

Література

1. Поляк Б.Т., Щербаков П.С. Робастная устойчивость и управление. – Москва: «Наука», 2002 – 304 с.
2. Рост кристаллов / [Горилицкий В. И., Гринев Б. В., Заславский Б. Г. и др.]. – Харьков: АКТА, 2002. – 535 с.
3. Суздаль В.С. Параметрическая идентификация VARMAX моделей процесса кристаллизации крупногабаритных монокристаллов / В. С. Суздаль, Ю. М. Епифанов, А. В. Соболев, И. И. Тавровский // Нові технології. Науковий вісник Кременчуцького університету економіки, інформаційних технологій і управління. – 2009. – №4(26). – С. 23–29.
4. Grimble M.J. H_{∞} controllers with a PID structure / M. J. Grimble // Trans. ASMEJ. Dynam. Syst. Meas. Control. – 1990. – Vol. 1.112. – P. 325 – 330.
5. Chen B.S. A genetic approach to mixed H_2/H_{∞} optimal PID Control / B. S. Chen, Y. M. Chiang, C. H. Lee // IEEE Control System Magazine. – 1995. – Vol. 15. – P. 51–56.
6. Ho W. K. Tuning of PID controllers based on gain and phase margin specifications / W. K. Ho, C. C. Hang, L. S. Cao // Automatica. – 1995. – 31(3). – P. 497–502.
7. Broyden C.G. The Convergence of a Class of Double-Rank Minimization Algorithms / C. G. Broyden // Journal Inst. Math. Applic. – 1970. – Vol. 6. – P. 76–90.

В роботі обґрунтовано вплив просторового квантування енергетичного спектру електронного газу на його концентрацію в тонких пластинкових кристалах. Показано, що при певних умовах спостереження тонкоплівкові кристали можуть випромінювати неперервні та дискретні спектри променів світла

Ключові слова: хвильова функція, закон дисперсії, ефективна маса, потенціальна яма

В работе обосновано влияние пространственного квантования энергетического спектра электронного газа на его концентрацию в тонких пластинчатых кристаллах. Показано, что при определенных условиях наблюдения тонкопластинчатый кристалл может излучать непрерывные и дискретные лучи света

Ключевые слова: волновая функция, закон дисперсии, эффективная масса, потенциальная яма

The thesis grounds the influence of spatial quantization of electron gas energy spectrum on its concentration in thin lamellar crystals. It is shown that under certain observing conditions thin-film crystals may emit continuous and discrete spectrums of light rays

Key words: wave function, effective mass, dispersion law, potential well

УДК 621.373.8+621.382

ТОНКА КРИСТАЛІЧНА ПЛІВКА ЯК КВАНТОВА РОЗМІРНА СТРУКТУРА

Я. С. Буджак

Доктор фізико-математичних наук, професор*

О. В. Зуб

Аспірантка*

E-mail: oliazub@gmail.com.ua

*Кафедра напівпровідникової електроніки
Національний університет «Львівська політехніка»
вул. С. Бандери, 12, м. Львів, 79013

1. Вступ

Із квантової механіки відомо, що в тонкій кристалічній пластині з мікроскопічною товщиною d може

спостерігатися так зване просторове квантування енергетичного спектру носіїв струму, яке приводить до того, що багато властивостей тонкої пластини мають кореляційну залежність від товщини d .

2. Постановка задачі

В квантовій механіці рівняння Шредінгера для такої пластинкової структури розв'язується за допомогою методу розділення змінних.

З цією метою координатні осі (x, y) розташовують в площині кристалічної структури, в якій розміри кристала макроскопічні, а його товщина d, яка відраховується вздовж координатної вісі z, має мікроскопічні розміри.

При таких умовах спостереження необхідно вважати, що носії струму в площині кристала рухаються в двохмірному періодичному полі, тому їхня хвильова функція – це відома двохмірна функція Блоха $\psi_1(x,y)$, а закон дисперсії цього руху – простий параболічний $\epsilon_1(p_x, p_y) = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m}$, де m – ефективна маса носія струму, p_x, p_y – відповідні компоненти електронного квазіімпульсу [1,2].

3. Метод розв'язку та його аналіз

Рух носія заряду вздовж вісі z – еквівалентний рухові в прямокутній потенціальній ямі шириною d і глибиною U eB. Хвильова функція $\psi_2(z)$ і закон дисперсії $\epsilon_2(d)$ для носія заряду в стані такого руху теж відомі [1,2].

Далі, використовуючи метод розділення змінних для розв'язку рівняння Шредінгера, легко знайдемо повну хвильову функцію $\psi(x,y,z)$ та повний закон дисперсії носія заряду $\epsilon(d, p_x, p_y)$ в тонкій провідній кристалічній пластинці:

$$\psi(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}) = \psi_1(x, y) \psi_2(z) \tag{1}$$

$$\epsilon(d, p_x, p_y) = \epsilon_1(p_x, p_y) + \epsilon_2(d) = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m} + \frac{h^2}{8\pi m d^2} \left(\frac{4}{\pi}\right) \cdot p_z^2, \tag{2}$$

де h – постійна Планка, а p_z – безрозмірний корінь такого трансцендентного рівняння.

$$\frac{n\pi}{2} - p_z - \arcsin(p_0 p_z) = 0, \tag{3}$$

$$\text{де } p_0 = \frac{h}{2\pi d} \sqrt{\frac{2}{mU}}, n=1,2,3... \tag{3a}$$

Корені цього рівняння залежать від чисел квантових n, які визначають власні корені p_{zn} і рівні енергії (2) за їх зростанням.

Рівняння (3) має розв'язок з фізичним змістом лише тоді, коли аргумент $\arcsin(p_0 p_z)$ відповідає умові $p_0 p_{zn} \leq 1$.

За цієї умови, коли $p_0 p_{zn} = 1$, тобто $p_{zn} = \frac{1}{p_0}$, знайдемо максимальне значення числа n_{max} , при якому рівняння (3) ще має реальний розв'язок з фізичним змістом. Оскільки $\arcsin(p_0 p_{zn}) = \arcsin(1) = \frac{\pi}{2}$, тому при цій умові знаходимо, що $n_{max} = \text{floor}\left(\frac{2}{\pi p_0} + 1\right)$ \tag{5}

В цій формулі функція floor(x) в середовищі MathCAD означає найбільше ціле число менше або рівне x.

Формула (5) показує, що кількість власних коренів рівняння (3) залежить від безрозмірного параметра p_0 (формула 3a). Точні комп'ютерні розрахунки власних

коренів p_{zn} цього рівняння показують, що значення цих коренів пропорційні їхнім номерам і всі вони позитивні.

Якщо виходити з того, що в рівнянні (3) аргумент $\arcsin(p_0 p_{zn})$ менший або дорівнює одиниці, то розклавши цю функцію в ряд Тейлора і обмежившись при цьому одним першим доданком розвинення, маємо:

$$\frac{n\pi}{2} - (1 + p_0) p_{zn} = 0 \tag{6}$$

Отже наближений корінь рівняння (3) дорівнює

$$p_{zn} = \frac{n\pi}{2(1 + p_0)} \tag{7}$$

Точні комп'ютерні розрахунки коренів цього рівняння показують, що вони з великою точністю співпадають із своїм наближеннями (7). Тому в наступних розрахунках будемо користуватись власними коренями рівняння (3), які описуються формулою (7). В цьому наближенні закон дисперсії носіїв струму в тонкій кристалічній пластинці, згідно з формулою (2) має таке значення:

$$\epsilon(d, p_x, p_y) = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m} + \pi \cdot \left(\frac{h^2}{(1 + p_0)^2 \cdot 8\pi m d^2} \right) n^2 \tag{8}$$

Використаємо тепер цей закон дисперсії для розрахунку концентрації n(d) вільних носіїв струму в даній структурі, аналогічно як це зроблено в роботах [3,4], в яких показано, що при умові (8) n(d) дорівнює

$$n(d) = \frac{x_0}{2d^3} \sum_{n=1}^{n_{max}} \ln \left(\exp \left(\mu^* - \frac{\pi}{(1 + p_0)^2 x_0} n^2 \right) + 1 \right), \tag{9}$$

де для зручності записів використані такі позначення:

$$x_0 = \frac{8\pi m d^2 kT}{h^2}, \mu^* = \frac{\mu}{kT}, \text{ де } k - \text{постійна Больцмана, } T - \text{температура кристала, } \mu - \text{хімічний потенціал носіїв струму.}$$

Виконаємо тепер у формулі (9) наближене сумування за такою відомою формулою:

$$\sum_{n=1}^{n_{max}} \varphi(n) = \int_0^{n_{max}} \varphi(n) dn + \frac{1}{2} (\varphi(n_{max}) - \varphi(0)), \tag{10}$$

$$\text{де } \varphi(n) = \ln \left[\exp \left(\mu^* - \frac{\pi}{(1 + p_0)^2 x_0} n^2 \right) + 1 \right].$$

Для зручності розглянемо випадок коли $n_{max} \rightarrow \infty$, тобто, згідно з (5), $p_0 \rightarrow 0$, а для змінної інтегрування n у формулі (10) зробимо заміну

$$n = \sqrt{\frac{x_0(1 + p_0)^2}{\pi}} \cdot \sqrt{x} \approx \sqrt{\frac{x_0}{\pi}} \cdot \sqrt{x}, \text{ то одержимо:}$$

$$n(\mu, d) = n(\mu) \cdot \left[1 - \frac{1}{4d} \sqrt{\frac{h^2}{2mkT}} \cdot \frac{\ln(e^{\mu^*} + 1)}{F_{\frac{1}{2}}(\mu^*)} \right], \tag{11}$$

де $n(\mu^*)$ - концентрація носіїв струму з ізотропним параболічним законом дисперсії і хімічним потенціалом μ^* для масивного кристала. Вона дорівнює

$$n(\mu^*) = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{2\pi mkT}{h^2} \right)^{3/2} F_{\frac{1}{2}}(\mu^*), \tag{12}$$

де $F_{\frac{1}{2}}(\mu^*)$ - відомий інтеграл Фермі.

Із формули (11) видно, що для відсутності кореляції концентрації електронів та інших кінетичних властивостей від товщини плівки необхідно, щоб товщина плівки відповідала умові

$$d \gg \sqrt{\frac{h^2}{32mkT} \cdot \frac{\ln(e^{\mu^*} + 1)}{F_{1/2}(\mu^*)}} = \frac{3.303 \cdot 10^{-6} \cdot \ln(e^{\mu^*} + 1)}{(T/K)^{1/2} \cdot F_{1/2}(\mu^*)}. \quad (13)$$

Тепер розглянемо за формулою (9) концентрацію $n(d)$ для не вироджених носіїв струму в пластинковому кристалі при умові $\mu^* \leq -4$.

В цьому випадку формула (9) набуває такого вигляду:

$$n(d) = \frac{x_0}{2d^3} \cdot e^{\mu^*} \sum_{n=1}^{n_{max}} \exp\left(-\frac{\pi}{(1+p_0)x_0} \cdot n^2\right) \cdot n^2 =$$

$$2\left(\frac{2\pi mkT}{h^2}\right)^{3/2} \cdot e^{\mu^*} \cdot \frac{2}{x_0^{1/2}} \sum_{n=1}^{n_{max}} \exp\left(-\frac{\pi}{(1+p_0)x_0} \cdot n^2\right) = \quad (14)$$

$$= n_0(\mu^*, T) \cdot \Omega(p_0, x_0)$$

де $n_0(\mu^*, T) = 2\left(\frac{2\pi mkT}{h^2}\right)^{3/2} \cdot e^{\mu^*}$ - концентрація не вироджених носіїв струму в масивному кристалі, а

$\Omega(p_0, x_0) = \frac{2}{x_0^{1/2}} \sum_{n=1}^{n_{max}} \exp\left(-\frac{\pi}{(1+p_0)x_0} \cdot n^2\right)$ - функція, яка описує вплив просторового квантування на концентрацію носіїв струму в тонких кристалічних пластинках.

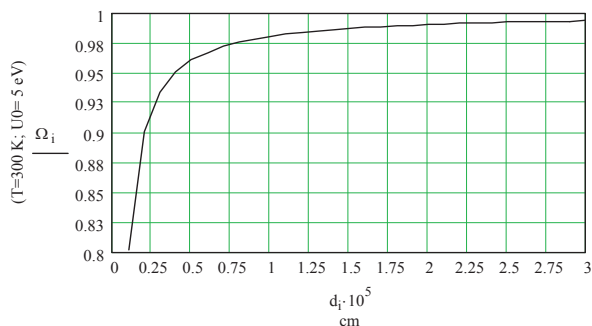


Рис. 1. Залежність $\Omega(p_0, x_0)$ від товщини d кристалічної пластинки

Використовуючи методи регресивного аналізу, який використовувався в роботі [5], можна показати, що для носіїв струму з хімічним потенціалом, який відповідає умові $-\infty \leq \mu^* \leq 1.2$ формула (9) апроксимується з точністю до 3 % таким наближенням:

$$n(d) \approx \frac{n_0(\mu^*, T)}{1 + 0.27e^{\mu^*}} \cdot \Omega(p_0, x_0) \approx n(\mu, T) \Omega(p_0, x_0), \quad (15)$$

де $n(\mu^*, T)$ описується формулою (12).

Функція $\Omega(p_0, x_0)$ через посередництво параметрів p_0 і x_0 залежить від температури T , товщини кристалічної плівки d та глибини потенціальної ями U . На рис.1 наведено графік залежності цієї функції від товщини d для кристала з глибиною потенціальної ями $U = 5eV$, що дорівнює деякій середній роботі виходу електрона з кристалу при температурі $T = 300K$.

4. Висновки

Проведені дослідження і розрахунки в даній роботі показують, що в тонких кристалах існують потенціально обмежені глибини, в яких існує обмежена кількість дискретних і енергетичних рівнів. Це при певних умовах спостереження може стати причиною випромінювання неперервного і дискретного спектру світла пластинковими кристалами.

При товщині d , яка відповідає умові

$$d \gg \frac{h}{2\pi} \cdot \sqrt{\frac{2}{mU}}$$

в потенціальній ямі обмеженої глибини $U = 5eV$ виникає велика кількість дискретних енергетичних рівнів. Це означає, що рух електрона вздовж вісі z , яка паралельна товщині кристала, стає квазінеперервним і просторове квантування спектру поступово зникає. Цей процес математично описується графіком на рис. 1.

Література

1. Л.Д.Ландау і Е.М.Лифшич. Квантовая механика (нерелятивистская теория).Физмат ИЗ.1963.
2. А.Ю.Глауберман. Квантова механіка. Видавництво Львівського університету. 1962.
3. Я.С.Буджак. Елементи статистичної теорії кінетичних властивостей тонких плівок // Фізика і хімія твердого тіла. Т.6. №3(2005) С.366-371.
4. Я.С.Буджак, Д.М.Фреїк, В.Ф.Пасічник. До питання про кореляційні залежності кінетичних властивостей тонких плівок від їх товщини // Фізика і хімія твердого тіла. Т.8. №3 (2007). С.463-465.
5. Я.С.Буджак. Хімічний потенціал як важлива характеристика електронного переносу в легованих кристалах // Фізика і хімія твердого тіла. Т.9. №4 (2008). С.686-689.