Микроэлектроника пәнінен дәріс.

1. Кіріспе

Соңғы кездері өсу әдістерінің дамуының арқасында микроэлектрониканың негізгі бағыты наноөлшемді приборларды жасау және қолдану болып келеді. Сондықтан наноқұрылымдар шала өткізгішті микроэлектроника саласында жаңа жетістіктерге жетуге үлкен мүмкіндік береді. Соның бірі молекула-шоқтық эпитакция (МШЭ) және метал-органикалық газфазды эпитакция әдістерімен өлшемі шектеулі 1-100 нанометрге дейінгі нысандарды (наноқұрылымдарды) өсіруге болады. Асқынтор екіөлшемді наноқұрылымдардың бір көрінісі болып табылады. Басқа бір көрінісіне кванттық шұңқыр қызмет етеді (КШ).

1.1. Кіші өлшемді микроэлектроника жүйелер физикасы пәні

максаты наноқұрылымдардың Бұл курстың микроэлектронды және тербелмелі қасиеттерін оқып үйрену. Мысалы, бірөлшемді наноқұрылымдарды кванттық өткізгіш деп атау. Наноөлшемді кристаллиттерді кванттық нүктелер деп Кейбір наноқұрылымдарда төсеніште атаймыз. тұрақты торлардың уйлесімділігінен және оған қабат жапқанда деформацияның салдарынан, кернеулік қабаты бар асқынтордың пайда болуына әкеліп соғады. Оның бір себебі, наноқұрылымдардың төменгі өлшемдері мен симметрияларының электронды және тербелмелі касиеттерінің өзгеруі болып табылатыны үлкен қызығушылық білдіреді.

GaAs сияқты шала өткізгіштіктерде Ганн эффектісі байқалады. Өткізгіштік зона ерекше шартты қанағаттандырады, соның ішінде осы зонада негізгі минимумға қарағанда өте жоғарыда орналасқан минимумдар бар (шамаман 0,2 ÷ 0,4эВ қашықтықта). Кәдімгі периодтылық Бриллюэн зонасын Бриллюэннің кішкентай зоналарына немесе «мини-зоналарға» жиналуына әкеліп соғады. Осының салдарынан өткізгіштік зонада Ганн осцилляциясына керекті энергиясы бар жоғары минимумдар пайда болатыны мәлім болды.

Осы курста кеңістікті өлшемді эффект наноқұрылымдардың тербелмелі және электронды қасиеттеріне әсерін тигізетінін және осы кезде кинетикалық және оптикалық қасиеттерінде өзгеріс болатындығын қарастырамыз. Басты назар кванттық шұңқырларға аударылады, себебі басқа құрылымдарға қарағанда олардың дәлдігі жоғары, әрі оларды дайындауға өте қатты көңіл бөлінуде. Сонымен қатар кванттық өлшемдік эффектілерге түсінік беріп, олардың кристалдағы фонондар мен электрондарға әсерін талқылаймыз. Бұл курста екі өлшемді электронды газдардағы квантты Холл эфектісімен (КХЭ) және өлшемді квантты электрондар негізінде жасалған құралмен (туннелді резонанспен) танысамыз. Бұл құралды 1980 ж. Клаус фон Клитцинг пен оның қызметкерлері ойлап тапқан. Кейін фон Клитцингке осы ашқан жаңалығы үшін Нобель сыйлығы берілді. Бұл эффект бөлшекті Холл эффектісімен қатар шала өткізігіштер саласында соңғы екі онжылдықта көп жетістіктерге жетті.

1.2 Квантты өлшемдік эффект және күй тығыздығы. Негізгі түйін

Ақауы жоқ кезде электрондар, фонондар және экитондар немесе блохты қозу толқын түрінде сипатталынады, яғни олар кристалда еркін қозғалып жүреді. Кристал аяқталсын деп алсақ, онда бір-біріне L қашықтықта орналасқан екі шексіз жоғарғы тосқауылдарға z бағытында блохты толқындар шағылады. Сонда осы толқындардың кеңістікте шектелуі байқалады деп айтуға болады. Толқындардың классикалық мысалы ретінде бір өлшеуде шектелетін екі өткізбейтін тосқауыл екі тексерілген соңы бар терелмелі ішек (струна) болып табылады. Осындай ішегі бар кәдімгі тербелмелі мода толқын ұзындығы *А* болатын тұрғын толқындар болып табылады:

 $\lambda_n = 2L/n$, оның дискрет мәндері n = 1, 2, 3, ... (1.1)

Басқа классикалық мысал Фабри-Перо интерферометрі болып табылады (Бриллюэн шашырауы бар). Эффективті m^{*} массасы бар еркін бөлшектер үшін кристалда z бағытында көрінбейтін тосқауылдармен шектелетін (яғни шексіз потенциялық энергиялары бар барьерлер) блох толқындарының тыйым салынбаған толқындық векторларының мәні келесі түрде болады:

$$k_{zn} = 2\pi r / \lambda_n = n\pi / L, \quad n = 1, 2, 3, ...,$$

ал негізгі күйдің энергиясы шексіз күймен салыстырғандағы келесі шамаға өсіп отырады:

(1.2)

$$\Delta E = \frac{\hbar^2 k_{z1}^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \cdot \frac{\pi^2}{L^2}$$
(1.3)

Осы энергияның ұлғаюы бөлшектердің өлшемдік квантты энергиясы деп аталады. Квантты механикада квантты өлшемдік энергия анықталмағандық принципінің салдары болып табылады. Егер бөлшек кеңістікте L шегіндегі қашықтықта шектеулі болса (осы жағдайда z бағыты бойымен бағытталса), онда анықталмаған z-компонентінің импулсі \hbar/L шамасына артады. Соған сәйкес ұлғаю бөлшектің кинетикалық энергиясын (1.3) береді. Сондықтанда осы эффектіні жиі квантты өлшемдік эңерсия.

1.3 Қатты дене қабыршағындағы (пленка) квантты өлшемдік эффект. Кристалдағы электрондардың микроскопиялық сипаттамалары. Массивті кристал

Екіөлшемді электронды газдың қасиетін қарастыру үшін шала өткізгіштерді, жартылай металдарды және металды жұқа кабыршактардың өлшемді квантталуынан бастаймыз. Кез-келген қатты дене –бұл (N) молекула немесе атомдар санының жиынтығы. Электр өрісі әсер еткенде жеке атомның кванттық N күйлерге жіктелінеді. Қатты денеге өту кезінде жеке атом сипаттайтын күйі энергетикалық деңгейлердің дискретті жүйесі бір-біріне өте жақын деңгейлер (энергия мәндерінің тыйым салынған зонасы) жүйесіндегі N жолақтарға айналады. Бұл жолақтар немесе зоналар кванттық күйі болмайтын тыйым салынған зонамен бөлінеді.

Қатты денелердегі барлық электрондардың жиынтығы кристалдың энергетикалық деңгейлерінің арасында таралған бір жүйе болып табылады. Электрондардың атомнан атомға өтуі мүмкіндін локализацияланған деп айтуға болмайды. Бұл жағдайдағы электронның зоналық күйі электронның атомдағы күйіне, еркін электрон күйіне ұқсас болады.

Кристалдағы электрондардың орналасуы квазиимпульс-векторымен сипатталынады. Қасиеті жағынан импульске өте ұқсас. Бірақ изотропты бос кеңістікте қозғалған еркін бөлшектен айырмашылығы, электрон кристалда электр өрісінің әсерінен периодты түрде тәртіппен қозғалады. Атомдардың бұндай орналасуы квазиимпульстің энергияға периодты тәуелділігіне әкеліп соғады. Еркін бөлшек импулсінен оның негізгі айырмашылығы осы.

р квазиимпульс зонадағы электрондар энергиясын анықтайды. Зона шетіндегі энергияның квазиимпульспен байланысы мынадай болады:

$$E=p^2/2m$$

Бұл қатынастағы пропорционалдық коэффициент электронның шын массасы емес, эффективті m* массасы болып табылады. m* шамасы кристалдағы электронның не тартымдылық, не инерциялық қасиетін таба алмайды. Бұл [∂²E/∂p²]⁻¹ шамасының шартты атауы үдеумен мен ішкі күштердің арасындағы пропорционалдық коэффициент. Анизотропты кристалдарда 1/m* бағытқа тәуелді шама болып табылады.

Кристалдағы электронның күйі, спинді есептемеген жағдайда электронға және квазиимпульске тиісті зоналар нөмерімен сипатталынатын электрон мен квазиимпульс жатады, әрі бір зона шегінде квазиимпульстің барлық үш проекциясы үздіксіз мәндер қатарына жылжиды.

Паули принципі бойынша бір күйде қарама-қарсы спиндері бар екі электроннан артық электрондар бола алмайды. Әрбір атомда NZ электрондар бар. Бір жағынан кристалдағы барлық электрондар Паули принципін қанағаттандарып энергетикалық деңгейлерге орналасады, ал екінші жағынан жүйенің минимум энергия талабын қанағаттандырады. Егер электрондар ең төменгі NZ/2 деңгейлерін толтырса ең аз энергияға жауап беретін күй пайда болады. Сондықтан тыйым салынбаған зоналардың ең аз энергиясы толады, ал жоғары энергияға сәйкес зоналар бос болады.

Энергия шкаласы бойынша жоғарыда орналасқан және T=0К кезінде электрондармен толық толған зона - валенттік зона деп аталады. Келесі жоғарыда орналасқан тыйым салынған зона - өткізгіштік зона деп аталады, онда электрондар болмайды. Өткізгіштік зона мен валенттік зонаны бөліп тұрған тыйым салынған зона енінің үлкендігі сонша әдеттегі жағдайда (электр тогы болмағанда) электрондар «секіріп» өте алмайды. Т=0К кезінде төмендегі барлық күйлер электрондармен толған шекаралық энергия E_F Ферми энергиясы деп аталады.

Өткізгіштік зонада 0К кезінде электрондармен жартылай толатын заттар металдар болып табылады. Кристалдарда Т=0К кезінде толығымен толатын және толығымен бос болатын зоналар – диэлектриктер деп аталады. Диэлектриктерде валенттік зонаның барлық энергетикалық деңгейлері электрондармен толығымен толған (әрбір деңгейде екі электрон болады), ал өткізгіштік зонаның энергетикалық деңгейлері (абсолют нөл температура кезінде) мүлдем бос.

Валенттік зона мен өткізгіштік зонаны жауып тұратын тағы бір зона бар. Электрондардың жартысы бір зонадан екінші зонаға өтеді. Бұл заттардың өткізгіштігіне байланысты. Осындай заттарды жартылай металдар деп атайды. Олардың өткізгіштігі температура төмендегенде металдардікі сияқты өседі, бірақ шамасы жағынан аз, ал электрондар мен кемтіктердің саны аз (бір атомға ~10⁻³— 10⁻⁵ келеді). Жартылай металдарға мысалы, висмут, сурьма, графит және т.б. жатады.



Рис.1.1 U(z) қабыршағының потенциалды моделі және қабыршақтағы (пленка) толқындық функцияның түрі. $\Psi_n(z)$ – әртүрлі n мәндері үшін толқындық функция координаталық бөлігі. Суретте энергия күйі келтірілген толқындық функцияға сәйкес төменнен жоғары қарай өседі.

«Толық» немесе «жұқа» қабыршақтар (пленка) туралы түсініктің мағынасы кез-келген физикалық шамамен салыстырғанда ғана болады. Әрі ол

қарастырылатын құбылыс үшін болатын және ұзындық өлшемі бар қабыршақ (пленка) пленка. Бұл жағдайдағы физикалық шама ток таситын де Бройль толқындарының ұзындығы болып табылады.

Ені d де Бройль толынының ұзындығына λ тең қабыршақ (пленка) қарастырылады. Нормальды қабыршақтың (пленка) бетіне z осі бойынша бағыттаймыз. Сонда (x, y) жазықтығындағы электрондардың қозғалысы массив кристалдағы сияқты болып қалады, яғни p_x и p_y шамалары- x және y остеріндегі квазиимпульс проекциялары кез-келген мәндерді қабылдай береді. $|p_z|$ шамасы z осі бағытындағы квазимпульстің абсолютті шамасы-қабыршақтың (пленка) қалыңдығын анықтайтын кейбір таңдаулы мәндерді ғана қабылдай алады. Сондықтан да осы шама квантталады. Квазимпульстің квантталуы шектелген көлденең ток тасушылармен байланысты.

Бұл құбылысты келесідей қарапайым түсіндіруге болады. Электрон қозғалу барысында қабыршақтың (пленка) шетінен шығып кете алмайды. Оның толқындық функциясы қабыршақтың (пленка) шекаралық бетінде нөлге айнады. Бұл пленка қалыңдығында де Бройльдің бүтін саны жиналады (сыйып кетеді) $d=n\lambda/2$ (сурет 1). Осыны ескеріп де Бройль толқынының ұзындығы электронның импульсімен байланысты екенін мына қатынастан көреміз (немесе квазиимпульспен):

$$\lambda = 2\pi\hbar/[p_z]$$
, осыдан
 $d = \pi\hbar n/|p_z|$ немесе $|p_z| = \pi\hbar n/d$,

(1.4) мұндағы п—1,2,3, ... — кванттық өлшемдік сан. Бұл шарт тыйым салынбаған мәндерді анықтайды |p_z |.

|p_z| шамасы уақыт бойынша өзгермейді, яғни тікбұрышты шұңқыр түріндегі U(z) пленканың потенциалды моделін таңдау барысында ғана квантты сан болып табылады (1.1 суретті қара). Потенциалдың басқа түрінде |p_z| уақыт бойынша сақталмайды және квантты сан болмайды. Бірақ тікбұрышты потенциалды шұңқыр түріндегі U(z) моделі жалпыға бірдей және негізгі тәжірибелік корытындыларды сипаттайды. Пленкадағы электронның көлденен қозғалысындағы энергиясы |p_z| шамасына тәуелді. Егер |p_z| шамасының тек белгіленгендеріне рұқсат етілсе және соған сәйкес энергияның белгіленген шамасына рұқсат етілсе, яғни көлденең қозғалыстағы энергия квантталады. Ары қарай $|p_z|=0$ мәніне рұқсат етілмесе, онда бұл үлкен шексіз де Бройль толқын ұзындығына сәйкес келген болар еді. d пленка қалыңдығының |p_z| шамасының минималь мәні nħ/d болады. Соған сәйкес нөлден өзге қабыршақтағы (пленка) электрондардың минималь кинетикалық энергиясы нөлдік энергия деп аталады. Оның мәні мына теңдік бойынша анықталынады:

$$E_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_z^* d^2}$$
(1.5)

мұндағы m_z^* — кристалдың z осі бағытындағы ток тасушылардың эффективті массасы. Нөлдік энергия мәнін шама тәртібі бойынша анықталмағандық принциппен табуға болады $\Delta z |p_z| \sim \hbar$, где $\Delta z \sim d$.

|p_z| әртүрлі рұқсат етілген мәндері үшін p_x, p_y шамаларының электрон энергияларына тәуелділігінің графигі параболид жүйесі түрінде берілуі мүмкін 1.2 сурет (немесе сол сияқты өлшемді квантты сандардың әртүрлі мәндері үшін де алуға болады). Энергияның нөлге тең шамасында N параболидінің түбі орналасады (квазиимпульстің тұрғын мәндері және соған сәйкес тұрғын қозғалысың энергиясы осы нүктеде нөлге тең). Энергияның осы мәндері өлшемді деңгейлер деп аталады. Ең төменгі бірінші параболойдтың түбі нөлдік энергияға сәйкес келеді. Әрбір параболойдтың беті кез-келген мүмкін р_х және р_у комбинациялары кезіндегі энергия мәндерін береді, бірақ |p_z| белгіленген мәндерді ғана береді. Энергия мәндерінің жиынтығы барлық мүмкін тұрғын квазиимпульс компоненттерінің берілген |p_z| мәндері кезінде ішкі зоналар (подзона) түзеді. Қабыршақ (пленка) қалыңдығы кішірейген кезде өлшемдік деңгей энергиясы және ішкі зоналар арасындағы қашықтық та үлкейеді.

Егер қабыршақтағы (пленка) және массивті кристалдағы электронның энергетикалық спектрі салыстырса, онда пленкаға өту кезінде спектр түгелдей өзгереді. Энергетикалық спектрдің өзгеруі электрон энергиясының g(E)* электрондық күй тығыздығына тәуелділігінің өзгеруіне әкеліп соғады. g(E) функциясы қатты дененің барлық электрондық сипаттамаларына әсерін тигізеді: электрөткізгіштік, жылуөткізгіштік, магнит кедергісіне, магнит моментіне және т.б. Массивті кристалдарда күй тығыздығы рұқсат етілген зоналарда энергияға катаң түрде тәуелді. Зона шетінен тікелей жақындықта $g(E) = \sqrt{E - E_{\min}}$ (немесе $\sim \sqrt{E - E_{\min}}$, яғни біркелкі монотонды сипаттамаға ие.



Рис.1.2 Қабыршақтағы және массивті кристалдағы электронның энергетикалық спектрі

Жартылай металдар мен шала өткізгіштерде ток тасушылардың аз концентарациясының салдарынан энергияның осы аймағы дәл болады. Осы себептен бір артық жері кристалдың электрондық қасиеті ішкі әсерлердің (деформация, жарықталыну, ішкі өрістердің квантталмауы және т.б.) салдарынан біркелкі өзгеріп отырады.



1.3 сурет- Қабыршақ (пленка) қалыңдығы мен электрондық күй тығыздығының (жоғары қарай) энергияға тәуелділігі. Штрихталған аймақ бос емес күйлерге сәйкес келеді. Массивті кристалдар үшін пунктирмен сызылған сызық көрсетілген.

Осы шарт қатарларын қанағаттандыратын нәзік қабыршақтарда (пленка) массивті кристалдардағы сияқты электрон күйі тығыздығының энергияға тәуелділігі біркелкі болмай баспалдақты түрде болады (1.3 сурет).

1.4 Кванттық өлшемдік эффектінің орындалу шарттары

Шарт қатарларын орындау барысында тәжірибеде квантты өлшемдік эффект байқалуы мүмкін. Зерттелетін нысан келесідей шарттарды қанағаттандыруы қажет.

Біріншіден өлшемді деңгейлер арасындағы қашықтық $\Delta E = E_{n+1} - E_n$ олардың ендерінен σE артық болуы керек (қарама-қарсы жағдайда барлық ерекшеліктері жағылған (сыланған, майланған) болып көрінеді. Кванттық механикадағы белгілі деңгейі ені \hbar/τ , мұндағы τ — релаксация уақыты (электрон шашырауының екі тізбектелген актысының арасындағы орташа уақыт).

$$\Delta E \gg \sigma E = \hbar/\tau \tag{1.6}$$

(1.7)

Бұл шарт квантты өлшемдік эффектіні бақылау үшін үлгінің т-ы үлкен болуы қажет немесе электронның еркіндік дәрежесі үлкен болатындай шартты білдіреді.

Екіншіден қабыршақ (пленка) қалыңдығы бойынша біркелкі болу керектігі оның әртүрлі бөліктерінде өлшемді деңгейлердің жағдайының өзгеруінің салдарынан кездейсоқ тастауы оның арақашықтықтарының арасында аз болу керек. Шағылу кезінде |p_z| квазиимпульс проекциясының мәні бетке қарағанда өзгермес үшін қабыршақ (пленка) шекарасынан электрондардың шашырауы айна тәріздес болу керек.

Үшіншіден үлгінің температурасы кәдімгідей төмен болу керек. Өйткені өлшемді деңгейлердің арасындағы қашықтық энергия бойынша электрондардың жылулық жайылу таралуынан кіші болу керек.

Осы аталған шарттарды қанағаттандыру үшін зерттелетін нысан мүлтіксіз болу керек. Қабыршақ (пленка) қалыңдығы электронның де Бройль толқынының ұзындығы мен өлшемдес болу керек, яғни

$$d \approx \lambda = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m^*E}}$$

Металдарда электрондардың эффективті массасы сол шамалас болады және $E=E_F$ сипаты бар m₀ еркін электронның массасы бірнеше электронвольтты құрады, $\lambda \approx 10^{-8} - 10^{-7}$ см, яғни кристалдық тордың периодымен шамалас. Қалыңдығы өте жұқа қабыршақтарды жасау қазіргі таңда күрделі мәселелердің бірі. Жартылай металдар мен шала өткізгіштердің тыйым салынған зоналары аз болғандықтан осыларға тоқталамыз. Олардың m* эффективті массалары мен энергиясы E_F немесе kT металдарға қарағанда кіші. Мысалы, висмутте m* $\approx 10^{-2}$ эB, мәні $\lambda \approx 10^{-5}$ см, мың есеге дейін үлкен.

Квантты өлшемді эффектіні бақылау үшін таңдаған материалымыздың электронды толқын ұзындығы (эффективті массасы және ток тасушылардың Ферми энергиясы кіші болу керек), электрондардың еркіндік дәрежесінің ұзындығы, айналы беттік шашырауы үлкен болуы керек, яғни технологиялық тиімді болу керек. Әдебиеттер 1[410-413], 2 [5-3], 4[204-209], 5[350-357, 206-214, 158-184]

Бақылау сұрақтары:

1. Кванттық өлшемдік эффект туралы түсінік және оның кристалдағы электрондар мен фонондарға әсері.

2. Кристалдағы электрондардың жылжыуы қалай түсіндіріледі?

3. Температура абсолют нөл болғанда кристалдағы электрондар кванттық күйлер бойынша қалай таралады?

4. Қабыршақтағы (пленка) электрондардың минималды кинетикалық энергиясы Е₀ қандай формуламен анықталады?

5. Кванттық нүктелер дегеніміз не?

2 дәріс

2.1 Шала өткізгіштердегі электрондар мен кемтіктердегі кванттық өлшемдік эффект

Шала өткізгіштердегі электрондардың квантты өлшемдік эффектісін суреттеу үшін бір кванттық шұңқырды қарастырамыз. Оның құрылымы шала өткізгішті (А деп белгіленген) материалдың жұқа қабатынан (L қалыңдығы бар) басқа В жартылай өткізгіштің (L' қалыңдықпен) екі қабатының арасынан тұратын «сэндвич» тәрізді болып келеді. Осы қабаттарға бағытталған перпендикулярға z Периодты түрде қайталанатын кабат типтерінен осьін аламыз. тұратын В/А/В/А/В/А/В/А... (мұндағы L'>>L) өте күрделі құрылымдар да бар. Мунлай құрылымдар көпретті қайталанатын кванттық шұңқырлар немесе КҚКШ деп аталады. Асқын торлар мен ККШ құрылымдары бірдей болып келеді. КҚКШ-да шұңқырлар арасындағы қашықтық үлкендігін ескерсек, бір шұңқырдан екінші шұңқырға электрондарды туннелдеу мүмкіндігі бар. Асқынторларда тосқауылдың L' қалыңдығы өте кіші, сондықтан ол электрондарды туннелдеуді қамтамасыз ете алмайды. Электрондар қатпар-қатпар периодты потенциалды «көреді» де кристалдың потенциалына қосылады. Тосқауылдарға қарағанда жалғыз A (Eg_A) кванттық шұңқырдың тыйым салынған зонасы аз деп бағдарлап көрелік. Осының салдарынан А және В үшін өткізгіштік және валенттік зоналарда тыйым салынған Олардың шеттеріндегі айырым зона жарылуы деп зона шеті тегістелмейді. аталады. Тек бір қабаттағы кванттық шектеушілерді тасушыларға жауапты зоналардың жарылуы потенциал құрады. Соның салдарынан квантты өлшемдік эффект пайда болады. Сондықтан да квантты өлшемдік эффектісі бар құралдарды жасау кезінде зоналардың жарылу шамасының мәнімен және оған бақылау жасау Мысалы, жақсы зерттелген өте үлкен рөл атқарады. GaAs(=A)/GaAlAs(=B)жүйесінде А және в интерфейстерінің арасындағы қалыңдық тек бір ғана моноқабатты түзеді. Оны рұқсат етілуі жоғары электронды микроскоппен көруге болады (2.1 сурет).



2.1 сурет. Айыру қабілеттілігі жоғары электронды микроскоп. Микрограммада сәуле үшін [110] бағытта түскен GaAs/AlAs асқын торы көрсетілген. (К. Плуг көрсеткен, Институт Пауля Друде, Берлин). Интерфейстің сапасына қарай Ga түйініндегі A1 атомын тауып көріндер және керісінше.

2.2 Беттік заряд қабатындағы электрондардың квантталу шарты Электрондардың толқындық функциясы мен энергетикалық спектрі

Электрондар жүйесіне энергетикалық спектрден басқа толық кванттымеханикалық сипаттама беру үшін толқындық функцияны $\psi(x, y, z, t)$ -кейбір координат және уақыт функцияларын $\psi(x, y, z, t)$ білу керек. Осы функциялардың көмегімен электронға қатысты толқындық қасиетке сипаттама бере аламыз. Бұл сипаттама үшін параметрлердің орнына уақыт бойынша өзгермейтін және бөлшектің күйіне толық сипаттама беретін кейбір шамаларды қолданамыз. Бұл шамалар кванттық сандар деп аталады. Біздің жағдайымызда кванттық сандар энергетикалық зоналар нөмері және координат осіндегі үш квазиимпульстің проекциясы болып табылады. Толқындық функцияның квадрат модулі осы уақыт моментіндегі кеңістіктің осы нүктесінде бөлшекті табу ықтималдығын анықтайды.

х осі бағытындағы вакуумде қозғалған еркін электронның толқындық функциясы келесі түрде болады:

$$\Psi(x) = A \exp\left(\frac{ip_x}{\lambda} - \frac{iE}{\hbar}t\right)$$
(2.1)

мұндағы A — х-ке тәуелсіз тұрақты, p — электронның импульсі.

Бұл жағдайда электрон кристалдың периодтық өрісінде қозғалады. Оның толқындық функциясын өзіне ұқсас бейне ретінде алуға болады, бірақ А көбейткіші тор периоды бар х периоды функциясы болады, яғни кристалдағы тоқындық функция жазық толқын болып келеді. Модуль амплитудасы периоды бар тор тұрақтысына тең.

Заряд тасушылар (ары қарай анық болу үшін электрондар туралы айтамыз) инверциялық немесе толықтырылған қабаттар жартылай өткізгіштік бетінде пайда болған потенциалдық барьермен потенциалдық шұңқырда локализденген. Басқа жағынан беттік зарядтардың электростатикалық потенциалымен потенциалдық шұңқырда локализденген. Бұл потенциалдық шұңқыр жіңішке болуы мүмкін (электрондар үшін тиімді де Бройль толқын ұзындығымен салыстырылған) және бетке перпендикуляр (z осінде) электрондардың қозғалысы кванттала бастайды. Бет бойымен, яғни (x, y) жазықтығында электрондардың қозғалысы еркін қозғалыс болып қалады және оны массивті үлгілердегідей сипаттауға болады. Сондықтан да электрондар шала өткізгіштік бетінде потенциалдық шұңқырда локализденген. Электрондардың энергетикалық спектрі жүйедегі екіөлшемді ішкі зонаға бөлінеді.

n- ішкі зонаға (подзона) электрондардың энергиясы мынаған тең:

$$E_{n}(k) = \varepsilon_{n} + \frac{\hbar^{2}k_{y}^{2}}{2m_{x}^{*}} + \frac{\hbar_{y}^{2}}{2m_{y}^{*}}$$
(2.2)

мұндағы ε_n - z осі бойындағы қозғалысты сипаттайтын дискретті энергетикалық деңгей (өлшемді деңгей). ε_n- анықтау үшін толқытыратын қабат немесе инверциялық Ф электростатикалық потенциалдың z тәуелділігін білу керек.

Ең қарапайым жағдай үшін аймақтың кеңістіктік заряды Е_s шала өткізгіштік беттіндегі электростатикалық өрісте тұрақты және өріске тең (үшбұрышты потенциалдық шұңқырға таяу).

 $\Phi(z)$ =-е E_s(z) өлшемді деңгей энергиясы

$$\varepsilon_n \cong \frac{1}{\left(2m_z^*\right)^{1/3}} \left[\hbar e E_s \frac{3}{2} \pi \left(n + \frac{3}{4}\right)\right]^{3/2}, n=0,1,2,\dots$$
(2.3)

Мұндағы m_z — эффективті кристалдағы z осі бойынша қозғалысты сипаттайтын электрондардың эффективті массасы.

Осы теңдіктен неғұрлым E_s электр осі көп болса соғұрлым беттік ішкі зонадағы экстремумдардың арасындағы қашықтық көп болады.

Беттік арна маңайындағы электрондардың толқындық функциясы (x,y) жазықтығындағы электрондардың еркін қозғалысын және $\varphi_n(z)$ z осі бойынша электрондар тығыздығының таралуын сипаттайтын кейбір функцияларға түсініктеме береді. Үшбұрышты потенциалдық шұңқырдағы энергетикалық

деңгейлердің орналасуы және n=0, 1 үшін $\phi_n(z)$ толқындық функцияның сапалы түрі 2.5 суретте көрсетілген.



Рис. 2.5 Энергетикалық деңгейлердің орналасуы және үшбұрышты шұңқырдағы электрондардың толқындық функциясы. Оңжақта- күй тығыздығының энергияға тәуелділігі.

Үшбұрышты потенциалдық шұңқырда негізгі күй (ең кіші энергиямен) n=0 күйінен басталады деп айтайық. Инверсиялық қабатта $\phi_n(z)$ функциясы тұрғын толқынға жатпайды және сондықтан да n=0 күйін алу мүмкін. Оң жақта 2.5 суретте күй тығыздығының энергияға тәуелдігі көрсетілген. Әрбір ішкі зонада күй тығыздығы тәуелді емес және ол мынған тең:

$$g(E) = \frac{\sqrt{m_x^* m_y^*}}{\pi \hbar^2}$$
(2.4)

(2.7)

Төменгі температурада бір ең ішкі зона (m=0) электрондармен толатын жағдай тууы мүмкін. Бұл жағдайда электронды газдың екіөлшемді сипаты ерекше анық болады. Оны электрлік квантты шек деп атайды. Кремнийдің инверсиялық қабаттарында 4,2К температерада электрлік квантты шек шартының концентрациясы N_{inv}<6х10¹²см⁻² болса ғана орындалады.

2.3 Шексіз жоғары тосқауылы бар кванттық шұңқырдағы электрондық күйлердің өлшемдік квантталуы

Шексіз жоғары тосқауылы ығысы: $\Psi(r) = \frac{1}{\sqrt{S}} \exp(iq\rho)\varphi(z)$ (2.5)

Шұңқыр ішіндегі Шредингер теңдеуі (эффективті массалар әдісімен):

$$-\frac{\hbar^2}{2m_A}\frac{d^2}{d_z^2}\varphi(z) = E_{z\varphi}(z), \quad E = E_z + E_{xy}, \quad E_{xy} = \frac{\hbar^2 q^2}{2m_A}$$
(2.6)

Шекаралық шарттар: $\varphi\left(\pm \frac{a}{2}\right) = 0$

Тақ және жұп шемімдер: $C \cos kz$ и $C \sin kz$, мұндағы $k = \sqrt{\frac{2m_A}{\hbar^2}E_z}$ Шекаралық шарттарды ескере отырып $k = \frac{\nu \pi}{a}$ -ны аламыз, мұндағы $\nu = 1$; 3 жұп шешімдер үшін және $\nu = 2$; 4 тақ шешімдер үшін. **Тосқауылдар шектеулі**, q = 0:

Шекаралық шарттар $\varphi|_{A} = \varphi|_{B}, \frac{1}{m_{A}} \frac{d\varphi}{dz}|_{A} = \frac{1}{m_{B}} \frac{d\varphi}{dz}|_{B}$ (2.8)

Жұп шемімдер

$$\varphi(z) = \begin{cases} C & \cos kz & \ddot{\imath} \partial \dot{e} \ |z| \le \frac{a}{2} \\ D & \exp\left[-\varphi\left(|z| - \frac{a}{2}\right)\right] & \ddot{\imath} \partial \dot{e} & |z| \ge \frac{a}{2} \end{cases}$$
(2.9)

мұндағы $\phi = \left[2m_B(V - E_z)/\hbar^2\right]^{1/2}$, V- тосқауылдың биіктігі. Теңдеулер жүйесінен

$$C\cos k\frac{a}{2} = D, \quad -\frac{k}{m_A}C\sin k\frac{a}{2} = -\frac{\phi}{m_B}D$$
 (2.10)

жұп күй энергиялары үшін трансценденттік теңдеу аламыз

$$\tan k \frac{a}{2} = \eta \equiv \frac{m_A \phi}{m_B k} \tag{2.11}$$

Тақ шешім үшін сәйкес теңдеудің түрі келесідей:

$$\cot k \frac{a}{2} = -\eta \tag{2.12}$$

[001] бағытта өсірілген GaAs/AlxGa1-xAs гетероауысудағы (hh) ауыр және жеңіл (lh) кемтіктер күйі q=0 кезіне тәуелсіз квантталады, сондықтан кванттық шұңқырларда кемтік күйінің бұрыштық момент проекциясын ($Jz = \pm 3/2$ және $Jz = \pm 1/2$) сипаттайтын екі (*hhk* және *lhk*) сериясы қалыптасады.

Әдебиет 1[413-425], 2 [13-19], 3[19-20], 4[234-245], 5[568-575]

Бақылау сұрақтары:

1. Гетероауысу дегеніміз не?

2. Тыйым салынған зонаны жобалау дегенімізді қалай түсінесің?

3. Құрылыммен легирленген (бір қабат бетіне екінші қабатты тозаңдандыру) асқынтор дегеніміз не?

4. Кванттық шұңқырлардағы электронның толқындық функциясын қалай қалыптастыруға блады?

5. Кванттық шұңқырдағы электрондық күйлердің өлшемдік квантталуы.

3 дәріс

3.1 Квантты өлшемдік шарты бойынша қатты денелердің электронды энергетикалық спектрлерін тәжірибе жүзінде зерттеу

Қатты денелердің негізгі есептерінің бірі-электронның энергетикалық спектрлерін зерттеу. Осы торларды құрайтын кристалдық торлардың көптеген түрі мен атомдардың химиялық жеке түрі әрбір затқа жекеше зоналық құрылым тудырады. Ол өз кезегінде кристалдың негізгі физикалық қасиетін анықтайды: механикалық, жылулық, электрлік, магниттік және т.б. Демек берілген шарт бойынша қатты денеге сипаттама беру үшін және жаңа эффектілерді сипаттау үшін әрбір берілген заттың ерекше зоналық құрылымын білу керек. Зоналық құрылымды анықтау оңай есеп емес.

Кейбір негізгі салдарлар қатты денелердегі электрондардың өлшемді квантталу энергиясы құбылысы ашуға әкеліп соқты. Бұл құбылыс электронның энергетикалық спектрлерінің параметрлерін анықтайды. Осы параметрлерді білу үшін тәжірибе жүзінде анықталған квантты өлшемдік эффектіні қарастыру. Зерттеу нысаны— металдар қабыршағы (пленка), жартылай металдар және вакуумдік тозаңдандыру әдісімен алынған шала өткізгіштер болып табылады.

Құрылымдық қатынаста олардың ішіндегі ең жақсысы (негізінен слюдадағы висмут қабыршақтары (пленка)) әшекейлі монокристалдар. Висмут пленкасының қалыңдығын өлшеу кезінде кинетикалық коэффициенттер осцилляциясы (меншікті кедергі, Холл константасы және магниттік кедергі) және осындай қабыршақтардан (пленка) құралған жүйенің туннелдік сипаттамаларының ерекшелігі квантты өлшемдік эффектіге жататын ең алғашқы тәжірибелік бақылаулар болып табылады. Алғаш рет өлшемдік квантталу құбылысы БССР ҒА радиотехника және электроника Институтында жүргізілді. Алынған висмут пленкасының меншікті кедергісінің пленка қалыңдығына тәуелділігі (3.1 сурет) бөлме температурасында кәдімгі монотонды қисық болып келеді.



3.1 сурет - 4,2, 78 и 300К температура кезіндегі висмут пленкасының меншікті кедергісінің пленка қалыңдығына тәуелділігі

Төменгі температурада мүлде басқаша қисық байқалады — осцилляция деп те айтуға болады. Қабыршақ (пленка) қалыңдығы мен температурасы өскен сайын осцилляция амплитудасы төмендейді. Үлкен қалыңдықта осцилляция өшеді, өйткені өлшемді деңгей жабылып кетеді және айрықша күй тығыздығы жоғалып кетеді. Бөлме температурасында жан-жақты қысу барысында висмут қабыршағы (пленка) өзінің кедергісін жәймен өзгерте алады. 78К дейін температура төмендегенде кедергінің өзгеруі күшті осциллияциялық сипатқа әкеліп соғады.

Висмуттың, антимонид индийдің және сол сияқты тар саңлаулы жартылай өткізгіштті жұқа қабыршақтардың (пленка) оптикалық қасиеттерін зерттеу электронның нөлдік энергиясы бар болуынан қабыршақ (пленка) қалыңдығын өлшеу кезінде фотошағылысудың қызыл шекарасындағы ығысуды байқауға болады. Антимонид индий қабыршағында (пленка) монотонды емес айрықша күй тығыздығымен байланысқан шағылу коэфициентінің g(E) электрон энергиясына спектралды тәуелділігі байқалды.

Квантты өлшемдік эффект электронның энергетикалық спектрленінің параметрлерін анықтай алатын тәжірибелер көп. Δd осцилляция периодында $\rho(d)$ тәуелділігі $z - p_z^F$ бағытындағы ферми мәнімен байланысқан басқа кинетикалық коэффициенттерге тең квазиимпульсы (Ферми энергиясын бар квазиимпульс фермилік деп аталады). Келтірілген қатынас электронды энергетикалық спектрлердің негізгі параметрлерін анықтайды. Олар: $|p_z^F|$ мәнін, энергияның квазиимпульске тәуелділігін, қабыршақ (пленка) жазықтығына перпендикуляр m_z^* эффективті масса мәні.

Қазіргі кезде энергетикалық спектрлердің параметрлерін анықтау үшін туннельдік эффект қолданылады.

3.2 Туннелдік спектроскоп әдісімен энергетикалық спектрлердің параметрлерін анықтау

Физикадағы туннелдік эффект кванттық құбылысқа жатады. Оның мағынасы электрондар потенциалдық тосқауылды бойлай өткіштейді (туннелдейді), ал потенциалдық тосқауылдың биіктігі Е бөлшектің толық энергиясынан артық (3.2а сурет). Бұл мүмкіндік электронның толқындық қасиетімен байланысты. Тосқауылға түсетін бөлшектің толқындық функциясы, амплитудасы тосқауыл (маңында) нөлге тең емес, яғни осы аймақта бөлшекті ұстап алатын соңғы ықтималдық туындайды. Сондықтан еркін (классикалық) бөлшектер өзінің қозғалысы кезінде потенциалдық тосқауылды кездестіреді, ал олардың толық энергиясы тосқауыл биіктігінен көп. Егер тосқауылға электрондар ағыны келіп түссе, онда олардың көпшілігі тосқауылдан шағылады, бірақ біраз бөлігі одан өтеді және еркін бөлшектерге тыйым салынған тосқауыл маңында болады.



3.2 сурет - Потенциалдық тосқауыл арқылы өткен электрондардың туннелденуі: а — қарапайым бірөлшемді потенциалдық тосқауыл U(x); U_m=тосқауыл биіктігі, Е — электронның толық энергиясы. Нұсқау (стрелка) электрондар қозғалысының бағытын көрсетеді; б — өлшемді квантталудан тұратын қабыршақтағы туннельдік жүйенің энергетикалық диаграммасы. Сол жақтағы— электронды күй тығыздығының энергияға тәуелділігі.

Өткен бөлшектердің бір бөлігі тосқауылдағы сол бөліктің ауданына тәуелді бөлшек энергиясы деңгейінде орналасқан бөлшектердің мөлдірлігін анықтайды: неғұрлым ауданы аз болса, соғұрлым мөлдірлігі жоғары болады. Бұдан энергия жоғарылаған сайын туннелдену ықтималдығы да өседі. Тосқауылдан шыққан бөлшектердің бөлігі өте аз және ол түскен бөлшектердің жалпы санынан 10⁻⁵—10⁻¹⁰ есеге дейін аз. Типтік туннелдік құрылым жұқа диэлектрлік (<10⁻⁶см) саңылаумен бөлінген екі өткізгіштік электродтан тұрады. Диэлектрик қабатта электрондар бір электродтан екінші электродқа өтіп потенциалдық тосқауыл құрады.

Туннелдік токты есептеу, туннелдік өткізгіш G=dI/dV электродтағы күй тығыздығының құрылымын тікелей шағылдарыды және сәйкесінше электронның энергетикалық спектрі құрылымын көрсетеді. Сондықтан туннелдік эффект микробөлшектердің энергетикалық спектрін оқып үйрену үшін тиімді құбылыс болып табылады.

Туннелдік эффектімен спектрді зерттеу туннелдік спектроскоп әдісі деп аталады. Туннелдік спектроскоп үшін қабыршақ (пленка) нәзік диэлектрлік қабатпен (~50 Å) бөлінген массивті металды электродтан және өлшемді квантталу пленкадан тұратын жүйе қолданылады. 3.2.6 суретте осындай жүйенің энергетикалық диаграммасы көрсетілген. Пленканың потенциалы жазық түбі бар тікбұрышты шұңқыр түрінде таңдалып алынған.

Туннелдік жүйеде кернеу жоқ кезде массивті электродтағы және пленкадағы Ферми деңгейі дәл келіп, потенциалдық тосқауылды бөліп тұратын электродтан электрондар ағыны оңнан солға солдан оңға өтіп, нәтижесінде туннелдік ток нөлге тең болады. Диэлектрлік қабатқа кернеу берген кезде қабыршақтағы (пленка) және массивті электродтағы Ферми деңгейі eV мәніне тарқайды (V—берілген кернеу, электрон зарды). 3.26 суретте қабыршақтағы (пленка) Ферми деңгейі E_F салыстырмалы түрде оңға бұрылу үшін берілген кернеудің полярлығы таңдалып алынды

Бұл үшін қабыршақтағы (пленка) қарсы толған күйдің eV энергия интервалында металдық электродта бос күйлер бар болып шығады. Сондықтан да қабыршақтан (пленка) массивті электродқа бағытталған кернеу полярлығы туннелдік электрондар ағынына ие. Керісінше: туннелдік электрондар ағыны мүмкін емес (Т=0К кезінде). Осылайша жүйеде туннелдік ток пайда болады.

Сондықтан да күй тығыздығының энергияға тәуелділігі секірмелі болады. Туннелдік өткізгіштік G кернеудің барлық мәнінде, яғни E_{n=}E_F+eV массивті электродтың Ферми деңгейі қабыршақтағы (пленка) өлшемді деңгейімен сәйкес келсе секірмелі түрде өзгереді.

Материалдың негізгі макроскопиялық сипаттамаларын дисперсия заңы анықтайды және заттың электрондық қасиетіне сипаттама беру үшін осы заңды білу керек. Әр түрлі заттар үшін ол күрделі және алуан түрлі. Сондықтан да дисперсия заңы қатты денедегі электрондық құбылыстарды оқу кезінде негізгі сипаттамаларды береді. Квантты өлшемдік эффектіні оқу кезінде тар тыйым салынған зонасы бар шала өткізгіштер өте тиімді, өйткені олардағы электрондардың эффективті массасы өте аз. Осындай шала өткізгіштегі дисперсия заңы кезіндеге теориялық мәндер параметрлері: E_g - тыйым салынған зона мен эффективті массалар компоненталары $m_{x_j}^*$, m_y^* және $m_{z_j}^*$ 3.3 суретте висмут қабыршағындағы (пленка) электронның дисперсия көрсетілген.



3.3 сурет – Висмуттағы электрондардың Е(p_z) дисперсия заңы

Өлшемді деңгей Е_n қабыршақтың (пленка) туннелдік спектроскоп әдісімен анықталады. |p_z|=πħn/d мәні қабыршақ (пленка) қалыңдығы және деңгей нөмірі арқылы анықталады.

Әдебиет 2[33-36], 3 [19-20], 4[568-575]

Бақылау сұрақтары:

- 1. Кристалдың қасиетін қалай анықтауға болады?
- 2. Туннелдік эффект құбылысын түсіндір?
- 3. Амплитуда осцилляциясы қай кезде төмендейді?
- 4. Қабыршақтың (пленка) меншікті кедергісі қалай белгіленеді?
- 5. Микробөлшектердің энергетикалық спектрлерін қандай әдістермен зерттейді?

4 дәріс

4.1 Асқынторлардағы электрондар мен кемтіктер

Асқынторлардағы электрондар мен кемтіктер кванттық шұңқырлардағыдай сәйкес шекаралық шарттарды қолданып есептеуге болады. Асқынтордың периодтылығы фонон мен электронның толқындық функциясына келіп түседі. Нәтижесінде өткізгіштік зонада блох толқындары түрінде таралған асқынтордың өсу бағытында $\Psi^{(z)}$ иілетін (огибающий) толқындық функцияны алуға болады. Асқынторда GaAs/Al_{1-x}Ga_{ax}As қарапайым жағдайда k_x=k_y=0 (0,15<x<0,30 кезінде электронның массасын изотропты массаға жақын деп есептеуге болады және $m_A^* = m_B^*$) толқындық теңдеу тікбұрышты потенциалдық шұңқыр (Кронига-Пенни

моделі) үшін электронның z бағытында өрнектеледі. Көптеген кванттық механика кітаптарында бұл есепті шешу берілген.

Қалыңдығы бар тосқауыл мен шұңқырдан тұратын асқынторлар үшін және шұңқыр V_0 биіктігі бар Е электрон энергиясы блохты $k_z = k$ (дисперсия) толқындық вектормен трансценденттік теңдеу түрінде байланысқан:

$$\cos(kd) = \cos(k_1 a) \cos(k_2 b) - \frac{k_1^2 + k_2^2}{2k_1 k_2} \sin(k_1 a) \sin(k_2 b) \, \ddot{o} \, \dot{e} \, E > V_0$$
(4.1a)

И

$$\cos(kd) = \cos(k_1a)ch(k_2b) - \frac{k_1^2 + k_2^2}{2k_1k_2}\sin(k_1a)sh(k_2b) \ \ddot{o}\dot{e} \ E < V_0$$
(4.1 6)

мұндағы k₁, k₂ және к келесі мәндермен анықталады:

$$E = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m_A^*}$$
(4.2a)

$$E - V_0 = \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m_A^*} \quad i \check{\partial} \dot{e} \quad E > V_0$$
(4.26)

$$E - V_0 = \frac{\hbar^2 k}{2m_A^*} \quad i\partial \dot{e} \quad E < V_0$$
(4.2 B)

Әдетте трансценденттік теңдеулер (4.1) сандық есептеу арқылы шешіледі. Асқынторлар мен кванттық шұңқырларды салыстыру ретінде 4.1 суретте потенциалдық тосқауыл битіктігі бар 0,4 эВ біртекті КҚКШ электрон энергиясы өзгерісінің тосқауыл еніне тәуелділігі бірілген. Тосқауыл енінің төмендеуі кезінде көрші кванттық шұңқырлар бір-бірімен әсерлесе бастайды және КҚКШ асқынторларға айналады: оның дискретті деңгейлері зоналарға ажырайды, әрі оны минизоналар деп атайды. Иілетін функцияға жақындау бірнеше моноқабаттарға тең қабат енін қолдану ары қарай болмайтынын ескереміз. Осындай қысқапериодты асқынторларда электрон энергиясын есептеу үшін бірпериодты асқынтордан тұратын үшөлшемді кристалға стандартты есептеу әдістерін пайдалану қажет.



4.1 сурет – Тосқауыл енінің (шұңқыр еніне тең) КШ энергетикалық деңгейлерге тәуелділігіның пайда болу минизонасы. Кронинга-Пенни потенциалын есептеу көрсетілген. Тікбұрышты потенциалдың биіктігі 0,4 эВ тең.



4.2 сурет – кемтіктік минизона энергиясының GaAs (68 моноқабат) GaAs/Ga_{0.7}A1_{0.3}As (71 моноқабат) АТ өсу осіне перпендикуляр толқындық векторға тәуелділігі

Асқынтордың қысқапериодты энергия деңгейлері псевдопотенциал әдісін қолдану арқылы есептелінге. 4.2 суретте GaAs/Ga_{0,7}A1_{0,3}As кемтіктік минизонаны есептеу көрсетілген. Бір моноқабат қалыңдығы GaAlAs бір моноқабат қалыңдығына жақын 2,827 Å тең.

Әдебиет 1[425-431], 2 [21-27], 4[225-227]

Бақылау сұрақтары:

1. Асқынторлардағы электрон мен кемтіктің энергиясы қандай әдіспен есептелінеді?

2. Минизона дегеніміз не?

3. Толқындық вектор мен энергияның сақталу шарттары қандай теңдеумен есептелінеді?

4. Бір моноқабат қалыңдығы шашамен қандай болады?

5 дәріс

5.1 Асқынторлардағы фонондар

Кванттық шұңқырда электрондарға өлшемді квантталу әсер етеді. Бұл әсер шұңқырдағы рұқсат етілмеген электрон энергиясы тосқауылдағы тыйым салынған энергияға тең болғанда байқалады (яғни тыйым салынған зона күйі). Фонондар өздерін электрондар тәрізді блох толқындық векторының тыйым салынған энергияға (яғни, жиілікке) тәуелділігін беретін дисперсиялық қатынасы бар блох толқындары түрінде көрсетеді. Бұл сұраққа жауап беру үшін 5.1 суретте GaAs және AlAs фонондары үшін дисперсиялық қисықтың есептелінуі берілген. Оптикалық тармақтардың электрондық зонаға жақын екені көрсетілген. Энергия Г нүктесін қоса есептегенде (яғни, Брюллен зонасы орталығы) критикалық нүктелері к толқындық векторымен квадратты түрде өзгереді.



5.1 сурет - Көлемді GaAs (жоғарғы) және AlAs (төменгі) үшін дисперсиялық қисық

Бірақ, кез-келген материалда акустикалық тармақ **k**=0 кезінде нөлге ұмтылады. Соңғы тұжырым k=0 кезінде акустикалық фонон (шексіз ұзын толқын) біртекті трансляциялық кристалға ұқсайды. Мұндай трансляцияда қайтып келетін куштер пайда болмайды. Өйткені атомдар арасындағы қашықтық өзгермейді. Акустикалық фонондарды сипаттағандағы басқа айырмашылық нәтижесі k бойынша Г жақын дисперсиясына сызықты (квадратты емес) екенін көрсетті. GaAs/AlAs жүйесінде екі компоненттің максималды акустикалық модасы бірдей екенін атап өткен жөн. Сондықтан жиілік диапазоны өте жәй білінеді. Асқынторлардағы акустикалық фонондардың серпімділік теориясын қолдану шегі таралған дисперсиясы бар серпімді толқындарға ұқсайды: $\omega = \overline{\upsilon}k$, мұндағы $\overline{\upsilon}$ v екі орта үшін жарық жылдамдығы. Егер k d_B қалыңдығы бар B орта мен d_A қалыңдығы бар А орта қабаттарынан тұратын асқынтордың өсу бағытымен бағытталса, онда осы орташа жылдамдықты тапқан жеңіл. D арқылы таралатын vақыт $t = d_A / \upsilon_A + d_B / \upsilon_B$. Сондықтан орташа жылдамдық

 $\overline{\upsilon} = d/t = d(d_A/\upsilon_A + d_B/\upsilon_B)^{-1}$ (5.1)



5.2 сурет - Жоғарыда: ArBr асқынторының элементар ұяшығы (мысалы, Si₂Ge₂). Төменде: Si₂Ge₂ жүйесі үшін Г нүктесіндегі үшмода үшін аралас атомдардың элементар ұяшығының суреті

5.1. суреттегі оптикалық модаларды қарастырамыз. Олар центрі 280 см⁻¹ жиіліктерде (GaAs) және 380см⁻¹ (AlAs) жіңішке зоналар түзеді. Кейбір жиіліктер аймағында оптикалық модаға сәйкес GaAs-та таралатын AlAs мода көрінбейді. Осының нәтижесінде квантталу эффектісі байқалады.

Қарапайым жағдайда бұл көріністерді сипаттау үшін m_A атомдық массасы бар А элементінің 2 қабаты мен m_B атомдық массасы бар В элементінің 2 қабатынан тұратын периоды бар асқынторларды қарастырамыз (мысалы, Si және Ge). Бұндай периодтық құрылымның элементар ұяшығы 5.2 суретте көрсетілген. Осы кездегі асқынтор арқылы таралған **k** толқындық векторы бар фонондар үшін қозғалыс теңдеуі:

$$-m_{A}\omega^{2}\upsilon = f[(x-\upsilon) + ue^{-idk} - \upsilon],$$

$$-m_{B}\omega^{2}x = f[(y-x) + (\upsilon - x)],$$

$$-m_{B}\omega^{2}y = f[(u-y) + (x-y)],$$

$$-m_{A}\omega^{2}u = f[(ue^{-idk} - u) + (y-u)],$$

(5.2)

Бұл жүйенің біртекті сызықты теңдеуінің шешімі нөл болмау үшін (салыстырмалы ығысу (v, x, y, z) оның анықтауышы нөлге тең болу керек. Бұл жағдай секулярлық теңдеуге алып келеді. Оны екі квадратты теңдеуге бөлуге болады.



5.3 сурет - 5.2 суретте көрсетілген Si $_2 Ge_2$ асқынторы үшін дисперсиялық қисықтың есептелінуі

k=0 кезіндегі төрт тыйым салынған жиілік $\omega^2 = 0$ (асқынтордағы акустикалық мода)

$$\omega^2 = f\left(\frac{1}{m_A} + \frac{1}{m_B}\right) \tag{5.3}$$

$$\omega^{2} = f \frac{3(m_{A} + m_{B}) \pm \sqrt{9(m_{A} - m_{B})^{2} + 4m_{A}m_{B}}}{2m_{A}m_{B}}$$
(5.4)

Бұны өзіндік мән үшін екі бөлінген квадрат теңдеуден тапқан ыңғайлы. 5.2 суреттегі фонондардың ығысуы супер ұяшық ортасына салыстырмалы тақ не жұп болуы мүмкін (өзіндік векторы). Бірақ жұп не тақ өзіндік векторлары араласпайды. 5.2. теңдеуін екі байланыспаған теңдеуге бөлуге болады. 5.3. тақ өзіндік векторы үшін (қосу және $\omega^2 = 0$) және жұп үшін (5.3) және (5.4) $m_B = 2,6m_A$ мәніне қоямыз, әрі ол Ge₂Si₂ осқынторына сәйкес және $f/m_A = (520\tilde{n}\tilde{i}^{-1})^2$ теңдеуін алып, k=0 кездіндегі көлемді материалдар үшін фонондық жиілікті жуықтап жазамыз. $\omega=348$ см⁻¹, $\omega=516$ см⁻¹ және $\omega=516$ см⁻¹ жиіліктерін табамыз.

5.2 Полярлық кристалдағы электростатикалық эффекттер: интерфейсті модалар

Қосарланған акустикалық фонондар тармағында үлкен периодтың болуынан әрқашан дисперсия болып тұрады, ал оптикалық тармақта аз периодтың болуынан дисперсия болмайды. Сондықтан КҚКШ немесе асқынторлардың периодты құрылымдарын бөлу кезінде электрондар тәртібімен жүзеге асады.

Осындай екіөлшемді құрылымдарда фонондарды қарастырған кезде кешігетін деп аталатын эффектіні ескермеуге болады. Бұл қарастырған қозудың толқын ұзындығы сол жиілік фотонының толқын ұзындығымен салыстырғанда аз екендігін көрсетеді және иондардың қозғалысын қамтамасыз ететін электр өрісінің толқындық табиғатын да ескермеуге болады. Өріс электростатикалық болса, онда Гауус теңдеуі мен сәйкес Максвелл теңдеуін пайдалануға болады. Мұнда электромагниттік толқындардың таралуын қамтамасыз ететін эффектілерді ескермеу үшін уақыт бойынша туынды нөлге тең:

$$\nabla x E = 0 \tag{5.11}$$

(5.11) теңдеуден Е өрісті ф(r) скалярлық потенциалдан тапқан жөн, әрі ол Лаплас теңдеуін қанағаттандырады:

$$\nabla^2 \phi(r) 0, \tag{5.12}$$

Интерфейске перпендикуляр электрлік ығысудың компоненті үшін әдетте, үзіліссіздік шекаралық шартты $D_{\perp} = \varepsilon E_{\perp}$ және $E_{//}$ электр өрісінің параллель үзіліссіздік компонентін қанағаттандырады. Изотропты диэлектрлік $\varepsilon_A(\omega)$ және $\varepsilon_{\hat{A}}(\omega)$ функциялары бар екі А және В шала өткізгіштің арасындағы бірлік интерфейсті қарастырамыз: $\varepsilon_A(\omega)$:

$$E_{I|A} = E_{I|B} \tag{5.13 a}$$

$$\varepsilon_A E_{\perp A} = \varepsilon_B E_{\perp B} \tag{5.136}$$

Тербеліс амплитудасына жиналған уақытша механикалық шекаралық шартты ескермей және екі орта үшін сәйкес кернеуді (5.12) тауып және $E=-E=-\nabla\phi$ ескеріп, электростатикалық шекаралық шартты (5.13) қолданамыз. Интерфейс z=0 жазықтық болып табылады, ал z<0 А ортасына сәйкес келеді. (5.12) шешімін келесі түрде қарастырамыз:

$$\phi_A = A e^{iq_x x} e^{+q_x z} e^{i\partial \hat{e} z \le 0}$$

$$\phi_B = B e^{iq_x x} e^{+q_x z} e^{i\partial \hat{e} z \ge 0}$$
(5.14 a,

6)

мұндағы x осі $q_z^2 = q_x^2 q^2$ жазықтығында жататын q векторына бағытталған. x жазықтықта жататын q векторының бағытымен бағытталады, ал $q_z^2 = q_x^2$. ϕ_A және ϕ_B потенциалы интерфейске жақын. Әрі олар z=0 экспоненциалды өшеді. Осындай модалар функция болып сипатталынып, интерфейсті модалар деп аталынады.

(5.13 а) теңдеуін (5.14) теңдеуіе қолдану A=B екеніне және интерфейс жиілігі үшін «секулярлық теңдеуге» алып келеді. Оның екі ε_A және ε_B диэлектрлік функциясы қарама-қарсы таңбаға ие, әрі жиілік пайда болған жағдайда ғана шешімі болады. Осы жағдайдағы интерфейс плазмон деп аталады.

d_A қалыңдығы бар A материалының қабатынан және d_B қалыңдығы бар B материалы қабатынан тұратын периодты КҚКШ (немесе асқын тор) «электростатикалық» моданы қарастырамыз.



5.6 сурет – Тосқауылы бар А материалының В бірлік кванттық шұңқырдың жүйелі кескіні. Интерфейстік моданың тақ (-таңба) және жұп (+таңба) потенциалына сәйкес келетін толқындық функциясы (тұтас қисық) көрсетілген

(5.5) қосарланған фонондарды сипаттау сияқты $\phi(x, z)$ потенциалына блох шартын қоямыз (5.6 сурет В бір қабаты және А екі көрші қабаты үшін). Екі В материалы және А материалындағы ехр ($\pm q_z z$) толқын түрі үшін екі коэффициентті анықтау жеткілікті. Бұл кәдімгі секулярлық теңдеуге алып келеді: $\cos(kd) = ch(q_x d_A)ch(q_x d_B) + D(\omega)sh(q_x d_A)ch(q_x d_B)$ (5.18)

$$D(\omega) = \frac{1}{2} \left(\frac{\varepsilon_A(\omega)}{\varepsilon_B(\omega)} + \frac{\varepsilon_B(\omega)}{\varepsilon_A(\omega)} \right)$$
(5.19)

(5.18) теңдеуі асқын тордағы (өсу бағытымен бағытталған) k блох толқындық теңдеу мәнінің ω және q_x тәуелділігін есептеуге мүмкіндік береді.



5.7 сурет – Екі гетероинтерфейсті aya /GaAs (60нм)/AlAs (500 нм) жүйесіндегі AlAs-тектес интерфейсті мода. Нүктелер- тәжірибе жүзінде алған раман өлшеуінің нәтижесі.

(5.18) теңдеуі электростатикалық шекаралық шартты қолдану нәтижесінде пайда болды және механикалық шекаралық шартты қолдануға болмайтындығын ескереміз. (5.18), (5.6) және (4.1а) теңдеуінің арасында бір жақындық бар екенін байқаймыз. Жалпы барлық есептер үшін, сонымен қатар қабатты ортадағы толқындар таралуымен байланысқан канондық түр болып табылады.

(5.18) бірнеше шекті жағдайды және жазықтықтағы k=0, бірақ $q_x \neq 0$ жағдайын қарастырған ыңғайлы:

$$-\frac{\varepsilon_A(\omega)}{\varepsilon_B(\omega)} = \begin{bmatrix} th(q_x d_A / 2chq_x d_{B/2}) \\ ch(q_x d_B / 2chq_x d_A / 2 \end{bmatrix}$$
(5.19-

Әдебиет 1[431-445], 4[156-161], 5[368-376] Бақылау сұрақтары:

a,6)

1. Кванттық шұңқырдағы электрондарға қандай квантталу әсер етеді?

2. Орташа жарық жылдамдығы қандай теңдеумен анықталады?

3. Асқынтордағы акустикалық фонондарға қандай толқын сәйкес келеді?

4. k толқындық теңдеуі бар фонондар үшін қозғалыс теңдеуі қандай теңдеумен анықталады?

5. Кванттық шектелуі бар мода дегеніміз не?

6 дәріс

6.1 Шала өткізгішті асқынтор фонондарының раман спектрлері

Асқынторлардағы тербелмелі қозуды есептеу үшін раман спектроскопы негізі ақпарат беретін әдіс болып табылады. Нейтрондардың шашырауын өлшеу үшін үлгі көлемі тіпті аз болады. Кейбір зерттеушілер инфрақызыл спектроскопын қолданғанда қиындықтар тудырғанын байқаған болатын. Бірге жақын қалдық жарық аймағындағы шашырау нәтижесінде спектрде әлсіз құрылымды байқау қиынға соқты (мысалы, m=3,5,7, ... модаларға сәйкес модалар). Бірінші жақындаудағы шашырау спектрі диэлектрлік тұрақтысы бар бір ості кристалл спектріне ұқсас болып келеді:

$$\left\langle \varepsilon_{z} \right\rangle^{-1} = \frac{1}{d} \left(\frac{d_{A}}{\varepsilon_{A}} + \frac{d_{B}}{\varepsilon_{B}} \right)$$
$$\left\langle \varepsilon(\omega)^{-1} \right\rangle = \frac{1}{d} \left(d_{A} \varepsilon_{A} + d_{A} \varepsilon_{A} \right) \tag{6.1}$$

Дифференциалдық спектроскоп m=3, 5, ... кванттық модаларымен байланысқан Инфрақызыл спектрлерінің әлсіз құрылымдарының шашырауына көмектесе алады.

6.2 Қосарланған акустикалық фонондардағы рамандық шашырау

КҚКШ және асқынтордағы акустикалық фонондар көлемді материалдардағы акустикалық фонондардан алынады:

- әрбір q үшін акустикалық дисперсиялық қатынастың ығысуы;

- акустикалық импеданстың сәйкестелінуінен зона шекарасындағы және ортасындағы саңылаулардың ашылуы.

Ge₂Si₂ жағдайында (5.3 суретті қара) шекарада тек бір ғана саңылау пайда болады. Жалпы жағдайда бұл шекара π/d мәні бар тұрғын А-векторына сәйкес. Осы кезде [001] бағыты үшін көлемді кристалдардағы вектор 5.3 суреттегіден екі есе үлкен $2\pi/a_0$ мәніне ие екенін ескереміз.

Активті раман шашырауындағы фонондардың толқындық векторы өте аз, яғни зона ортасына қатысты тек фонондар ғана раманды активті болуы мүмкін. Бұл тұжырымды дипольды жақындаумен түсіндірілген: жарықтың толқын ұзындығы сипатталынатын материалдың ұзындығынан (яғни экситон радиусы немесе тор тұрақтысы) көптеген есе кіші. $q \approx 0$ шектелуі қысқапериодты асқын торлар үшін дұрыс, бірақ d үлкен мәнінде өзгеруі тиіс. Кері шашырау үшін q шашырауының толқындық векторының келтірілген мәнін анықтаймыз:

$$\overline{q} = \frac{4\pi n/\lambda_L}{\pi/d} = \frac{4nd}{\lambda_L}$$
(6.2)

Әдеттегі (типтік) мәндер үшін сыну көрсеткіш $n \sim 3$, 5 және лазердің толқын ұзындығы $\lambda_L = 500$ нм, d = 36 нм үшін $\overline{q} = 1$, әрі GaAs-дың 130 моноқабатына сәйкес келеді. Бұл жағдайда шашырау фонондарда болады. Сондықтан d немесе λ_L өзгертіп, келтірілген толқындық вектродың барлық өлшеу диапазонын қамтып және шекараның мини-3Б дейін жетуге болады. Бұл 6.1 суретте $730 \le \lambda_L \le 830$ нм диапазонын өлшеу кезінде күрделі периоды бар (AIAs)₉₉[(GaAs)₁₇(AIAs)₄]₅ [001]-асқынторы көрсетілген. Суретте ең төменгі және бірінші қосарланған фонон тармақтары LA (FLA) және мини-3Б шетінде саңылаудың бар екені анық көрсетілген.



6.1 сурет – Раман спектроскоп көмегімен алынған AlAs₉₉[(GaAs)₁₇-(AlAs)4]₅ периоды бар асқын тордың дисперсиялық қисығы (бірлікке келтірілген) Пунктир— Рытов деңдеуімен есептелген дисперсия, Тұтас сызықтар-орташа жырық жылдамдығымен алынған дисперсия (сондықтан мұнда жіктелу жоқ)

Тәжірибелік нүктелер мен теориялық қисықтың арасында сәйкестік бар екенін суреттен көруге болады. Сондықтан осы спектрлерден серпімділік тұрақтыны анықтауға болады.

Ары қарай қосарланған акустикалық фонондардағы тиімді шашырау механизмін қарастырамыз. Әдетте, Q фонондық амплитуда бойынша туынды орына e_{ij} деформация бойынша туындыны қолдану рамандық тензорды береді. Q_j бойынша χ туынды трансляциялық инварианттықтың салдарынан салыстырмалы сызықты. Сондықтан e_{ij} бойынша χ туынды серпімділік теориясы тұрғысынан q тәуелсіз.

Деформация бойынша χ туынды төртінші рангті тензор компонентасы болып табылады және серпімді-оптикалық коэффициент деп аталады. $\delta \varepsilon_{ijkl}^3$ жағдайында кубтық кристалдардың үш тәуелсіз серпімді-оптикалық коэффициенті бар. Бірақ, қосарланған акустикалық фонондар үшін «рамандық тензор» біртекті деформация үшін жай туынды болып табылмайтынын ескергеніміз жөн, ал ол *d* периоды бойынша интеграл алынады. Өйткені период шегінде деформация біртекті емес. Бұл қосарланған 266см⁻¹ байланысқан акустикалық мода 5.2 суретте көрсетілген. Ge және Si жазықтығы арасындағы деформация нөлге тең. Осы кезде деформация Ge және Ge және Si және Si арасында қарама-қарсы таңба болады. Сәйкес R_{FA} рамандық тензорды асқынтор периоды бойынша фотосерпімдімен теңелу жолымен табуға болады. Қысқаша R_{FA} келесі түрде жазылады:

$$R_{FA} = \infty \int_0^d \frac{\partial \chi}{\partial e} e(z) dz \tag{6.3}$$

(6.3) теңдеудегі R_{FA} асқынтордың немесе e(z) екі құрамалы бөлік үшін біртекті ортадағы жазық толқынның қасиеттілігінің қарапайым шегінуінен серпімді-оптикалық коэффициент нөлге тең болуы мүмкін. Шашырау кезіндегі қосарланған акустикалық модалардың резонансты эффектісін қарастырамыз. 6.2 суретте (GaAs)₁₆(AlAs)₁₅ КҚКШ үшін шашырау спектрі көрсетілген. Әрбір қисықтың маңында энергия $\Delta\hbar\omega = \hbar(\omega_L - \omega_{e1,b1})$ көрсетілген.



6.2 сурет- КҚКШ (GaAs)₁₆(AlAs)₁₆ LA фонондағы және GaAs шұңқырдағы lh —» le ең төменгі өтудің резонансқа әсері. Қалың ашық фон толқындық векторды (біртексіз созылудың негізінен) сақтамаған кездегі LA фонондардың шашырауын көрсетеді. Қауырт өскен сұр пиктер қосарланған дублеттер. Өлшеу резонансты эффектіні арттыру мақсатында магнит өрісінде жүргізілді.

Ол энергия (10К кезіндегі $\hbar \omega_{e1,h1} = 1,7$ эВ) электрон мен ауыр кемтіктің зонамаңының бірінші өлшемінің арасындағы жиіліктің өтуі мен лазер жиілігі арасындағы айырмашылық болып табылады. Қосарланған LA-дублетінің резонанстық ұлғайтылуы байқалмайды. Оның орнына енді резонанстық фон көрінеді. Бұл құбылыс кездейсоқ қабат қалыңдығының флуктуациясының салдарынан $\hbar \omega_{e1,h1}$ біртексіз ұлғайтылумен түсіндіріледі.

Бұл жерде энергияның (немесе жиіліктің) біртекті және біртексіз ұлғайтылуы деген ұғымды енгізген жөн. Біртекті ұлғайтылу алдамшы энергия (жиілік) түріндегі бөлгіш (знаменатель) Лоренц резонансынының пайда болуымен түсіндіріледі. Керісінше біртексіз ұлғайтылу осциллятор жиынтығының нәтижесінде, бірақ ω_g орталық жиілікті айнала таралады. Қарапайым жағдайда кездейсоқ таралудың орнына Гаусс заңы қолданылады:

$$p(\omega) \propto \left(- \left| \frac{\omega - \omega_g}{g} \right|^2 \right) d\omega_g \tag{6.4}$$

мұндағы $p(\omega) - \omega$ және $\omega + d\omega_g$ аралғында жиілігі бар осцилляторлар саны, ал біртексіз енді білдіреді. КҚКШ-да жеке қабат жазықтығының *в* жиегінде немесе өсу бағытындағы қабат қалыңдығының кездейсоқ флюктуациясының салдарынан электронды ауысудағы ($\omega_{\varepsilon 1,h1}$ тектес) біртексіз ұлғаю жиілігінің болуы мүмкін. 6.1. суретте мұқият алынған екі интерфес өте жазық екенін көрсетеді және мұнда берілген интерфестің екі жағынан (А1 және Ga) екі түрлі атом сортын табуға болады. GaAs бір моноқабатынан қабат қалыңдығының флюктуациясы пайда болады, яғни $a_0/2$ немесе $\delta = \pm a_0/4$. (6.4) теңдеу көмегімен сәйкес g біртексіз ұлғайтуды (шексіз потенциалдық тосқауыл деп ұйғарамыз) есептеуге болады:

$$g \approx 2\frac{\delta}{d}\Delta e \tag{6.5}$$

(6.5) теңдеуден $\Delta E \sim 180$ мэВ, d=44 Å және $\delta = \pm 1,4$ Å үшін g ~ 10мэВ екенін табтық.

6.2 суретке қайта оралсақ, біртекті ұлғайтылу 1h → 1е өту кезінде ~0,8мэВ екенін көрсетеді, әрі ол g біртексіз қалыңдықтан көп есе кіші. Осы шартта және лазер жиілігі диапазонында:

$$\hbar\omega_{e1,h1} - g < \omega_L < \omega_{e1,h1} + g \tag{6.6}$$

6.3 суретте бірдей мәнде раман жылжуы ығысуы кезінде интенсивті дискретті қосарланған І_F және Ів фонондарының кері қатынасы көрсетілген.



6.3 сурет – резонансы бар бұзылудың lh —>1е өтудегі Ів фон интенсивтілігінің LA дублет интенсивтілігіне өту қатынасының тәуелділігі. Қисық тәжіріибелік нүктелерге қиыстырып (подгонка) салынған.

Тұтас қисық тәжіріибелік нүктелерге қиыстырып (подгонка) салынған. Қуып жету қисығының ені (≈12мэВ) шамамен 4g, яғни g~3 мэВ. g максимал I_F/Iв~3,3 мәніне бөліп, біртекті өту енін γ=0,76 мэВ аламыз.

6.3 Квантты оптикалық фонондардағы рамандық шашырау

Квантты оптикалық фонондардағы рамандық шашырауды қарастыру m=1, 2, 3, 4 және $k_{x,y}=0$ үшін полярлық [001]-асқынторлардағы LO моданың электростатикалық потенциалы мен ығысуы 6.4 суретте көрсетілген. ϕ және u_z фаза бойынша жылжыған. u_z сәйкес механикалық шекаралық шарты бар интерфейсте нөлге тең.

Фонондардағы рамандық шашырау электрон-фонондық әсерлесу арқылы пайда болады. Ек типтің әсерлесуі мүмкін. Біреуі атомдар ығысуымен байланысты, бірақ материалдың полярлы боуын талап етпейді.



6.4 сурет u_{z} ығысу мен $k_{xy}=0$ бар [001] өсу бағытындағы полярлық асқынтордың LO_m кванттық мода (m = от 1 до 4) үшін электростатикалық потенциалдың тәуелділігі

Ge/Si немес GaAs/AlAs типті жүйе үшін бұл әсерлесу тензормен анықталады және [001] кеңістігінен кері шашырау үшін LO фонондарда ғана шашырау рұқсат етіледі. Егер лазередің поляризациясы мен жарықтың шашырауы ξ_L және ξ_S кристалдың остеріне параллель болса (ξ немесе ξ), онда LO шашырау қозатын және шашырататын жарықтың байланған (скрещенный) поляризациясы кезінде болады. Электрон-фононды әсерлесудің деформациялық потенциалының матрицалық элементін есептеу кезінде жұп m үшін u_z осцилляциясының дәлдігінде өзара жойылады және шашырау тыйым салынған болып қалады. Бірақ m=1 үшін өзара жойылу болмайды, ал m=3, 5... үшін ол бөлік-бөлік болып өзара жойылады: кванттық модасы бар m=1, 3, 5,... үшін шашырау интенсивтілігі жуық түрде пропорционал болуы керек.

Ф электростатикалық потенциалының (фрёлих әсерлесуі) матрицалық элемент арқылы әсерлесуі параллель ξ_L және ξ_S LO фонондардағы тыйым салынған шашырауымен байланысты. Бұл жағдайда көлемді материалдардағы электрон-фононды әсерлесу кулондық әсерлесудің алыс әсер етуімен негізделген. Сәйкес сингулярлы q^{-1} тип валенттік зона мен өткізгіштік зонадағы қосынды LO фонондардың әсерінен болады. Бұл эсерлер тең және бір-бірімен сәйкес болуы керек. Қалған сингулярлы емес эффект кемтік пен электрондардың кері массаларының айырымына және е* фононның көлденең зарядына пропорционал. Өйткені бұл кезде асқынтор кристал болып табылады. Көрсетілген «тыйым салынған» шашырау түрі инфрақызыл активті модаларда, яғни тақ LO_m фонондарда пайда болуы мүмкін. m (∞m^{-2}) үлкейген кезде эффект кішіреюі мүмкін және шашырау кезіндегі үлкен период жағдайында өсу осі бағытында жоғалып кетеді. Өйткені z бағытындағы энергетикалық зона өте жазық (z бағытындағы кері масса нөлге тең болып кетеді). Жарықтың құрылым жазықтығымен таралуы (жарық КҚКШ шетіне қарай түседі) кезіндегі кері шашырауға ұқсас эффект те пайда болуы керек: рамандық тензор улкен период кезінде де жоғалмайтын электрондар мен кемтіктердің кері массасына пропорционал. Бірақ бұл үйлесімді кескінде өте аз тәжірибе жасалған жоқ. Күні бүгінге дейін бұл механизм қолданылған жоқ. Бұл механизм LO мода кезіндегі тақ т үшін шашырау туғызар еді. Бірақ бұл модалар GaAs/AlAs асқынторының A_1 қатысты нүктелік D_{2d} тобының толық симметриясына жататынын байқауға болады. Сәйкес рамандық тензор келесі түрге ие:

$$R_{LO}(A_1) = \begin{bmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & a \end{bmatrix}$$
(6.7)

Тензор көлемді GaA оптикалық фонондар жағдайында нөлге тең. Оның КҚКШ тегі $\phi(z)$ индуцирленген матрицалық элементпен электрон-фононды әсерлесуге негізделген. $\varphi_n(z)$ квантты электронды толқындық функция арасындағы $\phi(z)$ диогоналды матрицалық элемент тақ *m* кезінде нөлге айналады, бірақ *m* кезінде нөлге айналмайды.

$$M_{ep} = \int_0^d \varphi_n^d \phi_m(z) \varphi_n(z) dz$$
(6.8)

Бірақ ол *m* өскен кезде төмендейді. (6.8) матрицалық элемент электрон-фононды фрельих әсерлесуінен алынған. Тензор рангі екі өзаражоятын мүшемен қоса (6.8) матрицалық элемент түрін қамтиды: біреуі өткізгіштік зона, екіншісі валенттік зона. Шексіз электронды тосқауыл үшін өзаражоятын нүкте болып қалады. Бірақ бұл тосқауылдар шексіз емес, әрі кейбір әсерлер ескерілмейді.

Жоғарыдағы талқылаулар нәтижесіне сүйеніп қорытынды жасаймыз: $\xi_L // \xi$ және $\xi_S // \xi_L$ және ξ (байланысқан поляризация) кезінде m=1, 3, 5 модалар, ал $\xi_L // \xi_S$ (параллель поляризация) кезінде m=2, 4, 6, модалар байқалады. Әдебиет [445-453]

Бақылау сұрақтары:

1. Асқынтордың тербелмелі қозуы қандай әдіспен зерттелінеді?

2. Диагоналды матрицалық элемент қандай жағдайда нөлге айналады?

3. Интерфейсті мода қандай әдіспен анықталады?

4. Фонондардағы рамандық шашырау қандай әсерлесу арқылы пайда болады?

5. Рамандық теңдеу қандай формуламен көрсетілген?

7 дәріс

7.1 Көпретті қайталанатын кванттық шұңқырдағы электрон—LO фононды әсерлесудің макрсокопиялық моделі

Екі материалдан жасалған энергиялары бір-бірін басып қалмайтын оптикалық фонондарға мысал ретінде GaAs и AlAs алуға болады, әрі олар сәйкес қабаттарда кванттала алады. Сонымен қатар интерфейстің жойылуына сәйкес ығысуы экспоненциалды түрде өшетін интерфейсті модалар түзіледі. КҚКШ мен асқынторлар фрелих әсерлесуінің қалай өзгеретінін қарастырамыз. Ол үшін GaAs и AlAs құралған КҚКШ мен асқынторлар аламыз.

Фрелих эсерлесуінің гамильтонианы электростатикалық потенциалды скалярлы түрде электрон зарядына көбейтүін білдіруі мүмкін. Теориялық түрде бұл потенциалды еспетеу ушін сәйкес шекаралық шарттары бар тордың динамикалық моделін қолдануға болады. Практикада бұны есептеу көп уақытты алады, әрі мұны есептеу үшін жоғары жылдамдықты суперкомпьютерлер керек. Сонымен қатар алынған нәтижелер алдын-ала берілген тосқауылдар мен шұңқыр енін есептеуге тән. Сондықтан шұңқыр ені әртүрлі улгілер үшін пайдаланатын және скаларялық потенциалға қарапайым мәнді алған ыңғайлы. Олар «макроскопиялық» деп аталады. Бұл моделдердің негізгі айырмашылығы шекралық шарттарын дұрыс таңдауда, əpi КҚКШ мен асқынторлардың интерфейстерінің оптикалық фонондары жиналады. Шекаралық шарттарын таңдау барысында оның біреуі «механикалық модель», ал қалғандары «континуалды диэлектрлік модель» деп аталынады. Қатаң түрде айтқанда «механикалық модель» интерфейсте LO кванттық ығысу фонондары нөлге айналады. Егер ø электростатикалық потенциал интерфейсте жойылып кетпейді десек, онда А кванттық ортадағы фонон үшін, әрі q_x нөлге тең емес деп скалярлық потенциалды келесі түрде көрсетуге болады:

$$\phi(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \phi_{0\exp}(\mathbf{i}, q_{\mathbf{x}} \mathbf{x}) = \cos(\mathbf{k}_{\mathbf{m}} \mathbf{z}) \quad \text{жұп m үшін,} \phi(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \phi_{0\exp}(\mathbf{i}, q_{\mathbf{x}} \mathbf{x}) = \sin(\mathbf{k}_{\mathbf{m}} \mathbf{z}) \quad \text{тақ m үшін,} q_{\mathbf{x}} \mathbf{x}) = \sin(\mathbf{k}_{\mathbf{m}} \mathbf{z}) \quad \text{тақ m үшін,}$$
(7.1)



7.1. сурет - Әртүрлі қалыңдықтағы GaAs/AlAs КҚКШ GaAs тәріздес оптикалық модалардың өлшеу (пунктир) және салыстыру (тұтас қисықтар) раман спектрлері.

Интрефейске параллель электр өрісінінің компонентасы келесі түрге ие

$$E_x = -d\phi/dx = (-iq_x) \phi(x, z)$$
 (7.2)

және интерфейсте нөлге тең емес (өйткені ондағы потенциал нөлге тең емес). Мұндай моделдер Максвелл теңдеулерін керек етпейді, әрі одан интерфейстік моданың бар екендігі байқалмайды.

«Диэлектрлік континуалдық моделдерде» жүзеге асыратын нүкте ретінде Максвелл теңдеулері қолданылады. Олардың негізінде интерфейстік модалар Лаплас теңдеуі шешімінің бөлігі болады. Мұндай моделдер механикалық шекаралық шарттарды бұза алмайды (интерфейсте кванттық фонондардың атомдық ығысуы нөлге тең болатын талап). Бірақ интерфейстік модалар үшін олар микроскопиялық есептеулердің қорытындысына өте жақын қорытынды болып табылады. Шындығына келгенде атомдардың ығысуы интерфейске жақын маңда ғана нөлге тең болады.

Электростатикалық потенциал мен атомдардың ығысуын анықтау үшін тор динамикасын есептеуге микроскопиялық шешімнің моделін жасағанда, диэлектрлік континуалдық модельдің микроскопиялық есепке жақын өте жақсы нәтижелер алуға интерфейстік модалар болатынына көз жетізді. Осындай моделдерде жаксы сипатталынады. Механикалық және максвелдік шекаралық шарттар бірмезгілде орындалу үшін ф мен dф/dz туындысы интерфейсте нөлге айналады. ф жұп симметриясы бар сәйкес константасы (жазықтыққа шағылатын қатынас бойынша қабат ортасынан z бойынша сәйкес мүшен есептелінеді. өтетін) немесе ф тақ симметрисындағы Осыларды ескеріп ф үшін келесілер алынды:

$$\phi_{m} = \cos \frac{m \pi z}{(n+1)a} - (-1)^{m/2} \text{ жұп m үшін}$$

$$\phi_{m} = \sin \frac{\mu_{m} \pi z}{(n+1)a} - \frac{C_{m} z}{(n+1)a} \text{ тақ m үшін}$$
(7.3 a,6)

мұндағы а — GaAs немесе AlAs қабаттарындағы атомдық жазықтықтардың арасындағы қашықтық, nа — d_A немесе d_B қабат қалыңдығы. $z = \pm (n + 1)a/2$ кезінде орналасқан μ_m және C_m тұрақтылары интерфейсте ϕ_m и $d\phi_m/dz$ нөлге тең кезде анықталады. Бұл шекаралық шарттар μ_m және C_m келесі теңдеу шешімі болып табылса ғана қанағаттандырылады:

$$tg(\mu_m \pi/2) = \mu_m \pi/2,$$
 (7.4 a)

$$\sin(\mu_m \pi/2) = C_m \pi/2,$$
 (7.46)

Бұл екі трансценденттік теңдеулердің бірнеше шешімін келтіреміз:

$\mu_3 = 2,86064;$	$\mu_3 = 4,918;$	$\mu_3 = 6,95$ и
$C_3 = 1,9523;$	$C_5 = -1,983;$	$C_7 = 1,992.$

Электрон-LO фонондық әсерлесу (7.3) потенциалы арқылы алынады, әрі ол *Хуан-Джу* моделіне сүйенеді.



7.2 сурет - GaAs/AlAs «макроскопиялық» моделдер көмегімен есептелінген ең төменгі кванттық және интерфейстік фонондармен байланысқан электростатикалық потенциалдар мен атомдардың ығысуын салыстыру: а) диэлектрлік континуум; б) механикалық шекаралық шарт; в) Хуана-Джу моделі; және г) в микроскопиялық теория.

7.2 суретте ең төменгі реттегі кванттық фонондармен байланысқан потенциалдар және аb микроскопиялық модел нәтижелерімен салыстыратын интерфейстік моделдер модалары көрсетілген. Хуан-Джу моделі ең жақсы аппроксимациялық микроскопиялық модель болып табылады. Одан диэлектрлік континуалдық модель туындайды. Олардың нәтижелері 7.3 суретте көрсетілген. Бірак Хуан-Джу моделі мен диэлектрлік континуалдық модель арасындағы айырмашылық шұңқыр ені кіші жағдай үшін есептелінгенде жоғалып кетеді. Мұндай шұңқырлар үшін интерфейстік модалардың ықтималды шашырауы негізгі салым болып таыблады. Бұндай жағдай үшін мнимум төменгі зона қатынасы бойынша қалдық 200 мэВ энергиясы бар күйдегі электрондарды қоздыру үшін пикосекунды лазерлік импульсті қолданған. Қалдық энергиясы бар электрондар электрон-LO фонондық әсерлесуімен релаксацияланады және оған түсірілген LO фонондар 10 пс уақыты бар тепе-тең емес жағдайды құрады. Алынған тәжірибелік нәтижелер Хуан-Джу моделімен келіседі.



7.3. сурет – толық ішкізоналық квантталған электрондардың шашырау ықтималдығы (1 —> 1 зона маңы) мен LO-фонондардық шұңқыр еніне тәуелділігі. W_{in}^+ тұұтас қисығы — интерфейстік модадағы

шашырау; кванттық модадағы шашырау Wz — Хуан-Джу моделі көмегімен есептелінген; W_1 — диэлектрлік континуалдық модель; W_2 — механикалық модель.

Әдебиет 3[453-457], 5[234-245]

Бақылау сұрақтары:

1. Интерфейстік модалар қандай модельмен сипатталынады?

2. Интерфейске параллель электрлік өріс компонентасы қандай формуламен есептелінеді?

3. КҚКШ электрон - LO фонондық әсерлесу мәні қандай әдіспен анықталады?

8 дәріс

8.1 Асқынтордағы электрондар, фонондар және фотондар

ф(z) функциясы А қабатының ішінде берілсін

$$\varphi(x) = F_{+}e^{ik_{A}z} + F_{-}e^{-ik_{A}z}$$
(8.1)

Ал В қабатының ішінде келесі функция берілген.

$$\varphi(x) = G_{+}e^{ik_{B}z} + G_{-}e^{-ik_{B}z}$$
(8.2)

Бұл функция гетерошекарада мына шартты қанағаттандады.

$$arphi|_A = arphi|_B \ , \ C_A rac{darphi}{dz}|_A = C_B rac{darphi}{dz}|_B$$

 $\varphi(z)$ функциясын және оның туындысын екікомпонентті баған ретінде көрсетеміз.

 $\hat{\varphi}(z) = \hat{t}(z, z_0)\hat{\varphi}(z_0)$

$$\hat{\varphi}(z) = \begin{pmatrix} \varphi \\ \dot{\varphi} \end{pmatrix}, \ \dot{\varphi}_j \equiv \frac{C_j}{C_A} \frac{1}{k_A} \frac{d\varphi}{dz}$$
(8.3)

(8.4)

1 қалыңдықтағы біртекті қабат арқылы өтетін тасымалдау матрицасы:

$$\hat{t}(z, z_0) = \begin{bmatrix} \cos kl & \frac{1}{N}\sin kl \\ -\bar{N}\sin kl & \cos kl \end{bmatrix}$$

мұндағы: $l = z - z_0$, $\bar{N} = 1$ A қабаты ішінде $\bar{N} = (C_B k_B)/(C_A k_A) \equiv N$ B қабаты ішінде. Осы теңдеуді қорыту кезінде $d\varphi/dz$ туындысы ескерілді. $ik_A \left(F_+ e^{ik_A z} - F_- e^{-ik_A z}\right)_{\text{немесе}} ik_B \left(G_+ e^{ik_B z} - G_- e^{-ik_B z}\right)$

 ${
m Det}\ \hat{t}=1$ ескереміз (унимодулярлы матрицы). $k_B=ipprox$ кезінде табатынымыз:

$$\hat{t}(z, z_0) = \begin{bmatrix} \cosh \mathfrak{A}l & \frac{1}{\eta} \sinh \mathfrak{A}l \\ \eta \sinh \mathfrak{A}l & \cosh \mathfrak{A}l \end{bmatrix}$$
(8.5)

Мұндағы - $\eta = (C_B x)/(C_A k_A)$. Блох теоремасы:

$$\hat{\varphi}(d) = \hat{t}_A \hat{t}_B \hat{\varphi}(0) \equiv \hat{T} \hat{\varphi}(0) = e^{iKd} \hat{\varphi}(0)$$
(8.6)

мұндағы К – толқын таралу кезіндегі асқынтордың z бағытындағы толқындық векторы. Дисперсилық теңдеу:

$$Det = \begin{bmatrix} T_{11} - e^{ikd} & T_{12} \\ T_{12} & T_{22} - e^{ikd} \\ \cos Kd = \frac{T_{11} + T_{22}}{2} \end{bmatrix}$$
(8.7)

 $\cos Kd = \cos k_A a \, \cos k_B b - \frac{1}{2} \left(N + \frac{1}{N} \right) \sin k_A a \, \sin k_B b$

Шындығында:

$$\hat{T} = \hat{t}_A \hat{t}_B = \begin{bmatrix} \cos k_A a & \sin k_A a \\ -\sin k_A a & \cos k_A a \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos k_B b & \frac{1}{N} \sin k_B b \\ -N \sin k_B b & \cos k_B b \end{bmatrix} = \\ = \begin{bmatrix} \cos k_A a \cos k_B b - N \sin k_A a \sin k_B b & \dots \\ & \cos k_A a \cos k_B b - \frac{1}{N} \sin k_A a \sin k_B b \end{bmatrix}$$

$$(8.8)$$

Осыдан (8.9) теңдеу шығады.

 φ - электронның (немесе кетіктің) иілетін толқындық функциясы. Шекаралық шарт келесідей:

$$C_A = rac{1}{m_A}, \ C_B = rac{1}{m_B}, \ N = rac{m_A}{m_B} rac{k_B}{k_A}$$

V тосқауылынан төмен Е энергиясы бар күй үшін дисперсиялық теңдеуді келесі түрде жазу ыңғайлы:

$$\cos Kd = \cos ka \, \cosh \mathfrak{B}b \, + \, \frac{1}{2}(\eta - \frac{1}{\eta})\sin ka \sinh \mathfrak{B}b \tag{8.9}$$

Дисперсия анализі үшін кіші Kd –ғы түйін келесідей:

$$1 - \cos Kd = \frac{1}{2}\sin ka \,\sinh \mathfrak{B} \, f_1 f_2 \equiv F \tag{8.10 a}$$

$$f_1 = \tan k \frac{a}{2} - \eta \tanh \frac{b}{2} \tag{8.10.6}$$

$$f_2 = \frac{1}{\eta} \cot k \frac{a}{2} + \coth \frac{b}{2}$$

$$(8.10 \text{ B})$$

Жеке кванттық шұңқырдағы электрон энергиясы үшін (8.10 б), (8.10в) теңдеулері осы теңдеумен $f_1 = 0, f_2 = 0$ при $b \to \infty$ сәйкес келеді.

Kd<<1 кезінде алатынымыз $E \approx E_{e\nu} + \frac{d^2}{2F'}K^2$ немесе $\frac{1}{M_{\parallel}} = \frac{d^2}{F'\hbar^2}$. Тар зоналар: $E \approx E_{e\nu} + \frac{1}{F'}(1 - \cos Kd)$

8.2 Оптикалық асқынторлардағы кәдімгі жарық толқындары Максвелл теңдеуі:

$$rot \mathbf{B} = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}, rot \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}$$
$$div \mathbf{D} = 0, div \mathbf{B} = 0.$$
(8.11)

Монохроматтық толқын кезінде операторыды $\partial / \partial t$ алмастыруға болады $-i\omega$

s-поляризация: $\vec{E}//y$, $\vec{B} \perp y$ ролін ойнайды, φ , ε_y шекаралық шарт: $\varepsilon_y | A = \varepsilon_y |$ үздіксіз Вх келсідей: $(\partial \mathcal{E}_y / \partial z) |_A = (\partial \mathcal{E}_y / \partial z) |_B$

$$\mathcal{E}_{y} \propto \exp\left(\pm ik_{z}z + i\mathbf{q}\rho\right)^{k_{jz}} = \sqrt{\left(\frac{\omega}{c}\right)^{2}\varepsilon_{j} - q^{2}}, \ N = \frac{k_{Bz}}{k_{Az}}$$
(8.12)

p-поляризация: $\vec{E}//y$, $\vec{B} \perp y$, φ ролін Ву ойнайды, шекаралық шарт: $B_y | A = \varepsilon_y | B$ және үздіксіздіктен ε_x шығатыны

$$\varepsilon_A^{-1}(\partial B_y/\partial z)|_A = \varepsilon_B^{-1}(\partial B_y/\partial z)|_B N = (k_{Bz}\varepsilon_A)/(k_{Az}\varepsilon_B)$$

Ұзын толқынды ығысу кезінде асқынторды эффективті диэлектрлік өтімділігі бар біртекті орта деп қарастырамыз:

$$\varepsilon_{\perp}^{\text{(eff)}} = \frac{\varepsilon_A a + \varepsilon_B b}{a + b}, \ \varepsilon_{\parallel}^{\text{(eff)}} = \left(\frac{a}{\varepsilon_A} + \frac{b}{\varepsilon_B}\right)^{-1} (a + b)$$
(8.13)

Бұл формулаларды қарапайм түрде қорытуға болады. Демек, жұқа қабаттарда Е өрісінің өзгеруін және жеке қабаттағы D ығысуын ескермеуге болады: *s*-поляризация (ɛ_v үздіксіз).

$$D_A = \varepsilon_A \ \mathcal{E}_y \ , \ D_B = \varepsilon_B \ \mathcal{E}_y \ \ \bar{D} = \frac{a \ D_A + b \ D_B}{a + b} = \frac{a \ \varepsilon_A + b \ \varepsilon_B}{a + b} \mathcal{E}_y$$
(8.14)

р-поляризация (Dz үздіксіз).

$${\cal E}_{A,z}=D_z/arepsilon_A$$
 , ${\cal E}_{B,z}=D_z/arepsilon_B$

$$\bar{\mathcal{E}}_z = \frac{a \, \mathcal{E}_{A,z} + b \, \mathcal{E}_{B,z}}{a+b} = \frac{a \, \varepsilon_A^{-1} + b \, \varepsilon_B^{-1}}{a+b} \, D_z$$

8.3 Интерфейсті (шекара аралық) фонондар

$$\begin{split} \mathbf{E} &= -\nabla \varphi \ , \ div \ \mathbf{D} = 0 \ , \ \varepsilon \triangle \varphi = 0 \ , \\ \mathcal{E}_z &= -\frac{\partial \varphi}{\partial z} \ , \ \mathcal{E}_x = -ik_x \varphi \ , \ k_z = \pm i \ k_x \ , \ N = \frac{\varepsilon_B}{\varepsilon_A} \end{split}$$

Интерфейсті фонондар үшін дисперсиялық теңдеулер:

$$\cos Kd = \cosh k_x a \cosh k_x b + \frac{1}{2} \left(\frac{\varepsilon_B}{\varepsilon_A} + \frac{\varepsilon_A}{\varepsilon_B} \right) \sinh k_x a \sinh k_x b$$
(8.15)

$$|k_x|a, |k_x|b \to \infty$$
 - өтеді
 $0 = 1 + \frac{1}{2} \left(\frac{\varepsilon_B + \varepsilon_A}{\varepsilon_A + \varepsilon_B} \right) = \frac{(\varepsilon_A + \varepsilon_B)^2}{\varepsilon_A \varepsilon_B}$ немесе $\varepsilon_A + \varepsilon_B = 0$

Екі жартылай шексіз орта шекарасындағы беттік толқын. Орта шекарасындағы А/В өрісі келесі түрде анықталады:

z < 0 кезіндегі потенциал $\varphi = \varphi_0 \exp(ik_x x + k_x z), \qquad \varepsilon_x = -ik_x \varphi, \quad D_z = \varepsilon_B k_x \varphi, \quad (kx>0$ таңдаймыз)

при z > 0 потенциал $\varphi = \varphi_0 \exp(ik_x x - k_x z), \qquad \varepsilon_x = -ik_x \varphi, \qquad D_z = \varepsilon_B k_x \varphi$. Dz үздіксіздіктен $\varepsilon_A k_x \varphi = \varepsilon_B k_x \varphi$ т.е. $\varepsilon_A + \varepsilon_B = 0$ жоғарыдағы қорытындылармен келсе отырып алатынымыз. Сонда:

$$\varepsilon_A = \varepsilon_{\infty} \frac{\Omega_L^2 - \omega^2}{\Omega_T^2 - \omega^2}, \ \varepsilon_B = \varepsilon_{\infty}$$
$$\omega_{\infty} = \sqrt{(\Omega_T^2 + \Omega_T^2)/2}$$

Беттік толқынның жиілігі келесідей: $\omega_s = \sqrt{(M_L + M_T)/2}$ $k_x b \to \infty$ ұмтылады деп, бірақ $k_x a$ соңында екі аралас беттік толқынның жиілігі үшін келесі теңдеуді аламыз:

$$\begin{split} 0 &= \cosh k_x a + \frac{1}{2} \left(\frac{\varepsilon_B}{\varepsilon_A} + \frac{\varepsilon_A}{\varepsilon_B} \right) \sinh k_x a \\ \text{немесе} \ e^{k_x a} (\varepsilon_A + \varepsilon_B)^2 &= e^{-k_x a} (\varepsilon_A - \varepsilon_B)^2 \text{ және қорытынды жиілік келесідей түрге ие:} \\ \omega^2 &= \omega_s^2 \pm (1/2) (\omega_L^2 - \omega_T^2) e^{-k_x a} \end{split}$$

Өшпейтін блох шешімі $K \in (-\pi/d, \pi/d]$ и $|\cos Kd| \le 1$. Сондықтан

$$\frac{\varepsilon_A}{\varepsilon_B} = \frac{\Omega_L^2 - \omega^2}{\Omega_T^2 - \omega^2}$$

жиілік шешімі: $\Omega_T < \omega < \Omega_L$, мұндағы қатынас керісінше $\varepsilon_A / \varepsilon_B$; қарама-қарсы жағдайда 8.15 теңдеудің бірінші бөлімі $k_x \neq 0$.

8.4 "Қосарланған" акустикалық фонондар $(z \$ бағытымен таралатын тұрғын фонондар) $\varphi \longrightarrow u_z$, $\sigma = \lambda_{zzzz} u_{zz}$

$$u_{z}|_{A} = u_{z}|_{B}, \ \sigma_{zz}|_{A} = \sigma_{zz}|_{B}, \ C_{A} = \lambda_{A N} = \frac{\rho_{B}s_{B}}{\rho_{A}s_{A}} C_{B} = \lambda_{B}, \ N = \frac{\lambda_{B}k_{B}}{\lambda_{A}k_{A}}$$

$$\omega = s \ k \ , \ s = \sqrt{\lambda/\rho} \ , \ \lambda = \rho s^{2}$$

$$(8.16)$$

 $arepsilon=rac{
ho_Bs_Bho_As_A}{\sqrt{
ho_A
ho_Bs_As_B}}$ мұндағы

Дисперсиялық теңдеуді келесі түрде қарастырған ыңғайлы:

$$\cos Kd = \cos \left(k_A a + k_B b\right) - \frac{1}{2} \sin k_A a \sin k_B b \varepsilon^2$$
(8.17)

 ε^2 пропорционал деп қиыстырып алатынымыз:

$$Kd = k_A a + k_B b = rac{\omega}{s_{SL}} d \, s_{SL} = \left(a s_A^{-1} + b s_B^{-1}\right)^{-1}$$

Спектрдегі акустикалық фонондарды қиыстырған кезде тыйым салынған және тыйым салынбаған минизоналар пайда болады. Бірінші аз тыйым салынған минизонаның $\Delta \omega$ келесі шарттан табылады

$$0 = -\frac{1}{2} \left(\frac{\omega}{s_{SL}} d - 2\pi \right)^2 - \frac{1}{2} \sin k_A a \sin k_B b \varepsilon^2$$

Hence $\Delta \omega = 2(s_{SL}/d) |\varepsilon \sin k_A a|$.

Мұнда $\sin k_B b \approx \sin (2\pi - k_A a) = -\sin k_A a$ екені ескерілді.

Әдебиет 2[21-27], 5[206-214

Бақылау сұрақтары:

1. l біртекті қабат қалыңдығынан өтетін тасымалдау матрицасы қандай формуламен анықталады?

2. Оптикалық асқынторлардағы жарық толқындары қандай формуламен анықталады?

9 дәріс

9.1 Үшөлшемді газдардағы еркін электрондардағы Ландаудың диамагнетизмнің теориясы

m* изотропты эффективті массасы бар үшөлшемді еркін электронды газ z бағытымен бағытталған уақытқа тәуелсіз және біртекті В магнит өрісінде қозғалсын дейік. Магнит өрісі электронның спиндік динамикасына және орбиталды қозғалысына әсер етеді. Магнит өрісі мен электрон спинінің арасында әсерлесу бар десек, әрі ол квантты Холл эффектісі бола алмайды. Біртекті және тұрақты магнит магнит үшін гамильтониан:

$$H = \frac{1}{2m^*} (P + \frac{eA}{c})^2$$
(9.1)

мұндағы е —электрон заряды, р —электрон импульсінің операторы, А — магнит өрісімен байланысқан векторлы потенциал (СИ бірліктер жүйесі үшін осы және келсі теңдеулер с бөлінеді). Гамильтониан үшін (9.1) шешу квантты механика оқулықтарынан алуға болады. Мұнда тек нәтижені көрсетеміз. Ландау (9.1) үлгілеуді (калибровканы) енгізу арқылы жеңілдетті (Ландау үлгілеуі (калибровкасы) деп аталады):

$$A = (0, B, 0) \tag{9.2}$$

(9.2) *B=rotA* шартын қанағаттандыратынын жеңіл көрсетуге. (9.2) Шредингер теңдеуін қолданғанда:

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \left(\frac{\partial}{\partial y} + \frac{ieB}{\hbar c}x\right)^2 + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{2m^*E}{\hbar^2}\right]\Psi(x, y, z) = 0$$
(9.3)

Бұны екі теңдеуге бөлуге болады, біреуі— z бағытымен, ал екіншісі — ху жазықтығымен қозғалғанда. z бағытымен қозғалу толқындық функциясы және энергиясы бар еркін бөлшек қозғалысы болып табылады:

$$E_{z} = \frac{\hbar^{2}k_{z}^{2}}{2m^{*}}$$
(9.4 a)

$$\Psi(z) = \exp(\pm ik_{z}z)$$
(9.4 б)

Бұл классикалық теория нәтижесімен үйлестіріледі: магнит өрісіне параллель электрон қозғалысы өзгермейді және электронның еркін қозғалысы сол күйінде қалады. ху жазықтығы (яғни магнит өрісіне перпендикуляр жазықтық) үшін қозғалыс теңдеуін толқындық функцияны қолданып шешуге болады.

$$\phi(x, y) = \exp(\pm ik_y y) \tag{9.5}$$

Жоғарыдағы теңдеулерді ескеріп толқындық функцияны келесі түрде жазуға болады:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*}\right)\frac{\partial^2 u(x)}{\partial x^2} + \frac{m^*}{2}\left(\frac{eB}{m^*c} - \frac{\hbar k_y}{m^*}\right)^2 u(x) = E'u(x)$$
(9.6)

мұндағы Е'=Е-Е_z. (9.6) теңдеуі ω_c резонанстық жиілігі бар (яғни циклотрондық жиілігі бар) қарапайым біртекті гармоникалық осциллятор үшін Шредингер теңдеуіне ұқсайды, әрі ол келесідей:

$$x_0 = \frac{\hbar k_y}{m^* \omega_c} \tag{9.7}$$

Е' қарапайым гармоникалық осциллятор үшін келесідей:

$$E' = (n - 1/2)\hbar\omega_c \tag{9.8}$$

Қарапайым біртекті гармоникалық осциллятор үшін n кванттық сан нөлден емес бірден басталады. Бұл кванттық деңгейлер Ландау деңгейлері деп аталады. Электрон энергиясы $E=E'+E_z$ үшөлшемді жағдайда зоналар түзеді (энергия k_y тәуелді емес, яғни кері кеңістітке бірөлшемді) және 9.1а суретінде көрсетілген. Сәйкес күй тығыздығы осы суретте көрсетілген.

Кері кеңістітке магнит өрісі жоқ кезде электрондық зонлар үшөлшемді болады. Еркін электронның бүтін санына магнит өрісі әсер етпейді. Ландаудың әрбір деңгейі қатты тозғындалған борлуы керек. Тозғындалу дәрежесі (Ландаудың барлық деңгейілері үшін бірдей) Ландау деңгейінің санына көбейту магнит өрісі жоқ кезде еркіндік дәрежесіне тең екенін келесідей түрде көрсетуге болады:

$$\varsigma = \frac{1}{2\pi\hbar} m^* \omega_c L_x L_y = \frac{1}{2\pi} \frac{L_x L_y}{l_B^2}$$
(9.9)

мұндағыде L_x және L_y — x және y бағытындағы үлгі өлшемі, ал $l_B = \left[\frac{\hbar c}{eB}\right]^{1/2}$ (СИ бірліктер жүйесінде c=1) — магнитті Ландау ұзындығы (бұл ұзындық n = 1 Ландау деңгейіне сәйкес классикалық орбита радиусына тең) деп аталады.

Алынған нәтижелерді өрнектеуге болады: магнит өрісіндегі орбитада kкеңістікте электронның циклотронды орбитасы квантталады, әрі ол келесідей мәнге ие:

$$A = 2\pi eB/c\hbar \tag{9.10}$$

Сонымен, Ландау деңгейінде үш өлшеуде де әсер ететін квантты эффект электрон қозғалысын біртекті және тұрақты магнит өрісінде уақыт бойынша циклотронды орбитаның квантталуы деп сипаттауға болады. Магнит өрісіне перпендикуляр әрбір циклотронды орбита кеңістікте бүтін санды ауданға ие (9.10) анықталады. Электрон еркін бөлшек ретінде тек бағыт байынша электрон магнит өрісіне параллель қозғалады. Нәтижесінде оның күй тығыздығы біртекті қозғалатын бөлшектің күй тығыздығына ұқсас.

Электр өрісі x₀ тепе-теңдік жағдайындағы дрейфті қозғалысқа немесе циклотронды орбитаның «бас центріне» алып келеді. Электр және магнит өрісі әсер ететін бас центрдің дрейфті қозғалысын классикалық тұрғыдан зерттеуге болады.



9.1 сурет - а) Ландау деңгейінің сызбалы көрінісі және сәйкес үшөлшемді жағдай үшін ішкі магнит өрісіндегі еркін электронның күй тығыздығы. б) Магнит өрісіне перпендикуляр еркін электронның қозғалысы тек жазықтықта болатын дәл сондай сызба.

9.2 Көлденең квантталатын магнит өрісіндегі құбылыс Электрон спектрінің толық дискреттілікке негізделген эффектілері

Қабыршаққа (пленка) $(H=H_z)$ квантталатын Н магнит өрісіне нормаль бағытта өлшемді квантталу пленкасы салу қызығушылық білдіреді. Квантты эффектілердің әсерінен магнит өрісіне бағытталған электронның энергетикалық спектріндегі өзгеріс болатын магнит өрісін квантталған деп атаймыз. Осы кезде жазықтыққа перпендикуляр энергия үздіксіз өзгеріп квантталады.

Магнитті және өлшемдік квантталуды қатты денеде үйлестіру бір атомның макроскопиялық аналогы – толық дискретті энергетикалық спектрі бар электронды жүйе. Кіші үлгі өлшемі бар магнит өрісі қозғалысындағы қабыршақ жазықтығындағы қозғалыс магнит өрісімен квантталады. Қатты денеде дискретті спектрдің болуы жарық шағылуының резонанстық сипаты (газдағы шағылу спектрі сияқты сызықтық) құбылыс болып табылады. Ол пленка-диэлектрик- қабыршақ жүйесіндегі резонансты туннелді эффект. Бұл құбылыс ғылымда және практикада үлкен мәнге ие.

Кристалдағы электронның қасиетін оқып үйренудің негізгі есебінің бірі квазиимпульс кеңістігінде бетте, кеңістікте $E(p_x, p_y, p_z) = const$ тұрақты энергия топологиясын анықтау. Бұл сипаттама дисперсия заңымен байланысты, әрі заттың негізгі электрондық қасиетін анықтайды. Изоэнергетикалық бет түрі күй тығыздығының энергияға тәуелділігі береді. Осы облыстағы кең тараған әдісквантталатын магнит өрісіндегі массивті кристалдағы термодинамикалық және кинетикалық сипаттама осцилляциясын оқу.

Магнит өрісінде электронға Лоренц күші әсер етеді:

$$F = \frac{e}{c} \upsilon H \sin \Theta \tag{9.11}$$

мұндағы Θ — магнит өрісі мен v электрон жылдамдығының бағыты арасындағы бұрыш, c—жарық жылдамдығы, e-электрон заряды. Осы күштің әсерінен жазықтықта электрон магнит өрісіне перпендикуляр тұйық орбита (шеңбер бойымен) бойымен қозғалады. Магнит өрісі бағытында электрон тұрақты импульспен қозғалады. Бұл бағытта оған күш әсер етпейді. Орбитадағы электронның айналу жиілігі циклотронды немесе ларморлық жиілік деп аталады. Магнит өрісіне перпендикуляр жазықтықтағы электрон қозғалатын шеңбер радиусы лармор радиусы деп аталады.

$$r_L = V/\omega_c = m^* V c^* e H \tag{9.12}$$

Егер кристалдағы электрон эффективті изотропты массамен сипатталынса, $m = \sqrt{m^* m^*}$

онда $\omega_c = eH/m*c$ анықталатын циклотроннды масса m_e енгізіледі. Ол $m_c = \sqrt{m_x^* m_y^*}$ эффективті масса қатынасымен байланысты. Осы кезге лармор радиусы электронның де Бройль толқын ұзындығынан үлкен болып келген. Мұны классикалық бөлшек деп атаған. Қарама-қарсы жағдайда квантты эффект болып табылады. Магнит өрісінде осындай эффектілер пайда болса, онда квантталған деп айтуға болады. Бұл тәртіп бойынша күшті өріс. Мысалы, висмутта квантталатын магнит өрісінің аймағы H~ 1T басталады.

Квантталатын магнит өрісінде электронның қозғалысы электрон өзін классикалық бөлшек ретінде сезінетін аймақпен салыстырғанда көп өзгеріске ие. Магнит өрісіне перпендикуляр жазықтықта тек берілген орбитада ғана қозғалыс болуы мүмкін, онда магнит өрісі мәнінің орбита ауданына қатынас келесідей S/H=(e/ch)1(1=0, 1, 2, ... — бүтін сан) және энергияның белгілі анықталған мәндеріне $E_1=\hbar\omega_c(l+1/2)$ ғана рұқсат етілген. Бұл энергияның рұқсат етілген мәндері Ландау деңгейлері деп аталады. Олардың энергиясы неғұрлым көп болса, соғұрлым магнит өрісі көп болады және соғұрлым циклотронды массаның мәні аз (берілген магнит өрісінде) болады. m_с төмендегенде және магнит өрісі өскенде Ландау деңгейлерінің арасындағы қашықтық та өседі $\Delta E = E_{l+1} - E_{l=}\hbar\omega_c$. Сондықтан квантталатын магнит өрісінде электронның энергетикалық спектрі квазидискретті және ішкі зоналар (подзоны) жүйесіне ыдырайтыны 9.2 суретте (Ландау зоналары) көрсетілген.

Электронның толық энергиясынан электрондар жүйесінің «нөлдік» энергиясы E_0 (1=0, $p_z=0$) нөлден өзгеше және $1/2\hbar\omega_c$ тең. Энергетикалық спектр өзгерісі өзімен бірге күй тығыздығын g(Е) өзгертеді. Ол энергия кезінде енді сәйкес деңгейлерінде тез өзгеретін ерекшелік білдіреді Ландау (9.3 сурет). Квантталатын магнит өрісінде осцилляция құбылысы g(E) ерекешелігіне негіз болады. Ферми деңгейі Е₁ және Е₁₊₁ Ландау деңгейлерінің арасында жатады (9.3 сурет). Егер оны өсірсек, онда Ландау деңгейі де өседі. Ақырында Е_t Ферми деңгейімен сәйкес келетін өріс мәнін аламыз.



9.2 сурет – Квантталатын магнит өрісіндегі H=H_z электронның энергетикалық спеткрі (массивті кристалл)

Осы кезде Ферми деңгейінде күй тығыздығының секіруі болады. Қашан Ферми энергиясы Ео=1/2 ћос Ландаудың соңғы (төменгі) деңгейіне жеткенше g(E_F) секіруі қайталана береді.



9.3 сурет – Электронның күй тығыздығының магнит өрісінде квантталатын энергияға тәуелділігі

Өріс ары қарай өскенде g(E_F) монотонды өзгереді. Магнит өрісі аймағы үшін орындалатын шартты ħω_c>2E_F ультра кванттық шек деп атаймыз.

Магнит өрісі төмендегенде Ландау деңгейі кері жолда Ферми деңгейімен қиылысады. Сонда тағы да Ферми деңгейінде күй тығыздығының секіруі болады. Бірақ магнит өрісі төмендегенде Ландау деңгейінің арасындағы қашықтық төмендейді. Өйткені өрістің кейбір аз мәндерінде Ландау деңгейінің арасындағы қашықтық ені (электрондардың шашырау процесінің әсерінен нөлден өзгеше) азаяды және барлық деңгейлер тұтас болыды.

Сонглыктан магнит opici өзгерген кезде Ферми деңгейінде күй тығыздығының секіруі болады. Басқа жағынан металдың электр өткізгіштігі тәртіппен қозғалатын ферми электрондарымен анықталады. Шашырау тығыздығы Ферми деңгейінде күй тығыздығына тәуелді. Сондықтан Ландау мен саны деңгейі Ферми деңгейімен дәл келгенде магнит өрісінің тез өзгерісі күй тығыздығының және электр өткізгіштігінің өзгерісіне алып келетінді. Керісінше өрісінің өзгерісі кезінде тозғындалған электронды магнит газдын термодинамикалық сипаттамалары да өзгереді, мысалы, магнитті момент (де Гааз-ван Альфен эффекті).

Кері магнит өрісінің электр периоды өткізгіштікке тәуелділігі 1/Н Шубников—де Гааз эффекті деп аталады.



9.4 сурет – Қабыршақтағы квазиимпульс кеңістігіндегі электронның рұқсат етілген күйлері

Нормаль бойынша бағытталған квантталатын магнит өрісіне қабыршақты (пленка) салғанда өріс бағытындағы еркін электрондардың қозғалысы қабыршақ (пленка) енінің аздығынан шктелінеді. Біз білетіндей көлденең қозғалыстағы энергияның және |р| квантталуына алып келеді. Сондықтан электронның толық энергиясы екі дискретті n және l кванттық сандардың функциясы болып табылады, яғни E=E(n, l) тек дискретті мәндерді ғана қабылдайды. Осы кезде күй тығыздығының энергияға тәуелділігі Е рұқсат етілген мәндері бар жеке шыңдарға Қоспаларда электрондардың шашырауы бұл шыңдардың бірін-бірін жауып ие. калатынана алып келеді. Осы жағдайда күй тығыздығы энергияның осциллияциялайтын функциясы болып табылады. Массивті улгілерде және абыршақтарда электр өткізгіштің осцилляциясы байқалады. Кабыршақтарда квантталуынан барлық ағындарға рұқсат етілмейді, тек |p_z| импульстың |p_z| $=\pi\hbar n/d$ тең кезде ғана (9.4 сурет). Сондықтан суретте рұқсат етілген ағын қарамен боялған және экстремальды роль ойнайды. Қабыршақты өлшеу Ферми деңгейінде немесе кез-келген изоэнергетикалық бетте экстремальды емес ағынды анықтайды.

Квантталатын магнит өрісіндегі нәзік қабыршақтарға (пленка) туннельді спектроскоп әдісін қолданғанда изоэнергетикалық беттің аралық ағынының энергиясын анықтайды.

Әдебиет [464-466], 2 [19-29]. 5[127-132]

Бақылау сұрақтары:

1. Қай кезде пленка квантталады?

2. Лармор радиусы қандай формуламен анықталады?

3. Металл өткізгіштігі бар үлгілерде электр өткізгіштік осцилляциясы қалай пайда болады?

4. Қанда жағдайда процесс осцилляцияланады?

Лекция 10

Екіөлшемді электронды газдағы магнитті өткізгіш. Толтыру факторы

Егер электрондардың қозғалысы магнит өрісіне перпендикуляр жазықта қозғалысы шектелген болса, онда олардың параллель магнит өрісіне «еркін» қозғалысы басым болады. Е' үшін және электрон энергиясының тыйым салынған деңгейлері дискретті сипаттама мәнін береді.

Сәйкес күй тығыздығы $\hbar\omega_c$ тең энергетикалық саңылаулармен бөлінген дельта-функция жиынтығы болып табылады. Ландау деңгейлерінің арасындағы энергетикалық саңылаулардың болуы, Ферми деңгейі екі деңгей арасындп жатыр. Бұл (2D) екіөлшемді электронды газ $\hbar\omega_{c}$ тең тыйым салынған зонасы бар шала өткізгіш ретінде сезінеді. $T << (\hbar \omega_c / k_B)$ температура кезінде бұндай «шала өткізгіш» өзін изолятор ретінде сезінеді, яғни магнитті өткізгіш тензорының диагоналды элементі $\delta_{xx} = \delta_{yy}$ нөлге тең. Магнитті өткізгіш тензорының диагоналды элементі нөлге айналса, кері матрицаның диагоналды элементі (q магнита-кедергі тензоры деп аталады) де нөлге айналатынын айтып кету керек. Бірақ, 2D электронды газдағы $\delta_{xx} = \sigma_{yy}$ магнитті өткізгіш тензорының диагоналды элементі нөлге теңдігі үлгінің асқын өткізгіштікке айналғанына алып келмейді. Егер диагоналды элементі емес δ_{xx} және σ_{yy} нөлге тең болса, онда үлгіде энергияның диссипациясы пайда болады.

T=0 десек және 2D электрон N_e концентрациясы Ферми деңгейі n кванттық нөмірі бар Ландау деңгейінен жоғары жатады. Әрбір Ландау деңгейінің мәні ξ (электрон спинін ескермейтінімізді еске түсіреміз) тең десек, осы n Ландау деңгейіндегі электрондардың толық саны:

$$N_e = n\xi \tag{10.1}$$

Егер жоғарыдағы тараулардан алып (10.1) қойсақ, онда

$$N_e = nBL_x L_y(e/hc) \tag{10.2}$$

hc/е мәні (c=1 СИ бірліктер жүйесінде) — электрон орбитасы арқылы өтетін магнит ағынының ең кіші бірлігі. Ол квант ағыны (әдетте Фо деп белгіленеді) деп аталады. BL_xL_y мәні L_xL_y аудан арқылы өтетін Ф толық магнит ағынын береді. Сондықтан (10.2) теңдеуі келесі түрге ие:

$$N_e = n(\phi_0) \tag{10.3}$$

2D электрон орбитасын алатын $N_{\phi} = \Phi/\Phi_o$ толық кванттық ағынға ие. 2D жағдайында v=Ng/N_{\phi} толтыру факторы деп аталынды. Егер Ферми деңгейі n және n+1 арасында жатса, онда (10.3) сәйкес v соңғы толған n Ландау деңгейіне тең. (v)⁻¹ кері шама үлгідегі әрбір электронды қамтитын квантты ағынның орташа санын береді. v>>1 кезінде тәжірибе орындалса, онда олар тұтас мәнді КХЭ режимінде жасалынады, керісінше (v<1) жағдайында олар бөлшектік квантты Холл эффекті режимінде жасалынады. Егер 2D үшін толтыру факторы n толық

санға тең болса, онда Ферми деңгейі n және n+1 Ландау деңгейлерінің арасында жатады және оның магнитті өткізгіш тензорының диагоналды элементі нөлге тең. Осы қарапайым суреттен (үлгідегі ұқыпсыздықты ескермей) 2D жағдайдағы магнитті өткізгіш тензорының диагоналды элементі магнит өрісінен Холл эффектісіне тәуелділігінде периодты түрде нөлге тең. Біраз бұл нәтижелерде көптеген қызықты жәйттер бар. Бұл тәжірибе нәтижелерін 2D жағдайында электрондар транспортындағы бейбереттік әсерін ескермей түсіндіруге болмайды.

Электрон спинін ескермей, магнит өрісінде еркін электрондар Ландау деңгейін бөлуге толтыру факторы әкеліп соғады $\Delta E = \pm \frac{1}{2} g \mu_B B$, мұндағы μ_B -Бора магнетроны. Шала өткізгіштерде ΔE g* эффективті g-факторымен анықталады. Оның g айырмашылығы едәуір (GaAs g* ~ 0,4 электрондар үшін). Әдебиет 1[466-467], 2[], 5[276-284]

Бақылау сұрақтары:

1. Кванттық ағын дегеніміз не?

2. Толық квантты ағын саны қандай формуламен анықталады?

3. Бор магнетроны қалай белгіленеді?

4. Магнитті өткізгіш тензоры қандай жағдайда нөлге ұмтылады?

11 дәріс 11.1 фон Клитцинг, Пеппер және Дорды тәжірибелері

фон Клитцинг пен т.б. қолданған үлгі геометриясы 11.1а суретінде көрсетілген. Ол металл-оттек-шала өткізгішті кремнийлі өрісті транзистордан тұрады. Үлгінің көлденең қимасы 11.16 суретте көрсетілген.



11.1 сурет а) фон Клитцинга мен т.б. қолданған холлдық үлгінің (металл-оттек-жартылай өткізгішті кремнилі өрісті транзистордан) жоғарыдан көрсетілген тәжірибесі. б) Беттік канал бойындағы үлгінің көлденең қимасы, в) Көлденең үлгіде электрон энергиясының өзгеру кеңістігінде SiO₂ интерфейс пен подложка арасындағы инверсиялық қабат пайда болады.

Екі өлшемді электронды газ тәжірибесінің «жүрегі», (SiO₂) екіоттекті кремний арасында «тыйым салу» интерфейске жақын инверсиялық қабаттан тұрады және Si-дiң p-типтi төсеніштен (подложка) тұрады.

Инверсиялық қабат пайда болу үшін төсенішке (подложка) кернеу берген кезде интерфейс маңында зона иілуі 11.1в көрсетілген. Жоғарыда металдық контакт (жапқы (затвор) деп аталады), SiC>2 қабат жіне төсенішке парраллель пластинасы бар көлем құрады. Осы электродтағы толық заряд жапқыдағы (затвор) V_g кернеуге пропорционал. Нәтижесінде V_g өзгертіп зарядтың беттік тығыздығын өзгертуге болады. Тәжірибеде тұрақты магнит өрісі үлгіге перпендикуляр z бағытына жиналады. Берілген кернеу көмігімен үлгідегі секірмелі кернеу (U_{xx} и U_{xy}) өлшенген. U_{xx} кернеу qxx тұрғын меншікті кедергіге пропорционал, ал U_{xy} — σ_{xy} көлденең меншікті кедергіге және Холл коэффициентіне пропорционал.

фон Клитцинг пен т.б. алғашқы тәжірибесінің нәтижесі 11.2 суретте көрсетілген. Көріп отырғанымыздай U_{xx} жапқы (затвор) кернеуінің нақты мәндерінде ылғида нөлге тең. Теория бойынша толтыру факторы 2, 4 және 6 толықсанды мәндерді қабылдайды деп соңғысын нәтиже ретінде анықтауға болады. U_{xx} нөлге тең болғанда әрқашан U_{xy} жазық (плато) пайда болатын кутпеген нәтиже алынды (UH 11.2 сурет). Сонымен қатар осы (холлдық кедергі деп аталатын) жазықтағы көлденең кедергі мәні тізбектей бүтін санға бөлінген 25,813 кОм тең. Көріп отырғанымыздай фон Клитцинг қолмен есептеген қағазынан (11.2 сурет) «квант кедергісі» h/2 фундаменталды тұрақты бірлігіне Сол кезден бастап (1980 жылдан бастап) $h/^2$ мәні 2·10⁻⁷ дәлдікпен келтірілген. қазіргі уақытқа дейін стандартты кедергі ретінде қолдынып келеді. Холлдық кедергідегі жазықтың (немесе холлдық жазық) пайда болуы, бұрын талқыланған екіөлшемді электронды газдың магнитті транспорттық қасиеті тұрғысынан анық емес.



11.2 сурет - КЭХ-дағы холлдық жазық көрінетін түп нұсқалы тәжірибелік қисықтар және квантты эффект Холлдың ашылуына әкеліп соғатын соған сәйкес есептеулер.

Әдебиет 1[467-470], 2[]

Бақылау сұрақтары:

1. фон Клитцинг, Пеппер және Дорды тәжірибесінің физикалық мағынасы.

2. фон Клитцингті алғашқы тәжірибесі қалай жасалынған.

3. Квантты Холл эффекті қалай пайда болды?

12 дәріс

12.1 Нәзік құрылымның атомдық тұрақтысын прецензиялы анықтау үшін квантты Холл эфектісін қолдану

1980ж. қатты дене физикасында жаңа квантты эффект – екі электронды жүйедегі холлдық кедергінің квантталуының ашылуы туралы хабар тарады. Бұл эффектіні зерттеу қатты дене физикасы саласында ғана емес физиканың барлық салаларында үлкен мәнге ие. Өйткені ол эффект нәзік құрылымның тұрақтысын тікелей анықтайды.

Нәзік құрылымның тұрақтысы фундаментальды физикалық константа болып табылады, әрі ол зарядталған бөлшектердің электромагниттік сәулеленумен әсерлесуін сипаттайды. Ең алғаш рет оны 1916ж. нәзік құрылымды сутегі атомының оптикалық спектрін түсіндіру және төменгі бор орбитасындағы электрон жылдамдығының жарық жылдамдығына қатынасы анықтау үшін Зоммерфельд енгізген еді.

α мәні буық шамамен 1/137 тең, оны басқа әлемдік физикалық константа комбинациясы түрінде өрнектеуге болады. Мысалы, *h* Планка тұрақтысын *е* электрон заряды мен жарық жылдамдығы с көбейтіндісіне бөліп өрнектеуге болады:

$$\alpha = \frac{e^2 c}{2h}$$

Тұрақты нәзік құрылымдар квантты электродинамикада негізгі роль атқарады. Электромагниттік сәулеленумен элементар бөлшектердің әсерлесу эффектісін өлшеу тәжірибелік әдіспен анықталады. Сонымен қатар тәжірибе мен теория салыстырылады. Осы кезде кванттық электродинамика теориясының дұрыстығын тексеру үшін α дәл мәнін анықтау үшін тәуелсіз әдіс керек.

Бұны түсіндірмес бұрын Холл эффектісіне тоқталайық. Өткізгіш х осімен бағытталған Е ішкі электр өрісі бар Ј токпен Н магнит өрісіне (z осімен бағытталған) салынған делік. Шала өткізгіштегі зарядқа у осінде V жылдамдықпен электр өрісі бағытында Лоренц күші әсер етді:

$$F = -\frac{e}{c}\upsilon H \tag{12.2}$$

Осы күштің арқасында электрондар x осінен ауытқып үлгіні теріс зарядтай отырып оның оң жағына жиналады.

Соған сәйкес үлгінің оң жағын зарядтай отырып, токқа және магнит өрісіне перепендикуляр E_H қосымша электр өрісі пайда болады. Бұл холлдық өріс $F=-eE_H$ күшімен Лоренц күші тепе-теңдікке келгенше өсіп отырады:

$$eE_H = e/cVH \tag{12.3}$$

Егер бұл теңдіктің екі жағын n электрон концентрациясына көбейтіп және enV=j, мұндағы j — ток тығыздығы, ол j=j/S тең, S=bd — (y,z) жазықтығындағы үлгінің ауданы екенін ескеріп келсі теңдеуді аламыз:

$$E_{H} = \frac{enV}{nec}H = \frac{J}{S} \cdot \frac{H}{nec}$$
(12.4)

у осі бойынша үлгінің қарама-қарсы жағында орналасқан контакты арасында потенциалдар айырымы пайда болады:

$$V_{H} = E_{H}b = \frac{1}{nec} \cdot \frac{1}{d}HJ$$
(12.5)

Оны Холлдың ЭҚК деп атайды. V_H мен j арасындағы пропорционалдық коэффициент холл кедергiсi деп аталады. Электрондардың жылдамдық бойынша таралуын ескерiп дәлiрек есептегенде Холл тұрақтысы: R = r/nec тең, мұндағы r

(12.1)

—бірлік көбейткіш. Ол мән шала өткізгіштегі электрондардың шашырауына тәуелді.

Квантталатын магнит өрісінің перпендикуляр жазықтығына салынған екі электронды инверсиялық қабатта Холлдың ЭҚК қалай пайда болатынын түсіндірейік.

Жоғарыда айтып кеткеніміздей, егер электрлік кванттық шек шарты орындалса, онда электронды газды екіөлшемді дейміз, яғни ішкі зона маңы электрондармен толады. 9.2 тарауда квантталатын магнит өрісіндегі екі өлшемді газдың өткізгіштігі түсіндірілген. Дәл сондай себеп осында да бар, яғни тұрақты магнит өрісіндегі электрондардың концентрациясының өзгерісі кезінде Ландау салыстырмалы Ферми денгейіндегі козғалыс денгейімен өткізгіштік осцилляцияның пайда болуына әкеліп соғады. Кушті емес магнит өрісінде деңгей арасындағы қашықтық пен олардың ені тең болса, бұл осцилляция синусоидалы болады. Кремнийлі инверсиялы қабаттар үшін бұндай көрініс Н~2— *5Т* болады.

Магнит өрісін күшейткенде деңгей арасындағы қашықтық H пропорционал өседі, ал деңгей енін өсіргенде ол жәймен өседі (магнит өрісінің электрондардың шашырауына байланысты әсер етеді), яғни \sqrt{H} пропорционал. Сондықтан күшті магнит өрісінде күй тығыздығы жеке максимумдар сериясын түзеді (бұл кезде электрондардың энергетикалық спектрін дискретті деп айтуға болады). Электрондар саны Ландау деңгейіне сыйып кетеді, әрі ол магнит өрісіне тәуелді және тең:

$$V = eH/hc \tag{12.6}$$

Бұны түсіндіру үшін металдар мен шала өткізгіштердегі токтың өтуі немен байланысты екенін еске түсіреміз. Өткізгіште ішкі электр өрісі бойымен электрондардың қозғалысы Е өріс әсерінен *-еЕ/т* үдеумен қозғалады дейміз. Электрон энергиясы тор немесе қоспалы атом мүкістігімен соқтығыспайынша өсіп отырады. Осы кезде электрон бағытталған жылдамдығын және алған энергиясын жоғалтпайды. Сосын ол өріспен күшейіп осы процесс қайталанып олтырады.

Бұндай электрондардың секірмелі қозғалысын кейбір реттелген қозғалыстың орташа жылдамдығы деп сипаттауға болады: $V_d = l/\tau$, мұндағы l — электронның соқтығысу арасындағы орташа қашықтығы. Ток тығыздығы $j \approx enV_d$, мұндағы n — электрондар концентрациясы.

Дискретті энергетикалық спектрі бар жүйедегі токтың пайда болу механизмін түсіндерейік. Басқару кернеуінің салдарынан Ландаудың кейбір деңгейлерінде электрондар саны аз болсын. Электр өрісінің әсерінен электрондар иеленетін максимал энергия келесі мәнге ие $eE_1 \sim \Gamma$ (Г—Ландау деңгейлерінің ені). Соған сәйкес орташа жылдамдық:

$$V_d \approx \sqrt{\frac{2\Gamma}{m}}$$

(12.7)

Ландау деңгейлерінің толу V төмендейді, сондықтан электр өрісінің әсерінен алған энергия да төмендейді. Ландау деңгейлеріндегі электрондар саны керісінше өседі. Нәтижесінде Ландау деңгейі жартылай толғанда, өткізгіштік максимумға жетеді. Соңында Ландау деңгейі толығымен толса, бос орын болмай V_d нөлге тең болады.

Электрон Ландау келесі деңгейіне өтуі үшін, оған энергия қажет. Сондықтан электрондық жүйедегі өткізгіштік те нөлге тең.

V_g мәндерінде өткізгіштік нөлге ұмтылса, онда холлдық кедергіні элементар қарастырсақ:

$$R_{H} = \frac{H}{N_{inV}ec} = \frac{h}{e^{2}i}$$
(12.8)

мұндағы

 $N_i = iV = i\frac{eH}{hc}$, *i* — Ландау деңгейін толған электрондардың саны. И — И — Пен әріптестерінің Si бетінде Ең алғаш рет неміс ғалымы фон Клицинг пен әріптестерінің Si бетінде n-типті алған *R_H*-дің *V_g* тәуелділік қисығы 12.3 суретте инверсиялық қабат үшін көрсетілген. Бұл қисық тбаспалдақты сипатты береді. Үлкен дәлдіктегі жазықта $R_{H} = h/e^{2}i$ сақталынады. Осы мәнде өткізгіштік нөлге тең.



12.3 суреет - Si бетінде п-типті инверсиялық қабат үшін басқару электротындағы Vg кернеудің R_H-ға тәуелділік қисығы. Магнит өрісі H=18,9 Т, температура 1,5К.

Холлдық кедергі мәні тек әлемдік тұрақтыларды ғана анықтайды, әрі жарық жылдамдығы мен қоса жұқа құрылымның а тұрақтысын анықтайтын комбинацияда орындалады.

e²/h мәнін екіөлшемді электронды газдардардағы әртүрлі эффектілі тәжірибелік зерттеулерден анықтайды. Мысалы, бұл мән электрондар нүктелік коспаларда шашырайды деген шарт кезіндегі квантталатын магнит өрісіндегі екіөлшемді электронды газдардағы өткізгіштің максимал мәнін анықтайды. Квантты Холл эффекті жазықтағы холл кедергісінің мәні үлгі геометриясына, температурасына және электрондардың шашырау механизміне тәуелді еместігі жағынан керемет эффект. Оған әртүрлі лабораторияларда алған нәтижелер дәлел. Осы эффектінің артықшылығы анықтау кезінде кванттық электродинамиканың теориялық түйіні қолданылмайды. Соңғы жылдары нәзік құрылымның тұрақтысын анықтау бойынша тәуелсіз нәтижелер саны күннен-күнге өсіп отыр.

Әдебиет 1[467-470], 2[33-36], 4[190-193], 5[247-276]

Бақылау сұрақтары:

1. Холлдық жазық қалай пайда болады?

2. кедергісінің мәні үлгі геометриясына, Холл температурасына және электрондардың шашырау механизміне тәуелді ме?

3. Холл эффектісі кай жылы ашылды?

4. Холл эффектісінің физикалық мағынасы?

5. Холлдық ЭҚК қандай теңдеумен анықталады?

13 дәріс

13.1 GaAs—A1_x Ga_{1-x} As гетероауысу кезіндегі электрондардың өлшемдік квантталуы

1979 ж. бастап жаңа құрылымдағы квазиекіөлшемді электронды газдың қасиетін зерттеу басталды: GaAs—A1_x Ga_{1-x} As гетерауысуларда.

Казіргі уақытта көрсетілген құрылымдарда электрон қозғалысының рекордты мәндері бар: 300 К μ =360000, 120000 және 8600 см²/Вс және сәйкес температура кезіндегі 4,2, 78 және 300 К. Сұйық гелийдегі и мәні массивті кристалдармен салыстырғанда электрон концентрациясының салыстырмалы мәндерінде (4,2 К) 60 есе үлкен емесғ бірақ басқа шала өткізгішті материалдардан үлкен. Бұндай жоғары қозғалғышты алу фундаменталды кеңінен тараған (іргелі) және қолданбалы ерекшеліктерге ие және микро-нано электрониканың шапшаң әсер ететін активті элементтерін алудың жолының бірі болып табылады.

Екі әртүрлі шала өткізгіштердің контактысы гетероауысу деп аталады, біздің жағдайымызда GaAs және A1_x Ga_{1- x} As қоспасы.

Егер екі шала өткізгіш электрон бір біріне өте алатын болса, онда тепе-теңдік орныққаннан кейін екі шала өткізгіште электрондар жалпы Ферми деңгейіне ие. Бұл аз байланыс энергиясы бар шала өткізгіштен көп байланыс энергиясы бар шала өткізгішке зарядтар кенеттен ток тудырғанда пайда болады. Бұл зарядтардың өтуінен болады, шала өткізгіштің біреуі оң-біреуі теріс зарядталады, олардың арасында потенциалдар айырымы пайда болады.

V_к контакт кезіндегі екі шала өткізгіштің арасында потенциалдар айырымы шығу жұмысының айырымына тең:

$$-eV_K = W_1 - W_2 \tag{13.1}$$

Егер гетероауысу құратын екі кристалдың тор тұрақтысының атомдық қабаттарында айырмашылық болса, онда қатты деформацияға ұшырайды.

Деформация электронды тартып алатын дислокацияның пайда болуына және кристалдық тордың басқа бұзылуларына әкеліп соғады. Тұрақты торладың шекара бөлімінде бірнеше процентке теңелу ~ 10^{14} см⁻². Барлық зарядтың гетероауысуда теңелуі беттік күйде таралмайды және түгелімен гетероауысудың қасиетін анықтайды. Сондықтан гетероауысу жұбына тұрақты торлары жақын шала өткізгіштерді алады. Мысал ретінде, GaAs—A1_x Ga_{1-x} As (x=0,2—0,4) жұбын алады, торда сәйкестелуі ~0,1%. Осындай типтес гетероауысулар оптоэлектрондық құралдар мен шала өткізгішті лазерлерді жасау үшін кеңінен қолданылады.

Әдетте, шекара бөліміне жақын екіөлшемді электронды газы бар гетероауысулар GaAs—A1_x Ga_{1-x} As n- немесе р-типті қалдық қоспалы концентрациясы бар ~ 10^{15} см⁻³ GaAs, ал A1_x Ga_{1-x} AsAl қабат n-типа өткізгітігі мен кемтіктік қоспамен легирленеді.

13.1 суретте түйісуге дейінгі п-типті Al_{0.3}Ga_{0.7}As мен р-типті GaAs көрсетілген. энергетикалық диаграммасы Энергия «вакуум деңгейімен» есептелінеді, яғни шала өткізгіштен вакуумға шығатын минималь энергия нөлге Бұл суретте Ферми деңгейімен еспетелінетін екі шала өткізгіштің жығу тен. жұмысы көрсетілген. Байланыс энергиясына сипаттама беру үшін электрондық (сродства) тектестік деген ұғымды енгізген жөн. Электрондық тектестік — бұл легирлену денгейіне тәуелсіз материал параметрі. 13.1а суретте электронды тектестік % әріпімен белгіленген. 13.16 суретте тепе-теңдікті p-GaAs/n-Al_{0.3}Ga_{0.7}As гетероауысудың энергетикалық диаграммасы көрсетілген. Шала *—еV_K=W₁—W₂* контактылық потенциалдар айырмасы өткізгіштер арасында орныққан.

Өткізгішті зона мен валенттік зона жағдайының z тәуелділігі электронның потенциалдық энергиясы жүрісімен қайталанып отырады. GaAs—Al_{0,3}Ga_{0,7}As шекарасында контактылайтын материалдағы электрондық ұқсастық мәнімен анықталынатын AE_C өткізгіштік зонаға сәйкес энергияның секіруі анықталынады. Ол 300 мэВ тең. Гетероауысудағы валенттік зонаның энергетикалық деңгейі 55 мэВ секіруді көрсетеді.

Бір жағынан потенциалдық шұңқырда электрондар GaAs бетінде пайда болған электр потенциалымен Е электр өрісін ұстап тұрады, екінші жағынан шекара бөлігінде потенцалдық энергияның секіруімен ұстап тұрады. Бұл потенциалдық шұңқырдың қалыңдығы 100 Å және ондағы электрондардың гетероауысудағы перпендикуляр жазықтықтағы қозғалыс бағытында (z ось) квантталады.



13.1 сурет- GaAs—A1_x Ga_{1-x} As гетероауысудағы екіөлшемді электронды газдың пайда болуы:а- р-типті GaAs және п-типті Al_{0,3}Ga_{0,7}As энергетикалық диаграммасы: б-тепе-теңдікті р-GaAs- n- Al_{0,3}Ga_{0,7}As гетероөтуінің энергетикалық диаграммасы



13.2 сурет - GaAs-Al_xGa_{1-x}As гетероқұрылымының негізінде жасалған өрісті триодтың сызбалы кескіні

Бұл арнада төменгі температурадағы электронды газ квази екіөлшемді іспеттес және бұл металл—диэлектрик—шала өткізгіш құрылымында қалай болатынын қарастырайық. GaAs-Al_xGa_{1-x}As гетероауысу бұл арнадағы квази екіөлшемді электронды газды алу үлкен технологиялық қиыншылықтармен байланысты және арнайы технологияны жетілдіруден кейін ғана алуынуы мүмкін.

Бұндай гетероқұрылымдарды өндіру үшін молекулалық эпитакция әдісі қолданылады. Сондай гетероқұрылым 13.2 суретте көрсетілген. Монокристалды жоғары омдық төсеніште (подложка) GaAs (Сг легирленген) қалыңдығы ~0,3 мм легирленбеген GaAs қабыршақ өсіріледі, ал оның қабатында кремниймен легирленген концентрациясы ~ 10^{18} см⁻³ тең п-типті (x=0,2—0,3) Al_xGa_{1-x}As қабат бар. GaAs және Al_xGa_{1-x}As қабыршағының қалыңдығы 0,4-ден 3 мкм-ге дейін. Молекула эпитаксиялық әдіс бойынша өсіру кезіндегі шекара бөлімінде беттік күй болмайды: электронды-микроскопиялық әдіспен зерттеу барысында өту қабатының қалыңдығы ~20 Å болды.

Гетероауысудағы екіөлшемді электронды газдың қасиеті. Төменгі температурада GaAs—GaAs-Al_xGa_{1-x}As гетероауысудағы потенциалдық шұңқырда электрондар квази екіөлшемді электронды газ пайда болады. Теориялық есептеулер бұл газды тозғындалған деп көрсетті. Шынында да әрбір өлшемді ішкі зонадағы күй тығыздығы келесідей:

$$g(E) = \frac{m^*}{\pi \lambda^2} \cong 2,8 \cdot 10^{10} \, c \, m^{-2} \, \Im B^{-1}$$
(13.2)

және $N_s \cong 2,8 \cdot 10^{11} cm^{-2}$ концентрация кезінде Ферми энергиясы 10 мэВ, яғни сұйық азот температурасы кезіндегі kT электрондардың орташа жылулық энергиясы жоғарылайды.

Гетероауысудағы екіэлектронды газдың бар екендігін дәлелдеу үшін Шубников—де Гааз эффектісінің өлшеу нәтижелері қолданылған. Егер өткізгіштік немесе магнит кедергіні гетероауысу бағытындағы гетероауысу жазықтығына бағытталған Θ бұрышпен магнит өрісі тәуелділігі бойынша өлшесе, онда өткізгіштік осцилляция периодындағы Θ өзгеру екіөлшемді электронды газ кезінде sin Θ пропорционал түрде өзгереді. Гетероауысу жазықтығына бұрышпен бағытталған магнит өрісін екі компонентке бөлуге болады: $H_{\perp}Hsin\Theta$ перпендикуляр және GaAs-Al_xGa_{1-x}As шекаралық бөлігіндегі $H_{//}Hsin\Theta$ параллель. Магнит өрісіндегі екі өлшемді электрондардың энергетикалық спектрінің квантталуы H_{\perp} компонентасына ғана әсер етеді. $H_{//}$ өрісіндегі квантталу тек мына жағдайда ғана орындалады: егер осы өрісте электронның лармор орбитасының диаметрі потенциалдық шұңқырдың енінен кіші болса ғана орындалады.

13.3 суретте гетероауысуға параллель (1 қисық) және перпендикуляр(2 қисық), бағытталған магнит өрісінің GaAs-Al_xGa_{1-x}As гетероауысу арнасындағы электрондардың электркедергісіне тәуелділігінің тәжірибелік қисығы көрсетілген. Параллель өрістегі осцилляция кедергісінің жойылуы екіөлшемді электрондардың бар екендігінде. Осындай өлшеулер шала өткізгішті беттердегі көлемді заряд қабаттарындағы екіөлшемді электронды газдардың болуын дәлелдейді.



13.3 сурет Гетероауысудағы магнит өрісінің көлденең магнит кедергіге тәуелділігі. 1 қисық - магнит өрісіндегі гетероөту жазықтығына параллель. 2 қисық - магнит өрісіндегі гетероөту жазықтығына перпендикуляр. Температура T=4,2K.

13.3 келтірілген қисық гетероауысудағы екіөлшемді газдарды американ ғалымдары Цу мен Логан зерттеген және бұл жұмыс олардың алғашқы жұмыстары. 13.3 суретте келтірілген $H=H_{\perp}$ магнит өрісіндегі магнит кедергі осцилляцисы магнит өрісіне кері периодты болу керек етін. Арнадағы электрондардың беттік концентрациясы Δ осцилляция периоды байланыстылығы келесідей:

$$N_s = \frac{e}{\pi c \hbar} \cdot \frac{1}{\Delta} \tag{13.3}$$

Бұл N_s мәнін анықтауға мүмкіндік береді, әрі ол 3,68х10¹¹ см⁻² тең болды. Есептеулер төменгі өлшемді деңгейдің энергетикалық жағдайы өткізгіштік зона түбімен салыстырмалы 13 мэВ екенін көрсетті.

Гетероауысудағы өлшемдік зона құрылымы туралы мәліметтер жарықтың шашырауын өлшеулер көмегімен алынды.

Арнадағы электрондардың шапшаңдығы беттік концентрацияға тәуелді. Гетероауысуды көрінетін жарықпен жарықтандырғанда бірнеше секундта N_s 1,1-10¹² 1,6-10¹² см⁻² өзгерді. Т=100 К қыздырғанда N_s өзінің бастапқы мәніне келді.

Кейін гетероауысу негізінде өрістік триодта пайда болды. Мұнда электрондар концентрациясының ішкі кернеуі жапқыда (затвор) өзгерді (сол сияқты металл диэлектрик — шала өткізгіштік құрылымында да). Жапқыдағы металдан жасаған қабыршақ немесе A1 немесе Al_xGa_{1-x}As қаптаған қалыңдығы ≤ 1000 Å Ti—Pt— A1 балқымасынан жасауға болады. Al_xGa_{1-x}As қабаты конденсатор астарларын (GaAs және жапқы) бөліп тұратын изолятор болып табылады. Омдық «бастау» және «құйма» контактілері екіөлшемді электронды газдардың өткізгіштігін өлшеу үшін қолданылады және In немесе Au—Ge/Au қоспасын алады.

Жоғарыда сипаттатынған құралдарда 7-10¹⁰ до 8-10¹¹ см⁻² интервалда электрондардың беттік концентрациясын өлшеуге болады. Осындай құралдардағы электрондардың шапшаңдығының беттік концентрацияға тәуелділігі 13.4 суретте көрсетілген. 1қисық $Al_xGa_{1-x}As$ барлық қабаттының қоспамен легирленген (4,2 К) жағдайына сәйкес. 2 және 3 қисықтар құралдағы 78 және 4,2 К температурамен өлшенген кездегі селективті легирленуді қолдану арқылы алынған. Легирленбеген $Al_xGa_{1-x}As$ қабат ені 165 Å болды. Селективті легирленуді қолдану техникасы басқа шарттарға қарағанда электрондар шапшаңдығын 100 есе арттырады. N_s аз кездегі оң зарядталған қоспасы бар электрондардың әсерлесуі Кулон заңымен өтеді.



13.4 сурет- Гетероауысу каналындағы электрондар шапшаңдығының электрондардың беттік концентрациясына тәуелділігі. 1-қисық Al_xGa_{1-x}As L=165Å, T=4,2 легирленбеген қабат ені. 2қисық L=165Å, T=4,2K.

Электрондар концентрацисы өскен кезде қоспаның тартатын потенциалы оның еркін тасушыларының экрандалуымен бәсеңдейді және келесідей түрге ие:

$$V(r) = \frac{e}{\varepsilon r} \exp(-\frac{r}{r_0})$$
(13.4)

мұндағы ε — диэлектрлік өтімділік; r₀ — экрандалу радиусы, r₀~l/N_s. Сондықтан N_s өскен сайын экрандалу радиусы төмендейді. Бұл ары қарай электрондардың қоспамен әсерлесуіне кедергі жасайды. Нәтижесінде аронадағы еркін электрондар концентрациясы жоғарылаған сайын шапшаңдық та өседі.

Si бетiндегi инверсиялық қабаттарда электрондар шапшаңдығығының N_s тәуелдiлiгi $N_s=1,5-10^{12}$ см⁻² кезiнде максимумға ие болды. Жоғары концентрацияларда шапшаңдықтың төмендеуi бiртексiз беттердегi шашыраумен

негізделген. Гетероқұрылымдардағы μ шапшаңдықтың төмендеуінің есесінен шашырау байқалмады. Біртексіз беттің шекара бөлігіндегі GaAs-Al_xGa_{1-x}As шашыраудың болмауы төменгі температураларда электрондардың шапшаңдық мәнінің μ= 10⁶ см²/Вс өсуіне әкеліп соғады.

Si салыстырғандағы GaAs эффективті массаның мәні Ландау квантталуын алу кезінде магнит өрісінің жоғары тиімділігін қамтамасыз етеді. Бұл магнит өрісіндегі ~8Т және 4,2К температура кезінде холл кедергісінің квантталуын байқауға болатынын көрсетті. Кремнийдің инверсиялық қабаттарында квантты Холл эффектісін өлшеу ~1,5 К температура кезіндегі 15—20 Т магнит өрісінде жүзеге асады.

Гетероауысудағы квантты Холл эффектісін өлшеу шартын құру үлкен қиындықтар туғызбайды. Сондықтан гетероауысудағы GaAs-Al_xGa_{1-x}As холлдық кедергінің квантталуын стандартты кедергіні құру үшін қолданылады. Қазіргі уақытта гетероауысулардағы $R_{\rm H}$ =h/e²i (i=1, 2, ...) шарты орындалатын тәжірибе жүзіндегі дәлдік 10⁻²% аспайды.

Әдебиет 2[50-63], 2[], 4[305-366]

Бақылау сұрақтары:

- 1. Гетероауысу дегеніміз не?
- 2. Гетероқұрылымдарда қандай жағдайда шашырау болмайды?
- 3. Молекулалық эпитаксия әдісі қайда қолданылады?
- 4. Дифференциалды кері кедергінің пайда болуы үшін қандай өріс қажет?
- 5. Өрістік транзисторлар қайда қолданылады?

14 дәріс

14.1 Электрлік транспорт: туннелдік резонанс

Кванттық механикада зерттелген құбылыстардың бірі бөлшектердің тоскауыл арқылы туннелденуі. Барлық шала өткізгішті құралдарда туннелдену үлкен рөл атқарады. Олар: туннелді диод немесе Есаки диоды (1958 ж. Есаки ойлап тапқан). Мұнда түзу ығысуы бар германий ауысуы қатты тозғындалған түзу арқылы туннелденеді. Есаки диодының негізгі сипаттамасы кері дифференциалды кедергі (КДК) болып табылады. Оны жоғары осциллятор ретінде пайдалануға болады. Есаки диодының бірінші қасиеті негізінен көлемді шала өткізгіштің зоналық құрылымына анықтаған. 1973 ж. Тсу және Есаки кері дифференциалды кедергі асқынторларда ғана пайда болады деген идея тастаған болатын. Бірак он жыл өткенен соң жоғары сапалы кванттық шұңқыры бар үлгілер жасап, кері дифференциалды кедергі эффектісін байқады. Осы жағдайдың өзінде үлгілер асқынторлар болмай кванттық шұңқырлар екендігін көрсетті. GaAs/AlAs асқын торлардағы кері дифференциалды кедергі туралы хабар бірнеше жылдан соң таралды. Көптеген асқынторлары мен кванттық шұңқырлары бар кұрылымдарда кері дифференциалды кедергі байқала бастады. Екі тосқауыл арасындағы кванттық шұңқырдан тұратын қарапайым құрылымды қарастырамыз, әрі ол екі тосқауылы бар кванттық шұңқыр деп аталынады.

14.2 Екі тосқауылы бар кванттық шұңқыр арқылы өтетін туннелдікк резонанс

14.1а суретте екі тосқауылы бар кванттық шұңқыр құрылымы көрсетілген. Бұл жағдайда КШ GaAs (N_{D2} концентрация тасымалдаушылары бар) мен GaAlAs тұрады. Шұңқыр ені (Wz) мен тосқауыл биіктігінің сондайлығы, шұңқырда тек бір ғана деңгей пайда болады. Өйткені ол шұңқыр ені (Wz) мен тосқауыл биіктігіне байланысты. Бұл үшқабатты құрылым п-типпен Ферми деңгейінде - E_F электрлік контакт болу үшін қатты легирленген GaAs екі қабатының арасына салынады. 14.1а суретте көрсетілген құрал п-типті құрал болып табылады. 14.1б және 14.1в суретте құралға кернеу берген сызба көрсетілген. Кернеу берген кезде оң жақтағы GaAs (эмитер) қабаттан сол жақтағы

қабатқа *(коллектор)* электрондарды туннелдейді. Бастапқыда туннелді ток аз болады, бірақ кернеуді көбейткен кезде ол өседі. Ол 14.1*г* суретте көрсетілген. Туннелді токтың кернеуі қатты өседі. Бұл құбылыс туннелді резонанс деп аталады. Кернеуді $2E_1/e$ (14.1в сурет) өсірске, туннелді ток кері дифференциалдық кернеуі бар аймақты құрып тез төмендейді (14.1г сурет).

Эмиттер, шұңқыр және коллектор бір материалдан жасалған десек (GaAs сияқты 14.1 сурет), ал электрондар m_A^* изотропты эффективті массасы бар еркін тасымалдаушылар сияқты сезінеді. Электрон k толқындық векторы бар эмиттерде тосқауыл арқылы коллекторда туннелдейді, ЯҒНИ энергия шығынысыз жазыктык шашыраусыз құрылымындағы толқындық вектордың өзгеруінсіз туннелдейді. Электрон арасындағы кулондық әсерлесуді туннелдейтін электронға әсер ететінін ескермейміз. Тағы сондай интерфейстегі эмиттер (коллектор) арасында пайда болатын зона майысуын ескермейміз. Осы айтылған ескертулер үшөлшемді есепті бірөлшемдіге келтіруге жеңілдетеді.



14.1 сурет- Үш кернеу ығысуы кезіндегі екі тосқауылы бар резонансты туннелді құралдан тұратын КШ электрон энергиясының кеңістіктік өзгеруі : а) нөлдік ығысу, б) кернеудің ығысуы V_b=2E₁/e және в) V_b>2E₁/e, мұндағы E₁ — GaAs КШ ішіндегі электрон энергиясы; г) І-V құралдың сипаттамасының сызбасы

V(z) потенциалы (V_b кернеу ығысу функциясыV(z)), туннелдік электронды «көреді», Шредингер теңдеуіне тәуелді және оны екіге бөлуге болады. x және y бағытында жазық толқын болып табылады және ары қарай қарастырылмайды.

Осы шешімдер үшін өздік мән келесідей: $E_{x,y}\left[\frac{\hbar^2}{2m_A^*}\right](k_x^2+k_y^2)$

z бағытындағы қозғалыс Шредингер теңдеуі:

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m_A^*}\frac{d^2}{d^2} + V(x)\right]\psi_A(z) + E_z\psi_A(z)$$
(14.1 a)

Тосқауылдан тыс және тосқауыл ішіндегі *z* бағыты үшін:

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m_A^*}\frac{d^2}{d^2} + V(x)\right]\psi_B(z) + E_z\psi_B(z)$$
(14.1 б)

мұндағы m_B^* — тосқауыл ішіндегі электронның эффективті массасы. Туннелдейтін электронның энергиясы $E=E_{x,y}+E_z$. Тосқауылдан тыс және тосқауыл ішіндегі электрон массасы әртүрлі. Бұл есеп кванттық механика оқулықтарында келтірілген. Біз бұл процедураны төменде тек жаза саламыз.

Оң ығысу кезінде әрбір тосқауыл биіктігінен электрон энергиясы E_z төмен Осындай жағдайда электронның толқындық функциясы шұңқыр мен болсын. эмиттер аймағында түскен және шағылған жазық толқындарының қосындысы түрінде берілген. Тосқауыл ішіндегі толқындық функция алдамшы толқындық вектор болып табылады, яғни экспоненциалды. Коллектор аймағында толқындық функция тек оңға бағытталған жазық толқын болып табылады. Бұл аймақ шексіздікке дейін созылып жатыр, өйткені бұнда шағылған толқын жоқ. Интерфейсте кәдімгі толқындық функцияның шекаралық шарты жиналады және оның z бойынша бірінші туындысы алынған. Осы шарт кезінде толқындық функцияның тускен және шағылған коэффициенті көрші аймақтығы коэффициентпен 2x2 матрицасы түрінде байланысқан. Оны тасымалдау матрицасы деп атайды.

Мысал ретінде, потенциалды n+1 аймақтарға бөлеміз және $z = [-\infty, z_1]$, $[z_1, z_2]$, ..., $[z_n, \infty]$ түрінде анықталады, сонымен қатар әрбір z аймақ ішінде K потенциал тұрақты деп есептейміз. Эмиттер мен коллектор 1 және n+1 аймағымен сәйкес. A_i және B_i—толқын амплитудасы оң және сол жаққа қарай бағытталсын. i аймағындағы біріккен толқындық вектор k_i болсын:

$$\frac{\hbar^2 k_i^2}{2m_j^*} = E_z - V_i \tag{14.2}$$

мұндағы $m_i^* - i$ аймағындағы электрон массасы. Егер k_i —жорамал болса, онда толқын сөнеді. Эмиттер мен коллектор аймағындағы (A_{n+1}, B) және (A_{n+1}, B_{n+1}) коэффициенттер сәйкес қатынаспен байланысқан:

$$\begin{pmatrix} A_{1} \\ B_{1} \end{pmatrix} = M_{1} M_{2....M_{n}} \begin{pmatrix} A_{n+1} \\ B_{n+1} \end{pmatrix}$$
 (14.3)

мұндағы тасымалдау матрицасы $M_p(\alpha,\beta)$ ($\alpha,\beta=1$ немес 2) келесідей түрде:

$$M_{p}(1,1) = \left(\frac{1}{2} + \frac{k_{p+1}m_{p}^{*}}{2k_{p}m_{p+1}^{*}}\right) \exp\left[i(k_{p+1} + k_{p})z_{p}\right]$$

$$M_{p}(1,2) = \left(\frac{1}{2} - \frac{k_{p+1}m_{p}^{*}}{2k_{p}m_{p+1}^{*}}\right) \exp\left[i(k_{p+1} + k_{p})z_{p}\right]$$

$$M_{p}(2,1) = \left(\frac{1}{2} - \frac{k_{p+1}m_{p}^{*}}{2k_{p}m_{p+1}^{*}}\right) \exp\left[i(k_{p+1} + k_{p})z_{p}\right]$$

$$M_{p}(2,2) = \left(\frac{1}{2} + \frac{k_{p+1}m_{p}^{*}}{2k_{p}m_{p+1}^{*}}\right) \exp\left[i(k_{p+1} - k_{p})z_{p}\right]$$

Осы нәтижелердің негізінде Е_z энергиясы бар электрон үшін түсу коэффициентін есептеуге болады:

$$T(E_z) = \left| \frac{A_{n+1}}{A_1} \right|^2$$
(14.5)



14.2 сурет- 0,1 эВ (тұтас қисық) және нөлдік ығысу (штрихты қисық) кезіндегі екі тосқауылы бар құрылым арқылы өтетін электронның түсу коэффициентінің энергетикалық тәуелділігінің есептелінуі Шұңқыр мен тосқауы ені 26 и 50 Å тең. Шұңқыр енімен малыстырғандағы тосқауыл биіктігі — 1,2 эВ

14.2 суретте туннелдейтін электрон үшін $T(E_Z)$ 0,1 эВ және нөлдік ығысу кезіндегі екі тосқауылы бар құрылым арқылы өтетін тәуелділігі көрсетілген. Тасымалдау матрицасына жай өзгеретін потенциалға қойып шығаруға болады. Мұнда нөлдік ығысу кезінде түсу коэффициенті $E_z=0,25$ және 0,83эВ мәндерінде бірге жақындайды. Осы кезде электрон энергиясы резонанстық туннелдеуге ие. Әдебиет1[457-463], 2[32-34], 3[29-31], 4[308-309]

Бақылау сұрақтыры:

1. Резонанстық туннелдеу дегеніміз не?

- 2. Е_z бар электрон үшін түсу коэффициенті қандай теңдеумен анықталады?
- 3. Туннельді ток қалай пайда болады?
- 4. Туннельді ток қандай теңдеумен анықталады?

Лекция 15

15.1 Қоспа центрлері мен экситондардағы гетероқұрылымдар

Өлшемді квантталу кезінде экситондар өздерін электрондар мен фонондардан өзгеше көрсетеді, өйткені ол а₀ бор радиусынан қашықтықта жататын электрондар мен кемтіктерден тұрады. Егер L>>a₀ болса, онда экситон еркін бөлшек ретінде массасымен барьерлер арасында қозғалады толык Μ (электрондар мен кемтіктердің массасына тең массамен). Кванттық өлшемдік эффект үшін L максималды мәні экситонның орташа еркіндік дәрежесімен ұзындығымен анықтылынады. Электрондар мен кемтіктерден құралған квантты өлшемді эффект әсері салдарынан L<a₀ кезінде экситонның қасиетін өзертеді. Мысалы, экситонның байланыс энергиясы, әдетте электрондар мен кемтіктер бір-біріне жақын тұруға мәжбүр болады. Шекті жағдайда екіөлшемді экситонның байланыс энергиясы ушөлшемдіге қарағанда төрт есеге өседі. Кейде кванттық тосқауылдар потенциалы (оны шексіз деп есептегенде) кулондық әсерлесуге қарағанда екі бөлшекке жоғары шұңқырдың потенциалдык ішіндегі кванттық ыкпалын тигізелі. Сонда конфайнмент ауыр бөлшекті бақылайтынын есептеу ыңғайлы (шұңқырдың ортасанда оның толқындық функциясы күшті локалданған), ал кулондық әсерлесу салдарынан жеңіл бөлшектерді тартады. Алаған мен берегеннің байланыс энергиясы өсетіндей жағайда болса, онда бұндай қоспалардың ені бор радиуысынан кіші потенциалдық шұңқырда орналасады.

Квантты өлшемді эффект қоздыру энергиясын өзгертіп қана қоймай, сонымен бірге олардың күй тығыздықтарында жаңартады (модифицирует). Жалпы жағдайда оның кемуі критикалық нүктедегі күй тығыздығында сингулярлықты «күшейтуге» алып келеді. Мысалы, фотон энергиясына тәуелді $\hbar \omega (\hbar \omega - \text{Eg})^{1/2}$ баспалдақ түрінде функцияға дейін үш көлемді үлгіден екі квантты шұңқырларда электронды күй тығыздығына жақын тыйым салынған зона E_{g} табалдырығы бар функцияда түрін өзгертеді. Фермидің алтын ережесінің көмегімен есептелеген өтулер ықтималдығы соңғы күй тығыздығына тәуелді болады. Шала өткізгішті құралдардың шашырау процессінің динамикасына квантты өлшемді эффект әсерін тигізеді. Кванттық шұңқырлар негізінде жасалған лазерлік диодтар көлемдік лазерлік диодтарға қарағанда үлкен тиімділік пен аз босағадағы шекті токты жұмсайтыны көрсетілген болатын. Кванттық нүктелердегі (нөлөлшемді) лазерлер аз шекті токтарын иемденуі тиіс екені айтылып жүр. Сонымен қатар температураның өзгеруіне байланысты олардың генерация жиілігінің сезімталдығы азая түседі.

15.2 Кванттық шұңқырдағы қоспалық орталықтар

Қалың шұңқырлар (а>>а_В), шексіз жоғары тосқауылдар болып табылады.

Ортасында: $E = -E_B = -e^2/(2\varepsilon a_B)$, ал шекарасында: $E = -E_B/4$, 2pz-орбиталь шекаралық шарттарды және Шредингер теңдеуін қанағаттандырады.

Жұқа шұңқырларда (a<<a_B), шексіз жоғары тосқауылдар болып табылады және қоспа шұңқырдың ішінде:

$$\psi(\mathbf{r}) = F(\rho) \varphi_{e1}(z) F(\rho) = \sqrt{\frac{2}{\pi a_{2D}^2}} \exp\left(-\frac{\rho}{a_{2D}}\right) a_{2D} = \frac{a_B}{2} , \ E = -4 E_B$$

Жұқа шұңқыр, соңғы биіктіктегі тосқауылдар.

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_B^3}} e^{-r/a_B}, \ E = E_0^B - E_B - \delta E$$

мұндағы $\delta E - B$ материалындағы өткізгіштік зонаның түбіндегі жағдай және $E_0^B - B$ материалындағы экситонның байланыс энергиясы және бор радиусы, $\delta E - шұңқырдың байланыс энергиясына қосымша:$

$$\delta E \approx -V(a/2a_B)$$

15.3 Кванттық шұңқырлардағы экситондар

Ваннье-Мотта экситонының сутек тәрізді күйі екі бөлшекті иілетін (огибающий) функциямен сипатталынады $\Psi_{exc}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h)$. Қарапайым зоналары бар көлемді шала өткізгіштіктерде 1s үшін экситон келесі теңдеуді жазамыз

$$\Psi_{exc}(\mathbf{r}_{e},\mathbf{r}_{h}) = rac{e^{i\mathbf{K}\mathbf{R}}}{\sqrt{V}} arphi(\mathbf{r})^{arphi(\mathbf{r})} = rac{\exp\left(-r/a_{B}
ight)}{\sqrt{\pi a_{B}^{3}}}$$

Қалың шұңқырлар. Бұл жағдайда экситон бүтін бірлік ретінде квантталады:

$$\Psi_{exc} = F(\mathbf{R}) \,\varphi(\mathbf{r}) \,, \, F(\mathbf{R}) = \frac{1}{\sqrt{S}} \,e^{i\mathbf{K} \|\mathbf{R}\|} \,\Phi(Z)$$
(15.1)

$$E = E_g - E_B^{3D} + \frac{\hbar^2}{2M} \left[K_{\parallel}^2 + \left(\frac{\pi\nu}{a}\right)^2 \right]$$
(15.2)

где $M = m_e + m_h$ - экситонның трансляциялық эффективті массасы, $\mathbf{r} = \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h$, $\mathbf{R} = (m_e \mathbf{r}_e + m_h \mathbf{r}_h)/(m_e + m_h)$ - экситонның массалық орталығы, $\mathbf{R}_{//}$ -интерфейс жазықтығындағы массалық орталықтағы күйі. Z осі бойындағы экситонның кванттық өлшемдік $\Phi(Z)$ функциясымен сипатталынады a – шұңқыр ені. Экситонның кванттық өлшемдік төменгі деңгей үшін $\Phi(z) = \sqrt{2/a} \cos(\pi Z/a)$.

Жұқа шұңқырлар. Экситонның негізгі (1s) күйі үшін қарапайым қолайлы вариацияда толқындық функция келесідей сипатталынады:

$$\begin{split} \Psi_{exc} &= \frac{1}{\sqrt{S}} e^{i \mathbf{K}_{\parallel} \mathbf{R}_{\parallel}} \varphi(\rho, z_e, z_h) , \ \varphi(\rho, z_e, z_h) = \\ &= f(\rho) \varphi_{e1}(z_e) \varphi_{h1}(z_h) \end{split}$$

Байқау функциясымен

$$f(
ho) = \sqrt{rac{2}{\pi ilde{a}_B^2}} e^{-
ho/ ilde{a}_B}$$

жалғыз вариациялық параметрмен \tilde{a} сипатталынатын 2*D*-шекте:

$$E = E_g + E_{e1} + E_{h1} - E_B^{2D} + \frac{\hbar^2 K_{\parallel}^2}{2M}, \quad \tilde{a}_B = \frac{a_B}{2}, \quad E_B^{2D} = 4E_B^{3D}$$

Әдебиет 1[412-413], 2[28-29],

Бақылау сұрақтары:

1. Экситон дегеніміз не?

2. Нәзік және қалың шұңқырлар қандай теңдеумен анықталынады?

Практикалық сабақтардың жоспары

1 сабақ

Тапсырма. Біртекті тікбұрышты потенциалдық шұңқырдағы бөлшек. Компьютердің және Mathcad или Mathematica бағдарламаларының көмегімен есептеңдер:

а) 0,045 еркін электрон массасына тең изотропты массасы бар байланысқан бөлшектер күйінің энергия биіктігі 0,5эВ (Сао_{0,47}In_{0.53}A₃ қатты ерітіндісінің өткізгіштік зонадағы электронның эффективті массасымен салыстыру үшін) біртекті тікбұрышты потенциалдық шұңқырда жататынын дәлелдендер. Шұңыр ені 50, 100 және 150 Å болғандағы есептеулерді жүргізіңдер. Осы нәтижелерді негізгі әдебиеттегі [1] 4236. 9.7 суретпен және дәлдікпен алынған нәтижелермен қос. әдеб. [6] салыстырыңдар.

б) Осы қосарланған күйлер үшін бөлшектің шұңқыр ішінде болу ықтималдығын табыңдар;

в) тосқауыл ішіндегі бөлшек массасы шұңқыр ішіндегі массасының жартысына ғана тең деп, шұңқыр ені 50 Å жағдайды қайталап есептеңдер. Негізгі әдебиеттегі [1] 422б. (9.13) теңдеуіне сүйеніп байланысқан күй энергиясының көп не аз екенін айтуға болады.

Әдебиет 1[474-475]

Бақылау сұрақтары:.

1. Шала өткізгіштіктердегі кванттық өлшемдік эффект.

2. Электрондар мен кемтіктердегі квантты өлшемді эффект.

2 сабақ

Тапсырма. а) Біртекті периодты потенциалдағы тікбұрышты шұңқырдың ішіндегі бөлшек (немесе Крониг-Пенни потенциалы). Компьютердің және Mathcad немесе Mathematica бағдарламалырының көмегімен биіктігі 0,4эВ біртекті периодты потенциалдағы тікбұрышты шұңқыр үшін өздік мәндердің k толқындық векторға тәуелділігін біртекті дискретті мәндері үшін есептеңдер (k арасындағы 0 мен π/a , мұндағы а=30 Å — тосқауыл мен шұңқыр ені). Минизона құрылымын тұрғызыңдар және зона экстремумдарының алынған энергияларын және 4.1 суретте келтірілген ендермен салыстырыңдар.

б) Тетраэдр құрылымындағы көлденең фонондар. (5.2) теңдеуі тұрғын фонондар үшін орындалатынын, ал [100] бағытында өсірілген Si₂Ge₂ асқынторындағы көлденең фонондар үшін орындалмайтынын түсіндіріңдер. Көлденең модалар үшін сәйкес теңдеулерді алу үшін қандай өзгерістер жасау керек? Ескертпе: таяқша мен түйіршіктерден жасалынған GaAs құрылымының моделін зерттеңдер. Әдебиет 1[475-476]

Бақылау сұрақтары.

- 1. Біртекті потенциалдағы бөлшек.
- 2. Асқынторлардағы электрондар мен кемтіктер.
- 3. Асқынторлардағы акустикалық модалар.
- 4. Тетраэдр құрылымындағы көлденең фонондар.

3 сабақ.

Тапсырма. а) Асқынторлардағы тұрғын фонондар. 5.2 суреттегі В-В моноқабат арасындағы ортаға жақын қатынастағы тақ немесе жұп ығысуды (5.2) теңдеуге қойып (5.3) және (5.4) теңдеулерін алыңдар. k = π/d үшін сурет ығысуы В-В моноқабат арасындағы ортаға жақын қатынасы тақ немесе жұп екенін, бірақ k=0 жағдайындағы тақ (жұп) айырмашылық суретінің А-А арасындағы ортамен салыстырғанда жұп (тақ) болатынын көретіңдер. k = π/d кезіндегі төрт өздік жиіліктің мәндерін мына теңдеуден алыңдар

$$\omega^{2} = f \frac{(3m_{B} + m_{A}) \pm \sqrt{(3m_{B} + m_{A}) - 8m_{A}m_{B}}}{2m_{A}m_{B}}$$

және m_A және m_B ауыстырған кездегі ұқсас мәндерді алыңдар:

¹' Mathcad MathSoft, Inc сауда маркасының өнімі.

²' Mathematica Wolfram Research, Inc сауда маркасының өнімі.

б) Асқынтордағы акустикалық модалардың жіктелуі. Негізгі әдебиеттегі [1] 436б. (9.27) теңдеуден ортадағы байланысқан акустикалық жіктелу үшін және Бриллюэн минизонасының шетіндегі *е* тәуелділігін табатын теңдеуді алыңдар.

Әдебиет 1[474-475]

Бақылау сұрақтары.

1. Асқынторлардағы қосарланған акустикалық модалар.

2. Асқынторлардағы фонондар.

4 сабақ

Тапсырма. Интерфейсті модалардың бұрыштық тәуелділігі. а) GaAs/AlAs КҚКШ үшін алынған w(q_x) дисперсиялық тәуелділігі келтірілген $\tilde{q} = dq_x/K$ толқындық вектор орнына q_x және d_A/d_B параметр негізін абсцисса осіне қойып тұрғызыңдар. d_A/d_B осы дисперсияға тәуелділігін түсіндіріңдер.

б) КҚКШ Ge/GaAs үшін (а) бөлігін қайталаңдар (Ge инфраактивті фонондары жоқ және оның ɛ(w) инфрақызыл аймақта дисперсиясы болмайтынын есте сақтаңдар). Әдебиет 1[475-476]

Бақылау сұрақтары.

1. Квантты активті фонондардағы раман шашырауы.

2. Интерфейсті модалардағы раман шашырауы.

5 сабақ

5 тапсырма Қосарланаған акустикалық модалардағы іріктеу тәртібі. Рамандық шашыраудың $\tilde{q}=0$ кезінде тек бір ғана қосарланған акустикалық модалар пайда болу керек, ал $\tilde{q} \neq 0$ кезінде екі компонента пайда болатынын көрсет. $\tilde{q}=1$ кезінде не болады? (6.1 суретті қара).

Әдебиет 1[475-476]

Бақылау сұрақтары.

- 1. Раман шашырауы.
- 2. Акустикалық моданың физикалық мағынасы.

6 сабақ

Тапсырма. Интерфейсті модалардағы электростатикалық потенциал. 5.7 суретте жазылған k_x әртүрлі мәндері үшін КШ жауап беретін интерфейсті модалар $\phi(x)$ потенциалының тәуелділігін тұрғызыңдар және осы тәуелділіті түсіндіріңдер. Сәйкес Е өрісі таралу бағытымен (жазықтықта) салыстырғанда не тұрғын, не көлденең толқын болмайтындығын көрсет.

Әдебиет 1[475-476]

Бақылау сұрақтары.

- 3. Раман шашырауы.
- 4. Қосарланған акустикалық фонондардағы раман шашырауы.

7 сабақ

Тапсырма. Резонанстық жарық шашырауы кезіндегі қалыңдықтың флюктуацияға әсері. Біртексіз кеңейген КҚКШ акустикалық фонондар шашырауы кезінде негізінен люминесценция фонына ұқсайтын кең фонон көрінеді. (6.2 сурет).

a) Оптикалық фонондарда осыған ұқсас құбылыстың неге байқалмайтынын түсіндіріңдер.

б) 6.3 суреттегі ұсастырып алған қисық үшін тыйым салынған зонаның біртексіз флюктуациясының тәуелділік ұғымын алыңдар. Осы қисықтың ені біртексіз g еніне қарағанда шамамен төрт есе үлкен болатынын көрсет.

Әдебиет 1[475-476] Бақылау сұрақтары. 1.Люминесценция. 2. Оптикалық және акустикалық тор тербелістері.

8 сабақ

Тапсырма. [001] асқынторы үшін нүктелік топ және іріктеу тәртібі. [001] бағытында өсірілген GaAs/AlAs асқынторының m тақ не жұп мәндері үшін LO және TO фонондарына жүргізілмейтін түйінді табыңдар. Бұл жағдайда нүктелік топ D_{2d} болып табылады, ал оған сипаттама төмендегі кестеде көрсетілген:

	Е	$2S_{4}^{2}$	C_4^2	2C ₂	$2\sigma_d$
A ₁	1	1	1	1	1
A_2	1	2	1	-1	-1
B ₁	1	-1	1	1	-1
B_2	1	-1	1	-1	1
Е	2	0	-2	0	0

Негізгі әдебиеттегі [1] 451б. (9.50) теңдеуімен анықталатын тақ m бар LOмодалары рамандық тензорға ие болатынын көрсет.

Әдебиет 1[475-476]

Бақылау сұрақтары.

1. Шала өткізгішіті асқынторлардағы фонондардың рамандық спектрі.

2. Квантты оптикалық фонондардағы раман шашырауы.

9 сабақ

Тапсырма. AB/CD типтес мырыш жалатылған асқынторының нүктелік тобы. [001] бағытында өсірілген GaAs/AlSb асқынторының қандай нүктелік топқа жататынын анықтаңдар. Осы типтің үш эквивалент емес құрылымдарының GaAs және AlSb арасындағы интерфейс қабаттары қандай тәуелділікте болатынына назар аудараыңдар: а) GaSb қабаты, б) AlAs қабаты, в) AlAs және GaSb қабаттары ауыспалы болғанда. Әдебиет 1[475-476c]

Бақылау сұрақтары.

- 1. Асқынторлардағы фонондар.
- 2. Асқынторлардағы электрондар мен кемтіктер.

10 сабақ

Тапсырма. LO-фонондарындағы кері шашыраудың іріктеу тәртібі. [001] бағытында өсірілген GaAs/AlAs КҚКШ үшін [110] және [1 $\overline{1}$ 0] бағыттағы ξ_L және ξ_S (параллель және қосарланған) поляризация үшін LO-фонондарындағы кері шашыраудың іріктеу тәртібін алыңдар.

Әдебиет 1[476-477с]

Бақылау сұрақтары.

- 1. Электрон фононды әсерлесу.
- 2. Көп қайталанатын кванттық шұңқырлар.

11 сабақ

Тапсырма. 2D кезіндегі магнитөткізгіштік тензор және магниткедергі. Магнит өрісі бар ху жазықтығындағы екіөлшемді электронды газдың магниткедергісі мен магнитөткізгіштік тензорының осы жазықтыққа перпендикуляр болатынын теңдеуді келесідей теңдеуден көрсет, әрі мұндағы Ландау деңгейіндегі толтыру факторы бүтін сан болып табылатынын ескер:

$$\sigma = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_{xy} \\ \sigma_{xy}^* & 0 \end{pmatrix}$$

Сонымен қатар сәйкес магниткедергі тензоры келесідей болатынын көрсет:

$$\sigma = \begin{pmatrix} 0 & 1/\sigma_{xy}^* \\ 1/\sigma_{xy} & 0 \end{pmatrix}$$

Әдебиет 1[476-477]

Бақылау сұрақтары.

1. Магнитөткізгіштік тензор және магниткедергі

2. Магнитрезистивті эффект.

12 сабақ

Тапсырма. КШ қалыңдығының электрон-фононды әсерлесуге тәуелділігі.

a) әртүрлі интерфейсті және кеңістікті шектеулі оптикалық фонондардағы кванттық шұңқырлардағы электрондардың арасындағы әсерлесу күшінің тәуелділігін 7.3 суреттен көрсететін теориялық қисықтың қандай деңгейде сапалы екенін түсіндіріңдер:

1. «Диэлектрлік континуум моделі» мен «Хуан-Жу моделінің» көмегімен есептелген W₁ және W₂ қисықтарының арасында аз ғана айырмашылық бар екенін. Басқа қырынан алғанда «механикалық модельдің» негізінде есептелген W₁ мен W₃ қисықтарға қарағанда көптеген есе шашырау интенсивтілігін береді.

2. W₁ және W₃ барлық үш қисықтар жағдайында шашырау интенсивтілігінің кванттық шұңқырлар қалыңдығы кішірійген кезде кеңістікті шектеулі оптикалық фонондар модалары да кішірейетінінің теориясы.

3. Электрон-фононды әсерлесудің деформациялық потенциялық түрінен және оның көлемді шала өткізгіштердің фонондардың толқындық векторына тәуелділігін сапалық деңгейде түсіндір және электрон-фононды әсерлесудің деформациялық потенциялының кванттық шұңқыр қалыңдығынының тәуелділігінің қандай болып шығатынына назар аударыңдар. Әдебиет 1[476-477 б]

Бақылау сұрақтары.

- 1. Кеңістікті шектелген көлденең оптикалық фонондар.
- 2. Жиналған тұрғын акустикалық фонондар.

13 сабақ

Тапсырма. (14.3), (14.4) теңдеулеріндегі қалыптасатын тасымалдау матрицасын қолданып және 14.2 суреттегі электрон энергиясы тәуелділігінің біртекті тосқауыл арқылы туннелденетін электронның түсу коэффициентін есептеңдер. Бірінші жағдайда нөлдік ығысуға, сосын 0,1 В ығысуға есептеңдер. Екінші жағдайда тік бұрышты потенциал түрінде ығысу потенциалын жуықтап есептеңдер. Тікбрышты шұңқырдың аз санынан (мысалы төрттен бастауға болады) бастаңдар және 14.2 суреттегі нәтижені қаншалықты түсіндіре аласыңдар. Сосын шұңқыр санын көбейтіңдер және сендердің нәтижелерің 14.1 суретке қаншалықты жақын екенін қараңдар.

Әдебиет 1[476-477 б]

Бақылау сұрақтары.

- 1. Тасымалдау матрицасы.
- 2. Тікбұрыштыпотенциалдық шұңқыр.

14-15 сабақтар

Тапсырмалар. Мырыш жалатылған шала өткізгіштіктегі электрондардың өткізгіштік зонадағы эффективті g-факторы. Квантты Холл эффектісін оқу кезінде электронның спинін ескермейді. Іс жүзінде берілген магнит өрісі электронның магнит моментіне әсер етеді. Атомдағы электронның магнит моментінің екіжақтылық табиғаты бар: электронның орбиталды қозғалу салдарынан және оның спинінің бар болу салдарынан. Берілген магнит өрісі мен электронның магнит моментінің арасындағы әсерлесу энергетикалық деңгейлердің жіктелуіне экеліп соғады, яғни Зееман эффектісі деп аталады. GaAs типтес шала өткізгіштің электрондары үшін пайда болған магнит өрісінен электронның энергетикалық деңгейінің зеемандық жіктелуі спин-орбиталды әсерлесудің нәтижесінде бірталай төмендеуі мүмкін. Осы есепте өткізетін g-факторы бар өткізетін электронның эффективті мәні еркін электронға қарағанда (g=2) аз немесе көп болатынын Есепті шешпес бұрын оқырман 1 қосымшаны оқу керек. көрсетіндер. 1 қосымша: Шала өткізгіштегі электронның (g*) тиімді g-факторы мына Web-сайтта http://Pauline.Berkeley.edu/textbook/Appendices. берілген. Мырыш жалатылған шала өткізгіштік k=0 кезінде оның тыйым салынған зонасын айнала уш зонамен қоршаған деп есептеңдер. Соның біреуі Г₆ симметриясы және тозғындалған спині бар өткізгіштік зона болып табылады. Қалған екеуі Г₈ симметриясы (J=3/2 зонаға сай келетін) және Г7 симметриясы бар (J=1/2 зонаға сәйкес) валенттік зоналар. Тыйым салынған зонаның энергиясын (яғни өткізгіштік зона мен валенттік зона арасындағы қашықтық - Γ_8) E_0 ал валенттік зона арасындағы спинорбиталды жіктелуді — Δ_0 деп белгілеңдер.

а) Эффективті массаларды жуықтауды қолдана отырып, өткізетін электронға магнит өрісін берген кезде электронның g-факторы эффективті мәнге ие екенін көрсетіңдер:

$$g^* = 2 - \frac{4p^2 \Delta_0}{3mE_0(E_0 + \Delta_0)}$$

б) g* көмегімен өткізгіштің эффективті масса арқылы m* орнына P² алыңдар. Кестеде көрсетілген GaAs, GaN, InSb және ZnSe үшін E₀, Δ_0 және m_c^* мәндерін

қолданып g* теориялық мәндерін есептеңдер және алынған нәтижелерді тәжірибемен салыстырыңдар:

Шала өткізгіш	g* тәжірибелік мәндері
GaAs	0,44
GaN	1,98
InSb	-51
ZnSe	1,15

Әдебиет 1[476-477 б]

Бақылау сұрақтары..

1. Квантты Холл эффектісі.

2. Біртекті тосқауыл арқылы туннелдеу.

3. Зееман эффектісі.

4. Шала өткізгіштер.

5. Эффективті д-фактор.