

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ ФІЗИКИ КОНДЕНСОВАНИХ СИСТЕМ

БОЙКО Ігор Володимирович



УДК 538.913, 538.915, 538.935, 538.958, 538.971

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

01.04.02 — теоретична фізика
(104 — Фізика та астрономія)

РЕФЕРАТ
дисертації на здобуття наукового ступеня
доктора фізико-математичних наук

ЛЬВІВ 2024

Дисертацією є рукопис.

Робота виконана в Тернопільському національному технічному університеті імені Івана Пулюя Міністерства освіти і науки України.

Офіційні опоненти: доктор фізико-математичних наук, професор **Ткачук Володимир Михайлович**, Львівський національний університет імені Івана Франка, завідувач кафедри теоретичної фізики імені професора Івана Вакарчука;

доктор фізико-математичних наук, старший науковий співробітник **Майзеліс Захар Олександрович**, Інститут радіофізики та електроніки ім. О.Я. Усикова Національної академії наук України, старший науковий співробітник відділу радіофізики твердого тіла;

доктор фізико-математичних наук, професор **Головацький Володимир Анатолійович**, Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича, професор кафедри термоелектрики та медичної фізики.

Захист відбудеться « 29 » січня 2025 року о 15.30 на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 35.156.01 при Інституті фізики конденсованих систем Національної академії наук України за адресою: 79011 м. Львів, вул. Свенціцького, 1.

З дисертацією можна ознайомитись у науковій бібліотеці Інституту фізики конденсованих систем НАН України за адресою: 79026 м. Львів, вул. Козельницька, 4, а також на сайті спеціалізованої вченої ради Д 35.156.01 за посиланням: <https://www.icmp.lviv.ua/node/6658>

Вчений секретар
спеціалізованої вченої ради Д 35.156.01
доктор фіз.-мат. наук



А.М. Швайка

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

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 симетрії з невеликою кількістю потенціальних ям (зазвичай це на наноструктури одною чи двома потенціальними ямами), що виконувались нанковою 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 квазі-стаціонарними 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 квантових каскадних лазерів (ККЛ) та детекторів (ККД). Це стало можливим зокрема завдяки реалізації методу молекулярно-променевої епітаксії, що дозволило створювати багатошарові резонансно-тунельні структури (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 виявленні 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.

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 тунельованими електронами у виникаючих квазістаціонарних станах з скінченним 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 багаточарових 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, дрітків. Для плоских наносистем розглядалися лише моделі одноямних наноструктур, причому для спрощення приймалося, 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;
- 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 наносистемах разом із розв'язанням задач для електронних процесів з урахуванням впливу просторового статичних та динамічних зарядів є безумовно актуальною і важливою для розвитку теоретичної фізики низьковимірних систем. 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.

Мета і завдання дослідження. Безпосередньою метою дисертаційної роботи є розробка аналітичної теорії електронних процесів, асоційованих з акустичними фононами, 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. Розробка теорії розрахунку потенціальних профілів нітридних РТС, теорії квазістаціонарних електронних станів, тунельного струму та електронної провідності відкритих РТС з урахуванням внеску акустичних фононів, 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 багат шарових 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 в сумарній величині електронної провідності. 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.
- Розробити квантову теорію електронних КСС та електронної провідності багат шарових 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.
- Розробити теорію методу розрахунку потенціальних профілів багат шарових нітридних РТС на основі відшукування самоузгоджених аналітичних розв’язків системи рівнянь Шредінгера-Пуассона. З використанням розвиненої теорії дослідити геометричні конфігурації каскадів ККД близького інфрачервоного діапазону з метою виявлення таких, які забезпечують максимальну інтенсивність квантових електронних переходів.
- З використанням моделі пружного континууму розвинути теорію мод поперечних, флексуральних та ділататіональних акустичних фононів у багат шарових AlAs/GaAs РТС. Розвинути теорію взаємодії електронів з флексуральними та ділататіональними акустичними фононами у багат шарових арсенідних РТС за довільних значень температури.
- Побудувати аналітичну теорію мод поперечних, флексуральних та ділататіональних мод акустичних фононів, які виникають у нітридних бінарних AlN/GaN і потрійних AlGaIn/GaN багат шарових РТС. Виконати розрахунки спектру та компонент поля зміщення цих типів акустичних фононів, їх залежностей від геометричних параметрів РТС та дослідити їх властивості.

- Побудувати теорію взаємодії електронів з згинувими та розтягувальними акустичними фононами в багат шарових нітридних РТС через деформаційний та п'єзоелектричний потенціали для довільних значень температури за наявності п'єзоелектричного ефекту. Розрахувати та дослідити температурні зміщення енергетичних рівнів електронних станів та їх згасань зумовлені обома механізмами взаємодії та встановити їхні закономірності й особливості.
- Розвинути аналітичну теорію поперечних акустичних фононів у багат шарових нітридних РТС у врахуванням 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 електронних КСС, електронної провідності та тунельного струму для відкритих нітридних РТС з врахуванням 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 врахуванням внеску внутрішніх полів. Розвинути послідовну теорію взаємодії екситонів з поперечними, флексуралями та ділататональними 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 арсенідних напівпровідників GaAs/AlGaAs та нітридних напівпровідників GaN/AlGaN з кристалічною ґраткою типу вюрциту чи цинкової обманки.

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 багат шарових РТС з врахуванням двофотонних переходів, а також з врахуванням 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 з використанням методів коефіцієнта прозорості та розподілу густини ймовірності. Потенціальні профілі РТС розраховувались за допомогою розробленого аналітичного методу. Теорія електронних квазістаціонарних станів у нітридних наносистемах з врахуванням 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 багат шарових РТС будувалась 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.
- Побудовано квантову теорію електронних КСС та електронної провідності багатошарових РТС з урахування внесків просторових статичного та динамічного зарядів. Встановлено, що для значних концентрацій електронів n_0 зростає вплив дисипативних процесів, спричинених просторовим динамічним зарядом, а також має місце зростання майже на порядок величин часів життя електронних КСС.
- Розвинено 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 багатошарових 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, за урахування 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 Шредингера 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 багатошарових 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 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. Запропоновано модифікацію методу Льюїса-Різенфілда разом з представленням хвильової функції у вигляді характерному для теорії розсіювання.
- Побудовано послідовну теорію взаємодії екситонів з поперечними, флексуральними та ділататональними 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 розвиненої 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, згинувими та розтягувальними 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 рівнянн 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 квантилів (Q1 і Q2), 9 статей [6, 8, 11, 13, 14, 18–20, 23] віднесені до третього квантиля (Q3), 2 статті [2, 12] віднесені до четвертого квантиля (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.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

Перший розділ присвячено дослідженню електронного транспорту та пошуку можливостей генерації додаткових гармонік в багаточарових РТС до шарів яких в загальному випадку прикладене постійне магнітне поле F . Для цього застосовувалось рівняння Шредінгера у вигляді:

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

$$U(z) = U \sum_{p=0}^N [(\theta(z-z_p) - \theta(z-z_{p+1})) - eF \{z[\theta(z) - \theta(z-z_N)] + z_N \theta(z-z_N)\}],$$

$$H(z,t) = -e \left[\epsilon_1 (e^{i\omega_1 t} + e^{-i\omega_1 t}) + \epsilon_2 (e^{i\omega_2 t} + e^{-i\omega_2 t}) \right] [z\theta(z) + (z_N - z)\theta(z-z_N)] \quad (2)$$

де (2) - це 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 .

У наближенні слабого сигналу, за умови реалізації двофотонних переходів між електронними станами з випромінюванням та поглинанням електромагнітних хвиль, розв'язок рівняння Шредінгера (3) шукається у другому порядку теорії збурень у вигляді:

$$\begin{aligned} \Psi(z,t) = & \Psi_0(z) e^{-i\omega_0 t} + \Psi_{-1}(z) e^{-i(\omega_0 - \omega_1)t} + \Psi_{+1}(z) e^{-i(\omega_0 + \omega_1)t} + \\ & + \Psi_{-2}(z) e^{-i(\omega_0 - \omega_1 - \omega_2)t} + \Psi_{+2}(z) e^{-i(\omega_0 + \omega_1 + \omega_2)t}, \end{aligned} \quad (3)$$

Тоді теоретична модель двофотонної генерації описується такими рівняннями:

$$\begin{aligned} & \left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} + U(z) - E \right] \Psi_0(z) = 0, \quad \omega_0 = E / \hbar, \quad \Omega_1 = \hbar \omega_1, \quad \Omega_2 = \hbar \omega_2, \\ & \left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} + U(z) - (E \pm \Omega_1) \right] \Psi_{\pm 1}(z) = e\epsilon_1 [z\theta(z) + (z_N - z)\theta(z-z_N)] \Psi_0(z), \\ & \left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} + U(z) - (E \pm (\Omega_1 + \Omega_2)) \right] \Psi_{\pm 2}(z) = e\epsilon_2 [z\theta(z) + (z_N - z)\theta(z-z_N)] \Psi_{\pm 1}(z). \end{aligned} \quad (4)$$

Отримані вирази для хвильових функцій такі:

$$\begin{aligned} \Psi_0(E, z) = & (A_0^{(0)} e^{ik_0^{(0)} z} + B_0^{(0)} e^{-ik_0^{(0)} z}) \theta(-z) + A_0^{(N+1)} e^{ik_0^{(N+1)} (z-z_N)} \theta(z-z_{N+1}) + \\ & + \sum_{p=1}^N \left[A_0^{(p)} Ai(\xi^{(p)}) + B_0^{(p)} Bi(\xi^{(p)}) \right] [\theta(z-z_{p-1}) - \theta(z-z_p)], \\ k^{(0)} = & \hbar^{-1} \sqrt{2m_0 E}, \quad k^{(N+1)} = \hbar^{-1} \sqrt{2m_0 (E + eFz_N)}, \\ \xi^{(p)} = & (2m_1 eF / \hbar^2)^{1/3}, \quad \xi^{(p+1)} = -(2m_0 eF / \hbar^2)^{1/3}. \end{aligned} \quad (5)$$

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

$$\begin{aligned} \Psi_{\pm 1(2)}(z) = & \psi_{\pm 1(2)}(z) + \Phi_{\pm 1(2)}(z), \\ \psi_{\pm 1(2)}(z) = & B_{\pm 1(2)}^{(0)} e^{-ik_{\pm 1(2)}^{(0)} z} \theta(-z) + A_{\pm 1(2)}^{(N+1)} e^{ik_{\pm 1(2)}^{(N+1)} (z-z_{N+1})} \theta(z-z_{N+1}) + \\ & + \sum_{p=1}^N \sum_{l=0}^N \left[A_{\pm 1}^{(p)} e^{ik_{\pm 1}^{(p)} (z-z_{pl})} + B_{\pm 1}^{(p)} e^{-ik_{\pm 1}^{(p)} (z-z_{pl})} \right] [\theta(z-z_{pl}) - \theta(z-z_{p+1})], \\ \Phi_{\pm 1}(z) = & \sum_{p=1}^N \sum_{l=0}^M \Phi_{\pm 1l}^{(p)}(z) [\theta(z-z_{pl}) - \theta(z-z_{p+1})] + \Phi_{\pm 1}^{(N+1)}(z) \theta(z-z_N) = \\ = & \sum_{p=1}^M \sum_{l=0}^N \left[\mp \frac{U_1}{\Omega_1} \frac{z}{z_N} \Psi_{0l}^{(p)}(z) + \frac{\hbar^2 U_1}{m_l z_N \Omega_1^2} \frac{d\Psi_{0l}^{(p)}(z)}{dz} \right] [\theta(z-z_{pl}) - \theta(z-z_{p+1})] \mp \frac{U_1}{\Omega_1} \Psi_0^{(N+1)}(z) \theta(z-z_N); \end{aligned}$$

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

де

$$\begin{aligned}
m_{p_l} &= \begin{cases} m_0; \text{ потенціальні ями} \\ m_1; \text{ потенціальні бар'єри} \end{cases}; \quad k_{\pm 1}^{(p_l)} = k_{\pm 1}^{(p_l)}(z_{p_l}) = \begin{cases} \hbar^{-1} \sqrt{2m_0(E + eFz_{p_l} \pm \Omega_1)}; \\ \hbar^{-1} \sqrt{2m_1(E - U_0 + eFz_{p_l} \pm \Omega_1)} \end{cases}; \\
k_{\pm 2}^{(p_l)} = k_{\pm 2}^{(p_l)}(z_{p_l}) &= \begin{cases} \hbar^{-1} \sqrt{2m_0(E + eFz_{p_l} \pm (\Omega_1 + \Omega_2))}; \\ \hbar^{-1} \sqrt{2m_1(E - U + eFz_{p_l} \pm (\Omega_1 + \Omega_2))}. \end{cases}
\end{aligned} \tag{7}$$

Хвильова функція $\Psi(z, t)$ є однозначно визначеною шляхом застосування умов неперервності для функцій (6), (7) та потоків їх густин ймовірності на всіх гетеромержах РТС у довільний момент часу t :

$$\Psi^{(p_l)}(z_{p_l} - 0, t) = \Psi^{(p_{l+1})}(z_{p_l} + 0, t); \quad \frac{1}{m_{p_l}} \frac{d\Psi^{(p_l)}(z, t)}{dz} \Big|_{z=z_{p_l}-0} = \frac{1}{m_{p_{l+1}}} \frac{d\Psi^{(p_l)}(z, t)}{dz} \Big|_{z=z_{p_l}+0}, \tag{8}$$

разом з умовою нормування:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_0^*(k', z) \Psi_0(k, z) dz = \delta(k - k'). \tag{9}$$

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:

$$\begin{aligned}
\sigma^{(II)}(\Omega_1, \Omega_2, E) &= \frac{\Omega_1}{2z_5 e \epsilon_1^2} \{ [j_{+1}(E + \Omega_1, z = z_5) - j_{-1}(E - \Omega_1, z = z_5)] - \\
&- [j_{+1}(E + \Omega_1, z = z_0) - j_{-1}(E - \Omega_1, z = z_0)] \} + \\
&+ \frac{(\Omega_1 + \Omega_2)}{2z_5 e \epsilon_2^2} \{ [j_{+2}(E + \Omega_1 + \Omega_2, z = z_5) - j_{-2}(E - \Omega_1 - \Omega_2, z = z_5)] - \\
&- [j_{+2}(E + \Omega_1 + \Omega_2, z = z_0) - j_{-2}(E - \Omega_1 - \Omega_2, z = z_0)] \},
\end{aligned} \tag{10}$$

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

Крім того доданок

$$\sigma^{(I)}(\Omega_1, E) = \frac{\Omega_1}{2z_5 e \epsilon_1^2} \{ [j_{+1}(E + \Omega_1, z = z_5) - j_{-1}(E - \Omega_1, z = z_5)] - [j_{+1}(E + \Omega_1, z = z_0) - j_{-1}(E - \Omega_1, z = z_0)] \} \tag{11}$$

визначає провідність, що формується у однофотонних переходах.

Згідно з квантовою механікою густини електронних струмів, які виникають у РТС у результаті квантових переходів між електронними станами з випромінюванням чи поглинанням енергії у однофотонних та двофотонних переходах визначаються виразом:

$$j_{\pm 1(2)}(E, z) = \frac{ie\hbar n_0}{2m_0} \left(\Psi_{\pm 1(2)}(E, z) \frac{d\Psi_{\pm 1(2)}^*(E, z)}{dz} - \Psi_{\pm 1(2)}^*(z) \frac{d\Psi_{\pm 1(2)}(E, z)}{dz} \right), \quad p = 1, 2. \quad (12)$$

В результаті розраховані величини електронної провідності такі:

$$\begin{aligned} \sigma^{(II)}(\Omega_1, \Omega_2) &= \sigma^{(I)}(\Omega_1) + \sigma^{(2)}(\Omega_1, \Omega_2), \\ \sigma^{(I)}(\Omega_1) &= \sigma^{(I)+}(\Omega_1) + \sigma^{(I)-}(\Omega_1), \quad \sigma^{(2)}(\Omega_1, \Omega_2) = \sigma^{(2)+}(\Omega_1, \Omega_2) + \sigma^{(2)-}(\Omega_1, \Omega_2), \\ \sigma^{(I)+}(\Omega_1) &= \frac{e^2 \hbar \Omega_1 z_5 n_0}{2m_0 U_1^2} \left\{ k_{+1}^{(0)} |A_{\pm 1}^{(6)}|^2 - k_{-1}^{(0)} |A_{-1}^{(6)}|^2 + \frac{U_1}{2\Omega_1} (P_{01}^+ - P_{01}^-) \right\}; \quad \sigma^{(I)-} = \frac{e^2 \hbar \Omega_1 z_5 n_0}{2m_0 U_1^2} \left\{ k_{+1}^{(0)} |B_{+1}^{(0)}|^2 - k_{-1}^{(0)} |B_{-1}^{(0)}|^2 \right\}; \\ \sigma^{(2)+}(\Omega_1, \Omega_2) &= \frac{e^2 \hbar (\Omega_1 + \Omega_2) z_5 n_0}{2m_0 U_2^2} \left\{ \frac{U_2}{2\Omega_2} (P_{12}^+ - P_{12}^-) + |k_{+2}^{(0)} A_{+2}^{(6)}|^2 - |k_{-2}^{(0)} A_{-2}^{(6)}|^2 + \right. \\ &\quad \left. \frac{U_1 U_2}{2\Omega_1 (\Omega_1 + \Omega_2)} (P_{02}^+ - P_{02}^-) + \left(\frac{U_2}{\Omega_2} \right)^2 \left(k_{+}^{(0)} |A_{+1}^{(6)}|^2 - k_{-}^{(0)} |A_{-1}^{(6)}|^2 \right) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{U_1 U_2^2}{2\Omega_1 \Omega_2 (\Omega_1 + \Omega_2)} (P_{01}^+ - P_{01}^-) \right\}, \quad \sigma^{(2)-}(\Omega_1, \Omega_2) = \frac{e^2 \hbar (\Omega_1 + \Omega_2) z_5 n_0}{2m_0 U_2^2} \left\{ k_{\pm 2}^{(0)} |B_{\pm 2}^{(0)}|^2 - \frac{e\hbar n_0}{m_0} k_{-2}^{(0)} |B_{-2}^{(0)}|^2 \right\} \end{aligned} \quad (13)$$

Величина внеску у динамічну провідність від генерації додаткових гармонік характеризується величиною відносного підсилення:

$$\eta = (\sigma^{(II)} - \sigma^{(I)}) / \sigma^{(I)}. \quad (14)$$

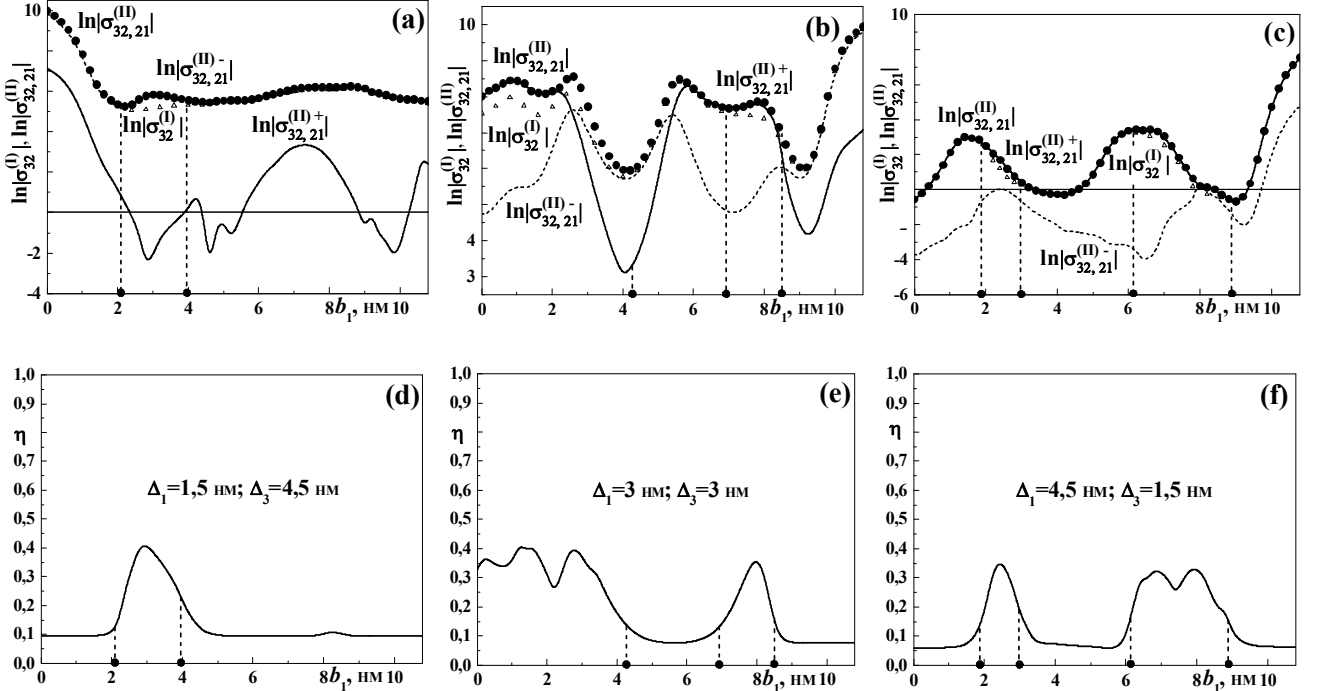


Рис. 1. Залежності електронної провідності трибар'єрної наносистеми у переходах 3→1 і 3→2 від положення внутрішнього бар'єра в загальній потенціальній ямі для різних геометричних конфігурацій наносистеми.

Конкретні розрахунки виконувались на прикладі трибар'єрної РТС 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. Результати розрахунку величин електронної провідності подано на Рис. 1a, b, c разом з величинами внеску додаткових гармонік у величину провідності η у залежності від геометричного дизайну наноструктури, що містяться на Рис. 1d, e, f. Як видно з цих рисунків 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%. Загалом, що для РТС з різними зовнішніми потенціальними бар'єрами суттєве підсилення інтенсивності випромінювання виникає у кількох інтервалах зміни b_1 де η досягає значення від 0,3 до 0,4. В цих конфігураціях РТС величина провідності $\sigma_{32,21}^{(II)}$ суттєва і формується складовою $\sigma_{32,21}^{(II)+}$, яка визначається прямим електронним потоком. Таким чином, можна передбачати, що в цих конфігураціях трибар'єрна РТС може працювати не лише як окремий двочастотний квантовий лазер, але й як активна зона ККЛ.

Другий розділ присвячено дослідженню електронного транспорту у відкритих наносистемах при урахуванні впливу на цей процес просторового динамічного заряду. Для цього ми конкретизували та доповнили модель електронних квазістаціонарних станів у плоских РТС, насамперед шляхом врахування того, що часи життя електронних станів є скінченними величинами. В результаті цього виникає цілком нова проблема, що полягає у описанні електронних станів на основні самоузгодженої системи повного рівняння Шредінгера та рівняння Пуассона. 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:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(z,t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} + U(z) + H(z,t) \right) \Psi(z,t), \quad (15)$$

$$H(z,t) = -eC [z\theta(z) + (z_N - z)\theta(z - z_N)] (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) + e\phi(z,t).$$

Потенціал, що характеризує взаємодію електрона з полем просторового заряду $\phi(z,t)$ визначається рівнянням Пуассона:

$$\frac{\partial}{\partial z} \left[\varepsilon(z) \frac{\partial \phi(z,t)}{\partial z} \right] = -en(z,t). \quad (16)$$

де $n(z,t) = n_0 |\Psi(z,t)|^2$ то змінна у просторі концентрація електронів.

Застосування наближення слабкого сигналу, дозволяє подати хвильову функцію у такому вигляді:

$$\Psi(z,t) = \Psi_0(z)e^{-i\omega_0 t} + \Psi_{-1}(z)e^{-i(\omega_0 - \omega)t} + \Psi_{+1}(z)e^{-i(\omega_0 + \omega)t}, \quad \omega_0 = E / \hbar, \quad (17)$$

що рівняння, що описує просторово-часову залежність зарядів у наносистемі:

$$\frac{\partial}{\partial z} \left[\varepsilon(z) \frac{\partial \phi(z,t)}{\partial z} \right] = -en_0 \left[\xi_0(z) + \xi_+(z)e^{i\omega t} + \xi_+^*(z)e^{-i\omega t} \right]; \quad (18)$$

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

З (18) тепер видно, що у відкритих наносистемах просторовий заряд має як статичний характер так і визначається переходами з поглинаннями та випромінюванням електромагнітного поля, що є кардинально новим фактом. В результаті відповідні потенціали статичного та динамічного заряду є такими:

$$\begin{aligned}\phi_{st}(z) &= \sum_{p=1}^N \left(-\frac{en_0}{\varepsilon_p} \int_0^z \int_0^{z'} \xi_0^{(p)}(z'') dz'' dz' + C_1^{(p)}(z - z_{p-1}) + C_2^{(p)} \right) \left[\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p) \right]; \\ \phi_{\pm}(z) &= \sum_{p=1}^N \left(-\frac{en_0}{\varepsilon_p} \int_0^z \int_0^{z'} \xi_0^{(p)}(z'') dz'' dz' + C_1^{(p)}(z - z_{p-1}) + C_2^{(p)} \right) \left[\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p) \right].\end{aligned}\quad (19)$$

де випадку детекторних електронних переходів з поглинанням електромагнітного поля відповідає знак “+”, а випадку лазерних переходів з випромінюванням енергії електромагнітного поля відповідає знак “-” відповідно. Статичний та динамічний потенціали визначаються повністю з умов неперервності потенціалу $\phi(z,t)$ та вектора електричної індукції $\phi_p(z,t) = \varepsilon_0 \varepsilon_p E_p(z,t) = \varepsilon_0 \varepsilon_p \partial \phi_p(z,t) / \partial z$ на всіх гетеромежах РТС:

$$\phi_p(z_p, t) = \phi_{p+1}(z_p, t); \quad \varepsilon_p \left. \frac{\partial \phi_p(z, t)}{\partial z} \right|_{z=z_p} = \varepsilon_{p+1} \left. \frac{\partial \phi_{p+1}(z, t)}{\partial z} \right|_{z=z_p}.\quad (20)$$

Знайдені вирази для статичного динамічного заряду дозволяють отримати розв’язки рівнянь Шредінгера та Пуассона з необхідною точністю шляхом апроксимації потенціалів (19) виразами:

$$\phi_{st(\pm)}(E, z) = \sum_{p=0}^N \sum_{l=0}^M \phi_{st(\pm)}^{(p_l)}(E, z_l) [\theta(z - z_{l-1}) - \theta(z - z_l)],\quad (21)$$

в результаті чого складові електронної функції у виразі (17) такі:

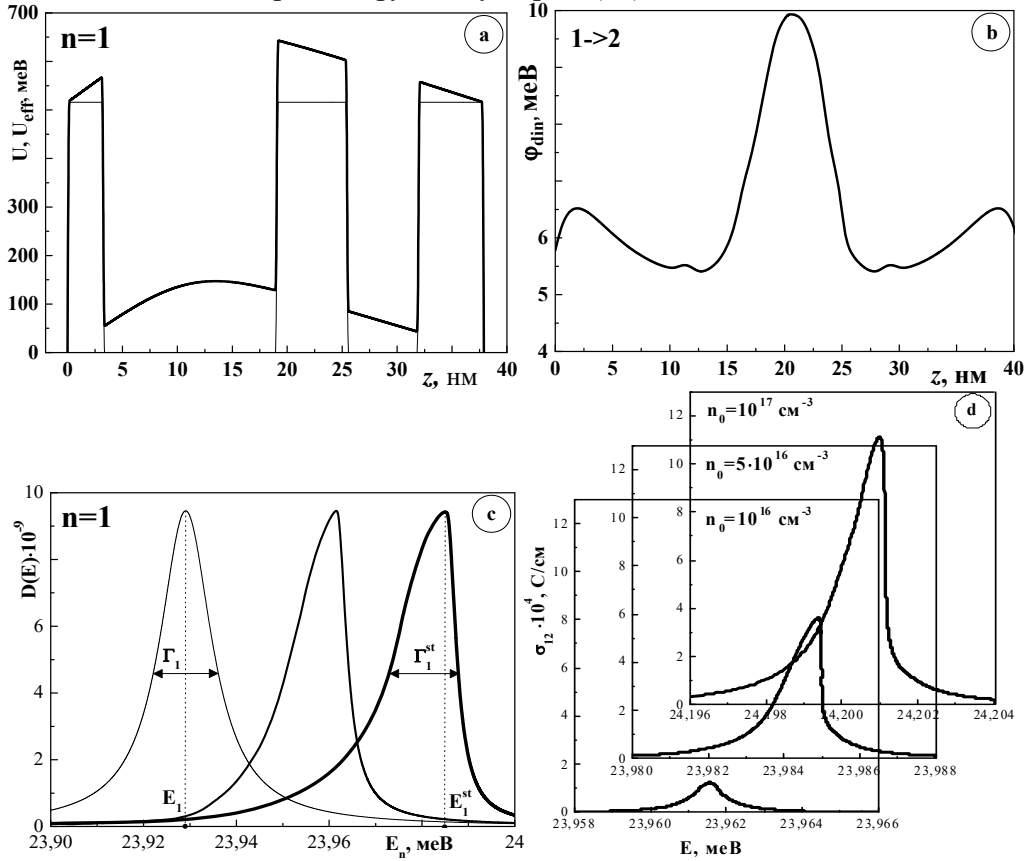


Рис. 2. Вплив статичного (а) та динамічного (б) просторових зарядів на потенціальний профіль наносистеми з трьома бар’єрами, коефіцієнт прозорості наносистеми (с) та її електронна провідність (д), розраховані при різних значеннях концентрації електронів n_0 .

$$\begin{aligned}
\Psi_{i_0}(z) &= (A_i^{(0)} e^{ik_0^{(0)}z} + B_i^{(0)} e^{-ik_0^{(0)}z})\theta(-z) + A_i^{(N+1)} e^{ik_0(z-z_N)}\theta(z-z_N) + \\
&+ \sum_{p=1}^N \sum_{l=0}^M [A_{il}^{(p,l)} e^{iK_1^{(p,l)}(z-z_{l-1})} + B_{il}^{(p)} e^{-iK_1^{(p,l)}(z-z_{l-1})}] [\theta(z-z_{l-1}) - \theta(z-z_l)], \\
\Psi_{\pm}(z) &= \Psi_{i_{\pm}}(z) + \Phi_{i_{\pm}}(z); \quad \Psi_{i_{\pm}}(z) = B_{i_{\pm}}^{(0)} e^{-ik_{\pm}^{(0)}z}\theta(-z) + A_{i_{\pm}}^{(N+1)} e^{ik_{\pm}^{(6)}(z-z_N)}\theta(z-z_N) + \\
&+ \sum_{p=1}^N \sum_{l=1}^M [A_{i_{\pm}}^{(p,l)} e^{iK_{\pm}^{(p,l)}(z-z_{l-1})} + B_{i_{\pm}}^{(p,l)} e^{-iK_{\pm}^{(p,l)}(z-z_{l-1})}] [\theta(z-z_{l-1}) - \theta(z-z_l)]; \quad (22) \\
\Phi_{i_{\pm}}(z) &= \sum_{p=1}^N \sum_{l=1}^M \left(\mp \frac{e\mathcal{E}z}{\hbar\omega} \Psi_{i_0}^{(p,l)}(z) + \frac{e\mathcal{E}}{m_l\omega^2} \frac{d\Psi_{i_0}^{(p,l)}(z)}{dz} \right) [\theta(z-z_{l-1}) - \theta(z-z_l)] + \\
&+ \frac{e\mathcal{E}z_N}{\hbar\omega} \Psi_0^{(6)}(z)\theta(z-z_N); \quad k_{\pm}^{(0)} = k_{\pm}^{(6)} = \hbar^{-1} \sqrt{2m_0(\hbar(\omega_0 \pm \omega))}; \\
K_{\pm}^{(p,l)} &= K_{\pm}^{(p,l)}(z_l) = \begin{cases} \sqrt{2m_0(\hbar(\omega_0 \pm \omega) - e\phi(z_l))}; & \text{в ямах} \\ \sqrt{2m_1(\hbar(\omega_0 \pm \omega) - U - e\phi(z_l))}. & \text{в бар'єрах} \end{cases}
\end{aligned}$$

Далі, контролюючи точність розрахунків умовою $|\phi_{st(\pm)}^{i+1}(z) - \phi_{st(\pm)}^i(z)| / \phi_{st(\pm)}^i(z) \ll 1$, де i - це номер ітерації, знаходимо електронну провідність наносистеми:

$$\begin{aligned}
\sigma(E, \Omega) &= \sigma^+(E, \Omega) + \sigma^-(E, \Omega), \quad \sigma^+(E, \Omega) = \frac{\hbar\Omega n_0}{2m_0 z_N \mathcal{E}^2} \left(k_{+1}^{(N+1)} |A_{+1}^{(N+1)}|^2 - k_{-1}^{(N+1)} |A_{-1}^{(N+1)}|^2 \right); \\
\sigma^-(E, \Omega) &= \frac{\hbar\Omega n_0}{2m_0 z_N \mathcal{E}^2} \left(k_{+1}^{(0)} |B_{+1}^{(0)}|^2 - k_{-1}^{(0)} |B_{-1}^{(0)}|^2 \right). \quad (23)
\end{aligned}$$

Результати розрахунків потенціальної схеми трибар'єрної наносистеми з урахуванням виникаючого статичного та динамічного зарядів подано на Рис. 2a, b, c, d. З Рис. 2a, b видно, що просторовий заряд спричиняє значну деформацію потенціальної схеми наноструктури, причому внесок статичного заряду є більшим ніж динамічного. З Рис. 2c видно, що збільшення концентрації електронів n_0 приводить до зміщення максимумів коефіцієнта прозорості (резонансних енергій) в область більших значень енергій, при цьому резонансні ширини зменшуються, а форма коефіцієнта прозорості деформується. Оскільки резонансні ширини пов'язані з часами життя відповідних квазістаціонарних станів як $\tau_n = \hbar/\Gamma_n$, то це приводить до зростання останніх, що вказує на дисипативний характер впливу просторових зарядів на електронні квазістаціонарні стани. Схожу деформацію форми як і у випадку коефіцієнта прозорості демонструють залежності електронної провідності наносистеми від енергії, що подані на Рис. 2d.

Третій розділ присвячено розробці аналітичного методу розрахунку потенціальних профілів нітридних наносистем. Оскільки 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 (P_{pz}) та спонтанної (P_{sp}) поляризацій, що в свою чергу визначає кардинальні відмінності при розрахунку потенціальних профілів РТС, що потребують врахування впливу внутрішніх полів, обмінно-кореляційних ефектів порівнянні з ізотропними системами, що мають кубічну структуру кристалічної ґратки. В дисертації ця проблема вирішувалась шляхом дослідження ефективного потенціалу виду:

$$V(z) = \Delta E_C(z) + V_E(z) + V_H(z) + V_{HL}(z), \quad (24)$$

де $\Delta E_C(z)$ - потенціальний профіль РТС для електрона, розрахунок якого було виконано в моделі з прямокутними потенціалами, зокрема температурна залежність забороненої зони для $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ напівпровідників розраховувалась за співвідношенням Варшні виду: $E_g(x, T) = E_g(x, 0) - a(x)T^2 / (b(x) + T)$. Напруженості внутрішніх електричних полів $F_p, p=1..N$, визначаються з умов неперервності вектора

електричного зміщення $\bar{D}_p = \varepsilon^{(p)} \bar{F}_p + \bar{P}_p$ на всіх межах РТС: $D_p = D_{p+1}$, а також умови, для сумарної величини напруги, прикладеної до РТС: $\sum_{p=1}^N F_p d_p = 0$. Це дає вираз для напруженості електричного поля у довільному шарі РТС та складової $V_E(z)$ ефективного потенціалу, що характеризує внесок взаємодії електрона з виникаючими у РТС внутрішніми полями в межах кожного шару товщиною d_k :

$$V_E(z) = e \sum_{p=1}^N (-1)^{p-1} (F_p z - F_{p-1} z_{p-1}) \left[\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p) \right], \quad F_0 = 0. \quad (25)$$

$$F_p = \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq p}}^N (P_k - P_p) \frac{d_k}{\varepsilon^{(k)}} \bigg/ \varepsilon^{(p)} \sum_{k=1}^N \frac{d_k}{\varepsilon^{(k)}}, \quad P_k = P_k^{pz} + P_{sp}^{pz}.$$

Обмінно-кореляційний потенціал отримано у зображенні Хедіна-Лундквіста:

$$V_{HL}(z) = -\frac{1}{4\pi} \left(\frac{9}{4\pi^2} \right)^{1/3} \left[1 + \frac{0,6213 r_s}{21} \ln \left(1 + \frac{21}{r_s(z)} \right) \right] \frac{e^2}{\varepsilon_0 r_s(z) \varepsilon(z) a_B^*(z)}, \quad (26)$$

де $r_s(z) = (4\pi a_B^3 n(z) / 3)^{-1/3}$ - 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. Це визначає енергетичний спектр електрона E_n та його хвильові функції $\Psi(z)$ визначаються шляхом розв'язування самоузгодженої системи рівнянь Шредінгера та Пуассона:

$$\left\{ \left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m(z)} \frac{d}{dz} + V_{\text{eff}}(z) - E_{n\bar{k}} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \right] \Psi(z) = 0, \right. \quad (27)$$

$$\left. \left[\frac{d}{dz} \left[\varepsilon_\infty(z) \frac{dV_H(z)}{dz} \right] = -\frac{e}{\varepsilon_0} \left\{ e \left[N_D^+(z) - n(z) \right] + \sum_{p=1}^N \sigma_p(z_p) \delta(z - z_p) \right\}, \quad \sigma_p(z_p) = P_{p+1} - P_p. \right. \right.$$

де $n(z) = n_0(z) \sum_n |\Psi(E_n, z)|^2 \ln \left| 1 + \exp \left[(E_F - E_n) / k_B T \right] \right|$, $n_0(z) = m(z) k_B T / \pi \hbar^2$, а ефективна маса електрона, скорельована за всіма шарами наноструктури така:

$$m_n^* = \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \left(|\Psi_n(z)|^2 / m(z) \right) dz \right]^{-1}, \quad \Psi_n(z) = \Psi_{Ek}(r, z) \Big|_{k=0}.$$

У розвиненому методі розв'язки системи рівнянь Шредінгера-Пуассона такі:

$$\Psi_0(E, z) = A_1^{(0)} e^{\chi^{(0)} z} \theta(-z) + \sum_{p=1}^N \sum_{l=0}^M \left\{ A_1^{(p_l)} Ai \left[\zeta^{(p_l)}(z) \right] + B_1^{(p_l)} Bi \left[\zeta^{(p_l)}(z) \right] \right\} \left[\theta(z - z_{p_l}) - \theta(z - z_{p_{l+1}}) \right] +$$

$$+ B_0^{(N+1)} e^{-\chi^{(N+1)} z} \theta(z - z_N), \quad \zeta^{(p_l)}(z) = \left(2m^{(p_l)} eF(z_{p_l}) / \hbar^2 \right)^{1/3} \left[(\Delta E_C(z) - E) / eF(z_{p_l}) - z \right];$$

$$F(z_{p_l}) = (V(z_{p_{l+1}}) - V(z_{p_l})) / e(z_{p_{l+1}} - z_{p_l}); \quad (28)$$

$$V_H^{(p)}(z) = -\frac{e}{\varepsilon_0 \varepsilon^{(p)}} \int_0^z \int_0^{x_1} \left\{ e \left[N_D^+ - \frac{m^{(p)} k_B T}{\pi \hbar^2} \sum_n |\Psi(E_n, x_2)|^2 \ln \left| 1 + \exp \left(\frac{E_F - E_n}{k_B T} \right) \right| \right] + \sigma_p \delta(x_2 - z_p) \right\} dx_1 dx_2.$$

Результати розрахунків, виконаних з допомогою розвиненої теорії демонструють залежності, що подані на Рис. 3а, б, с, d. Рис. 3а демонструє прикладу розрахунку потенціального профілю нітридної наносистеми з розрахунком її електронного спектру. Спостерігається ефект, згідно якого внутрішнє електричне поле має різний знак у потенціальних ямах та бар'єрах наносистеми. Крім того як видно з Рис. 3б з розрахунків для поданого деталізованого потенціального профілю окремої потенціальної

ями та аналітичний та числовий методи дають близькі результати, проте врахування лише внеску внутрішнього електричного поля дає завищені абсолютні значення потенціалів. Також аналітичний метод дозволяє розрахунками електронного спектру та сил осциляторів, що на Рис. 3с, d у залежності від геометричного дизайну наносистеми встановлювати її конфігурація, що забезпечують найбільшу ефективність квантових переходів.

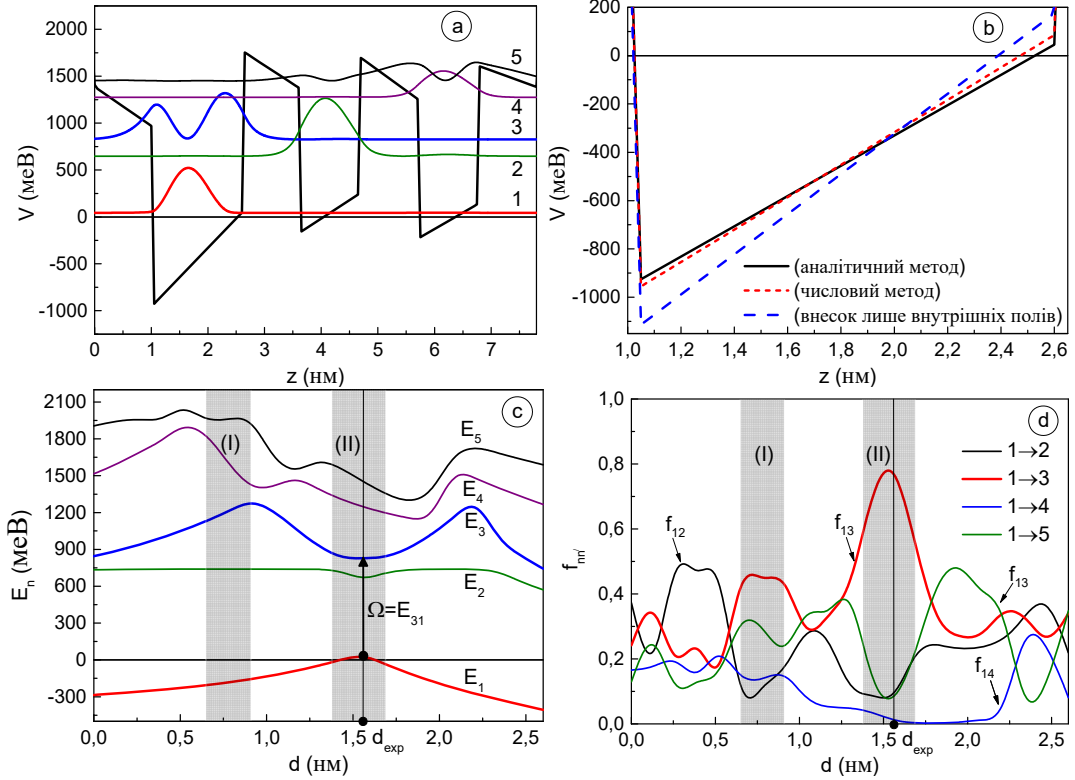


Рис. 3. Потенціальний профіль наносистеми розрахований аналітичним методом та квадрати хвильовий функцій перших п'яти електронних станів (а); порівняння розробленого аналітичного методу з числовим методом та апроксимацією внеском внутрішніх полів (b); енергетичний спектр (с) та сили осциляторів квантових переходів (d), розраховані у залежності від геометричного дизайну наносистеми

Четвертий розділ присвячено розробці аналітичної теорії акустичних фонових у нітридних наносистемах. Для цього використовувалась модель пружного континууму, згідно якої фонові моди визначаються із рівняння:

$$\rho(z) \frac{\partial^2 u_i(r,t)}{\partial t^2} = \frac{\partial \sigma_{ik}(r)}{\partial x_k}; \quad i, k = (1; 2; 3); \quad x_1 = x; \quad x_2 = y; \quad x_3 = z, \quad (29)$$

де густина наносистеми та пружні константи її матеріалу подаються у вигляді:

$$[\rho(z) C_{iklm}(z)]^T = \sum_{p=1}^N [\rho^{(p)} C_{iklm}(z)]^T [\theta(z_p - z_{p-1}) - \theta(z_p - z_{p+1})]. \quad (30)$$

При поданні тензора напружень у такому вигляді:

$$\sigma_{ik}(r) = C_{iklm}(z) u_{lm}(r), \quad u_{lm}(r) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_l(r)}{\partial x_m} + \frac{\partial u_m(r)}{\partial x_l} \right), \quad l, m = (1; 2; 3) \quad (31)$$

та відшукавши розв'язки рівняння (29) у формі:

$$u_i(r,t) = \sum_{p=1}^N [u_1^{(p)}(z) \quad u_2^{(p)}(z) \quad u_3^{(p)}(z)]^T [\theta(z_p - z_{p-1}) - \theta(z_p - z_{p+1})] e^{i(\omega t - qx)} \quad (32)$$

з урахуванням форми тензора пружних констант для наносистем вюрцитного типу отримується система диференціальних рівнянь, що описує фононні моди:

$$\begin{aligned}
& -C_{44}^{(p)} \frac{d^2 u_1^{(p)}(z)}{dz^2} + iq \left(C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(p)} \right) \frac{du_3^{(p)}(z)}{dz} + \left(q^2 C_{11}^{(p)} - \rho^{(p)} \omega^2 \right) u_1^{(p)}(z) = 0; \\
& -C_{44}^{(p)} \frac{d^2 u_2^{(p)}(z)}{dz^2} + \left(q^2 C_{66}^{(p)} - \rho^{(p)} \omega^2 \right) u_2^{(p)}(z) = 0; \\
& -C_{33}^{(p)} \frac{d^2 u_3^{(p)}(z)}{dz^2} + iq \left(C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(p)} \right) \frac{du_1^{(p)}(z)}{dz} + \left(q^2 C_{44}^{(p)} - \rho^{(p)} \omega^2 \right) u_3^{(p)}(z) = 0.
\end{aligned} \tag{33}$$

Встановлено, що друге рівняння (33) описує так звані зсувні фононні моди, а система першого і третього рівнянь (33) 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 . В дисертації вперше отримано аналітичні розв’язки рівнянь для фононних мод (33), зокрема для флексуральних та ділататіональних фононів у межах окремого шару наносистеми вони такі:

$$\begin{aligned}
u_1^{(p)}(z) &= -iq \left(C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(p)} \right) \sum_{s=1}^2 \left(\tilde{A}_{2s-1}^{(p)} e^{\lambda_s^{(p)} z} - \tilde{A}_{2s}^{(p)} e^{-\lambda_s^{(p)} z} \right) / \left\| \alpha_s^{(p)}(q) \right\|; \\
u_3^{(p)}(z) &= -\sum_{s=1}^2 \left\{ C_{44}^{(p)} \left(\lambda_s^{(p)} \right)^2 + \rho^{(p)} \omega^2 - q^2 C_{11}^{(p)} \right\} \left(\tilde{A}_{2s-1}^{(p)} e^{\lambda_s^{(p)} z} + \tilde{A}_{2s}^{(p)} e^{-\lambda_s^{(p)} z} \right) / \left\| \alpha_s^{(p)}(q) \right\|; \\
\left\| \alpha_n^{(p)}(q) \right\| &= \left[\left(C_{44}^{(p)} \lambda_n^2 + \rho^{(p)} \omega^2 - q^2 C_{11}^{(p)} \right)^2 + q^2 \lambda_n^2 \left(C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(p)} \right)^2 \right]^{-1/2}.
\end{aligned} \tag{34}$$

Моди та спектр акустичних фононів отримуються шляхом послідовного застосування граничних умов для зміщень та компонент тензора напружень на всіх межах наносистеми:

$$\begin{cases}
u_1^{(p)}(q, \omega, z) \Big|_{z=z_p-\varepsilon} = u_1^{(p+1)}(q, \omega, z) \Big|_{z=z_p+\varepsilon}; & u_3^{(p)}(q, \omega, z) \Big|_{z=z_p-\varepsilon} = u_3^{(p+1)}(q, \omega, z) \Big|_{z=z_p+\varepsilon}; \\
\sigma_{xz}^{(p)}(q, \omega, z) \Big|_{z=z_p-\varepsilon} = \sigma_{xz}^{(p+1)}(q, \omega, z) \Big|_{z=z_p+\varepsilon}; & \sigma_{zz}^{(p)}(q, \omega, z) \Big|_{z=z_p-\varepsilon} = \sigma_{zz}^{(p+1)}(q, \omega, z) \Big|_{z=z_p+\varepsilon},
\end{cases} \tag{35}$$

де

$$\begin{aligned}
\sigma_{xz}^{(p)}(q, \omega, z) &= \sigma_{13}^{(p)}(q, \omega, z) = \frac{1}{2} C_{44}^{(p)} \left(\frac{\partial u_z^{(p)}(x, z)}{\partial x} + \frac{\partial u_x^{(p)}(x, z)}{\partial z} \right); \\
\sigma_{zz}^{(p)}(q, \omega, z) &= \sigma_{33}^{(p)}(q, \omega, z) = C_{13}^{(p)} \nabla \cdot u_i^{(p)}(x, z) + (C_{33}^{(p)} - C_{13}^{(p)}) \frac{\partial u_i^{(p)}(x, z)}{\partial z},
\end{aligned} \tag{36}$$

разом із умовою нормування:

$$S_{XY} \int_0^{z_3} \rho(z) \left(u_1^*(q, \omega, z) u_1(q, \omega, z) + u_3^*(q, \omega, z) u_3(q, \omega, z) \right) dz = \frac{\hbar}{2\omega}, \tag{37}$$

де $S_{XY} = \Delta l_x \Delta l_y$ - площа поперечного перерізу наносистеми.

Результати розрахунків спектру різних типів акустичних фононів подано далі. Для зсувних фононів це Рис. 4а і Рис. 5а для флексуральних та ділататіональних. Отримані залежності демонструють встановлений факт того, що для зсувних акустичних фононів залежності спектру від хвильового вектора формуються в інтервалі межі якого визначаються енергіями зсувних акустичних фононів у масивних кристалах. Для флексуральних та ділататіональних акустичних фононів межі інтервалів, в яких формується їхній спектр визначаються швидкостями поширення поздовжніх та поперечних хвиль у масивних кристалах. Залежності, що подані на Рис. 4б і Рис. 5б демонструють властивості спектрів згаданих типів акустичних фононів у залежності від розмірів сумарної потенціальної ями

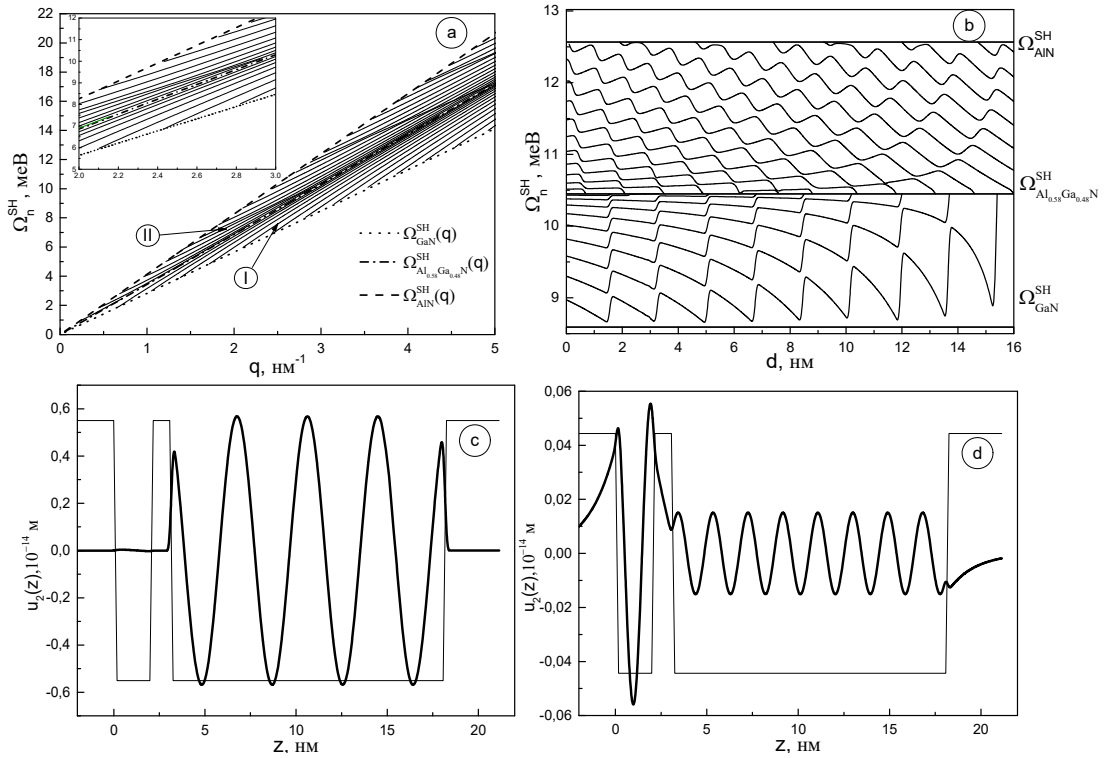


Рис. 4. Спектр зсувних акустичних фононів, розрахований у залежності від хвильового числа (а) та розмірів сумарної потенціальної ями трибар'єрної наносистеми (b), а також компоненти поля зміщення розраховані при 9.883 меВ (c), 10.645 меВ (d)

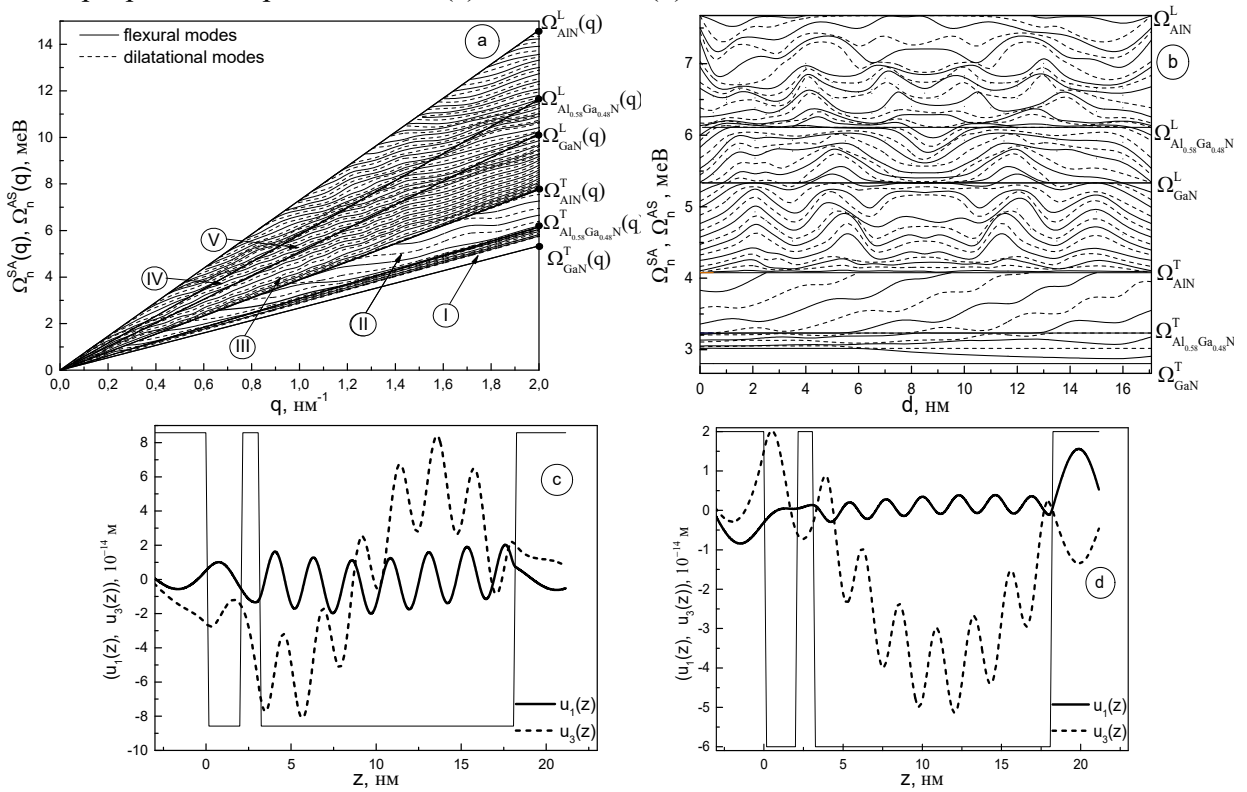


Рис. 5. Спектр флексуральних та ділататіональних акустичних фононів, розрахований у залежності від хвильового числа (а) та розмірів сумарної потенціальної ями трибар'єрної наносистеми (b), а також компоненти поля зміщення розраховані при 5.384 меВ (c), 7.722 меВ (d)

трибар'єрної нітридної наносистеми. Як видно з цих рисунків залежності груп фононних спектрів мають суттєві відмінності, які не можуть бути встановленими прями розрахунками спектру від хвильового вектора. Залежності компонент поля зміщення для різних значень енергії акустичних фононів подано для на Рис. 4с, d для зсувних фононів та Рис. 5с. d для флексуральних та ділатіональних фононів, що демонструють їхню симетричну та антисиметричну поведінку в шарах наносистеми.

П'ятий розділ присвячено побудові послідовної теорії взаємодії електронів з акустичними фонами в нітридних наноструктурах для ненульових температур. Оскільки нітридні наноструктури характеризуються значним п'єзоелектричним ефектом, то слід очікувати різних механізмів такої електрон-фононної взаємодії. Врахування п'єзоелектричного ефекту з загальному випадку вдалось вперше здійснити шляхом модифікації тензора напружень:

$$\sigma_{ik}(\vec{r}) = C_{iklm}(z)u_{lm}(\vec{r}) - e_{ikl}(z)E_l(\vec{r}), \quad l, m = (1; 2; 3), \quad (37)$$

та використанні рівняння, що описує зв'язок між електричним полем та пружним зміщенням середовища:

$$D_i(\vec{r}, t) = e_{ilm}(z)u_{lm}(\vec{r}) + \varepsilon_{ik}(\omega, z)E_k(\vec{r}, t). \quad (38)$$

Використання рівняння (29) вкупі з співвідношенням (31) та умовою, що досліджувана наносистема є електрично нейтральною, тобто $\text{div}D_i(\vec{r}, t) = 0$ отримується система рівнянь, що описують поле зміщення акустичних фононів та створюваний ними п'єзоелектричний ефект:

$$\left(\rho^{(p)}\omega^2\delta_{ki} - C_{iklm}^{(p)}\frac{\partial^2}{\partial x_l\partial x_m} \right) u_k(x, z) - e_{ikl}^{(p)}\frac{\partial^2\phi(x, z)}{\partial x_k\partial x_l} = 0; \quad e_{ikl}^{(p)}\frac{\partial^2 u_k(x, z)}{\partial x_l\partial x_l} - \varepsilon_{ik}^{(p)}\frac{\partial^2\phi(x, z)}{\partial x_l\partial x_l} = 0, \quad (39)$$

де враховано, що компоненти пружного зміщення й відповідно пов'язане цим зміщенням електричне поле мають гармонічну залежність від часу: $u_i(\vec{r}, t) = u_i(\vec{r})e^{i\omega t}$; $E_i(\vec{r}, t) = E_i(\vec{r})e^{i\omega t}$. Далі врахування виду тензорів пружних та п'єзоелектричних констант та діелектричної проникності у представленні Ліддена-Сакса-Теллера приводить з (39) до такої системи рівнянь для флексуральних і ділатіональних мод:

$$\begin{aligned} -C_{44}^{(p)}\frac{d^2 u_1^{(p)}}{dz^2} + iq(C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(p)})\frac{du_3^{(p)}}{dz} + (q^2 C_{11}^{(p)} - \rho^{(p)}\omega^2)u_1^{(p)} + iq(e_{31} + e_{15})\frac{d\phi_x^{(p)}}{dz} &= 0; \\ -C_{33}^{(p)}\frac{d^2 u_3^{(p)}}{dz^2} + iq(C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(p)})\frac{du_1^{(p)}}{dz} + (q^2 C_{44}^{(p)} - \rho^{(p)}\omega^2)u_3^{(p)} + e_{15}q^2\phi_x^{(p)} - e_{33}\frac{d^2\phi_x^{(p)}}{dz^2} &= 0; \\ iq(e_{31} + e_{15})\frac{d\phi_x^{(p)}}{dz} + e_{15}q^2u_3^{(p)} - \varepsilon_{11}q^2\phi_x^{(p)} - e_{33}\frac{d^2 u_3^{(p)}}{dz^2} + \varepsilon_{33}\frac{d^2\phi_x^{(p)}}{dz^2} &= 0. \end{aligned} \quad (40)$$

Розв'язки цієї системи такі:

$$\begin{aligned} u_1^{(p)}(z) &= -iq(C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(p)})\sum_{s=1}^3 \left(\tilde{A}_{2s-1}^{(p)}e^{\lambda_s^{(p)}z} - \tilde{A}_{2s}^{(p)}e^{-\lambda_s^{(p)}z} \right) / \|\alpha_s^{(p)}(q)\|; \\ u_3^{(p)}(z) &= -\sum_{s=1}^3 \left\{ C_{44}^{(p)}(\lambda_s^{(p)})^2 + \rho^{(p)}\omega^2 - q^2 C_{11}^{(p)} \right\} \left(\tilde{A}_{2s-1}^{(p)}e^{\lambda_s^{(p)}z} + \tilde{A}_{2s}^{(p)}e^{-\lambda_s^{(p)}z} \right) / \|\alpha_s^{(p)}(q)\|; \\ \phi_x^{(p)}(z) &= \sum_{s=1}^3 \left\{ \frac{q^2(C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(p)})^2(\lambda_s^{(p)})^2 + (C_{44}^{(p)}(\lambda_s^{(p)})^2 + \rho^{(p)}\omega^2 - q^2 C_{11}^{(p)}) \left(C_{33}^{(p)}(\lambda_s^{(p)})^2 + \rho^{(p)}\omega^2 - q^2 C_{44}^{(p)} \right)}{\left[e_{15}^{(p)}q^2 - e_{33}^{(p)}(\lambda_s^{(p)})^2 \right] \|\alpha_s^{(p)}(q)\|} \right\} \times \end{aligned}$$

$$\times \left(\tilde{A}_{2s-1}^{(p)} e^{\lambda_s^{(p)} z} + \tilde{A}_{2s}^{(p)} e^{-\lambda_s^{(p)} z} \right); \quad \|\alpha_n^{(p)}\| = \left\{ q^2 \left(C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(p)} \right)^2 \lambda_n^2 + \left(C_{44}^{(p)} \lambda_n^2 + \rho^{(p)} \omega^2 - q^2 C_{11}^{(p)} \right)^2 + \right. \quad (41)$$

$$\left. + \left| \frac{q^2 \left(C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(p)} \right)^2 \lambda_n^2 + \left(C_{44}^{(p)} \lambda_n^2 + \rho^{(p)} \omega^2 - q^2 C_{11}^{(p)} \right) \left(C_{33}^{(p)} \lambda_n^2 + \rho^{(p)} \omega^2 - q^2 C_{44}^{(p)} \right)}{e_{15}^{(p)} q^2 - e_{33}^{(p)} \lambda_n^2} \right|^2 \right\}^{-1/2}.$$

Спектр акустичних фононів та п'єзоелектричний потенціал отримуються шляхом послідовного застосування граничних умов для зміщень $u_{1(3)}^{(p)}(q, \omega, z)$, компонент тензора напружень $\sigma_{xz}^{(p)}(q, \omega, z) = \left\{ C_{44}^{(p)} \left(-iqu_3^{(p)}(z) + du_1^{(p)}(z)/dz \right) / 2 + iqe_{15}^{(p)} d\phi^{(p)}(z)/dz \right\} e^{i(\omega t - qx)}$ і $\sigma_{zz}^{(p)}(q, \omega, z) = \left(-iqC_{13}^{(p)} u_1^{(p)}(z) + C_{33}^{(p)} \frac{du_3^{(p)}(z)}{dz} \right) e^{i(\omega t - qx)}$, а також п'єзоелектричних потенціалів $\phi_z^{(p)}(q, \omega, z)$ та нормальних компонент вектора електричної індукції $D_z(z) = \left(-iqe_{31}^{(p)} u_1^{(p)}(z) + e_{33}^{(p)} du_3^{(p)}(z)/dz \right) e^{i(\omega t - qx)}$ на всіх межах наносистеми разом з умовою нормування (37).

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:

$$\left(u_1(q, \omega_{nq}, r) \quad u_3(q, \omega_{nq}, r) \quad \phi(q, \omega_q, r) \right)^T = \sum_{nq} \left(u_1(q, \omega_{nq}, z) \quad u_3(q, \omega_{nq}, z) \quad \phi(q, \omega_{nq}, z) \right)^T e^{iqr}, \quad (42)$$

виконуючи далі перехід від отриманих фур'є-компонент до узагальнених координат й імпульсів, а потім до операторів чисел заповнення, отримано оператор для компонент пружного зміщення у представленні чисел заповнення:

$$\hat{u}_{1(3)}^{(p)}(q, \omega_{nq}, r) = \sum_{p=0}^N \sum_{nq} \sqrt{\frac{\hbar}{2\Delta l_x \Delta l_y \rho^{(p)} \omega_{nq}}} \left[\hat{b}_{n_i}(-\bar{q}) + \hat{b}_{n_i}(\bar{q}) \right] \hat{w}_{1(3)}^{(p)}(q, \omega_{nq}, z) e^{i\bar{q}r} \times \quad (43)$$

$$\times \left[\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p) \right], \quad \hat{w}_{1(3)}^{(p)}(q, \omega_{nq}, z) = \sqrt{\rho^{(p)}} \hat{u}_{1(3)}^{(p)}(q, \omega_{nq}, z), \quad z_1 = -\infty.$$

Після перетворень та спрощень будемо мати рівняння для визначення $\phi(q, \omega_{nq}, z)$:

$$\frac{d^2 \phi^{(p)}(q, \omega_{nq}, z)}{dz^2} - \frac{e_{15}^{(p)} q^2}{e_{33}^{(p)}} \phi(q, \omega_{nq}, z) = \frac{1}{e_{33}^{(p)}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\Delta l_x \Delta l_y \rho^{(p)} \omega_{nq}}} \left[-C_{33}^{(p)} \frac{d^2 \hat{w}_3^{(p)}(q, \omega_{nq}, z)}{dz^2} - \right. \quad (44)$$

$$\left. -q^2 \left(C_{13}^{(p)} + C_{44}^{(p)} \right) \frac{d\hat{w}_1^{(p)}(q, \omega_{nq}, z)}{dz} + \left(q^2 C_{44}^{(p)} - \rho^{(p)} \omega^2 \right) \hat{w}_3^{(p)}(q, \omega_{nq}, z) \right].$$

Отриманий гамільтоніан для акустичних фононів у представленні вторинного квантування є таким:

$$\hat{H}_{ac} = \sum_{nq} \hbar \omega_{nq} \left(\hat{b}_{nq}^+ \hat{b}_{nq} + \frac{1}{2} \right). \quad (45)$$

де \hat{b}_{nq}^+ і \hat{b}_{nq} - відповідно оператори народження та знищення фононного стану у представленні Бозе. Знайдену в результаті розв'язку самоузгодженої задачі (27) електронну хвильову функцію подамо у такому вигляді:

$$\Psi_{Ek}(r, z) = \frac{1}{\sqrt{\Delta x \Delta y}} e^{i\vec{k}\vec{r}} \Psi_E(z) \quad (46)$$

де \vec{k} - квазіімпульс електрона, а \vec{r} - вектор у площині xOy , а її умова нормування така:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_{nk}(E_{n\vec{k}}, r, z) \Psi_{n'k'}^*(E_{n'\vec{k}'}, r, z) dr dz = \frac{1}{2\pi} \delta(k - k') \delta_{nn'}. \quad (47)$$

Тепер для електронних станів існуючих в ефективному потенціалі наноструктури $V_{\text{eff}}(z)$, використовуючи метод вторинного квантування отримаємо їх хвильову функцію та гамільтоніан невзаємодіючих електронів:

$$\hat{\Psi}(r, z) = \sum_{\vec{k}} \sum_n \Psi_{n\vec{k}}(\vec{r}, z) \hat{a}_{n\vec{k}}, \quad \hat{H}_e = \sum_{n, \vec{k}} E_{n\vec{k}} \hat{a}_{n\vec{k}}^+ \hat{a}_{n\vec{k}}, \quad E_{n\vec{k}} = E_n + \hbar^2 k^2 / 2m_n^*, \quad (48)$$

$\hat{a}_{n\vec{k}}^+$ і $\hat{a}_{n\vec{k}}$ - відповідно оператори народження та зниження електронних станів у досліджуваній наноструктурі. У напівпровідниках з решіткою типу вюрциту величина зміщення зони провідності запропоновано визначати як:

$$\Delta E_v = a_{1c} \varepsilon_{zz} + a_{2c} (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}), \quad (49)$$

де ε_{xx} , ε_{yy} , ε_{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:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{def}} &= \sum_{q, n_1} \sum_{p=1}^N \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho^{(p)} \omega_{n_1 q} \Delta l_x \Delta l_y}} \left[b_{n_1}(\vec{q}) + b_{n_1}^+(-\vec{q}) \right] \times \\ &\times \left(iqa_{2c} u_1^{(p)}(q, \omega_{n_1 q}, z) + a_{1c} \frac{\partial u_3^{(p)}(q, \omega_{n_1 q}, z)}{\partial z} \right) e^{i\vec{q}\vec{r}} \left[\theta(z_p - z_{p-1}) - \theta(z_p - z_{p+1}) \right]; \quad (50) \\ \hat{H}_{pz} &= \sum_{q, n_1} \sum_{p=1}^N \phi^{(p)}(q, \omega_{n_1 q}, z) \left[b_{n_1}(\vec{q}) + b_{n_1}^+(-\vec{q}) \right] e^{i\vec{q}\vec{r}} \left[\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_{p+1}) \right]. \end{aligned}$$

де ω_{n_1} - частота спектру акустичних фононів, n_1 номер вітки цього спектру. Таким чином, взаємодія електронів з акустичними фононами через деформаційний потенціал та п'єзоелектричний потенціал визначається гамільтоніаном:

$$\hat{H}_{e-\text{def}(e-pz)} = \sum_{n, n', n_1, \vec{k}, \vec{q}} F_{nkn_1n'}^{\text{def}(pz)}(q) \hat{a}_{n'\vec{k}+\vec{q}}^+ \hat{a}_{n\vec{k}} \left[b_{n_1}(\vec{q}) + b_{n_1}^+(-\vec{q}) \right], \quad (51)$$

де функції зв'язку такі:

$$\begin{aligned} F_{nkn_1n'}^{\text{def}}(q) &= \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho^{(p)} \omega_{n_1} \Delta l_x \Delta l_y}} \int_{z_{p-1}}^{z_p} \Psi_{nk}^{(p)}(E_{n\vec{k}}, z) \left(iqa_{2c} u_1^{(p)}(q, \omega_{n_1 q}, z) + a_{1c} \frac{\partial u_3^{(p)}(q, \omega_{n_1 q}, z)}{\partial z} \right) \times \\ &\times e^{i\vec{q}\vec{r}} \Psi_{n'k}^{*(p)}(E_{n'\vec{k}}, z) dz; \quad F_{nkn_1n'}^{\text{pz}}(q) = \int_{z_{p-1}}^{z_p} \Psi_{nk}^{(p)}(E_{n\vec{k}}, z) \phi^{(p)}(q, \omega_{n_1 q}, z) e^{i\vec{q}\vec{r}} \Psi_{n'k}^{*(p)}(E_{n'\vec{k}}, z) dz. \end{aligned} \quad (52)$$

Отриманий гамільтоніан системи електронів з акустичними фононами у плоскій наноструктурі за наявності п'єзоелектричного ефекту такий:

$$\hat{H} = \hat{H}_e + \hat{H}_{ac} + \hat{H}_{e-\text{def}} + \hat{H}_{e-pz}. \quad (53)$$

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:

$$G_{n\bar{k}}(\Omega) = 1 / (\Omega - E_{n\bar{k}} - M_{n\bar{k}}(\Omega)). \quad (54)$$

де масовий оператор розрахований у однофононному наближенні такий:

$$M_{n\bar{k}}^{\text{def(pz)}}(\Omega) = \sum_{qn, n'} |F_{nk_1 n'}^{\text{def(pz)}}(q)|^2 \left[\frac{1 + \nu_{n_1}}{\Omega - E_{n', \bar{k} - \bar{q}} - \Omega_{n_1} + i\eta} + \frac{\nu_{n_1}}{\Omega - E_{n', \bar{k} + \bar{q}} - \Omega_{n_1} + i\eta} \right] \quad (55)$$

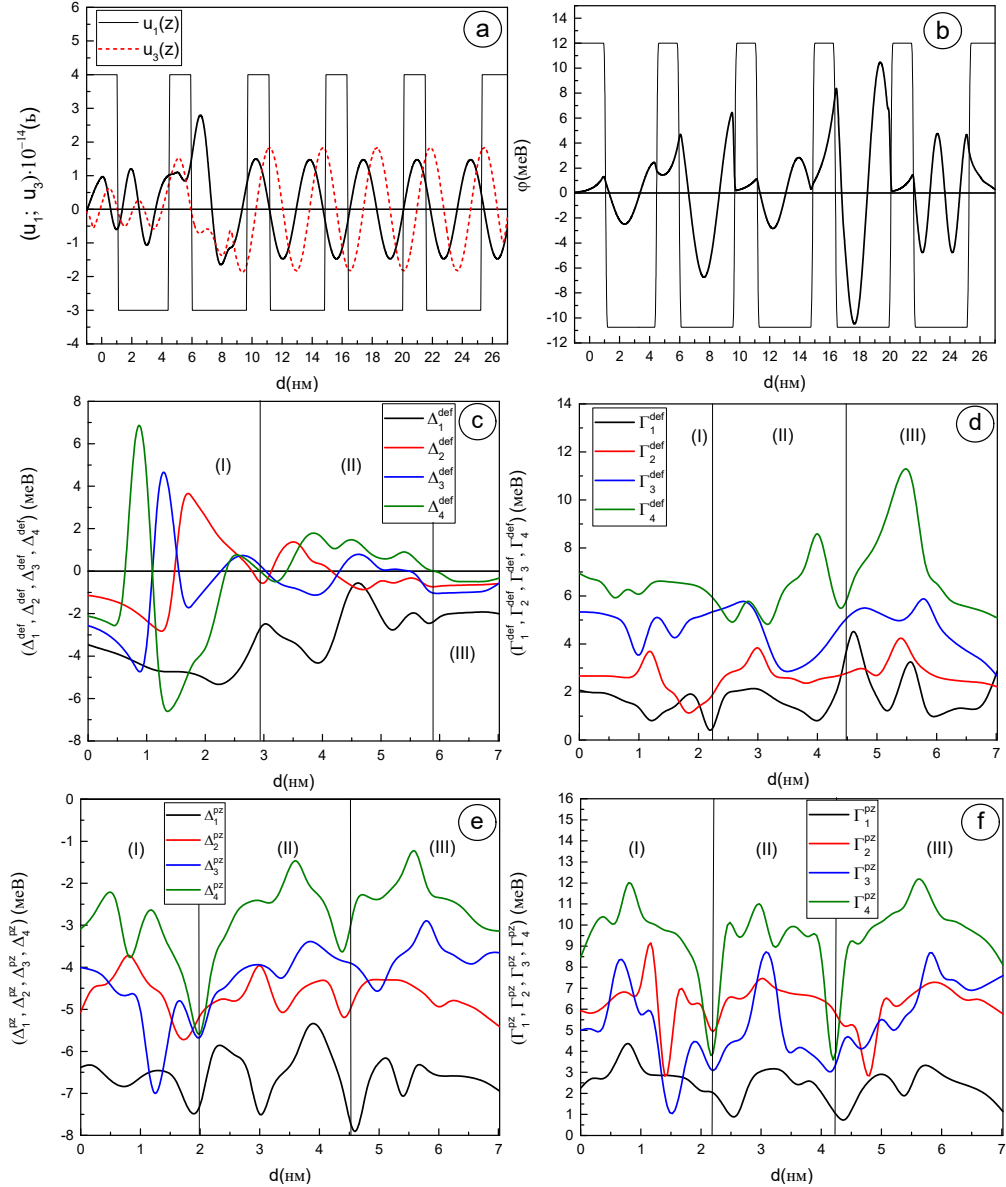


Рис. 6. Компоненти поля пружного зміщення $u_1(z)$ та $u_3(z)$ (a) акустичних фононів та створюваний ними п'єзоелектричний потенціал (b), а також температурні зміщення та згасання перших чотирьох рівнів електронного спектру, розраховані при температурі 300К, що відповідають механізму взаємодії через деформаційний потенціал (c). (d) та п'єзоелектричний потенціал (e), (f)

де $\Omega_{n_1} = \hbar\omega_{n_1}$, $\nu_{n_1} = (e^{\hbar\omega_{n_1}/k_B T} - 1)^{-1}$. Ефекти впливу на електронний спектр взаємодії електронів з акустичними фононами через деформаційний та п'єзоелектричний потенціали досліджувались при

різних температурах, виконавши розрахунок зміщень рівнів електронних станів спектру (Δ_n) та відповідних їм швидкостей розпаду (Γ_n):

$$\Delta_n^{\text{def (pz)}} = \text{Re} M_n(\Omega = E_n, \bar{k} = 0) = \frac{\Delta l_x \Delta l_y}{(2\pi)^2} \sum_{n_1} \text{P} \iint \frac{F_{nn_1n'}^{\text{def (pz)}}(q) F_{nn_1n'}^{*\text{def (pz)}}(q) dq^2}{E_n - E_{n,\bar{q}} - \Omega_{n_1}}, \quad (56)$$

$$\Gamma_n^{\text{def (pz)}} = -2 \text{Im} M_n(\Omega = E_n, \bar{k} = 0) = \frac{\Delta l_x \Delta l_y}{2\pi} \sum_{n_1} \iint \delta(E_n - E_{n,\bar{q}} - \Omega_{n_1}^{(\text{FL,DL})}) F_{nn_1n'}^{\text{def (pz)}}(q) F_{nn_1n'}^{*\text{def (pz)}}(q) dq^2,$$

отже, отриманий повний зсув n -го електронного енергетичного рівня \tilde{E}_n , що зумовлюється обома розглянутими типами взаємодії з акустичними фононами та швидкість згасання такі:

$$\tilde{E}_n = E_n + \Delta_n^{\text{def}} + \Delta_n^{\text{pz}}, \Gamma_n = \Gamma_n^{\text{def}} + \Gamma_n^{\text{pz}}. \quad (57)$$

На Рис. 6a, b, c, d, e подано результати розрахунку компонент поля зміщення акустичних фононів (a) та п'єзоелектричний потенціал, що зумовлений цими фононами (b). Як видно з Рис. 6c та Рис. 6e температурні зміщення електронного спектру мають різні властивості для кожного із двох можливих механізмів взаємодії. При взаємодії через деформаційний потенціал в залежності від геометричних параметрів досліджуваної наносистем зміщення можуть мати як додатній так і від'ємний знак, тоді як при взаємодії через п'єзоелектричний потенціал зміщення тільки від'ємні. Залежності згасань електронних рівнів, що подані на Рис. 6d, f вказують на їхнє зростання за рахунок обох механізмів електрон-фононної взаємодії.

Шостий розділ присвячено дослідженню впливу фононних підсистем та залежних від часу потенціалів на електронний тунельний транспорт у відкритих наносистемах. Отримано ряд теоретичних результатів в теорії квантово-механічного розсіювання та тунельного транспорту в електрон-фононних підсистемах. Розглянуто тунелювання системи електронів з акустичними фононами у нітридних наносистемах. Для цього розглянуто повне рівняння Шредінгера із складовими визначеними згідно (24) та (25):

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(z,t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} + U(z) + U_E(z) + U_{e-em}(z,t) + \Phi_{def}(z,t) \right] \Psi(z,t), \quad (58)$$

де внесок від системи акустичних фононів описується залежним від часу деформаційним потенціалом:

$$\Phi_{def}(z,t) = \sum_{p=1}^3 \sum_{s=1}^2 \left[A_{2s-1}^{(p)} \phi_{2s-1}^{(p)} e^{\lambda_s^{(p)}(z-z_p)} + A_{2s}^{(p)} \phi_{2s}^{(p)} e^{-\lambda_s^{(p)}(z-z_p)} \right] e^{i\omega_{ac}^{(m)}(q)t} \left[\theta(z-z_{p-1}) - \theta(z-z_p) \right]. \quad (59)$$

$$\phi_s^{(p)} = -\lambda_s^{(p)} \left\{ a_{2c}^{(p)} c_1^{(p)} q^2 + a_{1c}^{(p)} \left[(k_1^{(p)})^2 + (\lambda_s^{(p)})^2 \right] \right\} / \left\| \alpha_s^{(p)} \right\|.$$

Рівняння (58) розв'язане з використанням запропонованого варіаційного методу. Для цього розглянуто рівняння усереднене за величину часу релаксації τ_{ph} :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + U(z) + U_E(z) + \bar{\Phi}_{def}(z) - E \right] \Psi_0(z) = 0, \quad (60)$$

де

$$\bar{\Phi}_{def}(z) = \frac{i \left(1 - e^{i\omega_{ac}^{(n_1)}(q)\tau_{ph}}\right)}{\omega_{ac}^{(n_1)}(q)\tau_{ph}} \sum_{p=1}^3 \sum_{s=1}^2 a_{2s-1}^{(p)} \cos\left(\Lambda_s^{(p)}(z - z_p) - \delta_{2s-1}^{(p)}\right) \left[\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)\right],$$

$$\Lambda_s^{(p)} = i\lambda_s^{(p)}; a_{2s-1}^{(p)} = \sqrt{\left(i \left[A_{2s-1}^{(p)}\phi_{2s-1}^{(p)} - A_{2s}^{(p)}\phi_{2s}^{(p)}\right]\right)^2 + \left[A_{2s-1}^{(p)}\phi_{2s-1}^{(p)} + A_{2s}^{(p)}\phi_{2s}^{(p)}\right]^2};$$

$$\delta_{2s-1}^{(p)} = \arctg \left[i \left(A_{2s-1}^{(p)}\phi_{2s-1}^{(p)} - A_{2s}^{(p)}\phi_{2s}^{(p)} \right) / \left(A_{2s-1}^{(p)}\phi_{2s-1}^{(p)} + A_{2s}^{(p)}\phi_{2s}^{(p)} \right) \right].$$

Розв'язки рівняння (60) мають задовольняти асимптотику:

$$\begin{cases} \Psi_0(z)|_{z \rightarrow -\infty} = e^{ik_1 z} + B e^{-ik_1 z}, & k_1 = \sqrt{2m^{(0)}E} / \hbar, \\ \Psi_0(z)|_{z \rightarrow +\infty} = A e^{ik_2 z}, & k_2 = \sqrt{2m^{(0)}(E + eFl)} / \hbar. \end{cases} \quad (62)$$

Процес розсіювання електронного потоку на ефективному потенціалі наноструктури $U_{eff}(z) = U(z) + U_E(z) + \bar{\Phi}_{def}(z)$ описується хвильовою функцією:

$$\Psi_0(z) = e^{ikz} - \int_{-\infty}^{+\infty} G(z, z') V_{eff}(z') \Psi_0(z') dz'; \quad V_{eff}(z) = 2m U_{eff}(z) / \hbar^2, \quad (63)$$

де функція Гріна у (63) визначається як:

$$G^{(0)}(z, z') = e^{ikz} + B^{(0)}(z, z') e^{-ikz}, \quad z < 0; \quad G^{(4)}(z, z') = A^{(N)}(z, z') e^{ikz}, \quad z > z_N.$$

$$G^{(p)}(z, z') = A^{(p)}(z, z') \text{Ai}[\zeta^{(p)}(z)] + B^{(p)}(z, z') \text{Bi}[\zeta^{(p)}(z)], \quad (64)$$

$$\zeta^{(p)}(z) = \left(2m^{(p)} eF(z_{p_i}) / \hbar^2\right)^{1/3} \left[(\Delta E_C(z) - E) / eF(z_{p_i}) - z \right].$$

Далі формулюється варіаційний метод для амплітуди проходження шляхом розглянемо рівняння для хвильової функції, що відповідає хвилі, що падає на наноструктуру з $-\infty$ з амплітудою A :

$$\Psi(z) = A e^{ikz} + \frac{1}{4\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} G(z, z') V_{eff}(z') \Psi(z') dz' \quad (65)$$

Варіаційний принцип формулюється для величини функціоналу:

$$\nu[f] = \left[(f - 1)^{-1} \right]; \quad (f - 1)^{-1} = \left(4\pi \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(z) V_{eff}(z) \Psi(z) dz - I \right) / 4\pi I; \quad (66)$$

$$I = \int_0^{z_N} \int_0^{z_N} \Psi^*(z) V_{eff}(z) G(z, z') V_{eff}(z') \Psi(z') dz' + \left[eFl A^{(N)}(z, z')^2 \right] \int_{z_3}^{+\infty} \Psi^*(z) e^{ik_2 z} dz \int_{z_3}^{+\infty} e^{-ik_2 z} \Psi(z) dz.$$

Для побудови пробних функцій знаходяться розв'язки диференціального рівняння, що містять нелінійний член - внесок деформаційного потенціалу акустичних фононів:

$$-f''(z) + \frac{2m^{(p)}}{\hbar^2} a_{2s-1}^{(p)} \cos\left(\Lambda_s^{(p)}(z - z_p) - \delta_{2s-1}^{(p)}\right) f(z) = 0. \quad (67)$$

Розв'язками цього рівняння є лінійна комбінація функцій Матґе $se(z)$ і $se(z)$:

$$f(z) = C_1 se \left[\frac{4m^{(p)} a_{2s-1}^{(p)}}{\hbar^2 \Lambda_s^{(p)2}}, \frac{1}{2} \left(\delta_{2s-1}^{(p)} - \Lambda_s^{(p)}(z - z_p) \right) \right] + C_2 se \left[\frac{4m^{(p)} a_{2s-1}^{(p)}}{\hbar^2 \Lambda_s^{(p)2}}, \frac{1}{2} \left(\delta_{2s-1}^{(p)} - \Lambda_s^{(p)}(z - z_p) \right) \right]. \quad (68)$$

Вважатимемо, що для функцій $f(z)$ виконується умова їхнього згасання на зовнішніх межах наноструктури та умови їх зшивання на її межах:

$$f(z)|_{z \rightarrow 0} \rightarrow 0; \quad f^{(p)}(z)|_{z=z_p} = f^{(p+1)}(z)|_{z=z_p}, \quad \frac{1}{m^{(p)}} f^{(p)}(z)|_{z=z_p} = \frac{1}{m^{(p+1)}} f^{(p+1)}(z)|_{z=z_p}. \quad (69)$$

Пробна функція в межах окремого шару наноструктури при використанні функції $f(z)$ як координатних функцій представляється у такому вигляді:

$$\Psi^{(p)}(z) = \sum_{i=1}^n \alpha_i \psi_i^{(p)}(z) + \psi^{(p)}(z) \sum_{j=1}^m \beta_j f_j^{(p)}(z); \quad \psi^{(p)}(z) = a^{(p)} \text{Ai}[\zeta^{(p)}(z)] + b^{(p)} \text{Bi}[\zeta^{(p)}(z)]. \quad (70)$$

Таким чином, розв'язки рівняння (60) є такими:

$$\Psi_0(z) = (e^{ik_1 z} + B_0 e^{-ik_1 z}) \theta(-z) + A_{N+1}^{(0)} e^{ik_2 z} \theta(z - z_N) + \sum_{p=1}^N \psi^{(p)}(z) \left\{ \sum_{i=1}^n \alpha_i + \sum_{j=1}^m \beta_j f_j^{(p)}(z) \right\} [\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)]. \quad (71)$$

Далі використовуючи функції (71) у функціоналі (66), множини значень коефіцієнтів $\{\alpha_i\}$ і $\{\beta_j\}$ отримуються з умов існування екстремуму:

$$\frac{\partial v}{\partial \alpha_i} = 0; \quad \frac{\partial v}{\partial \beta_j} = 0, \quad i = \overline{1..n}, \quad j = \overline{1..m}, \quad (72)$$

при цьому значення n береться довільним, а значення m вибирається рівним числу гілок фононного спектра при заданому значенні хвильового вектора q .

Далі розглянута важлива задача, що описує розсіяння електронів на наноструктурі при генерації електромагнітних полів у кожній з її потенціальних ям. Розв'язання цієї задачі привело до отримання нових класів розв'язків повного рівняння Шредінгера з залежним від часу потенціалом:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(z,t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{\mu(z)} \frac{\partial}{\partial z} + U(z) + U_e(z) + U_{e-em}(z,t) \right] \Psi(z,t), \quad (73)$$

$$U_{e-em}(z,t) = -2e \left\{ z [\theta(z) + \theta(z - z_N)] + z_N \theta(z - z_N) \right\} \sum_{l=1}^M \xi_l \cos \omega_l t.$$

Для розв'язання рівнянь Шредінгера такого типу запропоновано модифікувати метод Льюїса-Різенфілда для відшукування квантово-механічного інваріанта, що задовольняє співвідношення:

$$\frac{dI_p(t)}{dt} = \frac{\partial I_p(t)}{\partial t} - \frac{i}{\hbar} [I_p(t), H_p(t)] = 0, \quad (74)$$

$$H_p(t) = \frac{P^2}{2\mu_p} + U_0 + (-1)^{p+1} e F_p z_p + T_p(t) z; \quad T_p(t) = (-1)^p e F_{p+1} - 2e \sum_{l=1}^M \xi_l \cos \omega_l t.$$

З урахуванням структури гамільтоніана (73) розглядався такий лінійний інваріант:

$$I_p(t) = \alpha^{(p)}(t) P + \beta^{(p)}(t) z + \gamma^{(p)}(t). \quad (75)$$

Безпосередні обчислення дають таке рівняння:

$$\left[\frac{\partial \alpha^{(p)}}{\partial t} + \frac{\beta^{(p)}(t)}{\mu_p} \right] P + \frac{\partial \beta^{(p)}}{\partial t} z + \left[\frac{\partial \gamma^{(p)}}{\partial t} - \alpha^{(p)}(t) T_p(t) \right] = 0. \quad (76)$$

з якого отримуємо:

$$\alpha^{(p)} = \frac{1}{2\mu_p} (1 - 2\Omega_m t); \quad \beta^{(p)} = \Omega_m; \quad (77)$$

$$\gamma^{(p)} = \gamma_0^{(p)} + \frac{e}{2\mu_p} \left\{ (-1)^{p+1} F_{p+1} t (t\Omega_m - 1) + \sum_{l=1}^M \frac{2\xi_l [2\Omega_m \cos \omega_l t + (2t\Omega_m - 1)\omega_l \sin \omega_l t]}{\omega_l^2} \right\}.$$

Хвильова функція електрона всередині наносистеми відшукалась вигляді:

$$\Psi_{\lambda p}(z,t) = \exp[i\delta_\lambda(t)] \Phi_\lambda(z,t), \quad (78)$$

причому вона задовольняє рівняння:

$$\hbar \frac{d\delta_\lambda(t)}{dt} = \langle \Phi_\lambda(z, t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_p(t) | \Phi_\lambda(z, t) \rangle, \quad (79)$$

де $\delta_\lambda(t)$ - фазова функція. Функція $\Phi_\lambda(z, t)$ ж знаходиться розв'язуючи рівняння на власні значення λ оператора (75):

$$I_p(t)\Phi_\lambda(z, t) = \lambda\Phi_\lambda(z, t), \quad (80)$$

що дає:

$$\begin{aligned} \Phi_\lambda(z, t) &= \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}[\varphi_\lambda(t)z + \phi(t)z^2]\right\}, \quad \phi(t) = \frac{2\mu_p\Omega_m}{1-2\Omega_m t}; \\ \varphi_\lambda(t) &= \frac{e}{1-2\Omega_m t} \left\{ (-1)^{p+1} F_{p+1} t(t\Omega_m - 1) + \frac{2\mu_p(\gamma_0^{(p)} - \lambda)}{e} + \sum_{l=1}^M \frac{2\xi_l [2\Omega_m \cos \omega_l t + (2t\Omega_m - 1)\omega_l \sin \omega_l t]}{\omega_l^2} \right\}. \end{aligned} \quad (81)$$

Цікавий результат отримується із умови ортогональності функцій $\Phi_\lambda(z, t)$. Ми отримуємо, що вони є нормовані з величиною яка має такий вигляд:

$$\Phi_\lambda^{(0)}(t) = \frac{1}{2\sqrt{-2\text{Im}[\phi(t)]}} \left(1 + \text{erf} \left\{ \frac{\text{Im}[\varphi_\lambda(t)]}{\sqrt{-2\text{Im}[\phi(t)]}} \right\} \right) \exp\left(-\frac{\text{Im}[\varphi_\lambda(t)]^2}{2\text{Im}[\phi(t)]} \right), \quad \text{Im}[\phi(t)] \leq 0, \quad (82)$$

де $\text{erf}(x)$ - це функція помилок, причому слід зауважити, що умова $\text{Im}\phi(t) \leq 0$ виконується, оскільки безпосереднє обчислення дає:

$$\text{Im}\phi(t) = -\mu_p \Gamma_m / \hbar \left[\left(1 - \frac{2E_m t}{\hbar} \right)^2 + \left(\frac{t\Gamma_m}{\hbar} \right)^2 \right] \leq 0. \quad (83)$$

Звідси видно, що частковий випадок, коли $\text{Im}\phi(t) = 0$ відповідає ситуації, коли електронні стани є стаціонарними. Далі визначаємо фазову функцію:

$$\delta_\lambda(t) = \frac{i\hbar}{2\mu_p} \int_0^t \{ [\varphi_\lambda(\tau)]^2 + 2\phi(\tau) \} d\tau. \quad (84)$$

Отже, розв'язки, що задовольняють рівняння Шредінгера (73) такі:

$$\Psi_{\lambda p}(z, t) = \exp\left[-\frac{i\hbar}{2\mu_p} \int_0^t \{ [\varphi_\lambda(\tau)]^2 + 2\phi(\tau) \} d\tau \right] \exp\left\{ -\frac{i}{\hbar} [\varphi_\lambda(t)z + \phi(t)z^2] \right\}, \quad (85)$$

Загальні розв'язки у випадку неперервного спектру отримуються при інтегруванні (85) за всіма можливими значеннями λ , тобто:

$$\Psi_p(z, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(\lambda) \Psi_{\lambda p}(z, t) d\lambda, \quad g(\lambda) = \exp(i\mu_p \Delta z_p \lambda / \hbar). \quad (86)$$

Остаточний результат описує нові класи розв'язків повного рівняння Шредінгера, які можуть бути подані у вигляді лінійної комбінації інтегралів Френеля $C(x)$, $S(x)$:

$$\begin{aligned} \Psi_p(z, t) &= \sqrt{\frac{1-2\Omega_m t}{2\hbar\mu_p t}} \exp\left[-\frac{i\hbar}{2\mu_p} \int_0^t [\varphi_1(\tau) + 2\phi(\tau)] d\tau \right] \exp\left\{ -\frac{i}{\hbar} [\varphi^{(1)}z + \phi(t)z^2] \right\} \times \\ &\times \exp\left[i \frac{1-2\Omega_m t}{2\hbar\mu_p t} \left[\hbar \int_0^t \frac{\varphi_1(\tau)}{1-2\Omega_m \tau} d\tau + \frac{\mu_p \Delta z_p}{\hbar} + \frac{\mu_p}{\hbar(1-2\Omega_m t)} z \right]^2 \right] \times \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \times \left(A_p C \left[\sqrt{\frac{2(1-2\Omega_m t)}{\pi \hbar \mu_p t}} \left[\hbar \int_0^t \frac{\varphi_1(\tau)}{1-2\Omega_m \tau} d\tau + \frac{\mu_p \Delta z_p}{\hbar} + \frac{\mu_p}{\hbar(1-2\Omega_m t)} z \right] \right] + \right. \\
& \left. + B_p S \left[\sqrt{\frac{2(1-2\Omega_m t)}{\pi \hbar \mu_p t}} \left[\hbar \int_0^t \frac{\varphi_1(\tau)}{1-2\Omega_m \tau} d\tau + \frac{\mu_p \Delta z_p}{\hbar} + \frac{\mu_p}{\hbar(1-2\Omega_m t)} z \right] \right] \right). \tag{87}
\end{aligned}$$

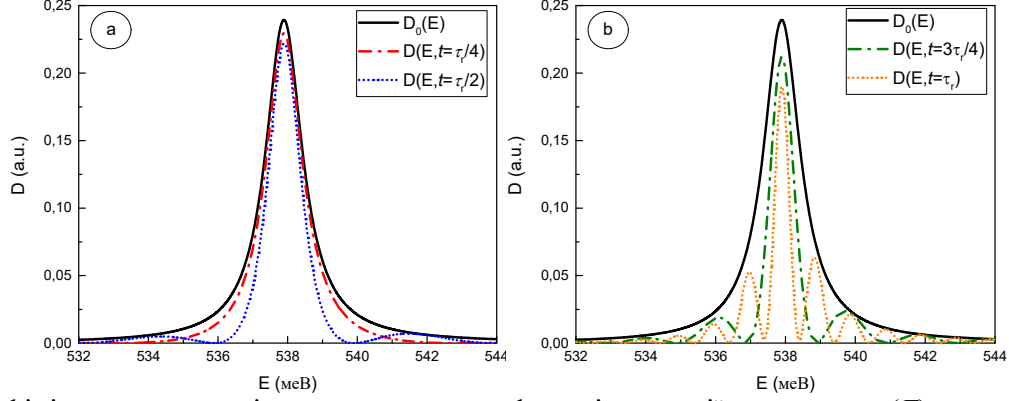


Рис. 7. Коефіцієнт прозорості наносистеми як функція енергії електрона (E) в околі першого квазістаціонарного стану локалізованого у вхідній квантовій ямі, розраховані при різних значеннях часу t , які пропорційні часу релаксації τ_r .

Розвинена теорія застосовувалась до дослідження коефіцієнта прозорості наносистеми за умов генерації електромагнітного поля у всіх її квантових ямах. На Рис. 7 подано результати розрахунку коефіцієнта прозорості трійної наносистеми при реалізації лазерних квантових переходів у всіх її ямах для характерних значень часу, виражених у величинах часу релаксації τ_r . Встановлено, що внесок квантових переходів відмінних від основного при значеннях часу, співмірних з часом релаксації приводить до руйнування електронного квазістаціонарного стану та неоднозначності у визначеності його резонансних енергій та ширин.

Сьомий розділ присвячено дослідженню екситонних станів та екситон-фононної взаємодії у нітридних наносистемах. Підхід до розрахунку електронних потенціальних профілів нітридних наноструктур дає змогу розраховувати також потенціальні профілі цих наносистем для дірок. У загальному вигляді діелектрична проникність наноструктури, щільність наноструктури, ефективна маса електронів і дірок і тензор жорсткості можуть бути представлені таким чином:

$$A^{(\alpha)}(z_\alpha) = \sum_{p=0}^N \left\{ \varepsilon^{(\alpha)}(z_\alpha) \quad m^{(\alpha)}(z_\alpha) \quad C_{iklm}(z) \quad \rho(z) \right\}^T \left[\theta(z_\alpha - z_\alpha^{(p)}) - \theta(z_\alpha - z_\alpha^{(p+1)}) \right]; \quad \alpha = \{e, h\}. \tag{88}$$

де $\varepsilon_0^{(\alpha)}$, $\varepsilon_1^{(\alpha)}$ - відповідно діелектричні проникності AlN і AlGaIn напівпровідників. Тоді екситонний гамільтоніан має такий вигляд:

$$H_{ex}(\rho, z_e, z_h) = E_g + \hat{H}_{(e)}(z_e) + \hat{H}_{(h)}(z_h) + \hat{H}_r(\rho, z_e, z_h) + V(|z_e - z_h|), \tag{89}$$

де заборонена зона як функція температури T розраховується виходячи із формули Варшні:

$$E_g^{(*)}(T) = E_0^{(*)} - a^{(*)} T^2 / (b^{(*)} + T), \quad E_0^{(*)} = E_g^{(*)}(T) \Big|_{T=0}, \quad * = \{\text{AlN}, \text{GaIn}\}, \tag{90}$$

де $a^{(\alpha)}$, $b^{(\alpha)}$ - параметри Варшні для AlN і GaIn напівпровідників. Отже, тепер складові $\hat{H}_{(e)}(z_e)$ і $\hat{H}_{(h)}(z_h)$, що відповідають вільним електрону та дірці, враховуючи є такими:

$$\hat{H}^{(\alpha)}(z_\alpha) = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z_\alpha} \frac{1}{m^{(\alpha)}(z_\alpha)} \frac{\partial}{\partial z_\alpha} + U^{(\alpha)}(z_\alpha) + U_E^{(\alpha)}(z_\alpha); \quad (91)$$

$$U_E^{(\alpha)}(z_\alpha) = \sum_{p=1}^N (-1)^{p-1} q^{(\alpha)} F_p \left(z_\alpha - \frac{F_{p-1} z_\alpha^{(p-1)}}{F_p} \right) \left[\theta(z_\alpha - z_\alpha^{(p-1)}) - \theta(z_\alpha - z_\alpha^{(p)}) \right],$$

Кулонівська взаємодія між електроном та діркою описується складовою гамільтоніана, що визначена як:

$$V(|z_e - z_h|) = -e^2 / 4\pi\epsilon_0 \epsilon^{(\alpha)}(z_\alpha) \sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}, \quad (92)$$

Відносний рух електрона та дірки описувався рух у системі координат, яка віднесена до їхнього центра мас. Такий рух визначається складовою гамільтоніана:

$$\hat{H}_r(\rho, z_e, z_h) = -\frac{\hbar^2}{2\mu(z_e, z_h)} \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \right); \quad \mu(z_e, z_h) = \frac{m^{(e)}(z_e) m^{(h)}(z_h)}{m^{(e)}(z_e) + m^{(h)}(z_h)}. \quad (93)$$

Для отримання спектру та хвильових функцій екситона слід знайти розв'язки стаціонарного рівняння Шредінгера:

$$\hat{H}_{ex}(\rho, z_e, z_h) \Psi(\rho, z_e, z_h) = E_{ex} \Psi(\rho, z_e, z_h). \quad (94)$$

Спершу знайдемо окремо спектра та хвильові функції вільних електрона та дірки. Для цього знайдемо розв'язки стаціонарного рівняння Шредінгера в наносистемі з довільною кількістю шарів:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z_\alpha} \frac{1}{m^{(\alpha)}(z_\alpha)} \frac{\partial}{\partial z_\alpha} + U^{(\alpha)}(z_\alpha) + U_E^{(\alpha)}(z_\alpha) \right] \Psi^{(\alpha)}(z_\alpha) = E^{(\alpha)} \Psi^{(\alpha)}(z_\alpha), \quad (94)$$

$$\Psi^{(\alpha)}(z_\alpha) = A_{(0)}^\alpha e^{\zeta_{(0)}^\alpha z_\alpha} \theta(-z_\alpha) + B_{(N+1)}^\alpha e^{-\zeta_{(N+1)}^\alpha z_\alpha} \theta(z_\alpha - z_\alpha^{(N+1)}) +$$

$$+ \sum_{p=1}^N \left\{ A_{(p)}^\alpha Ai[\zeta_{(p)}^\alpha(z_\alpha)] + B_{(p)}^\alpha Bi[\zeta_{(p)}^\alpha(z_\alpha)] \right\} \left[\theta(z_\alpha - z_\alpha^{(p-1)}) - \theta(z_\alpha - z_\alpha^{(p)}) \right]; \quad (95)$$

$$\zeta_{(p)}^\alpha(z_\alpha) = \sqrt[3]{\frac{2(-1)^{p-1} m_p^{(\alpha)} q^{(\alpha)} F_p}{\hbar^2} \left[\frac{U^{(\alpha)}(z_\alpha) - E}{q^{(\alpha)}} + (-1)^{p-1} (F_p z_\alpha - F_{p-1} z_\alpha^{(p-1)}) \right]}.$$

В такому разі, для того, щоб виконати розрахунок енергії зв'язку екситона, ми подамо екситонну хвильову функцію у такому вигляді:

$$\Psi_{nm}(\rho, z_e, z_h) = \Psi_n^{(e)}(z_e) \Psi_m^{(h)}(z_h) \Phi(\rho), \quad (96)$$

де функції $\Phi(\rho)$ вибираються у такому вигляді

$$\Phi(\rho) = \sqrt{2/\pi} e^{-\rho/\lambda} / \lambda, \quad (97)$$

а λ - варіаційний параметр. Тепер енергія зв'язку екситона в основному стані буде визначатися з умови мінімізації для функціоналу за цим параметром:

$$E_{nm}^{ex} = \min_{\lambda} \frac{\langle \Psi_n^{(e)}(z_e) \Psi_m^{(h)}(z_h) \Phi(\rho) | \hat{H}_{ex}(\rho, z_e, z_h) | \Psi_n^{(e)}(z_e) \Psi_m^{(h)}(z_h) \Phi(\rho) \rangle}{\langle \Psi_n^{(e)}(z_e) \Psi_m^{(h)}(z_h) \Phi(\rho) | \Psi_n^{(e)}(z_e) \Psi_m^{(h)}(z_h) \Phi(\rho) \rangle}. \quad (98)$$

Уведемо тепер для екситона квантовану хвильову функцію виду:

$$\hat{\Psi}(\rho, z_e, z_h) = \sum_{\vec{k}_e, \vec{k}_h} \Psi_{\vec{k}_e, \vec{k}_h}(\rho, z_e, z_h) \hat{a}_{\vec{k}_e, \vec{k}_h}, \quad k_\alpha = \sqrt{2m_p^{(\alpha)} [U^{(\alpha)}(z_\alpha^{(p)}) + U_E^{(\alpha)}(z_\alpha^{(p)})] / \hbar^2}, \quad (99)$$

де $\hat{a}_{\vec{k}_e, \vec{k}_h}$ - бозонний оператор знищення стану з комутаційним співвідношенням:

$$\left[\hat{a}_{\vec{k}_e, \vec{k}_h}, \hat{a}_{\vec{k}'_e, \vec{k}'_h}^+ \right] = \delta_{\vec{k}_e, \vec{k}'_e} \delta_{\vec{k}_h, \vec{k}'_h} \delta_{\vec{k}, \vec{k}'}, \text{ тоді екситонний гамільтоніан набуває канонічного вигляду:}$$

$$\hat{H}_{ex} = \int dz_e dz_h \hat{\Psi}^+(\rho, z_e, z_h) H_{ex}(\rho, z_e, z_h) \hat{\Psi}(\rho, z_e, z_h) = \sum_{\vec{k}_e, \vec{k}_h} \tilde{E}_{\vec{k}_e, \vec{k}_h}(\vec{k}_e, \vec{k}_h) \hat{a}_{\vec{k}_e, \vec{k}_h}^+ \hat{a}_{\vec{k}_e, \vec{k}_h}, \quad (100)$$

де $\tilde{E}_{\vec{k}_e, \vec{k}_h}(\vec{k}_e, \vec{k}_h) = E_{\vec{k}_e, \vec{k}_h}(\vec{k}_e, \vec{k}_h) + \hbar^2 k^2 / 2\mu(z_e, z_h)$ - це закон дисперсії для екситонів у стані (k_e, k_h) , \vec{k} - це квазіімпульс екситона, набуваючий усіх значень у зоні Бріллюена.

Використовуючи розвинену в 4 розділі дисертації теорію екситонів досліджувались механізми взаємодії екситонів з акустичними фононами. Крім того, розглянуто важливі випадки коли кристалічна кратка напівпровідників утворюючих наносистему має структуру типу вюрциту і типу цинкової обманки. Отримані гамільтоніани, що описують взаємодію з фононами через п'єзоелектричний та деформаційний потенціали у випадку решітки типу цинкової обманки такі:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{pz}^{ZB} &= \sum_{q n_1} \sum_{p=1}^N \sum_{s=1}^2 \left[A^{(p)} e^{qz} + B^{(p)} e^{-qz} - \frac{e_{14}^{(p)}}{\varepsilon_0 \varepsilon^{(p)}} q \sqrt{\frac{2\hbar}{S_{\perp} \rho^{(p)} \omega_{n_1 q}}} \left\{ e^{qz} \int_0^z e^{-q\xi} \Phi_s^{(p)}(q, \xi) d\xi - e^{-qz} \int_0^z e^{q\xi} \Phi_s^{(p)}(q, \xi) d\xi \right\} \right] \times \\ &\times \left[\hat{b}_{n_1}^+(-\vec{q}) + \hat{b}_{n_1}(\vec{q}) \right] e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_1} \left[\theta(z_p - z_{p-1}) - \theta(z_p - z_{p+1}) \right]; \end{aligned} \quad (101)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_{def}^{ZB} &= a_C^{ZB} \sum_{q n_1} \sum_{p=1}^N \sum_{s=1}^2 \sqrt{\frac{\hbar}{2 \|u_s^{(p)}(q)\|^2 S_{\perp} \omega_{n_1 q}}} \left[qq_x c_1^{(p)} + \lambda_s^{(p)} \left\{ (\lambda_s^{(p)})^2 + (\chi_1^{(p)})^2 \right\} \right] \left(A_{2s-1}^{(p)} e^{\lambda_s^{(p)} z} + A_{2s}^{(p)} e^{-\lambda_s^{(p)} z} \right) \\ &+ q_y \left(A_2^{(p)} e^{-z} + B_2^{(p)} e^{z} \right) \left[\hat{b}_{n_1}^+(-\vec{q}) + \hat{b}_{n_1}(\vec{q}) \right] e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_1} \left[\theta(z - z_p) - \theta(z - z_{p+1}) \right], \end{aligned}$$

а у випадку решітки типу вюрциту:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{pz}^{WZ} &= \sum_{q n_1} \sum_{p=1}^N \sum_{s=1}^2 \left(\tilde{A}^{(p)} e^{qz} + \tilde{B}^{(p)} e^{-qz} - \frac{1}{\varepsilon_0 \varepsilon^{(p)}} \sqrt{\frac{\hbar}{2 S_{\perp} \rho^{(p)} \omega_{n_1 q}}} \times \right. \\ &\times \left. \left\{ e^{qz} \int_0^z e^{-q\xi} \tilde{\Phi}_s^{(p)}(q, \xi) d\xi - e^{-qz} \int_0^z e^{q\xi} \tilde{\Phi}_s^{(p)}(q, \xi) d\xi \right\} \right) \left[\hat{b}_{n_1}^+(-\vec{q}) + \hat{b}_{n_1}(\vec{q}) \right] e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_1} \left[\theta(z - z_p) - \theta(z - z_{p+1}) \right]; \end{aligned} \quad (102)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_{def}^{WZ} &= \sum_{q n_1} \sum_{p=1}^N \sum_{s=1}^2 \sqrt{\frac{\hbar}{2 \|u_s^{(p)}(q)\|^2 S_{\perp} \omega_{n_1 q}}} \left\{ (a_{2c} - D_2) qq_x c_1^{(p)} - (a_{1c} - D_1) \lambda_s^{(p)} \left\{ (\lambda_s^{(p)})^2 + (\chi_1^{(p)})^2 \right\} \right\} \times \\ &\times \left(\tilde{A}_{2s-1}^{(p)} e^{\lambda_s^{(p)} z} - \tilde{A}_{2s}^{(p)} e^{-\lambda_s^{(p)} z} \right) + q_y \left(\tilde{A}_2^{(p)} e^{-z} + \tilde{B}_2^{(p)} e^{z} \right) \left[\hat{b}_{n_1}^+(-\vec{q}) + \hat{b}_{n_1}(\vec{q}) \right] e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_1} \left[\theta(z - z_p) - \theta(z - z_{p+1}) \right], \end{aligned}$$

Тут a_{1c}, a_{2c}, D_1, D_2 - константи зв'язку деформаційного потенціалу для валентної зони.

Використовуючи бозонні оператори $\hat{b}_{n_1}^+$ і \hat{b}_{n_1} подамо гамільтоніан фононів у вигляді:

$$\hat{H}_{ph}^{ac} = \sum_{n_1 q} \hbar \omega_{n_1 q} \left(\hat{b}_{n_1 q}^+(\vec{q}) \hat{b}_{n_1 q}(\vec{q}) + \frac{1}{2} \right); \quad \left[\hat{b}_{n_1 q}^+(\vec{q}), \hat{b}_{n_1 q'}(\vec{q}') \right] = \delta_{n_1 n_1'} \delta_{q q'}. \quad (103)$$

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:

$$\hat{H}_{ex-ph}^{def(pz)} = \int dr_e dr_h \hat{\Psi}^+(\rho, r_e, r_h) \left(\hat{H}_{e-ph}^{def(pz)} + \hat{H}_{h-ph}^{def(pz)} \right) \hat{\Psi}(\rho, r_e, r_h) = \sum_{\vec{k}_e, \vec{k}_h, q n_1} F_{\vec{k}_e, \vec{k}_h, q n_1}^{def(pz)}(q) \hat{a}_{\vec{k}_e, \vec{k}_h}^+ \hat{a}_{\vec{k}_e, \vec{k}_h} \left[\hat{b}_{n_1}^+(-\vec{q}) + \hat{b}_{n_1}(\vec{q}) \right], \quad (104)$$

де відповідні функції зв'язку такі:

$$F_{\vec{k}_e \vec{k}_h q n_1}^{def(pz)}(q) = \sum_{p=1}^N \left[\iint |\Phi^{(p)}(\rho)|^2 d\rho^2 \int_{z_{p-1}}^{z_p} \Psi^{(e)}(E_{\vec{k}\vec{k}_e}, z_e) \left(\Psi^{(e)}(E_{\vec{k}\vec{k}_e}, z_e) \right)^* dz_e \times \right. \\ \left. \times \int_{z_{p-1}}^{z_p} \Psi^{(h)}(E_{\vec{k}\vec{k}_h}, z_h) \phi_{def(pz)}^{ZB(WZ)}(q, \omega_{n_1 q}, z_h) e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_h} \left(\Psi^{(h)}(E_{\vec{k}\vec{k}_h}, z_h) dz_h \right)^* \right] \left[\theta(z - z_p) - \theta(z - z_{p+1}) \right]. \quad (104)$$

Отже, гамільтоніан системи екситона Ван'є-Мотта з акустичними фононами таких:

$$\hat{H} = \hat{H}_{ex} + \hat{H}_{ph}^{ac} + \hat{H}_{ex-ph}^{def} + \hat{H}_{ex-ph}^{pz} = \sum_{\vec{k}\vec{k}_e \vec{k}_h} E_{\vec{k}\vec{k}_e \vec{k}_h}(\vec{k}_e, \vec{k}_h) \hat{a}_{\vec{k}\vec{k}_e \vec{k}_h}^+ \hat{a}_{\vec{k}\vec{k}_e \vec{k}_h} + \sum_{n_1 q} \hbar \omega_{n_1 q} \left(\hat{b}_{q n_1}^+(\vec{q}) \hat{b}_{q n_1}(\vec{q}) + \frac{1}{2} \right) + \\ + \sum_{\vec{k}\vec{k}_e \vec{k}_h q n_1} \left[F_{\vec{k}\vec{k}_e \vec{k}_h q n_1}^{def}(q) + F_{\vec{k}\vec{k}_e \vec{k}_h q n_1}^{pz}(q) \right] \hat{a}_{\vec{k}+\vec{q} \vec{k}_e \vec{k}_h}^+ \hat{a}_{\vec{k}\vec{k}_e \vec{k}_h} \left[\hat{b}_{n_1}^+(-\vec{q}) + \hat{b}_{n_1}(\vec{q}) \right]. \quad (105)$$

Скористаємося тепер загальною температурною функцією Гріна, що визначається таким чином:

$$G_{nm}(\vec{k}, \omega') = \frac{1}{\hbar \omega' - \tilde{E}_{\vec{k}\vec{k}_e \vec{k}_h}(\vec{k}_e, \vec{k}_h) - M(k, \omega')}; \quad \omega' = \omega + i\eta, \quad \eta \rightarrow 0, \quad (106)$$

де n і m – номери рівнів дискретного спектру електрона та дірки у стаціонарних станах n і m відповідно, а масовий оператор, що враховує внесок від однофононного процесу є таким:

$$M(k, \omega') = \sum_{q n_1} F_{n_1 k n_1}^{def(pz)}(q) \left[F_{n k n_1}^{def(pz)}(q) \right]^* \left\{ \frac{1 + \nu_{n_1}(q)}{\hbar \omega' - E_{\vec{k}\vec{k}_e \vec{k}_h}(\vec{k}_e, \vec{k}_h) - \hbar^2 (\vec{k} - \vec{q})^2 / 2\mu(z_e, z_h) - \Omega_{n_1}(q)} + \right. \\ \left. + \frac{\nu_{n_1}(q)}{\hbar \omega' - E_{\vec{k}\vec{k}_e \vec{k}_h}(\vec{k}_e, \vec{k}_h) - \hbar^2 (\vec{k} + \vec{q})^2 / 2\mu(z_e, z_h) + \Omega_{n_1}(q)} \right\}, \quad \nu_{n_1}(q) = \left\{ \exp(\Omega_{n_1}(q)/k_B T) - 1 \right\}^{-1}. \quad (107)$$

Величини $F_{n k n_1}^{def(pz)}(q)$, які входять у вираз для масового оператора розраховуються як матричні елементи гамільтоніанів (101), (102) на екситонних хвильових функціях. З використанням масового оператора виконано розрахунок температурної залежності екситонних станів, що визначається функцією форми для смуги поглинання світла, яка визначається таким чином:

$$\Im(k, \xi, T) = \frac{\rho(k, \xi, T)}{2} = - \frac{\text{Im} M(k, \xi)}{\left[\xi - \tilde{E}_{\vec{k}\vec{k}_e \vec{k}_h}(\vec{k}_e, \vec{k}_h) - \text{Re} M(k, \xi) \right]^2 + [\text{Im} M(k, \xi)]^2}; \quad \xi = \hbar \omega. \quad (108)$$

Прийmemo до уваги той факт, що при слабкій екситон-фононній взаємодії дискретна частина спектру переформовується, величини зміщення Δ_{nm} та згасання γ_{nm} такі:

$$\Delta_{nm} = \frac{S_{\perp}}{(2\pi)^2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} \sum_{n_1} P \iint \left[\nu_{n_1}(q) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right] \frac{F_{\vec{k}_e \vec{k}_h q n_1}^{def(pz)}(q) \left[F_{n q \vec{k}_h \vec{k}_e}^{def(pz)}(q) \right]^*}{E_{nm} - E_{\vec{n}\vec{m}\vec{q}} + \Omega_{n_1}(q)} d^2 \vec{q}; \quad (109) \\ \gamma_{nm} = \frac{S_{\perp}}{2\pi} \sum_{\vec{n}\vec{m}} \sum_{n_1} P \iint \left[\nu_{n_1}(q) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right] F_{\vec{k}_e \vec{k}_h q n_1}^{def(pz)}(q) \left[F_{n q \vec{k}_h \vec{k}_e}^{def(pz)}(q) \right]^* \delta \left[E_{nm} - E_{\vec{n}\vec{m}\vec{q}} + \Omega_{n_1}(q) \right] d^2 \vec{q}.$$

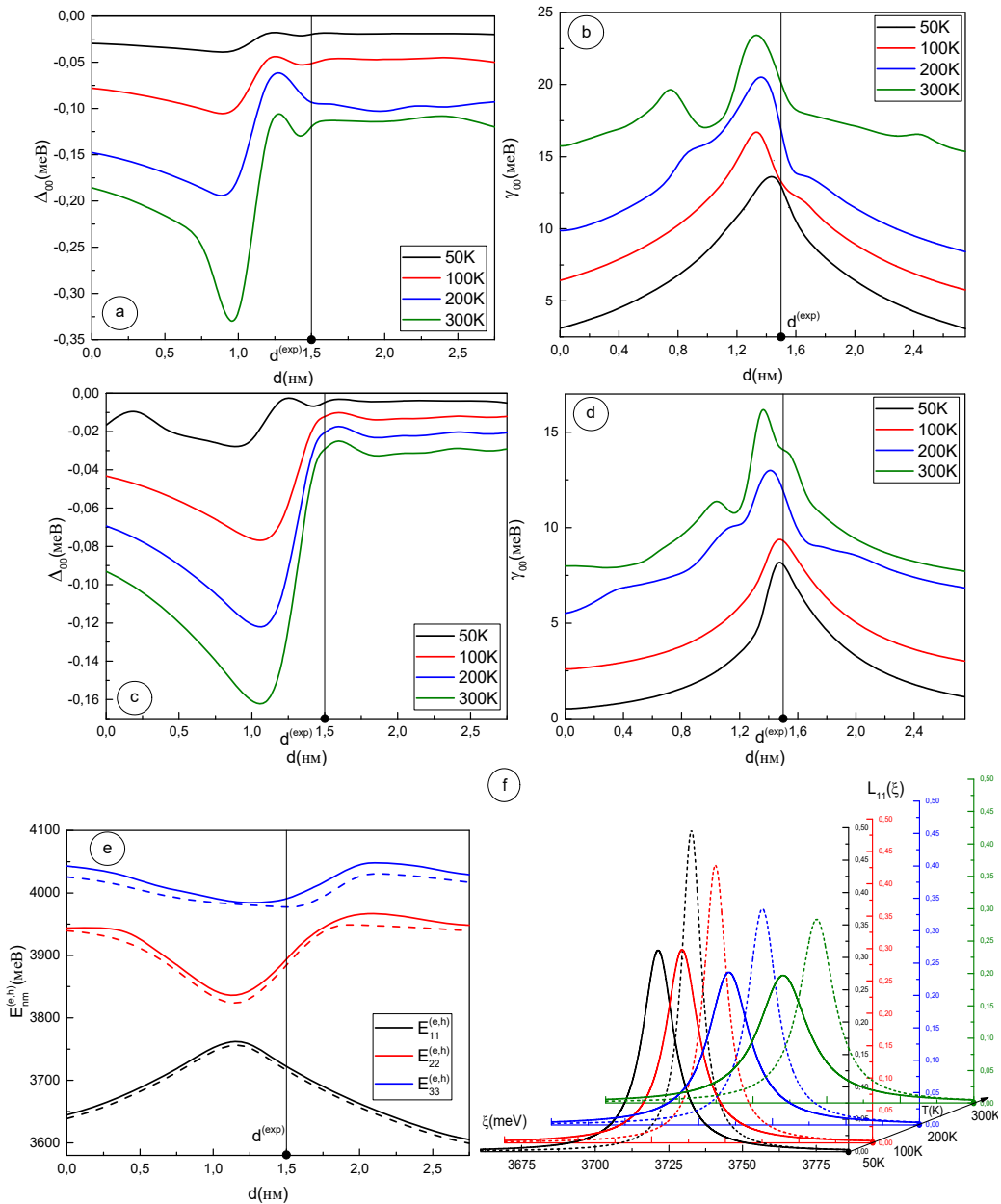


Рис. 8. Залежності зміщень спектру екситонів та величини згасань екситонних станів розраховані залежно від ширини сумарної потенціальної ями d для різних температур. Рисунок а), б) відповідають напівпровідникам типу вюрциту, а рисунки с), д) напівпровідникам цинкової обманки. Енергії електронно-діркових переходів $E_{nm}^{(e,h)}$ (е) і функції форми смуги поглинання світла (ф), розраховані в околі цих енергій для різних температур. На рис. (е), (ф) суцільні лінії відповідають напівпровідникам з ґраткою типу вюрциту, штрихові - напівпровідникам з ґраткою типу цинкової обманки.

Залежності, що подані на Рис. 8а, б, с, д, е відображають результати розрахунків температурних зміщень екситонного спектру, їх згасань, а також енергій електронно-діркових переходів розрахованих для напівпровідникової наносистеми, що може мати кристалічну структуру типу вюрциту і типу цинкової обманки. Отримані результати свідчать про той факт, що у вюрцитних наносистемах екситон-фононна взаємодія є сильнішою ніж наносистемах типу цинкової обманки.

Крім того, як видно з Рис. 8е у вюрцитних наносистемах екситон-фононна взаємодія набагато більше пригнічує інтенсивність електронно-діркових переходів.

ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ ТА 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 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 та розглянуто можливість формування додаткової гармоніки з частотою, рівною подвоєній робочій частоті квантового каскадного лазера.
- 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 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.
- 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.
- Встановлено, що для значних концентрацій електронів зростає вплив дисипативних процесів, спричинених просторовим динамічним зарядом. Для таких концентрацій 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.
- 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.
- 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.
- Вперше розвинено математичний апарат послідовної аналітичної теорії мод поперечних, флексу-ральных та ділататіональних мод акустичних фононів, виникаючих у нітридних бінарних

AlN/GaN і потрійних AlGaIn/GaN багатошарових РТС. На базі розвинутої теорії виконано розрахунки спектру та компонент поля зміщення поперечних, флексуальних 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.

- Розвинено аналітичну теорію п'єзоелектричного ефекту, зумовленого флексуальними та ділататіональними акустичними фононами в багатошарових нітридних РТС. Виконано дослідження спектру згинувих та розтягувальних 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 флексуальними та ділататіональними в багатошарових нітридних РТС через деформаційний та п'єзоелектричний потенціали для довільних значень температури за наявності п'єзоелектричного ефекту. На основі розвинутої 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 77K і 300 K набувають як від'ємних так і додатних 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 врахуванням підсистеми акустичних фононів за довільних значень температури.
- Виконано розрахунки часів фононної релаксації, коефіцієнта прозорості наноструктури та густини тунельного струму з врахуванням 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.
- 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.
- Встановлено, що при 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.
- Розглянуто повне рівняння Шредінгера з залежним від часу потенціалом, що описує тунельний транспорт 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. Точні 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.
- 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 $t > \tau_{rel}$. Це дозволяє застосовувати магнітне поле для зміни енергії квантових переходів між електронними рівнями. Аналогічним чином, 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.
- Розрахунки електронної провідності наносистеми у залежності від індукції магнітного поля показали, що зміною величини індукції можна отримати збільшення величини електронної провідності 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.
- 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 переважають аналогічні величини для наносистеми типу цинкової обманки. 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.

НАУКОВІ ПРАЦІ, В ЯКИХ ОПУБЛІКОВАНІ ОСНОВНІ НАУКОВІ РЕЗУЛЬТАТИ ДИСЕРТАЦІЇ

1. Ткач М. В., Сеті Ю. О., **Бойко І. В.**, Гринишин Ю. Б.. Взаємодія електронів з обмеженими фононами у багатошаровій резонансно-тунельній структурі // *Фіз. хім. тверд. тіла.* - 2014. - Т. 15, № 1. - С. 20-28. [категорія «А»]
2. **Boiko 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. **Boiko 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. **Boiko 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. **Boiko I. V.**, Gryschuk 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.**, Грищук 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. **Boiko I. V.**, Tkach M. V., Seti Ju. O. Self-Consistent Calculation of Potential Profile of GaN/AlN Resonance Tunneling Structures // *Phys. Chem. Solid St.*, 2017. Vol. 18, No. 3. P. 288-296 [Web of Science, категорія «А»]
11. **Boiko 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. **Boiko 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]

ОПУБЛІКОВАНІ ПРАЦІ АПРОБАЦІЙНОГО ХАРАКТЕРУ

27. **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.
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. **Воуко І.**, 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 // «Лашкарівські 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. **Воуко І.**, 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. **Воуко І. В.**, 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. **Воуко І.**, 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. **Воуко І.**, 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. **Воуко І.**, 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. **Воуко І.**, 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]

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 багатошарових низьковимірних наносистемах – резонансно-тунельних структурах, при урахуванні чинників різної фізичної природи, які впливають на процеси електронного тунелювання та електронні спектральні параметри. Дані процеси можуть бути як зумовленими розмірним квантуванням у досліджуваних 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, що подані 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. У дисертаційній роботі досліджено електронний транспорт у відкритих наносистемах при урахуванні внеску статичного по динамічного просторових зарядів, з'ясовано їх дисипативний вплив на електронні квазістаціонарні стани. Досліджено можливості підсилення електронної провідності наносистем за рахунок генерації додаткових гармонік у квантових переходах. Розроблено метод розрахунку потенціальних схем нітридних наноструктур та обґрунтовано його ефективність. Розвинено теорію акустичних фононів в багатошарових нітридних та арсенідних наносистемах, досліджено типи цих фононів, та їхні спектри, а також п'єзоелектричний ефект пов'язаний з акустичними фононами. Досліджено взаємодію електронів та екситонів з акустичними фононами при відмінних від нуля температурах шляхом застосування мацубарівських функцій Гріна, вперше встановлено та проаналізовано механізми такої взаємодії через деформаційних та п'єзоелектричний потенціали. Здійснено розвиток методу відшукування квантово-механічних варіантів та варіаційних методів у застосуванні до тунельного транспорту в електрон-фононних системах та залежних від часу потенціалах.

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 dissertation work is dedicated to theoretical studies of electronic processes occurring in multilayer low-dimensional nanosystems - resonant tunnel structures, taking into account factors of various physical natures that affect electron tunneling processes and electronic spectral parameters. These processes can be either due to size quantization in the objects under study, such as the possibility of generating an electromagnetic field with different frequencies in electronic transitions, or have a dissipative nature, such as electron-phonon interaction. The research presented in the dissertation 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 results obtained. In the dissertation work, electron transport in open nanosystems was studied taking into account the contribution of static to dynamic space charges, and their dissipative influence on electronic quasi-stationary states was clarified. The possibilities of enhancing the electronic conductivity of nanosystems due to the generation of additional harmonics in quantum transitions have been studied. A method for calculating potential schemes of nitride nanostructures has been developed, and its effectiveness has been substantiated. The theory of acoustic phonons in multilayer nitride and arsenide nanosystems has been developed, the types of these phonons and their spectra have been studied, and the piezoelectric effect associated with acoustic phonons has been explored. The interaction of electrons and excitons with acoustic phonons at non-zero temperatures was studied using Matsubara Green's functions; the mechanisms of such interaction through deformation and piezoelectric potentials were established and analysed for the first time. The development of a method for determining quantum mechanical invariants and variational methods in their application to tunnel transport in electron-phonon systems and time-dependent potentials has been carried out.

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.