^{(p)} e^{-\chi z} + B_2^{(p)} e^{\chi z} \right) + \\
&+ \left. \frac{\partial}{\partial z} \left(-\sum_{s=1}^2 \left\{ (\lambda_s^{(p)})^2 + (\chi_1^{(p)})^2 \right\} \left(A_{2s-1}^{(p)} e^{\lambda_s^{(p)} z} + A_{2s}^{(p)} e^{-\lambda_s^{(p)} z} \right) / \|u_s^{(p)}(q)\| \right) \right] e^{i(\vec{q} \cdot \vec{r} - \omega t)} = \\
&= a_C^{ZB} \sqrt{\frac{\hbar}{2S_{\perp} \omega_{nq}}} \left[q q_x c_1^{(p)} \sum_{s=1}^2 \left(A_{2s-1}^{(p)} e^{\lambda_s^{(p)} z} - A_{2s}^{(p)} e^{-\lambda_s^{(p)} z} \right) / \|u_s^{(p)}(q)\| + q_y \left(A_2^{(p)} e^{-\chi z} + B_2^{(p)} e^{\chi z} \right) \right. \\
&+ \left. \sum_{s=1}^2 \lambda_s^{(p)} \left\{ (\lambda_s^{(p)})^2 + (\chi_1^{(p)})^2 \right\} \left(A_{2s-1}^{(p)} e^{\lambda_s^{(p)} z} + A_{2s}^{(p)} e^{-\lambda_s^{(p)} z} \right) / \|u_s^{(p)}(q)\| \right] e^{i(\vec{q} \cdot \vec{r} - \omega t)} = \\
&= \left\{ \frac{a_C^{ZB}}{\|u_s^{(p)}(q)\|} \sqrt{\frac{\hbar}{2S_{\perp} \omega_{nq}}} \sum_{s=1}^2 \left[q q_x c_1^{(p)} + \lambda_s^{(p)} \left\{ (\lambda_s^{(p)})^2 + (\chi_1^{(p)})^2 \right\} \right] \left(A_{2s-1}^{(p)} e^{\lambda_s^{(p)} z} + A_{2s}^{(p)} e^{-\lambda_s^{(p)} z} \right) \right. \\
&+ \left. a_C^{ZB} q_y \left(A_2^{(p)} e^{-\chi z} + B_2^{(p)} e^{\chi z} \right) \right\} e^{i(\vec{q} \cdot \vec{r} - \omega t)} = \sum_{nq} \phi_{pz}^{ZB}(q, \omega_{nq}, z) e^{i(\vec{q} \cdot \vec{r} - \omega_{nq} t)}.
\end{aligned} \tag{7.47}$$

де a_C^{ZB} - постійна деформаційного потенціалу для валентної зони.

Отже, гамільтоніани, що описують взаємодію з фононами через п'єзоелектричний та деформаційний потенціали у випадку решітки типу цинкової обманки такі:

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{pz}^{ZB} &= \sum_{q n_1} \sum_{p=1}^N \sum_{s=1}^2 \left[A^{(p)} e^{qz} + B^{(p)} e^{-qz} - \frac{e_{14}^{(p)}}{\varepsilon_0 \varepsilon^{(p)} q} \sqrt{\frac{2\hbar}{S_{\perp} \rho^{(p)} \omega_{n_1 q}}} \times \right. \\
&\times \left. \left\{ e^{qz} \int_0^z e^{-q\xi} \Phi_s^{(p)}(q, \xi) d\xi - e^{-qz} \int_0^z e^{q\xi} \Phi_s^{(p)}(q, \xi) d\xi \right\} \right] \times \\
&\times \left[\hat{b}_{n_1}^+(-\vec{q}) + \hat{b}_{n_1}(\vec{q}) \right] e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_i} \left[\theta(z_p - z_{p-1}) - \theta(z_p - z_{p+1}) \right]; \\
\hat{H}_{def}^{ZB} &= a_C^{ZB} \sum_{q n_1} \sum_{p=1}^N \sum_{s=1}^2 \sqrt{\frac{\hbar}{2 \|u_s^{(p)}(q)\|^2 S_{\perp} \omega_{n_1 q}}} \left[qq_x c_1^{(p)} + \lambda_s^{(p)} \left\{ (\lambda_s^{(p)})^2 + (\chi_1^{(p)})^2 \right\} \right] \left(A_{2s-1}^{(p)} e^{\lambda_s^{(p)} z} + A_{2s}^{(p)} e^{-\lambda_s^{(p)} z} \right) \\
&+ q_y \left(A_2^{(p)} e^{-\chi z} + B_2^{(p)} e^{\chi z} \right) \left[\hat{b}_{n_1}^+(-\vec{q}) + \hat{b}_{n_1}(\vec{q}) \right] e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_i} \left[\theta(z - z_p) - \theta(z - z_{p+1}) \right]
\end{aligned} \tag{7.48}$$

Для наносистем з кристалічною решіткою вюрциту теорія акустичних фононів є розвиненою в Розділі 4. Ми використаємо свої попередні результати для розрахунку п'єзоелектричного та деформаційного потенціалів для валентної зони. З врахуванням виду тензора пружних констант, рівняння для фононних мод отримуються із рівнянь (7.32) шляхом заміни: $C_{12}^{(p)} \rightarrow C_{13}^{(p)}$; $C_{44}^{(p)} \rightarrow C_{66}^{(p)}$; $C_{11}^{(p)} \rightarrow C_{33}^{(p)}$. Крім того в рівнянні

$$(7.33) \text{ має бути } \left(q^2 - \frac{\rho^{(p)} \omega^2}{C_{44}^{(p)}} \right) \rightarrow \left(q^2 \frac{C_{66}^{(p)}}{C_{44}^{(p)}} - \frac{\rho^{(p)} \omega^2}{C_{44}^{(p)}} \right). \text{ Тоді для досліджуваної}$$

наносистеми розв'язки рівнянь (7.32) можна подати у вигляді, схожому до (7.34):

$$\begin{aligned}
\tilde{u}_1^{(p)}(z) &= -iq c_1^{(p)} \sum_{s=1}^2 \left(\tilde{A}_{2s-1}^{(p)} e^{\lambda_s^{(p)} z} - \tilde{A}_{2s}^{(p)} e^{-\lambda_s^{(p)} z} \right) / \|u_s^{(p)}(q)\|; \\
\tilde{u}_3^{(p)}(z) &= - \sum_{s=1}^2 \left\{ (\lambda_s^{(p)})^2 + (\chi_1^{(p)})^2 \right\} \left(\tilde{A}_{2s-1}^{(p)} e^{\lambda_s^{(p)} z} + \tilde{A}_{2s}^{(p)} e^{-\lambda_s^{(p)} z} \right) / \|u_s^{(p)}(q)\| \\
\|\tilde{u}_s^{(p)}(q)\| &= \sqrt{\left| qc_1^{(p)} \lambda_s^{(p)} \right|^2 + \left| (\lambda_s^{(p)})^2 + (\chi_1^{(p)})^2 \right|^2} \\
\tilde{u}_2^{(p)}(z) &= \tilde{A}_2^{(p)} e^{-\tilde{\chi} z} + \tilde{B}_2^{(p)} e^{\tilde{\chi} z}, \quad \tilde{\chi} = \sqrt{q^2 \frac{C_{66}^{(p)}}{C_{44}^{(p)}} - \frac{\rho^{(p)} \omega^2}{C_{44}^{(p)}}}.
\end{aligned} \tag{7.49}$$

Тепер п'єзоелектрична поляризація з урахуванням нотації Вейгта буде визначатися так:

$$P_{pz}^{WZ} = e_{klm} \varepsilon_{lm} = e_{ij}^{WZ}(z) (\varepsilon_{11} \varepsilon_{22} \varepsilon_{33} 2\varepsilon_{23} 2\varepsilon_{13} 2\varepsilon_{12})^T = \begin{bmatrix} 2e_{15}(z) \varepsilon_{13} \\ 2e_{15}(z) \varepsilon_{23} \\ e_{31}(z) (\varepsilon_{11} + \varepsilon_{22}) + e_{33}(z) \varepsilon_{33} \end{bmatrix}, \varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ij}(\vec{r}, t) \quad (7.50)$$

Використовуючи тепер рівняння (7.37) у рівнянні (7.39), враховуючи рівняння (4.49) і (7.50) обчислюємо:

$$-\varepsilon_0 \nabla \left[\varepsilon(z) \nabla \phi_{pz}^{WZ}(\vec{r}, t) \right] + \nabla \left[2e_{15}(z) \varepsilon_{13} 2e_{15}(z) \varepsilon_{23} e_{31}(z) (\varepsilon_{11} + \varepsilon_{22}) + e_{33}(z) \varepsilon_{33} \right]^T = 0, \quad (7.51)$$

врахування того, що $\phi_{pz}^{WZ}(\vec{r}, t) = \phi_{pz}^{WZ}(z) e^{i(\vec{q} \cdot \vec{r} - \omega t)}$ у рівнянні (7.51) для окремого шару наносистеми дає:

$$\begin{aligned} & -\varepsilon_0 \varepsilon^{(p)} \nabla^2 \phi_{pz}^{WZ}(\vec{r}, t) + 2e_{15}^{(p)} \left[\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u_1}{\partial z} + \frac{\partial u_3}{\partial x} \right) \right] + 2e_{15}^{(p)} \left[\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial u_2}{\partial z} + \frac{\partial u_3}{\partial y} \right) \right] + \\ & + e_{31}^{(p)} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial u_1}{\partial x} + \frac{\partial u_2}{\partial y} \right) + e_{31}^{(p)} \frac{\partial}{\partial z} \frac{\partial u_3}{\partial z} = 0; \\ & -\varepsilon_0 \varepsilon^{(p)} \nabla^2 \phi_{pz}^{WZ}(\vec{r}, t) + e_{15}^{(p)} \left(\frac{\partial^2 u_1}{\partial x \partial z} + \frac{\partial^2 u_3}{\partial x^2} \right) + e_{15}^{(p)} \left(\frac{\partial^2 u_2}{\partial y \partial z} + \frac{\partial^2 u_3}{\partial y^2} \right) + \\ & + e_{31}^{(p)} \frac{\partial^2 u_1}{\partial x \partial z} + e_{31}^{(p)} \frac{\partial^2 u_2}{\partial y \partial z} + e_{31}^{(p)} \frac{\partial^2 u_3}{\partial z^2} = 0; \\ & -\varepsilon_0 \varepsilon^{(p)} \nabla^2 \phi_{pz}^{WZ}(\vec{r}, t) + (e_{15}^{(p)} + e_{31}^{(p)}) \left(\frac{\partial^2 u_1}{\partial x \partial z} + \frac{\partial^2 u_2}{\partial y \partial z} \right) + e_{15}^{(p)} \left(\frac{\partial^2 u_3}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_3}{\partial y^2} \right) + e_{31}^{(p)} \frac{\partial^2 u_3}{\partial z^2} = 0. \end{aligned} \quad (7.52)$$

Після підстановки (7.43) отримується рівняння для складової $\phi_{pz}^{WZ}(z) = \phi_{pz}^{WZ}(q, \omega_q, z)$:

$$\begin{aligned} & \frac{d^2 \phi_{pz}^{WZ}(z)}{dz^2} - q^2 \phi_{pz}^{WZ}(z) - \frac{1}{\varepsilon_0 \varepsilon^{(p)}} \sqrt{\frac{\hbar}{2S_{\perp} \rho^{(p)} \omega_{nq}}} \times \\ & \times \left[i (e_{15}^{(p)} + e_{31}^{(p)}) \left(q_x \frac{dw_1^{(p)}(z)}{dz} + q_y \frac{dw_2^{(p)}(z)}{dz} \right) + e_{15}^{(p)} q^2 w_3^{(p)}(z) - e_{31}^{(p)} \frac{d^2 w_3^{(p)}(z)}{dz^2} \right] = 0. \end{aligned} \quad (7.53)$$

Розв'язки рівняння (7.53) мають такий вигляд:

$$\begin{aligned}
\phi_{pz}^{WZ}(z) &= \tilde{A}^{(p)} e^{qz} + \tilde{B}^{(p)} e^{-qz} - \frac{1}{\varepsilon_0 \varepsilon^{(p)}} \sqrt{\frac{\hbar}{2S_{\perp} \rho^{(p)} \omega_{nq}}} \times \\
&\times \left\{ e^{qz} \int_0^z e^{-q\xi} \tilde{\Phi}_s^{(p)}(q, \xi) d\xi - e^{-qz} \int_0^z e^{q\xi} \tilde{\Phi}_s^{(p)}(q, \xi) d\xi \right\}; \\
\tilde{\Phi}_s^{(p)}(q, \xi) &= i(e_{15}^{(p)} + e_{31}^{(p)}) \left(q_x \frac{d\tilde{u}_1^{(p)}(z)}{dz} + q_y \frac{d\tilde{u}_2^{(p)}(z)}{dz} \right) + e_{15}^{(p)} q^2 \tilde{u}_3^{(p)}(z) - e_{31}^{(p)} \frac{d^2 \tilde{u}_3^{(p)}(z)}{dz^2} = \\
&= \sqrt{\rho^{(p)}} \left\{ i(e_{15}^{(p)} + e_{31}^{(p)}) \left(q_x \frac{d}{dz} \left(-iqc_1^{(p)} \sum_{s=1}^2 \left(\tilde{A}_{2s-1}^{(p)} e^{\lambda_s^{(p)} z} - \tilde{A}_{2s}^{(p)} e^{-\lambda_s^{(p)} z} \right) / \|u_s^{(p)}(q)\| \right) \right) + \right. \\
&+ q_y \frac{d}{dz} \left(\tilde{A}_2^{(p)} e^{-\tilde{\chi}z} + \tilde{B}_2^{(p)} e^{\tilde{\chi}z} \right) - \\
&- e_{15}^{(p)} q^2 \sum_{s=1}^2 \left\{ (\lambda_s^{(p)})^2 + (\chi_1^{(p)})^2 \right\} \left(\tilde{A}_{2s-1}^{(p)} e^{\lambda_s^{(p)} z} + \tilde{A}_{2s}^{(p)} e^{-\lambda_s^{(p)} z} \right) / \|u_s^{(p)}(q)\| - \\
&- e_{31}^{(p)} \frac{d^2}{dz^2} \left(-\sum_{s=1}^2 \left\{ (\lambda_s^{(p)})^2 + (\chi_1^{(p)})^2 \right\} \left(\tilde{A}_{2s-1}^{(p)} e^{\lambda_s^{(p)} z} + \tilde{A}_{2s}^{(p)} e^{-\lambda_s^{(p)} z} \right) / \|u_s^{(p)}(q)\| \right) \left. \right\} = \\
&= \sqrt{\rho^{(p)}} \left\{ -i(e_{15}^{(p)} + e_{31}^{(p)}) \left(iqc_1^{(p)} q_x \lambda_s^{(p)} \sum_{s=1}^2 \left(\tilde{A}_{2s-1}^{(p)} e^{\lambda_s^{(p)} z} + \tilde{A}_{2s}^{(p)} e^{-\lambda_s^{(p)} z} \right) / \|u_s^{(p)}(q)\| + \right. \right. \\
&+ q_y \tilde{\chi} \left(-\tilde{A}_2^{(p)} e^{-\tilde{\chi}z} + \tilde{B}_2^{(p)} e^{\tilde{\chi}z} \right) - e_{15}^{(p)} q^2 \sum_{s=1}^2 \left\{ (\lambda_s^{(p)})^2 + (\chi_1^{(p)})^2 \right\} \left(\tilde{A}_{2s-1}^{(p)} e^{\lambda_s^{(p)} z} + \tilde{A}_{2s}^{(p)} e^{-\lambda_s^{(p)} z} \right) / \|u_s^{(p)}(q)\| - \\
&- e_{31}^{(p)} \sum_{s=1}^2 (\lambda_s^{(p)})^2 \left\{ (\lambda_s^{(p)})^2 + (\chi_1^{(p)})^2 \right\} \left(\tilde{A}_{2s-1}^{(p)} e^{\lambda_s^{(p)} z} + \tilde{A}_{2s}^{(p)} e^{-\lambda_s^{(p)} z} \right) / \|u_s^{(p)}(q)\| \left. \right\} = \\
&= \sqrt{\rho^{(p)}} \left\{ (e_{15}^{(p)} + e_{31}^{(p)}) qc_1^{(p)} q_x \lambda_s^{(p)} \sum_{s=1}^2 \left(\tilde{A}_{2s-1}^{(p)} e^{\lambda_s^{(p)} z} + \tilde{A}_{2s}^{(p)} e^{-\lambda_s^{(p)} z} \right) / \|u_s^{(p)}(q)\| + \right. \\
&+ i(e_{15}^{(p)} + e_{31}^{(p)}) q_y \tilde{\chi} \left(\tilde{A}_2^{(p)} e^{-\tilde{\chi}z} - \tilde{B}_2^{(p)} e^{\tilde{\chi}z} \right) - \\
&- e_{15}^{(p)} q^2 \sum_{s=1}^2 \left\{ (\lambda_s^{(p)})^2 + (\chi_1^{(p)})^2 \right\} \left(\tilde{A}_{2s-1}^{(p)} e^{\lambda_s^{(p)} z} + \tilde{A}_{2s}^{(p)} e^{-\lambda_s^{(p)} z} \right) / \|u_s^{(p)}(q)\| - \\
&- e_{31}^{(p)} \sum_{s=1}^2 (\lambda_s^{(p)})^2 \left\{ (\lambda_s^{(p)})^2 + (\chi_1^{(p)})^2 \right\} \left(\tilde{A}_{2s-1}^{(p)} e^{\lambda_s^{(p)} z} + \tilde{A}_{2s}^{(p)} e^{-\lambda_s^{(p)} z} \right) / \|u_s^{(p)}(q)\| \left. \right\} =
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sqrt{\rho^{(p)}} \left\{ i \left(e_{15}^{(p)} + e_{31}^{(p)} \right) q_y \tilde{\chi} \left(\tilde{A}_2^{(p)} e^{-\tilde{\chi}z} - \tilde{B}_2^{(p)} e^{\tilde{\chi}z} \right) + \right. \\
&+ \sum_{s=1}^2 \left\{ \left(e_{15}^{(p)} + e_{31}^{(p)} \right) q c_1^{(p)} q_x \lambda_s^{(p)} - e_{15}^{(p)} q^2 \left\{ \left(\lambda_s^{(p)} \right)^2 + \left(\chi_1^{(p)} \right)^2 \right\} - e_{31}^{(p)} \left(\lambda_s^{(p)} \right)^2 \left\{ \left(\lambda_s^{(p)} \right)^2 + \left(\chi_1^{(p)} \right)^2 \right\} \right\} = \\
&\times \left(\tilde{A}_{2s-1}^{(p)} e^{\lambda_s^{(p)}z} + \tilde{A}_{2s}^{(p)} e^{-\lambda_s^{(p)}z} \right) / \| u_s^{(p)}(q) \| = \\
&= \sqrt{\rho^{(p)}} \left\{ i \left(e_{15}^{(p)} + e_{31}^{(p)} \right) q_y \tilde{\chi} \left(\tilde{A}_2^{(p)} e^{-\tilde{\chi}z} - \tilde{B}_2^{(p)} e^{\tilde{\chi}z} \right) + \right. \\
&+ \sum_{s=1}^2 \left\{ \left(e_{15}^{(p)} + e_{31}^{(p)} \right) q c_1^{(p)} q_x \lambda_s^{(p)} - \left[e_{15}^{(p)} q^2 + e_{31}^{(p)} \left(\lambda_s^{(p)} \right)^2 \right] \left[\left(\lambda_s^{(p)} \right)^2 + \left(\chi_1^{(p)} \right)^2 \right] \right\} \times \\
&\times \left(\tilde{A}_{2s-1}^{(p)} e^{\lambda_s^{(p)}z} + \tilde{A}_{2s}^{(p)} e^{-\lambda_s^{(p)}z} \right) / \| u_s^{(p)}(q) \|.
\end{aligned} \tag{7.54}$$

Для деформаційного потенціалу ми отримуємо в нашому випадку такий вираз:

$$\begin{aligned}
\phi_{pz}^{WZ}(q, \omega_q, \vec{r}, t) &= \Delta E_C^{WZ}(\vec{r}, t) = (a_{1C} - D_1) \varepsilon_{33}(\vec{r}, t) + (a_{2C} - D_2) (\varepsilon_{11}(\vec{r}, t) + \varepsilon_{22}(\vec{r}, t)) = \\
&= (a_{1C} - D_1) \frac{\partial u_3(\vec{r}, t)}{\partial z} + (a_{2C} - D_2) \left(\frac{\partial u_1(\vec{r}, t)}{\partial x} + \frac{\partial u_2(\vec{r}, t)}{\partial y} \right) = \\
&= \sqrt{\frac{\hbar}{2S_{\perp} \omega_{nq}}} \left\{ (a_{1C} - D_1) \frac{\partial}{\partial z} \left[- \sum_{s=1}^2 \left\{ \left(\lambda_s^{(p)} \right)^2 + \left(\chi_1^{(p)} \right)^2 \right\} \left(\tilde{A}_{2s-1}^{(p)} e^{\lambda_s^{(p)}z} + \tilde{A}_{2s}^{(p)} e^{-\lambda_s^{(p)}z} \right) / \| u_s^{(p)}(q) \| \right] + \right. \\
&+ (a_{2C} - D_2) \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(- i q c_1^{(p)} \sum_{s=1}^2 \left(\tilde{A}_{2s-1}^{(p)} e^{\lambda_s^{(p)}z} - \tilde{A}_{2s}^{(p)} e^{-\lambda_s^{(p)}z} \right) / \| u_s^{(p)}(q) \| \right) + q_y \left(\tilde{A}_2^{(p)} e^{-\tilde{\chi}z} + \tilde{B}_2^{(p)} e^{\tilde{\chi}z} \right) \right] \right\} \times \\
&\times e^{i(\vec{q} \cdot \vec{r} - \omega t)} = \\
&= \sqrt{\frac{\hbar}{2S_{\perp} \omega_{nq}}} \left\{ - (a_{1C} - D_1) \sum_{s=1}^2 \lambda_s^{(p)} \left\{ \left(\lambda_s^{(p)} \right)^2 + \left(\chi_1^{(p)} \right)^2 \right\} \left(\tilde{A}_{2s-1}^{(p)} e^{\lambda_s^{(p)}z} - \tilde{A}_{2s}^{(p)} e^{-\lambda_s^{(p)}z} \right) / \| u_s^{(p)}(q) \| + \right. \\
&+ (a_{2C} - D_2) q_y \left(\tilde{A}_2^{(p)} e^{-\tilde{\chi}z} + \tilde{B}_2^{(p)} e^{\tilde{\chi}z} \right) + (a_{2C} - D_2) q q_x c_1^{(p)} \sum_{s=1}^2 \left(\tilde{A}_{2s-1}^{(p)} e^{\lambda_s^{(p)}z} - \tilde{A}_{2s}^{(p)} e^{-\lambda_s^{(p)}z} \right) / \| u_s^{(p)}(q) \| \right\} \times \\
&\times e^{i(\vec{q} \cdot \vec{r} - \omega t)} = \\
&= \sqrt{\frac{\hbar}{2S_{\perp} \omega_{nq}}} \left\{ \sum_{s=1}^2 \left[(a_{2C} - D_2) q q_x c_1^{(p)} - (a_{1C} - D_1) \lambda_s^{(p)} \left\{ \left(\lambda_s^{(p)} \right)^2 + \left(\chi_1^{(p)} \right)^2 \right\} \right] \times \right. \\
&\times \left(\tilde{A}_{2s-1}^{(p)} e^{\lambda_s^{(p)}z} - \tilde{A}_{2s}^{(p)} e^{-\lambda_s^{(p)}z} \right) / \| u_s^{(p)}(q) \| + \\
&+ q_y \left(\tilde{A}_2^{(p)} e^{-\tilde{\chi}z} + \tilde{B}_2^{(p)} e^{\tilde{\chi}z} \right) \left. \right\} e^{i(\vec{q} \cdot \vec{r} - \omega t)} = \sum_{nq} \phi_{pz}^{WZ}(q, \omega_{nq}, z) e^{i(\vec{q} \cdot \vec{r} - \omega_{nq} t)}.
\end{aligned} \tag{7.55}$$

де a_{1c}, a_{2c}, D_1, D_2 - константи зв'язку деформаційного потенціалу для валентної зони.

Отже, гамільтоніани, що описують взаємодію з фононами через деформаційний та п'єзоелектричний потенціали у випадку решітки типу вюрциту такі:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{pz}^{WZ} &= \sum_{qn_1} \sum_{p=1}^N \sum_{s=1}^2 \left(\tilde{A}^{(p)} e^{qz} + \tilde{B}^{(p)} e^{-qz} - \frac{1}{\varepsilon_0 \varepsilon^{(p)}} \sqrt{\frac{\hbar}{2S_{\perp} \rho^{(p)} \omega_{n_1 q}}} \times \right. \\ &\times \left. \left\{ e^{qz} \int_0^z e^{-q\xi} \tilde{\Phi}_s^{(p)}(q, \xi) d\xi - e^{-qz} \int_0^z e^{q\xi} \tilde{\Phi}_s^{(p)}(q, \xi) d\xi \right\} \right) \times \\ &\times \left[\hat{b}_{n_1}^+(-\vec{q}) + \hat{b}_{n_1}(\vec{q}) \right] e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_{\parallel}} \left[\theta(z - z_p) - \theta(z - z_{p+1}) \right]; \\ \hat{H}_{def}^{WZ} &= \sum_{qn_1} \sum_{p=1}^N \sum_{s=1}^2 \sqrt{\frac{\hbar}{2 \|u_s^{(p)}(q)\|^2 S_{\perp} \omega_{n_1 q}}} \left\{ \left[(a_{2c} - D_2) q q_x c_1^{(p)} - (a_{1c} - D_1) \lambda_s^{(p)} \left\{ (\lambda_s^{(p)})^2 + (\chi_1^{(p)})^2 \right\} \right] \times \right. \\ &\times \left. \left(\tilde{A}_{2s-1}^{(p)} e^{\lambda_s^{(p)} z} - \tilde{A}_{2s}^{(p)} e^{-\lambda_s^{(p)} z} \right) + q_y \left(\tilde{A}_2^{(p)} e^{-\tilde{\chi} z} + \tilde{B}_2^{(p)} e^{\tilde{\chi} z} \right) \right\} \left[\hat{b}_{n_1}^+(-\vec{q}) + \hat{b}_{n_1}(\vec{q}) \right] e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_{\parallel}} \left[\theta(z - z_p) - \theta(z - z_{p+1}) \right], \end{aligned} \quad (7.56)$$

де коефіцієнти $\tilde{A}^{(p)}, \tilde{B}^{(p)}$ знаходяться з умов, що аналогічні умовам (7.35).

7.3. Гамільтоніан екситон-фононої системи. Перенормування спектру екситона взаємодією з акустичними фононами. Скорельована ефективна маса екситона

Ми почнемо з того, що використовуючи бозонні оператори $\hat{b}_{n_1}^+$ і \hat{b}_{n_1} подамо гамільтоніан фононів у вигляді:

$$\hat{H}_{ph}^{ac} = \sum_{n_1 q} \hbar \omega_{n_1 q} \left(\hat{b}_{n_1 q}^+(\vec{q}) \hat{b}_{n_1 q}(\vec{q}) + \frac{1}{2} \right); \quad \left[\hat{b}_{n_1 q}^+(\vec{q}), \hat{b}_{n_1 q'}(\vec{q}) \right] = \delta_{n_1 n_1'} \delta_{qq'}. \quad (7.57)$$

Далі ми дослідимо перенормовані положення основного та збуджених електронних станів, часів життя екситона у цих станах, а також вплив фононів на ефективну масу екситона. Будемо вважати, що система має слабкий екситон-фононний зв'язок, а також приймемо до відома, що екситонна зона є відділеною від інших зон таким чином, що їхній вплив є таким, що ним можна знехтувати.

Для того, щоб отримати гамільтоніан, який описує взаємодію екситонів з акустичними фононами, то в такому випадку будемо вважати, що електрон та дірка

взаємодіють незалежно з акустичними фононами через механізми як деформаційного та і п'єзоелектричних потенціалів, що встановлені вище. Це приводить до таких гамільтоніанів, що описують таку взаємодію:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{ex-ph}^{def(pz)} &= \int dr_e dr_h \hat{\Psi}^+(\rho, r_e, r_h) \left(\hat{H}_{e-ph}^{def(pz)} + \hat{H}_{h-ph}^{def(pz)} \right) \hat{\Psi}(\rho, r_e, r_h) = \\ &= \sum_{\vec{k}\vec{k}_e\vec{k}_h q n_1} F_{\vec{k}\vec{k}_e\vec{k}_h q n_1}^{def(pz)}(q) \hat{a}_{\vec{k}+\vec{q}\vec{k}_e\vec{k}_h}^+ \hat{a}_{\vec{k}\vec{k}_e\vec{k}_h} \left[\hat{b}_{n_1}^+(-\vec{q}) + \hat{b}_{n_1}(\vec{q}) \right] \end{aligned} \quad (7.58)$$

де відповідні функції зв'язку обчислюються відповідно до співвідношень (7.45), (7.47), (7.48), (7.54), (7.55), (7.56):

$$\begin{aligned} F_{\vec{k}\vec{k}_e\vec{k}_h q n_1}^{def(pz)}(q) &= \sum_{p=1}^N \left[\iint |\Phi^{(p)}(\rho)|^2 d\rho^2 \int_{z_{p-1}}^{z_p} \Psi^{(e)}(E_{\vec{k}\vec{k}_e}, z_e) \left(\Psi^{(e)}(E_{\vec{k}\vec{k}_e}, z_e) \right)^* dz_e \right. \\ &\times \left. \int_{z_{p-1}}^{z_p} \Psi^{(h)}(E_{\vec{k}\vec{k}_h}, z_h) \phi_{def(pz)}^{ZB(WZ)}(q, \omega_{n_1 q}, z_h) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_h} \left(\Psi^{(h)}(E_{\vec{k}\vec{k}_h}, z_h) dz_h \right)^* \right] \left[\theta(z - z_p) - \theta(z - z_{p+1}) \right]; \quad (7.59) \\ z_0 &= 0; z_N = +\infty. \end{aligned}$$

Отже, повний гамільтоніан системи екситона Ван'є-Мотта з акустичними фононами є таким:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{H}_{ex} + \hat{H}_{ph}^{ac} + \hat{H}_{ex-ph}^{def} + \hat{H}_{ex-ph}^{pz} = \\ &= \sum_{\vec{k}\vec{k}_e\vec{k}_h} E_{\vec{k}\vec{k}_e\vec{k}_h}(\vec{k}_e, \vec{k}_h) \hat{a}_{\vec{k}\vec{k}_e\vec{k}_h}^+ \hat{a}_{\vec{k}\vec{k}_e\vec{k}_h} + \sum_{n_1 q} \hbar \omega_{n_1 q} \left(\hat{b}_{q n_1}^+(\vec{q}) \hat{b}_{q n_1}(\vec{q}) + \frac{1}{2} \right) + \\ &+ \sum_{\vec{k}\vec{k}_e\vec{k}_h q n_1} \left[F_{\vec{k}\vec{k}_e\vec{k}_h q n_1}^{def}(q) + F_{\vec{k}\vec{k}_e\vec{k}_h q n_1}^{pz}(q) \right] \hat{a}_{\vec{k}+\vec{q}\vec{k}_e\vec{k}_h}^+ \hat{a}_{\vec{k}\vec{k}_e\vec{k}_h} \left[\hat{b}_{n_1}^+(-\vec{q}) + \hat{b}_{n_1}(\vec{q}) \right]. \end{aligned} \quad (7.60)$$

Скористаємося тепер загальною температурною функцією Гріна, що визначається таким чином:

$$G_{nm}(\vec{k}, \omega') = \left\{ \hbar \omega' - \tilde{E}_{\vec{k}\vec{k}_e\vec{k}_h}(\vec{k}_e, \vec{k}_h) - M(k, \omega') \right\}^{-1}, \omega' = \omega + i\eta, \eta \rightarrow 0, \quad (7.61)$$

де n і m – номери рівнів дискретного спектру електрона та дірки у стаціонарних станах $|n\rangle$ і $|m\rangle$ відповідно, а масовий оператор, що враховує внесок від однофоновного процесу є таким:

$$\begin{aligned}
M(k, \omega') &= \sum_{q_{n_1}} \left\{ \frac{1 + \nu_{n_1}(q)}{\hbar\omega' - \tilde{E}_{\vec{k}-\vec{q}, \vec{k}_e, \vec{k}_h}(\vec{k}_e, \vec{k}_h) - \Omega_{n_1}(q)} + \frac{\nu_{n_1}(q)}{\hbar\omega' - \tilde{E}_{\vec{k}+\vec{q}, \vec{k}_e, \vec{k}_h}(\vec{k}_e, \vec{k}_h) + \Omega_{n_1}(q)} \right\} = \\
&= \sum_{q_{n_1}} F_{n_1 k n'}^{\text{def (pz)}}(q) \left[F_{n k n_1}^{\text{def (pz)}}(q) \right]^* \left\{ \frac{1 + \nu_{n_1}(q)}{\hbar\omega' - E_{\vec{k}\vec{k}_e, \vec{k}_h}(\vec{k}_e, \vec{k}_h) - \hbar^2(\vec{k} - \vec{q})^2 / 2\mu(z_e, z_h) - \Omega_{n_1}(q)} + \right. \\
&\quad \left. + \frac{\nu_{n_1}(q)}{\hbar\omega' - E_{\vec{k}\vec{k}_e, \vec{k}_h}(\vec{k}_e, \vec{k}_h) - \hbar^2(\vec{k} + \vec{q})^2 / 2\mu(z_e, z_h) + \Omega_{n_1}(q)} \right\}. \tag{7.62}
\end{aligned}$$

Величина $\nu_{n_1}(q) = \left\{ \exp(\Omega_{n_1}(q)/k_B T) - 1 \right\}^{-1}$ це середнє значенням числа заповнення акустичних фононів у стані з числом n_1 .

Величини $F_{n k n_1'}^{\text{def (pz)}}(q)$, які входять у вираз для масового оператора розраховані згідно (7.62) для випадку кристалічної ґратки типу цинкової обманки такі:

$$\begin{aligned}
F_{n_1 p s}^{\text{def}}(q) &= a_C^{ZB} \sqrt{\frac{\hbar}{2 \|u_s^{(p)}(q)\|^2 S_{\perp} \omega_{n_1 q}}} \times \\
&\times \left[\iint |\Phi^{(p)}(\rho)|^2 d\rho^2 \int_{z_{p-1}}^{z_p} \Psi^{(e)}(E_{\vec{k}\vec{k}_e}, z_e) \left(\Psi^{(e)}(E_{\vec{k}\vec{k}_e}, z) \right)^* dz_e \int_{z_{p-1}}^{z_p} \Psi^{(h)}(E_{\vec{k}\vec{k}_h}, z_h) \times \right. \\
&\times \left[q q_x c_1^{(p)} + \lambda_s^{(p)} \left\{ \left(\lambda_s^{(p)} \right)^2 + \left(\chi_1^{(p)} \right)^2 \right\} \left(A_{2s-1}^{(p)} e^{\lambda_s^{(p)} z_h} + A_{2s}^{(p)} e^{-\lambda_s^{(p)} z_h} \right) + q_y \left(A_2^{(p)} e^{-\chi z_h} + B_2^{(p)} e^{\chi z_h} \right) \right] \times \\
&\times e^{i\vec{q} \cdot \vec{\eta}_{\parallel}} \left(\Psi^{(h)}(E_{\vec{k}\vec{k}_h}, z_h) \right)^* dz_h; \\
F_{n_1 p s}^{\text{pz}}(q) &= \iint |\Phi^{(p)}(\rho)|^2 d\rho^2 \int_{z_{p-1}}^{z_p} \Psi^{(e)}(E_{\vec{k}\vec{k}_e}, z_e) \left(\Psi^{(e)}(E_{\vec{k}\vec{k}_e}, z) \right)^* dz_e \times \\
&\times \int_{z_{p-1}}^{z_p} \Psi^{(h)}(E_{\vec{k}\vec{k}_h}, z_h) \left[A^{(p)} e^{q z_h} + B^{(p)} e^{-q z_h} - \right. \\
&\quad \left. - \frac{e_{14}^{(p)}}{\varepsilon_0 \varepsilon^{(p)} q} \sqrt{\frac{2\hbar}{S_{\perp} \rho^{(p)} \omega_{n_1 q}}} \left\{ e^{q z_h} \int_0^{z_h} e^{-q \xi} \Phi_s^{(p)}(q, \xi) d\xi - e^{-q z_h} \int_0^{z_h} e^{q \xi} \Phi_s^{(p)}(q, \xi) d\xi \right\} \right] \times \\
&\times e^{i\vec{q} \cdot \vec{\eta}_{\parallel}} \left(\Psi^{(h)}(E_{\vec{k}\vec{k}_h}, z_h) \right)^* dz_h. \tag{7.63}
\end{aligned}$$

для випадку кристалічної ґратки типу вюрциту:

$$\begin{aligned}
F_{n_1 p s}^{\text{def}}(q) &= \sqrt{\frac{\hbar}{2 \|u_s^{(p)}(q)\|^2 S_{\perp} \omega_{n_1 q}}} \left[\iint |\Phi^{(p)}(\rho)|^2 d\rho^2 \int_{z_{p-1}}^{z_p} \Psi^{(e)}(E_{\vec{k}\vec{k}_e}, z_e) \left(\Psi^{(e)}(E_{\vec{k}\vec{k}_e}, z) \right)^* dz_e \times \right. \\
&\times \int_{z_{p-1}}^{z_p} \Psi^{(h)}(E_{\vec{k}\vec{k}_h}, z_h) \times \left\{ (a_{2C} - D_2) q q_x c_1^{(p)} - (a_{1C} - D_1) \lambda_s^{(p)} \left\{ (\lambda_s^{(p)})^2 + (\lambda_1^{(p)})^2 \right\} \right\} \times \\
&\times \left(\tilde{A}_{2s-1}^{(p)} e^{\lambda_s^{(p)} z_h} - \tilde{A}_{2s}^{(p)} e^{-\lambda_s^{(p)} z_h} \right) + q_y \left(\tilde{A}_2^{(p)} e^{-\tilde{\chi} z} + \tilde{B}_2^{(p)} e^{\tilde{\chi} z} \right) \left. \right\} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_{\parallel}} \left(\Psi^{(h)}(E_{\vec{k}\vec{k}_h}, z_h) \right)^* dz_h; \\
F_{n_1 p s}^{pz}(q) &= \iint |\Phi^{(p)}(\rho)|^2 d\rho^2 \int_{z_{p-1}}^{z_p} \Psi^{(e)}(E_{\vec{k}\vec{k}_e}, z_e) \left(\Psi^{(e)}(E_{\vec{k}\vec{k}_e}, z) \right)^* dz_e \\
&\int_{z_{p-1}}^{z_p} \Psi^{(h)}(E_{\vec{k}\vec{k}_h}, z_h) \left[\tilde{A}^{(p)} e^{qz_h} + \tilde{B}^{(p)} e^{-qz_h} - \frac{1}{\varepsilon_0 \varepsilon^{(p)}} \sqrt{\frac{\hbar}{2 S_{\perp} \rho^{(p)} \omega_{n_1 q}}} \times \right. \\
&\times \left. \left\{ e^{qz_h} \int_0^{z_h} e^{-q\xi} \tilde{\Phi}_s^{(p)}(q, \xi) d\xi - e^{-qz_h} \int_0^{z_h} e^{q\xi} \tilde{\Phi}_s^{(p)}(q, \xi) d\xi \right\} \right] e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_{\parallel}} \left(\Psi^{(h)}(E_{\vec{k}\vec{k}_h}, z_h) \right)^* dz_h. \quad (7.64)
\end{aligned}$$

З використанням масового оператора (7.62) виконується розрахунок температурної залежності екситонних станів, що визначається функцією форми для смуги поглинання світла, що слідує загальній теорії екситонів [201] визначається таким чином:

$$\begin{aligned}
\Im(k, \xi, T) &= \frac{\rho(k, \xi, T)}{2} = - \frac{\text{Im} M(k, \xi)}{\left[\xi - \tilde{E}_{\vec{k}\vec{k}_e \vec{k}_h}(\vec{k}_e, \vec{k}_h) - \text{Re} M(k, \xi) \right]^2 + [\text{Im} M(k, \xi)]^2}; \quad (7.65) \\
\xi &= \hbar \omega.
\end{aligned}$$

Прийmemo до уваги той факт, що при слабкій екситон-фононній взаємодії дискретна частина спектру переформовується. Для цього виконаємо Фур'є-перетворення функції Гріна (7.61) переходячи при цьому від підсумування за хвильовим вектором q до інтегрування за правилом $\sum_q \Rightarrow S_{\perp} / (2\pi)^2 \iint dq^2$ та використовуючи співвідношення Дірака:

$$\iint \frac{d^2 q}{F(q) + i\eta} = \text{P} \iint \frac{d^2 q}{F(q)} - i\pi \iint \delta[F(q)] d^2 q, \quad (7.66)$$

де “ P ” – символ інтеграла, що обчислюється в смислі головного значення. Отримані з дисперсійного рівняння $\hbar\omega' - \tilde{E}_{nm} - M(k, \omega') = 0$ величини зміщення Δ_{nm} та згасання γ_{nm} такі:

$$\begin{aligned} \Delta_{nm} &= \operatorname{Re} M(k, \omega') \Big|_{k=0} = \frac{S_{\perp}}{(2\pi)^2} \sum_{\bar{n}\bar{m}} \sum_{n_1} P \iint \left[v_{n_1}(q) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right] \frac{F_{\bar{k}_e \bar{k}_h q n}^{def(pz)}(q) \left[F_{nq \bar{k}_h \bar{k}_e}^{def(pz)}(q) \right]^*}{E_{nm} - E_{\bar{n}\bar{m}\bar{q}} + \Omega_{n_1}(q)} d^2 \bar{q}; \\ \gamma_{nm} &= -2 \operatorname{Im} M(k, \omega') \Big|_{k=0} = \\ &= \frac{S_{\perp}}{2\pi} \sum_{\bar{n}\bar{m}} \sum_{n_1} P \iint \left[v_{n_1}(q) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right] F_{\bar{k}_e \bar{k}_h q n}^{def(pz)}(q) \left[F_{nq \bar{k}_h \bar{k}_e}^{def(pz)}(q) \right]^* \delta \left[E_{nm} - E_{\bar{n}\bar{m}\bar{q}} + \Omega_{n_1}(q) \right] d^2 \bar{q} \end{aligned} \quad (7.67)$$

Також нашою метою є дослідження впливу температури на ефективну масу екситона у досліджуваній наноструктурі. Як відомо з експериментальних та теоретичних робіт наявність температури не приводить до сильного згасання екситонної смуги, то в такому випадку опис екситона як квазічастинки залишається в силі, крім того ми можемо нехтувати уявною частиною масового оператора (7.62). Розкладемо темпер рівняння, яке отримується з полюса функції Гріна для екситона (7.61) в ряд за квазіімпульсом \vec{k} , зберігаючи при цьому тільки квадратичний доданок:

$$\hbar\omega' - \tilde{E}_{nm} - \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2\mu} - \operatorname{Re} M(k, \omega') \Big|_{k=0} - \frac{\partial^2 M(k, \omega')}{\partial \vec{k}^2} \Big|_{\vec{k}=0} \vec{k}^2 = 0; \quad \mu = \mu(z_e, z_h). \quad (7.68)$$

Отже, перенормована величина ефективної маси екситона така:

$$\tilde{\mu} = \frac{\mu}{1 + \partial^2 M(k, \omega') / \partial \vec{k}^2 \Big|_{\vec{k}=0}}, \quad (7.69)$$

а перенормований закон дисперсії екситонів:

$$\tilde{E}_{nm} = E_{nm} + \operatorname{Re} M(k, \omega') \Big|_{k=0} + \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2\tilde{\mu}}. \quad (7.70)$$

7.4. Властивості екситонних спектрів та характеристик взаємодії екситонів з акустичними фононами у багатошарових нітрідних наноструктурах

Розрахунки проводились для геометричних параметрів нітридної наносистеми з досить геометричними параметрами, типовими для нещодавно створених квантових каскадних детекторів [122, 207, 273]. У відповідності до позначень на Рис. 7.1 наносистема складається з трьох потенціальних бар'єрів з товщинами $\Delta_1 = 2.0\text{ нм}$, $\Delta_3 = 2.0\text{ нм}$ $\Delta_2 = 30.0\text{ нм}$ та двох потенціальних ям ширини яких рівні $d_1 = 1.5\text{ нм}$ і $d_2 = 1.25\text{ нм}$ відповідно. Фізичні параметри, що використовувались у розрахунках такі як ті, що використовувались для розрахунків у Розділах 3-6 [194].

На Рис. 7.1 приведено енергетичну схему наносистеми розраховану для електрона та дірки, разом з усіма дискретними спектрами цих квазічастинок, що утворені розмірним квантуванням. Тут ми приводимо результати розрахунків як для напівпровідників з ґраткою типу вюрциту (суцільні лінії) та і типу цинкової обманки (штрихові лінії). Як видно з Рис. 7.1 в досліджуваній наносистемі є десять дискретних електронних та дванадцять діркових стаціонарних рівнів. При цьому значення енергій електронів та дірок для напівпровідників двох типів є близькими, але у випадку ґратки типу цинкової обманки вони є дещо більшими ніж у випадку решітки типу вюрциту. Локалізацію цих електронних та діркових станів демонструють наведені для кожного з станів квадрати модулів хвильових функцій.

Подальші розрахунки досліджуваних фізичних величин ми виконуватимемо наступним чином. Ми зафіксуємо значення товщин потенціальних бар'єрів наносистеми й виконувати розрахунки таким чином, щоб величина лівої потенціальної ями мінялась від 0 нм до $d_1 + d_2$, а величина правої ями змінювалась при цьому $d_1 + d_2$ до 0. Тоді фактично величина $0 \leq d \leq d_1 + d_2$ характеризуватиме положення внутрішнього потенціального бар'єра відносно зовнішніх. Даний принцип розрахунку наочно демонструє розрахований як функція від величини d спектр електронних та діркових станів досліджуваної наносистеми, який подано на Рис. 7.2. Як можна бачити з Рис. 7.2 у даному підході можна чітко спостерігати формування ефекту пляшкового горла у розрахованих залежностях для електронних стаціонарних станів, причому цей ефект є найбільш вираженим для нижніх рівнів спектру. Також з огляду на те, яким чином є локалізовані діркові стани наноструктури (фактично в області внутрішнього потенціального бар'єра) є

очевидним, що діркові енергетичні рівні від величини d фактично не залежать, що і підтверджується розрахованими залежностями на Рис. 2, які є фактично прямими лініями. Слід також зауважити, що для вюрцитних та цинкової обманки напівпровідників залежності обох квазічастинок від d мають фактично ідентичний характер.

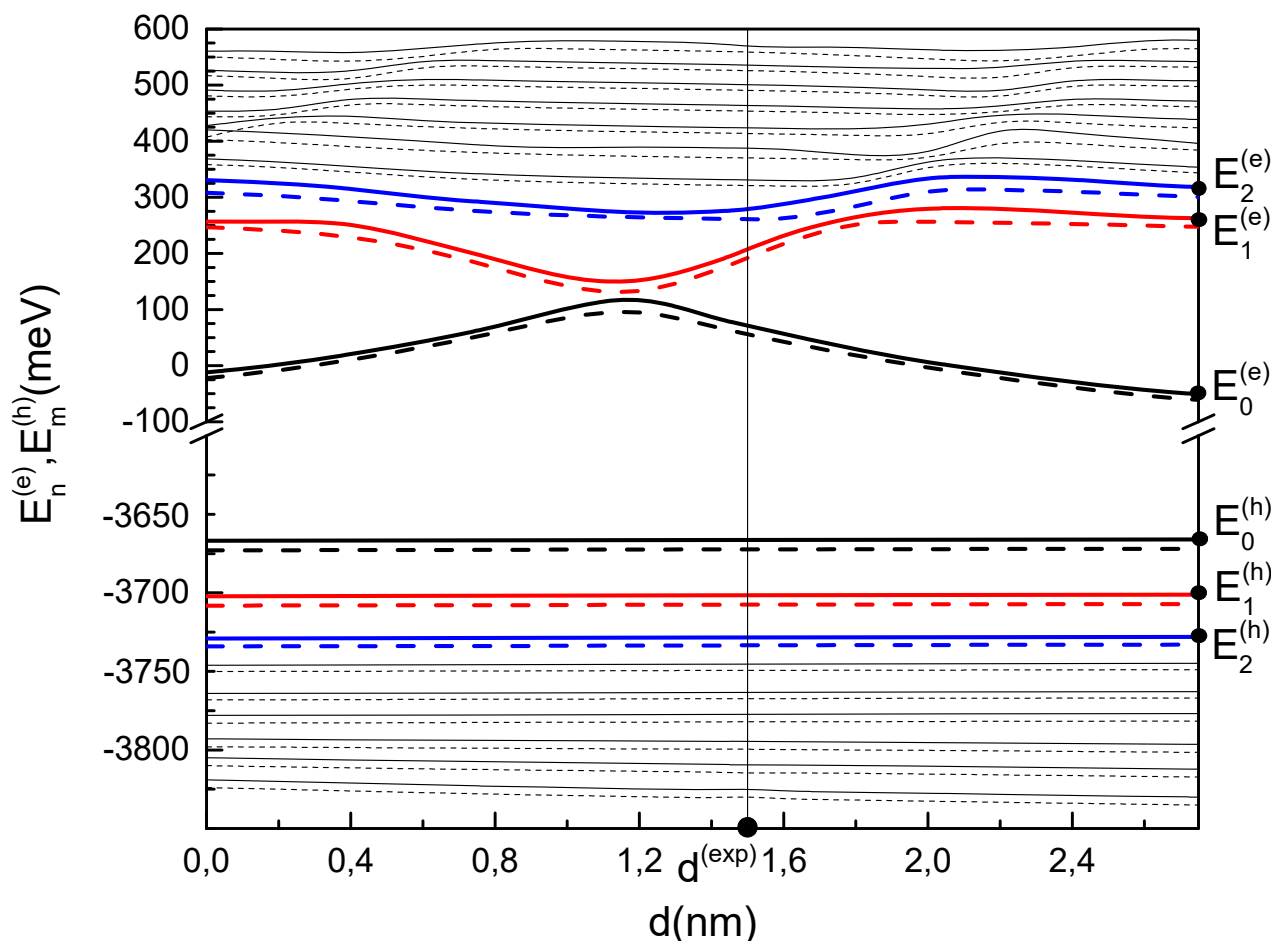


Рис. 7.2. Електронний $E_n^{(e)}$ та дірковий $E_m^{(h)}$ спектри, розраховані як функції положення внутрішнього бар'єру ($0 \leq d \leq d_1 + d_2$) у загальній потенційній ямі (суцільні лінії відповідають вюрцитним напівпровідникам, штрихові лінії відповідають напівпровідника типу цинкової обманки). Енергетична шкала має розрив в діапазоні від -100 меВ до -3600 меВ.

Перш ніж приступати до дослідження впливу акустичних фононів та екситонні стани наносистеми з'ясуємо етимологію формування в досліджуваній наносистемі величин деформаційного та п'єзоелектричного потенціалів. З цією метою ми виконували розрахунок величин компонент u_1 та u_3 , які входять у згадані

потенціали згідно виразів (7.34) і (7.49). Приклад результату таких розрахунків u_1 та u_3 при їх локалізації у межах всієї області наносистеми подано на Рис. 7.3 відповідно для вюрцитних напівпровідників (суцільні лінії) та напівпровідників цинкової обманки (штрихові лінії). З метою встановлення відмінностей між залежностями, що отримуються для різного типу кристалічної структури значення хвильового числа фіксувалось: $q = q_x = q_y$. Як видно із Рис. 7.3 залежності u_1 та u_3 демонструють схожу поведінку, формуючи в області наноструктури однакову кількість пучностей, проте відрізняються за амплітудою та фазою як між собою так і в обох випадках кристалічної структури напівпровідників.

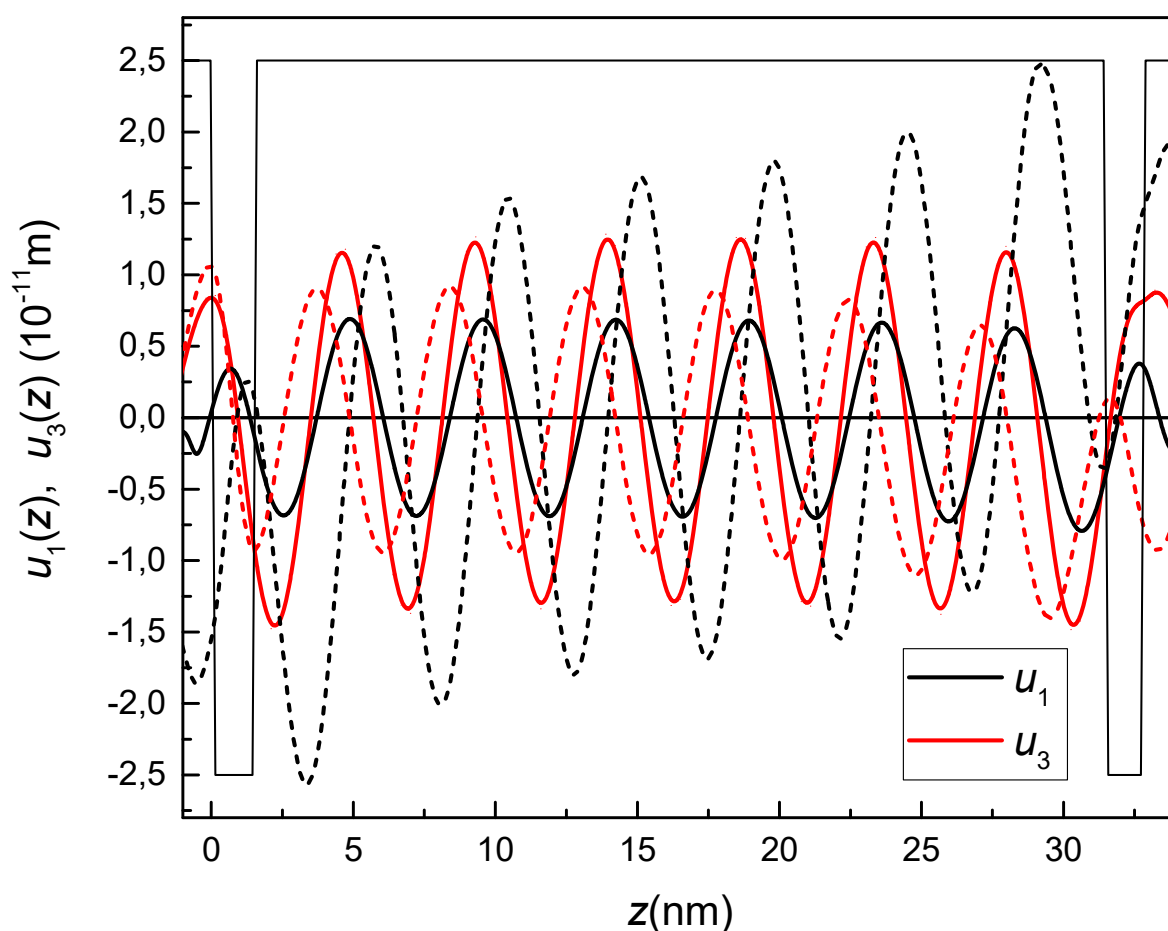


Рис. 7.3. Компоненти $u_1(z)$ (чорні лінії) та $u_3(z)$ (червоні лінії), локалізовані в наносистемі при $q_x=q_y= q=10 \text{ нм}^{-1}$. (суцільні лінії відповідають вюрцитним напівпровідникам, штрихові лінії відповідають напівпровідника типу цинкової обманки).

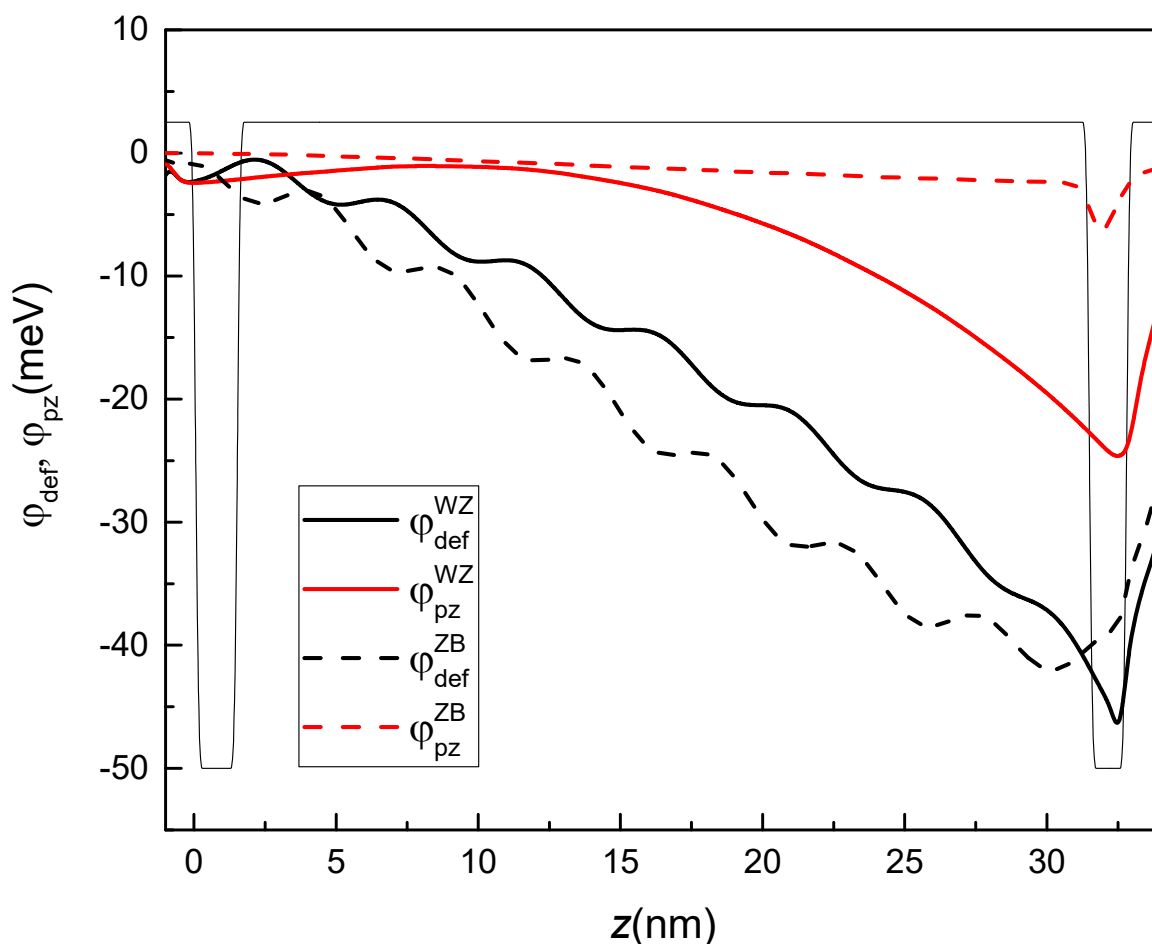


Рис. 7.4. Деформаційний потенціал (чорні лінії) та п'єзоелектричний потенціал (червоні лінії) розраховані при $q_x=q_y=q=10 \text{ нм}^{-1}$. (суцільні лінії відповідають вюрцитним напівпровідникам, штрихові лінії відповідають напівпровідника типу цинкової обманки).

Далі, результати, що подані на Рис. 7.4 демонструють поведінку деформаційного та п'єзоелектричного потенціалів в області наносистеми. Розрахунок цих величин виконувався для такого ж значення хвильового числа $q = q_x = q_y$. Як видно із Рис. 7.4 усі величини потенціалів набувають всередині наносистеми лише від'ємних значень, маючи чітку тенденцію до спадання зліва на право у шкалі значень z . При цьому найбільше за модулем значення досліджуваних потенціалів формується в області правої квантової ями на границі з вихідним потенціальним бар'єром. Як видно із Рис. 7.4, у випадку, коли наносистема утворена напівпровідниками типу вюрциту, то абсолютні значення деформаційного потенціалу переважають абсолютні значення п'єзоелектричного потенціалу у 2-5 разів. Проте у випадку

наносистеми цинкової обманки цей факт порушується: величина деформаційного потенціалу є домінуючою величиною переважаючи аналогічну абсолютну величину п'єзоелектричного потенціалу у 18-20 разів. Слід зауважити, що встановлений факт залишається справедливим для усіх конфігурацій наносистеми, що визначаються у наших розрахунках уведеною вище величиною $0 \leq d \leq d_1 + d_2$. Таки чином можна зробити висновок, що у випадку вюрцитної наносистеми вплив акустичних фононів на екситонні стани чиниться як за рахунок деформаційного так і п'єзоелектричного потенціалів, тоді як випадку наносистеми цинкової обманки екситон-фононна взаємодія визначається в основному деформаційним потенціалом.

Зважаючи на локалізацію електронних та діркових станів у наносистемі в подальших розрахунках ми виконували розрахунки величин зміщень Δ_{nm} та згасань γ_{nm} для перших трьох екситонних станів ($n = m = 0..2$). При цьому у розрахунках для нас буде актуальним діапазон температур від 50К до 300К, що дозволить охопити різноманітні температурні режими для існуючих напівпровідникових приладів. З метою порівняння ми спочатку розглянемо залежності для зміщень $\Delta_{nm} = \Delta_{nm}(d)$ для різних типів ґраток, а далі в такому ж ключі проаналізуємо залежності $\gamma_{nm}(d)$.

На Рис. 7.5a, b, c, d, e, f наведено результати розрахунку зміщень екситонного спектру, які виконувались для чотирьох значень температури: 50К, 100К, 200К, 300К. Рис. 7.5a, b, c відповідають випадку вюрцитних напівпровідників (WZ), а Рис. 7.5d, e, f відповідно напівпровідникам цинкової обманки (ZB). Як видно із поданих залежностей $\Delta_{nm} = \Delta_{nm}(d)$ у низькотемпературному режимі (50К) усі величини зміщень мають від'ємний знак, тобто взаємодія з акустичними фононами приводить до зміщення екситонних енергетичних рівнів у область менших енергій. При цьому ми не ставимо перед собою задачу розгляду тривіального випадку, коли $T=0\text{К}$, крім того цей випадок в межах пропонованої теорії не отримується граничним переходом $T \rightarrow 0\text{К}$. Слід зауважити, що з ростом температури проявляється ефект, який полягає збільшенні абсолютних величин зміщень у формуванні в залежностях $\Delta_{nm}(d)$ інтервалів значень d , в яких величини зміщень

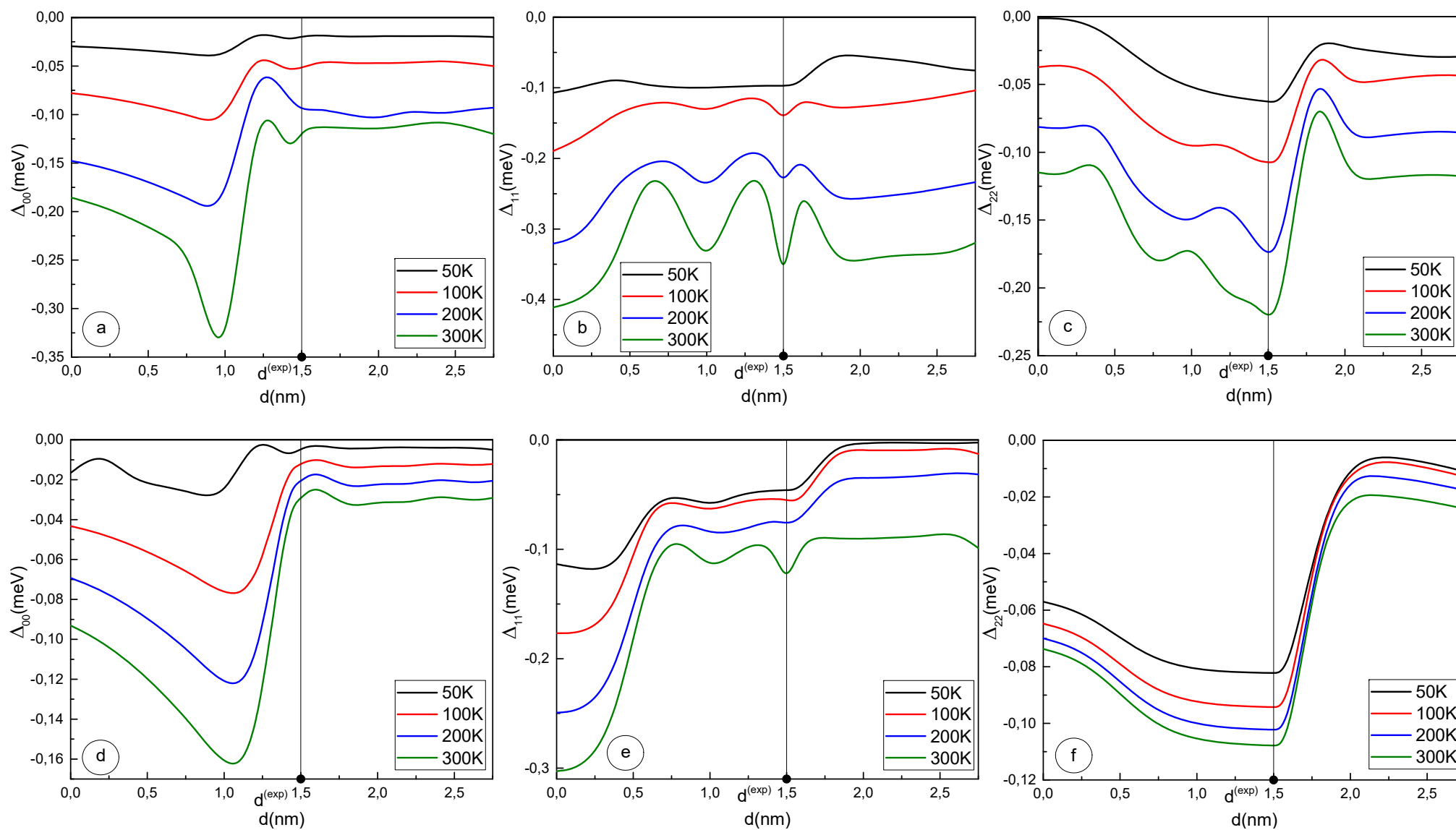


Рис. 7.5. Зміщення спектру екситонів розраховані залежно від величини d для різних температур. Рисунки а), б), с) відповідають напівпровідникам типу вюрциту, а рисунки д), е), ф) напівпровідникам цинкової обманки.

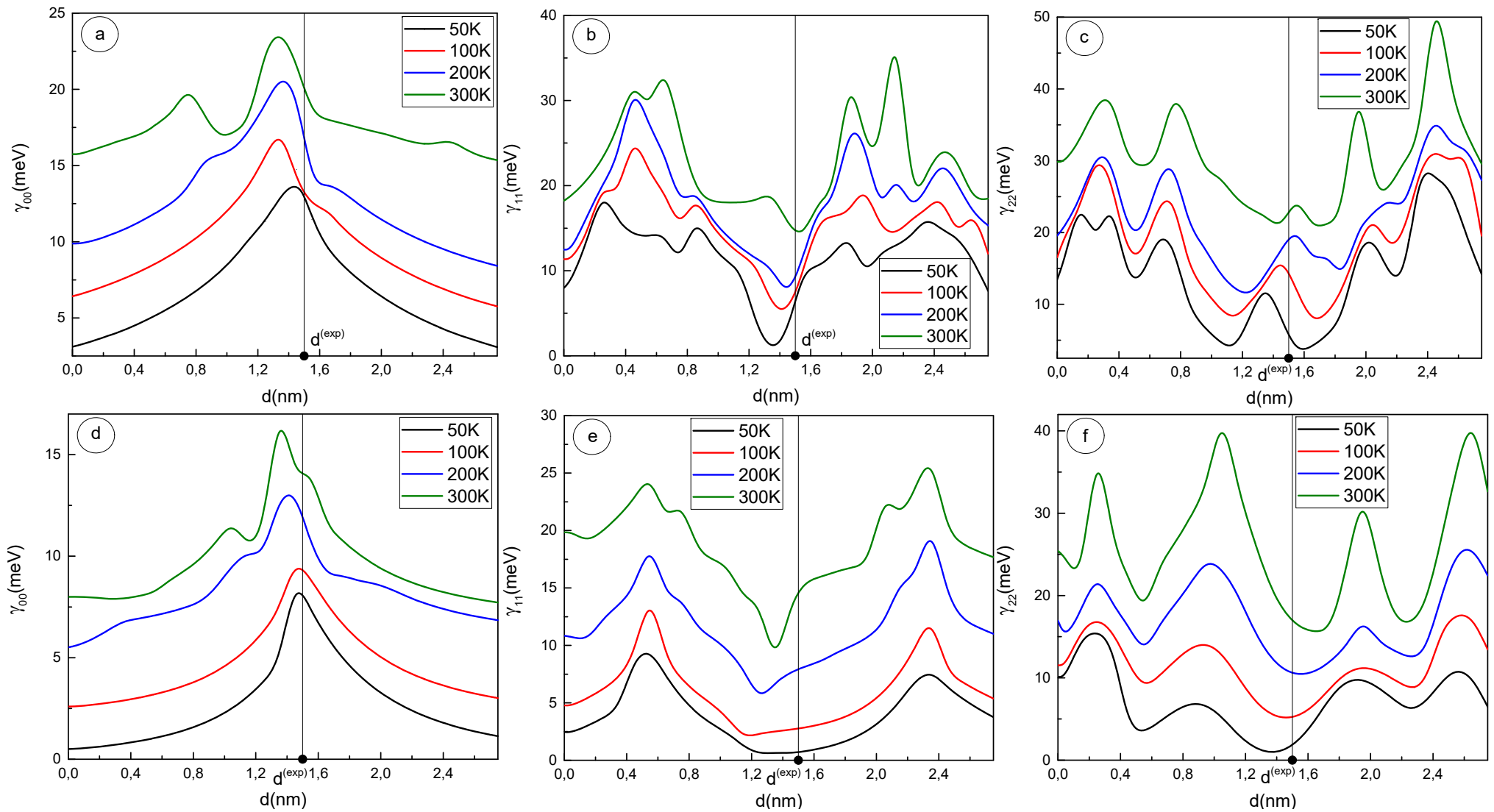


Рис. 7.6. Величини згасань екситонних станів розраховані залежно від величини d для різних температур. Рисунки а), б), с) відповідають напівпровідникам типу вюрциту, а рисунки д), е), ф) напівпровідникам цинкової обманки

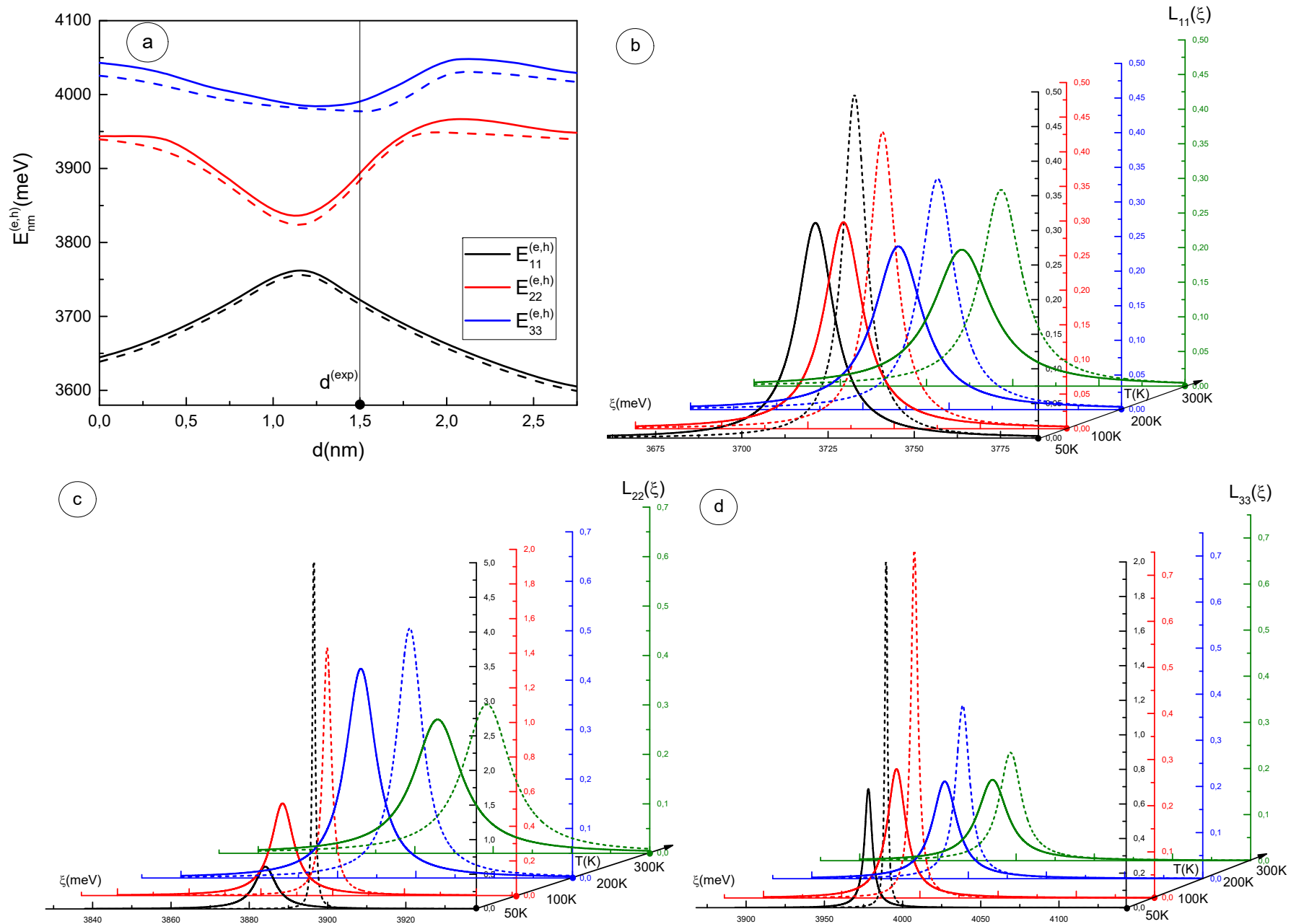


Рис. 7.7. Енергії електронно-діркових переходів $E_{nm}^{(e,h)}$ розраховані як функції d (a) і функції форми смуги поглинання світла (b), (c), (d), розраховані в околі цих енергій для різних температур .

сильно залежать від d і таких інтервалів, де така залежність є слабкою. Для прикладу для $\Delta_{11}^{WZ}(d)$ і $\Delta_{11}^{ZB}(d)$ цей інтервал сильної залежності від d фактично однаковий: $0\text{нм} \leq d \leq 1.3\text{нм}$, проте у випадку $\Delta_{11}^{WZ}(d)$ максимальне абсолютне значення величини зміщення при $T=300\text{К}$ у два рази більше ніж у випадку $\Delta_{11}^{ZB}(d)$. У інтервалі $1.5\text{нм} \leq d \leq 2.75\text{нм}$ обидві величини зміщень слабо залежать від d . З Рис. 7.5b і Рис. 7.5e видно, що залежності зміщень $\Delta_{11}^{WZ}(d)$ і $\Delta_{11}^{ZB}(d)$ є достатньо схожими між собою у інтервалі $0\text{нм} \leq d \leq 0.35\text{нм}$. Для решти значень d ми бачимо, що $\Delta_{11}^{WZ}(d) > \Delta_{11}^{ZB}(d)$. Розглядаючи тепер залежності на Рис. 7.5c і Рис. 7.5f встановлюється, що зміщення $\Delta_{22}^{WZ}(d)$ і $\Delta_{22}^{ZB}(d)$ в вузькому інтервалі $1.45\text{нм} \leq d \leq 1.55\text{нм}$ формують максимальні абсолютні значення. Крім того, не зважаючи на формальну схожість залежностей, Δ_{22}^{WZ} чітко різняться між собою: $\Delta_{11}^{ZB} \Big|_{T=300\text{К}} > \Delta_{11}^{ZB} \Big|_{T=200\text{К}} > \Delta_{11}^{ZB} \Big|_{T=100\text{К}} > \Delta_{11}^{ZB} \Big|_{T=50\text{К}}$, а у випадку Δ_{22}^{ZB} значення є достатньо близькими між собою для усіх значень температури.

Далі на Рис. 7.6a, b, c, d, e, f наведено результати розрахунку згасань екситонних станів, зміщення яких розраховувалось вище. Значення температури при яких виконувались розрахунки такі ж самі як і у випадку залежностей, що подані на Рис. 7.5. Як видно із порівняння Рис. 7.6a, b, c та Рис. 7.6d, e, f вони є достатньо схожими для випадку обох типів кристалічної ґратки, проте слід виділити ряд відмінностей. Максимальні величини згасань є дещо більшими для випадку вюрцитних напівпровідників, крім того зростання температури менше деформує залежності для напівпровідників цинкової обманки, які при всіх значеннях температури залишаються симетричними відносно величини $(d_1 + d_2) / 2$. Також ми звертаємо

на виконання умови:

$$\gamma_{nm}^{WZ(ZB)} \Big|_{T=50\text{К}} < \gamma_{nm}^{WZ(ZB)} \Big|_{T=100\text{К}} < \gamma_{nm}^{WZ(ZB)} \Big|_{T=200\text{К}} < \gamma_{nm}^{WZ(ZB)} \Big|_{T=300\text{К}}$$

для усіх можливих конфігурацій наносистеми d . Підсумовуючи разом аналіз залежностей на Рис. 7.5 і Рис. 7.6 слід зробити висновок, що менші абсолютні значення зміщень та згасань у випадку напівпровідників цинкової обманки зумовлюються домінуванням лише

механізму взаємодії з акустичними фононами через деформаційний потенціал, тоді як у випадку вюрцитних напівпровідників значний внесок роблять обидва механізми такої взаємодії, що власне й прогнозувалось нами вище під час аналізу залежностей на Рис. 7.4.

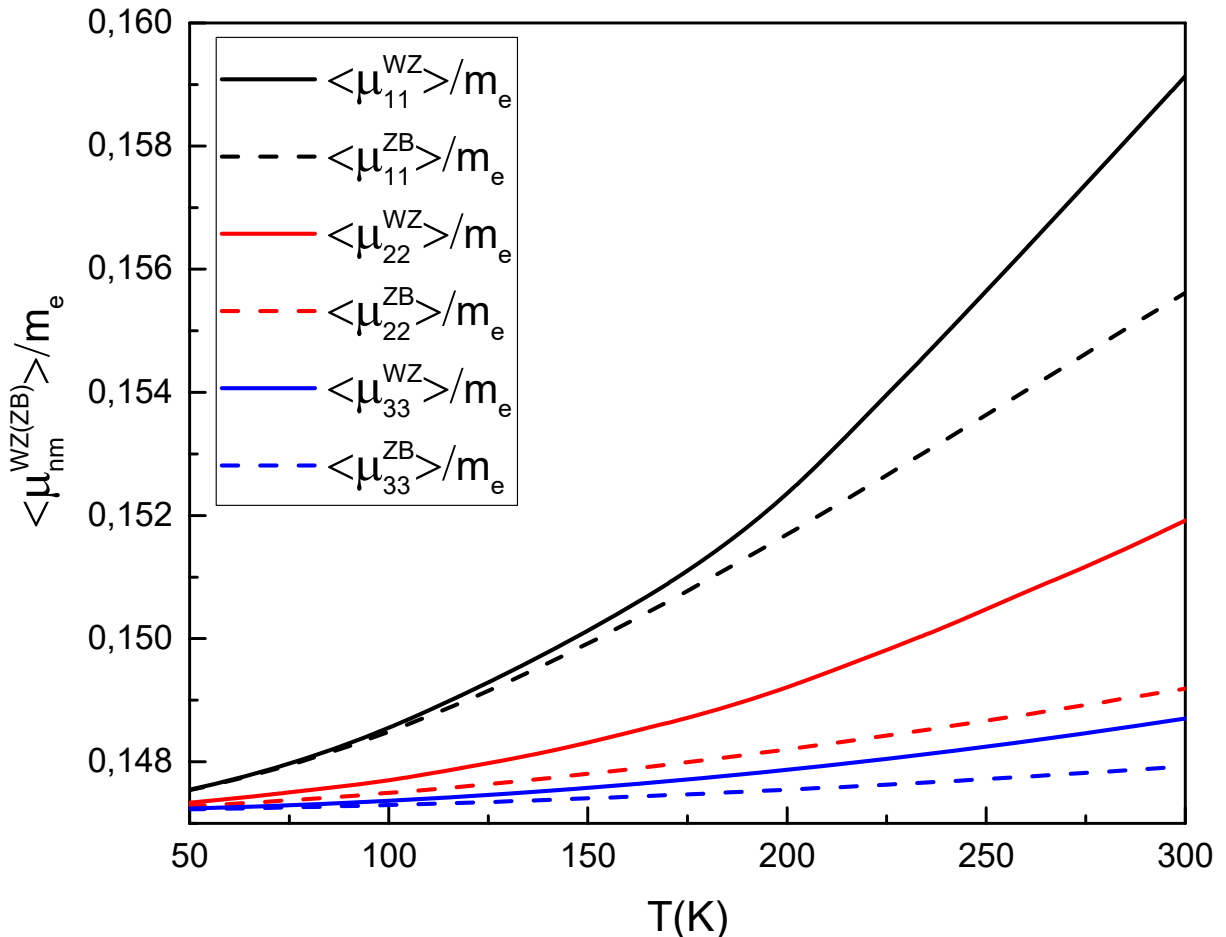


Рис. 7.8. Температурні залежності ефективної маси екситона $\langle \mu_{nm} \rangle$ у випадку, коли шари наносистеми складаються з вюрцитних напівпровідників (суцільні лінії) та цинкової обманки (штрихові лінії).

Далі залежності, що подані на Рис. 7.7 демонструють результати розрахунків енергій електронно-діркових переходів та функцій смуги поглинання, які розраховувались для вказаних вище значень температури в околі цих значень енергії. Як видно з Рис. 7.7а значення енергій електронно-діркових переходів у випадку напівпровідників типу цинкової обманки дещо переважають значення, отримувані у випадку напівпровідників типу вюрциту, а самі залежності від d є достатньо схожими. Значення цих енергій, що отримуються при $d = d^{(exp)}$ для

наочності відповідають значенням максимумів функцій смуги поглинання L_{11}, L_{22}, L_{33} . З Рис. 7.7b, c, d видно, залежності L_{11}, L_{22}, L_{33} від енергії ξ мають вигляд квазілоренцових кривих. При збільшенні значень температури що спостерігається ефект збільшення ширин отриманих кривих та зменшення величин їх максимумів, що додатково пояснюється залежностями, які подані на Рис. 7.6. Слід зауважити що для всіх розрахункових значень температури максимальне значення функції $L_{nm}(\xi)$ завжди спостерігається у випадку наноструктури на основі напівпровідників типу цинкової обманки. Це пояснюється вище встановленим ефектом, який полягає в тому, що для напівпровідників типу цинкової обманки внесок акустичних фононів у екситон-фононну взаємодію зумовлений в основному деформаційним потенціалом і є меншим ніж у випадку вюрцитних напівпровідників. Також як видно з Рис. 7.6c і Рис. 7.6d при $T = 50\text{K}$ виконується така умова: $L_{nm}(\xi)|_{T=50\text{K}} \square L_{nm}(\xi)|_{T=100\text{K}}, L_{nm}(\xi)|_{T=200\text{K}}, L_{nm}(\xi)|_{T=300\text{K}}$. Таким чином можна говорити, що при $T \rightarrow 0\text{K}$ відбувається наближення до теорії, коли $T = 0\text{K}$ й $\gamma_{nm} = 0$ згідно загальної теорії екситонів, проте зрозуміло, що про безпосередню збіжність даних результатів не йдеться і теорія при $T = 0\text{K}$ має розглядатись окремо.

На заключному етапі ми дослідимо вплив акустичних фононів на перенормування ефективної маси екситона у досліджуваній наносистемі. Оскільки ефективна маса екситона є різною у різних напівпровідникових шарах, то у співвідношенні (7.71) ми в якості величини приведеної маси екситона μ ми будемо розглядати величину його маси усереднену за внеском шарів наносистеми (наскільки нам відомо такий підхід вперше було використано у праці [185] для електронної задачі). В нашому випадку вираз для усередненої маси екситона такий:

$$\langle \mu \rangle = \langle \mu_{nm} \rangle = \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\{m^{(e)}(z_e) + m^{(h)}(z_h)\} |\Psi_n^{(e)}(z_e)|^2 dz_e \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{|\Psi_m^{(e)}(z_h)|^2 dz_h}{m^{(h)}(z_h)} \right]^{-1}. \quad (7.71)$$

Крім того з виразу (7.71) добре видно, що усереднена маса екситона залежить від номерів n і m відповідних зв'язаних електронних та діркових станів.

На Рис. 7.8 подано температурні залежності усереднених ефективних мас екситона, що демонструють їх перенормування за рахунок впливу акустичних фононів для наносистеми з напівпровідниковими шарами типу вюрциту і цинкової обманки відповідно. Як видно з Рис. 7.8 при $T=50\text{K}$ величини ефективних мас екситона $\langle\mu_{11}\rangle, \langle\mu_{22}\rangle, \langle\mu_{33}\rangle$ близькі між собою. При цьому для всіх значень температури виконується умова: $\langle\mu_{11}\rangle > \langle\mu_{22}\rangle > \langle\mu_{33}\rangle$ причому завжди $\langle\mu_{nm}^{WZ}\rangle > \langle\mu_{nm}^{ZB}\rangle$, а спостережуваним ефектом є збільшення ефективної маси екситона за рахунок екситон-фононної взаємодії. Слід зауважити, що при температурах $T < 200\text{K}$ залежності $\langle\mu_{11}\rangle$ від T мають квадратичний характер, який слабо виражений для $\langle\mu_{22}\rangle$ і ще слабше для $\langle\mu_{33}\rangle$. При температурах $T > 200\text{K}$ спостерігається вже квазілінійна залежність перенормованих ефективних мас екситона від температури, що є наслідком фактичного виконання наближення: $\nu_{n_1}(q) \approx k_B T / \Omega_{n_1}(q)$. Загалом слід зауважити, що у випадку вюрцитних напівпровідників перенормована ефективна маса електрона збільшується більше ніж у випадку напівпровідників типу цинкової обманки і становить максимально можливо близько 8% і 5% відповідно для $\langle\mu_{11}\rangle$, а для $\langle\mu_{11}\rangle$ і $\langle\mu_{11}\rangle$ ці величини є ще меншим. Таким чином можна підсумувати, що з ростом номера рівнів електронних та діркових станів, ефективна маса екситона утвореного цими станами дедалі менше переформовується шляхом взаємодії з акустичними фононами.

Висновки до розділу 7

1. Розроблено послідовну аналітичну теорію взаємодії екситонів з акустичними фононами в плоских напівпровідникових нітридних наносистемах. Ця теорія враховує обидва можливі випадки орієнтації кристалічної решітки нітридних напівпровідникових наносистем - типу вюрциту і типу цинкової обманки відповідно, і також може бути застосована для відмінних від нуля температур. З використанням моделі ефективних мас електрона та дірки досліджено екситонні стани та отримано екситонний гамільтоніан у поданні вторинного квантування.

2. Розвинена теорія вирізняється від відомих числових підходів за рахунок використання точних аналітичних виразів для фононних мод, отриманих у моделі пружного континууму, що визначає її гнучкість та застосовність, а також дозволяє подати у вигляді вторинного квантування гамільтоніани, відповідальні за механізми взаємодії через деформаційний та п'єзоелектричний потенціал. Виконавши розрахунок масових операторів та застосувавши метод температурних функцій Гріна разом з рівнянням Дайсона, було вирішено завдання перенормування спектру екситонів для отримання характеристик цього спектра – температурних зміщень та згасань.

3. Отримано вирази для функції форми смуги поглинання екситона та усередненої за шарами наносистеми перенормованої ефективної маси екситона.

4. Встановлено, що рівні енергії електронів та дірок та енергії електронно-діркових переходів у разі наносистеми з ґраткою типу вюрциту дещо переважають аналогічні величини для наносистеми типу цинкової обманки. Нами виявлено, що деформаційний і п'єзоелектричний потенціали мають негативний знак, але у разі вюрцитної наносистеми ці потенціали є одного порядку, тоді як для наносистеми цинкової обманки деформаційний потенціал значно перевищує п'єзоелектричний потенціал, будучи в цьому випадку визначальним фактором, що визначає екситон-фононну взаємодію.

5. Показано, що температурні зміщення спектру екситонів, розраховані залежно від геометричної конфігурації наносистем, мають негативний знак, а абсолютні значення зміщень мають явну тенденцію до зростання їх абсолютних значень при збільшенні розрахункових значень температури. Аналогічним чином встановлено факт температурного зростання згасань екситонних станів із ростом температури.

6. Виявлено, що значення температурних зміщень і згасань для тих самих екситонних станів у разі наносистеми вюрциту домінують над тими ж значеннями для наносистеми цинкової обманки. Аналізуючи функції форми смуги поглинання, розраховану для температур від 50К до 300К, було встановлено, що вплив акустичних фононів пригнічує електронно-діркові переходи, і цей ефект більш виражений для вюрцитних наносистем.

7. Виявлено, що величина перенормованої ефективної маси екситона збільшується за рахунок взаємодії з акустичними фононами для всіх розрахункових температур, причому величина такого збільшення становить до 8% у разі вюрцитної наносистеми та до 5% у разі наносистеми типу цинкової обманки.

ВИСНОВКИ

У дисертаційній роботі виконано теоретичні дослідження електронних процесів, що відбуваються у плоских багат шарових резонансно-тунельних структурах створених на основі арсенідних та нітридних напівпровідникових сполук. Виконано побудову теоретичних моделей, що дозволяють враховувати внески факторів різної природи, що чинять вплив на процеси електронного тунелювання та генерації електромагнітних хвиль в результаті квантових електронних переходів. Розроблено ряд методів, що дають змогу розраховувати потенціальні схеми анізотропних нітридних наноструктур. Для електрон-фононних систем та електронних систем із прикладеними зовнішніми постійними та залежним від часу полями вперше отримано результати, що демонструють зв'язок методу Льюїса-Різенфілда та підходів теорії розсіювання.

Основні результати, які було отримано у дисертаційній роботі такі:

- Побудовано квантово-механічну теорію квазістаціонарних станів та електронної провідності наносистеми з довільними геометричними параметрами в якій досягається можливість формування додаткової гармоніки з частотою, рівною подвоєній робочій частоті квантового каскадного лазера.
- Встановлено, що величина внеску двофотонних переходів у сумарній величині електронної провідності складає до 37% та виконано дослідження властивостей її парціальних складових. Розвинено підхід до встановлення безпосередніми розрахунками конфігурацій наносистем, в якій реалізуються послідовні електронні квантові переходи з третього у другий та з другого у перший квазістаціонарні стани з випромінюванням двох фотонів однакової частоти.
- Побудовано квантово-механічну теорію квазістаціонарних станів та електронної провідності багат шарових наноструктур з прикладеним поздовжнім постійним електричним полем за умови реалізації додаткових других гармонік з частотою відмінною від робочої частоти наноприладів. Окремо досліджено випадок відсутності електричного поля.

- Встановлено, що величина внеску від складової електронної провідності сформованою додатковою гармонікою у сумарній її величині електронної провідності для різних геометричних конфігурацій наноструктур при лазерній генерації складає до 38%.
- Розвинено підхід до встановлення безпосередніми розрахунками конфігурацій наносистем в яких реалізується можливість лазерної генерації двох різних частот електромагнітного поля з співмірним внеском цих частот у результуючій величині динамічної провідності. Проаналізовано перспективи застосування арсенідних та нітридних напівпровідників як функціональної бази наноприладів функціонуючих на основі механізму з двома робочими частотами.
- У моделі ефективних мас та прямокутних потенціалів знайдено самоузгоджений розв'язок рівняння Шредінгера та Пуассона за різних концентрацій електронів. Побудовано квантову теорію спектральних параметрів електронних квазістаціонарних станів та динамічної провідності відкритої наноструктури як моделі активної зони каскаду квантового каскадного лазера чи детектора з урахуванням змінного просторового заряду, що виникає при транспортуванні електронів крізь наносистему та їх взаємодії з електромагнітним полем. Розраховано резонансні енергії, ширини, активну динамічну провідність та її парціальні складники в моделі відкритої резонансно-тунельної структури, яка відповідає активним зонам експериментально реалізованих квантових каскадних лазерів та детекторів.
- Встановлено, що концентрації електронів менші ніж 10^{16} см^{-3} , майже не змінюють спектральних характеристик і активної провідності за рахунок виникнення змінного просторового заряду. Показано, що значні концентрації носіїв заряду (10^{17} – 10^{18} см^{-3}), спричиняють появу просторового заряду, потенціал якого деформує форми коефіцієнта прозорості й активної динамічної провідності від лоренцової до клиноподібної. Показано, що максимуми коефіцієнта прозорості зміщуються у високоенергетичну область при цьому збільшуються часи життя електронних квазістаціонарних станів.

- Показано, що зі збільшенням концентрації електронів енергія лазерного випромінювання у квантових переходах $3 \rightarrow 2$ та $3 \rightarrow 1$ зменшується, а сумарна величина активної динамічної провідності збільшується так, що в ній зростає внесок парціальної складової провідності, визначеної потоком, напрямленим протилежно до виходу із наносистеми.
- Встановлено, що для значних концентрацій електронів n_0 зростає вплив дисипативних процесів, спричинених просторовим динамічним зарядом. Для великих концентрацій ($3 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$) отримується має місце зростання майже на порядок величин часів життя електронних квазістаціонарних станів та зростання ролі дисипативних парціальних складових динамічної провідності, визначених електронними потоками, спрямованими протилежно до виходу наносистеми.
- З використанням розв'язків самоузгодженої системи рівнянь Шредінгера та Пуассона розвинено метод розрахунку потенціальних профілів нітридних наноструктур при апроксимації складових електронного гамільтоніана. На основі методу розвинена теорія стаціонарних електронних станів та сил осциляторів квантових переходів у анізотропній наносистемах вюрцитного типу.
- Розроблено теоретичний метод розрахунку потенціальних профілів багат шарових нітридних наносистем на основі відшукування самоузгоджених аналітичних розв'язків системи рівнянь Шредінгера-Пуассона. На основі отриманих розв'язків розвинено електронну теорію стаціонарних електронних станів, хвильових функцій та сил осциляторів квантових електронних переходів у нітридних наносистемах.
- На основі розвиненої теорії виконано дослідження геометричних конфігурацій каскадів наноприладів близького інфрачервоного діапазону з метою виявлення таких, які забезпечують максимальну інтенсивність квантових електронних переходів. Показано, що розрахована величина детектованої енергії відрізняється від експериментально отриманої не більше ніж на 3%. Встановлено, що в околі експериментально реалізованої конфігурації

наноструктури найбільшою є інтенсивність квантових переходів між робочими електронними станами, що визначають робочу величину детектованої енергії.

- Безпосередніми розрахунками потенціальних схем наносистем та електронних спектрів, виконаними на основі розроблених теоретичних методів розрахунку виконано порівняння їхньої ефективності та варіативності використання у застосуванні до безпосередньо створених наносистем. Встановлено, що аналітичний метод має ряд переваг порівняно з числовим, забезпечуючи більш швидко збіжність до заданої точності обчислень та його результати можуть використовуватись у подальших теоретичних дослідженнях електронних процесів у нітридних наноструктурах.
- Вперше розвинено математичний апарат послідовної аналітичної теорії мод поперечних, флексуральних та ділататіональних мод акустичних фононів, виникаючих у нітридних бінарних AlN/GaN і потрійних AlGaIn/GaN багат шарових РТС. На базі розвиненої теорії виконано розрахунки спектру та компонент поля зміщення поперечних, флексуральних та ділататіональних акустичних фононів, їх залежностей від геометричних параметрів РТС та досліджено їх властивості. Встановлено, що спектри акустичних фононів формуються в інтервалах, межі яких визначаються швидкостями поширення поперечних та поздовжніх хвиль у масивних напівпровідниках.
- Встановлено, що спектр акустичних фононів нітридної наноструктури складається з двох груп зміщувальних та п'яти окремих груп флексуральних та ділатіональних фононів. Встановлено особливості нормованих компонент полів зміщення для кожної з фононних груп.
- Побудовано аналітичну теорію взаємодії електронів з флексуральними та ділататіональними акустичними фононами у багат шарових арсенідних РТС за довільних значень температури.
- Розвинено аналітичну теорію п'єзоелектричного ефекту, зумовленого флексуральними та ділататіональними акустичними фононами в багат шарових нітридних РТС. Виконано дослідження спектру флексуральних

та ділататіональних акустичних фононів за наявності п'єзоелектричного ефекту.

- Розвинено аналітичну теорію зсувних акустичних фононів у багатошарових нітридних РТС у врахуванням створюваного ними п'єзоелектричного ефекту. Виконано дослідження властивостей спектру та компонент поля зміщення поперечних акустичних фононів та виявити їх особливості, що пов'язані з п'єзоелектричним ефектом.
- Встановлено, що взаємодія зсувних акустичних фононів з електронами можлива тільки через п'єзоелектричний потенціал. Розвинено теорію взаємодії електронів з поперечними акустичними фононами у нітридних РТС через п'єзоелектричний потенціал за довільних значень температури. Досліджено властивості температурних зміщень рівнів електронного спектру та їх згасань, які зумовлені даним механізмом взаємодії електронів з акустичними фононами.
- Розвинено теорію взаємодії електронів з флексуральними та ділататіональними в багатошарових нітридних РТС через деформаційний та п'єзоелектричний потенціали для довільних значень температури за наявності п'єзоелектричного ефекту. На основі розвиненої теорії виконано розрахунки та досліджено температурні зміщення енергетичних рівнів електронних станів та їх згасань зумовлені обома механізмами взаємодії та встановити їхні характеристики.
- Встановлено, що теплові зміщення рівнів електронного спектру, які зумовлені взаємодією електронів з акустичними фононами через деформаційний потенціал при температурах 77К і 300 К набувають як від'ємних так і додатнім значень, а при цьому теплові зміщення рівнів електронного спектру, що зумовлені взаємодією електронів з акустичними фононами через п'єзоелектричний потенціал набувають лише від'ємних значень. Встановлено, що абсолютні величини зміщень для електронних рівнів та їх згасання зростають із збільшенням температури в кілька разів, що приводить до суттєвого перенормування смуги поглинання.

- Запропоновано варіаційний метод для рівняння Шредінгера, з використанням якого виконано теоретичні дослідження квазістаціонарних станів електронів разом з підсистемою акустичних фононів. На основі методу розвинена квантова тунельного транспорту електронів в плоских нітридних наноструктурах з урахуванням підсистеми акустичних фононів за довільних значень температури.
- Виконано розрахунки часів фононної релаксації, коефіцієнта прозорості наноструктури та густини тунельного струму з урахуванням фононної підсистеми для різних температурних значень. Встановлено, що вплив підсистеми акустичних фононів зумовлює температурне збільшення частот квантових переходів та резонансних ширин електронних КСС та збільшує величину напруженості електричного поля необхідну для досягнення пікового значення тунельного струму. Встановлено, що вплив фононної підсистеми полягає у зменшенні із ростом температури складової електронної провідності, яка відповідає за прямий електронний потік з наноструктури та збільшенні конкуруючої складової потоку у протилежному напрямку.
- Шляхом застосування методу Льюїса-Різенфілда до залежного від часу рівняння Шредінгера розвинено теорію електронного тунельного транспорту у відкритій багатошаровій наноструктурі в кожній з квантових ям якої є можливою генерація електромагнітних хвиль з різними амплітудами.
- Розрахунки залежного від часу коефіцієнта прозорості досліджуваної наносистеми дозволили встановити, що на досліджуваний процес електронного тунелювання впливають такі основні чинники. При фіксованих значеннях амплітуд електричної складової електромагнітного поля розраховані залежності коефіцієнта прозорості для значень часу, що менші за час релаксації проявляються у зменшенні величини максимуму коефіцієнта прозорості, значення резонансної енергії залишається незмінним, значення резонансної ширини зменшується.
- Встановлено, що для значень часу близьких до часу релаксації та більших від нього у залежностях коефіцієнта прозорості з'являються осциляції які

приводять до неможливості однозначного визначення спектральних характеристик квазістаціонарного стану і його фактичного руйнування. Для фіксованих значень часу, що менші за час релаксації встановлено таке: якщо амплітуди електричних складових електромагнітних полів менші на два порядки від амплітуди електромагнітного поля, що генерується в основному квантовому переході, то має місце слабке зменшення максимуму коефіцієнта прозорості та зміщення його у шкалі енергій вправо. Подальше зростання амплітуд приводить до різкого зменшення коефіцієнта прозорості наносистеми та руйнування квазістаціонарного стану. Отримані результати будуть корисними для дослідників електронного транспорту в наносистемах та впливу різноманітних чинників на цей процес.

- Розвинено теорію тунельного транспорту електронів крізь відкриту багат шарову наносистему за умови наявності впливу постійного внутрішнього електричного поля, постійного магнітного поля спрямованого перпендикулярно до напрямку руху електронів й з урахуванням взаємодії тунельованих електронів із змінним електромагнітним полем. Для цього розглянуто повне рівняння Шредінгера з залежним від часу потенціалом. Розв'язки цього рівняння з отримано шляхом застосування методу Льюїса-Різенфілда разом з представленням хвильової функції у вигляді характерному для теорії розсіювання. Використання граничних умов для хвильової функції та потоку її ймовірності на межах шарів наносистеми дозволило однозначно визначити електронну хвильову функцію та S - матрицю з полюсів якою визначався електронний квазістаціонарний спектр – резонансні енергії та ширини. Використання отриманих хвильових функції дозволило виконати аналітичні розрахунки електронної провідності наносистеми.
- Розрахунки спектральних характеристик квазістаціонарних станів та електронної провідності, що були виконані з використанням пропонованої теорії для параметрів трибар'єрної нітридної наноструктури дозволили встановити, що зі збільшенням величини індукції магнітного поля, значення енергій електронних рівнів також зростають, формуючи антикросінги між

сусідніми енергетичними рівнями. Положення цих антикросінгів із наближенням величини моменту часу t до значення відповідному часу релаксації τ_{tel} зміщуються в шкалі значень індукції магнітного поля вліво, частина цих антикросінгів взагалі зникає при $t \geq \tau_{tel}$. Як результат це дозволяє застосовувати магнітне поле, для зміни енергії квантових переходів між електронними рівнями.

- Встановлено, що зі збільшенням величини індукції магнітного поля, залежності резонансних ширин формують кросінги для тих же значень індукції, що й мало місце формування антикросінгів у залежностях резонансних енергій. Дані кросінги зміщуються та зникають аналогічним чином, як антикросінги резонансних енергій – це відбувається для тих же значень індукції магнітного поля та моменту часу t . Наявність у залежностях резонансних ширин інтервалів для яких має місце зростання їх значень дає змогу впливати зміною індукції магнітного поля на час життя електронних квазістаціонарних станів, а також змінювати ширини смуг поглинання та випромінювання в функціонуючих наноприладах.
- Розрахунки електронної провідності наносистеми у залежності від індукції магнітного поля показали, що зміною величини індукції можна отримати збільшення величини електронної провідності, що формується в електронних переходах $1 \rangle \rightarrow 2 \rangle$ і $1 \rangle \rightarrow 3 \rangle$, проте це буде ефективним лише за умови, що режим тунелювання відбувається в часовому інтервалі не перевищуючому час релаксації.
- Розроблено послідовну аналітичну теорію взаємодії екситонів з акустичними фононами в плоских напівпровідникових нітридних наносистемах. Ця теорія враховує обидва можливі випадки орієнтації кристалічної решітки нітридних напівпровідникових наносистем - типу вюрциту і типу цинкової обманки відповідно, і також може бути застосована для відмінних від нуля температур. З використанням моделі ефективних мас електрона та дірки досліджено

екситонні стани та отримано екситонний гамільтоніан у поданні вторинного квантування.

- Розвинена теорія вирізняється від відомих числових підходів за рахунок використання точних аналітичних виразів для фононних мод, отриманих у моделі пружного континууму, що визначає її гнучкість та застосовність, а також дозволяє подати у вигляді вторинного квантування гамільтоніани, відповідальні за механізми взаємодії через деформаційний та п'єзоелектричний потенціал. Виконавши розрахунок масових операторів та застосувавши метод температурних функцій Гріна разом з рівнянням Дайсона, було вирішено завдання перенормування спектру екситонів для отримання характеристик цього спектра – температурних зміщень та згасань.
- Отримано вирази для функції форми смуги поглинання екситона та усередненої за шарами наносистеми перенормованої ефективної маси екситона. Встановлено, що рівні енергії електронів та дірок та енергії електронно-діркових переходів у разі наносистеми з ґраткою типу вюрциту дещо переважають аналогічні величини для наносистеми типу цинкової обманки. Нами виявлено, що деформаційний і п'єзоелектричний потенціали мають негативний знак, але у разі вюрцитної наносистеми ці потенціали є одного порядку, тоді як для наносистеми цинкової обманки деформаційний потенціал значно перевищує п'єзоелектричний потенціал, будучи в цьому випадку визначальним фактором, що визначає екситон-фононну взаємодію.
- Показано, що температурні зміщення спектру екситонів, розраховані залежно від геометричної конфігурації наносистем, мають негативний знак, а абсолютні значення зміщень мають явну тенденцію до зростання їх абсолютних значень при збільшенні розрахункових значень температури. Аналогічним чином встановлено факт температурного зростання згасань екситонних станів із ростом температури.
- Виявлено, що значення температурних зміщень і згасань для тих самих екситонних станів у разі наносистеми вюрциту домінують над тими ж значеннями для наносистеми цинкової обманки. Аналізуючи функції форми

смуги поглинання, розраховану для температур від 50К до 300К, було встановлено, що вплив акустичних фононів пригнічує електронно-діркові переходи, і цей ефект більш виражений для вюрцитних наносистем.

- Виявлено, що величина перенормованої ефективної маси екситона збільшується за рахунок взаємодії з акустичними фононами для всіх розрахункових температур, причому величина такого збільшення становить до 8% у разі вюрцитної наносистеми та до 5% у разі наносистеми типу цинкової обманки.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Buffaz A., Gomez A., Carras M., Doyennette L., Berger V. Role of subband occupancy on electronic transport in quantum cascade detectors // *Phys. Rev. B* — 2010. — Vol. 81, no. 7. — P. 075304.
2. Terazzi R., Gresch T., Wittmann A., Faist J. Sequential resonant tunneling in quantum cascade lasers // *Phys. Rev. B* — 2008. — Vol. 78, no. 15. — P. 155328.
3. Franckić M., Faist J. Bayesian Optimization of Terahertz Quantum Cascade Lasers // *Phys. Rev. Appl.* — 2020. — Vol. 13, no. 3. — P. 034025.
4. Liu J., Zhou Y., Zhai S., Liu F., Liu S., Zhang J., Wang Z. High-frequency very long wave infrared quantum cascade detectors // *Semicond. Sci. Technol.* — 2018. — Vol. 33, no. 12. — P. 125016.
5. Tkach M.V., Seti, Ju. O., Matijek V.O. Optimization of operation of terahertz nano-laser at the base of three-barrier resonance tunnel structure with shifted bottoms of potential wells // *Rom. Rep. Phys* — 2012. — Vol. 57, no. 7-8. — P. 1148–1157.
6. Tkach N.V., Seti, Ju. A. Evolution and collapse of quasistationary states of an electron in planar symmetric three-barrier resonance-tunneling structures // *Low Temp. Phys.* — 2009. — Vol. 35, no. 7. — P. 556–564.
7. Erneux T., Kovanis V., Gavrielides A. Nonlinear dynamics of an injected quantum cascade laser // *Phys. Rev. E* — 2013. — Vol. 88, no. 3. — P. 032907.
8. Menyuk C. R., Talukder M. A. Self-Induced Transparency Modelocking of Quantum Cascade Lasers // *Phys. Rev. Lett.* — 2009. — Vol. 102, no. 2. — P. 023903.
9. Kumar S., Hu Q. Coherence of resonant-tunneling transport in terahertz quantum-cascade lasers // *Phys. Rev. B* — 2009. — Vol. 80, no. 24. — P. 245316.
10. Winge D. O., Dupont E., Wacker A. Ignition of quantum cascade lasers in a state of oscillating electric field domains // *Phys. Rev. A* — 2018. — Vol. 98, no. 2. — P. 023834.
11. Gröbke H. H. Theory of photon assisted tunneling // *Infrared Phys.* — 1990. — Vol. 30, no. 4. — P. 307–322.

12. Shang R., Li H.-O., Cao G., Xiao M., Tu T., Jiang H., Guo G.-P. Photon-assisted-tunneling in a coupled double quantum dot under high microwave excitation powers // *Appl. Phys. Lett.* — 2013. — Vol. 103, no. 16. — P. 162109.
13. Shibata K., Umeno A., Cha K. M., Hirakawa K. Photon-Assisted Tunneling through Self-Assembled InAs Quantum Dots in the Terahertz Frequency Range // *Phys. Rev. Lett.* — 2012. — Vol. 109, no. 7. — P. 077401.
14. Niu C., Lin D. Intersubband transitions in photon-assisted tunneling through a quantum wire // *Phys. Rev. B* — 2000. — Vol. 62, no. 7. — P. 4578–4585.
15. Vasko F. T., O'Reilly, E. P. Resonant photon-assisted tunneling between independently contacted quantum wells // *Phys. Rev. B* — 2003. — Vol. 67, no. 23. — P. 235317.
16. Daley A. J., Simon J. Effective three-body interactions via photon-assisted tunneling in an optical lattice // *Phys. Rev. A* — 2014. — Vol. 89, no. 5. — P. 053619.
17. Houle S., Thibault K., Pinsolle E., Lupien, C. Reulet, B. Photon-assisted dynamical Coulomb blockade in a tunnel junction // *Phys. Rev. B* — 2019. — Vol. 100, no. 4. — P. 045304.
18. Mielnik-Pyszczorski A., Gawarecki K., Machnikowski, P. Phonon-assisted tunneling of electrons in a quantum well/quantum dot injection structure // *Phys. Rev. B* — 2015. — Vol. 91, no. 19. — P. 195421.
19. Cai W., Zheng T. F., Hu P., Lax M., Shum K., Alfano R. R. Photon-assisted resonant tunneling through a double-barrier structure for infrared radiation detection // *Phys. Rev. Lett.* — 1990. — Vol. 65, no. 1. — P. 104–107.
20. Tkach M. V., Seti Ju. O., Voitsekhivska O. M. Quasi-stationary states of electrons interacting with strong electromagnetic field in two-barrier resonance tunnel nanostructure // *Condens. Matter Phys.* — 2012. — Vol. 15, no. 3. — P. 33703.
21. Tkach N. V., Seti Ju. A. On the transmission channels and current-voltage characteristics of a double-barrier nanostructure driven by dc electric and electromagnetic fields of arbitrary strength // *Semiconductors* — 2014. — Vol. 15, no. 3. — P. 550–595.

22. Tkach M. V., Seti Ju. O., Voitsekhivska O. M., Pytiuk O. Ju. Photon- and phonon-assisted transport of electrons in resonant tunneling structures // *J. Phys. Stud.* — 2017. — Vol. 21, no. 1-2. — P. 1702.
23. Terazzi R., Faist J. A density matrix model of transport and radiation in quantum cascade lasers // *New J. Phys.* — 2010. — Vol. 12, no. 1. — P. 033045.
24. Tkach M. V., Seti Ju. O., Voitsekhivska O. M. Transmission canals for the photon-assisted transport of electron through the double-barrier resonant tunneling structure // *Acta Phys. Pol. A.* — 2013. — Vol. 124, no. 1. — P. 94–101.
25. Li L., Luo X., Yang X., Wang M., Lü X., Wu Y. An analog of photon-assisted tunneling in a periodically modulated waveguide array // *Sci Rep.* — 2016. — Vol. 6, no. 10. — P. 35744.
26. Pashkovskii A. B. High transparency of a two-photon scattering channel in triple-barrier structures // *JETP Lett.* — 2009. — Vol. 89, no. 1. — P. 30–34.
27. Pashkovskii A. B. Resonance propagation of electrons through three-barrier structures in a two-frequency electric field // *Semiconductors.* — 2011. — Vol. 45, no. 6. — P. 743–748.
28. Saidi I. Single- and double-resonant enhancement of second-harmonic generation in asymmetric AlGaIn/GaN/AlGaIn quantum well heterostructures // *J. Appl. Phys.* — 2019. — Vol. 125, no. 18. — P. 185702.
29. Seti Ju. O., Tkach M. V., Voitsekhivska O. M. Dynamic conductivity of symmetric three-barrier plane nanosystem in constant electric field // *Condens. Matter Phys.* — 2011. — Vol. 14, no. 1. — P. 13701.
30. Tkach M. V., Seti Ju. O. Theory of the properties of resonant-tunneling nanostructures as active elements of quantum cascade lasers and detectors // *Ukr. J. Phys.* — 2013. — Vol. 58, no. 2. — P. 182–188.
31. Baz' A.I., Zeldovich, Ya.B., Perelomov, A.M. Scattering, reactions and decay in nonrelativistic quantum mechanics — Washington, D.C: NASA, 1969.
32. Hofstetter D., Giorgetta F. R., Baumann E., Yang Q., Manz C., Köhler K. Midinfrared quantum cascade detector with a spectrally broad response // *Appl. Phys. Lett.* — 2008. — Vol. 93, no. 22. — P. 221106.

33. Kumar S., Chan C. W. I., Hu Q., Reno J. L. Two-well terahertz quantum-cascade laser with direct intrawell-phonon depopulation // *Appl. Phys. Lett.* — 2009. — Vol. 95, no. 14. — P. 141110.
34. Kapsalidis F., Shahmohammadi M., Süess M. J., Wolf J. M., Gini E., Beck M., Faist J. Dual-wavelength DFB quantum cascade lasers: sources for multi-species trace gas spectroscopy // *Appl. Phys. B* — 2018. — Vol. 124, no. 6. — P. 107.
35. Shahmohammadi M., Kapsalidis F., Süess M. J., Gini E., Beck M., Hundt M., Faist J. Multi-wavelength distributed feedback quantum cascade lasers for broadband trace gas spectroscopy // *Semicond. Sci. Technol.* — 2019. — Vol. 34, no. 8. — P. 083001.
36. Kainz M. A., Schönhuber S., Limbacher B., Andrews A. M., Detz H., Strasser G., Unterrainer K. Color switching of a terahertz quantum cascade laser // *Appl. Phys. Lett.* — 2019. — Vol. 114, no. 19. — P. 191104.
37. Khanal S., Gao L., Zhao L., Reno J. L., Kumar S. High-temperature operation of broadband bidirectional terahertz quantum-cascade lasers // *Sci. Rep.* — 2016. — Vol. 6, no. 1. — P. 32978.
38. Becker C., Vasanelli A., Sirtori C., Bastard, G. Electron–longitudinal optical phonon interaction between Landau levels in semiconductor heterostructures // *Phys. Rev. B* — 2004. — Vol. 69, no. 11. — P. 115328.
39. Saha S., Kumar J. Rate equation modelling and investigation of quantum cascade detector characteristics // *Superlattices Microstruct.* — 2016. — Vol. 98, no. 10. — P. 70–77.
40. Hillbrand J., Krüger L. M., Cin S. D., Knötig H., Heidrich J. High-speed quantum cascade detector characterized with a mid-infrared femtosecond oscillator // *Opt. Express* — 2021. — Vol. 29, no. 4. — P. 5774–5781.
41. Luo T., Garg J., Shiomi J., Esfarjani K., Chen G. Gallium arsenide thermal conductivity and optical phonon relaxation times from first-principles calculations // *Opt. Express* — 2013. — Vol. 101, no. 1. — P. 16001.

42. Zhang J.-Z., Dyson A., Ridley, B. K. Momentum relaxation due to polar optical phonons in AlGa_N/Ga_N heterostructures // *Phys. Rev. B* — 2011. — Vol. 84, no. 15. — P. 155310.
43. Tian Z., Esfarjani K., Shiomi J., Henry A. S., Chen G. On the importance of optical phonons to thermal conductivity in nanostructures // *Appl. Phys. Lett.* — 2011. — Vol. 99, no. 5. — P. 053122.
44. Liu D.-F., Li X.-Y., Cheng Y., Sun Y.-H. Hot-optical-phonon effects on electron relaxation in optically pumped step quantum well structures // *Phys. E: Low-Dimens. Syst. Nanostructures.* — 2012. — Vol. 44, no. 7–8. — P. 1535–1538.
45. Markel V. A., Geller M. R. One-phonon relaxation of localized electronic states in anharmonic nanoparticles // *J. Phys.: Condens. Matter* — 2000 — Vol. 12, no. 34. — P. 7569.
46. Konsek S. L., Pearsall T. P. Dynamics of electron tunneling in semiconductor nanostructures // *Phys. Rev. B* — 2003. — Vol. 67, no. 4. — P. 045306.
47. Schubotz M., Brandes T. Random backaction in tunneling of single electrons through nanostructures // *Phys. Rev. B*. — 2011. — Vol. 84, no. 7. — P. 075340.
48. Díaz-Tendero S., Borisov A. G., Gauyacq J. P. Different quantization behaviors of electrons confined in nanostructures at surfaces // *Phys. Rev. B* — 2007. — Vol. 76, no. 15. — P. 155428.
49. Baines Y., Buckley J., Biscarrat J. Coherent tunneling in an AlGa_N/Al_N/Ga_N heterojunction captured through an analogy with a MOS contact // *Sci Rep.* — 2017. — Vol. 7, no. 11. — P. 8177.
50. Sakr S., Kotsar Y., Tchernycheva M., Warde E., Isac N., Monroy E., Julien F. H. Resonant Tunneling Transport in a Ga_N/Al_N Multiple-Quantum-Well Structure // *Appl. Phys. Express* — 2012. — Vol. 5, no. 5. — P. 052203.
51. Klemmer P. S., Mityagin Y. A., Telenkov M. P., Nagaraja K. K., Elantsev D. A., Amiri S. Resonant tunneling in GaAs/AlGaAs quantum well system for solar photovoltaics // *Superlattices Microstruct.* — 2020. — Vol. 140, no. 4. — P. 106472.

52. Kuehn W., Gaal P., Reimann K., Woerner M., Elsaesser T., Hey R. Terahertz-induced interband tunneling of electrons in GaAs // *Phys. Rev. B* — 2010. — Vol. 82, no. 7. — P. 075204.
53. Jandieri K., Baranovskii S. D., Rubel O., Stolz W., Gebhard F., Guter W., Bett A. W. Resonant electron tunneling through defects in GaAs tunnel diodes // *J. Appl. Phys.* — 2010. — Vol. 104, no. 9. — P. 094506.
54. Tkach M., Seti J., Voitsekhivska O. Spectrum of electron in quantum well within the linearly-dependent effective mass model with the exact solution // *Superlattices Microstruct.* — 2017. — Vol. 109, no. 9. — P. 905–914.
55. Ivlev B. Tunneling in a magnetic field // *Phys. Rev. A*. — 2006. — Vol. 73, no. 5. — P. 052106.
56. Pinaud O. Transient simulations of a resonant tunneling diode // *J. Appl. Phys.* — 2002. — Vol. 92, no. 4. — P. 1987–1994.
57. Mennemann J.-F., Jünger A., Kosina H. Transient Schrödinger–Poisson simulations of a high-frequency resonant tunneling diode oscillator // *J. Comput. Phys.* — 2013. — Vol. 239, no. 4. — P. 187–205.
58. Newaz A. K. M., Song W., Mendez E. E., Lin Y., Nitta J. Shot-noise characteristics of triple-barrier resonant-tunneling diodes // *Phys. Rev. B* — 2005. — Vol. 71, no. 19. — P. 195303.
59. Wójcik P., Adamowski J., Wołoszyn M., Spisak B. J. Shot-noise characteristics of triple-barrier resonant-tunneling diodes // *Phys. Rev. B* — 2012. — Vol. 86, no. 16. — P. 165318.
60. Morandi O., Modugno M. Multiband envelope function model for quantum transport in a tunneling diode // *Phys. Rev. B* — 2005. — Vol. 71, no. 23. — P. 235331.
61. Majer N., Schöll E. Resonant control of stochastic spatiotemporal dynamics in a tunnel diode by multiple time-delayed feedback // *Phys. Rev. E* — 2009. — Vol. 79, no. 1. — P. 011109.

62. Berland K. A general solution to the Schrödinger–Poisson equation for a charged hard wall: Application to potential profile of an AlN/GaN barrier structure // *Superlattices Microstruct.* — 2011. — Vol. 50, no. 4. — P. 411–418.
63. Rached A., Bhourri A., Sakr S., Lazzari J.-L., Belmabrouk H. Self-consistent vertical transport calculations in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ based resonant tunneling diode // *Superlattices Microstruct.* — 2016. — Vol. 91, no. 3. — P. 37–50.
64. Almansour S. Theoretical study of electronic properties of resonant tunneling diodes based on double and triple AlGaAs barriers // *Results Phys.* — 2020. — Vol. 17, no. 6. — P. 103089.
65. Batı M. Resonant tunneling properties of inverted Morse double quantum barrier // *Chin. J. Phys.* — 2018. — Vol. 56, no. 2. — P. 593–597.
66. Ershov M., Ryzhii V., Saito K. Capacitance-voltage characteristics of multiple-quantum-well semiconductor heterostructures // *J. Phys. D: Appl. Phys.* — 1995. — Vol. 28, no. 10. — P. 2118.
67. Brounkov P. N., Benyattou T., Guillot G., Clark S. A. Admittance spectroscopy of InAlAs/InGaAs single-quantum-well structure with high concentration of electron traps in InAlAs layers // *J. Appl. Phys.* — 1995. — Vol. 77, no. 1. — P. 240–243.
68. Pashkovskii A.B. Electron passage through quantum-size structures in high-frequency fields // *JETP*. — 1996. — Vol. 96, no. 7. — P. 1063.
69. Pashkovskii A.B. Alternating space charge and ambiguity of quantum states in double-barrier structures // *Semiconductors* — 2000. — Vol. 34, no. 3. — P. 334–343.
70. Pashkovskii A.B. Suppression of electron transitions between split energy levels in three-barrier structures by a varying space-charge field // *Semiconductors* — 2009. — Vol. 43, no. 10. — P. 1316–1321.
71. Tkach M. V., Seti Ju. O. Quasistationary electron states and the conductivity of a symmetric three-barrier resonant tunnel structure // *Ukr. J. Phys.* — 2010. — Vol. 55, no. 7. — P. 798–807.

72. Zhai S.-Q., Liu J.-Q., Wang X.-J., Zhuo N., Liu F.-Q., Wang, Z.-G., Lu, W.-P. 19 μm quantum cascade infrared photodetectors // *Appl. Phys. Lett.* — 2013. — Vol. 102, no. 19. — P. 191120.
73. Sirtori, C., Faist J., Capasso F., Sivco D. L., Hutchinson A. L., Cho A. Y. Mid-infrared (8.5 μm) semiconductor lasers operating at room temperature // *IEEE Photonics Technol. Lett.* — 1997. — Vol. 9, no. 3. — P. 294–296.
74. Berland K., Andersson T. G., Hyldgaard P. Polarization-balanced design of heterostructures: Application to AlN/GaN double-barrier structures // *Phys. Rev. B* — 2011. — Vol. 84, no. 24. — P. 245313.
75. Edmunds C., Tang L., Cervantes M., Shirazi H. D, M., Shao J., Grier A., Malis O. Comparative study of intersubband absorption in AlGaN/GaN and AlInN/GaN superlattices: Impact of material inhomogeneities // *Phys. Rev. B* — 2013. — Vol. 88, no. 23. — P. 235306.
76. Machhadani H., Tchernycheva M., Sakr S., Rigutti L., Colombelli R., Warde E., Julien F. H. Intersubband absorption of cubic GaN/Al(Ga)N quantum wells in the near-infrared to terahertz spectral range // *Phys. Rev. B* — 2011. — Vol. 83, no. 7. — P. 075313.
77. Hamazaki J., Kunugita H., Ema K., Kikuchi A., Kishino K. Intersubband relaxation dynamics in GaN/Al N multiple quantum wells studied by two-color pump-probe experiments // *Phys. Rev. B* — 2005. — Vol. 71, no. 16. — P. 165334.
78. Giehler M., Hey R., Kleinert P., Grahn H. T. Intersubband transitions in dilute (In, Ga) (As, N)(Al, Ga)As multiple quantum wells analyzed within a three-band $k\cdot p$ model // *Phys. Rev. B* — 2006. — Vol. 73, no. 8. — P. 085322.
79. Saha S., Kumar J. Role of interface roughness scattering, temperature, and structural parameters on the performance characteristics of III-nitride quantum cascade detectors // *J. Appl. Phys.* — 2017. — Vol. 121, no. 5. — P. 053104.
80. Zhang H., Xue J., Fu Y., Li L., Sun Z., Yao J., Hao Y. Demonstration of highly repeatable room temperature negative differential resistance in large area AlN/GaN double-barrier resonant tunneling diodes // *J. Appl. Phys.* — 2020. — Vol. 129, no. 1. — P. 014502.

81. Fu H., Lu Z., Huang X., Chen H., Zhao Y. Crystal orientation dependent intersubband transition in semipolar AlGaIn/GaN single quantum well for optoelectronic applications // *J. Appl. Phys.* — 2016. — Vol. 119, no. 17. — P. 174502.
82. Fu H., Chen H., Huang X., Lu Z., Zhao Y. Theoretical analysis of modulation doping effects on intersubband transition properties of semipolar AlGaIn/GaN quantum well // *J. Appl. Phys.* — 2017. — Vol. 121, no. 1. — P. 014501.
83. Vardi A., Kheirodin N., Nevou L., Machhadani H., Vivien L., Crozat P., Bahir G. High-speed operation of GaN/AlGaIn quantum cascade detectors at $\lambda \approx 1.55 \mu\text{m}$ // *Appl. Phys. Lett.* — 2008. — Vol. 93, no. 19. — P. 193509.
84. Beeler M., Bougerol C., Bellet-Amalric E., Monroy E. Pseudo-square AlGaIn/GaN quantum wells for terahertz absorption // *Appl. Phys. Lett.* — 2014. — Vol. 105, no. 13. — P. 131106.
85. Castellano F., Bismuto A., Amanti M. I., Terazzi R., Beck M., Blaser S., Faist J. Loss mechanisms of quantum cascade lasers operating close to optical phonon frequencies // *J. Appl. Phys.* — 2011. — Vol. 109, no. 10. — P. 102407.
86. Jovanović V. D., Höfling S., Indjin D., Vukmirović N., Ikonić Z., Harrison, P., Forchel A. Influence of doping density on electron dynamics in GaAs/AlGaAs quantum cascade lasers // *J. Appl. Phys.* — 2006. — Vol. 99, no. 10. — P. 103106.
87. Dang Y. X., Fan W. J. Design of $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{N}_y/\text{AlAs}$ quantum cascade structures for $3.4 \mu\text{m}$ intersubband emission // *J. Appl. Phys.* — 2007. — Vol. 101, no. 8. — P. 084504.
88. Commin J. P., Revin D. G., Zhang S. Y., Krysa A. B., Cockburn J. W. High performance, high temperature $\lambda \approx 3.7 \mu\text{m}$ InGaAs/AlAs(Sb) quantum cascade lasers // *Appl. Phys. Lett.* — 2009. — Vol. 95, no. 11. — P. 111113.
89. Semtsiv M. P., Wienold M., Dressler S., Masselink W. T. Short-wavelength ($\lambda \approx 3.05 \mu\text{m}$) InP-based strain-compensated quantum-cascade laser // *Appl. Phys. Lett.* — 2007. — Vol. 90, no. 5. — P. 051111.

90. Khanna S. P., Salih M., Dean P., Davies A. G., Linfield E. H. Electrically tunable terahertz quantum-cascade laser with a heterogeneous active region // *Appl. Phys. Lett.* — 2009. — Vol. 95, no. 18. — P. 181101.
91. Bismuto A., Beck M., Faist J. High power Sb-free quantum cascade laser emitting at 3.3 μm above 350 K // *Appl. Phys. Lett.* — 2011. — Vol. 98, no. 19. — P. 191104.
92. Bandyopadhyay N., Bai Y., Tsao S., Nida S., Slivken S., Razeghi M. Room temperature continuous wave operation of $\lambda\sim 3\text{--}3.2\ \mu\text{m}$ quantum cascade lasers // *Appl. Phys. Lett.* — 2012. — Vol. 101, no. 24. — P. 241110.
93. Bernardini F., Fiorentini V., Vanderbilt D. Spontaneous polarization and piezoelectric constants of III-V nitrides // *Phys. Rev. B* — 1997. — Vol. 56, no. 16. — P. R10024(R).
94. Bernardini F., Fiorentini V. Macroscopic polarization and band offsets at nitride heterojunctions // *Phys. Rev. B* — 1998. — Vol. 57, no. 16. — P. R9427(R).
95. Fara A., Bernardini F., Fiorentini V. Theoretical evidence for the semi-insulating character of AlN // *J. Appl. Phys.* — 1999. — Vol. 85, no. 3. — P. 2001–20003.
96. Bernardini F., Fiorentini V. Spontaneous versus Piezoelectric Polarization in III–V Nitrides: Conceptual Aspects and Practical Consequences // *Phys. Status Solidi B* — 1999. — Vol. 216, no. 1. — P. 391–398.
97. Fiorentini V., Bernardini F., Della Sala F., Di Carlo A., Lugli P. Effects of macroscopic polarization in III-V nitride multiple quantum wells // *Phys. Rev. B* — 1999. — Vol. 60, no. 15. — P. 8849–8857.
98. Fiorentini V., Bernardini F. Incorporation, diffusion, and electrical activity of Li in GaN // *Phys. Rev. B* — 2000. — Vol. 61, no. 19. — P. 12598–12601.
99. Zoroddu A., Bernardini F., Ruggerone P., Fiorentini V. First-principles prediction of structure, energetics, formation enthalpy, elastic constants, polarization, and piezoelectric constants of AlN, GaN, and InN: Comparison of local and gradient-corrected density-functional theory // *Phys. Rev. B* — 2001. — Vol. 64, no. 4. — P. 045208.

100. Bernardini F., Fiorentini V. Nonlinear macroscopic polarization in III-V nitride alloys // *Phys. Rev. B* —2001. — Vol. 64, no. 8. — P. 085207.
101. Ambacher O., Majewski J., Miskys C., Link A., Hermann M., Eickhoff M., Eastman L. F. Pyroelectric properties of Al(In)GaN/GaN hetero- and quantum well structures // *J. Phys.: Condens. Matter* —2002. — Vol. 14, no. 13. — P. 3399–3434.
102. Foutz B. E., Ambacher O., Murphy M. J., Tilak V., Eastman L. F. Polarization-Based Calculation of the Dielectric Tensor of Polar Crystals // *Phys. Status Solidi B* — 1999. — Vol. 79, no. 20. — P. 3958–3961.
103. Bernardini F., Fiorentini V., Vanderbilt D. Polarization-Based Calculation of the Dielectric Tensor of Polar Crystals // *Phys. Rev. Lett.* — 1999. — Vol. 79, no. 20. — P. 3958–3961.
104. Bernardini F., Fiorentini V. Electronic dielectric constants of insulators calculated by the polarization method // *Phys. Rev. B* — 1998. — Vol. 58, no. 23. — P. 15292–15294.
105. Bernardini F., Fiorentini V., Vanderbilt D. Accurate calculation of polarization-related quantities in semiconductors // *Phys. Rev. B* — 2001. — Vol. 63, no. 19. — P. 193201.
106. Ambacher O., Dimitrov R., Stutzmann M., Foutz B. E., Murphy M. J., Smart J. A., Eastman, L. F. Role of Spontaneous and Piezoelectric Polarization Induced Effects in Group-III Nitride Based Heterostructures and Devices // *Phys. Status Solidi B* — 1999. — Vol. 216, no. 1. — P. 381–389.
107. Metcalfe G. D., Shen H., Wraback M., Hirai A., Koblmüller G., Gallinat C. S., Speck J. S. Nitride semiconductors as terahertz sources based on spontaneous and piezoelectric polarization // *Phys. Status Solidi C* — 2010. — Vol. 7, no. 10. — P. 2455–2458.
108. Ridley B. K., Schaff W. J., Eastman, L. F. Theoretical model for polarization superlattices: Energy levels and intersubband transitions // *J. Appl. Phys.* — 2003. — Vol. 94, no. 6. — P. 3972–3978.

109. Terashima W., Hirayama H. Design and fabrication of terahertz quantum cascade laser structure based on III-nitride semiconductors // *Phys. Status Solidi C* — 2009. — Vol. 6, no. S2. — P. S615–S618.
110. Liu A., Chuang S.-L., Ning C. Z. Piezoelectric field-enhanced second-order nonlinear optical susceptibilities in wurtzite GaN/AlGa_N quantum wells // *Appl. Phys. Lett.* — 2000. — Vol. 76, no. 3. — P. 333–335.
111. Cen L. B., Shen B., Huang C. C., Xu F. J., Qin Z. X., Zhang G. Y., Lu W. Influence of polarization-induced electric fields on coherent electron tunneling in AlN/GaN coupled double quantum wells // *J. Appl. Phys.* — 2010. — Vol. 108, no. 11. — P. 113107.
112. Cen L. B., Shen B., Qin Z. X., Zhang G. Y. Influence of applied electric fields on the absorption coefficient and subband energy distances of intersubband transitions in AlN/GaN coupled double quantum wells // *J. Appl. Phys.* — 2008. — Vol. 104, no. 6. — P. 063114.
113. Lei S. Y., Shen B., Cao L., Yang Z. J., Zhang G. Y. Intersubband transitions in asymmetric Al_xGa_{1-x}N/GaN double quantum wells // *J. Appl. Phys.* — 2007. — Vol. 101, no. 12. — P. 123108.
114. Li J. M., Lü Y. W., Li D. B., Han X. X., Zhu Q. S., Liu X. L., Wang Z. G. Effect of spontaneous and piezoelectric polarization on intersubband transition in Al_xGa_{1-x}N–GaN quantum well // *J. Vac. Sci. Technol. B* — 2004. — Vol. 22, no. 6. — P. 2568–2573
115. Cen L. B., Shen B., Qin Z. X., Zhang G. Y. Influence of polarization induced electric fields on the wavelength and the refractive index of intersubband transitions in AlN/GaN coupled double quantum wells // *J. Appl. Phys.* — 2009. — Vol. 105, no. 9. — P. 093109.
116. Gryshchenko S. V., Klymenko M. V., Shulika O. V., Sukhoivanov I. A., Lysak V. V. Temperature dependence of electron transport in GaN/AlGa_N quantum cascade detectors // *Superlattices Microstruct.* — 2012. — Vol. 52, no. 4. — P. 894–900.

117. Wu F., Tian W., Yan W. Y., Zhang J., Sun S. C., Dai J. N., Chen C. Q. Terahertz intersubband transition in GaN/AlGa_N step quantum well // *J. Appl. Phys.* — 2013. — Vol. 113, no. 15. — P. 154505.
118. Berland K., Stattin M., Farivar R., Sultan D. M. S., Hyldgaard P., Larsson A., Andersson T. G. Temperature stability of intersubband transitions in AlN/GaN quantum wells // *Appl. Phys. Lett.* — 2010. — Vol. 97, no. 4. — P. 043507.
119. Saha S., Kumar J. Fully self-consistent analysis of III-nitride quantum cascade structures // *J. Comput. Electron.* — 2016. — Vol. 15, no. 4. — P. 1531–1540.
120. Pearton P. GaN and ZnO-Based materials and devices: Springer Series in Materials Science, vol. 156 — Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2012.
121. Hedin L., Lundqvist B. I. Explicit local exchange-correlation potentials // *J. Phys. C* — 1972. — Vol. 4, no. 1. — P. 2064–2083.
122. Sakr S., Giraud E., Tchernycheva M., Isac N., Quach P., Warde E., Julien F. A simplified GaN/AlGa_N quantum cascade detector with an alloy extractor // *Appl. Phys. Lett.* — 2012. — Vol. 101, no. 25. — P. 251101.
123. Vardi A., Sakr S., Mangeney J., Kandaswamy P. K., Monroy E., Tchernycheva M., Bahir G. Femto-second electron transit time characterization in GaN/AlGa_N quantum cascade detector at 1.5 micron // *Appl. Phys. Lett.* — 2011. — Vol. 99, no. 20. — P. 202111.
124. Boyko I. V. Anisotropic wurtzite resonance tunneling structures: stationary spectrum of electron and oscillator strengths of quantum transitions // *J. Phys. Stud.* — 2018. — Vol. 22, no. 1. — P. 1701.
125. Leconte S., Gerrer L., Monroy E. Electronic transport through GaN/AlN single barriers: Effect of polarisation and dislocations // *Microelectron. J.* — 2009. — Vol. 40, no. 2. — P. 339–341.
126. Saidi I., Mejri H., Baira M., Maaref H. Electronic and transport properties of AlInN/AlN/GaN high electron mobility transistors // *Superlattices Microstruct.* — 2015. — Vol. 84, no. 8. — P. 113–125.

127. Pardeshi H., Raj G., Pati S., Mohankumar N., Sarkar C. K. Influence of barrier thickness on AlInN/GaN underlap DG MOSFET device performance // *Superlattices Microstruct.* — 2013. — Vol. 60, no. 8. — P. 47–59.
128. Li Y., Tian W., Zhang J. Study of electronic transport properties in AlGa_N/AlN/GaN/AlGa_N double-heterojunction transistor // *J. Appl. Phys.* — 2019. — Vol. 26, no. 7. — P. 075707.
129. Tang J., Liu G., Mao B., Ali S., Zhao G., Yang J. Influence of AlGa_N back-barrier on irradiation tolerance of AlGa_N/AlN/GaN HEMTs // *Phys. Lett. A* — 2021. — Vol. 410, no. 9. — P. 127527.
130. Rodrigues C. G., Vasconcellos Á. R., Luzzi R. Theoretical calculations of nonlinear electronic transport behavior in III-nitrides: GaN and AlN // *Phys. Status Solidi B* — 2009. — Vol. 426, no. 2. — P. 417–425.
131. Gleize J., Renucci M. A., Frandon J., Demangeot F. Anisotropy effects on polar optical phonons in wurtzite GaN/AlN superlattices // *Phys. Rev. B* — 1999. — Vol. 60, no. 13. — P. 15985.
132. Shi J. Interface optical-phonon modes and electron–interface-phonon interactions in wurtzite GaN/AlN quantum wells // *Phys. Rev. B* — 2003. — Vol. 68, no. 16. — P. 165335.
133. Lü J. T., Cao J. C. Confined optical phonon modes and electron-phonon interactions in wurtzite GaN/ZnO quantum wells // *Phys. Rev. B* — 2005. — Vol. 71, no. 15. — P. 155304.
134. Zhang L., Shi J., Tansley T. L. Polar vibration spectra of interface optical phonons and electron-interface optical phonon interactions in a wurtzite GaN-AlN nanowire // *Phys. Rev. B* — 2005. — Vol. 71, no. 24. — P. 245324.
135. Anderson D. R., Zakhleniuk N. A., Babiker M., Ridley B. K., Bennett C. R. Polar-optical phonon-limited transport in degenerate GaN-based quantum wells // *Phys. Rev. B* — 2001. — Vol. 63, no. 24. — P. 245313.
136. Lee K. G., Kim D. S., Yee K. J., Lee H. S. Control of coherent optical phonon excitations in GaN using femtosecond pulse shaping // *Phys. Rev. B* — 2006. — Vol. 74, no. 11. — P. 113201.

137. Mora-Ramos M. E. Electron–Optical-Phonon Corrections in the Conduction Band of Wurtzite $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ // *Phys. Status Solidi B* — 2000. — Vol. 119, no. 2. — P. R1–R2.
138. Goñi A. R., Siegle H., Syassen K., Thomsen C., Wagner J.-M. Effect of pressure on optical phonon modes and transverse effective charges in GaN and AlN // *Phys. Rev. B* — 2001. — Vol. 64, no. 3. — P. 035205.
139. Medeiros S. K., Albuquerque E. L., Farias G. A., Vasconcelos M. S., Anselmo D. H. A. L. Dispersion relation of the optical phonon frequencies in AlN/GaN superlattices // *Phys. Status Solidi C* — 2005. — Vol. 2, no. 7. — P. 2512–2515.
140. Cros A., Pomer F. Phonon dispersion in GaN/AlN non-polar quantum wells: confinement and anisotropy // *Phys. Status Solidi C* — 2007. — Vol. 4, no. 7. — P. 2515–2518.
141. Darakchieva V., Monemar B., Paskova T., Einfeldt S., Hommel D., Lourdudoss S. Phonons in strained AlGa_N/Ga_N superlattices // *Phys. Status Solidi C* — 2007. — Vol. 4, no. 1. — P. 170–174.
142. Zhang L. Full optical phonon states and their dispersive spectra of a wurtzite GaN/AlGa_N superlattice: Quantum size effect // *Phys. Status Solidi B* — 2011. — Vol. 248, no. 9. — P. 2120–2127.
143. Huang W. D., Ren Y. J., Yan J. F., Wu Q., Zhang S. H. Propagating optical phonons and their properties in GaN/AlN quantum wells // *Eur. Phys. J. Appl. Phys.* — 2011. — Vol. 54, no. 1. — P. 11301.
144. Huang W. D., Ren Y. J., Xia C. X., Wei S. Y. Dispersions of propagating optical phonons and electron-phonon interactions in wurtzite GaN/ZnO quantum wells // *Eur. Phys. J. Appl. Phys.* — 2012. — Vol. 57, no. 1. — P. 11301.
145. Mora-Ramos M. E., Gaggero-Sager L. M. Electron-optical-phonon scattering rates in AlGa_N/Ga_N-based single heterostructures // *Phys. Status Solidi C* — 2005. — Vol. 2, no. 8. — P. 3002–3005.
146. Zhao F. Q., Zhang M. Bound polarons in wurtzite GaN/Al_xGa_{1-x}N quantum well // *Phys. Status Solidi C* — 2011. — Vol. 8, no. 1. — P. 62–65.

147. Li L., Liu D., Shi J.-J. Electron quasi-confined-optical-phonon interactions in wurtzite GaN/AlN quantum wells // *Eur. Phys. J. B* — 2005. — Vol. 44, no. 4. — P. 401–413.
148. Zhang L. Binding energies of bound polaron in a wurtzite nitride nanowire: Contributions of IO and QC phonon modes // *Phys. Status Solidi B* — 2012. — Vol. 249, no. 3. — P. 544–554.
149. Qu Y., Ban S. L. Electron mobility in wurtzite nitride quantum wells limited by optical-phonons and its pressure effect // *Eur. Phys. J. B* — 2009. — Vol. 69, no. 5. — P. 321–329.
150. Yan Z. W., Ban S. L., Liang X. X. Effect of electron-phonon interaction on surface states in zinc-blende GaN, AlN, and InN under pressure // *Eur. Phys. J. B* — 2003. — Vol. 35, no. 1. — P. 41–47.
151. Yan Z. W., Ban S. L., Liang X. X. Phonon and electron-hole plasma effects on binding energies of excitons in wurtzite GaN/ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ quantum wells // *Eur. Phys. J. B* — 2012. — Vol. 85, no. 2. — P. 67.
152. Huang W. D., Ren Y. J., Wei S. Y., Wang J. H. The interface optical phonon and electron-phonon interaction in GaN/AlN spherical heterostructures // *Eur. Phys. J. Appl. Phys.* — 2008. — Vol. 43, no. 1. — P. 73–77.
153. Park K., Mohamed A., Dutta M., Stroschio M. A., Bayram C. Electron Scattering via Interface Optical Phonons with High Group Velocity in Wurtzite GaN-based Quantum Well Heterostructure // *Sci Rep.* — 2018. — Vol. 8, no. 10. — P. 15947.
154. Zhou X., Wang Z., Qu Y., Ban S. Electron mobility influenced by optical phonons in AlGaIn/GaN MISHEMTs with different gate dielectrics // *Appl. Phys. A* — 2020. — Vol. 126, no. 10. — P. 825.
155. Zhang L., Shi J.-J., Wang Q. Fröhlich electron–phonon interaction Hamiltonian and potential distribution of a polar optical phonon mode in wurtzite nitride triangular nanowires // *J. Appl. Phys.* — 2022. — Vol. 132, no. 1. — P. 014301.

156. Pokatilov E. P., Nika D. L., Balandin A. A. Phonon spectrum and group velocities in AlN/GaN/AlN and related heterostructures // *Superlattices Microstruct.* — 2003. — Vol. 33, no. 3. — P. 155–171.
157. Pokatilov E. P., Nika D. L., Balandin A. A. Confined electron-confined phonon scattering rates in wurtzite AlN/GaN/AlN heterostructures // *J. Appl. Phys.* — 2003. — Vol. 95, no. 10. — P. 5626–5632.
158. Pokatilov E. P., Nika D. L., Balandin A. A. A phonon depletion effect in ultrathin heterostructures with acoustically mismatched layers // *Appl. Phys. Lett.* — 2004. — Vol. 85, no. 5. — P. 825–827.
159. Pokatilov E. P., Nika D. L., Askerov A. S., Balandin A. A. Size-quantized oscillations of the electron mobility limited by the optical and confined acoustic phonons in the nanoscale heterostructures // *J. Appl. Phys.* — 2007. — Vol. 102, no. 5. — P. 054304.
160. Rytov S. M. Acoustic properties of a finely layered medium // *Akust. Zh.* — 1956. — Vol. 71, no. 2. — P. 71–83.
161. Zan Y. H., Ban S. L., Chai Y. J., Qu Y. Acoustic phonon modes in asymmetric $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}/\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}$ quantum wells // *Superlattices Microstruct.* — 2017. — Vol. 102, no. 2. — P. 64–73.
162. Zhu L., Luo H. On the role of piezoelectricity in phonon properties and thermal conductivity of GaN nanofilms // *Theor. App. Mech. Lett.* — 2016. — Vol. 6, no. 6. — P. 277–281.
163. Wang J., Zhu L., Yin W. Effects of heterogeneity and prestress field on phonon properties of semiconductor nanofilms // *Comput. Mater. Sci.* — 2018. — Vol. 145, no. 1. — P. 14–23.
164. Zhu L., Luo H. Phonon properties and thermal conductivity of GaN nanofilm under prestress and surface/interface stress // *J. Alloys Compd.* — 2016. — Vol. 685, no. 11. — P. 619–625.
165. Tang X., Jiachuan W., Zhu L., Yin W.-Y. Simulating stress-tunable phonon and thermal properties in heterostructured AlN/GaN/AlN-nanofilms // *Mater. Res. Express* — 2018. — Vol. 6, no. 1. — P. 015018.

166. Chatterjee B., Dundar C., Beechem T. E., Heller E., Kendig D., Kim H., Choi S. Nanoscale electro-thermal interactions in AlGaN/GaN high electron mobility transistors // *J. Appl. Phys.* — 2020. — Vol. 127, no. 4. — P. 044502.
167. Feng Z.-Y., Ban S.-L., Zhu J. Binding energies of impurity states in strained wurtzite GaN/Al_xGa_{1-x}N heterojunctions with finitely thick potential barriers // *Chin. Phys. B* — 2014. — Vol. 23, no. 6. — P. 066801.
168. Feng Z.-Y., Ban S.-L., Zhu J. Acoustic phonon scattering on the two-dimensional electron gas in wurtzite Al_xGa_{1-x}N/GaN/Al_yGa_{1-y}N double heterostructures: The ternary mixed crystal effect and size effect // *Solid State Commun.* — 2013. — Vol. 161, no. 5. — P. 5–8.
169. Komirenko S. M., Kim K. W., Demidenko A. A., Kochelap V. A., Strosio M. A. Amplification of transverse acoustic phonons in quantum well heterostructures with piezoelectric interaction // *J. Appl. Phys.* — 2001. — Vol. 90, no. 8. — P. 3934–3941.
170. Komirenko S. M., Kim K. W., Kochelap V. A., Strosio M. A. Confinement and amplification of terahertz acoustic phonons in cubic heterostructures // *Phys. B: Condens. Matter* — 2002. — Vol. 316–317, no. 5. — P. 365–368.
171. Glavin B. A., Kochelap V. A., Linnik T. L. Generation of high-frequency coherent acoustic phonons in a weakly coupled superlattice // *Appl. Phys. Lett.* — 1999. — Vol. 74, no. 23 — P. 3525–3527.
172. Komirenko S. M., Kim K. W., Demidenko A. A., Kochelap V. A., Strosio M. A. Generation and amplification of sub-THz coherent acoustic phonons under the drift of two-dimensional electrons // *Phys. Rev. B* — 2000. — Vol. 62, no. 11. — P. 7459–7469.
173. Cavill S. A., Challis L. J., Kent A. J., Ouali F. F., Akimov A. V., Henini M. Acoustic phonon-assisted tunneling in GaAs/AlAs superlattices // *Phys. Rev. B* — 2002. — Vol. 66, no. 23. — P. 235320.
174. Trigo M., Fainstein A., Jusserand B., Thierry-Mieg V. Finite-size effects on acoustic phonons in GaAs/AlAs superlattices // *Phys. Rev. B* — 2002. — Vol. 66, no. 12. — P. 125311.

175. Kloeffel C., Trif M., Loss D. Acoustic phonons and strain in core/shell nanowires // *Phys. Rev. B* — 2014. — Vol. 90, no. 1. — P. 115419.
176. Li Z., Chandler C. J., Marsiglio F. Perturbation theory of the mass enhancement for a polaron coupled to acoustic phonons // *Phys. Rev. B* — 2011. — Vol. 83, no. 4. — P. 045104.
177. Weng C.-L., Chen I.-C., Tsai Y.-C. Electron–acoustic-phonon interaction in core/shell nanocrystals and in quantum-dot quantum wells // *Phys. Rev. B* — 2007. — Vol. 76, no. 19. — P. 195313.
178. Glavin B. A., Kubakaddi S. S. Influence of dielectric environment on screening of electron-phonon interaction in quantum well structures // *Phys. Rev. B* — 2006. — Vol. 74, no. 3. — P. 033312.
179. Sanders G. D., Stanton C. J. Carrier dynamics and coherent acoustic phonons in nitride heterostructures // *Phys. Rev. B* — 2006. — Vol. 74, no. 20. — P. 205303.
180. Wendler L., Grigoryan V. G. Acoustic interface waves in sandwich structures // *Surf. Sci.* — 1988. — Vol. 206, no. 1-2. — P. 203–224.
181. Strosio M. A., Dutta M. Phonons in Nanostructures — Cambridge University Press, 2001.
182. Pesach A., Gross E., Huang C.-Y., Lin Y.-D., Vardi A., Schacham S. E., Bahir G. Non-polar m-plane intersubband based InGaN/(Al)GaN quantum well infrared photodetectors // *Appl. Phys. Lett.* — 2013. — Vol. 103, no. 2 — P. 022110.
183. Xu L., Curwen C. A., Reno J. L., Williams B. S. High performance terahertz metasurface quantum-cascade VECSEL with an intra-cryostat cavity // *Appl. Phys. Lett.* — 2017. — Vol. 111, no. 10 — P. 101101.
184. Tkach M. V., Seti Ju. O., Grynyshyn Y. B., Voitsekhivska O. M. Quasi-stationary states of electrons interacting with strong electromagnetic field in two-barrier resonance tunnel nano-structure // *Condens. Matter Phys.* — 2014. — Vol. 17, no. 2. — P. 23704.

185. Gao X., Botez D., Knezevic I. X -valley leakage in GaAs-based midinfrared quantum cascade lasers: A Monte Carlo study // *J. Appl. Phys.* — 2007. — Vol. 101, no. 6. — P. 063101.
186. Yan Q., Rinke, P., Scheffler M., Van de Walle C. G. Strain effects in group-III nitrides: Deformation potentials for AlN, GaN, and InN // *Appl. Phys. Lett.* — 2009. — Vol. 95, no. 12 — P. 121111.
187. Yan Q., Rinke P., Janotti A., Scheffler M., Van de Walle C. G. Effects of strain on the band structure of group-III nitrides // *Phys. Rev. B* — 2014. — Vol. 90, no. 12. — P. 125118.
188. Boyko I. V., Petryk M. R., Fraissard J. Acoustic phonons in multilayer nitride-based AlN/GaN resonant tunneling structures // *Nano Express* — 2020. — Vol. 1, no. 1. — P. 010009.
189. Boyko I., Petryk M., Fraissard J. Spectrum and normalized modes of acoustic phonons in multilayer nitride-based nanostructure // *Eur. Phys. J. B* — 2020. — Vol. 93, no. 3. — P. 57.
190. Sesion P. D., Albuquerque E. L., Vasconcelos M. S., Mauriz P. W., Freire V. N. Acoustic phonon dynamics in strained cubic and hexagonal GaN/Al₂O₃ superlattices // *Eur. Phys. J. B* — 2006. — Vol. 51, no. 4. — P. 583–591.
191. Sesion P. D., Albuquerque E. L., Chesman C., Freire V. N. Acoustic phonon transmission spectra in piezoelectric AlN/GaN Fibonacci phononic crystals // *Eur. Phys. J. B* — 2007. — Vol. 58, no. 4. — P. 379–387.
192. Bannov N., Mitin V., Stroschio M. Confined acoustic phonons in a free-standing quantum well and their interaction with electrons // *Phys. Status Solidi B* — 1994. — Vol. 183, no. 1. — P. 131–142.
193. Quach P., Liu S. F., Jollivet A., Wang D., Cheng J. Y., Isac N., Wang X. Q. A GaN/AlN quantum cascade detector with a broad response from the mid-infrared (4.1 μm) to the visible (550 nm) spectral range // *Appl. Phys. Lett.* — 2020. — Vol. 116, no. 17 — P. 171102.
194. Vurgaftman I., Meyer J. R.. Band parameters for nitrogen-containing semiconductors // *J. Appl. Phys.* — 2003. — Vol. 94, no. 6. — P. 3675–3696.

195. Bungaro C., Rapcewicz K., Bernholc J. Ab initio phonon dispersions of wurtzite AlN, GaN, and InN // *Phys. Rev. B* — 2000. — Vol. 61, no. 10. — P. 6720–6725.
196. Boyko I., Petryk M., Fraissard J. Theory of the shear acoustic phonons spectrum and their interaction with electrons due to the piezoelectric potential in AlN/GaN nanostructures of plane symmetry // *Low Temp. Phys.* — 2021. — Vol. 47, no. 2. — P. 141–154.
197. Boyko I., Petryk M., Fraissard J. Investigation of the electron-acoustic phonon interaction via the deformation and piezoelectric potentials in AlN/GaN resonant tunneling nanostructures // *Superlattices Microstruct.* — 2021. — Vol. 156, no. 8. — P. 106928.
198. Boyko I., Petryk M. Interaction of electrons with acoustic phonons in AlN/GaN resonant tunnelling nanostructures at different temperatures // *Condens. Matter Phys.* — 2020. — Vol. 23, no. 3. — P. 33708.
199. Balandin A., Wang K.L. Significant decrease of the lattice thermal conductivity due to phonon confinement in a free-standing semiconductor quantum well // *Phys. Rev. B* — 1998. — Vol. 58, no. 3. — P. 1544.
200. Zou J., Balandin A. Phonon heat conduction in a semiconductor nanowire // *J. Appl. Phys.* — 2001. — Vol. 89, no. 5. — P. 2932–2938.
201. Knox R.S. Theory of Excitons.—1st ed. — New York and London: Academic Press, 1963.—P. 207.
202. Wang D., Chen Z., Su. J, Wang T., Zhang B., Rong X., Wang P., Tan W., Guo S., Zhang J., Shen B., Wan X. Controlling Phase-Coherent Electron Transport in III-Nitrides: Toward Room Temperature Negative Differential Resistance in AlGaIn/GaN Double Barrier Structures // *Adv. Funct. Mater.* — 2021. — Vol. 31, no. 8. — P. 2007216.
203. Hillbrand J., Krüger L.M., Cin S.D., Knötig H., Heidrich J., Andrews A.M., Strasser G., Keller U., Schwarz B. High-speed quantum cascade detector characterized with a mid-infrared femtosecond oscillator // *Opt. Express.* — 2021. — Vol. 29, no. 4. — P. 5774-578.

204. Schwarz B., Reininger P., Detz H.; Zederbauer T., Andrews A.M., Schrenk W., Strasser G. Monolithically Integrated Mid-Infrared Quantum Cascade Laser and Detector // *Sensors*. — 2013. — Vol. 13, no. 2. — P. 2196-2205.
205. Cheng F., Zhang J., Sun Y, Zhuo N., Zhai S., Liu J., Wang L., Liu S., and Liu F. High performance distributed feedback quantum cascade laser emitting at $\lambda \sim 6.12 \mu\text{m}$ // *Opt. Express*. — 2022. — Vol. 30, no. 4. — P. 5848-5854.
206. Sakr S., Crozat P., Gacemi D., Kotsar Y., Pesach A., Quach P., Isac N., Tchernycheva M., Vivien L., Bahir G., Monroy E., Julien F.H. GaN/AlGaIn waveguide quantum cascade photodetectors at $\lambda = 1.55 \mu\text{m}$ with enhanced responsivity and 40 GHz frequency bandwidth // *Appl. Phys. Lett.* — 2013. — Vol. 102, no. 1. — P. 011135.
207. Sakr S., Giraud E., Dussaigne A., Tchernycheva M., Grandjean N., Julien F.H. Two-color GaN/AlGaIn quantum cascade detector at short infrared wavelengths of 1 and $1.7 \mu\text{m}$ // *Appl. Phys. Lett.* — 2012. — Vol. 100, no. 18. — P. 181103.
208. Hofstetter D., Bour D.P., Beck H. Proposal for Deep-UV Emission from a Near-Infrared AlN/GaN-Based Quantum Cascade Device Using Multiple Photon Up-Conversion // *Crystals* — 2023. — Vol. 13, no. 3. — P. 494.
209. Saczuk E., Kamiński J. Z. Resonant tunnelling in the presence of intense laser fields // *Phys. Status Solidi B* — 2023. — Vol. 240, no. 3. — P. 603-609.
210. Faisal F. H. M., Kamiński J. Z., Saczuk E. Photoemission and high-order harmonic generation from solid surfaces in intense laser fields // *Phys. Rev. A* — 2005. — Vol. 72, no. 2. — P. 023412.
211. Fring A., Frith T. Quasi-exactly solvable quantum systems with explicitly time-dependent Hamiltonians // *Phys. Lett. A* — 2019. — Vol. 383, no. 2-3. — P. 158-163.
212. Fring A., Taira T., Tenney R. Time-dependent C-operators as Lewis-Riesenfeld invariants in non-Hermitian theories // *Phys. Lett. A* — 2022. — Vol. 425, no. 11. — P. 128458.

213. Fring A., Tenney R. Exactly solvable time-dependent non-Hermitian quantum systems from point transformations // *Phys. Lett. A* — 2021. — Vol. 410, no. 9. — P. 127548.
214. Pedrosa I.A., Rosas A., Guedes I. Exact quantum motion of a particle trapped by oscillating fields // *J. Phys. A: Math. Gen.* — 2005. — Vol. 38, no. 35. — P. 7757.
215. Pedrosa I.A., Rosas A. Electromagnetic Field Quantization in Time-Dependent Linear Media // *Phys. Rev. Lett.* — 2009. — Vol. 103, no. 1. — P. 010402.
216. Pedrosa I.A. Quantum electromagnetic waves in nonstationary linear media // *Phys. Rev. A*. — 2011. — Vol. 83, no. 3. — P. 032108.
217. Pedrosa I.A., De Lima D.A.P. Coherent states and geometric phases of a generalized damped harmonic oscillator with time-dependent mass and frequency // *Int. J. Mod. Phys. B*. — 2014. — Vol. 28, no. 26. — P. 1450177.
218. Pedrosa I.A. Adiabatic and nonadiabatic evolution of a generalized damped harmonic oscillator // *Mod. Phys. Lett. A*. — 2021. — Vol. 36, no. 28. — P. 2150201.
219. Lewis Jr. H.R., Riesenfeld W.B. An exact quantum theory of the time-dependent harmonic oscillator and of a charged particle in a time-dependent electromagnetic field // *J. Math. Phys.* — 1969. — Vol. 10, no. 8. — P. 1458 - 1473.
220. Sobhani H., Hassanabadi H. Exact Solutions for Time-Dependent Schrödinger Equation in Presence of the Pöschl–Teller Double-Ring Shaped Harmonic Potential // *Acta Phys. Pol. A*. — 2019. — Vol. 136, no. 1. — P. 17 - 20.
221. Sobhani H., Hassanabadi H. Davydov–Chaban Hamiltonian in presence of time-dependent potential // *Phys. Lett. B*. — 2016. — Vol. 760, no. 9. — P. 1-5.
222. Lohe M. A. Exact time dependence of solutions to the time-dependent Schrödinger equation // *J. Phys. A: Math. Gen.* — 2009. — Vol. 42, no. 3. — P. 035307.

223. Rau A.R.P., Unnikrishnan, K. Evolution operators and wave functions in a time-dependent electric field // *Phys. Lett. A* — 1996. — Vol. 222, no. 5. — P. 304-308.
224. Guedes I. Solution of the Schrödinger equation for the time-dependent linear potential // *Phys. Rev. A* — 2001. — Vol. 63, no. 3. — P. 034102.
225. Feng M. Complete solution of the Schrödinger equation for the time-dependent linear potential // *Phys. Rev. A* — 2001. — Vol. 64, no. 3. — P. 034101.
226. Bauer J. Comment on “Solution of the Schrödinger equation for the time-dependent linear potential” // *Phys. Rev. A* — 2002. — Vol. 65, no. 3. — P. 036101.
227. Bekkar H., Benamira F., Maamache M. Comment on “Solution of the Schrödinger equation for the time-dependent linear potential” // *Phys. Rev. A* — 2003. — Vol. 68, no. 1. — P. 016101.
228. Piprek J. Nitride Semiconductor Devices: Principles and Simulation.—1st ed. — Weinheim: WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2007.—P. 493.
229. Pedrosa I. A. Exact wave functions of a harmonic oscillator with time-dependent mass and frequency // *Phys. Rev. A* — 1997. — Vol. 55, no. 4. — P. 3219.
230. Pedrosa I. A., Serra G. P., Guedes I. Wave functions of a time-dependent harmonic oscillator with and without a singular perturbation // *Phys. Rev. A* — 1997. — Vol. 56, no. 5. — P. 4300.
231. Pedrosa I. A., Guedes I. Wave function of the time-dependent inverted harmonic oscillator // *Mod. Phys. Lett. B*. — 2002. — Vol. 16, no. 17. — P. 637-643.
232. Li L., Bo-Zang L. Lewis–Riesenfeld phases and Berry phases for the harmonic oscillator with time-dependent frequency and boundary conditions, // *Int. J. Mod. Phys. B*. — 2003. — Vol. 17, no. 10. — P. 2045–2052.
233. Pedrosa I. A. Complete exact quantum states of the generalized time-dependent harmonic oscillator // *Mod. Phys. Lett. B*. — 2004. — Vol. 18, no. 24. — P. 1267–1274.

234. Chen X, Torrontegui E., Muga J. G. Lewis-Riesenfeld invariants and transitionless quantum driving // *Phys. Rev. A* — 2011. — Vol. 83, no. 6. — P. 062116.
235. Bessa V., Guedes I. Wave functions of log-periodic oscillators // *J. Math. Phys.*— 2011. — Vol. 52, no. 6. — P. 062106.
236. Pedrosa I. A., Petrov A. Y., Rosas A. On the electrodynamics in time-dependent linear media // *Eur. Phys. J. D*— 2012. — Vol. 66, no. 12. — P. 309.
237. Ünal N. Quasi-coherent states for harmonic oscillator with time-dependent parameters // *J. Math. Phys.*— 2012. — Vol. 53, no. 1. — P. 012102.
238. Guerrero J., López-Ruiz F. F. On the Lewis–Riesenfeld (Dodonov–Man'ko) invariant method // *Phys. Scr.* — 2015. — Vol. 90, no. 7. — P. 074046.
239. Liang M-L., Zhang Z-G., Zhong K-S. General Solution and Quantum Phases of the Time-Dependent Linear Potential // *Phys. Scr.* — 2004. — Vol. 70, no. 2-3. — P. 98.
240. Laroze D., Gutiérrez G., Rivera R, Yáñez J. M. Dynamics of a rotating particle under a time-dependent potential: exact quantum solution from the classical action // *Phys. Scr.* — 2008. — Vol. 78, no. 1. — P. 015009.
241. Seleznyova A. N. Unitary transformations for the time-dependent quantum oscillator // *Phys. Rev. A* — 1995. — Vol. 51, no. 2. — P. 950.
242. Martinez J., Polatdemir E. Semiclassical approach to time-dependent tunnelling // *Eur. Phys. J. C* — 2001. — Vol. 21, no. 6. — P. 389–395.
243. Lozano-Gómez D., Kelkar N.G. Electron interaction with the environment in tunnel ionization // *Ann. Phys.* — 2020. — Vol. 415, no. 4. — P. 168112.
244. Fan K., Zheng Y., Ren W., Ding S.. Exact quantum solutions of general driven time-dependent quantum quadratic system // *Int. J. Quantum Chem.* — 2007. — Vol. 107, no. 6. — P. 1355–1366.
245. Fratini F., Safari L. Quantum mechanical evolution operator in the presence of a scalar linear potential: discussion on the evolved state, phase shift generator and tunneling // *Phys. Scr.* — 2014. — Vol. 89, no. 8. — P. 085004.

246. Breuer H. P., Dietz K., Holthaus M. A remark on the Kramers-Henneberger transformation // *Phys. Lett. A* — 1992. — Vol. 165, no. 4. — P. 341–346.
247. Berry M. V., Balazs N. L. Nonspreading wave packets // *Am. J. Phys.* — 1979. — Vol. 47, no. 3. — P. 264–267.
248. Song D.-Y. Unitary transformation for the system of a particle in a linear potential // *EPL* — 2003. — Vol. 65, no. 2. — P. 622.
249. Lin C.-L., Hsiung T.-C., Huang M.-J. The general potential $V(x,t)$ in which Airy wave packets remain nonspreading // *EPL* — 2008. — Vol. 83, no. 3. — P. 30002.
250. Song D.-Y. Exact quantum states of a general time-dependent quadratic system from classical action // *Phys. Rev. A* — 1999. — Vol. 59, no. 4. — P. 2616.
251. Song D.-Y. Unitary relation between a harmonic oscillator of time-dependent frequency and a simple harmonic oscillator with and without an inverse-square potential // *Phys. Rev. A* — 2000. — Vol. 62, no. 1. — P. 014103.
252. Wang X.-B., Kwek L. C., Oh C. H. Quantum and classical geometric phase of the time-dependent harmonic oscillator // *Phys. Rev. A* — 2000. — Vol. 62, no. 3. — P. 032105.
253. Song D.-Y. Geometric Phase, Hannay's Angle, and an Exact Action Variable // *Phys. Rev. Lett.* — 2000. — Vol. 85, no. 6. — P. 1141.
254. Song D.-Y. Periodic Hamiltonian and Berry's phase in harmonic oscillators // *Phys. Rev. A* — 2000. — Vol. 61, no. 2. — P. 024102.
255. Yeon K. H, Um C. I, George T. F. Time-dependent general quantum quadratic Hamiltonian system // *Phys. Rev. A* — 2003. — Vol. 68, no. 5. — P. 052108.
256. Cruz H., Schuch D., Castaños O., Rosas-Ortiz O. Time-evolution of quantum systems via a complex nonlinear Riccati equation. I. Conservative systems with time-independent Hamiltonian // *Ann. Phys.* — 2015. — Vol. 360, no. 9. — P. 44–60.

257. Khantoul B., Bounames A., Maamache M. On the invariant method for the time-dependent non-Hermitian Hamiltonians // *Eur. Phys. J. Plus.* — 2017. — Vol. 132, no. 5. — P. 258.
258. Ramos B. F., Pedrosa I. A., de Lima L. Lewis and Riesenfeld approach to time-dependent non-Hermitian PT -Hamiltonians having symmetry // *Eur. Phys. J. Plus.* — 2018. — Vol. 133, no. 11. — P. 449.
259. Pedrosa I. A., Ramos B. F., Bakke K., de Lima A. L. Quantum theory of a non-Hermitian time-dependent forced harmonic oscillator having PT symmetry // *Int. J. Mod. Phys. A.* — 2019. — Vol. 34, no. 30. — P. 1950187.
260. Fring A., Tenney R. Time-independent approximations for time-dependent optical potentials // *Eur. Phys. J. Plus* — 2020. — Vol. 135, no. 1. — P. 163.
261. Leuliet A., Vasanelli A., Wade A., Fedorov G., Smirnov D., Bastard G., Sirtori C. Electron scattering spectroscopy by a high magnetic field in quantum cascade lasers // *Phys. Rev. B* — 2006. — Vol. 73, no. 8. — P. 085311.
262. Wade A., Fedorov G., Smirnov D., Kumar S., Williams B. S., Hu Q., Reno. J. L. Magnetic-field-assisted terahertz quantum cascade laser operating up to 225 K // *Nature Photon.* — 2009. — Vol. 3, no. 12. — P. 41–45.
263. Wade A., Fedorov G., Smirnov D., Kumar S., Williams B. S., Hu Q., Reno. J. L. InGaAs/AlInGaAs THz quantum cascade lasers operating up to 195 K in strong magnetic field // *New J. Phys.* — 2015. — Vol. 17, no. 2. — P. 023050.
264. Kim C.S., Olendski O. The effect on currents of anticrossings in the energy spectrum in quantum wells under crossed electric and magnetic fields // *Semicond. Sci. Technol.* — 1997. — Vol. 12, no. 7. — P. 788.
265. Choi J. R., Zhang S. Thermodynamics of the standard quantum harmonic oscillator of time-dependent frequency with and without inverse quadratic potential // *J. Phys. A: Math. Gen.* — 2002. — Vol. 35, no. 12. — P. 2845.
266. Ramos B. F., Pedrosa I. A., Bakke K. Effects of a non-Hermitian potential on the Landau quantization // *Int. J. Mod. Phys. A* — 2019. — Vol. 34, no. 12. — P. 1950072.

267. Guo Y., Wang H., Gu B.-L., Kawazoe Y. Electric-field effects on electronic tunneling transport in magnetic barrier structures // *Phys. Rev. B* —2000. — Vol. 61, no. 3. — P. 1728.
268. Wang H., Zhang Y., Xu H. The effect of transverse wave vector and magnetic fields on resonant tunneling times in double-barrier structures // *J. Appl. Phys.* — 2007. — Vol. 101, no. 2. — P. 023712.
269. Ku S., Ipsita S. S., Mahapatra P. K., Mishra D. K. 2-D tunneling structures and increased peak to valley current ratio in double barrier quantum systems under perpendicular electric and magnetic bias // *J. Magn. Magn. Mater.* —2023. — Vol. 580, no. 8. — P. 170870.
270. Chin S., Mitev V., Giraud E., Maulini R., Blaser S., Boiko D. L. Electrically driven frequency blue-chirped emission in Fabry–Perot cavity quantum cascade laser at room temperature // *Appl. Phys. Lett.*— 2021. — Vol. 118, no. 2. — P. 021108.
271. Wang K., Grange T., Lin T., Wang L., Jehn Z., Birner S., Yun J., Terashima W., Hirayama H. Broadening mechanisms and self-consistent gain calculations for GaN quantum cascade laser structures // *Appl. Phys. Lett.* — 2018. — Vol. 113, no. 6. — P. 061109.
272. Quach P., Jollivet A., Babichev A., Isac N., Morassi M., Lemaitre A., Yunin P. A., Frayssinet E., de Mierry P., Jeannin M., Bousseksou A., Colombelli R., Tchernycheva M., Cordier Y., Julien F. H. A 5.7 THz GaN/AlGaIn quantum cascade detector based on polar step quantum wells // *Appl. Phys. Lett.* — 2022. — Vol. 120, no. 17. — P. 171103.
273. Mensz P. M., Dror B., Ajay A., Bougerol C., Monroy E., Orenstein M., Bahir G. Design and implementation of bound-to-quasibound GaN/AlGaIn photovoltaic quantum well infrared photodetectors operating in the short wavelength infrared range at room temperature // *J. Appl. Phys.* — 2019. — Vol. 125, no. 17. — P. 174505.

274. Shi J.-j. Interface optical-phonon modes and electron–interface-phonon interactions in wurtzite GaN/AlN quantum wells // *Phys. Rev. B*. — 2003. — Vol. 68, no. 16. — P. 165335.
275. Li L., Liu D., Shi, J.-j. Electron quasi-confined-optical-phonon interactions in wurtzite GaN/AlN quantum wells // *Eur. Phys. J. B* — 2005. — Vol. 44, no. 5. — P. 401–413.
276. Zhang L. Full optical phonon states and their dispersive spectra of a wurtzite GaN/AlGaIn superlattice: Quantum size effect // *Phys. Status Solidi B* — 2011. — Vol. 248, no. 9. — P. 2120-2127.
277. Huang W. D., Ren Y. J., Xia C. X., Wei S. Y. Dispersions of propagating optical phonons and electron-phonon interactions in wurtzite GaN/ZnO quantum wells // *Eur. Phys. J. Appl. Phys* — 2012. — Vol. 57, no. 1. — P. 11301.
278. Qu Y., Ban S. Electron mobility in wurtzite nitride quantum wells limited by optical-phonons and its pressure effect // *Eur. Phys. J. B* — 2009. — Vol. 69, no. 5. — P. 321–329.
279. Zhou X., Wang Z., Qu Y., Ban S. Electron mobility influenced by optical phonons in AlGaIn/GaN MISHEMTs with different gate dielectrics // *Appl. Phys. A* — 2020. — Vol. 126, no. 5. — P. 825.
280. Smith M., Lin J. Y., Jiang H. X., Khan A., Chen Q., Salvador A., Botchkarev A., Kim W., Morkoc H. Exciton-phonon interaction in InGaIn/GaN and GaN/AlGaIn multiple quantum wells // *Appl. Phys. Lett.* — 1997. — Vol. 70, no. 21. — P. 2882–2884.
281. Viswanath A. K., Lee J. J., Kim D., Lee C. R., Leem J. Y. Exciton-phonon interactions, exciton binding energy, and their importance in the realization of room-temperature semiconductor lasers based on GaN // *Phys. Rev. B* — 1998. — Vol. 58, no. 24. — P. 16333.
282. Xu S. J., Zheng L. X., Cheung S. H., Xie M. H., Tong S. Y., Yang H. Comparative study on the broadening of exciton luminescence linewidth due to phonon in zinc-blende and wurtzite GaN epilayers // *Appl. Phys. Lett.* — 2002. — Vol. 81, no. 23. — P. 4389–439.

283. Ostapenko I. A, Hönig G., Rodt S., Schliwa A., Hoffmann A., Bimberg D., Dachner M.-R., Richter M., Knorr A., Kako S., Arakawa Y. Exciton acoustic-phonon coupling in single GaN/AlN quantum dots // *Phys. Rev. B* — 2012. — Vol. 85, no. 8. — P. 081303(R).
284. Bouzidi M., Soltani S., Halidou I., Chine Z., El Jani B. Photoreflectance investigation of exciton-acoustic phonon scattering in GaN grown by MOVPE // *Solid State Sci.* — 2016. — Vol. 54, no. 4. — P. 59-63.
285. Grigorchuk N. Exciton-phonon coupling functions in uniaxial crystals // *Phys. Rev. B* — 1997. — Vol. 55, no. 1. — P. 888.
286. Grigorchuk N. Exciton-phonon coupling and exciton damping due to acoustic phonons in anisotropic nonpolar crystals // *J. Phys.: Condens. Matter* — 1999. — Vol. 11, no. 2. — P. 417.
287. Sedhain A., Li J., Lin J. Y., Jiang H. X. Probing exciton-phonon interaction in AlN epilayers by photoluminescence // *Appl. Phys. Lett.* — 2009. — Vol. 95, no. 6. — P. 061106.
288. Ajia I. A., Edwards P. R., Liu Z., Yan J. C., Martin R. W., Roqan I. S. Excitonic localization in AlN-rich $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}$ multi-quantum-well grain boundaries // *Appl. Phys. Lett.* — 2014. — Vol. 105, no. 12. — P. 122111.
289. Bayerl D., Kioupakis E. Room-temperature stability of excitons and transverse-electric polarized deep-ultraviolet luminescence in atomically thin GaN quantum wells // *Appl. Phys. Lett.* — 2019. — Vol. 115, no. 13. — P. 131101.
290. Staszczak G., Trzeciakowski W., Monroy E., Bercha A., Muzioł G., Skierbiszewski C., Perlin P., Suski T. Hydrostatic pressure dependence of indirect and direct excitons in InGaN/GaN quantum wells // *Phys. Rev. B* — 2020. — Vol. 101, no. 8. — P. 085306.

ПОДЯКИ

- Вся моя наукова робота присвячується світлій пам'яті моєї матері Ольги Бойко. Завдяки їй, мені ще школяру 5 класу відкрився світ фізики й математики. Разом із нею я пройшов роки фізичних олімпіад, перемоги та поразки, але на завжди давала мені сил, щоб не здаватись і знову повертатись й перемагати усі труднощі. Усі роки мого заняття наукою вона була поряд і підтримувала мене у всіх скрутних ситуаціях. Без неї я б ніколи не зміг досягнути й елементарної долі того, що є зараз.
- Хочу подякувати своєму батькові Володимирі Бойку за постійну підтримку і безмежну віру у мої сили. В ці темні та скрутні часи, я завжди можу звернутись за підтримкою та настановою. Дякую за здатність завжди змусити мене працювати і завершувати почате, як би важко то не було.
- Хочу подякувати своєму вчителю - докторові фізико-математичних наук, професору Ткачу Миколі Васильовичу за те, що свого часу відкрив для мене новий світ науки, за те, що в будь-який час був готовий допомогти цінною порадою та настановою й підтримував мене як в наукових пошуках так і в житті.
- Хочу подякувати докторові фізико-математичних наук, професору Петрику Михайлу Романовичу за цінні настанови, увагу та підтримку.
- Хочу подякувати за підтримку всім своїм колегам із кафедри теоретичної фізики Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича за дружню підтримку та увагу.
- Хочу подякувати своїм колегам з Тернопільського національного технічного університету імені Івана Пулюя, які завжди вірили в мої сили та допомагали цінними порадами.

ДОДАТОК А

СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ЗДОБУВАЧА ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

- 1*. Ткач М. В., Сеті Ю. О., **Бойко І. В.**, Гринишин Ю. Б.. Взаємодія електронів з обмеженими фононами у багат шаровій резонансно-тунельній структурі // *Фіз. хім. тверд. тіла.* - 2014. - Т. 15, № 1. - С. 20-28. [категорія «А»]
- 2*. **Boyko I. V.**, Grynishyn Yu. B., Seti Ju. O., Tkach M. V. The influence of static and dynamic spatial charges on electronic active conductivity of three-barrier resonant tunneling structures // *J. Phys. Stud.* 2014. Vol. 18, No. 4. P. 4702-1 –4702-10 [Scopus, SCImago Q4]
- 3*. Ткач М. В., Сеті Ю. О., **Бойко І.В.**, Паньків М.В. Роль двофотонних електронних переходів у роботі квантових лазерів // *Сенсор. електрон. мікросистем. технології*, 2014. -Т. 111, № 4. - С. 9-17. [категорія «Б»]
- 4*. Сеті Ю. О., **Бойко І. В.**, Паньків М. В. Теорія динамічної провідності трибар'єрної резонансно-тунельної структури з двофотонними лазерними переходами // *Фіз. хім. тверд. тіла.* 2015. - Т. 16, № 1. - С. 7-13. [категорія «А»]
- 5*. Gryschuk A. M., **Boiko I. V.** Influence of dimensional static and dynamic charges on conduction in the active zone of a quantum cascade laser // *Semicond. phys. quantum electron. optoelectron.* 2015. Vol. 18, No. 2. P. 123-127. [Web of Science, категорія «А»]
- 6*. **Boyko I. V.**, Petryk M. R., Tsupryk H. B. Contribution of two-photon detector electronic transitions in the formation of dynamic conductivity of three-barrier resonant tunneling structures // *J. Nano- Electron. Phys.* 2015. Vol. 7 No. 4, P. 04078 [Scopus, SCImago Q3]
- 7*. **Boyko I.V.** Role of Two-Photon Electronic Transitions in the Formation of Active Dynamic Conductivity in a Three-Barrier Resonance Tunneling Structure with an Applied DC Electric Field // *Ukr. J. Phys.* 2016. Vol. 61, No.1. P. 66-74 [Scopus, SCImago Q2]

- 8*. **Boyko I. V.**, Gryshuk A. M. The Spectrum of Transverse Acoustic Phonons in Planar Multilayer Semiconductor Nanostructures // *J. Nano- Electron. Phys.* 2016. Vol. 8 No. 4, P. 04001 [Scopus, SCImago Q3]
- 9*. **Бойко І. В.**, Гришук А. М. Вплив статичного та динамічного просторових зарядів на спектральні параметри та активну динамічну провідність резонансно-тунельних структур з постійним електричним полем // *Фіз. хім. тверд. тіла.* 2016. - Т. 17, № 1. - С. 21-30. [категорія «А»]
- 10*. **Boyko I. V.**, Tkach M. V., Seti Ju. O. Self-Consistent Calculation of Potential Profile of GaN/AlN Resonance Tunnelling Structures // *Phys. Chem. Solid St.*, 2017. Vol. 18, No. 3. P. 288-296 [Web of Science, категорія «А»]
- 11*. **Boyko I. V.**, Petryk M. R. Influence of the Space Charge on Tunneling of Electrons and Their Conductivity by the Resonance Tunneling Structures in the Constant Electric Field // *J. Nano- Electron. Phys.* 2017. Vol. 9, No 3, P. 03030 [Scopus, SCImago Q3]
- 12*. **Boyko I. V.** Anisotropic wurtzite resonance tunneling structures: stationary spectrum of electron and oscillator strengths of quantum transitions // *J. Phys. Stud.*, 2018. Vol. 22, No 1. P. 1701 [Scopus, SCImago Q4]
- 13*. **Boyko I. V.** Analytical method for calculation of the potential profiles of nitride-based resonance tunneling structures // *Condens. Matter Phys.* 2018. Vol. 21, No. 4, P. 43701 [Scopus, SCImago Q3, IF=1.095]
- 14*. **Boyko I. V.**, Petryk M. R. Shear Acoustic Phonons in Multilayer Arsenide Semiconductor Nanostructures // *J. Nano- Electron. Phys.* 2019. Vol. 11, No 1. P.01019 [Scopus, SCImago Q3]
- 15*. **Boyko I.V.**, Petryk M.R., Fraissard J. Spectrum and normalized modes of acoustic phonons in multilayer nitride-based nanostructure // *Eur. Phys. J. B.* 2020. Vol. 93, No. 3. P. 57 [Scopus, SCImago Q2, IF=1.440]
- 16*. **Boyko I.V.**, Petryk M.R., Fraissard J. Acoustic phonons in multilayer nitride-based AlN/GaN resonant tunneling structures // *Nano Express.* 2020. Vol. 1 No 1. P. 010009 [Scopus]

- 17*. **Boyko I. V.** and Petryk M. R. Electron scattering on acoustic phonons in plane semiconductor GaN/AlN nanostructures // *Proc. SPIE 11369, Fourteenth International Conference on Correlation Optics*, 1136915 (6 February 2020); ISSN 0277786X [Scopus]
- 18*. **Boyko I. V.**, Petryk M. R. Interaction of electrons with acoustic phonons in AlN/GaN resonant tunnelling nanostructures at different temperatures // *Condens. Matter Phys.* 2020. Vol. 23, No. 3. P. 33708 [Scopus, SCImago Q3, IF=0.581]
- 19*. **Boyko I. V.**, Petryk M. R. Electron-acoustic Phonon Interaction in AlAs/GaAlAs Resonance Tunneling Nanostructures // *J. Nano- Electron. Phys.* 2020. Vol. 12, No 6, P. 06030 [Scopus, SCImago Q3]
- 20*. **Boyko I. V.**, Petryk M. R., Fraissard J. Theory of the shear acoustic phonons spectrum and their interaction with electrons due to the piezoelectric potential in AlN/GaN nanostructures of plane symmetry // *Low Temp. Phys.* 2021. Vol. 47, No. 2. P. 159-172 [Scopus, SCImago Q3, IF=0.825]
- 21*. **Boyko I.**, Petryk M., Fraissard J. Investigation of the electron-acoustic phonon interaction via the deformation and piezoelectric potentials in AlN/GaN resonant tunneling nanostructures // *Superlattices Microstruct.* 2021. Vol. 156, No. 8. P. 106928 [Scopus, SCImago Q2, IF=2.658]
- 22*. **Boyko I.**, Petryk M. Tunneling transport in open nitride resonant tunneling structures taking into account the acoustic phonons: An variational approach // *Physica B Condens. Matter.* 2022. Vol. 636, No. 1. P. 413862 [Scopus, SCImago Q2, IF=2.988]
- 23*. **Boyko I.**, Petryk M. and Mykhailyshyn R. Excitons in resonant tunnelling structures based on AlN/GaN/AlN/AlGaIn/AlN nitride: spectral dependences and intensities of interband optical transitions // *Ukr. J. Phys. Opt.* 2022. Vol. 23, No. 3. P. 180 – 191 [Scopus, SCImago Q3, IF=3.9]
- 24*. **Boyko I.** Exciton-phonon interaction in planar nitride nanostructures: The case of acoustic phonons // *Phys. Rev. B.* 2023. Vol. 108, No. 7. P. 075403 [Scopus, SCImago Q1, IF=3.7]

- 25*. **Boyko I.**, Petryk M., Lebovka N. Application of the Lewis-Riesenfeld quantum mechanical invariant method for description of electron tunneling transport in nitride multilayer quantum well nanostructures // *Phys. Lett. A*. 2023. Vol. 489, P. 129152 [Scopus, SCImago Q2, IF=2.6]
- 26*. **Boyko I.**, Petryk M., Lebovka N. Tunnel transport problem for open multilayer nitride nanostructures with an applied constant magnetic field and time-dependent potential: An exact solution // *Phys. Rev. B*. 2024. Vol. 110, No. 4. P. 045438 [Scopus, SCImago Q1, IF=3.2]

ТЕЗИ ДОПОВІДЕЙ НА НАУКОВИХ КОНФЕРЕНЦІЯХ

- 27*. **Бойко І. В.**, Ткач М. В., Сеті Ю. О. Електрон-фононна взаємодія багат шарових резонансно-тунельних структурах // VI Українська наукова конференція з фізики напівпровідників, Чернівці, Україна, 30 вересня – 4 жовтня 2013 р.:Тези доповідей. С. 66–67.
- 28*. Ткач М. В., Сеті Ю. О., **Бойко І. В.**, Паньків М. В. Роль двофотонних електронних переходів у роботі квантових каскадних лазерів // 6-а Міжнародна науково-технічна конференція “Сенсорна електроніка та мікросистемні технології”, Одеса, Україна, 28 вересня – 3 жовтня 2014 р.:Тези доповідей. С. І-14.
- 29*. **Бойко І. В.**, Грищук А. М. Вплив просторового статичного та динамічного заряду на провідність активної зони квантового каскадного лазера // «Лашкарівські читання - 2015» Конференція молодих вчених з фізики напівпровідників з міжнародною участю, Київ, Україна, 1-3 квітня 2015 р.:Збірник тез. С. 32.
- 30*. Грищук А. М., Грищук В. В., **Бойко І. В.** Спектр поперечних акустичних фононів у плоских багат шарових напівпровідникових наноструктурах // «Лашкарівські читання - 2016» Конференція молодих вчених з фізики напівпровідників з міжнародною участю, Київ, Україна, 6-8 квітня 2016 р.:Збірник тез. С. 23-24.

- 31*. **Бойко І. В.** Теорія двофотонної лазерної генерації у плоских напівпровідникових резонансно-тунельних структурах у поздовжньому електричному полі // XIX Наукова конференція Тернопільського національного технічного університету імені Івана Пулюя, Тернопіль, Україна, 18-19 травня 2016 р.:Збірник тез. С. 186-187.
- 32*. **Бойко І. В.** Самоузгоджений розрахунок потенціального профілю AlN/GaN наноструктур // XX Наукова конференція Тернопільського національного технічного університету імені Івана Пулюя, Тернопіль, Україна, 17-18 травня 2017 р.:Збірник тез. С. 183-184.
- 33*. **Boyko I., Petryk M.** An Analytical Approach to the Calculation of the Spectral Characteristics of an Electron in Nitride Nanostructures // 2018 IEEE 8th International Conference on Nanomaterials: Applications & Properties (NAP – 2018), September 9-14, 2018. Zatoka, Ukraine: Book of Abstracts. P. 03TFNMC17.
- 34*. **Бойко І. В.** Теоретичний підхід до розрахунку потенціальних профілів каскадів нітридних квантових каскадних детекторів // «Лашкарьовські читання - 2018» Конференція молодих вчених з фізики напівпровідників з міжнародною участю, Київ, Україна, 4-6 квітня 2018 р.:Збірник тез. С. 69-70.
- 35*. **Бойко І. В.** Електронний спектр та сили осциляторів квантових переходів у нітридних резонансно-тунельних структурах // VIII Українська наукова конференція з фізики напівпровідників, Ужгород, Україна, 2-4 жовтня 2018 р.:Тези доповідей. С. 182–183.
- 36*. **Boyko I., Tsupryk H., Kinakh I., Stoianov Y., Byts T.** Mathematical Modeling of the Acoustic Phonons Spectra Arising in Multilayer Nanostructures // 2019 9th International Conference on Advanced Computer Information Technologies (ACIT), June 5-7, 2019. Ceske Budejovice, Czech Republic: Conference proceedings. P. 17-20. [Scopus]
- 37*. **Boyko I. V., Petryk M. R., Zayats V. B.** The theory of the interaction of electrons with acoustic phonons in AlN / GaN nanostructures at T=0 K // 7th International Conference "Nanotechnologies and Nanomaterials" NANO-2019, August 27-30, 2019. Lviv, Ukraine: Conference proceedings. P. 555.

- 38*. **Boyko I.**, Tsupryk H., Kinakh I., Stoianov Y. Simulation of Energy Schemes and Electron Spectrum in Plane Nitride Semiconductor Nanostructures // 2019 XIth International Scientific and Practical Conference on Electronics and Information Technologies (ELIT), September 16-18, 2019. Lviv, Ukraine: Conference proceedings. P. 227-231. [Scopus]
- 39*. **Boyko I.**, Tsupryk H., Stoianov Y. Shear Acoustic Phonons in AlN/GaN Nanostructures in the Presence of Piezoelectric Effect // 2020 IEEE 10th International Conference Nanomaterials: Applications & Properties (NAP), November 09-13, 2020. Sumy, Ukraine: Conference proceedings. P. 02TM01-1-02TM01-4. [Scopus]
- 40*. **Boyko I.**, Petryk M., Tsupryk H., Mudryk I., Stoianov Y. A Piezoelectric Properties and Electron-Phonon Interaction in Semiconductor Arsenide GaAs/AlAs Nanosystems of Plane Symmetry // 2022 IEEE 12th International Conference Nanomaterials: Applications & Properties (NAP), September 11-16, 2022. Krakow, Poland: Conference proceedings. P. 1-5. [Scopus]
- 41*. **Boyko I.**, Tsupryk H., Stoianov Y., Grygorchuk G. Petryk M. A Theoretical Model of Thermal Conductivity for Multilayer Nitride-based Nanosystems // 2022 IEEE 41st International Conference on Electronics and Nanotechnology (ELNANO), October 10-14, 2022. Kyiv, Ukraine: Conference proceedings. P. 111-114. [Scopus]
- 42*. **Boyko I.** Mathematical Model of Tunneling Transport in Nanosystems with the Influence of Optical Phonons // 2023 13th International Conference on Advanced Computer Information Technologies (ACIT), September 21-23, 2023. Wroclaw, Poland: Conference proceedings. P. 182-186. [Scopus]