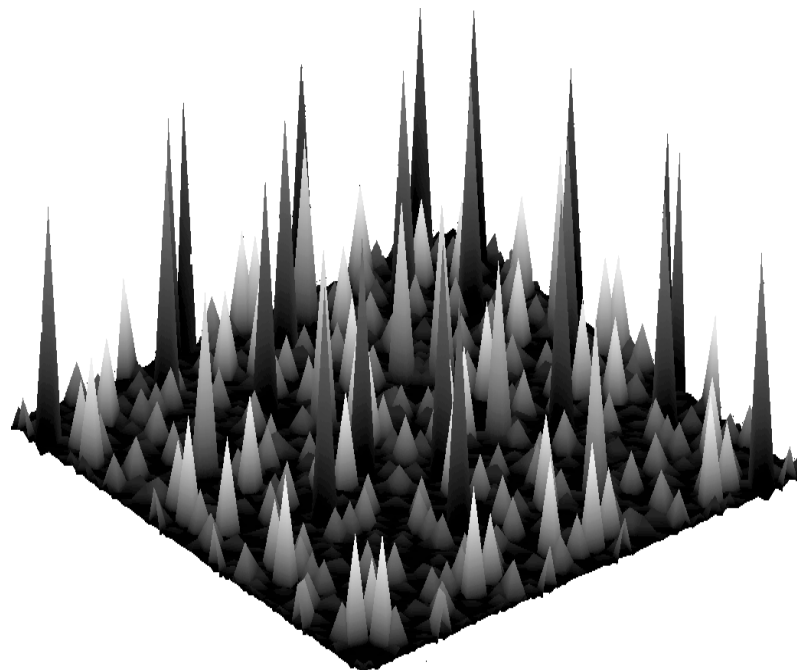


КАЗАХСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМ. АЛЬ-ФАРАБИ

З.Ж. Жанабаев, Т.Ю. Гревцева

**ФРАКТАЛЬНЫЕ СТРУКТУРЫ
И ОПТИЧЕСКИЕ ЯВЛЕНИЯ В
НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ
ПОЛУПРОВОДНИКАХ**



Алматы, Қазақ университеті
2014

*Рекомендовано к изданию
Ученым советом физико-технического факультета
и Редакционно-издательским советом КазНУ имени аль-Фараби*

Рецензенты:

доктор физико-математических наук, профессор ***А.С. Дробышев***
доктор физико-математических наук, профессор ***А.Ж. Турмухамбетов***

Жанабаев З.Ж., Гревцева Т.Ю. Фрактальные структуры и оптические явления в наноструктурированных полупроводниках / Алматы: Қазақ университеті, 2014. – 165 с.

Монография посвящена теории и конкретным алгоритмам компьютерного моделирования физических явлений в наноструктурированных полупроводниках. Предложены новые уравнения для фрактальной эволюции концентрации носителей заряда, для энергии экситонных образований. Оптические процессы рассмотрены на основе квантовой формы флуктуационно-диссипационного соотношения. Флуктуации определены в виде спектра мощность корреляций носителей заряда, диссипация энергии выражена через равновесное распределение фотонов.

Теоретически определены критерии самоподобия и самоаффинности хаотических систем в виде неподвижных точек информации и энтропии. Эти критерии определяют разность фрактальных и топологических размерностей, характеризующих наноструктуры, и использованы в качестве основных параметров теории. Выводы теории по температурной зависимости, кинетики электронов, дырок, примесей, морфологии поверхностей, оптическим свойствам нанопленок сопоставлены с соответствующими экспериментальными данными.

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение	5
----------------	---

ГЛАВА 1

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ОСНОВЫ ФИЗИКИ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

Фрактальное строение наноструктурированных полупроводниковых пленок	8
Топологические особенности тонких пленок с квантовыми нитями	17
Оптические свойства квантово-размерных структур	24
Экситонные механизмы оптических процессов	31
Явление локализации фотона в полупроводниках	41

ГЛАВА 2

ФРАКТАЛЬНАЯ ПРИРОДА РАСПРЕДЕЛЕНИЯ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА В НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

Критерии самоподобия и самоаффинности динамического хаоса	44
Температурная зависимость концентрации и кинетика носителей заряда в наноструктурированных полупроводниках	56

ГЛАВА 3

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ОПИСАНИЯ МОРФОЛОГИИ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

Уравнения, описывающие неравновесное распределение электронов, дырок и примесей в наноструктурированном полупроводнике	67
Отображение фрактальной эволюции меры	72
Применение метода реконструкции динамического хаоса для моделирования морфологии поверхностей наноструктурированных пленок	76

ГЛАВА 4

РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ МОРФОЛОГИИ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

Численное исследование распределения электронов, дырок и примесей в наноструктурированных полупроводниках	78
--	----

Сопоставление результатов моделирования морфологии полупроводниковых пленок с экспериментом	90
Моделирование морфологии наноструктурированных полупроводников универсальным отображением фрактальной эволюции меры	100

ГЛАВА 5

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ОПИСАНИЯ ОПТИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

Флуктуационно-диссипационное соотношение для описания поглощения, отражения и пропускания фотонов	115
Экситонное поглощение света	120
Задержка фотонов по времени в наноструктурированном полупроводнике	122

ГЛАВА 6

РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ОПТИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

Численное исследование оптического поглощения в наноструктурированных полупроводниках	124
Моделирование экспериментальных спектров поглощения и люминесценции наноструктурированных полупроводниковых пленок	131
Экситонное поглощение в наноструктурированных полупроводниковых пленках	138
Моделирование процессов, связанных с задержкой фотонов, в неупорядоченных полупроводниках	143
Заключение	145
Список использованной литературы	146
Приложение 1	155

ВВЕДЕНИЕ

Наноструктурированные полупроводники являются перспективным материалом электроники новых технологий. Исследования полупроводниковых пленок, проведенные современными методами микроскопии, показали, что они содержат структуры в виде нанокластеров. Эти структуры нерегулярны, в то же время обладают свойствами самоподобия и самоаффинности, т.е. их можно рассматривать как фрактальные и мультифрактальные объекты. Самоподобие означает одинаковость коэффициентов подобия по всем переменным, самоаффинность – их различие.

Важное достоинство полупроводниковых наноструктур связано с тем, что, изменяя их геометрические размеры и конфигурации, можно управлять свойствами системы. Открывается широкая возможность управления параметрами структур и, прежде всего, энергетическим спектром носителей зарядов и фононов, а следовательно, и оптических свойств наноструктур. Создание нанотехнологий требует знания физических свойств наноматериалов, имеющих структуры с квантовыми и фрактальными свойствами. Основным отличием наноструктур является не только малость (порядка нанометров) их размеров, вследствие чего проявляются квантовые эффекты, но и зависимость геометрических (длина, площадь, объем) и физических характеристик от масштаба измерения. Причиной этого является нерегулярность их формы, вследствие чего геометрические и физические меры нелинейным (степенным) образом зависят от масштаба измерения. Этот нелинейный эффект проявляется всегда при любых измерениях, его можно учесть только при известных характеристиках масштабной инвариантности.

В силу неоднозначности свойств наноструктур только одним физическим экспериментом практически невозможно создать эффективную и надежную технологию. Характеристики наноструктур в принципе невозможно точно измерить, т.к. они зависят от масштаба измерения, они могут быть только вычислены в виде фрактальных мер. Дорогостоящие экспериментальные исследования не будут эффективными, если их не обосновывать и не описывать теоретическими и компьютерными моделями. В связи с этим актуальным вопросом является теоретический анализ и компьютерное моделирование электрофи-

зических, оптических, радиационных свойств наноструктурированных полупроводников. Поэтому использование компьютерного моделирования в создании нанотехнологий является необходимостью.

Наноструктуры могут представлять собой квантовые точки, нити, сверхрешетки (квантовые ямы). Все такие структуры в настоящее время широко используются в электронике, например, при создании лазеров, чувствительных сенсоров, быстродействующей компьютерной техники, солнечных элементов и т.д. В последние годы проблемы нанoeлектроники непосредственно связываются с физикой экситонных образований. Экситон и биэкситон могут рассматриваться как два квантовых бита, которые могут взаимодействовать друг с другом, и являются логическими единицами для квантовых затворов.

Особый интерес представляет использование полупроводниковых поверхностей, содержащих квантовые нити с известными геометрическими и топологическими характеристиками, для повышения эффективности приборов оптоэлектроники. Применение таких пленок в качестве поверхностей оптоэлектронных приборов, в частности, солнечных элементов, может быть использовано для минимизации рассеяния и отражения фотонов от поверхности образца. Таким образом, за счет уменьшения рассеяния и отражения коэффициент поглощения света увеличивается. Если использовать поверхности полупроводниковых пленок с выращенными на них квантовыми нанонитями с определенными параметрами в качестве поверхности солнечного элемента, возможно повышение коэффициента его полезного действия.

Однако проведение целенаправленных экспериментальных исследований затрудняется отсутствием единой простой теории, описывающей оптические процессы в наноструктурированных элементах. Так, в литературе приводятся классические подходы к описанию оптических явлений на основе таких методов, как применение соотношений Краммерса-Кронинга, формул Урбаха, Тауца и т.д. Несмотря на ценность этих методов, они не учитывают нанокластерное строение вещества, указанные выше нелинейные эффекты, поэтому не полностью описывают современные эксперименты. На данный момент недостаточно разработана, например, теория нового эффекта локализации света в некристаллической среде, взаимодействия экситонов и биэкситонов в квантово-размерных структурах и т.д.

В настоящей работе мы приводим систему уравнений фрактальной эволюции концентраций носителей заряда (электронов, дырок) и примесей в наноструктурированных полупроводниках. Фрактальная размерность реального хаотического объекта точно не определяется измерениями. Поэтому значительный успех достигается тем, что мы

пользуемся теоретически определенными нами критериями самоподобия и самоаффинности. Эти критерии связаны с дробными частями фрактальной размерности объекта и представляют собой численные значения энтропии Колмогорова-Синяя.

Полученная система уравнений фрактальной эволюции была использована для моделирования поверхности наноструктур. Часть результатов была получена с учетом стохастического возмущения.

Мы предлагаем также нелинейное отображение, реализующее хаотические колебания типа «накопление-выброс». Используя этот подход, основанный на теории динамического хаоса, мы получили картины поверхности наноструктурированных пленок, четко различающие квантовые точки, нити, ямы при использовании соответствующих значений фрактальной размерности.

Оптические процессы поглощения, отражения, пропускания фотонов через наноструктурированные полупроводниковые пленки были рассмотрены на основе квантовой формы флуктуационно-диссипационного соотношения. Флуктуации взяты в виде спектральной плотности корреляций концентрации носителей зарядов, соответствующих системе уравнений фрактальной эволюции. Диссипация в тепло поддерживается энергией падающих фотонов. Был использован специальный вид мнимой части обобщенной восприимчивости, соответствующий квазистационарности флуктуаций в оптическом диапазоне частоты внешнего возмущения.

Практически все наши результаты численного анализа вышеуказанных исходных уравнений были направлены на описание многочисленных физических экспериментов последних лет. При анализе численных результатов мы указывали необходимое соответствие интервалов изменения параметров: длины волны излучения, ширины запрещенной зоны, концентрации носителей заряда и т.д.

Мы особо отмечаем, что приведенный список литературы никоим образом не претендует на полноту даже в области конкретных вопросов, рассмотренных нами. Мы привели только те работы, которые имеют непосредственное отношение к нашим исследованиям. Может быть, единственное оправдание этому в том, что в такой новой области науки, как наноаука, лучше говорить только о проверенных результатах, к которым, на наш взгляд, относятся и наши результаты.

ГЛАВА 1

**ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ОСНОВЫ
ФИЗИКИ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ
ПОЛУПРОВОДНИКОВ**

**Фрактальное строение наноструктурированных
полупроводниковых пленок**

В последние годы было проведено множество исследований фрактальной структуры поверхностей [1]. Понятие «фрактал» часто используется при описании систем, в которых наблюдается динамический хаос, самоорганизация. Понятие фрактала было введено в науку Б. Манбельбротом в 1975 году в книге [2], где рассмотрены нерегулярные, самоподобные структуры. Термин *фрактал* образован от латинского причастия *fractus*. Соответствующий глагол *frangere* переводится как *ломать, разламывать*, т.е. создавать объекты неправильной формы. Фракталами являются геометрические объекты: линии, поверхности, пространственные тела, имеющие сильно изрезанную форму и обладающие свойством самоподобия. Самоподобие как основная характеристика фрактала означает, что он более или менее единообразно устроен в широком диапазоне масштабов. При увеличении маленькие фрагменты фрактала получаются очень похожими на большие. Строго и полного определения фрактала пока не существует. Б. Мандельброт определил понятие фрактала следующим образом: фракталом называется структура, состоящая из частей, которые в каком-то смысле подобны целому [3]. Одномерные фрактальные объекты имеют свойство самоподобия, или масштабной инвариантности: части объекта подобны целому. Если число определяющих переменных больше единицы и коэффициенты подобия по этим переменным различны, то такие фрактальные объекты называются самоаффинными. Самоаффинными фракталами могут быть кривые формы сложных сигналов временного ряда, пространственного распределения

физических величин в наноструктурах, пространственного и временного энергетического спектров полупроводниковых тонких пленок и т.д.

Мультифракталы – одни из наиболее сложных объектов нелинейной физики. В природе распределение в пространстве параметров меры – аддитивно слагающейся величины (длина, площадь, объем, масса, заряд, энергия и т.д.) – является сильно флуктуирующим, перемежаемым. Общие закономерности таких явлений установлены теорией мультифракталов. Общепринятого определения мультифракталов на данный момент нет. Приведем ряд утверждений, которые могут служить логическими компонентами строгого, обобщающего определения мультифракталов [1].

– Перемежаемое, вероятностное распределение меры на геометрическом носителе связано с мультифрактальными мерами.

– Мультифрактальный объект характеризуется набором фрактальных размерностей.

– Структурно-иерархически взаимосвязанные фрактальные объекты образуют мультифрактал.

В настоящее время проводятся исследования свойств, в том числе и фрактальных, новых материалов электроники, таких, как фуллерены, нанотрубки. Фуллерены – это сфероидальные структуры, образованные многоатомными молекулами углерода C_n , включающие в себя 60, 70, 76, 84 и т.д. атомов углерода, которые находятся на поверхности сферы или сфероида. Электронная оболочка s^2p^2 атома углерода обеспечивает оптимальную структуру углерода, когда соседние атомы образуют пятиугольники и шестиугольники. Недавно было установлено, что фуллерены являются полупроводниками. Идеальная нанотрубка представляет собой однослойную или многослойную свернутую в цилиндр графитовую плоскость, т.е. поверхность, выложенную правильными шестиугольниками, в вершинах которых расположены атомы углерода. Нанотрубки могут быть как полупроводниками, так и металлами в зависимости от угла расположения графитовых плоскостей относительно оси нанотрубки. Результаты исследований последних лет свидетельствуют о том, что эти объекты имеют фрактальное строение [4-13]. Эти исследования применяют весь спектр методов физики и химии к различным объектам – от молекулярных поверхностей белков до взлетных полос аэродромов. В качестве фрактальных рассматривались различные объекты. Например, была исследована шероховатость поверхностей разнообразных объектов – от обшивки супертанкеров и бетонных взлетных полос до поверхностей суставов, молекулярных поверхностей белков и шлифованных металлических поверхностей. Были сделаны выводы о том, что эти поверхности являются фрактальными. В работе отмечено, что статистически изотропные поверхности, на которых не выделен какой-

либо масштаб и уровень которых хорошо определен, но недифференцируем, могут иметь фрактальные свойства. Также были проведены исследования поверхностей разлома, которые являются шероховатыми и нерегулярными. Такие поверхности также имеют фрактальную структуру. Поверхности разломов являются самоаффинными с локальной фрактальной размерностью, т.к. такие поверхности должны характеризоваться различными законами подобия в плоскости разлома и поперек нее [14-17].

Применение современных методов микроскопии, таких, как электронная, сканирующая туннельная, атомно-силовая и т.д. позволяет получать фотографии поверхностей пленок с высоким разрешением. Обнаружено, что полупроводниковые пленки имеют иерархически самоподобную, фрактальную структуру. Главным условием фрактализации полупроводниковых пленок является выполнение трех условий: неравновесности, нелинейности и незамкнутости. Ниже описаны некоторые механизмы формирования тонких пленок с фрактальной структурой.

Так, например, при ограниченной диффузией агрегации рост скоплений молекул происходит путем присоединения к агрегату по одной молекуле за цикл, что приводит к образованию фрактальных объектов. Еще одним важным процессом роста, который также приводит к образованию фрактальных структур, является агломерация аэрозолей и коллоидов. Процесс агломерации кластеров показан на рисунке 1 [17].

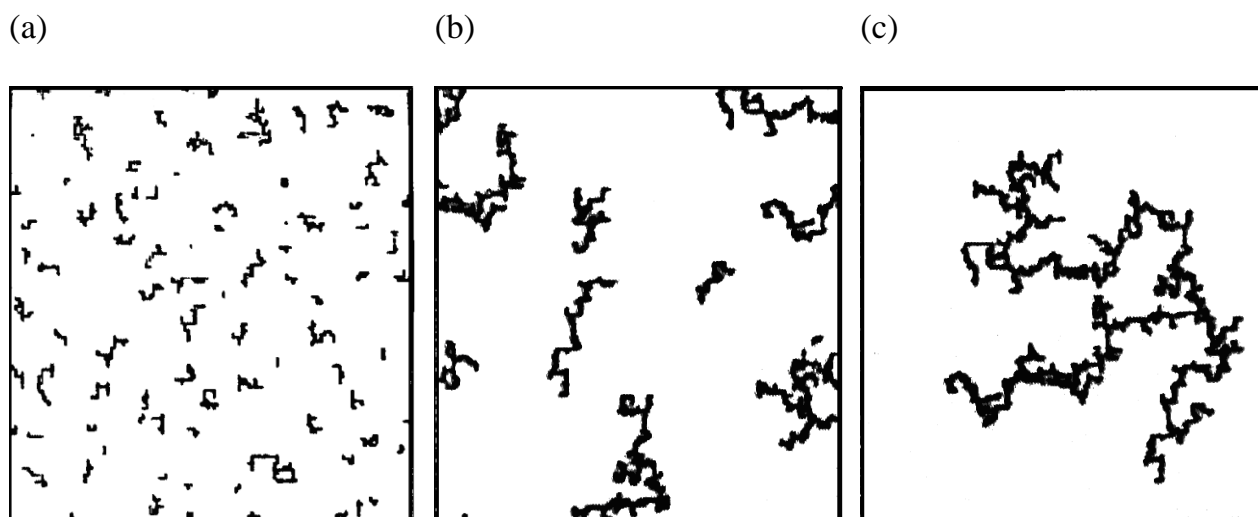


Рисунок 1. Агломерация кластеров.

- (a) – однородное случайное распределение,
- (b) – образование малых кластеров при случайном движении,
- (c) – образование больших кластеров.

Первоначально отдельные частицы почти равномерно распределены в некотором конечном объеме. Затем частицы случайным образом мигрируют, как при броуновском движении. При столкновении две частицы слипаются и в дальнейшем движутся как маленький «кластер». Эти маленькие кластеры, в свою очередь, также слипаются при столкновении, образуя более крупные кластеры. Подобные агломерационные процессы приводят к образованию все более крупных кластеров, которые обладают структурой статистически самоподобных фракталов [18]. Агломерация также играет решающую роль в процессах электролитического осаждения, в каталитических реакциях, в также в перколяционных процессах. Жидкость, инжектированная в любую пору среды, может вторгнуться только в ту пору, которая непосредственно соединена с данной капиллярным каналом. Поры, или узлы, связанные с выбранным центром инъекции, образуют кластер. Наиболее характерной особенностью перколяционных процессов (процессов протекания жидкости через пористую среду) является существование порога протекания [1], ниже которого процесс распространения жидкости ограничен конечной областью среды.

Изменения морфологии трехмерных фрактальных агрегатов нанокластеров серебра на графитовой подложке при отжиге и химической активации исследованы в экспериментальной работе [18]. На рисунке 2 показаны экспериментальные фотографии нанокластеров, полученные при помощи сканирующей электронной микроскопии, и в этой работе отмечено, что образовавшиеся нанокластеры серебра имеют фрактальную структуру.

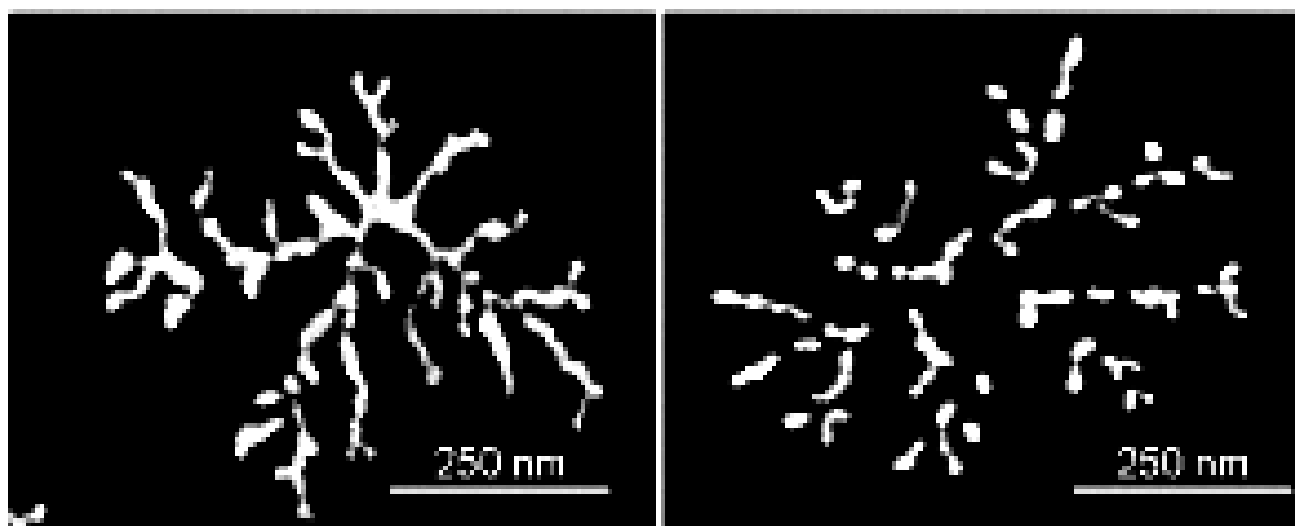


Рисунок 2. Эволюция ранней стадии образования фрактальных кластеров при отжиге (слева) и химической активации (справа).

Наряду с процессами агрегации в зависимости от характера взаимодействий между молекулами и неравновесности физических величин в нелинейной среде могут протекать и процессы сегрегации – расслоения, отделения кластеров. Сегрегация (расслоение) представляет собой изменение физического состояния неоднородной среды. Сегрегация может быть вызвана различными причинами. Например, вследствие диффузии примесных атомов и ионов, которой сопровождаются высокотемпературные стадии технологических процессов, на свободных поверхностях полупроводников и границах раздела наблюдаются процессы расслоения (сегрегации) дефектов. В частности, учет процессов сегрегации позволяет описать равновесное распределение подвижных ионов в металл-диэлектрик-полупроводник структурах с ионными поверхностными состояниями на границе раздела диэлектрик-полупроводник [19]. Установлено, что сегрегация изменяет структуру вещества. Например, при выращивании эпитаксиальных слоев твердых растворов сегрегация (отделение) одного из компонентов раствора поверхностью роста приводит к искажению профиля концентрации, что особенно заметно сказывается на тонких слоях типа квантовых ям [20-22].

Сегрегация, так же, как и агрегация, сопровождается образованием кластеров на поверхности образцов. На рисунке 3 приведена полученная при помощи электронной микроскопии фотография поверхности отожженного образца твердого раствора $(ZrC)_{1-x}(NbC)_x$ с выделениями монокристаллов карбида [21]. В работе [22] отмечается фрактальная упорядоченность образующихся из расплавов твердых тел и их пор.

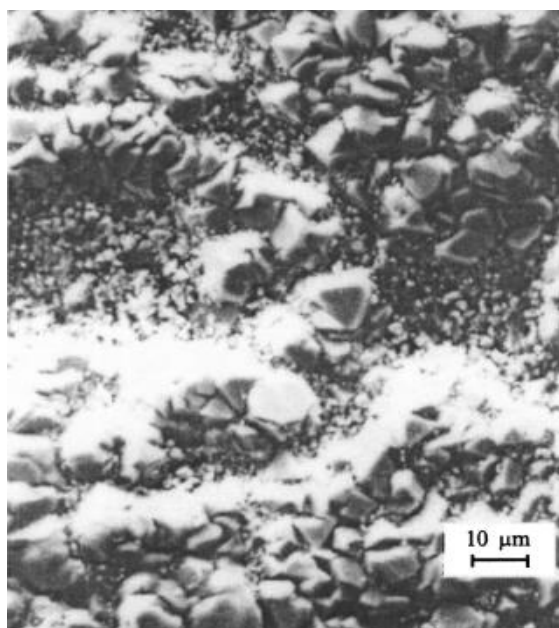


Рисунок 3. Поверхность отожженного образца твердого раствора $(ZrC)_{1-x}(NbC)_x$ с выделениями монокристаллов карбида циркония.

В присутствии бромистого аллила образуются иерархии фрактальных образований в виде «цветков типа роз», содержащих железо и углерод (рисунок 4).



Рисунок 4. Морфология поверхности железо-углеродного покрытия, имеющая фрактальную структуру в виде «цветков типа роз».

В настоящее время различными группами исследователей проводятся экспериментальные исследования морфологии поверхностей пленок, в результате которых обнаружены различные типы наноструктур.

Под наноструктурами понимают наноразмерные объекты искусственного или естественного происхождения, свойства которых определяются не только размером структурных элементов, но и их взаимным расположением в пространстве. Размеры наноструктур варьируются от единиц до сотен нанометров. Области пространственной неоднородности в наноструктурах могут играть роль потенциальных ям, в которых могут быть локализованы различные квазичастицы твердого тела – электроны, дырки, фононы и т.д. Наибольший интерес представляет случай, когда линейные размеры области пространственной локализации квазичастиц оказываются меньшими, чем их длины свободного пробега. В такой ситуации возникает эффект размерного квантования – зоны разрешенных энергий квазичастиц расщепляются на подзоны при уменьшении области локализации в одном или двух измерениях (квантовые ямы и квантовые нити) и на дискретные уровни при уменьшении размеров в трех измерениях (квантовые точки).

Системы, в которых движение квазичастиц ограничено в одном направлении, называются квантовыми ямами, в двух направлениях – квантовыми нитями (или квантовыми проводами), в трех направлениях – квантовыми точками.

Наиболее типичными являются точечные, линейчатые, поверхностные и объемные наноструктуры [23-28]. Эксперимент показывает, что на поверхности некоторых полупроводников наблюдаются линейчатые структуры. Так, в экспериментальной работе [23] был исследован рост пленок *GeSi*, полученных методом низкотемпературной молекулярно-лучевой эпитаксии. На рисунке 5 представлено АСМ-изображение (изображение, полученное при помощи атомно-силового микроскопа) поверхности образца *GeSi* с содержанием германия 20-30%. Такие пленки являются первой ступенью при выращивании гетероструктур со ступенчатым изменением состава. Их поверхность представляет собой систему протяженных пересекающихся ступеней, так называемых “crosshatches”, и является характерной для релаксированных пленок с малой плотностью пронизывающих дислокаций ($10^5 - 10^6 \text{ см}^{-2}$). Другой тип линейчатых структур получен в работе [24]. При помощи метода атомно-силовой микроскопии обнаружено, что поверхность пленки естественного окисла на сколе гетероструктуры обладает квазистационарным нанорельефом в виде линейчатых структур (рисунок б). Возникновение нанорельефов на поверхности и на нижней границе пленки окисла объяснено различной глубиной окисления слоев *GaAs* и *Ga_{0.7}Al_{0.3}As* и увеличением объема при окислении.

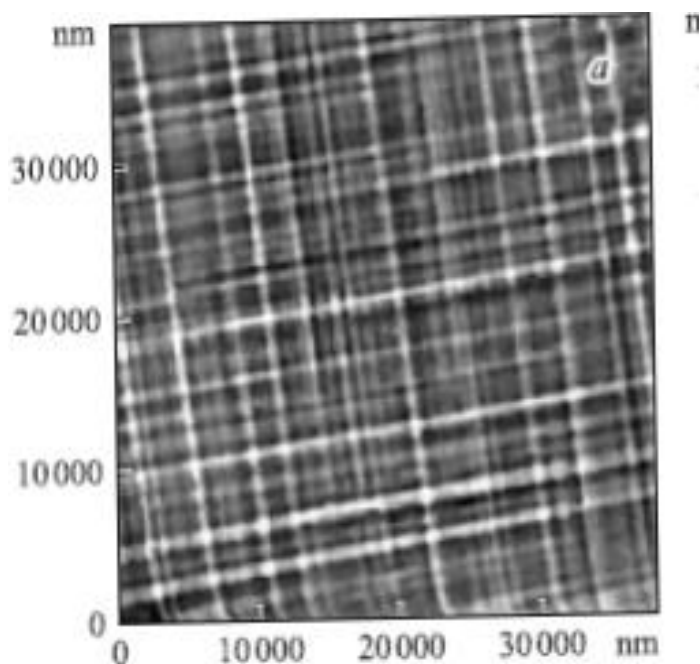


Рисунок 5. АСМ-снимок поверхности пленки *GeSi*.

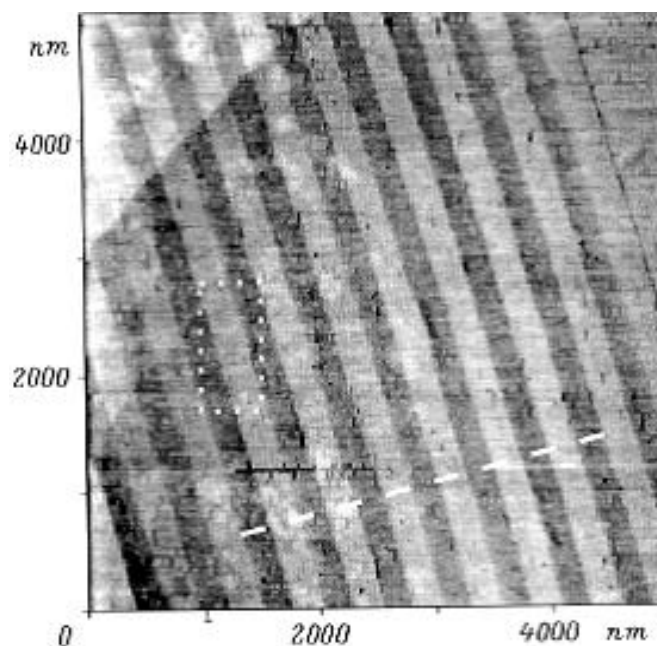


Рисунок 6. АСМ-изображение поверхности скола гетероструктуры $GaAs$ и $Ga_{0.7}Al_{0.3}As$.

Эксперимент показывает, что тонкая пленка также может характеризоваться наличием точечных структур [25]. На рисунке 7 показана поверхность пленки ZnO на кремниевой подложке. В эксперименте напыление производилось при температуре $370^{\circ}C$ в течение 20 минут в вакуумной камере, изготовленной из нержавеющей стали. Размеры кристаллитов порядка 30 нм, а шероховатость около 15 нм.

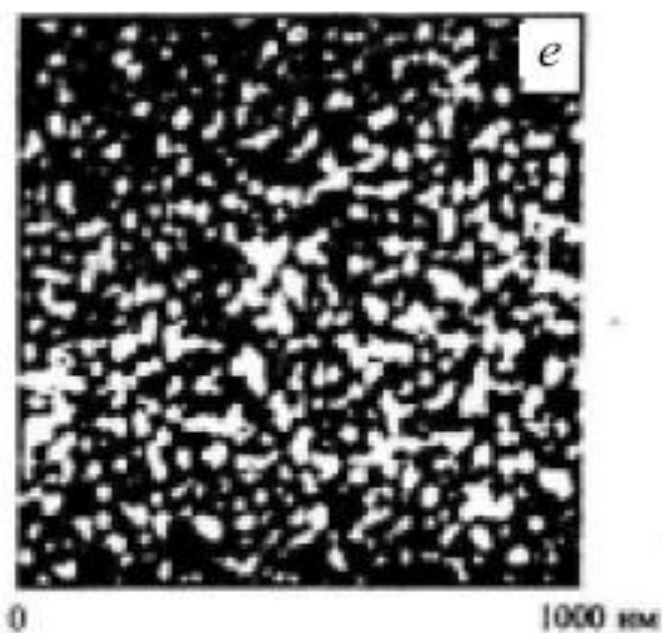


Рисунок 7. АСМ-изображение поверхности пленки ZnO на кремниевой подложке.

Отдельные точечные структуры могут группироваться в кластеры (рисунок 8). Так, в работе [26] кластеризация наблюдалась при облучении поверхности полупроводниковой кристаллической пленки *p-CdTe* лазером.

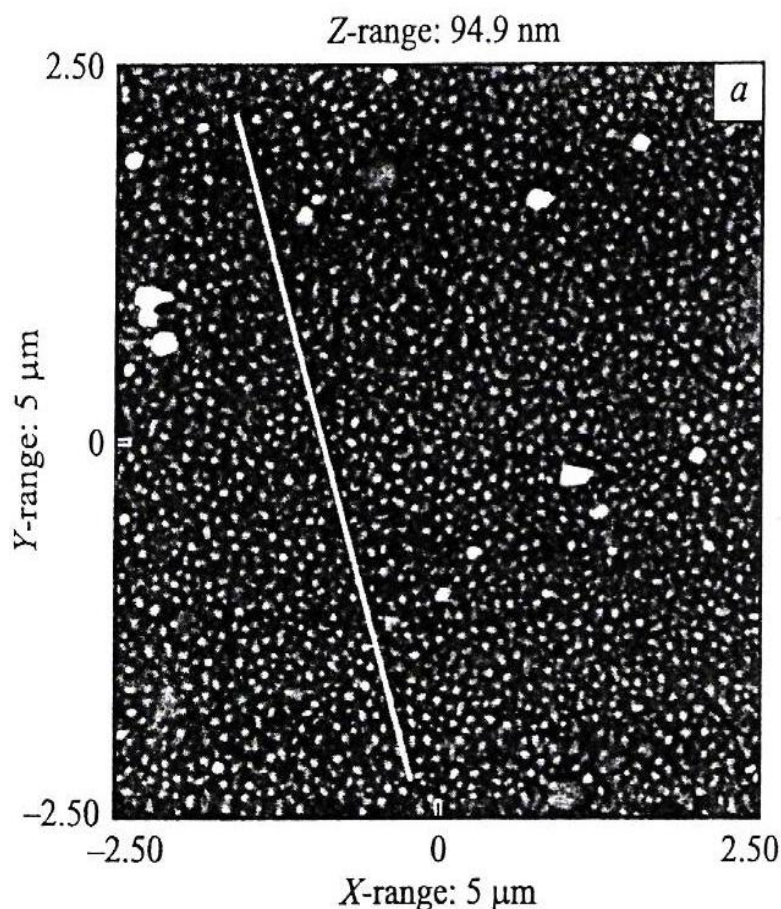


Рисунок 8. АСМ-изображение поверхности кристалла *p-CdTe* после облучения одним импульсом излучения лазера.

Образование кластеров в полупроводниковых пленках может быть вызвано различными причинами. Например, кластеризация наблюдалась при обработке образца *GaAs(100)* в парах селена [27], а в работе [29] описано образование наноразмерных кластеров при отжиге аморфного гидрогенизированного улерода, легированного кобальтом. Аналогичные экспериментальные данные приведены в различных работах, в частности, в работах [30-38].

Итак, на основе результатов экспериментов, полученных при помощи современных методов микроскопии (атомно-силовой, сканирующей туннельной, электронной, просвечивающей и т.д.), можно сделать вывод о нанокластерном строении тонких пленок и наличии процессов самоорганизации, играющих существенную роль при формировании наноструктур.

Топологические особенности тонких пленок с квантовыми нитями

В последние годы существенно возрос интерес к исследованию квантово-размерных структур, в частности, квантовых нитей. Квантовые нити представляют собой полупроводниковые структуры, в которых движение носителей заряда в двух направлениях резко ограничено. В полупроводниковых структурах, где движение электронов по одной из координат ограничено, начинают проявляться эффекты квантования вдоль этой координаты. В результате свободное движение электронов из трехмерного становится двумерным, что кардинально меняет большинство электронных свойств и является причиной новых интересных эффектов.

Особый интерес представляет изучение оптических свойств квантовых нитей. Именно нитевидные структуры сильно меняют оптические свойства поглощения и отражения. Результаты таких исследований могут быть использованы для создания новых оптимальных приборов оптоэлектроники и фотоники. Солнечные элементы, созданные на основе полупроводников, содержащих квантовые нити, могут иметь значительно большие значения коэффициента полезного действия, чем существующие в настоящее время.

Современные виды микроскопии, такие, как электронная, сканирующая туннельная, атомно-силовая и т.д. позволяют получать фотографии поверхностей пленок с высоким разрешением. При помощи этих методов были получены фотографии наномасштабных полупроводниковых структур, в том числе и квантовых нитей.

Так, в работе [39] были исследованы морфология кремниевых нанонитей и их оптические свойства. Фотография поверхности кремниевой пленки, содержащая нанонити, показана на рисунке 9. Изображение получено при помощи сканирующего электронного микроскопа. Диаметр исследуемых квантовых нитей варьируется от 30 до 200 нм, а их высота приблизительно одинакова и составляет около 24 мкм. Как показывает эксперимент, квантовые нанонити могут иметь хорошо упорядоченную структуру, а расстояние между ними сравнимо по величине с их диаметром. В этой же работе была изучена также фотолюминесценция квантовых нитей. Исследования показали, что легирование кремниевой пленки наночастицами серебра приводит к увеличению интенсивности фотолюминесценции.

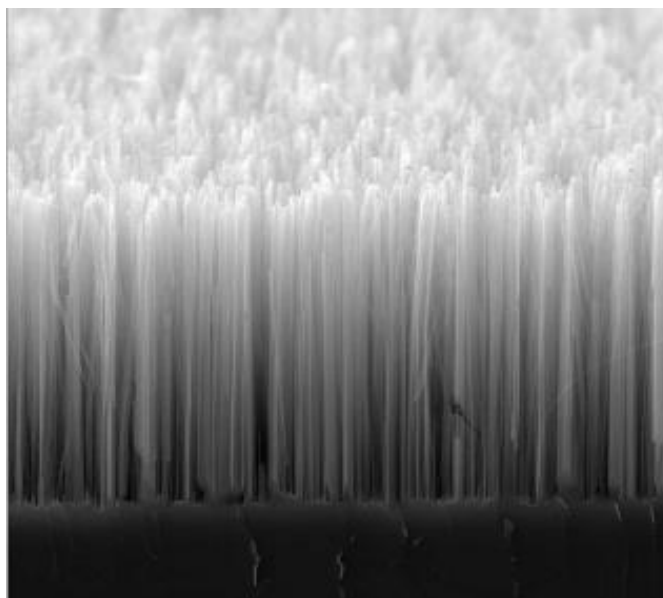


Рисунок 9. Кремниевые нанонити на подложке кристаллического кремния.

В работе [40] описаны результаты экспериментального исследования роста, морфологии и структуры нанонитей, в работе отмечено упорядоченное расположение рядов нитевидных структур (рисунок 10). Изображения получены при помощи сканирующего электронного микроскопа.

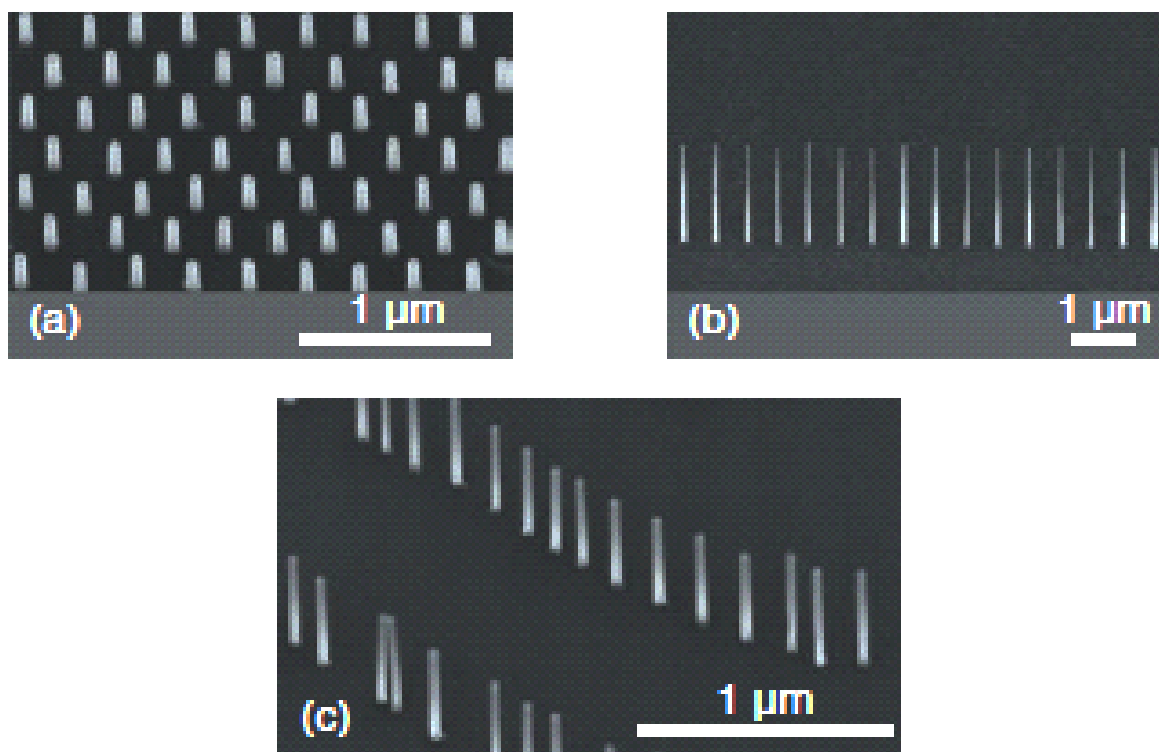


Рисунок 10. Морфология поверхности, содержащей ряды нанонитей *GaAs* (a), одиночный ряд *GaAs* (b), ряды нанонитей *GaP* (c).

В статье [41] рассмотрены методы выращивания квантовых нитей с гетероструктурами, в результате чего были сформированы квантовые нанонити приблизительно одной высоты (рисунок 11). Изображения получены при помощи просвечивающего и сканирующего электронных микроскопов.

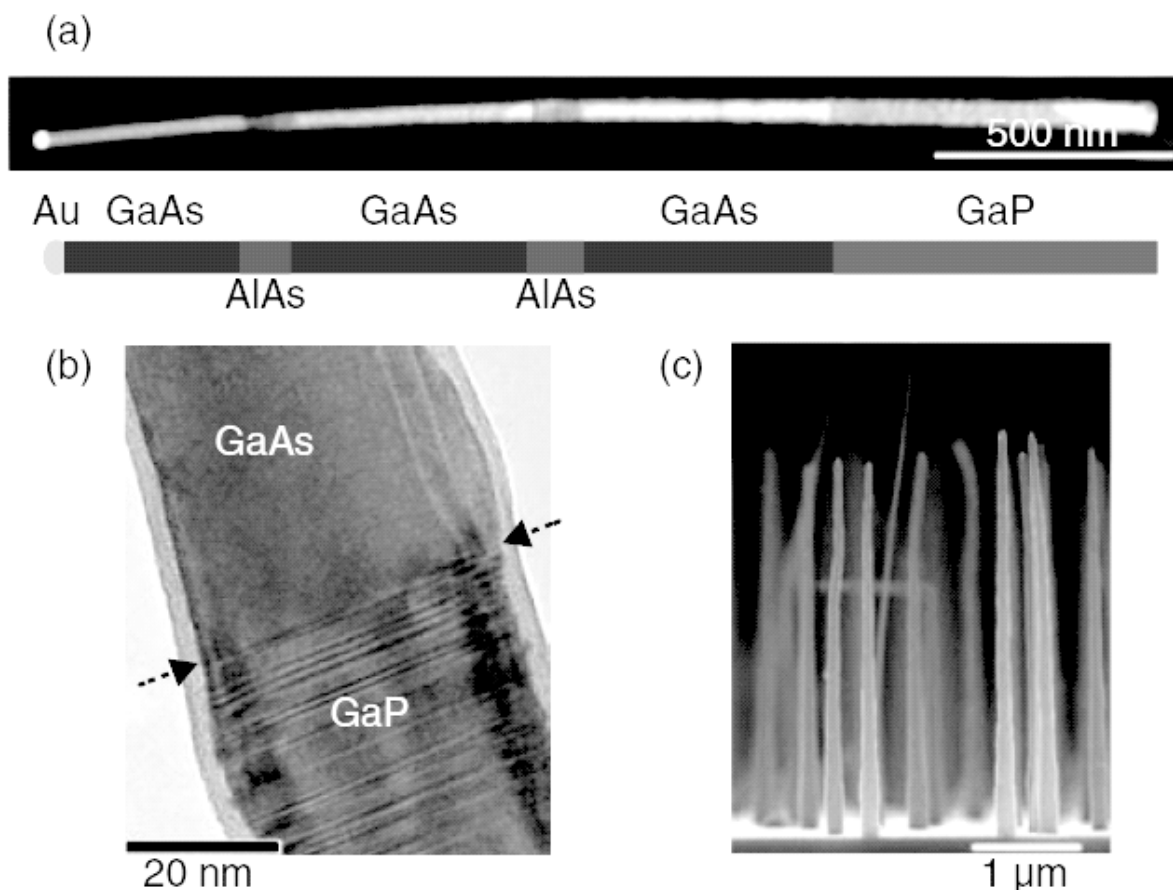


Рисунок 11. Нанонить с гетероструктурой (а), изображение границы раздела $GaAs/GaP$, полученное с высоким разрешением (б), массив $GaAs/GaP$ нанонитей, выращенных на кремниевой подложке (с).

В работе [42] рассмотрено влияние послеростового отжига гетероструктурных $InP/InAsP/InP$ нитевидных нанокристаллов, полученных методом молекулярно-пучковой эпитаксии на их структурные и оптические свойства. Показано, что процедура кратковременного отжига (1 мин) в атмосфере аргона позволяет повысить интенсивность излучения от $InAsP$ -квантовых точек, подавить излучение от $InAsP$ -квантовых ям, образованных вследствие латерального роста и существенно понизить плотность структурных дефектов в нитевидных нанокристаллах. На рисунке 12 приведено изображение ансамбля квантовых нанонитей $InP/InAsP/InP$, полученное при температуре подложки $380^{\circ}C$ при помощи сканирующего электронного микроскопа. Средняя высота нанонитей

около 1 мкм, диаметр варьируется в диапазоне 30-60 нм. В месте, соответствующем *InAsP*-нановставке, наблюдается локальное утолщение нанонитей, после чего диаметр нанонитей уменьшается. Авторы работы считают, что локальное увеличение диаметра при таких условиях роста обусловлено формированием квантовой ямы во время выращивания *InAsP* вследствие латерального роста при данной температуре роста.

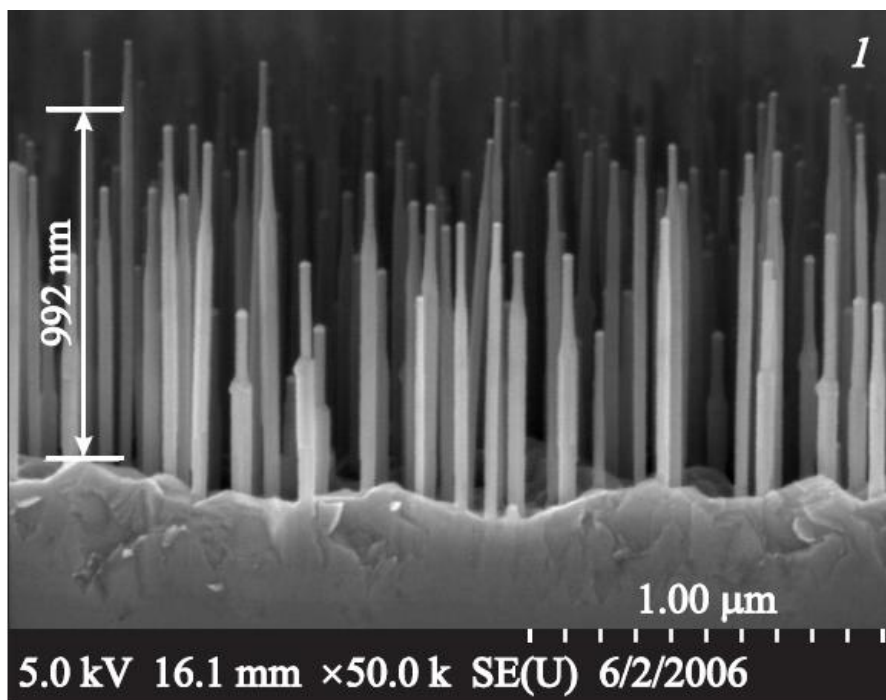


Рисунок 12. Ансамбль квантовых нанонитей *InP/InAsP/InP*.

Изображение нанонитей *CdO* на подложке *ZnO* было получено в работе [43]. Наноструктуры были сформированы при помощи термического напыления. Для анализа морфологии выращенных структур был использован сканирующий туннельный микроскоп. Для исследований авторы этой работы выбрали именно оксид цинка, потому что этот материал представляет интерес в качестве перспективного материала оптоэлектроники из-за своей относительно большой величины ширины запрещенной зоны. Анализ результатов работы [43] показывает, что выращенные квантовые нанонити имеют приблизительно одинаковую высоту, что, в частности, определяет оптические свойства пленки, содержащей структуры в виде квантовых нитей.

На рисунке 13 показаны фотографии поверхностей пленок, содержащих нанонити. Изображения получены при помощи сканирующего электронного микроскопа.

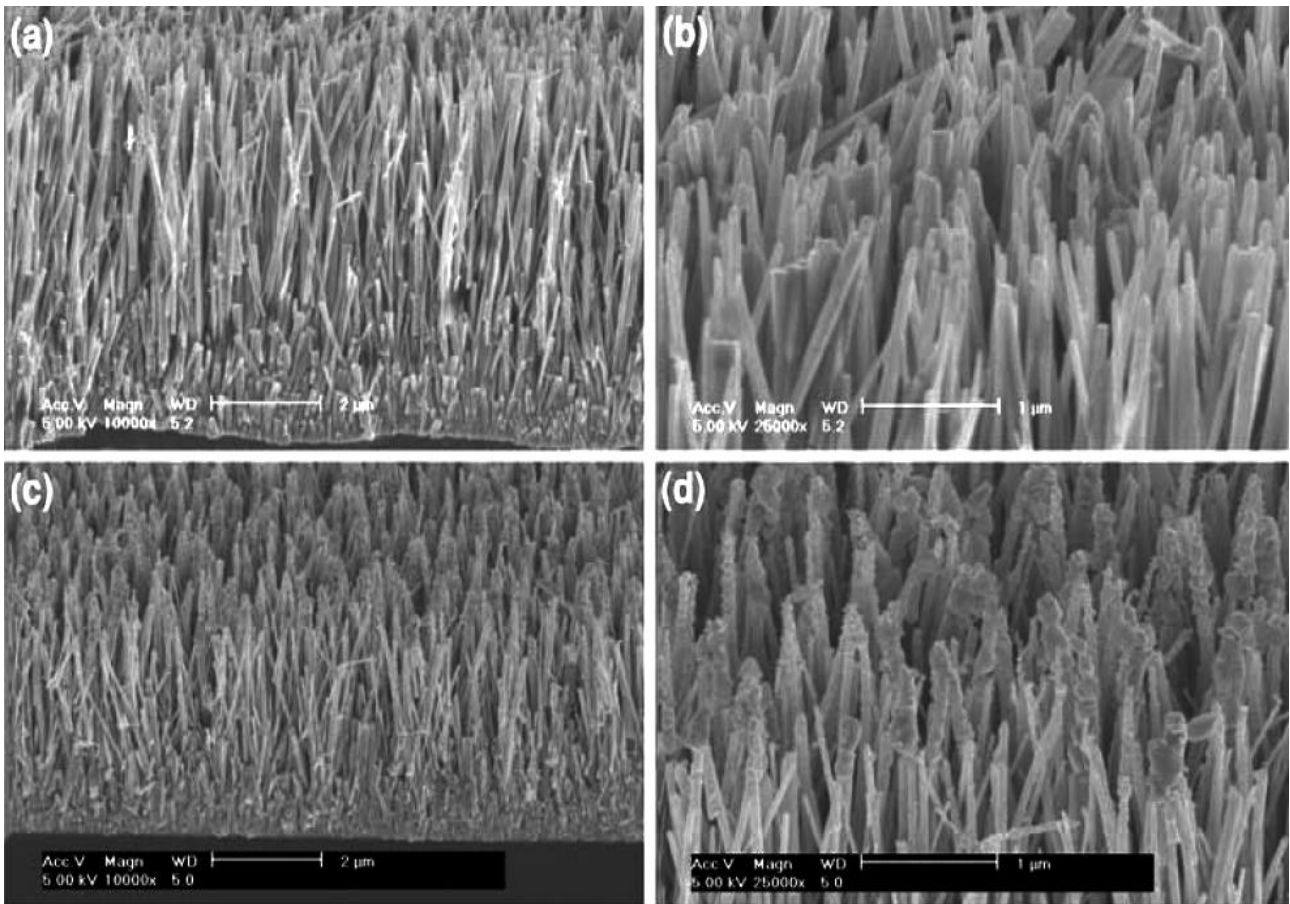


Рисунок 13. Поверхности, содержащие нанонити (под разными углами наклона):
 (а), (b) – нанонити ZnO ; (с), (d) – нанонити ZnO – композиты CdO .

Также представляет интерес изучение методики формирования горизонтальных квантовых нитей. В работе [44] описан оригинальный метод получения горизонтальными квантовых нитей в многослойных структурах $(In,Ga)As/GaAs$. Сначала в полупроводниковой пленке методом Странского-Крастанова выращиваются квантовые точки, которые выстраиваются в ряды и образуют горизонтальные квантовые нити. Обнаружено, что упорядоченное расположение квантовых точек в ряды и плоскости гетерограницы начинает формироваться при выращивании первых периодов многослойной структуры. При увеличении количества периодов наблюдается выстраивание квантовых точек в ряды и формирование нитей вдоль направления $[011]$. Повышение латеральной упорядоченности рассматриваемых структур коррелирует с увеличением оптической анизотропии излучения, обусловленной анизотропией релаксации упругих деформаций и формой нанобъектов. Процесс формирования горизонтальных нанонитей показан на рисунке 14. Изображения, представленные на этом рисунке, получены при помощи атомно-силового микроскопа.

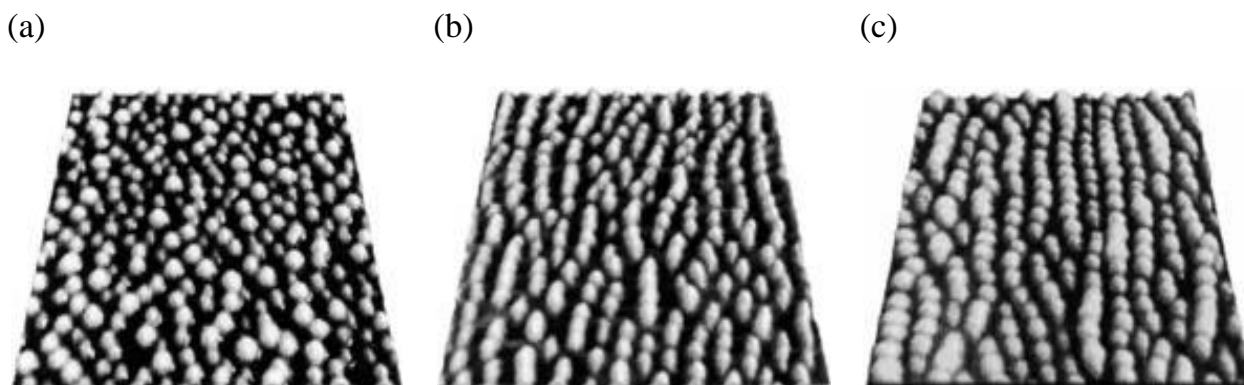


Рисунок 14. Трехмерные изображения фрагментов поверхности многослойных структур $In_{0.5}Ga_{0.5}As/GaAs$.

Горизонтальные эквидистантные квантовые нити также были получены в работе [45]. На рисунке 15 показано изображение рядов нанонитей Pt/Cu на подложке $NaCl$, полученное при помощи просвечивающей туннельной микроскопии. В работе отмечено, что горизонтальные нанонити могут иметь обширное применение в наноэлектронике в качестве перспективного материала для оптических измерений.

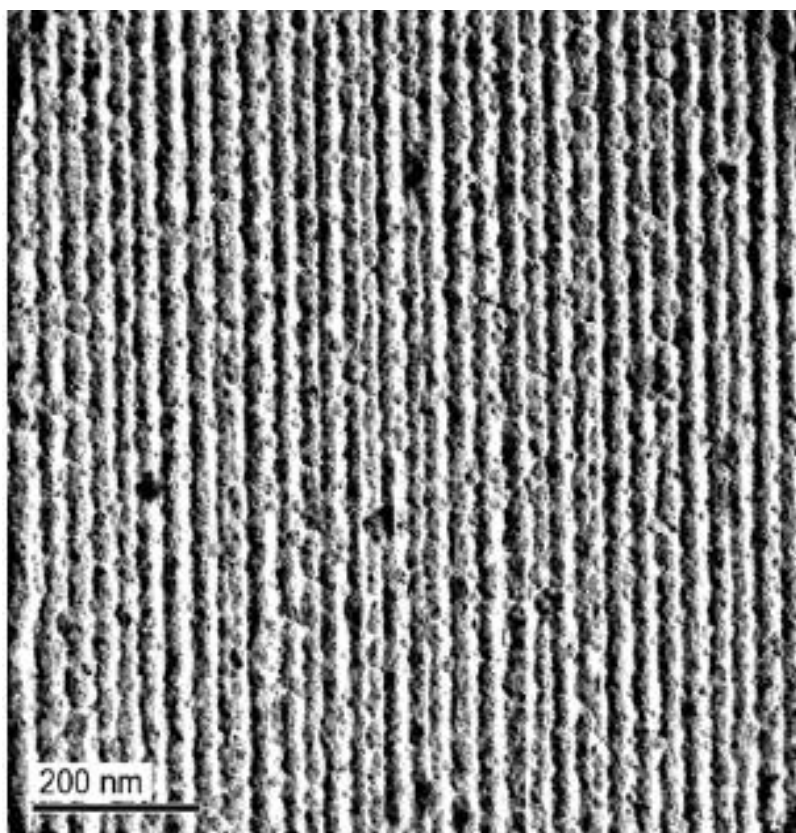


Рисунок 15. Горизонтальные нанонити Pt/Cu на подложке $NaCl$.

В работе [47] изучена структура горизонтальных квантовых нитей $Mo_6S_3I_6$. Исследование структуры пленок, содержащих горизонтальные квантовые нити, проводилась с использованием сканирующей туннельной микроскопии. Так, на рисунке 16 показана фотография поверхности, имеющей размеры 10×10 мкм. Толщина горизонтальных нанонитей составляет приблизительно 50 нм, а высота – 8 нм. Такие нанонити обладают уникальными оптическими свойствами, поэтому могут найти применение в оптоэлектронике и фотонике. Подобные результаты получены также в ряде других работ [30-33, 48-52].

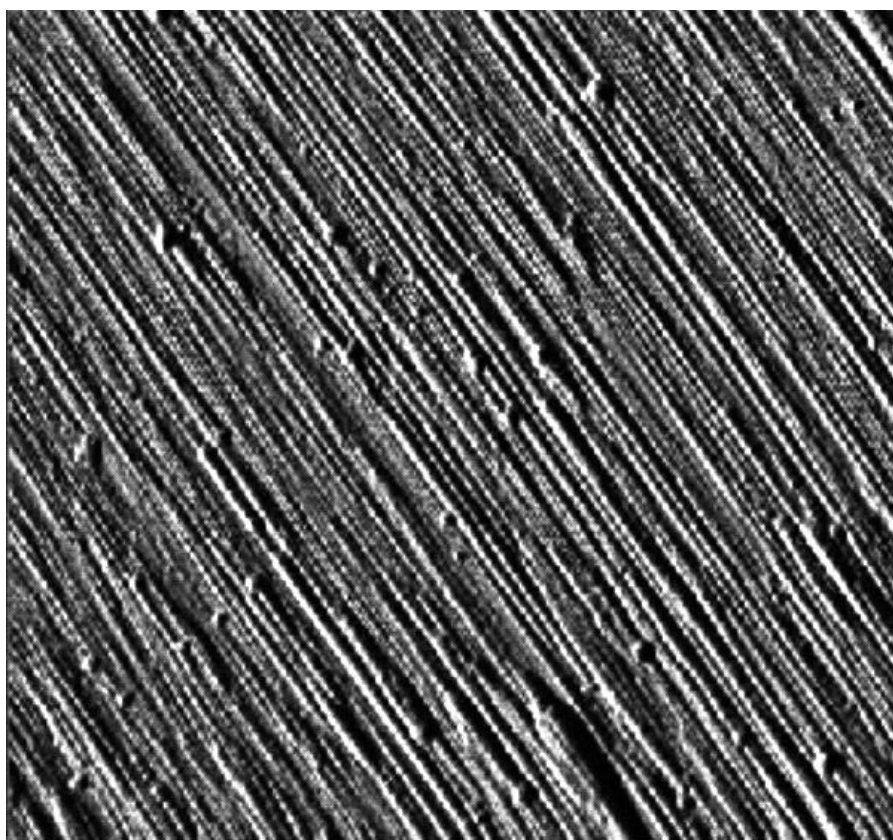


Рисунок 16. Горизонтальные квантовые нити $Mo_6S_3I_6$ на кварцевой подложке.

Следует ожидать, что если вертикальные нанонити могут дать непосредственный положительный эффект для оптимизации солнечных элементов, то горизонтальные нанонити могут применяться для управления электрическими, фотоэлектрическими свойствами структур.

Итак, на основе результатов экспериментов, полученных современными методами микроскопии, можно сделать вывод о нанокластерном строении тонких пленок и наличии самоорганизации, проявляемой в виде образования квантово-размерных структур, в том числе квантовых нитей.

Оптические свойства квантово-размерных структур

Экспериментальному и теоретическому исследованию оптических свойств полупроводников в последнее время посвящено большое количество работ, позволивших получить надежные сведения о физических свойствах различных полупроводниковых материалов. Именно на основании спектров оптического поглощения и отражения впервые были определены энергетические зазоры в запрещенных зонах полупроводников, обнаружена тонкая структура валентной зоны, получены сведения о фононном спектре кристаллов [34].

Оптический диапазон электромагнитного излучения находится в области от 0.01 до 2000 мкм и подразделяется на три поддиапазона: ультрафиолетовый (от 0.01 до 0.4 мкм), видимый (от 0.4 до 0.8 мкм), инфракрасный (от 0.8 до 2000 мкм). Оптический диапазон по механизмам взаимодействия с кристаллом может быть условно разделен на пять интервалов [53]. В первом, самом коротковолновом интервале особенности спектров поглощения и отражения связаны с возбуждением оптических переходов из глубоких зон в зону проводимости, во втором – с возбуждением электронов заполненной валентной зоны. В третьем интервале энергия, поглощаемая кристаллом, затрачивается на оптические переходы между абсолютными экстремумами валентной зоны и зоны проводимости. В четвертом интервале свет взаимодействует с кристаллом при помощи нескольких механизмов, главным из которых является процесс внутризонных оптических переходов, который в случае простой (вырожденной) зоны сводится к взаимодействию света со свободными носителями частично заполненной зоны. В пятом интервале механизмом, ответственным за поглощение, является процесс оптического возбуждения колебаний решетки. Этот механизм дает основную резонансную полосу, где коэффициент отражения близок к единице (полоса остаточных лучей), если возбуждается лишь пара оптических фононов (поперечный и продольный). При многофононном суммарном механизме возбуждения возникают более коротковолновые полосы, лежащие в четвертом интервале энергии. Слабые разностные полосы многофононного спектра поглощения расположены в более длинноволновой области относительно полосы остаточных лучей.

На рисунке 17 показаны спектры отражения $R(\omega)$ и поглощения $\alpha(\omega)$, которые могут быть разделены на пять интервалов. Сплошной линией показаны спектры для чистого кристалла, пунктиром – для сильнолегированного образца.

В первом интервале взаимодействие света с кристаллом обусловлено переходом электронов из d -зон в свободные состояния зоны проводимости (пик 1 соответствует энергии d -зоны), во втором – со свободными электронами в зонах (подобно металлам). В третьем интервале основной механизм взаимодействия – межзонные вертикальные и неvertикальные (с участием фононов) переходы. На границе третьего и четвертого интервалов (на краю основного поглощения) возможно возникновение экситонной линии 10 (или водородоподобной серии линий), линии 11, вызванной оптическим возбуждением комплексов, а также примесной полосы 12. Пики 2, 3, 4 соответствуют энергиям прямых (вертикальных) переходов между экстремальными точками зон. В четвертом интервале основной вклад дают внутризонные переходы (сплошной спектр 19, плазменный минимум 5 вблизи плазменного края 6) и фотоионизация примесных центров (совокупность линий 13). В пятом интервале и прилежащих к нему областях главный механизм взаимодействия с колебаниями решетки кристалла (так называемый однофононный резонанс) – это полоса остаточных лучей 8 с минимумом 7. Справа и слева от полосы 8 в спектре поглощения могут также возникать более слабые линии, которые обязаны своим происхождением испусканием или поглощением нескольких фононов (квантов колебаний кристаллической решетки) под действием кванта света. Пики 14 и 15 соответствуют суммарному механизму, когда под действием фотона испускается несколько фононов, а пики 16 и 17 – разностному механизму, когда под действием кванта света одновременно испускаются и поглощаются два или более фононов. Спектры отражения и поглощения в четвертом и пятом интервалах очень чувствительны к примесям и свободным носителям в кристалле. Край основного поглощения 18 у образца с большой концентрацией свободных носителей заряда сдвигается в более коротковолновую сторону, полосы 10, 11 и 12 маскируются сильным поглощением свободными носителями. Полоса остаточных лучей в спектре отражения образца с большой концентрацией свободных носителей также маскируется сильным (как в металлах) отражением и поглощением свободных носителей. Энергия особенностей 5 и 6 непосредственно связана с концентрацией и эффективной массой носителей заряда в кристалле.

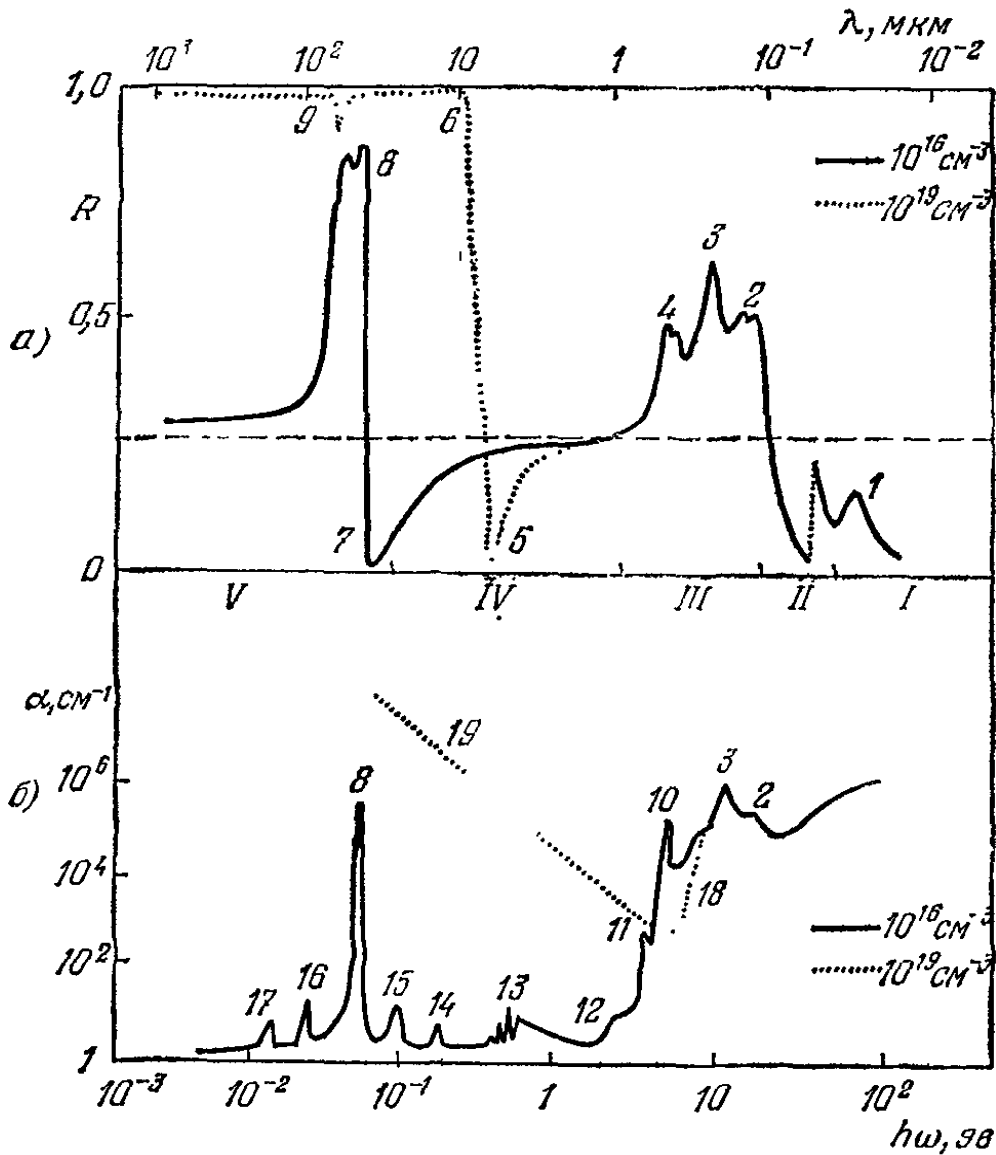


Рисунок 17. Схематические спектры отражения (а) и поглощения (б) чистого (сплошная линия) и сильнолегированного (пунктир) полупроводника.

Количество исследований оптических свойств полупроводников непрерывно растет, предлагаются новые методы, расширяется круг изучаемых материалов, для проведения экспериментов применяются более совершенные приборы. Ниже приведены результаты некоторых исследований по изучению оптического поглощения в полупроводниках.

На рисунке 18 показана тонкая структура спектра оптического поглощения в GaAs при 1.2 К [54]. Высота пика с $n=1$ ограничена люминесценцией.

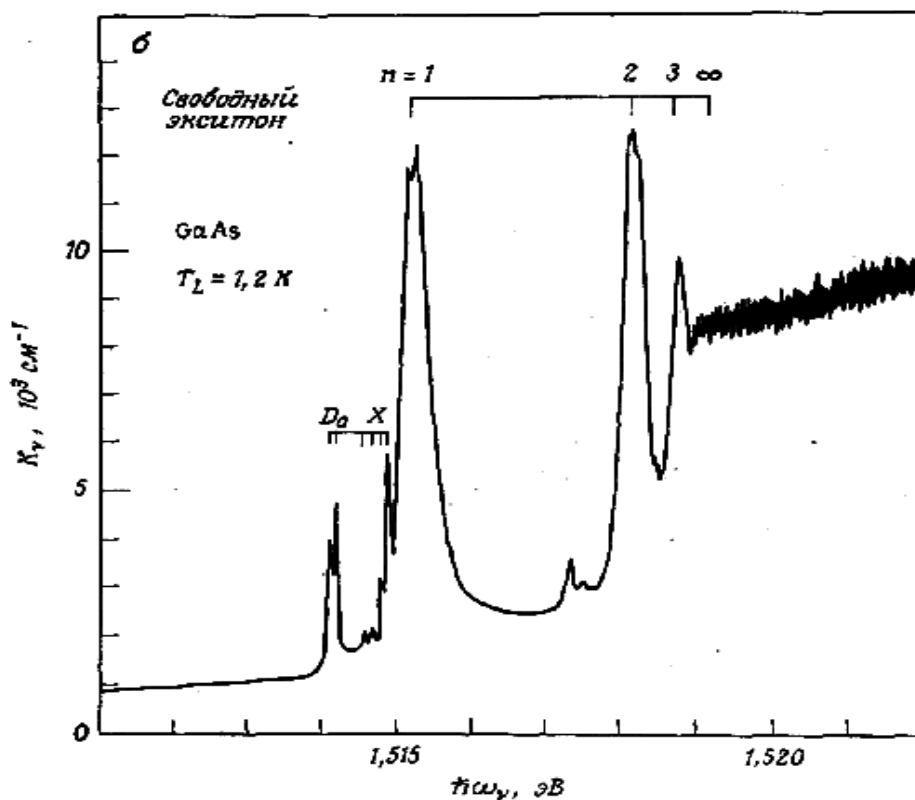


Рисунок 18. Экситонное поглощение в GaAs.

Особый интерес в последнее время представляет изучение оптических свойств новых материалов электроники – фуллеренов и нанотрубок. Так, в работе [36] исследовано оптическое поглощение галогенофуллерена $C_{60}Cl_{24}$. Галогенофуллерены образуются при соединении фтора, хлора или брома с C_{60} . Эксперимент показывает, что люминесценция $C_{60}Cl_{24}$ очень слаба, что указывает на значительную долю безызлучательных процессов (рисунок 19). „Провалы” в спектре люминесценции в диапазоне 1.69-1.76 эВ обусловлены эффектом реабсорбции излучения. Характер спектра поглощения указывает на ярко выраженный молекулярный характер кристалла $C_{60}Cl_{24}$.

В последних исследованиях обнаружены уникальные оптические свойства нанотрубок [35]. Поскольку нанотрубки представляют собой одномерные структуры, плотность электронных состояний в них существенно отличается от плотности состояний в обычных трехмерных полупроводниках. Плотность состояний нанотрубок характеризуется наличием резких „пиков” (особенностей ван Хофа) на краю энергетических зон. Это приведет к сильной осцилляции оптического спектра. Использование синтеза нанотрубок на наноструктурированной подложке позволило наблюдать интенсивную люминесценцию углеродных нанотрубок в воздухе при комнатной температуре (рисунок 20). Свечение вызывают именно одностенные нанотрубки.

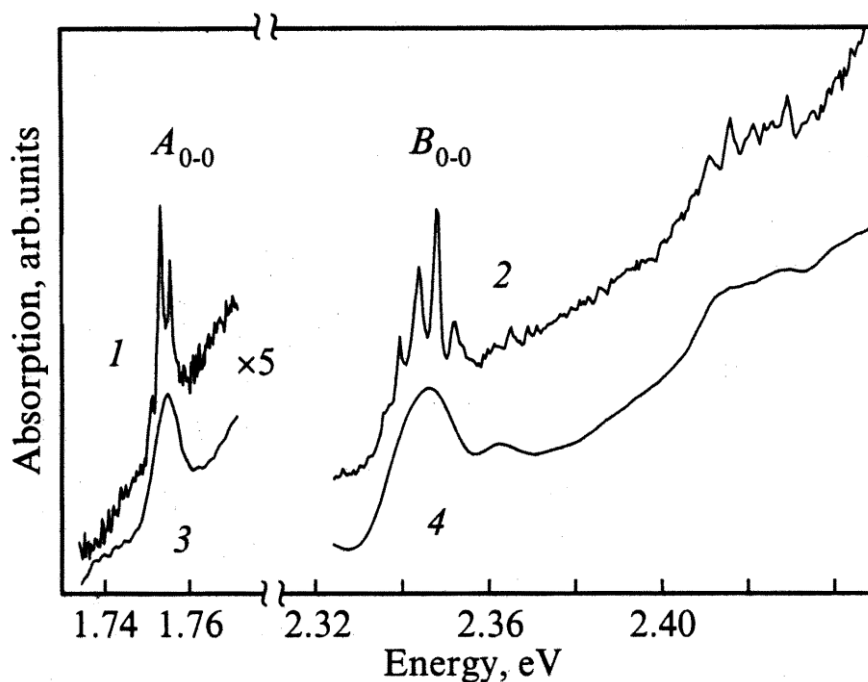


Рисунок 19. Тонкая структура линий поглощения А и В молекулы $C_{60}Cl_{24}$ в кристаллической матрице толуола (1, 2). В стеклообразной матрице толуола (3, 4) тонкая структура спектра отсутствует. $T = 80$ К.

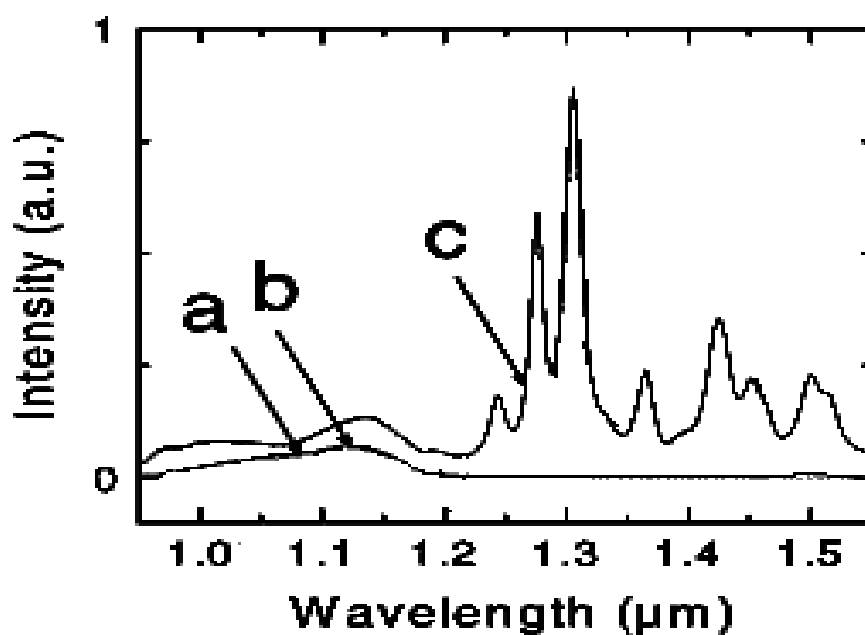


Рисунок 20. Спектр фотолюминесценции кремниевой подложки.
 а – спектр фотолюминесценции подложки без столбиков и нанотрубок;
 б – спектр фотолюминесценции подложки с выращенными на ней нанотрубками без столбиков;
 с – спектр микрофотолюминесценции подложки со столбиками и висящими между ними углеродными нанотрубками.

В работе [37] исследован антиферромагнитный полупроводник p -типа CuO . При создании дополнительных центров зародышеобразования при облучении монокристалла CuO электронами вызывает появление экспоненциального края фундаментального поглощения, изменение тонкой структуры на краю поглощения и рассеяние света на зародышах фазы полярных центров, образованных около радиационных дефектов. Результаты исследований приведены на рисунке 21.

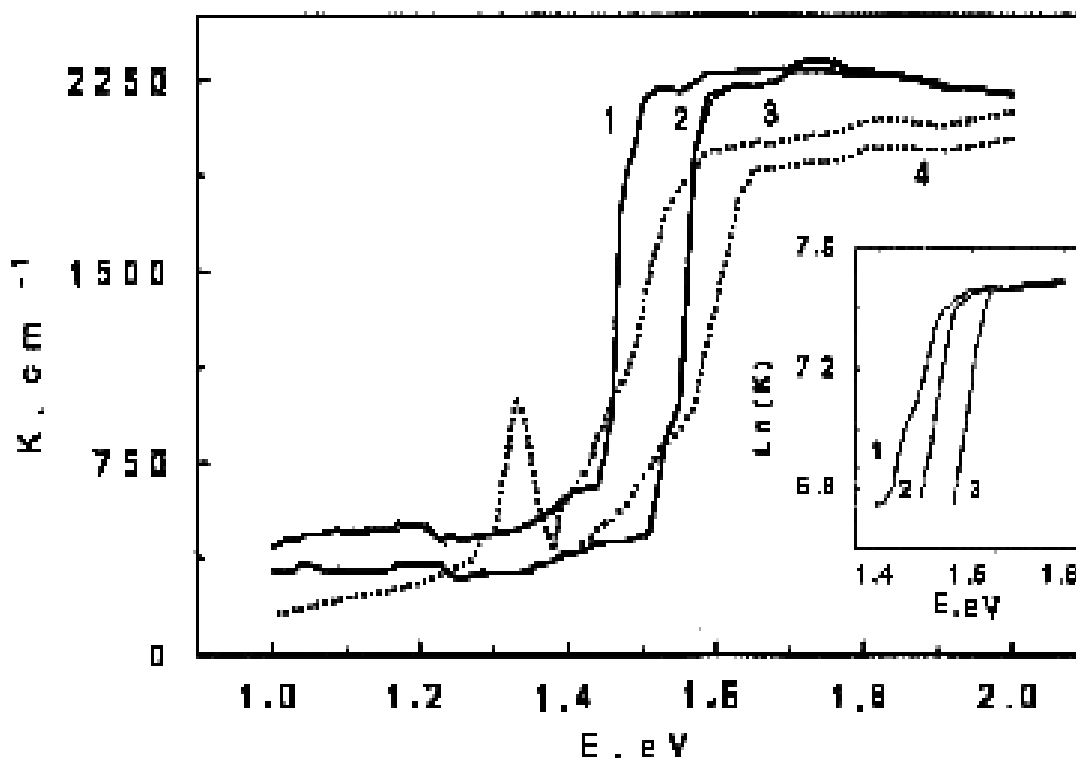


Рисунок 21. Спектр поглощения монокристалла CuO в естественном свете. 1, 2 – спектр до облучения, 3, 4 – спектр после облучения при температурах: 1, 3 – 300 К, 2, 4 – 80 К. На вставке – зависимость $\ln(K)$ от энергии фотона: 1 – $T=300$ К, 2 – 245 К, 3 – 80 К.

В работе [55] были исследованы спектры поглощения и термо-стимулированная люминесценция облученных кристаллов KBr с большим содержанием Na^+ . Спектр поглощения состоит всего из четырех полос поглощения, что объясняется подавлением дефектообразования: экситон распадается около примесного иона излучательно без создания дефектов.

В работе [56] описаны результаты облучения алмазоподобных образцов аморфного гидрогенизированного кремния фотонами. Образцы имели толщину порядка 300-400 нм. Эти образцы были выращены в газовой смеси: 80%– CH_4 и 20% – Ar при давлении 375 мТор и температуре 100°C. Получен фотолюминесцентный спектр (под действием Ar -лазера)

как при его возбуждении, так и при прекращении его работы. На рисунке 22 – HG-illumination – соответствует галогеновая лампа, дающая видимый свет, N-illumination – лазерное излучение. Авторами работы был сделан вывод, что излучение определенной энергии по-своему меняет свойства вещества, проведена аналогия с подобными эффектами, наблюдающимися в халькогенидных стеклах. По-видимому, это связано с изменением во внутреннем строении аморфных кремния и германия под действием облучения, эти изменения сводятся к появлению структурных состояний в виде длинных атомарных цепочек, характерных для халькогенидных стекол.

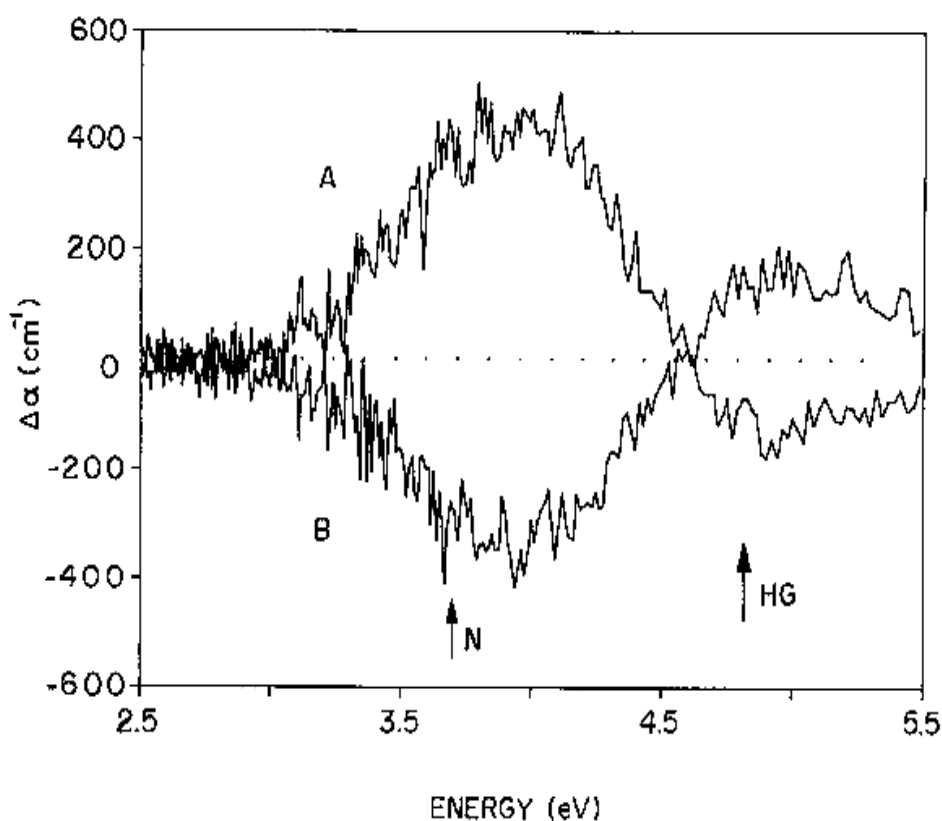


Рисунок 22. Спектр поглощения алмазоподобного образца аморфного гидрогенизированного кремния при облучении галогеновой лампой (A) и лазером (B).

Подобные осциллирующие спектры поглощения получены в ряде работ при легировании образцов, облучении их лазером, при приложении давления и т.д. [57-61]. Осциллирующие спектры наблюдаются также в том случае, если заселены высокоэнергетические состояния в разрешенных зонах. В частности, в объемных слоях GaN_xAs_{1-x} ($x \leq 0.015$) обнаружены энергетические состояния с полосой энергетических уровней в зоне проводимости [62]. Предполагается, что эти состояния связаны с различными кластерами атомов азота.

В реальном полупроводнике всегда содержится некоторое количество примесных атомов, неоднородностей, дефектов и т.д., которые образуют в запрещенной зоне локальные уровни, если концентрация центров невелика. Оптические переходы электронов между этими уровнями и зонами приводят к появлению примесного поглощения.

Экситонные механизмы оптических процессов

Полупроводниковые наноструктуры характеризуются рядом физических свойств, не свойственных макроскопическим объектам. Например, уникальность наноструктур проявляется в том, что резкие линии оптических спектров излучения и поглощения в них могут наблюдаться вплоть до комнатной температуры. Это обстоятельство позволяет использовать наноструктуры в качестве элементов для осуществления, например, лазерной генерации, что одновременно ведет к решению многих проблем, в частности, таких, как миниатюризация, увеличение интенсивности излучения, осуществление возможности плавной перестройки частоты излучения. Столь яркие особенности оптических спектров наноструктур обусловлены в первую очередь структурой их энергетического спектра, обеспечивающего существование долгоживущих возбужденных состояний, которые можно описать как возникновение и последующее уничтожение неких квазичастиц, называемых экситонами. Экситоны представляют собой электрически нейтральные системы, состоящие из электрона и дырки, удаленных друг от друга на расстояние в несколько постоянных решетки. Экситоны – это реально существующие квазичастицы. Так, в спектрах поглощения и люминесценции многих кристаллов появляются единственные собственные, не связанные с примесями и дефектами узкие полосы, обусловленные поглощением и излучением экситонов. Наличие в спектрах резких пиках указывает на экситонный характер оптических процессов. Экситонные уровни энергии находятся внутри запрещенной зоны вблизи дна зоны проводимости.

Экситоны сильной связи принято называть экситонами Френкеля, а экситоны слабой связи – экситонами Ванье-Мотта. В экситоне Френкеля электрон и дырка находятся возле одного из атомов и перемещаются под действием возмущения вместе к другому атому, поэтому для существования экситонов сильной связи наиболее оптимальные условия возникают в молекулярных кристаллах, где возбуждение молекулы ограничивается перераспределением электронов по молекулярным орбитам, которые существенно не перекрываются орбитами соседних молекул. В полупроводниковых кристаллах наиболее вероятной системой

является экситон слабого взаимодействия, образованный электроном зоны проводимости и дыркой валентной зоны. Энергетические уровни экситона находятся в запрещенной зоне. Поэтому учет несвязанных состояний электрон-дырка приводят к существенному изменению характера края основного поглощения, связанного с прямыми и непрямыми переходами.

Экситоны и их образования (биэкситоны, трионы) позволяют различать быстропеременную информацию, поэтому являются перспективными объектами исследований по нанoeлектронике. В наноразмерных полупроводниках реализуются более благоприятные условия для перекрытия волновых функций электрона и дырки, в силу этого энергия связи экситона будет значительно больше, чем в неограниченно однородной среде. Этот факт дает надежду на то, что квантовые биты от экситонов можно будет получать при достаточно высоких, даже комнатных температурах.

Экситоны и биэкситоны могут быть локализованы в квантовых точках. Квантовая точка может быть рассмотрена как частица полупроводника, ограниченная по всем трем пространственным координатам, имеющая наноразмеры, в которой проявляются квантовые эффекты. Для создания квантовых точек необходимо наличие трехмерной потенциальной ямы, в которой носители заряда оказываются запертыми по всем трем пространственным координатам.

Наличие квантовой ямы и запертых в ней электронов делает квантовые точки необычайно удобным объектом для целого ряда практических применений. Квантовые точки используются в полупроводниковых лазерах. Лазеры на квантовых точках обладают большим коэффициентом усиления, более высокой рабочей температурой, для них необходима меньшая пороговая плотность тока. На основе квантовых точек можно изготавливать светодиоды повышенной яркости, а также специальные покрытия для существующих источников света, корригирующие спектр излучения. Квантовые точки можно использовать практически во всех сферах, в которых нашли широкое применение современные полупроводниковые элементы, например, в области производства высокопроизводительных солнечных батарей, фотодиодов, фотодетекторов, одноэлектронных транзисторов. Также квантовые точки применяются в медицине (диагностирование поврежденных сосудов, аневризмы, опухолевые клетки). Наиболее многообещающим направлением исследования применения квантовых точек следует считать возможность создания на их основе квантовых компьютеров.

Есть ряд экситонных эффектов, которые зависят от размеров квантовой точки, содержащей экситон. Во-первых, чем меньше квантовая точка, тем ближе электрон к дырке (тем меньше радиус экситона) и тем

сильнее взаимодействие между ними, поскольку, как известно, потенциальная энергия кулоновского взаимодействия электрических зарядов уменьшается при увеличении расстояния между зарядами. А так как эта энергия имеет отрицательное значение, то уменьшается и полная энергия экситона. При помощи нанотехнологий можно менять размеры квантовых точек, а значит, управлять энергией экситонов, что позволяет создавать вещества с уникальными электронными и оптическими свойствами, которые могут быть использованы для создания новых устройств в информатике, фотонике и электронике. Во-вторых, вследствие сложения спинов электрона и дырки полный спин экситона может быть равен как 0, так и 1. При этом непосредственно при поглощении фотона может появиться лишь экситон со спином, равным нулю, а экситон со спином, равным единице, не может появиться, поскольку ввиду отсутствия у фотона механического момента движения такой процесс запрещен законами сохранения.

Как правило, из-за специфики технологических процессов (имплантация, диффузионная агрегация) наноразмерные полупроводники имеют нерегулярную, хаотическую структуру. При этом у них наблюдаются, хотя и на малом интервале масштаба измерения, фрактальные закономерности. Следовательно, свойства экситонов не могут быть универсальным образом описаны плавными закономерностями, вытекающими, например, из дифференциальных уравнений. Поэтому известная аналогия экситонов с водородоподобными атомами не может полностью описать специфику энергетического спектра экситонов в некристаллических полупроводниках с хаотической структурой [63]. К такому выводу также приводят экспериментальные работы [64, 65], в которых описывается наличие некоторого самоподобия, квантово-механической когерентности экситонов и биэкситонов и условия ее разрушения. В экспериментах [64-66] отмечается наличие когерентности экситонных и биэкситонных спектров.

Мы уже отмечали, что совместная реализация квантово-размерных эффектов и экситонных образований имеет повышенную вероятность. Поэтому в физике нанотехнологий экситоны являются необходимым объектом.

В настоящее время исследование оптических свойств квантовых нитей представляет особый интерес. В первую очередь это обусловлено разработкой новых эффективных приборов оптоэлектроники и фотоники – фотодетекторов, светодиодов, лазеров, фотоэлементов, сенсоров и т.д.

В работе [67] описаны исследования спектров фотолюминесценции нанонитей GaN . Так, на рисунке 23 приведен спектры фотолюминесценции квантовых нитей $GaN/(AlN/GaN)_{13}$ и GaN . Спектры характеризуются наличием ярко выраженного пика, положение максимума которого зависит от структуры квантовых нитей. На вставке рисунка 23 показаны фотографии квантовой нити $GaN/(AlN/GaN)_{13}$.

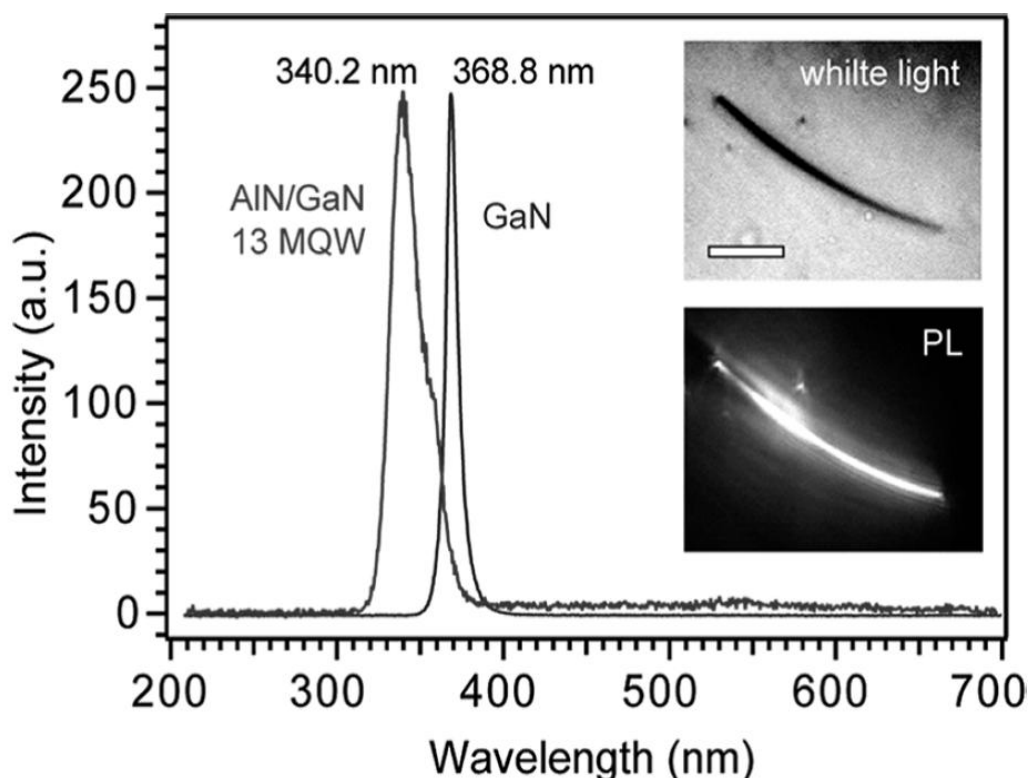


Рисунок 23. Спектры фотолюминесценции квантовых нитей $GaN/(AlN/GaN)_{13}$ и GaN .

Положение пиков и их количество в энергетическом спектре наноструктур может зависеть от наличия экситонных образований. В [68] приводятся результаты исследований по выращиванию рядов вертикальных квантовых нанонитей и изучен их спектр фотолюминесценции (рисунок 24). Наличие пиков в спектре фотолюминесценции авторы связывают с наличием экситонов в нанонитях и ярко выраженным эффектом квантового ограничения. Отмечено наличие аномальной зависимости динамики носителей заряда, выраженной в том, что при фотовозбуждении при низких температурах (порядка 10-80 К) носители захватываются локальными потенциальными ямами квантовых нитей.

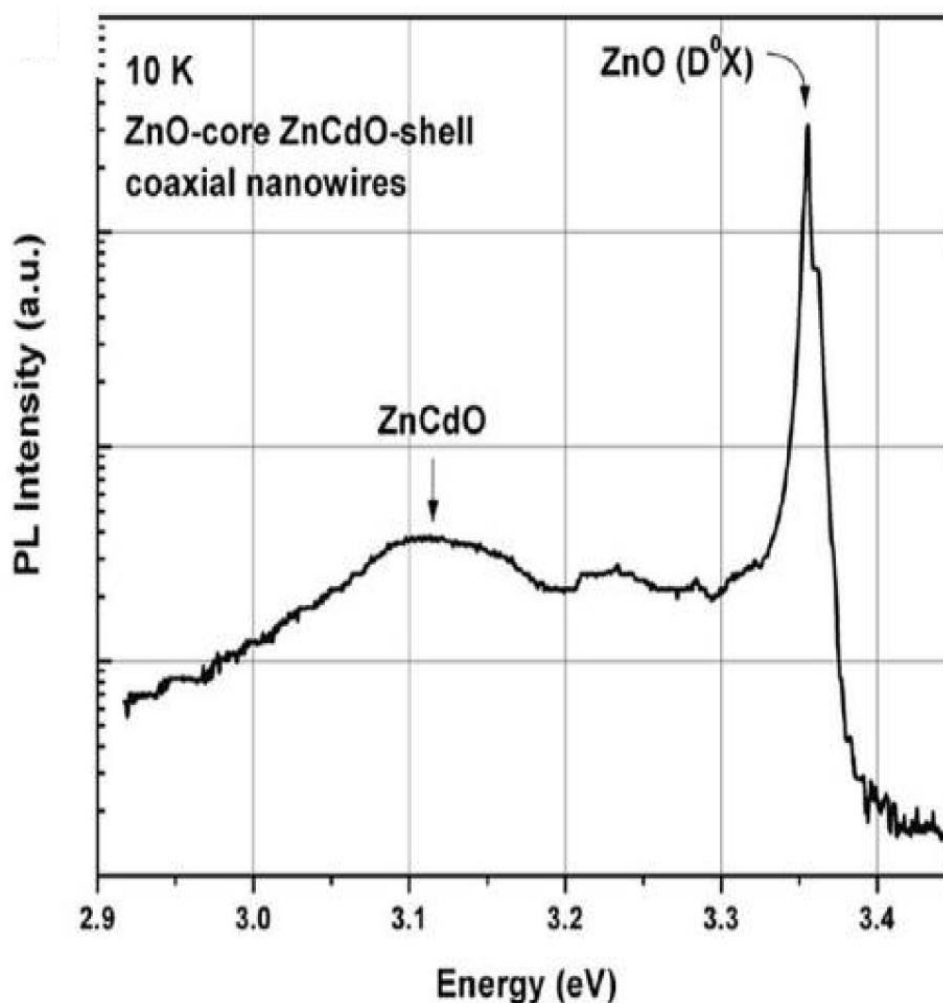


Рисунок 24. Спектр фотолюминесценции коаксиальных квантовых нитей $ZnO/ZnCdO$ при температуре 10 К.

Представляет интерес работа [69], посвященная изучению экситонной и биэкситонной люминесценции квантовых точек, внедренных в структуры одиночных квантовых нитей. Отмечено, что для фотозвуждения таких квантовых точек, имеющих высоту порядка 1 нм, требуется относительно небольшая энергия. Кроме того, изменение энергии возбуждения существенно изменяет спектр фотолюминесценции: при уменьшении величины энергии возбуждения пик в спектре фотолюминесценции смещается в стороны меньших энергий, в то время как осцилляции в спектре становятся менее заметными. Типичный спектр фотолюминесценции ансамбля нанонитей GaN , полученный в работе [69], представлен на рисунке 25. Эксперимент был проведен при температуре 5 К.

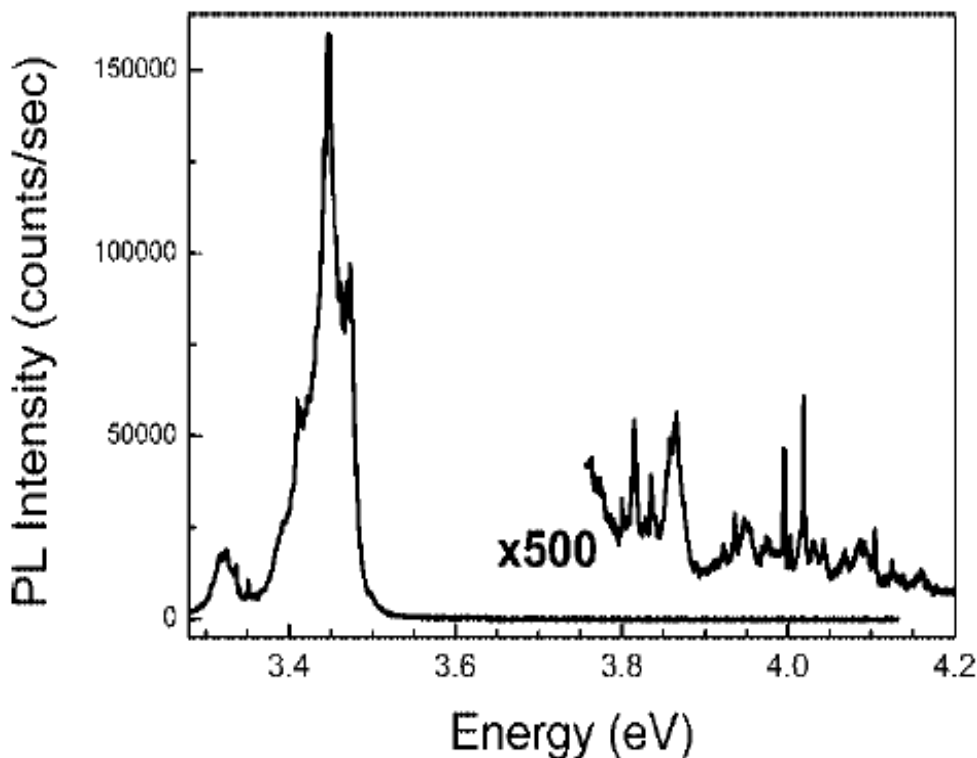
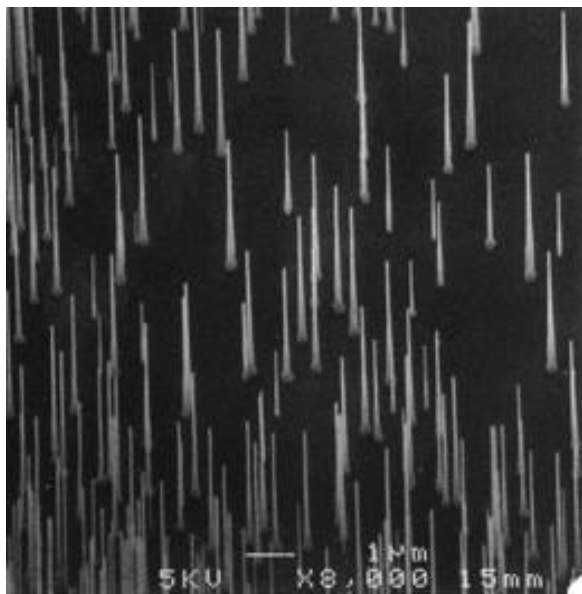


Рисунок 25. Спектр фотолюминесценции ансамбля нанонитей *GaN* при температуре 5 К.

Результаты, полученные в ряде современных экспериментальных работ, также показывают существенное изменение спектра энергии в тех случаях, когда характерные размеры наноструктур сравнимы с длиной волны излучения.

Так, морфология и оптические свойства нанонитей *ZnO* на кремниевой подложке, описаны в работе [70]. Авторами работы были выращены нанонити оксида цинка с заданными параметрами. Морфология поверхностей, содержащих квантовые нити, была исследована при помощи сканирующего электронного микроскопа. Также в работе были изучены спектры фотолюминесценции квантовых нитей различного диаметра. Полученные в эксперименте нанонити характеризуются приблизительно одной высотой. На рисунке 26(a) приведена фотография нанонитей *ZnO*, выращенных на кремниевой подложке, а на рисунке 26(b) – соответствующий спектр фотолюминесценции. Как видно из рисунка 26, эксперимент показал, что наибольшей интенсивностью фотолюминесценции характеризуются нити с меньшим диаметром.

(a)



(b)

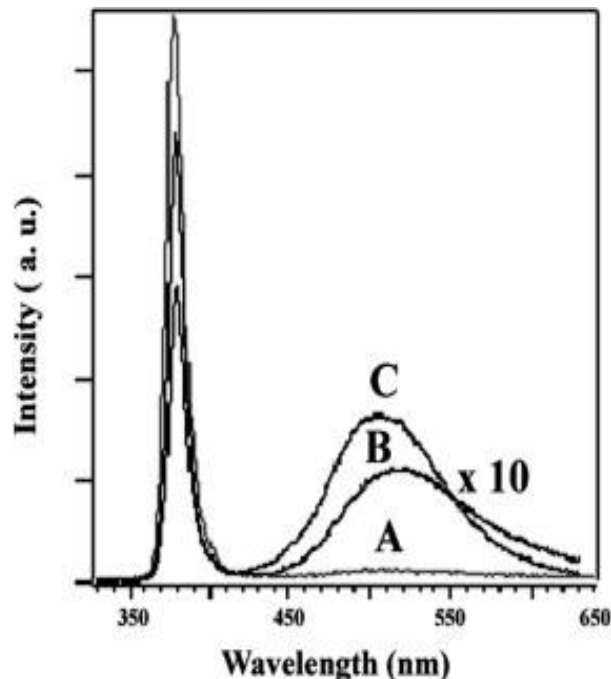


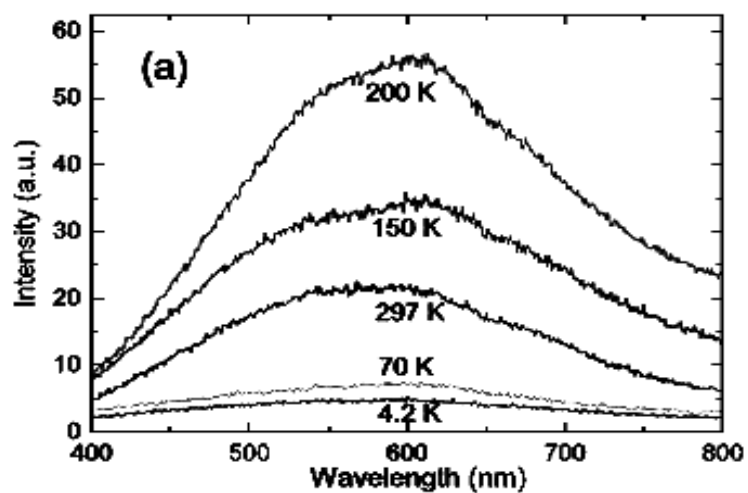
Рисунок 26. Нанонити ZnO на кремниевой подложке (a) и спектр фотолуминесценции нанонитей ZnO разного диаметра при комнатной температуре (b).

Спектры А, В и С получены от нанонитей диаметром 100, 50 и 25 нм соответственно.

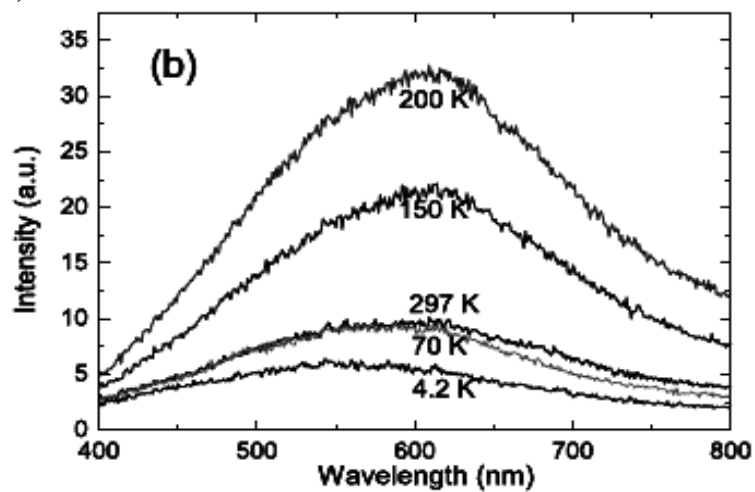
Работа [71] посвящена изучению оптического отражения рядов нанонитей Ni и Cu , а также сверхрешеток из рядов нанонитей. Спектры отражения были получены при разных температурах от 4.2 К до 297 К. Результаты исследования приведены на рисунке 27. Показано, что интенсивность отраженного излучения увеличивается с ростом температуры и для рядов квантовых нитей, и для сверхрешетки из рядов квантовых нитей. Также установлено, что положение максимума в спектрах отражения от температуры существенно не зависит.

В работе [72] описаны результаты исследования оптических свойств гетероструктур, образованных из нанонитей InP . На рисунках 28 и 29 показаны фотографии нанонитей InP с различным рельефом поверхностей, полученные при помощи просвечивающего микроскопа, а также соответствующие спектры фотолуминесценции. Измерения проводились при температуре 7 К. Показано, что спектры фотолуминесценции нанонитей различной морфологии существенно различаются друг от друга. Однако все спектры содержат осцилляции небольшой амплитуды, как правило, обусловленные наличием наноструктур.

(a)



(b)



(c)

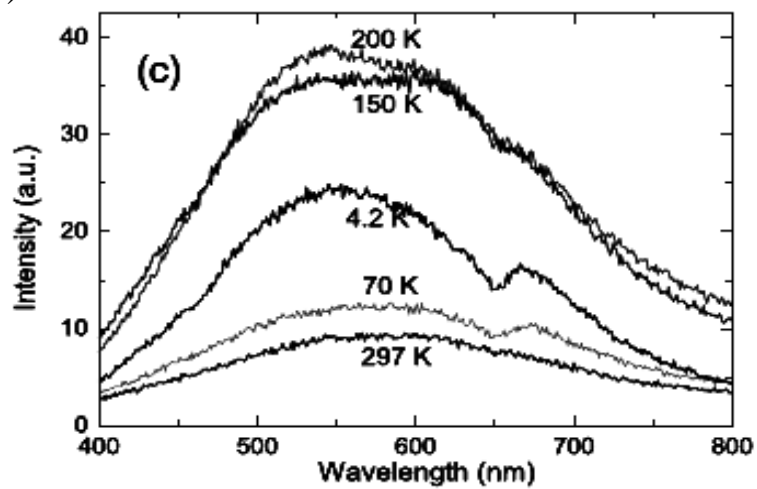


Рисунок 27. Спектры оптического отражения рядов нанонитей *Ni* (a), сверхрешеток *Ni/Cu* (b) и рядов нанонитей *Cu* (c).

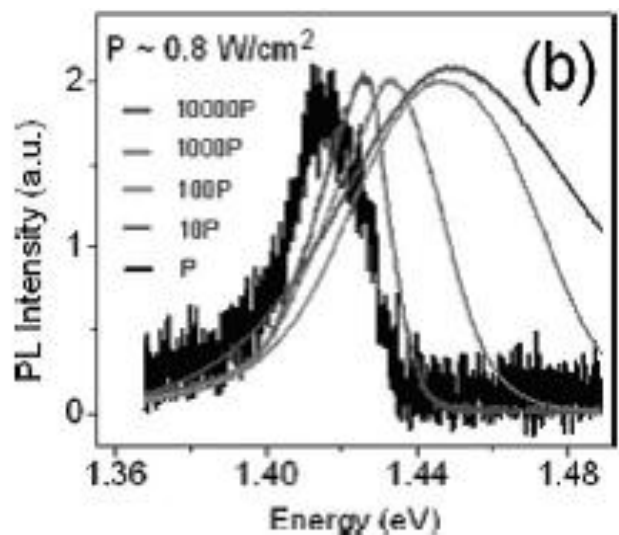
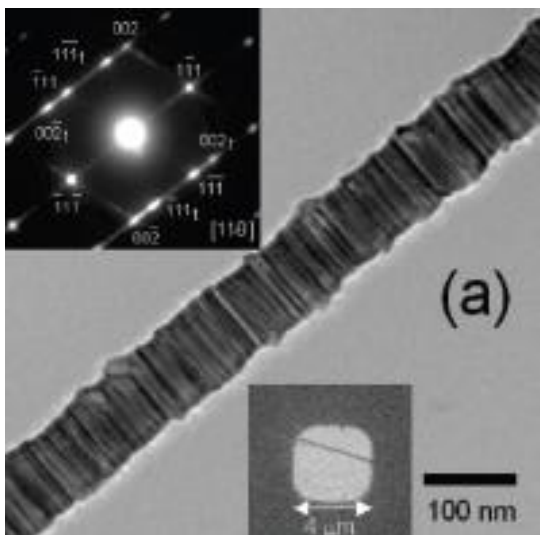


Рисунок 28. Нанонить *InP* с шероховатой поверхностью и ее спектр люминесценции при различных значениях интенсивности возбуждающего излучения.

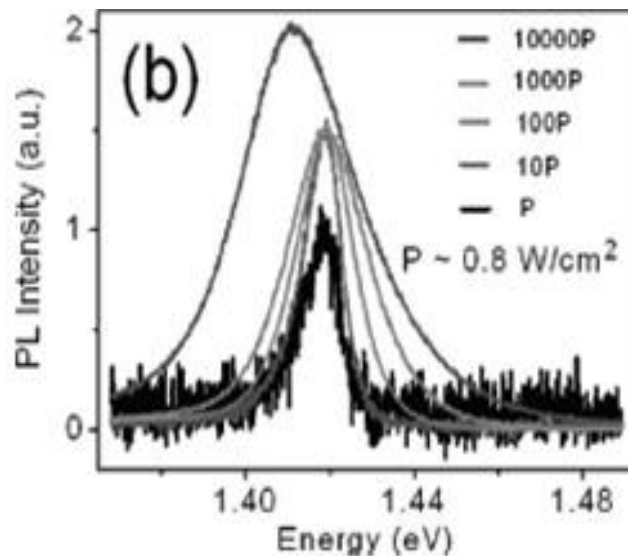
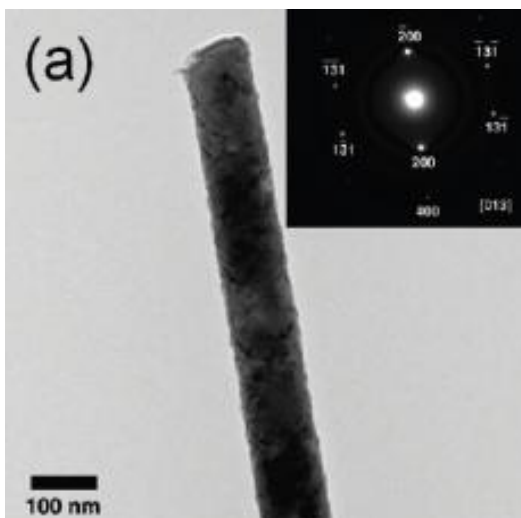


Рисунок 29. Нанонить *InP* с гладкой поверхностью и ее спектр люминесценции при различных значениях интенсивности возбуждающего излучения.

Исследованию структурных и оптических свойств *InGaN/GaN* гетероструктур из нанонитей посвящена работа [73]. В работе приведены фотографии ансамблей нанонитей (рисунок 30), полученные просвечивающей электронной микроскопией, а также изучено влияние температуры на фотолюминесценцию гетероструктур квантовых нитей при различных концентрациях *In* (рисунок 31). Как показали результаты исследования, чем выше содержание индия в образце, тем меньше влияет температура на расположение максимума в спектре фотолюминесценции. В этой работе был исследован температурный интервал от 7К до 300К, содержание индия в исследуемом образце варьировалось от 11% до 43%.

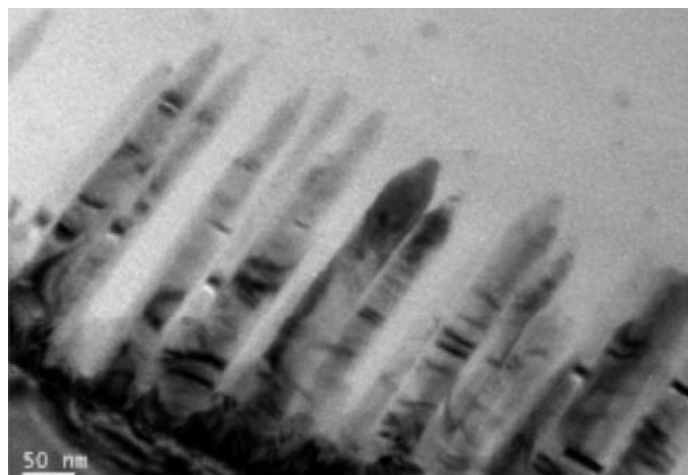


Рисунок 30. Ансамбль нанонитей с относительно низким содержанием индия (17%).

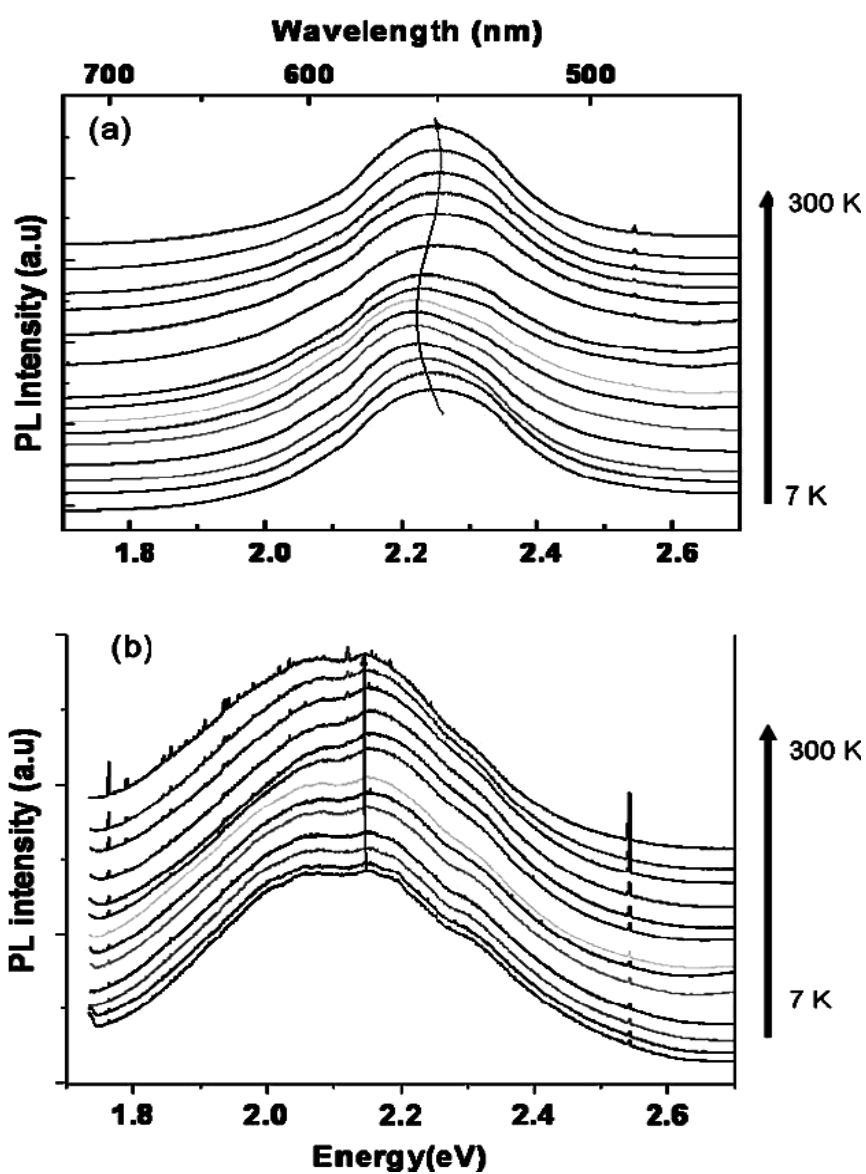


Рисунок 31. Температурная зависимость спектров фотолюминесценции образцов, содержащих нанонити, с различными концентрациями индия: (а) – 11%, (б) – 43%.

Явление локализации фотона в полупроводниках

Существуют, по крайней мере, две физические возможности взять под контроль процесс распространения света, используя законы его взаимодействия с рассеивающей средой [74-77]. Первая возможность контроля за процессом распространения света использует явление вынужденного комбинационного рассеяния и электромагнитной индуцированной прозрачности. Ввиду высокой плотности охлажденных атомов эта система изначально (в отсутствие контрольного импульса) рассеивает свет очень сильно. Высокий уровень охлаждения позволяет также добиться достаточно длительного (до нескольких миллисекунд) времени хранения записанного в данной системе квантового состояния. Процесс замедления распространения света и его «остановка» происходит следующим образом. Действие управляющего поля приводит к просветлению среды, но в сочетании с эффектом задержки – часть импульса не успевает выйти из среды, когда задний фронт импульса уже в нее вошел. Эта задержанная часть импульса может быть «остановлена» выключением управляющего поля, а впоследствии «восстановлена» после его повторного включения. При надлежащей оптимизации процесса таким способом удастся «остановить» и «восстановить» существенную часть импульса. Любопытным оказывается то, что часть рассеянного света также претерпевает задержку и в эксперименте может быть также «остановлена» и «восстановлена». Существует принципиально другая идея замедления распространения излучения в сильно рассеивающей свет среде. Наблюдая явление рассеяния в естественных условиях, можно заметить определенную аналогию между распространением света через среду и явлением диффузии.

Волновая природа света требует, чтобы сложение происходило для амплитуды волны, а переносимая светом энергия пропорциональна ее квадрату. Возникает так называемое явление интерференции, приводящее к тому, что в наблюдаемую интенсивность вклад дают амплитуды поля, прошедшие различные диффузионные пути. Если рассеяние слабое, как это бывает в естественных условиях, явление интерференции не играет принципиальной роли. Однако в случае сильного рассеяния оно способно кардинально повлиять на результат. На важность явления интерференции в распространении материальных волн, рассеиваемых случайными неоднородностями, впервые обратил внимание американский физик Ф. Андерсон в 1958 году [78]. Им было показано, что диффузия материальных волн, таких, как электроны, рассеиваемые на примесях в кристалле, при определенных условиях может быть существенно подавлена и даже приостановлена именно благодаря эффекту интерференции. Это явление впоследствии получило название андерсоновской локализации.

Серьезная трудность по наблюдению явления локализации в атомных системах связана с их тепловым движением. Атомы в обычных условиях движутся очень быстро. И хотя их скорость существенно меньше скорости света в вакууме, ее при обычных комнатных температурах более чем достаточно, чтобы разрушить интерференционную структуру рассеянных волн из-за эффекта Доплера.

Первое успешное наблюдение явления интерференции света в неупорядоченных холодных атомных ансамблях было осуществлено сравнительно недавно, в 1999 году, группой физиков университета Ниццы (Франция), руководимой профессором Робинотом Кайзером [79]. В работе [80] приведены результаты исследования оптических свойств нанокомпозитов, в том числе пористого кремния, фосфида галлия, оксида алюминия и структур на их основе. Обсуждается применимость модели эффективной среды для описания оптических свойств нанокомпозитов. Проанализированы эффекты локализации света, обусловленные рассеянием света в данных неоднородных средах. В неупорядоченных неоднородных оптических средах на основе пористых полупроводников длина свободного пробега фотона уменьшается с увеличением пористости, что проявляется как слабая локализация света. Данные об андерсоновской локализации света ближнего инфракрасного диапазона в порошках арсенида галлия на основе анализа распределения света в конусе рассеяния и зависимости интенсивности прошедшего излучения от толщины слоя приведены в [81]. Вместе с тем было показано, что результаты [81] могут быть объяснены при учете поглощения в среде [82]. Вопросы локализации света в трехмерных структурах были обсуждены в работе [83]. Изучению явления локализации света холодными атомами посвящен ряд работ [84-93]. Холодные атомы – это охлажденные лазерным светом до миллионных долей градуса выше абсолютного нуля. Исследованию распространения и локализации света в фотонных решетках посвящены работы [94-96]. Авторы работ описывают результаты экспериментального наблюдения дискретной дифракции, нелинейной локализации и последующего формирования пространственных солитонов и предлагают применять исследованные фотонные решетки в качестве оптоволокон, в телекоммуникационных системах, для формирования диаграммы направленности антенны, в биосенсорике. Наблюдению андерсоновской локализации света в трехмерных структурах посвящена также работа [97]. Отмечено отклонение от законов классической диффузии, которое авторы работы связывают с возможностью локализации света в веществе. Несоответствие законам классической диффузии, отмеченное в этой работе, невозможно объяснить наличием поглощения и флуоресценции. Вопросы создания управляемой локализации света при

помощи наноантенн были рассмотрены в работе [98]. Свет локализуется в очень маленьких по размерам диэлектрических зазорах между металлическими элементами. В работе [99] описаны результаты исследования структурных и оптических свойств кремниевых нанонитей с диаметром порядка 100 нм и длиной от 1 до 25 мкм. В частности, в работе отмечено наличие эффекта локализации света в таких наноструктурах.

Особый интерес представляют метаматериалы – композиционные материалы, свойства которых обусловлены не столько свойствами составляющих его элементов, сколько искусственно созданной периодической структурой. Метаматериалы синтезируются внедрением в исходный природный материал различных периодических структур с самыми различными геометрическими формами, которые модифицируют диэлектрическую и магнитную восприимчивости исходного материала. Метаматериалы характеризуются так называемым отрицательным коэффициентом преломления, который проявляется при одновременной отрицательности диэлектрической и магнитной проницаемостей. Благодаря тому, что метаматериалы обладают отрицательным показателем преломления, они идеальны для маскировки объектов, так как их крайне сложно обнаружить средствами радиоразведки. Исследованию оптических свойств и применения метаматериалов посвящен ряд работ [74, 100-108].

Выше приведен обзор некоторых современных работ, посвященных исследованию оптических свойств полупроводников, а также морфологии их поверхностей. Наибольшая часть выполняемых в этом направлении работ носит экспериментальный характер. Пока отсутствует детальное сопоставление существующих теоретических подходов с экспериментом, в общем случае известные теории полностью не описывают сложное экспериментальное поведение неравновесной концентрации носителей тока в зависимости от температуры, коэффициента оптического поглощения от энергии фотона, фонона, экситона и морфологии поверхностей полупроводниковых тонких пленок и т.д. Кроме того, эксперименты, проведенные при помощи современных высокочувствительных приборов, показывают наличие осцилляций, скачков в спектрах поглощения и фотолюминесценции, что не описывается классическими формулами. Следовательно, существует необходимость создания теоретических моделей, описывающих электрофизические и оптические свойства полупроводников, неоднородного, перемежаемого распределения носителей тока в полупроводниках, морфологию поверхностей полупроводниковых тонких пленок и анализа современных экспериментальных данных путем сопоставления их с теорией. Эти вопросы определяют цель следующих разделов настоящей работы.

ГЛАВА 2

ФРАКТАЛЬНАЯ ПРИРОДА РАСПРЕДЕЛЕНИЯ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА В НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

Критерии самоподобия и самоаффинности динамического хаоса

Большое количество последних научных достижений в физике твердого тела, электронике связаны с изучением динамического хаоса, в общем плане – нелинейной физикой. Основное содержание нелинейной физики определяет вопросы статистической физики открытых нелинейных систем, обменивающихся с внешней средой веществом, энергией и информацией. В принципе все физические явления нелинейные, если их рассматривать достаточно детально. Однако нелинейная физика устанавливает наиболее общие понятие, свойства и закономерности сложных систем. При описании открытых нелинейных систем используются такие понятия, как фрактал, мультифрактал, а также странный аттрактор, бифуркация, динамический хаос, перемежаемость, информация и энтропия, самоорганизация.

Одним из основных понятий нелинейной физики является понятие динамической системы. Под динамической системой понимают любой объект или процесс, для которого однозначно определено понятие состояния как совокупности некоторых величин в данный момент времени и задан оператор, описывающий эволюцию начального состояния во времени. Динамические системы – это механические, физические, химические и биологические объекты, вычислительные системы и системы преобразования информации. Математическая модель динамической системы считается заданной, если введены параметры (координаты) системы, определяющие однозначно ее состояние, и указан эволюционный оператор, позволяющий решать задачу определения изменения состояния во времени. Наиболее универсальные результаты были получены путем анализа колебаний динамической системы с помощью

графического представления в фазовом пространстве. Этот метод приобрел еще большее значение, когда были обнаружены колебания сложного вида, т. е. динамический хаос.

В диссипативной системе элемент фазового объема сжимается в процессе эволюции во времени. Предельное множество фазовых траекторий динамической системы всегда имеет нулевой объем. В частности, предельное множество может быть точкой, линией, поверхностью или совокупностью поверхностей, которые образуют канторову структуру в сечении Пуанкаре. Важными с физической точки зрения являются притягивающие предельные множества – аттракторы. Представляют интерес так называемые странные аттракторы. Слово "странный" подчеркивает два свойства аттрактора. Это, во-первых, необычность его геометрической структуры. Размерность странного аттрактора является дробной (фрактальной). Во-вторых, странный аттрактор – это притягивающая область для траекторий из окрестных областей. При этом все траектории внутри странного аттрактора динамически неустойчивы, что выражается в сильной (экспоненциальной) расходимости близких в начальный момент траекторий.

Дальнейшее развитие современных технологий нуждается в знании физических закономерностей, например, наноструктур, сверх высокочастотных (гигагерцовых) хаотических сигналов, ансамбля нейронных сетей. Несмотря на разнообразную сложность перечисленных объектов и процессов, у них может проявляться единое общее свойство – масштабная инвариантность. Это означает отсутствие необходимости в параметрах с размерностью, например, длины. Масштабная инвариантность проявляется в виде самоподобия (коэффициенты подобия одинаковы по всем переменным) и самоаффинности (коэффициенты подобия различны по разным переменным). Общее название процессов различной природы с такими свойствами – самоорганизация материи и ее движения. Теорию самоорганизации называют синергетикой.

Самоорганизацию также называют возникновением порядка из хаоса при выполнении условий нелинейности, неравновесности, незамкнутости. Поэтому для простоты мы будем говорить об инвариантных свойствах хаотических процессов.

В качестве количественных характеристик хаоса обычно используют информационную энтропию и фрактальную размерность множества значений физических величин. Более детальной характеристикой динамического хаоса является энтропия Колмогорова-Синяя, учитывающая неоднородность элементов фазового пространства. Известная теорема И. Пригожина утверждает, что при самоорганизации производная энтропии по времени стремится к минимуму. По теореме Ю. Климонтовича [109]

при самоорганизации энтропия уменьшается, если сравнение произвести при одинаковых значениях энергии.

Однако непосредственный точный расчет энтропии Колмогорова-Синяя технически не реализуется, упомянутые теоремы не отвечают на вопросы: каков минимальный прирост энтропии, насколько она уменьшается при самоорганизации? Также не выяснена связь между энтропийными критериями самоподобия и самоаффинности с фрактальными размерностями, характеризующими соответствующие хаотические процессы. Ниже описаны результаты поиска ответов на эти вопросы.

Информационные критерии масштабной инвариантности

Понятие информации широко используется в кибернетике, генетике, социологии. Развитие синергетики, физики открытых систем требует универсального определения информации, пригодного для использования в различных отраслях науки. Само определение открытой системы содержит понятие информации: открытой системой называется система, обменивающаяся с внешней средой веществом, энергией, информацией.

Обычно определение сложного понятия формируется через перечень его основных свойств. Информация $I(x)$ статистической реализации некоторой физической величины x является положительной величиной и определена при наличии неравновесности ($I(x) \neq I(x_0)$), если $x \neq x_0$. Если $P(x)$ является вероятностью появления величины x , то выражение для количества информации

$$I(x) = -\ln P(x) \quad (1)$$

описывает эти свойства. Повторяемость и неравновесность процесса учитывается условием $0 < P(x) < 1$. С точки зрения различных наук предложено много определений информации. Формула (1) совместима со всеми этими определениями.

При наличии некоторого условия y информацию определяют через разность безусловной и условной энтропий:

$$I(x/y) = S(x) - S(x/y). \quad (2)$$

Эта формула используется для технических задач, например, для оценки пропускной способности каналов связи. Однако сама информационная энтропия $S(x)$ является средним значением информации:

$$S(x) = \sum_i P_i(x) I_i(x) = - \sum_i P_i(x) \ln P_i(x), \quad (3)$$

где i – номер ячеек разбиения множества значений x . Поэтому формулу (1) мы примем за основное определение информации.

Таким образом, хотя нет универсального определения информации, она используется для описания явлений различной природы. Поэтому возможен другой новый подход к теории информационных явлений. Можно принять за определенную независимую переменную саму информацию. Выражая статистические характеристики процесса через информацию, можно искать новые свойства информации, например, масштабно-инвариантные свойства.

После этого можно говорить о вероятности реализации информации $P(I)$ согласно формуле (1):

$$P(I) = e^{-I}. \quad (4)$$

Для плотности вероятности $f(I)$ имеем формулы

$$0 \leq P(I) \leq 1, \quad 0 \leq I \leq \infty, \quad \int_0^{\infty} f(I) dI = 1, \quad P(I) = \int_I^{\infty} f(I) dI, \quad f(I) = P(I) = e^{-I}. \quad (5)$$

Функция вероятности реализации информации $P(I)$ совпадает с функцией распределения плотности вероятности $f(I)$. Именно информация, определенная по формуле (1), обладает масштабной инвариантностью: часть и целое имеют одинаковый закон распределения. Информационную энтропию распределения значений информации $S(I)$ определяем как среднее значение информации:

$$S(I) = \int_I^{\infty} I f(I) dI = (1+I) e^{-I}. \quad (6)$$

Для $0 \leq I \leq \infty$ имеем $1 \geq S \geq 0$, т.е. энтропия нормирована на единицу. Известно, что энтропия непрерывного множества при скачкообразном

изменении переменных бесконечна и поэтому интеграл вычисляется в смысле Лебега путем введения некоторой меры. В качестве меры мы приняли саму информацию и получили результат (6).

Воспользуемся известным функциональным уравнением, которому удовлетворяет некоторая характерная функция $g(x)$ с масштабнo-инвариантным свойством:

$$g(x) = \alpha g(g(x/a)), \quad (7)$$

где α – масштабный множитель. Любая непрерывная функция в своей неподвижной точке удовлетворяет уравнению (7). Принимая в качестве характерных функций $f(I)$ и $S(I)$, определим их неподвижные точки:

$$f(I) = I, \quad e^{-I} = I, \quad I = I_1 = 0.567, \quad (8)$$

$$S(I) = I, \quad (1+I)e^{-I} = I, \quad I = I_2 = 0.806. \quad (9)$$

Эти неподвижные точки являются единственно устойчивыми, так как они являются также и пределами бесконечных отображений, достигаемых при любых начальных значениях I_0 :

$$I_{i+1} = f(I_i), \quad \lim_{i \rightarrow \infty} \exp(-\exp(\dots - \exp(I_0)\dots)) = I_1, \quad (10)$$

$$I_{i+1} = S(I_i), \quad \lim_{i \rightarrow \infty} \exp(-\exp(\dots - \exp(\ln(I_0 + 1) - I_0)\dots)) = I_2, \quad (11)$$

где число скобок равно $i+1$.

Возможны различные толкования физического смысла чисел $I_1 = 0.567$, $I_2 = 0.806$. Плотность вероятности является локальной (мгновенной) характеристикой, поэтому она может быть различной по разным переменным и число I_1 можно принять за критерий самоаффинности. Энтропия – усредненная характеристика, поэтому число I_2 является критерием самоподобия.

С другой стороны, числа I_1, I_2 могут быть рассмотрены как аналоги числа Фибоначчи $I_{20} = 0.618$ (“золотого сечения” динамической меры), соответственно, для статистических самоаффинных и самоподобных систем. Действительно, из формулы (9) при $I \lesssim 1$ имеем

$$(1+I)(1-I)=I, I^2+I-1=0, I=I_{20}=0.618, \quad (12)$$

также при $I \ll 1$ из (9) имеем $e^{-I}=I, I=I_1=0.618$. Мы видим, что закономерности подобия самоаффинности, динамического равновесия, самоподобия систем описываются одной формулой (9).

Связь чисел I_1, I_2 с фрактальными и мультифрактальными размерностями специальных множеств и энтропией Колмогорова-Синя рассмотрим отдельно.

Энтропия Колмогорова-Синя фрактальных множеств

Пусть $\vec{x}(t) = \{x_1(t), \dots, x_m(t)\}$ – траектория динамической системы на странном (фрактальном) аттракторе и m – мерное фазовое пространство разделено на ячейки размера l^m . Если P_{i_0, \dots, i_n} – совместная вероятность того, что $\vec{x}(t=0)$ находится в ячейке i_1 , $\vec{x}(t=\tau)$ – в ячейке i_2 , ..., $\vec{x}(t+(n-1)\tau)$ – в ячейке i_n , τ – интервал времени измерения состояния системы, то энтропия Шеннона определяется как

$$S_n = - \sum_{i_1, \dots, i_n} P_{i_1, \dots, i_n} \ln P_{i_1, \dots, i_n}. \quad (13)$$

Энтропия Колмогорова-Синя S (KS-энтропия) определяется как средняя скорость потери информации [110]:

$$S = \lim_{\tau \rightarrow 0} \lim_{l \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N\tau} \sum_{n=1}^N (S_{n+1} - S_n) = - \lim_{\tau \rightarrow 0} \lim_{l \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N\tau} \sum_{n=1}^N P_{i_1, \dots, i_N} \ln P_{i_1, \dots, i_N}. \quad (14)$$

В случае дискретности шага по времени принимается $\tau=1$ и предел $\tau \rightarrow 0$ опускается. По смыслу τ представляет собой характерное время и нелинейно зависит от l .

Естественно поставить вопрос: существует ли постоянное определенное значение KS-энтропии? Прежде всего необходимо выяснить условия постоянства произведения $N\tau$ для масштабно – инвариантных пространственных и временных явлений.

По определению фрактальной размерности D некоторой фрактальной меры $N(l)$, зависящей только от одного масштаба измерения самоподобного множества имеем

$$N(l) = l^{-D}, \quad D = \lim_{l \rightarrow 0} \frac{\ln N(l)}{\ln 1/l}. \quad (15)$$

Мы можем выбрать в качестве $N(l)$ число переменных иерархической системы на этапе эволюции с минимальным характерным масштабом l . Самоаффинные множества переменных различной природы (например, координаты и времени) описываются показателем Херста H (H называется также показателем аффинности):

$$\frac{R}{\sqrt{\langle x^2(t) \rangle}} = \tau^H, \quad R(\tau) = \max_{1 \leq t \leq \tau} x(t, \tau) - \min_{1 \leq t \leq \tau} x(t, \tau). \quad (16)$$

Для чисто стохастического броуновского движения $H = 1/2$. Для хаотических явлений $1/2 < H < 1$. Известны формулы

$$D = 1/H, \quad D = 2 - H \quad (17)$$

соответственно для самоподобных и самоаффинных случаев, которые следуют из требования масштабной инвариантности обобщенного (“дробного”) броуновского движения [111].

Принимая безразмерную переменную l в виде $l = (\langle x^2(t) \rangle)^{1/2} / R$ из формул (15), (16), (17) получим

$$N\tau = l^{-D} l^{-1/H} = l^{-2D} = N^2, \quad \tau = N. \quad (18)$$

Как ожидалось, самоподобие достигается при равенстве выбранных безразмерных масштабов времени и количества переменных. В этом случае можно принять $\tau = 1$.

Для самоаффинного случая имеем

$$N\tau = l^{-D} l^{-1/(2-D)} = l^{-D_*}, \quad D_* = D + 1/(2-D), \quad (19)$$

где D_* может иметь смысл некоторого эффективного значения фрактальных размерностей самоаффинного множества. Отсюда следует возможность связи KS-энтропии с фрактальными и мультифрактальными характеристиками.

Из формулы Реньи для мультифрактальной размерности меры $N(q, l)$ имеем

$$D_q = \lim_{l \rightarrow 0} \frac{1}{q-1} \frac{\ln N(q, l)}{\ln l}, \quad N(q, l) = \sum_{i=1}^N P_i^q(l), \quad (20)$$

где q – порядок мультифрактального момента. Если дополнительно учесть переходы к пределам для случая $i = (i_1, \dots, i_N)$, $N \rightarrow \infty$, $\tau \rightarrow 0$, то из формулы (20) при $q \rightarrow 1$ получим

$$D_{q \rightarrow 1} = D_1 = \lim_{l \rightarrow 0} \frac{S(l)}{\ln 1/l} = S_1, \quad (21)$$

где $S(l)$ – выражение (14), записанное без указания предела $l \rightarrow 0$. В многомерном случае $S(l)$ вычисляется через суммирование по индексам i_1, \dots, i_N .

Далее, чтобы сопоставить S_1 и S_{KS} мы выясним возможности равенства величин $N\tau$ и $\ln 1/l$. Для этой цели учтем, что самоаффинность характеризуется множеством значений фрактальной размерности D_i , $i=1, 2, \dots$. Тогда нормированное по D_{*i} значение $(N\tau)_*$ определяется как $l^{-D_*} / \sum_i l^{-D_{*i}}$. В случае непрерывного спектра D_* имеем

$$(N\tau)_* = l^{-D_*} / \int l^{-D_*} dD_* = \ln 1/l. \quad (22)$$

Эти рассуждения показывают возможность $S_{KS} = S_1$.

С другой стороны, из известной теории мультифрактальной спектральной функции $f(\alpha(q))$ следует

$$f(\alpha(q)) = q\alpha(q) + \tau(q), \quad \tau(q) = (1-q)D_q, \quad \alpha(q) = -\frac{d\tau(q)}{dq}, \quad (23)$$

$$\alpha(q=1) = \alpha_1, \quad f(\alpha(q=1)) = f_1, \quad D_1 = \alpha_1 = f_1 = S_1.$$

где α – показатель сингулярности ячейки множества (показатель Липшица-Гёльдера), $f(\alpha)$ – фрактальная размерность множества ячеек с одинаковыми значениями α . По самому определению фрактальные характеристики D_1, α_1, f_1 не зависят от l , следовательно, S_1 тоже не зависит от l .

Таким образом, KS-энтропия, вычисленная по нормированному значению $N\tau_*$ равна самоподобному значению (неподвижной точке) информационной энтропии, т.е. числу I_2 . Критерий I_1 является неподвижной точкой функции плотности вероятности информации (“локальной энтропии”), поэтому является самоаффинным значением KS-энтропии.

Приложения критериев самоподобия и самоаффинности

Интервал значений нормированной энтропии Шеннона $I_1 \leq S_n/S_{n_{\max}} \leq I_2$ определяет самоорганизованный процесс, включая его режимы самоаффинности и самоподобия. Этот факт облегчает физический анализ хаотических сигналов в наноэлектронике, астрофизике, биофизике и т.д. Для одномерного сигнала $S_{n_{\max}}$ равно энтропии равнобедренного треугольного импульса. В многомерном случае можно использовать нормированную мультифрактальную спектральную функцию $f(\alpha_1) = \alpha_1$ вместо S_n , т.к. $f_{\max}(\alpha) = D_0$ и Хаусдорфова размерность D_0 вычисляется стандартными алгоритмами.

Числа I_1, I_2 определяют фрактальные меры самоаффинных и самоподобных явлений. Под мерой понимаем количественную характеристику любого аддитивного и измеримого множества. Фрактальная мера определяется как

$$M = M_0 l^{-(D-d)} = M_0 l^{-\gamma}, \quad (24)$$

где d – топологическая размерность носителя меры, M_0 – нефрактальная (регулярная) мера. Определим значения $\gamma = D - d$ через I_1, I_2 . Примем обозначения d_{\max} – наибольшее целочисленное значение D , $D_{\max} = d_{\max} + 1$, $I_* = (I_1, I_2)$. Возможны случаи

$$D_{\max} = d_{\max} + I_*, \gamma = D - d = d_{\max} - d + I_*, d = 0, 1, 2, 3; \quad (25)$$

$$D_{\max} = D_{\max} - I_* = d_{\max} + 1 - I_*, \gamma = d_{\max} - d + 1 - I_*, d = 0, 1, 2, 3. \quad (26)$$

Формула (25) применима при “наружной” фрактализации, т.е. при расположении фрактальной меры вне регулярной меры. Этот случай можно рассматривать также как одномерный безусловный случай, соответствующий безусловным вероятностным процессам. При этом вместо D можно пользоваться информационной размерностью $D_1 = S_1 = I_2$. Согласно формуле (23) D_1 удовлетворяет условию самоподобия. Формула (26) соответствует “внутренней” фрактализации. Появление слагаемого $1 - I$ можно обосновать, рассматривая размерность горизонтального сечения хаотического объекта [111].

Формулу (26) можно обосновать также из следующих рассуждений. Дробная часть фрактальной размерности равна минимальной информации, определенной в единицах $1/l$:

$$D - d_{\max} = \log_{1/l} N(l) / \log_{1/l} 1/l = -\log_{1/l} P(l) = I. \quad (27)$$

С другой стороны, в формуле (2) безусловная энтропия $S(x)$ всегда больше, чем условная энтропия $S(x/y)$, и, нормируя все величины на $S(x)$, имеем

$$I = 1 - S, \quad D - d_{\max} = 1 - I_*, \quad (28)$$

где приняты масштабно-инвариантные значения $S = I_*$.

Общее число возможных значений γ для формулы (25) определяется как

$$N_\gamma = \sum_{i=1}^4 \sum_{j \leq i} \sum_{k=1}^2 (d_{\max, i} - d_j) = 2 \sum_{i \geq j=1}^4 (d_{\max, i} - d_j) = 2 \sum_{n=1}^4 n = 2 \frac{4(4+1)}{2} = 20. \quad (29)$$

Такое же значение N_γ дает формула (26). Если использовать также значение числа Фиббоначи, т.е. принять $I_* = (I_1, I_2, I_{20})$, то $N_\gamma = 30$. I_{20} имеет смысл переходного значения I_* от I_1 к I_2 .

Таким образом, мы имеем возможность использовать 20 точных значений фрактальной размерности D для каждого типа (внешней к внутренней фрактализации) задач. Если учесть, что определение фрактальной размерности D представляет отдельную задачу и известные методы ее определения из опыта обеспечивают точность, не превышающей порядка одного процента, то использование чисел I_1, I_2 значительно облегчает эту проблему.

Приведем примеры использования формул (25), (26). Пусть необходимо моделировать, или описать эксперименты по оптике квантовых нитей на поверхности. Тогда $d_{\max} = 2$, $d = 1$, по формуле (25) имеем $\gamma = 1 + 0.567$ для самоаффинного процесса, $\gamma = 1 + 0.806$ для самоподобного процесса. Если необходимо описать электрические явления в среде, то следует пользоваться формулой (26).

Выводы настоящей работы можно проверить, вычисляя энтропию Колмогорова-Синяя для различных фракталов. Геометрические фракталы являются удобными моделями иерархической динамической системы, так как каждое поколение фрактала можно сопоставить эволюционному уровню.

Мы выделим два варианта сравнения теории с численным экспериментом. Первый подход может быть основан на вычислении энтропии только для одного звена фрактала по формуле (6).

$$S = (1 + I) e^{-I} = (1 + D \ln 1/l) e^{-D \ln 1/l}, \quad (30)$$

где, в отличие от формулы (27), информация определена через натуральный логарифм.

Второй подход предполагает вычисление KS-энтропии по формуле (14) для множества n поколений фрактала. При этом, чтобы учесть влияние точности вычисления δ , необходимо нормировать энтропию на ее максимальное значение S_{\max} :

$$S_{\max} = (1 + D \ln 1/\delta) e^{-D \ln 1/\delta}. \quad (31)$$

На рисунке 32 представлена зависимость $S(D)$ согласно формуле (30). Названия фракталов общепринятые [1]. Согласно формуле (17) при $D > 1.5$ имеем $H < 1.5$ (случаи отсутствия вероятностного поведения процесса) и необходимо пользоваться согласно (28) информацией вместо энтропии. Эти замены указаны стрелками. Расхождения $S > I_2$ связаны с тем, что этот график получен для дискретной модели одного звена, а критерии I_1, I_2 получены по теории непрерывных изменений энтропии.

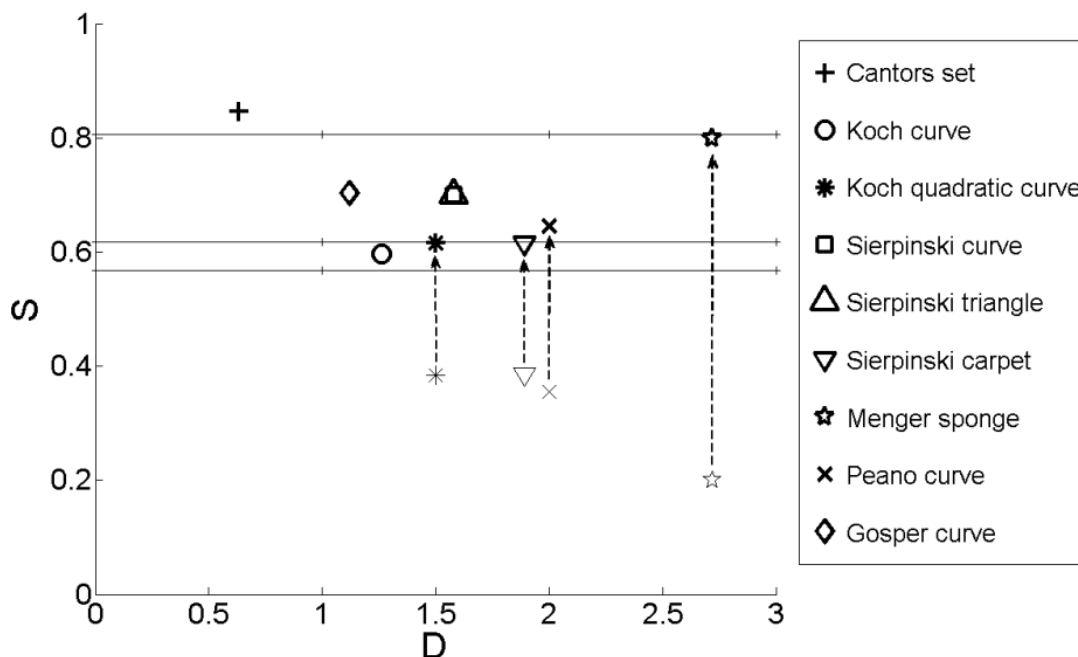


Рисунок 32. Нормированные энтропии одного звена модельных фракталов.

Более близкие результаты к теории можно ожидать при использовании второго подхода, так как в этом случае мы рассматриваем множество фрактальных звеньев, у которых более четко проявляются статистические закономерности.

Таким образом, хаотические процессы и объекты могут быть количественно классифицированы на самоаффинные и самоподобные. Соответствующие критерии I_1, I_2 являющиеся значениями энтропии Колмогорова-Синяя, определяют характерные фрактальные меры. Существование этих критериев масштабной инвариантности также доказывается соответствующей обработкой результатов экспериментальных исследований хаотических процессов различной природы (турбулентность, радиоизлучение Солнца, оптическое излучения переменных звезд и др.).

Температурная зависимость концентрации и кинетика носителей заряда в наноструктурированных полупроводниках

Уравнение для описания масштабно-инвариантных (скейлинговых) закономерностей в одномерном случае получим приравнивая соотношение дифференциалов к соотношению конечных разностей. Для учета нерегулярной структурности процесса необходимо принять условие Липшица-Гёльдера, ограничивающее производную через дробный показатель степени приращения аргумента $\alpha < 1$. Этот показатель мы примем в виде $\alpha = 1 - \gamma_0$, где γ_0 – фрактальная размерность множества точек разбиения оси аргумента. При $\gamma_0 = 0$ мы имеем обычную производную. После этого производную концентрации носителей тока в полупроводнике N по температуре T запишем в виде [63]

$$\frac{dN(T)}{dT} = \pm \frac{\delta_N}{(T_* - T)^{1-\gamma_0}}, \quad (32)$$

где δ_N – минимальный масштаб измерения величины N , T_* – критическая температура наступления фазового перехода. В формулу (32) концентрация и температура входят в безразмерном виде относительно некоторых характерных масштабов. Знак «минус» («плюс») соответствует положительной (отрицательной) разности $\delta_N = N(T) - N(T_*)$. Для фрактальной меры $N(T)$ запишем

$$N(T) = N_0(T) \delta_N^{-(D-d)}, \quad (33)$$

где d – топологическая размерность ячейки (структуры) с масштабом δ_N , D – фрактальная размерность множества всех ячеек, $N_0(T)$ – равновесная (не фрактальная) концентрация носителей тока. Исключая δ_N из формул (32) и (33), получим

$$\frac{dN(T)}{dT} = \pm (T_* - T)^{\gamma_0-1} \left(\frac{N(T)}{N_0(T)} \right)^{-\frac{1}{D-d}}. \quad (34)$$

Неравновесные концентрации $N(T_0)$ задаются через параметры D , d и γ_0 .

Переходя к новым безразмерным переменным

$$n_0 = \frac{N_0}{N_*}, \quad n = \frac{N}{N_*}, \quad N_* = N(T_*), \quad n_* = 1, \quad \theta = \frac{T - T_0}{T_* - T_0},$$

$$\theta_*(n) = \frac{T_*(n) - T_0}{T_*(n_0) - T_0}, \quad \theta_*(n_*) = 1, \quad (35)$$

запишем формулу (34) в виде

$$\frac{dn(\theta)}{d\theta} = \pm (\theta_*(n) - \theta)^{\gamma_0 - 1} \left(\frac{n(\theta)}{n_0(\theta)} \right)^{-\frac{1}{\gamma_i}}, \quad (36)$$

$$\gamma = D - d, \quad \gamma_i = D - i, \quad i = d_i = 0, 1, 2, 3.$$

Уравнение (36) определяет неравновесную концентрацию $n(\theta)$ для состояний с параметрами γ_i , γ_0 и известным распределением $n_0(\theta)$. Это уравнение может быть использовано относительно других переменных, например, подставляя τ вместо θ в уравнение (36), получим уравнение для изменения концентрации n по времени t :

$$\frac{dn(\tau)}{d\tau} = \pm |\tau_*(n) - \tau|^{\gamma_0 - 1} \left(\frac{n(\tau)}{n_0(\tau)} \right)^{-\frac{1}{\gamma_i}}, \quad \gamma_i = D - i, \quad i = d_i = 0, 1, 2, 3, \quad (37)$$

где $\tau = \frac{t}{t_*}$, $\tau_*(n) = \frac{t_0}{t_*}$, t_0 – минимальное значение времени стабилизации,

$t_* = t_0$ при $\theta = \theta_*$.

Для количественной градации состояний сложной системы можно использовать различные значения d – топологической размерности каскадно-деформируемого элемента. Имеем по определению для самоподобных состояний:

$$D = d + \gamma, \quad \gamma = \{0, I_{20}, I_2\}, \quad d = \{0, 1, 2, 3\}$$

$$D = \{0, I_{20}, I_2; 1, 1+I_{20}, 1+I_2; 2, 2+I_{20}, 2+I_2; 3, 3+I_{20}, 3+I_2\}. \quad (38)$$

Из всех равновесных состояний, характеризующихся $d = \{0, 1, 2, 3\}$, возможны 20 переходов в неравновесные состояния с показателем скейлинга γ (дробной частью D), равным I_{20} , I_2 и 4 перехода из неравновесного в неравновесное, 6 переходов из неравновесного в равновесное состояния.

Схематически эти переходы показаны на рисунке 33 как зависимость фрактальной размерности наноструктурированного полупроводника от относительной концентрации носителей тока n .

В тонкой полупроводниковой пленке с током основное равновесное состояние электронов достигается при $d = 2$, поэтому для этого случая принято $n = 1$. Скачкообразные изменения состояния (концентрации множества электронов) соответствуют фазовым переходам второго рода.

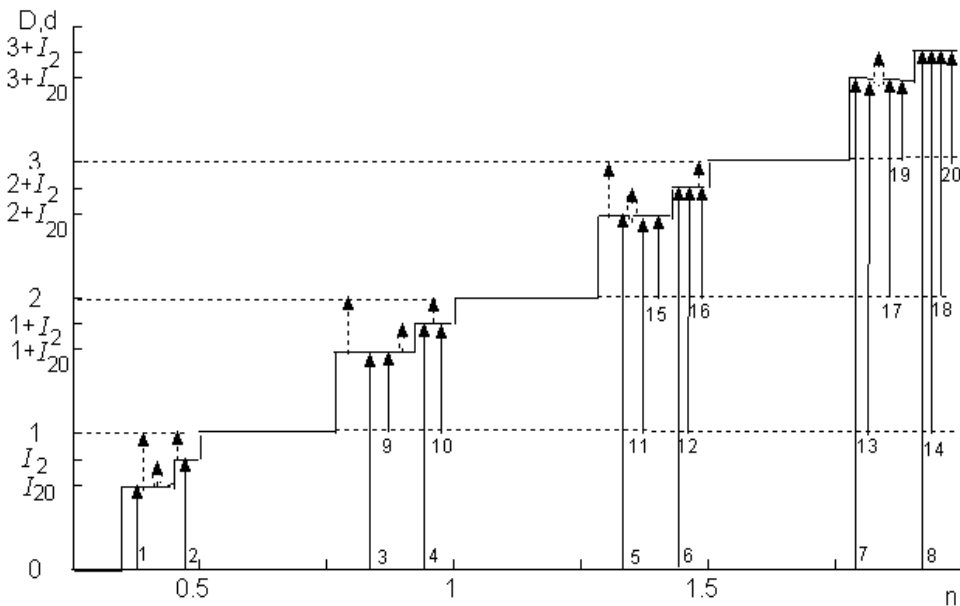


Рисунок 33. Схематическая зависимость изменения фрактальной размерности полупроводника от относительной концентрации носителей заряда, $n = N / N_*$, где N_* – концентрация, соответствующая фазовому переходу.

Типы фазовых переходов:

- – равновесно-неравновесные,
- – неравновесно-равновесные,
- – неравновесно-неравновесные.

Для выяснения характера зависимости $\theta_*(n)$, входящей в уравнение (36), определим неравновесную концентрацию $n(\gamma_0)$ через равновесную и неравновесную составляющие как

$$n(\gamma_0) = n_* \pm n(\delta, \gamma_0), \quad n_* = 1, \quad n(\delta, \gamma_0) = \delta^{-\gamma_0}, \quad \delta > 0, \quad (39)$$

При выборе $\gamma_0 = I_{20}$ знак «+» соответствует равновесно-неравновесному, а при $\gamma_0 = I_2$ – неравновесно-равновесному переходам. Свойство масштабной инвариантности рассматриваемых явлений дает возможность принять выражение и для δ в новых относительных масштабах также в виде формулы (39), определяющей неравновесную величину $\tilde{\delta}$:

$$\lim_{\delta \rightarrow \tilde{\delta}} n(\delta, \gamma_0) = \tilde{n}(\gamma_0), \quad \tilde{\delta} = 1 + \tilde{n}(\gamma_0),$$

$$\tilde{n}(\gamma_0) = \frac{1}{(1 + \tilde{n}(\gamma_0))^{\gamma_0}}, \quad \tilde{n}(\gamma_0)(1 + \tilde{n}(\gamma_0))^{\gamma_0} = 1. \quad (40)$$

Зная концентрации в состояниях с известными значениями $\gamma = \gamma_0$, мы можем определить $n(\gamma)$ для γ , где γ – произвольное значение дробной части фрактальной размерности:

$$n(\gamma_0) = \delta^{-\gamma_0}, \quad n(\gamma) = \delta^{-\gamma}, \quad n(\gamma) = n(\gamma_0), \quad \delta^{\gamma_0 - \gamma} = n(\gamma_0)^{\frac{\gamma}{\gamma_0}}. \quad (41)$$

Температура не является аддитивной мерой, поэтому ее нельзя представить в виде формул (41). Однако мы можем искать разность критических температур $\Delta\theta_* = \theta_*(n_*) - \theta(n) > 0$, которую можно выразить через

$$\Delta n = n(\gamma) - n(\gamma_0). \quad (42)$$

Воспользовавшись только первым членом разложения $\theta_*(n)$ и используя исходное уравнение (36) при условии $n(\theta_*) = n_*(\theta_*) = n_0(\theta_*)$ для определения первой производной, имеем

$$\Delta\theta_* = \left| \Delta n \right|_{\gamma_0}^{\frac{1}{\gamma_0}}. \quad (43)$$

Зависимость критической температуры от концентрации имеет максимум при $n = n_*$.

Рассмотрим кинетику установления временного равновесия концентрации носителей с различной фрактальной (неравновесной) структурой согласно уравнению (37). При заданной температуре для релаксации концентрации по времени примем наиболее простой закон

$$dn(\theta, \tau) = -n(\theta, \tau)\tau, \quad n(\theta, \tau) = n_0(\theta)e^{-\tau}, \quad n_0(\theta) = n(\theta, \tau = 0). \quad (44)$$

Нам необходимо установить закон изменения по $\tau_0 = t_0/t_*$ по температуре. Для определенности воспользуемся критической температурой θ_* , устанавливаемой после отжига образца полупроводника. Фрактальное поведение температуры можно выразить через связь ее разности с разностью концентрации. Воспользовавшись формулой (43), имеем

$$\Delta\theta_* = |\Delta n|_{\gamma_0}^{\frac{1}{\gamma_0}} = |\Delta n_0|_{\gamma_0}^{\frac{1}{\gamma_0}} e^{-\frac{\tau_0}{\gamma_0}}, \quad \Delta n_0 = n_0(\gamma) - n_0(\gamma_0) = n_0(\gamma_0)^{\frac{\gamma}{\gamma_0}} - n_0(\gamma_0), \quad (45)$$

где $n_0(\gamma_0)$ – неравновесное значение концентрации, ближайшее к $n_0 = 1$.

Для определенности можно принять $n_0(\gamma_0) = \tilde{n}(I_1)$ или $n_0(\gamma_0) = \tilde{n}(I_2)$.

В зоне проводимости равновесное распределение электронов по энергиям описывается формулой [112]

$$N_0 = N_c \frac{2}{\pi^{1/2}} \int_{\frac{E_c}{kT}}^{\infty} \frac{\left(\frac{E - E_c}{kT}\right)^{1/2} d\left(\frac{E}{kT}\right)}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right)}, \quad N_c = 2 \left(\frac{m_c kT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}, \quad (46)$$

где N_c – эффективная плотность состояний, m_c – эффективная масса, E_F – уровень Ферми электронов в зоне проводимости, T – абсолютная температура, k – постоянная Больцмана.

Для случая $N_0 \ll N_c$, приближенно записывая формулу (46), и, используя условие полной электрической нейтральности, имеем квадратное уравнение относительно N_0 :

$$\frac{N_0(N_a + N_0)}{N_d - N_a - N_0} = \frac{1}{2} N_c \exp\left(-\frac{E_d}{kT}\right), \quad (47)$$

где E_d , N_d – энергия и число электронов донорного уровня, N_a – число электронов акцепторного уровня.

Вводя новые переменные – относительные энергии и концентрации

$$\varepsilon_F = \frac{E_F}{kT_*}, \quad \varepsilon_d = \frac{E_d}{kT_*}, \quad \varepsilon_c = \frac{E_c}{kT_*}, \quad n_a = \frac{N_a}{N_*}, \quad n_d = \frac{N_d}{N_*}, \quad (48)$$

из (47) найдем равновесную концентрацию

$$n_0(\theta) = \frac{N_0}{N_*} = \frac{1}{2} \left\{ -n_a - A(\theta) + \left[(n_a + A(\theta))^2 + 4A(\theta)(n_d - n_a) \right]^{1/2} \right\}, \quad (49)$$

$$A(\theta) = B\theta^2 \exp\left(-\frac{\varepsilon_d}{\theta}\right).$$

где B – постоянная, содержащая эффективную массу электронов.

Подставляя (49) в уравнения (36) и (37), мы можем анализировать зависимости $n(\theta)$ и $n(\tau)$.

Критическая температура перехода из неравновесного состояния в равновесное зависит от концентрации носителей согласно формуле (43). Эта зависимость представлена на рисунке 34. Нам известны фрактальные размерности самоорганизованных состояний с самоаффинной и самоподобной структурой I_1 , I_2 , поэтому $\theta_*(n)$ определено для $n < 1 - \tilde{n}(I_{20})$, $n > 1 + \tilde{n}(I_2)$. При $n \geq 2$ формула (43) неприменима. На рисунке 34 неопределенным областям зависимости $\theta_*(n)$ соответствуют штриховые линии.

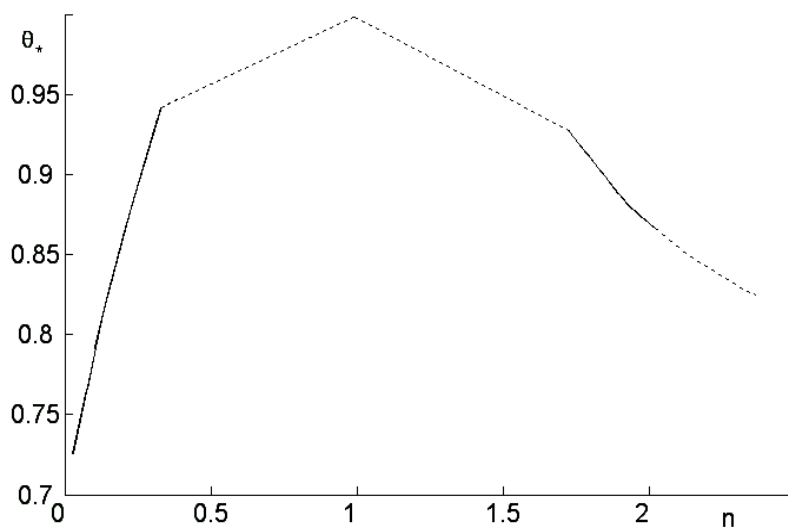


Рисунок 34. Зависимость критической температуры перехода из неравновесного в равновесное состояние от концентрации носителей.

Для относительно устойчивых неравновесных состояний γ отличается от γ_0 на целые числа, и это соответствует возрастанию n по θ . Если γ и γ_0 выбрать произвольно, то возможны неустойчивые, метастабильные состояния с убыванием концентрации электронов по температуре, что следует из (36).

На рисунке 35 представлена зависимость концентрации свободных носителей от температуры, построенная согласно уравнениям (36) и (49). На этом графике учтена зависимость $\theta_*(n)$. Кривые отличаются различными значениями $n(\theta_0)$, где θ_0 – минимальное значение температуры. Результаты численного анализа сопоставлены с экспериментальными данными [113].

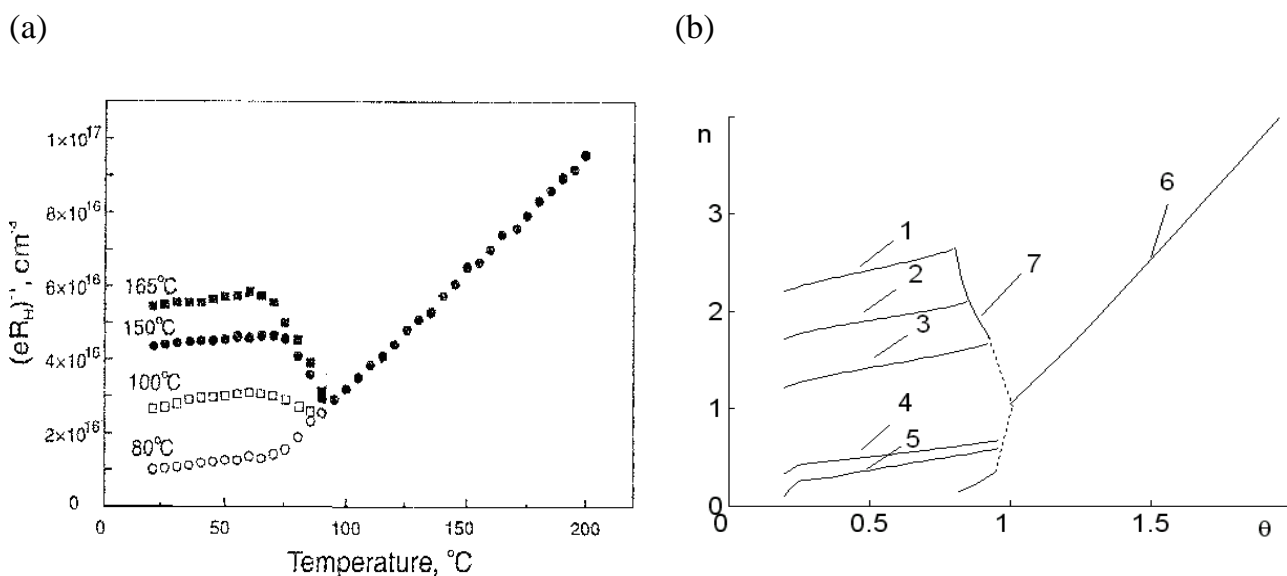


Рисунок 35. Поведение концентрации носителей заряда вблизи точки фазового перехода.

(a) – эксперимент; (b) – теория:

$$n_a = 0.1, n_d = 1, \varepsilon_d = 1, \varepsilon_c - \varepsilon_d = 1, \gamma_0 = I_2,$$

$$\gamma: 1 - 3 + I_1; 2 - 2 + I_2; 3 - 1 + I_2; 4 - 1 + I_2; 5 - 1 + I_1;$$

6 – соответствует равновесному состоянию при

$$n_a = 0.01, n_d = 58, \varepsilon_d = 3.5, B = 0.65, 7 - \text{линия из рисунка 34.}$$

На рисунке 36 показана близкая к линейной температурная зависимость концентрации свободных носителей, которая может реализоваться в равновесном случае. Для вычисления равновесной концентрации носителей тока было использовано выражение (49). Экспериментальные данные [113] достаточно хорошо согласуются с теоретическими результатами. На рисунке 37(с) приведены результаты численного анализа, проведенного согласно формулам (46) и (49) по мо-

делированию температурной зависимости концентрации носителей заряда в широком интервале температур. Для удобства масштабирования широкого интервала изменения θ использована переменная $1/\theta$. Полученные теоретические результаты качественно согласуются с экспериментальными данными [113] по исследованию температурной зависимости холловской концентрации носителей тока в кремнии, имплантированном протонами и подвергнутого отжигу. Также результаты моделирования соответствуют результатам экспериментального исследования [114], в котором показано сильное изменение электропроводности от температуры при изменении структуры образца путем облучения. Если принять зависимость подвижности от температуры линейной в условиях этого эксперимента, то мы имеем качественно одинаковую картину зависимости концентрации от температуры для случая отсутствия облучения (нижняя ветвь кривой рисунка 37). Количественное согласие можно ожидать при выборе критического значения проводимости, равного 10^{-6} согласно [114]. На рисунке 38 экспериментальные данные [113] сравнены с результатами теории временной релаксации концентрации электронов согласно уравнению (47). Фрактальные размерности множества значений времени выбраны внутри интервалов самоподобия и самоаффинности ($0,5 \div 0,806$).

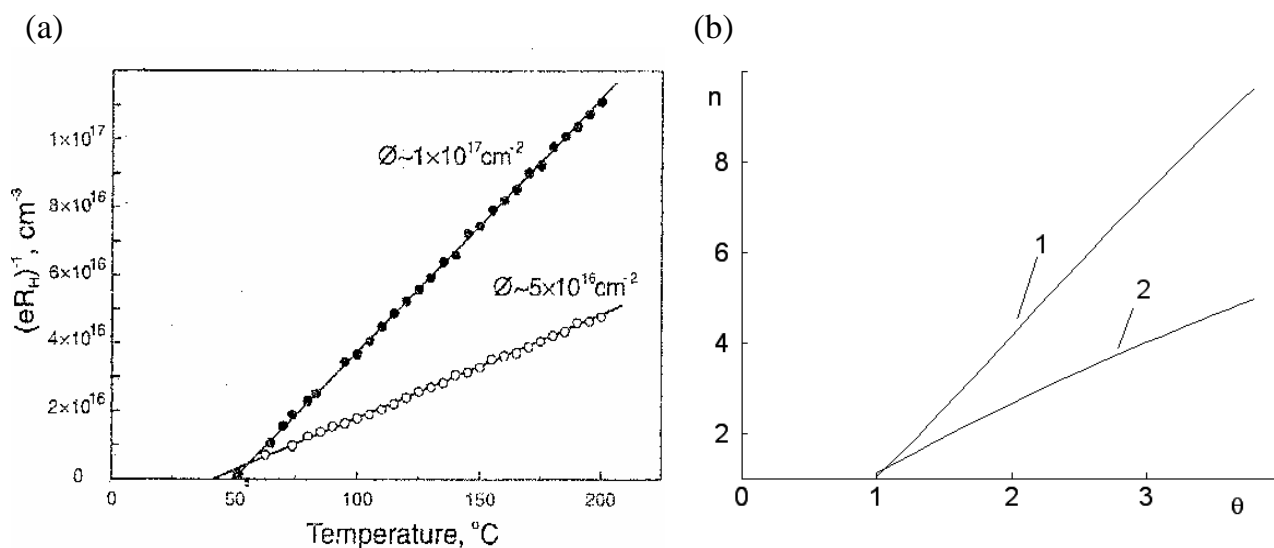


Рисунок 36. Температурная зависимость концентрации свободных носителей в равновесном состоянии в ограниченном интервале температур.

(a) – эксперимент; (b) – теория:

$$1 - n_a = 0.01, n_d = 58, \varepsilon_d = 3.5, B = 0.65;$$

$$2 - n_a = 0.01, n_d = 38, \varepsilon_d = 1.5, B = 0.15.$$

Рисунки 35-38 правильно описывают основные закономерности изменения концентрации электронов по температуре и по времени, наблюдаемые в эксперименте [113, 114]. В работе [113] подробно исследованы электрические свойства монокристаллического кремния, в котором образуются поверхностные доноры при имплантации водорода. Путем отжига гидrogenизированного кремния при различных температурах получены относительно стабильные неравновесные состояния с нанокластерной структурой. Если принять значения T_* , N_* , соответствующие условиям эксперимента, например, $T_* = 90^\circ\text{C}$, $N_* = 2.5 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $t_* = 5 \cdot 10^5 \text{ s}$, мы имеем близкое количественное согласие результатов численного анализа с экспериментальными графиками.

Сложный вид экспериментальных кривых, например, соответствующих рисункам 35 и 37, объясняется наличием различных физических закономерностей. Неравновесные состояния, достигаемые различной температурой отжига полупроводника, характеризуются различными фрактальными размерностями и соответствующими им изменениями концентрации до критической температуры. Критическая температура этих неравновесно-равновесных переходов асимметричным образом убывает как при росте, так и при уменьшении концентрации по сравнению с ее значением, соответствующим основному (определенному топологической размерностью всего объекта) равновесному состоянию. Концентрация носителей в основном равновесном состоянии ($\theta > \theta_*$) может линейно возрастать по температуре при условиях, определяемых формулой (49).

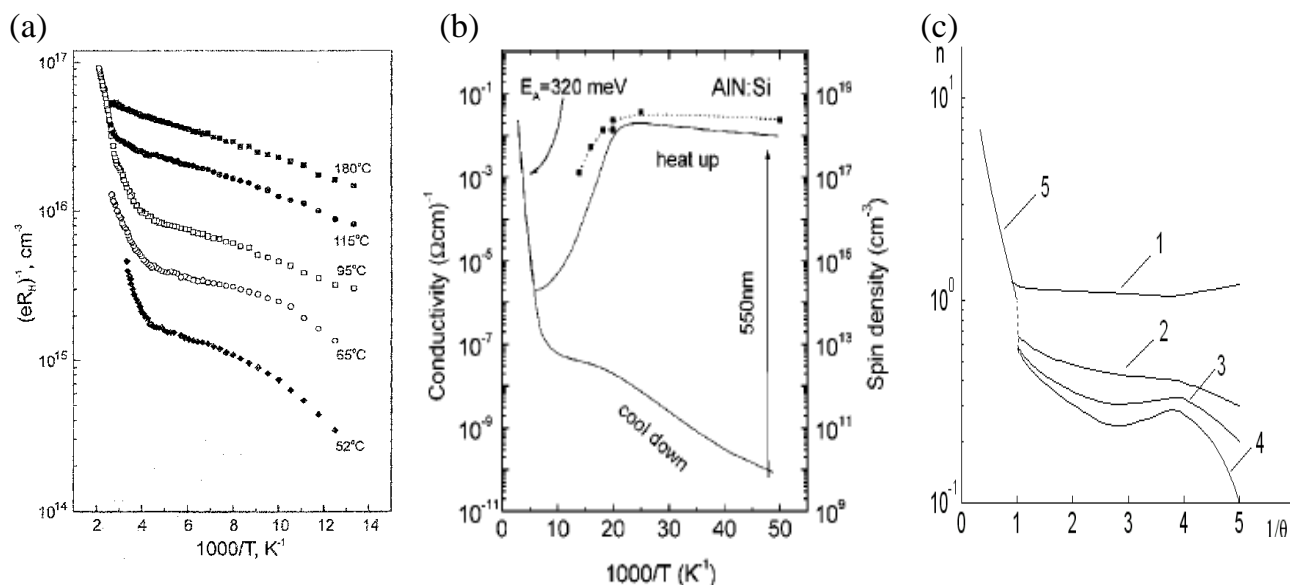


Рисунок 37. Поведение концентрации носителей заряда в широком интервале изменения температуры.

(a), (b) – эксперимент; (c) – теория:

$$n_a = 0.1, n_d = 1, \varepsilon_d = 1, \varepsilon_c - \varepsilon_d = 1, \gamma = 1,$$

γ_0 : 1 – I_1 , 2 – I_2 , 3 – I_1 , 4 – I_1 , 5 – линия 1 из рисунка 36.

Для одного значения температуры соответствуют различные значения концентрации электронов из-за различия структур кластеров. В работе [113] эти случаи представляют собой пространственную неравновесность, т.е. связаны с различными фрактальными (мультифрактальными) структурами. Их временная кинетика тоже будет различной.

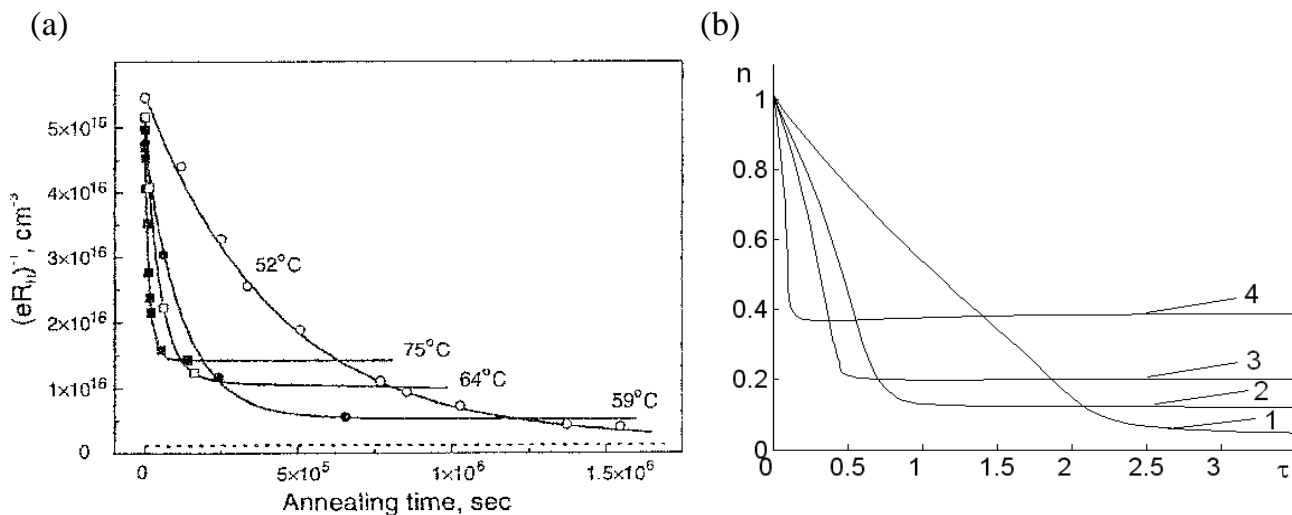


Рисунок 38. Зависимость концентрации носителей заряда от времени отжига.

(a) – эксперимент; (b) – теория:

$$\varepsilon_d = 1.0, n_a = 0.1, n_d = 1, \varepsilon_c - \varepsilon_d = 1, \gamma_0: 1 - I_2, 2 - I_{20}, 3 - I_1, 4 - I_{10}.$$

Таким образом, показано, что температурная зависимость и кинетика неравновесного распределения носителей заряда в наноструктурированных полупроводниковых пленках могут быть описаны дифференциальным уравнением с дробными производными.

Можно сделать вывод, что изложенная выше теория определения производной для фрактальных структур правильно описывает нелинейную температурную и временную зависимости концентрации носителей заряда в неравновесных состояниях. Фрактальные наноструктуры имеют разнообразные физические свойства, проявляющиеся из-за их нелинейной зависимости от определяющей переменной. Критическая температура неравновесно-равновесного перехода различным образом убывает как при росте, так и при уменьшении концентрации по сравнению с ее равновесным значением. Использованные в теории значения разности фрактальной и топологической размерностей самоаффинных и самоподобных структур позволяют количественно различать неравновесные физические явления.

Сказанное означает, что нахождение производной фрактальных мер по определяющей переменной с учетом условия Липшица-Гёльдера

позволяет описывать критические явления фазовых переходов. При этом в качестве показателей скейлинга можно использовать теоретически определенные критерии самоподобия и самоаффинности. Этот факт дает возможность значительно продвинуться в теории хаотических процессов в наноструктурах. Далее мы рассмотрим приложение настоящего подхода к описанию морфологии наноструктур и их оптических свойств.

ГЛАВА 3

**ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ОПИСАНИЯ
МОРФОЛОГИИ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ
ПОЛУПРОВОДНИКОВ**

**Уравнения, описывающие неравновесное
распределение электронов, дырок и примесей
в наноструктурированном полупроводнике**

Приведем результаты, полученные в наших исследованиях.

Как было отмечено выше, полупроводниковые пленки имеют кластерную структуру, которая является иерархически самоподобной и самоаффинной на разных пространственных масштабах, т.е. фрактальной и мультифрактальной. Для описания физических явлений в тонких полупроводниковых пленках необходимо знать распределение носителей тока, зависящее от фрактальной размерности их множества. Определение фрактальных размерностей неоднородных, анизотропных (аффинных) объектов само по себе является отдельной научной проблемой. Однако можно использовать значения размерностей модельных фракталов, также известные значения для самоподобных (энтропийных) и самоаффинных (информационных) множеств [115]. Целью исследований, описанных в данной главе, является получение фрактального и мультифрактального распределения концентраций носителей тока в наноструктурированных полупроводниках и сравнение результатов моделирования морфологии поверхностей полупроводников с электронно-микроскопическими данными [116-118].

Обозначим через n , p , a , соответственно, концентрации квазичастиц – электронов, дырок и кластеров – дефектов различных типов – образований из атомов, молекул вещества и примесей в полупроводнике. Будем интересоваться изменением концентраций по координате x вблизи $x = x_*$, где x_* – координата центра кластера. Можно принять, что центром кластеризации преимущественно являются собственные и примесные атомы,

молекулы. В более общем виде под кластеризацией можно понимать агрегацию (образование рыхлых скоплений) однотипных нейтральных дефектов.

Для учета нерегулярности движения носителей тока во фрактальной среде примем условие Липшица-Гёльдера, ограничивающее производную через дробный показатель степени аргумента $\alpha < 1$. Этот показатель мы примем в виде $\alpha = 1 - \gamma_0$, записанном через фрактальную размерность множества точек разбиения аргумента γ_0 . При $\gamma_0 = 0$ мы имеем обычную производную. После этого производную концентрации электронов $n(x)$ запишем через конечные разности в виде

$$\frac{dn(x)}{dx} = \pm \frac{\delta_n}{(|x - x_*|)^{1-\gamma_{0n}}}, \quad (50)$$

где δ_n – масштаб измерения величины $n(x)$.

В формулу (50) концентрация и координата входят в безразмерном виде относительно некоторых характерных масштабов. Знак «минус» («плюс») соответствуют положительной (отрицательной) разности $\delta_n = n(x) - n(x_*)$.

Фрактальную меру $n(x)$ представим в виде

$$n(x) = n_0(x) \delta_n^{-(D-d)}, \quad (51)$$

где d – топологическая размерность ячейки (структуры) с пространственным масштабом, соответствующим δ_n , D – фрактальная размерность множества всех различных ячеек, $n_0(x)$ – равновесная (не фрактальная) концентрация электронов.

Исключая δ_n из формул (50) и (51), имеем

$$\frac{dn(x)}{dx} = \pm (|x - x_*|)^{\gamma_{0n}-1} \left(\left| \frac{n(x)}{n_0(x)} \right| \right)^{-\frac{1}{\gamma_n}}, \quad \gamma_n = D_n - d, \quad d = 0, 1, 2, 3. \quad (52)$$

Неравновесная концентрация $n(x_1)$ для фиксированного значения x_1 задается в виде граничного условия.

Уравнение (52) запишем для множества случайно расположенных

(из-за динамических, тепловых факторов) кластеров различного строения, т.е. для случая

$$x_* = \{x_{*j}(n, p, a)\}, \quad j = 1, 2, \dots,$$

где x_{*j} – случайные числа, реализуемые в интервале $0 < x_{*j} < x_{\max}$.

Тогда чередование знаков «плюс», «минус» в формуле (50) будет случайным и его можно описать выражением $sign(\xi(x))$, где $\xi(x)$ – дельта-коррелированный случайный процесс.

Положение электрона в интервале $x - x_*$ также определяется вероятностным образом. Эту вероятность определим как

$$P_n(x) = |\psi_n(n, a, p, x)|^2 (|x - x_*|), \quad (53)$$

где $\psi_n(n, a, p, x)$ – волновая функция электрона, находящегося в поле электронов, дырок, примесей (кластера). Эта функция должна быть выбрана на основе простых моделей взаимодействия электрона с кластером.

Принимая аналогичные рассуждения для концентрации дырок $p(x)$ и примесей (кластеров) $a(x)$, мы можем записать следующую систему уравнений:

$$\frac{dn(x)}{dx} = sign(\xi(x)) |\psi_n(n, a, p, x)|^2 (|x - x_*|)^{\gamma_{0n}} \left(\frac{n(x)}{n_0(x)} \right)^{\frac{1}{\gamma_n}}, \quad (54)$$

$$\frac{dp(x)}{dx} = sign(\xi(x)) |\psi_p(n, a, p, x)|^2 (|x - x_*|)^{\gamma_{0p}} \left(\frac{p(x)}{p_0(x)} \right)^{\frac{1}{\gamma_p}}, \quad (55)$$

$$\frac{da(x)}{dx} = sign(\xi(x)) |\psi_a(n, a, p, x)|^2 (|x - x_*|)^{\gamma_{0a}} \left(\frac{a(x)}{a_0(x)} \right)^{\frac{1}{\gamma_a}}, \quad (56)$$

$$sign(\xi(x)) = \begin{cases} +1, & \xi(x) > 0 \\ -1, & \xi(x) < 0 \end{cases}.$$

Для учета специфики кристаллического или аморфного строения полупроводников волновые функции могут быть выбраны в виде функций

Блоха, учитывающих зависимости концентраций от координаты. Если подставить в уравнения (54)-(56) даже самые простые выражения для волновых функций, то все равно мы не сможем интегрировать полученную систему дифференциальных уравнений в силу их стохастичности. Поэтому мы рассмотрим их дискретную форму.

Для простоты вначале запишем уравнение (50) с определенным знаком плюс через последовательность дискретных значений n :

$$\frac{n_{i+1}}{\Delta x} = \left(\frac{n_i}{\Delta x} \right)_{\gamma_0} + \frac{\delta_{n,i}}{|\Delta x|^{1-\gamma_{0n}}}, \quad i=1, 2, 3, \dots, \quad (57)$$

где γ_0 – индекс, означающий необходимость регуляризации (ограничения) данного члена в пределах масштаба измерения δ_{ni} путем введения дробного показателя степени γ_0 .

Прежде чем выбрать $\Delta x=1$ для реализации отображения (57), мы должны записать правую часть с одинаковым показателем степени Δx , принимая

$$\left(\frac{n_i}{\Delta x} \right)_{\gamma_0} = \frac{n_i \delta_{n,i}}{|\Delta x|^{1-\gamma_{0n}}}. \quad (58)$$

Смысл принятого условия (58) состоит в том, что сам безразмерный масштаб измерения δ_{ni} тоже считается фрактальной мерой с размерностью γ_0 . При $\gamma_0=0$ мы получили бы условие постоянства величины $(n_i/\Delta x)_{\gamma_0}$ в интервале $\delta_{n,i}$.

Мы можем дискретные значения отсчета n_i взять через равные интервалы $\Delta x=1$, тогда формулы (54)-(56) принимают вид

$$n_{i+1} = \left\{ n_i + \text{sign}(\xi_i) |\psi_n(a, p_i, i)|^2 \right\} \left| \frac{n_i}{n_0} \right|^{\frac{1}{\gamma_n}}, \quad (59)$$

$$p_{i+1} = \left\{ p_i + \text{sign}(\xi_i) |\psi_p(a, n_i, i)|^2 \right\} \left| \frac{p_i}{p_0} \right|^{\frac{1}{\gamma_p}}, \quad (60)$$

$$a_{i+1} = \left\{ a_i + \text{sign}(\xi_i) |\psi_a(n_i, p_i, i)|^2 \right\} \left| \frac{a_i}{a_0} \right|^{\frac{1}{\gamma_a}}. \quad (61)$$

Возможны различные подходы к определению волновых функций квазичастиц. Разделяя электроны на электроны кластера и свободные (валентные) электроны, запишем гамильтониан для рассматриваемой задачи в следующем виде [119]

$$H = \sum_l \frac{\vec{P}_l^2}{2M_l} + \sum_{l,m} U(\vec{R}_l - \vec{R}_m) + \sum_i \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + \sum_{i,l} V(\vec{r}_i - \vec{R}_l) + \sum_{i,j} \frac{e^2 / 4\pi\epsilon_0}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}, \quad (62)$$

где l и m – индексы, нумерующие кластеры, i и j – индексы, нумерующие электроны, \vec{P} , M – импульс и масса кластера, \vec{p} , m – импульс и масса электрона, $U(\vec{R}_l - \vec{R}_m)$ – потенциал взаимодействия между кластерами, $V(\vec{r}_i - \vec{R}_l)$ – потенциал взаимодействия свободных электронов с кластерами.

Считая, что каждый электрон взаимодействует с кластером независимо от остальных, получим уравнение Шредингера в виде

$$\left\{ \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + \sum_l V(\vec{r}_i - \vec{R}_l) \right\} \psi_i(\vec{r}_i, \vec{R}) = E_i \psi_i(\vec{r}_i, \vec{R}), \quad (63)$$

где E_i – энергия электрона, $\psi_i(\vec{r}_i, \vec{R})$ – волновая функция.

Собственную функцию электрона представим в виде функции Блоха:

$$\psi_k(\vec{r}) = \psi_R(\vec{r}) \exp(i\vec{k}\vec{r}), \quad \psi_R(\vec{r} + \vec{R}) = \psi_R(\vec{r}), \quad (64)$$

где \vec{k} – волновой вектор.

Из условий (64) вытекает, что

$$\psi_k(\vec{r} + \vec{R}) = \psi_k(\vec{r}) \exp(i\vec{k}\vec{R}). \quad (65)$$

Можно построить волновые функции, центрированные на узлах кластеров \vec{R} , т.е. записать через функции Ванье $\varphi(\vec{r} - \vec{R})$:

$$\psi_k(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}} \varphi(\vec{r} - \vec{R}) \exp(i\vec{k}\vec{R}). \quad (66)$$

В приближении сильной связи между электронами и кластерами можно аппроксимировать функции Ванье атомными орбиталями ($\varphi(\vec{r} - \vec{R}) = \varphi_{n,l}(r)$):

$$\varphi_{n,l}(r) = \frac{2}{n^{l+2} (2l+1)!} \sqrt{\frac{(n+l)!}{(n-l-1)!}} (2r)^l e^{-\frac{r}{n}} F\left(-n+l+1, 2l+2, \frac{2r}{n}\right), \quad (67)$$

где n – главное квантовое число, l – орбитальное квантовое число, F – вырожденная гипергеометрическая функция.

В системе центра масс электрона и дырки формула (66) описывает и поведение дырки. В другом предельном случае слабой связи электрона с кластером мы можем воспользоваться приближением плоских волн

$$\psi_n(x) = \psi_p(x) = \psi_a(x) = \cos(k_n x) \cos(k_p x) \cos(k_a x). \quad (68)$$

Численные значения фрактальных размерностей могут быть выбраны, как было изложено в главе 2, для устойчивых самоподобных и самоафинных множеств [63, 117, 118].

Отображение фрактальной эволюции меры

Выше мы обсудили возможность описания морфологии наноструктур на основе полученной нами системы уравнений, учитывающей стохастичность процесса. Этот подход затрудняет точный прогноз морфологии конкретной наноструктуры. В связи с этим можно поставить вопрос об использовании динамического хаоса для описания сложной картины поверхности наноструктур. Обоснованием этого служит тот факт, что динамический хаос может иметь такую статистическую характеристику, практически неразличимую от стохастического процесса. Для этой цели необходимо иметь алгоритм получения динамического хаоса с перемежаемой и фрактальной структурой, близкой к структуре нанопленок.

Ниже мы покажем, что из условия фрактальности меры может быть получено универсальное отображение, описывающее ее перемежаемую эволюцию типа «накопление-выброс». В отличие от всех известных дифференциальных и дискретных моделей динамической системы данное отображение реализует хаотические колебания с характеристиками, соответствующими критериям самоорганизации.

Рассмотрим эволюцию по времени $x(t)$ – модуля некоторой функции, связанной с фрактальной мерой (аддитивной величиной, характеризующейся измеримым множеством) в виде

$$\frac{dx(t)}{dt} = \text{sign}\left(\frac{dx(t)}{dt}\right) \frac{|\Delta x|}{|\Delta t|^{1-\gamma_0}}, \quad (69)$$

где γ_0 – статистическая характеристика множества значений t , она введена с целью обеспечения условия Лифшица-Гельдера для ограничения производной $\frac{dx}{dt}$. Модуль приращения $|\Delta x|$ (относительный безразмерный масштаб измерения величины $x(t)$) заменим из условия фрактальности меры $x(t)$:

$$x = x_0 (|\Delta x|)^{-(D-d)}, \quad |\Delta x| = \left(\frac{x}{x_0}\right)^{\frac{1}{\gamma}}, \quad \gamma = D - d, \quad (70)$$

где x_0 – нефрактальная регулярная мера, D – фрактальная размерность множества значений $x(t)$, d – топологическая размерность носителя меры. Подставив формулу (70) в формулу (69) перейдем к дискретным разностям. Обозначим дискретную форму знаковой функции через μ_i . В силу того, что всегда $\Delta t > 0$ знаковая функция $\text{sign}\left(\frac{dx(t)}{dt}\right)$ зависит только от Δx_i . Ее изменение по дискретной переменной i определим в виде

$$\mu_{i+1} = \frac{\Delta x_{i+1}}{\Delta x_i} \Big|_{x_i=x_{i+1}} = \frac{dx_{i+1}}{dx_i}, \quad (71)$$

записанном в неподвижной точке. Обычно значения $\mu_{i+1} = \pm 1$ используются для линейного описания эволюции возмущения. Мы определим μ_{i+1} через μ_i и не ставим ограничения на модуль этой величины.

С учетом формул (70) и (71), запишем формулу (69) для случая $x_0 = 1$ в виде

$$\frac{x_{i+1}}{\Delta t} = \frac{x_i}{\Delta t} + \mu_i |x_i|^{-\frac{1}{\gamma}} \Delta t^{\gamma_0-1} = \frac{x_i}{\Delta t} + \mu_i |x_i|^{-\frac{1}{\gamma}} \frac{\Delta t^{\gamma_0}}{\Delta t} = \left(x_i \Delta t^{-\gamma_0} + \mu_i |x_i|^{-\frac{1}{\gamma}} \right) \frac{\Delta t^{\gamma_0}}{\Delta t}. \quad (72)$$

В формуле (72), чтобы можно было выбрать одинаковые моменты времени, исключим величину γ_0 . Прежде чем принять $\Delta t = 1$ по алгоритму дискретного счета, мы будем моделировать выражение $x_i \Delta t^{-\gamma_0}$ через γ_0 : именно это выражение, а не $x_i \Delta t^{\gamma_0}$, соответствует хаотизации значений x_i .

Учтем, что смысл введения величины γ_0 заключается в реализации условия

$$\frac{\Delta x_i}{x_i} \left(\frac{\Delta t}{\tau} \right)^{\gamma_0} = const \equiv C, \quad (73)$$

где τ – характерное время процесса.

При $\gamma_0 = 0$ мы имели бы случай вычисления меры Римана по $\Delta x = const$ при выборе $\Delta t = 1$. При $\gamma_0 \neq 0$ мы получим возможность вычисления меры по Лебегу, учитывая зависимость Δt^{γ_0} от приращения функции $\Delta x_i(\gamma, x_i)$:

$$\left(\frac{\Delta t}{\tau} \right)^{-\gamma_0} = \frac{1}{C} \frac{\Delta x_i(\gamma, x_i)}{x_i} = \frac{(|x_i|)^{-1/\gamma}}{C x_i} \quad (74)$$

где C – некоторая постоянная. Смысл параметра C можно трактовать как аналог базы (сложности) сигнала, используемый для характеристики спектра:

$$B = \tau_k \Delta \omega, \quad (75)$$

где τ_k – характерное время корреляции, $\Delta \omega$ – ширина полосы частот. Согласно определению C характеризует сложность выбранной точности описания хаотического сигнала. Мера фрактального объекта зависит от точности наблюдения, поэтому в результате теории входит постоянная C . Значение C соответствует выбору степени точности наблюдения процесса: $1/C = 10^{-2}, 10^{-3}$ и т. д. Если знак производной в (69) определяется внешними условиями (шумоподобные воздействия), то в (73) берутся абсолютные значения Δx , Δt^{γ_0} .

Принимая $\Delta t = \tau$, окончательно запишем уравнение (72) в следующем виде:

$$x_{i+1} = \left(\frac{1}{C} + \mu_i \right) |x_i|^{\frac{1}{\gamma}}. \quad (76)$$

Продифференцировав (76), получим:

$$\mu_{i+1} = \left(\frac{\Delta x_{i+1}}{\Delta x_i} \right)_{x_i = x_{i+1}} = -\frac{1}{\gamma} \left(\frac{1}{C} + \mu_i \right) |x_i|^{\frac{1}{\gamma}-1}. \quad (77)$$

Формулы (76) и (77) представляют собой искомое отображение фрактальной эволюции меры.

Распределение электронов, дырок и примесей в наноструктурированном полупроводнике на основе описанного отображения перемежаемости фрактальной эволюции может быть описано следующим образом:

$$X_{k,i+1} = \left(\frac{1}{C_k} + \sum_{k=1}^3 \mu_{k,i} \right) \left| \frac{X_{k,i}}{X_{k,0}} \right|^{\frac{1}{\gamma_k}}, \quad (78)$$

$$\mu_{k,i+1} = -\frac{1}{\gamma_k} \left(\frac{1}{C_k} + \sum_{k=1}^3 \mu_{k,i} \right) \left| \frac{X_{k,i}}{X_{k,0}} \right|^{\frac{1}{\gamma_k}-1},$$

где $k = (1, 2, 3) \equiv (n, p, a)$, обозначения n, p, a описывают распределение электронов, дырок и примесей соответственно; C_k – степень точности разрешения; γ_k – разность между фрактальной и топологической размерностями; $X_{k,0}$ – равновесная концентрация электронов, дырок и примесей; μ – знаковая функция [120].

На основе универсального отображения перемежаемости (78), описывающего эволюцию системы на основе условия фрактальности меры может быть моделирована морфология квантовых точек ($\gamma > 2$), квантовых нитей ($\gamma > 1$) и квантовых ям ($\gamma > 0$) на поверхности ($d = 2$). Таким образом, тип наноструктур определяется заданием соответствующих значений фрактальных размерностей множеств электронов, дырок и примесей в нанокластерном полупроводнике. Фрактальные размерности выбираются для устойчивых самоподобных и самоаффинных множеств.

Применение метода реконструкции динамического хаоса для моделирования морфологии поверхностей наноструктурированных пленок

Мы укажем также возможность того, что для построения морфологии поверхностей, содержащих квантово-размерные структуры, может быть применен известный метод реконструкции динамического хаоса [121] по одномерной последовательности данных. Согласно этому методу, по одномерной известной реализации может быть восстановлена многомерная картина хаотического явления.

В качестве реализации, к которой применяется этот алгоритм, выбирается зависимость концентрации электронов от пространственного шага, определяемая формулой (78). Далее необходимо определить необходимый набор фазовых переменных, образующих фазовое пространство. Для этого нужно развернуть исходную последовательность $n_{i+1} = f(n_i)$ в ряд наборов с последовательно возрастающими сдвигами, определенными как величины, кратные некоторой фиксированной задержке τ . Таким образом, мы можем записать следующий набор дискретных переменных:

$$\begin{aligned}
 & n_1 : n_1(t_1), \dots, n_1(t_N) \\
 & n_2 : n_1(t_1 + \tau), \dots, n_1(t_N + \tau) \\
 & \dots \\
 & \dots \\
 & n_{j-1} : n_1(t_1 + (j-1)\tau), \dots, n_1(t_N + (j-1)\tau)
 \end{aligned} \tag{79}$$

При должном выборе τ можно ожидать, что эти переменные будут линейно независимыми, а это все, что требуется для определения фазового пространства. И все эти переменные можно получить из единственной последовательности, относящейся к $n_{i+1} = f(n_i)$. Таким образом, применение описанного алгоритма позволяет выйти за пределы одномерного пространства исходной последовательности и развернуть динамику системы в многомерном пространстве. Текущие значения концентраций электронов в нанокластерном полупроводнике определяются из уравнения (78).

Откладывая каждый ряд с определенным сдвигом величины τ по различным осям координат, мы получим модель поверхности наноструктурированной тонкой пленки.

Варьируя параметры C_k , γ_k , $X_{k,0}$ и μ , входящие в (78), возможно моделирование поверхностей с учетом их кластерного строения. Известно, что полупроводниковые поверхности могут содержать следующие типы структур: точечные, линейчатые, поверхностные и объемные. Учет типа наноструктур осуществляется путем задания соответствующего значения параметра γ_k . Влияние подложки на тип расположенных на ней нанокластеров учитывается заданием соответствующих значений величины $X_{k,0}$, представляющей собой равновесные концентрации электронов, дырок и примесей. Разрешение моделируемой поверхности регулируется параметром C_k – степенью точности разрешения, который может принимать значения в интервале от 0 до 1.

ГЛАВА 4

**РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ
МОРФОЛОГИИ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ
ПОЛУПРОВОДНИКОВ**

**Численное исследование распределения электронов, дырок
и примесей в наноструктурированных полупроводниках**

На основе уравнений (59)-(61) и формулы (68) получены численные реализации, представленные на рисунках 39-46. В силу случайности функции $\xi(x)$ мы имеем в разных направлениях не идентичные, а случайно смещенные по фазе кривые. На этих рисунках показано влияние параметров $\gamma_n, \gamma_p, \gamma_a$ (разности между фрактальной и топологической размерностями множеств электронов, дырок и примесей в нанокластерном полупроводнике) на реализацию, морфологию поверхностей, корреляции концентраций электронов, спектр их мощности, а также на вид траектории в фазовом пространстве.

Как видно из рисунков 39-46, форма поверхности полупроводниковой тонкой пленки зависит от значений разности фрактальной и топологической размерностей $\gamma_n, \gamma_p, \gamma_a$, характеризующей распределение электронов, дырок и примесей. Увеличение значений параметров $\gamma_n, \gamma_p, \gamma_a$ приводит к более перемежаемому характеру распределения частиц. Варьируя эти параметры, можно получить модели поверхностей с различной морфологией. Корреляционная функция носителей заряда нерегулярным образом убывает с ростом расстояния между носителями тока. Спектры мощности были вычислены через корреляции плотности распределения электронов. Можно сделать вывод, что большим значениям $\gamma_n, \gamma_p, \gamma_a$ соответствует типичный спектр для перемежаемого шума (фликкер-шума), а малым значениям $\gamma_n, \gamma_p, \gamma_a$ – спектры шумовых сигналов.

Поверхностям с различной морфологией соответствуют различные типы фазовых портретов. При $\gamma_n, \gamma_p, \gamma_a$ больших единицы, в фазовом портрете наблюдаются гомоклинические структуры, существует точка симметрии фазового портрета, расположенная в начале координат. Участки фазовых траекторий, выделенные рамкой, представлены на

рисунках справа в увеличенном виде. Увеличенные участки приведенных рисунков подтверждают наличие устойчивой фазовой траектории, окруженной стохастическим слоем.

На распределение электронов, дырок, примесей, на морфологию поверхностей полупроводниковых тонких пленок и вид фазового портрета также значительно влияет наличие примесей. Как видно из сравнения рисунков 39-42, рельеф поверхности пленок при увеличении концентрации примесей становится более структурным, а в фазовом пространстве четко разделяется дополнительное сгущение точек, вызванное неравновесностью концентраций относительно $n_0 = p_0 = a_0 = 1$.

На рисунках 43-46 приведены результаты численного исследования влияния равновесных концентраций электронов, дырок и примесей n_0, p_0, a_0 на пространственное распределение носителей заряда, а также на вид траекторий в фазовом пространстве. При сравнимых значениях равновесных (т.е. нефрактальных) концентраций $n_0 = p_0 = a_0$ с начальными значениями $n_1 = p_1 = a_1$ наблюдается сильно перемежаемая картина: мелкомасштабные пульсации концентрации чередуются с ее резким всплеском. При значительном отличии значений n_0, p_0, a_0 от $n_1 = p_1 = a_1$ (в три и более раз) морфология, корреляционная функция, спектр мощности, фазовый портрет соответствуют обычному хаотическому объекту.

Если в системе уравнений (59)-(61) вместо случайной функции $\xi(x)$ использовать волновую функцию частиц, то можно построить фазовый портрет, характеризующий волнообразное квантовое распределение носителей заряда. Сравнение фазовых портретов, характеризующих распределение носителей заряда при наличии шума $\xi(x)$ и при отсутствии шума ($\xi(x)=1$) представлено на рисунке 47.

Из графиков видно, что вид фазового портрета в значительной степени определяется параметрами: разностью между фрактальными и топологическими размерностями множеств электронов, дырок и примесей $\gamma_n, \gamma_p, \gamma_a$. Качественно фазовые портреты стохастического и чисто волнового распределения концентраций согласуются между собой. Если значения этих параметров меньше единицы, траектории фазового пространства не являются гомоклиническими и не проходят через начало координат. Если же значение хотя бы одного из этих параметров больше единицы, фазовая траектория проходит через начало координат. Наибольшая плотность стохастического слоя в начале координат достигается в том случае, если значения всех параметров $\gamma_n, \gamma_p, \gamma_a$ превышают единицу.

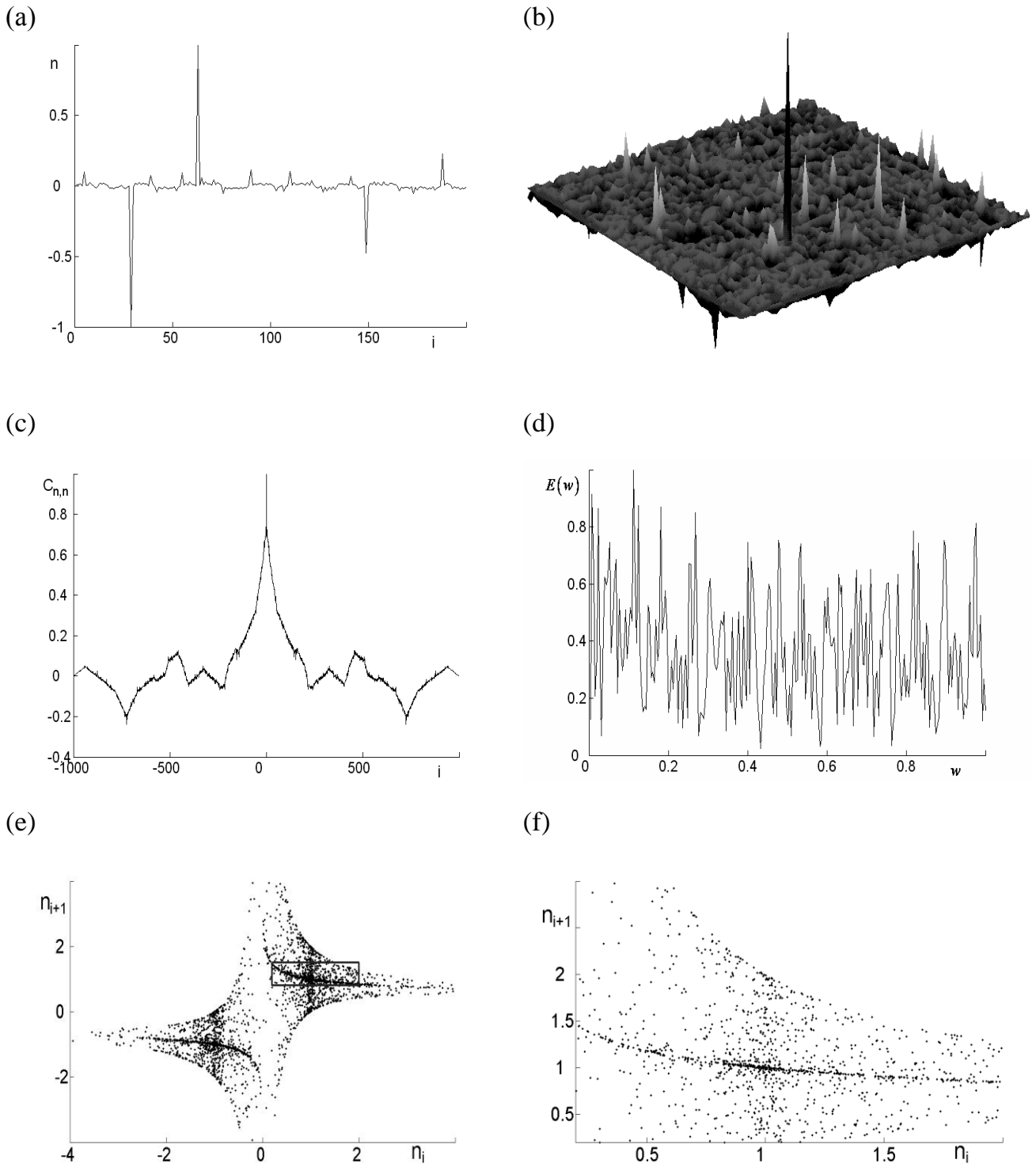
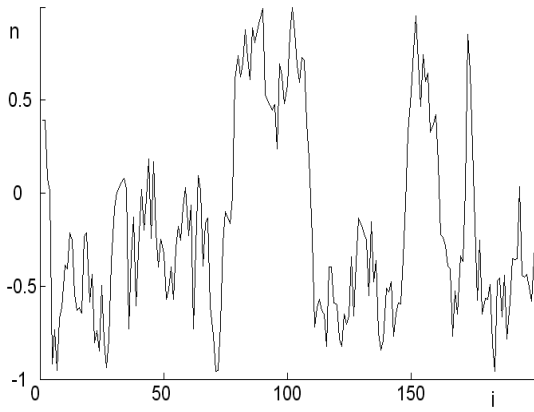


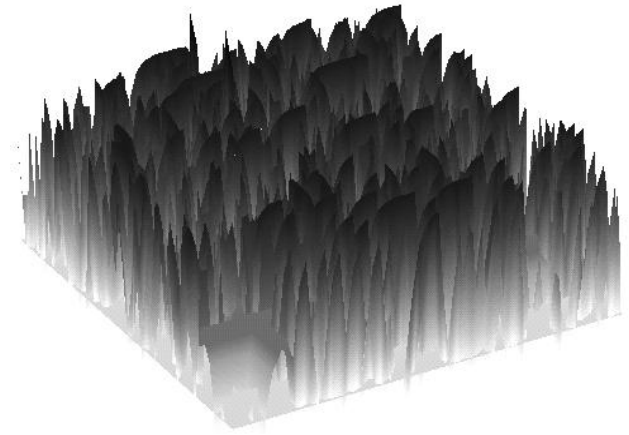
Рисунок 39. Реализация (а), модель поверхности (b), корреляционная функция распределения электронов (с), спектр мощности распределения носителей заряда (d), фазовая плоскость (n_i, n_{i+1}) (e) и ее фрагмент (f).

$n_1 = p_1 = a_1 = 1$, $n_0 = p_0 = a_0 = 1$, $\gamma_n = \gamma_p = \gamma_a = I_2$. $n_1 = p_1 = a_1$ – начальные, а $n_0 = p_0 = a_0$ – равновесные значения концентраций, отрицательные значения концентраций соответствуют углублениям от уровня поверхности.

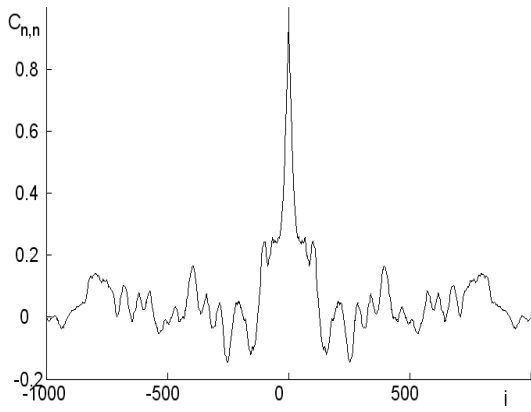
(a)



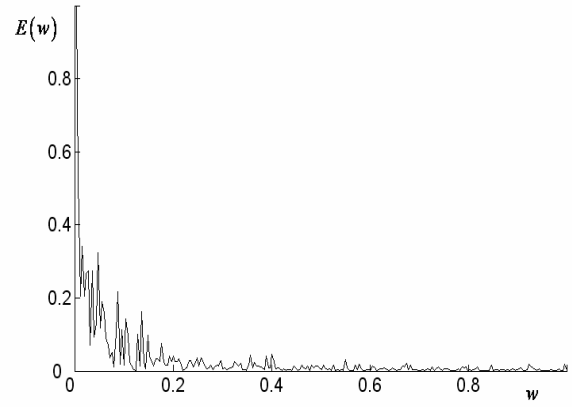
(b)



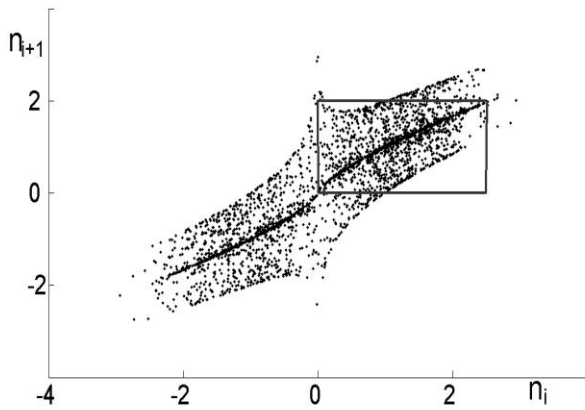
(c)



(d)



(e)



(f)

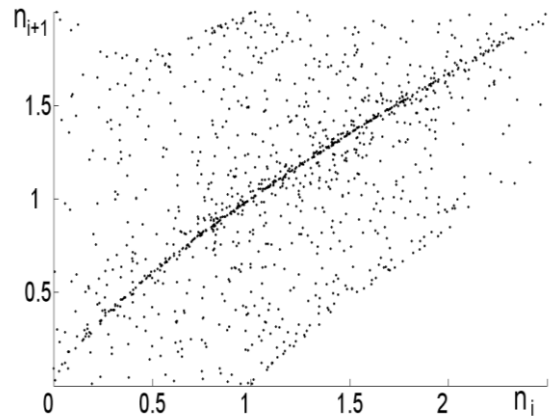


Рисунок 40. Реализация (a), модель поверхности (b), корреляционная функция распределения электронов (c), соответствующий спектр мощности (d), фазовая плоскость (n_i, n_{i+1}) (e) и ее фрагмент (f): $n_1 = p_1 = a_1 = 1$, $n_0 = p_0 = a_0 = 1$, $\gamma_n = \gamma_p = \gamma_a = 3 + I_2$.

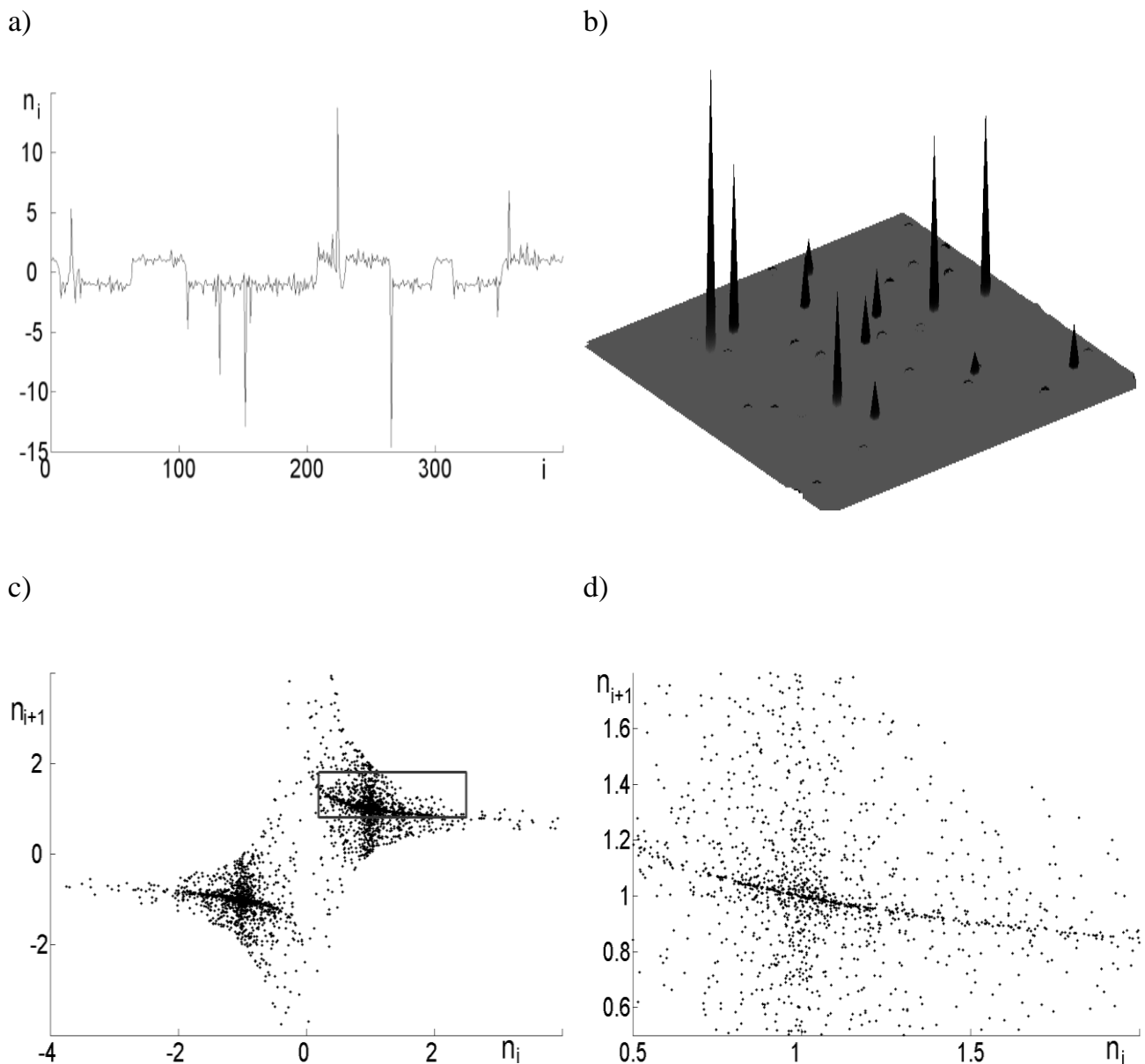


Рисунок 41. Реализация (а),
 модель поверхности (b),
 фазовая плоскость (n_i, n_{i+1}) (с)
 и ее фрагмент (d).

$$n_1 = p_1 = 1, a_1 = 100, n_0 = p_0 = a_0 = 1, \gamma_n = \gamma_p = \gamma_a = I_2.$$

Изменение начальной концентрации
 примесей a_1 в 100 раз приводит
 к качественно новой морфологии.

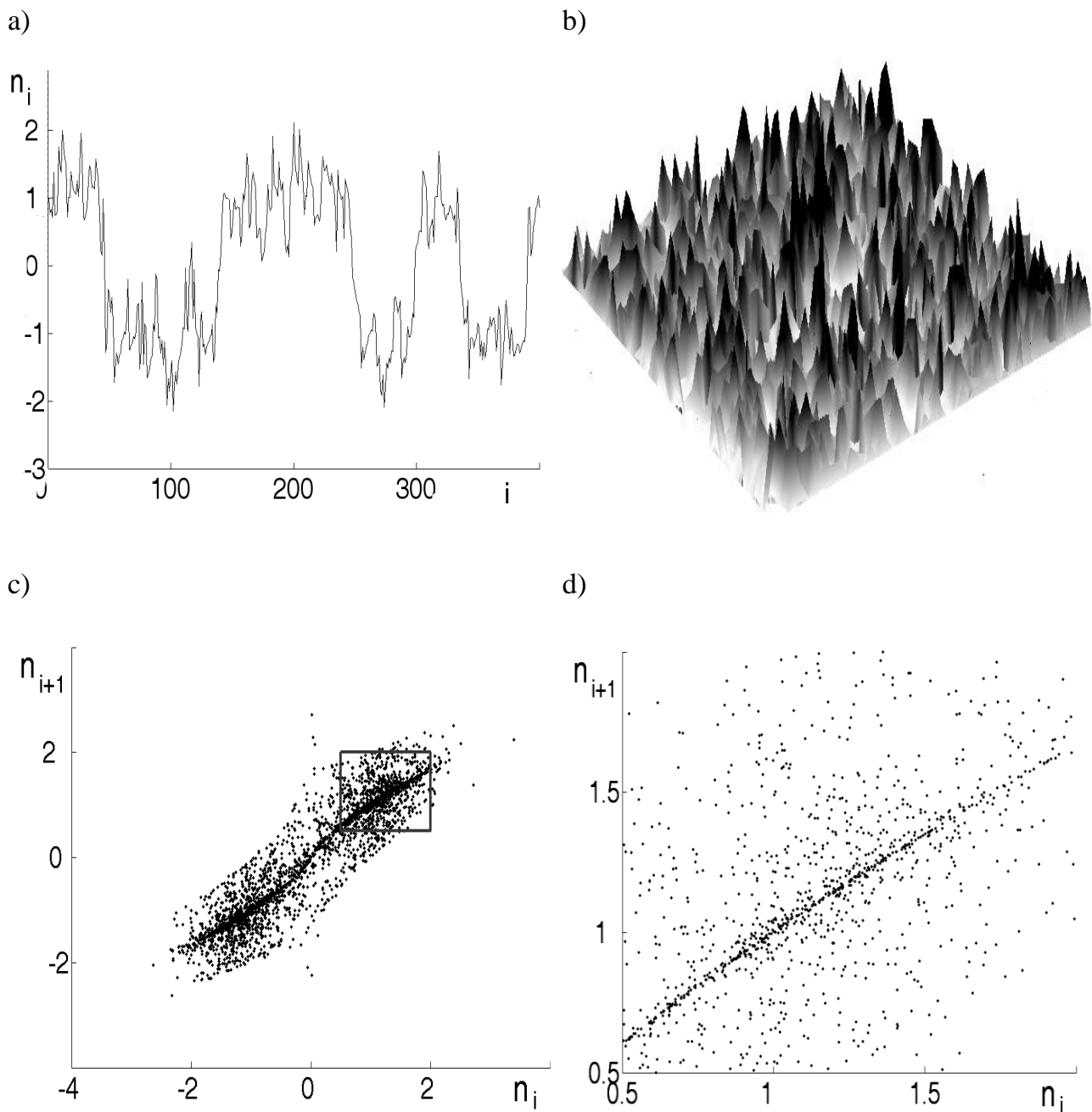
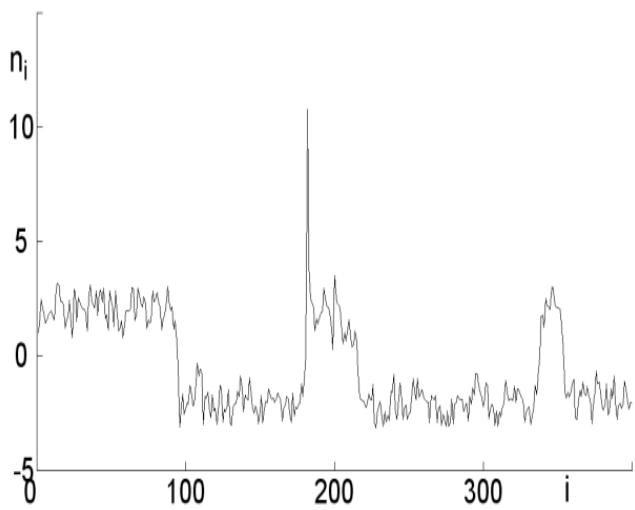


Рисунок 42. Реализация (а),
 модель поверхности (b),
 фазовая плоскость (n_i, n_{i+1}) (с)
 и ее фрагмент (d).

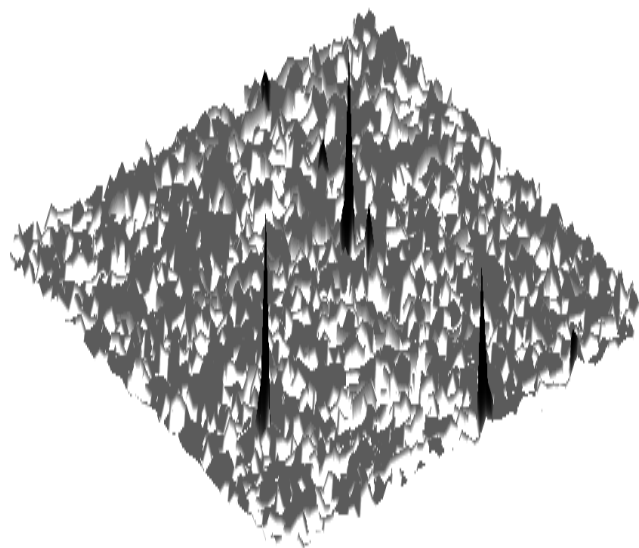
$$n_1 = p_1 = 1, a_1 = 100, n_0 = p_0 = a_0 = 1, \gamma_n = \gamma_p = \gamma_a = 3 + I_2.$$

Рост фрактальной размерности
 сопровождается стохастизацией
 морфологии и стиранием влияния
 неравновесности концентраций.

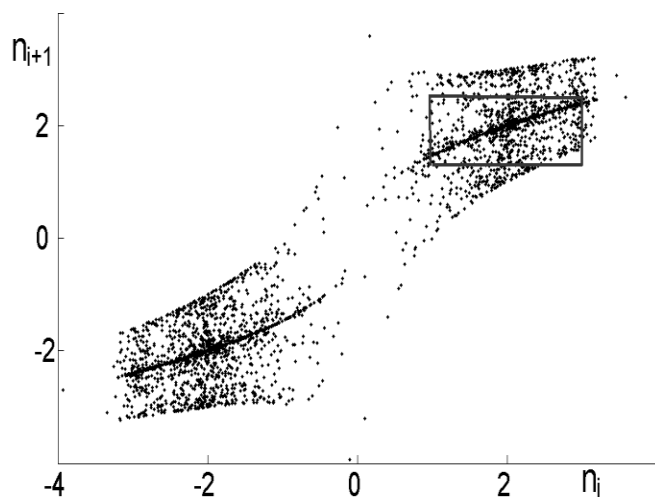
a)



b)



c)



d)

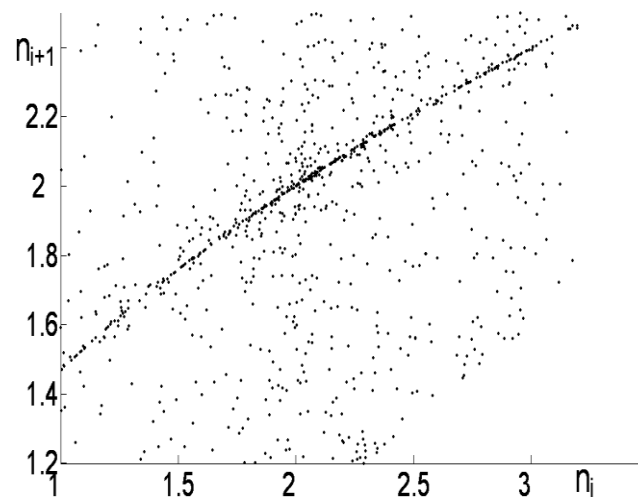
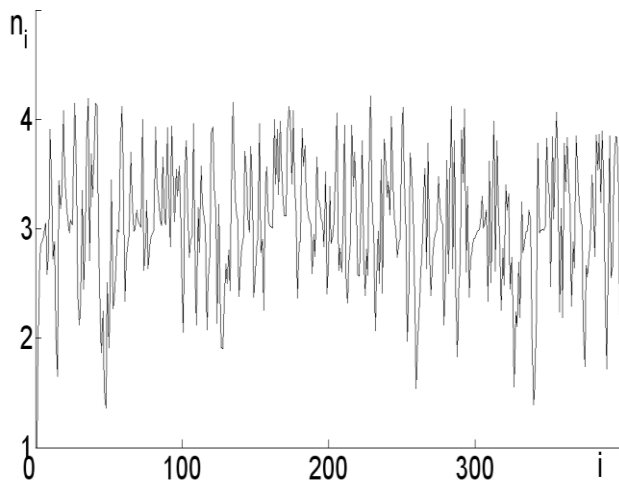


Рисунок 43. Реализация (а),
 модель поверхности (b),
 фазовая плоскость (n_i, n_{i+1}) (с)
 и ее фрагмент (d).

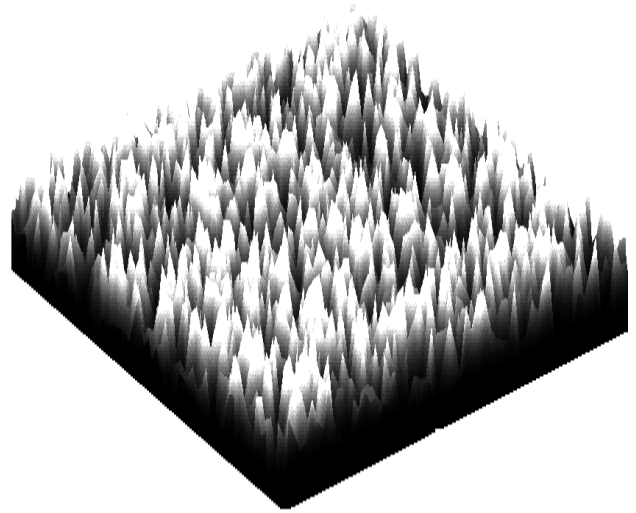
$$n_1 = p_1 = a_1 = 1, n_0 = p_0 = a_0 = 2,$$

$$\gamma_n = \gamma_p = \gamma_a = 1 + I_2.$$

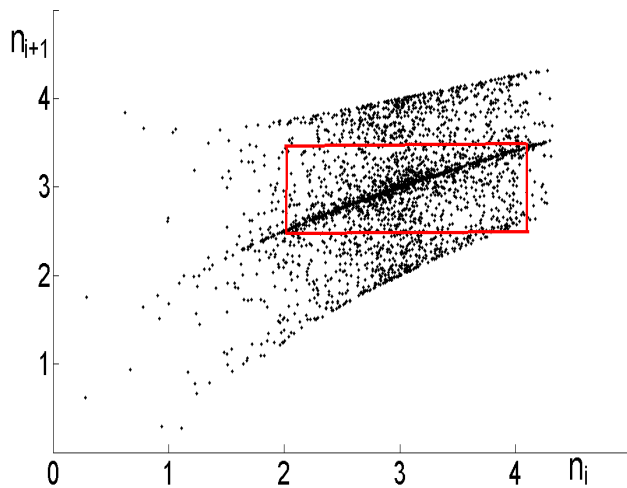
a)



b)



c)



d)

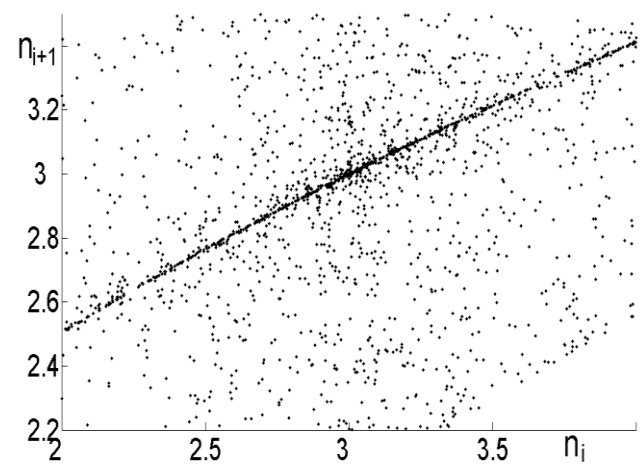
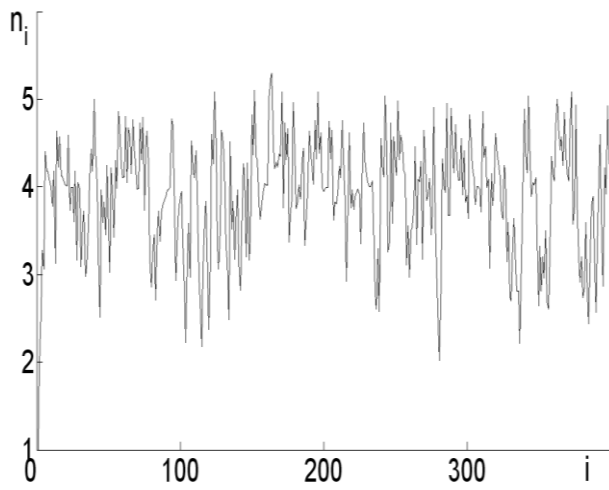


Рисунок 44. Реализация (a),
 модель поверхности (b),
 фазовая плоскость (n_i, n_{i+1}) (c)
 и ее фрагмент (d).

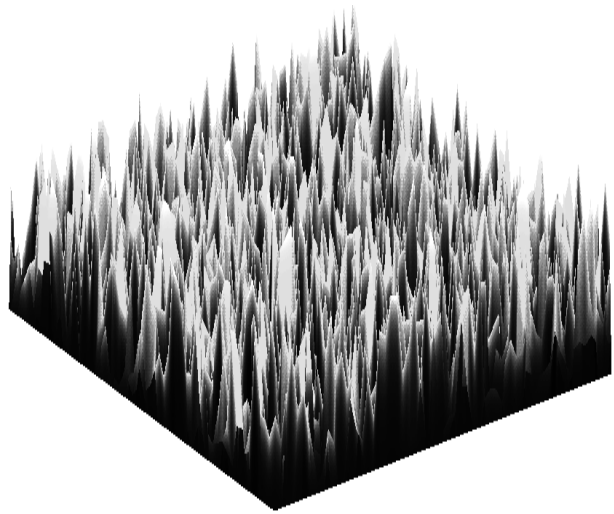
$$n_1 = p_1 = a_1 = 1, n_0 = p_0 = a_0 = 3,$$

$$\gamma_n = \gamma_p = \gamma_a = 1 + I_2.$$

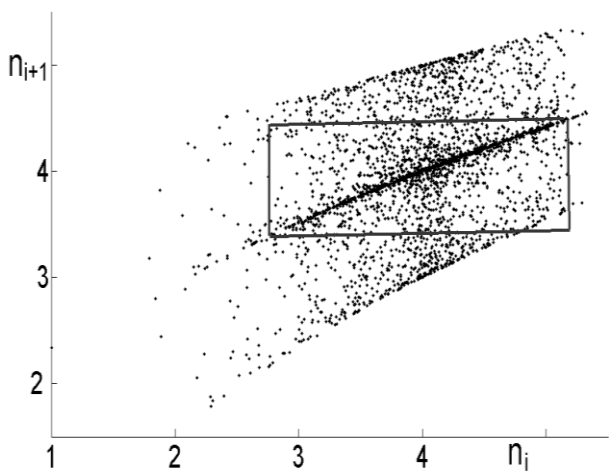
a)



b)



c)



d)

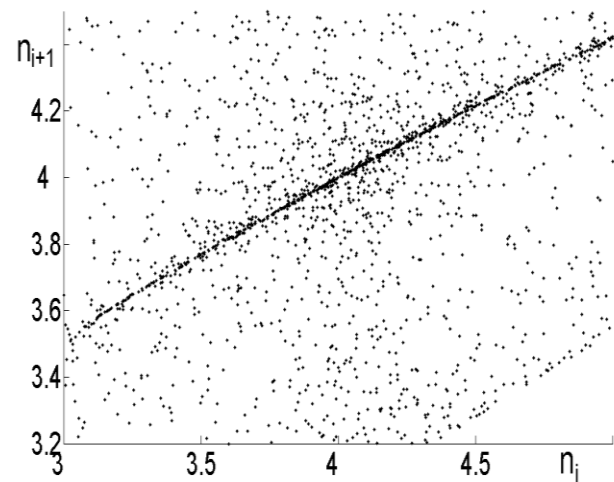
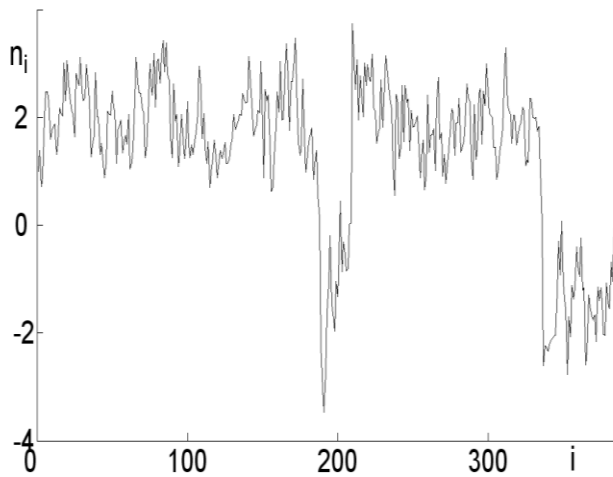


Рисунок 45. Реализация (a),
 модель поверхности (b),
 фазовая плоскость (n_i, n_{i+1}) (c)
 и ее фрагмент (d).

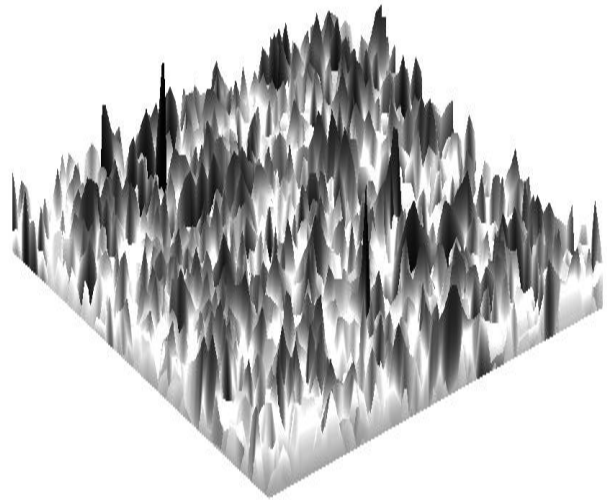
$$n_1 = p_1 = a_1 = 1, n_0 = p_0 = a_0 = 4,$$

$$\gamma_n = \gamma_p = \gamma_a = 1 + I_2.$$

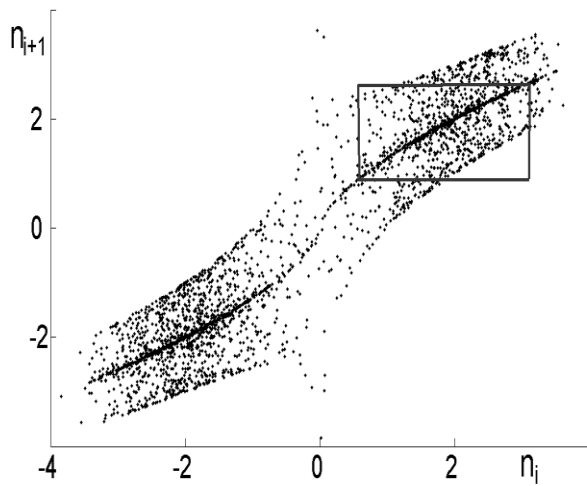
a)



b)



c)



d)

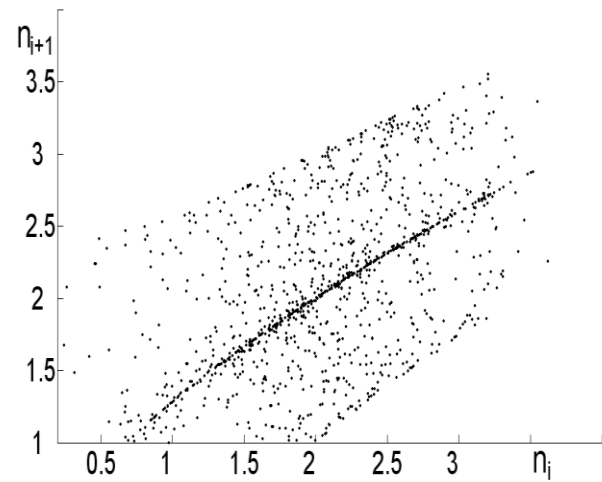


Рисунок 46. Реализация (a),
 модель поверхности (b),
 фазовая плоскость (n_i, n_{i+1}) (c)
 и ее фрагмент (d).

$$n_1 = p_1 = a_1 = 1, n_0 = p_0 = a_0 = 2,$$

$$\gamma_n = \gamma_p = \gamma_a = 2 + I_2.$$

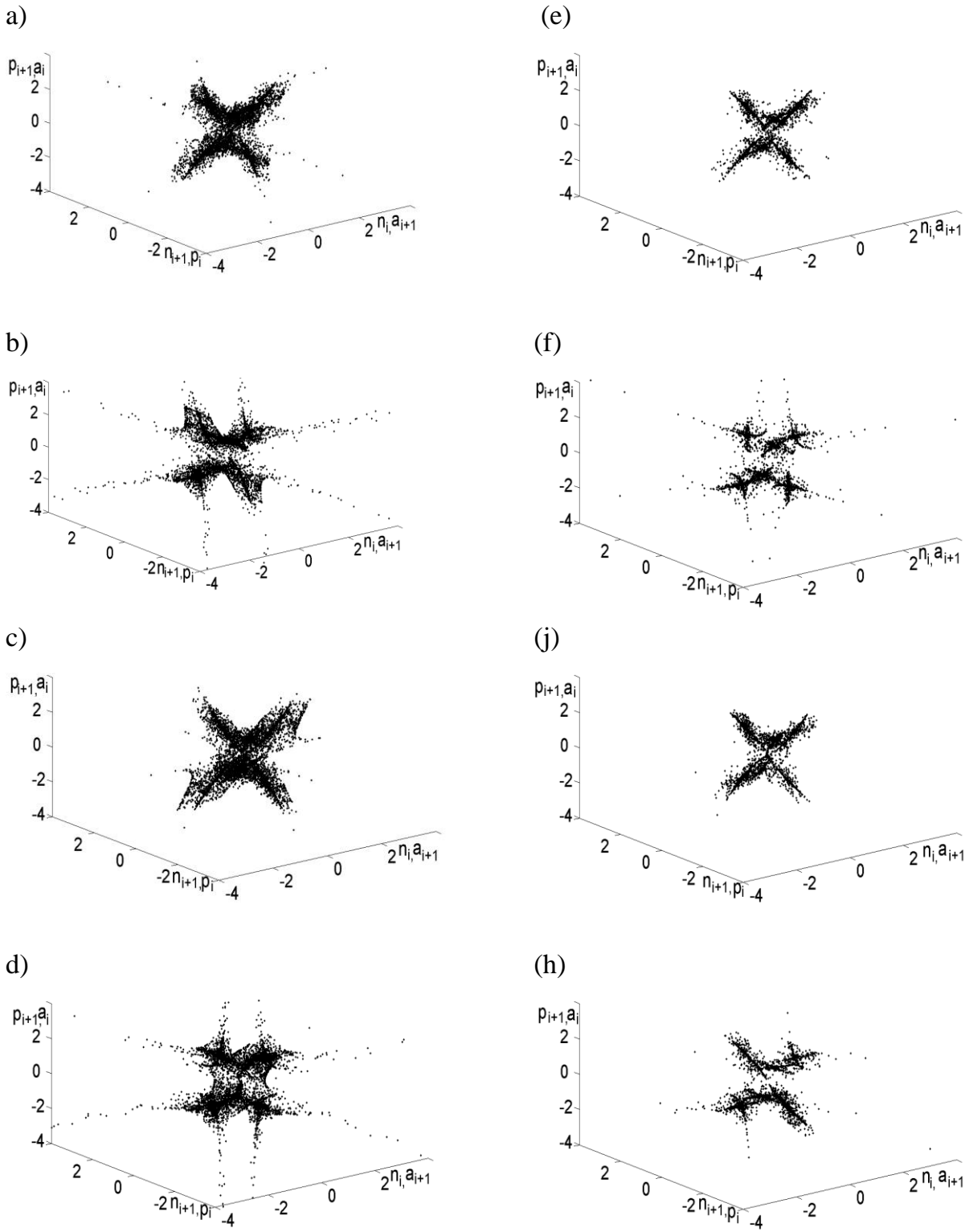


Рисунок 47. Фазовые портреты распределения концентраций электронов, дырок и примесей для случаев наличия шума (a, b, c, d) и чисто волнового типа (e, f, j, h).

$$\begin{aligned}
 & n_1 = p_1 = a_1 = 1, \quad n_0 = p_0 = a_0 = 1, \\
 & \text{(a, e): } \gamma_n = 2 + I_2, \quad \gamma_p = 3 + I_2, \quad \gamma_a = 1 + I_2, \\
 & \quad \text{(b, f): } \gamma_n = I_2, \quad \gamma_p = I_2, \quad \gamma_a = 1 + I_2, \\
 & \text{(c, j): } \gamma_n = 3 + I_2, \quad \gamma_p = 2 + I_2, \quad \gamma_a = 3 + I_2, \\
 & \quad \text{(d, h): } \gamma_n = 3 + I_2, \quad \gamma_p = I_2, \quad \gamma_a = I_2.
 \end{aligned}$$

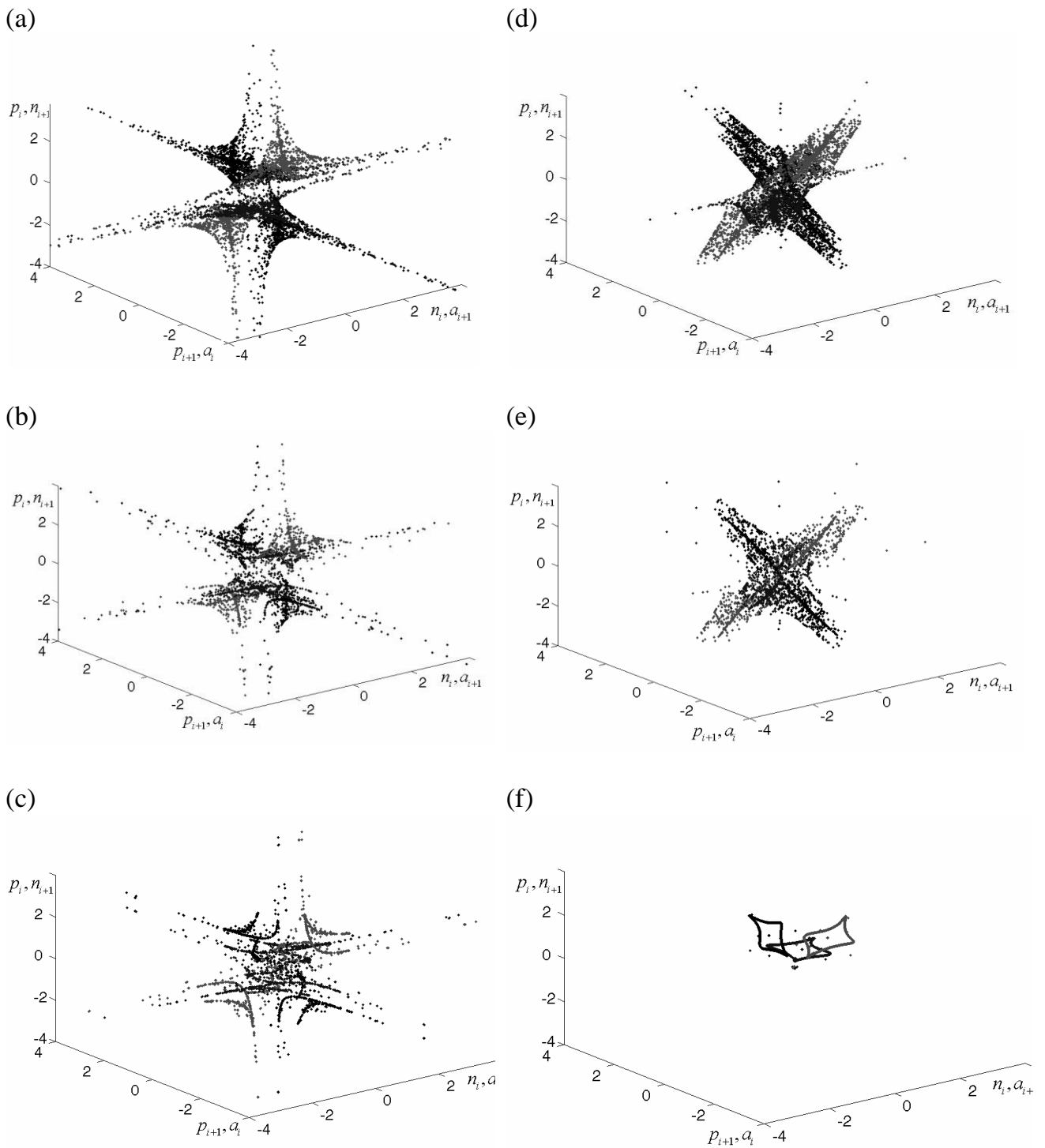


Рисунок 48. Фазовые портреты распределения концентраций электронов, дырок и примесей при различных значениях разности фрактальной и топологической размерностей.

$$\begin{aligned}
 n_0 = p_0 = a_0 = 1, \quad n_1 = p_1 = a_1 = 1, \\
 \text{(a), (b), (c): } \gamma_n = \gamma_p = \gamma_a = I_2, \\
 \text{(d), (e), (f): } \gamma_n = \gamma_p = \gamma_a = 3 + I_2.
 \end{aligned}$$

На рисунке 48 приведены фазовые портреты распределения концентраций электронов, дырок и примесей в полупроводниках. Фазовые портреты, показанные на рисунке 17 (а, b, c) получены для распределения концентраций электронов, дырок и примесей, характеризующихся малой разностью фрактальной и топологической размерностей ($\gamma_n = \gamma_p = \gamma_a = I_2$), что соответствует объемным структурам, а фазовые портреты, приведенные на рисунке 17 (d, e, f) соответствуют большим значениям такой разности ($\gamma_n = \gamma_p = \gamma_a = 3 + I_2$) и характеризуют точечные структуры.

Сопоставление результатов моделирования морфологии полупроводниковых пленок с экспериментом

Ниже приведены результаты сравнения экспериментальных данных по исследованию морфологии поверхностей полупроводниковых тонких пленок, полученных разными исследователями при помощи современных методов микроскопии, и результатов численного анализа по их моделированию на основе разработанного нами описанного выше алгоритма. Компьютерное моделирование произведено в компьютерной среде Matlab.

Картины, аналогичные микроскопическим снимкам поверхностей тонких полупроводниковых пленок, можно получить, варьируя значения параметров $\gamma_n, \gamma_p, \gamma_a, n_0, p_0, a_0$. Таким способом могут быть получены модели поверхностей полупроводниковых тонких пленок с различными типами структур.

Рисунок 49(а) получен в эксперименте [122] по эпитаксии пленки из 5 монослоев *Ag* на *Si* (001)2×1, выполненной при 65 К. Изображение получено при помощи сканирующей туннельной микроскопии. Пленка была подвергнута отжигу при туннельном токе 0.2 нА и максимальном напряжении 5 В при комнатной температуре.

Рисунок 50(а) соответствует эксперименту [123], при котором осаждение *In* произведено на подложку, полученную напылением одного монослоя *Ga* на поверхность *Si*(111)– $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ –*Ga* при комнатной температуре. Картина получена при помощи сверхвысоковакуумного сканирующего электронного микроскопа. Изображения поверхностей, показанные на рисунке 51, получены при помощи атомно-силовой микроскопии в работе [27], в которой была исследована топология поверхностей *GaAs* (100) до и после обработки в парах селена. В данной работе использовался высокоомный ($\sim 10^{16}$ см⁻³) арсенид галлия n-типа. После обработки арсенида галлия в парах селена на его поверхности

образовались островки Ga_2Se_3 с латеральными размерами порядка 100-200 нм и высотой 50-70 нм.

В экспериментальной работе [124] получено изображение полупроводниковой подложки $GaAs$ (100) p^+ – типа (рисунок 52(a)), характеризующееся высокой концентрацией дырок. Изображение поверхности полупроводника получено атомно-силовым микроскопом в атмосферных условиях при комнатной температуре.

На рисунке 53 показана поверхность p – $CdTe$, полученная в работе [26] при помощи атомно-силовой микроскопии. В этой работе исследовано образование наноразмерных структур на поверхности кристаллов $CdTe$ в зависимости от мощности лазерного излучения при однократном облучении.

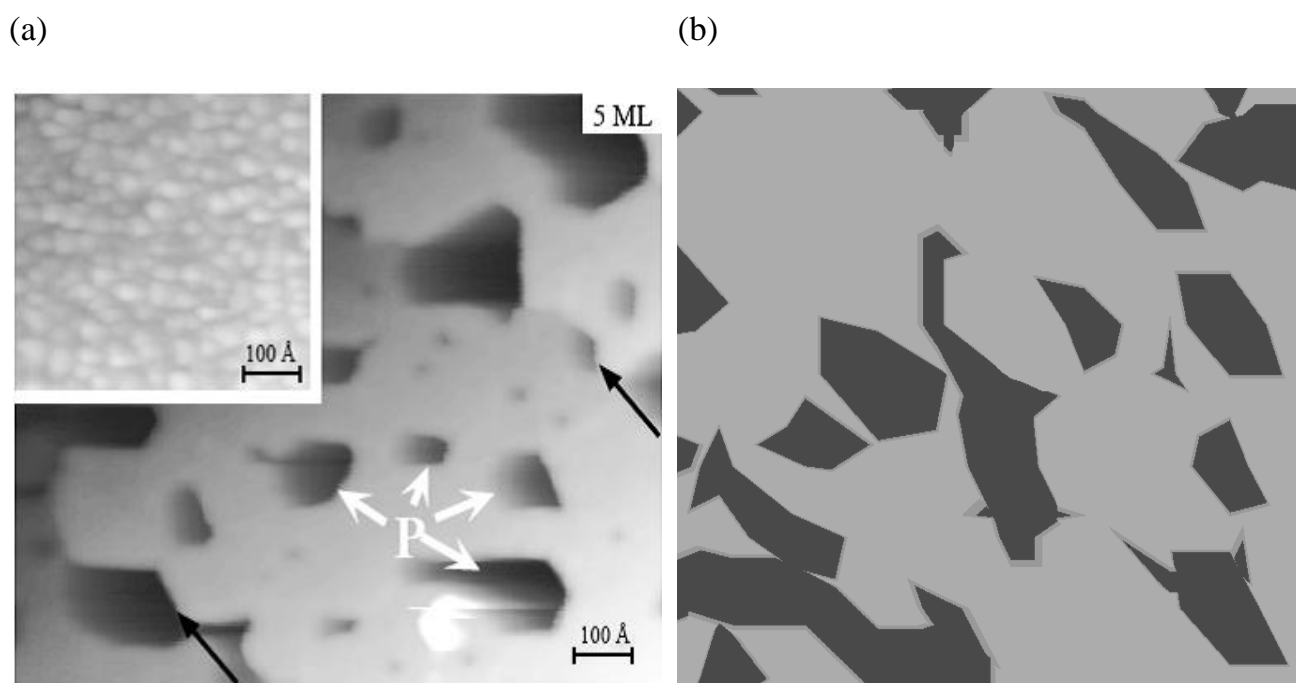


Рисунок 49. Поверхность Ag , адсорбированного на подложке Si .

(a) – эксперимент; (b) – теория:

$$\gamma_n = \gamma_p = \gamma_a = I_2, n_0 = p_0 = a_0 = 5,$$

$$n_1 = p_1 = 1, a_1 = 100.$$

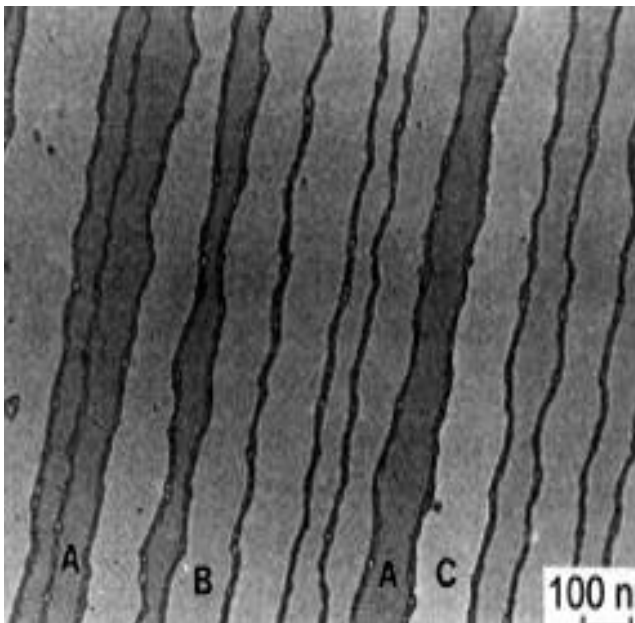
Выбрана самоподобная модель поверхности

$$D - 2 = I_2.$$

Относительные равновесные концентрации
 порядка валентности Si и Ag ,
 неравновесная концентрация примесей $a_1=100$.

Справа от экспериментальных снимков помещены модельные поверхности, полученные из уравнений (59-61) (рисунки 49(b), 50(b), 51(d, e, f), 52(b), 53(b)). Для построения моделей, показанных на рисунках 53(b,c), было использовано уравнение (59), рисунок 53(b) получен, когда функция $\varphi_{n,l}(r)$ выражена радиальной функцией электрона атома водорода в состоянии $1s$, в остальных случаях она выражена через формулу (68). Результаты численного анализа, полученные при помощи формулы (68), согласуются с экспериментальными данными при сравнительно малых значениях фрактальной размерности. При больших значениях фрактальной размерности более эффективным является применение функций Блоха-Ванье, что подтверждается сравнением рисунка 53(a) с моделями поверхностей, представленными на рисунках 53(b) и 53(c).

(a)



(b)

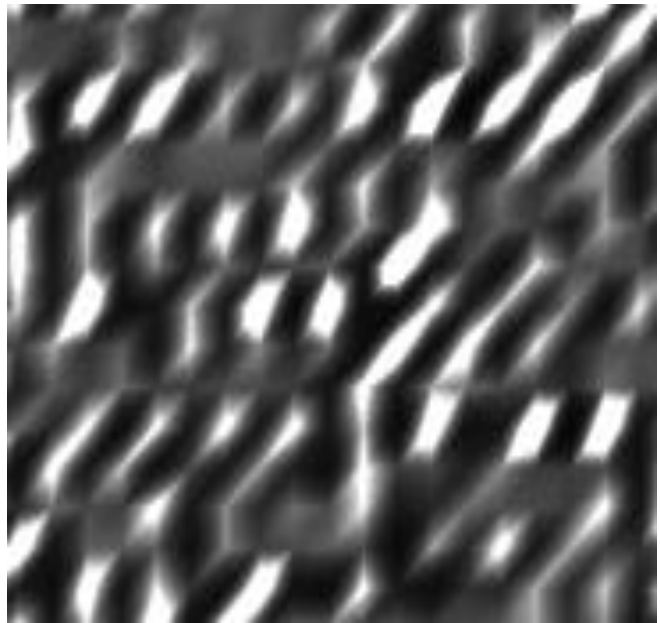


Рисунок 50. Поверхность *Si* после осаждения на нее 4 монослоев *In*.

(a) – эксперимент; (b) – теория:

$$n_1 = p_1 = 1, a_1 = 100, n_0 = p_0 = a_0 = 2.6,$$

$$\gamma_n = 0.53, \gamma_p = 2 + I_2, \gamma_a = 3 + I_2.$$

Валентность *In* меньше, чем у кремния. Поэтому значения n_0, p_0, a_0 выбраны порядка 3. Сложность технологии получения поверхности учтена различными значениями $\gamma_n, \gamma_p, \gamma_a$.

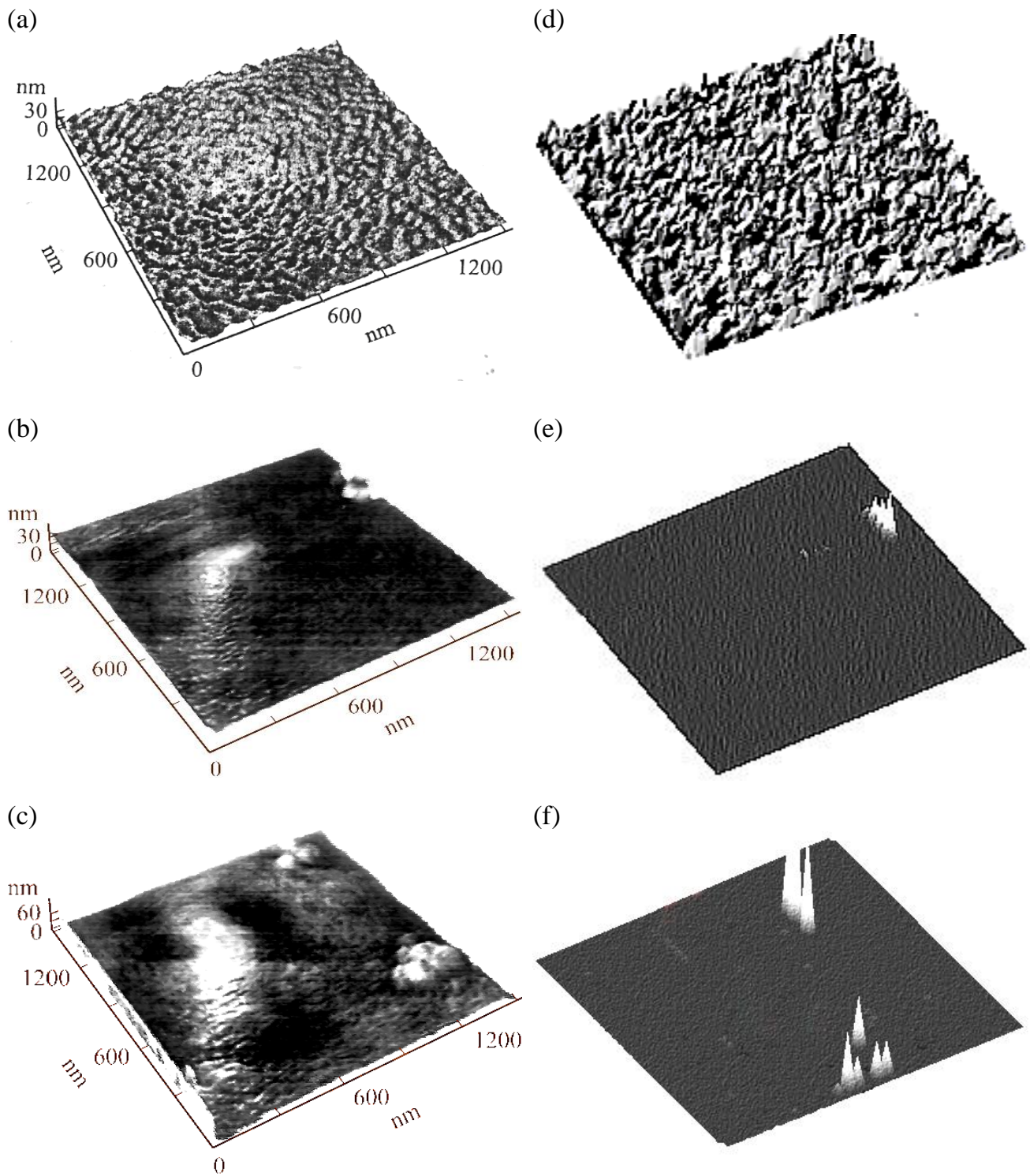


Рисунок 51. Поверхность $GaAs(100)$.

(a), (b), (c) – эксперимент; (d), (e), (f) – теория

(d) – $\gamma_a = \gamma_p = \gamma_n = 1 + I_2$, $n_1 = p_1 = a_1 = 1$, $n_0 = a_0 = p_0 = 20$,

(e) – $\gamma_a = \gamma_p = \gamma_n = I_2$, $n_1 = p_1 = 1$, $a_1 = 20$, $n_0 = p_0 = a_0 = 2$,

(f) – $\gamma_a = \gamma_p = \gamma_n = I_1$, $n_1 = p_1 = 1$, $a_1 = 20$, $n_0 = p_0 = a_0 = 2$.

Для теоретического описания таких поверхностей, содержащих одновалентный селен, использованы большие значения равновесных концентраций.

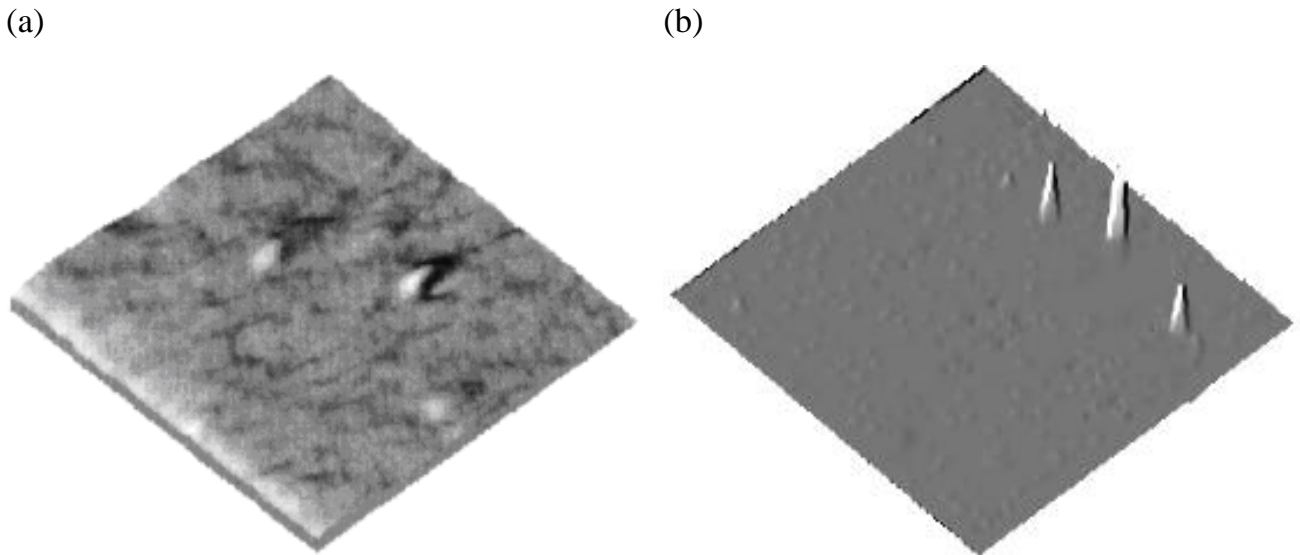


Рисунок 52. Морфология поверхности $p^+ - GaAs(100)$.

(a) – эксперимент; (b) – теория:

$$\gamma_n = I_2, \gamma_p = \gamma_a = 1 + I_1, n_0 = p_0 = a_0 = 1.5, n_1 = p_1 = 1, a_1 = 15.$$

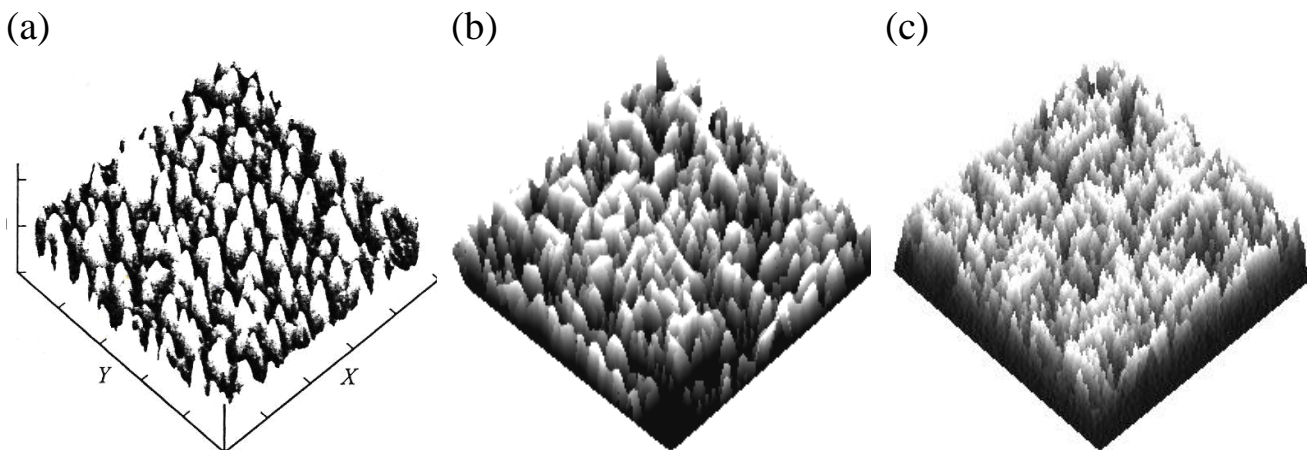


Рисунок 53. Поверхность $p - CdTe$.

$$\gamma_n = \gamma_p = \gamma_a = 3 + I_2, n_1 = p = 1, a = 10, n_0 = 3.$$

(a) – эксперимент; (b), (c) – теория:

Технологическая сложность наноструктур учтена главным образом большим значением фрактальной размерности $D = 3 + I_2$.

На рисунках 54(a-c) показаны полученные нами теоретические модельные поверхности, подобные поверхностям пленки ZnO на сапфировой подложке, изображение которых получено с помощью

атомно-силового микроскопа [25]. Напыление ZnO -пленок проводилось в вакуумной камере из нержавеющей стали. Морфология пленки, подобная

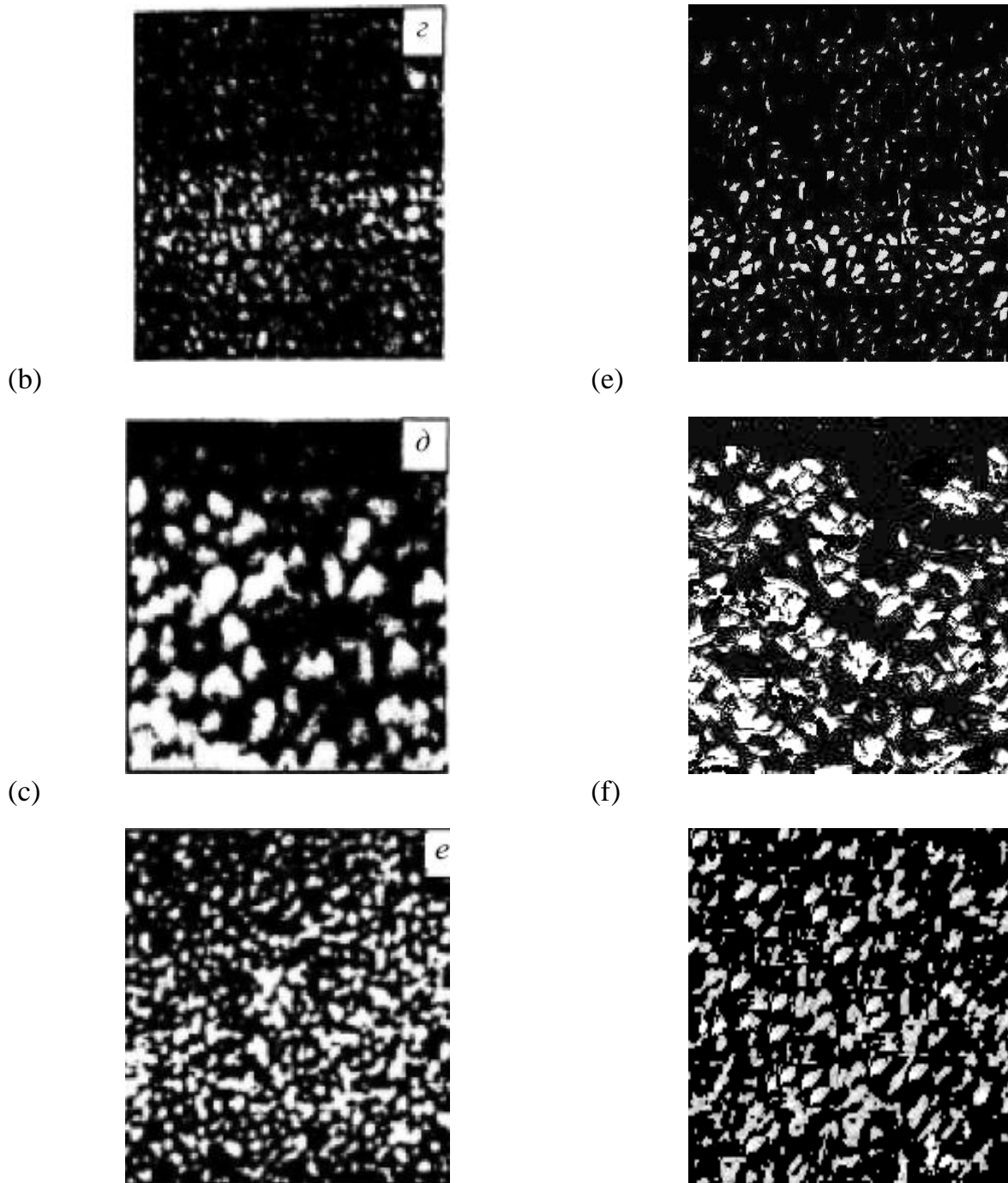


Рисунок 54. Модели поверхностей пленок ZnO на сапфировой и кремниевой подложках.

(a), (b), (c) – эксперимент;

(d), (e), (f) – теория:

(d): $\gamma_n = 1.4$; $\gamma_p = 1.4$; $a = 2$; (e): $\gamma_n = \gamma_p = 2.06$; $a = 0.5$; (f): $\gamma_n = 1.82$; $\gamma_p = 0.806$; $a = 0.5$.

Результат отжига моделируется различными значениями дробной части фрактальной размерности.

показанной на рисунке 54(a), наблюдалась при напылении ZnO на сапфировую подложку при давлении 10 мТор и температуре 370 °С в течение 20 минут. Пленка, подобная показанной на рисунке 54(b), получена при тех же значениях давления, температуры и времени экспозиции, но дополнительно подвергнута отжигу при температуре 370°С в течение 1 часа. В результате на поверхности пленки наблюдается образование островковых структур. На рисунке 54(c) приведена модель, описывающая поверхность пленки ZnO на кремниевой подложке, полученную при помощи той же методики при тех же значениях давления и температуры.

В экспериментальной работе [125] при использовании методов сканирующей туннельной микроскопии обнаружено, что пленка собственного оксида эпитаксиального $n-GaAs(100)$ образована плотно смыкающимися между собой нанокластерами, состоящими из оксидов Ga,As и избыточного слоя As на интерфейсе $Ga_2O_3/n-GaAs$. На рисунке 55(a) показана соответствующая теоретическая модель свободной от оксида поверхности $n-GaAs$, на рисунке 55(b) – модель поверхности $n-GaAs$ после 20 минут пребывания на воздухе. Различные параметры моделирования соответствует тенденции процесса окисления: рост неравновесности и уменьшение размерности.

В работе [126] изучен рост пленок $Si_{1-x}Ge_x$ ($x \approx 0.25$) на кремниевой подложке при использовании сверхтонких аморфных кремниевых буферов толщиной порядка 30 Å посредством молекулярно-лучевой эпитаксии. На рисунке 56 показана теоретическая модель изображения поверхности такой пленки, полученного в эксперименте [126] атомно-силовым микроскопом. Определяющим фактором в этом случае является наличие сверхтонких (почти точечных) структур в объеме, поэтому принято $\gamma \approx D = 3 + I_2$.

Работа [127] посвящена экспериментальному исследованию сканирующей туннельной микроскопией морфологии слоя $InGaN$ на поверхности GaN . Авторы работы отмечают, что при определенном подборе температуры, давления и скорости роста на поверхности образца наблюдается самоорганизованное образование наноструктур. На рисунках 57(a, b) показаны модели поверхности образца GaN , на поверхность которого нанесен слой $InGaN$ толщиной 3.9 нм посредством помещения в медленный поток атомов In при 600°С. Показанная на рисунке 57(a) модель идентична полученной в этом эксперименте области сканирования 1000×1000 нм², на рисунке 57(b) – 100×100 нм². Основным фактором в этом случае является наличие многовалентного N , что учтено соответствующим выбором равновесных концентраций.

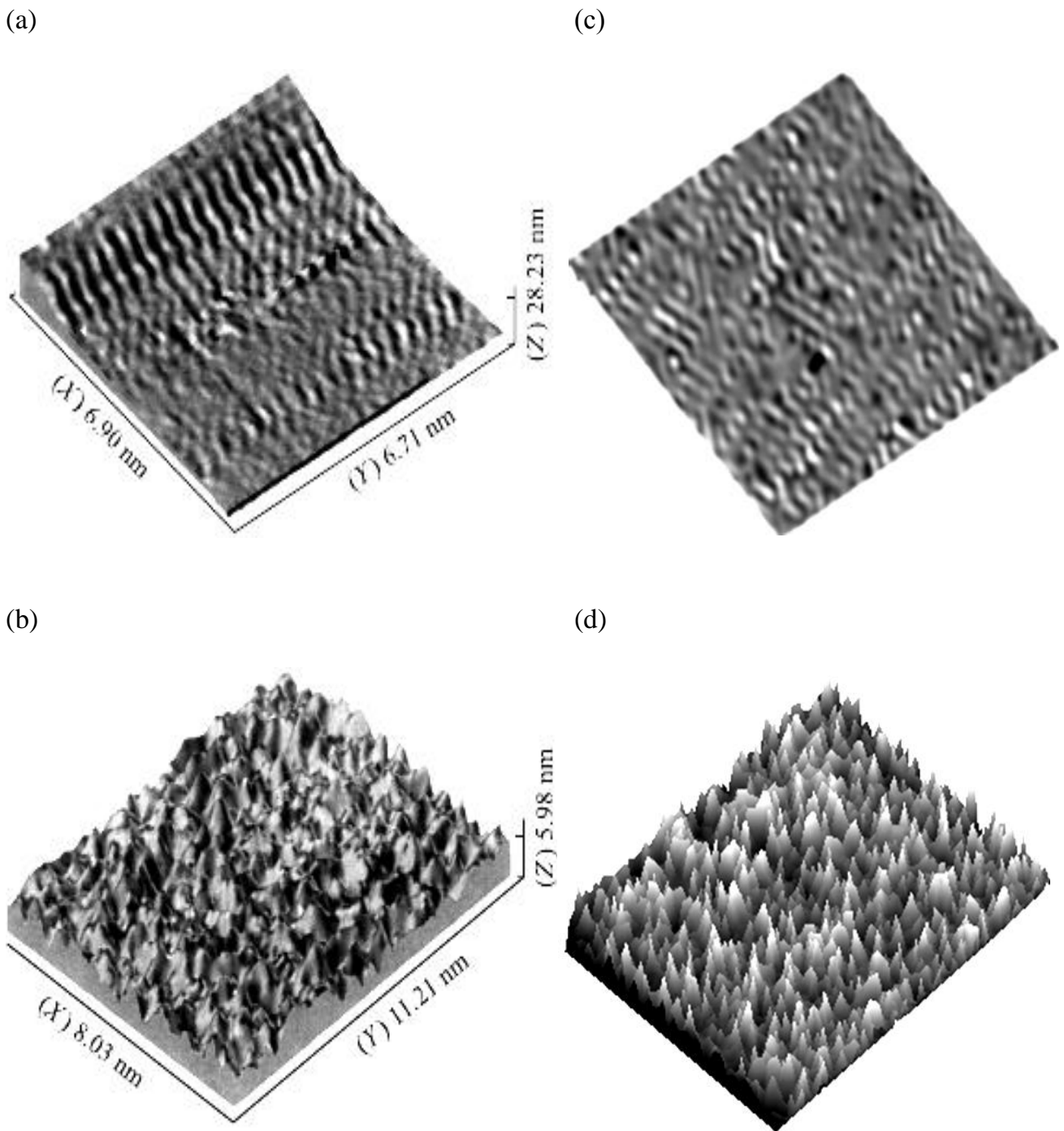


Рисунок 55. Модель поверхности *n-GaAs*.
 (a), (b) – эксперимент; (c), (d) – теория:

$$(c) - n_1 = p_1 = a_1 = 1, n_0 = p_0 = a_0 = 2.5, \gamma_n = I_1, \gamma_p = 2 + I_2, \gamma_a = 3 + I_2,$$

$$(d) - n_1 = p_1 = 1, a_1 = 50, n_0 = p_0 = a_0 = 2.5, \gamma_n = \gamma_p = \gamma_a = 1 + I_2.$$

Различные параметры моделирования соответствуют тенденции процесса окисления: рост неравносности и уменьшение размерности.

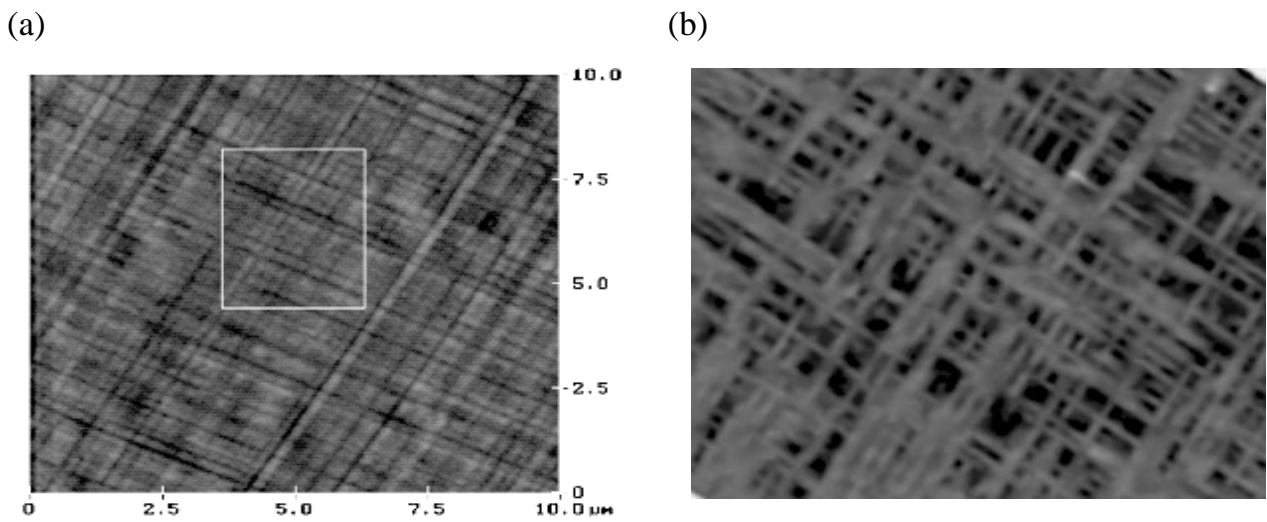


Рисунок 56. Модель поверхности $Si_{1-x}Ge_x$ на кремниевой подложке.

(a) – эксперимент; (b) – теория: $n_1 = p_1 = a_1 = 1$, $\gamma_n = \gamma_p = \gamma_a = 3 + I_2$, $n_0 = p_0 = a_0 = 1$.

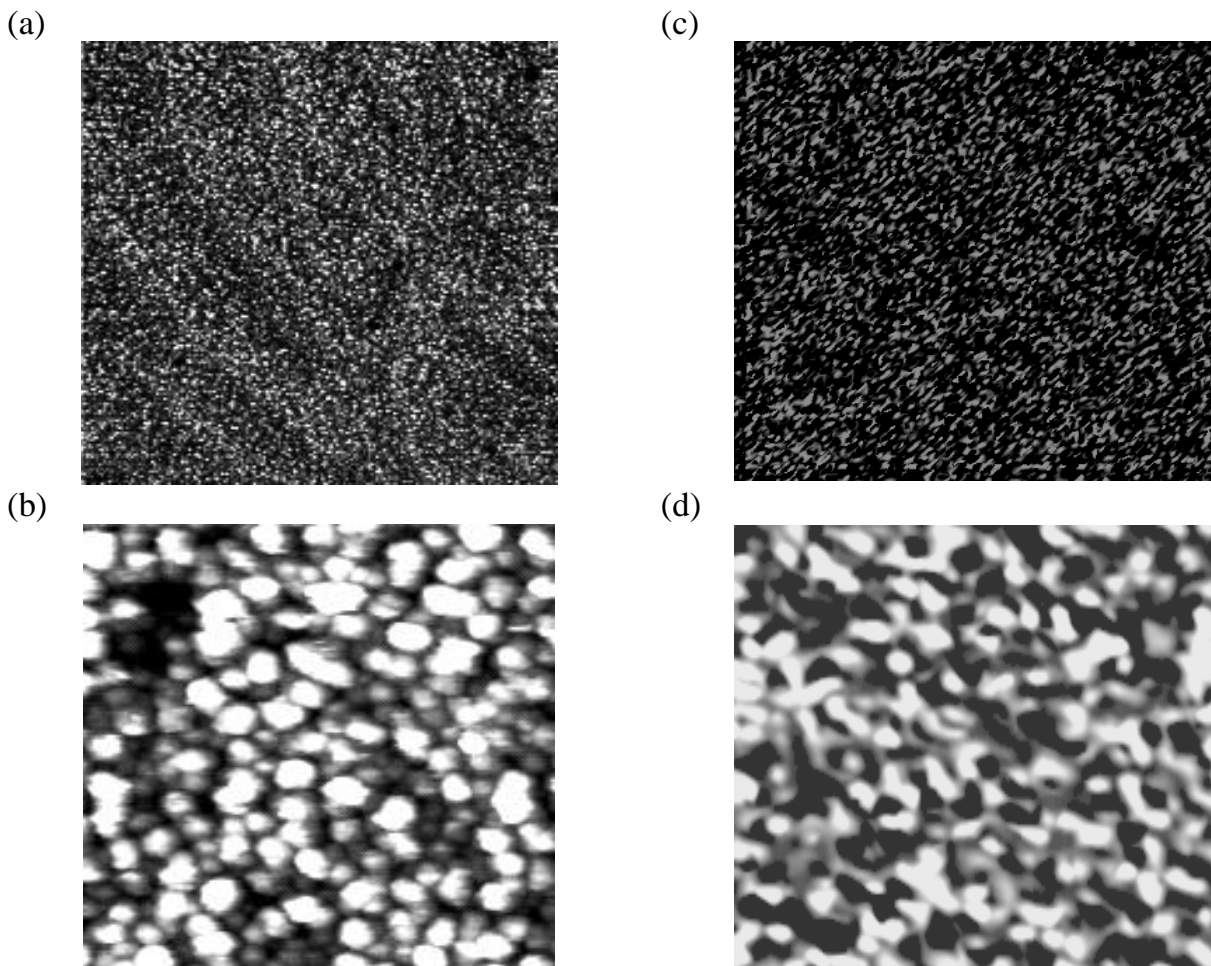


Рисунок 57. Теоретическая модель поверхности $InGaN$ на подложке GaN .

(a, b) – эксперимент; (c, d) – теория: $n_1 = p_1 = 1$, $a_1 = 5$, $\gamma_n = \gamma_p = \gamma_a = I_2$, $n_0 = p_0 = a_0 = 5$.

Рисунки (b), (d) отличаются от рисунков (a), (c) увеличением разрешения в сто раз.

(a)



(b)

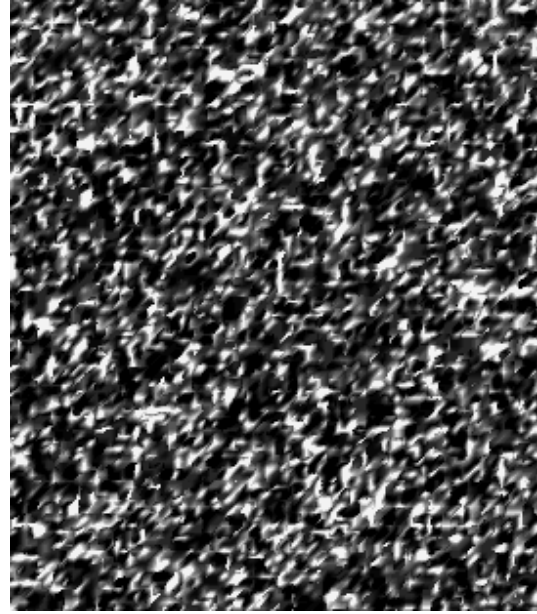


Рисунок 58. Морфология поверхности тонкой пленки SnO_2 .
(a) – эксперимент; (b) – теория:

$$n_1 = p_1 = a_1 = 1, \gamma_n = \gamma_p = \gamma_a = 1 + I_1, n_0 = p_0 = a_0 = 15.$$

На рисунке 58 показана модель пленки, аналогичная фотографии поверхности образца SnO_2 , полученной методом просвечивающей электронной микроскопии [128]. Средний размер зерен составляет 11-19 нм. Выбор параметров тоже соответствует сути явления: во фрактальном объеме ($D > 3$) расположены самоподобные плоские элементы ($d = 2$), которым соответствует высокая валентность ($n_0 = p_0 = a_0 = 15$).

Теория позволяет выделить следующие закономерности фрактальных поверхностей полупроводников. Квазирегулярные линейчатые и плоские структуры описываются малыми значениями дробной части фрактальной размерности ($\gamma \leq I_1$). Мелкомасштабные случайные образования соответствуют относительно большим значениям $\gamma \geq I_2 + d$, $d = 0, 1, 2, 3$. Стабилизирующее влияние подложки на образование структур учитывается преобладающей долей равновесной концентрации частиц ($n_0 > 1, p_0 > 1, a_0 > 1$). Количество свободных (валентных) электронов в кластере учитывается соответствующим выбором функции Блоха-Ванье или вида радиальной функции, которая используется для аппроксимации этой функции.

Все модели морфологии поверхностей полупроводниковых пленок, приведенные на рисунках 49-58, качественно верно описывают соответствующие экспериментальные картины, описанные выше. Это позволяет сделать вывод о том, что система нелинейных уравнений (59)-(61) применима к описанию наблюдаемых образований на

поверхности наноструктурированных полупроводников. Мы хотим особо отметить, что вопрос не стоял о точном количественном соответствии теории с экспериментом. Для хаотических процессов, каким является образование наноструктур, можно говорить только о статистических закономерностях, которые, на наш взгляд, обнаруживаются использованной системой уравнений.

Моделирование морфологии наноструктурированных полупроводников универсальным отображением фрактальной эволюции меры

Выше мы привели результаты применения формул (59)-(61) и (68). При этом знаковая функция, входящая в эти уравнения, была выбрана в виде знака функции случайного процесса, затем в виде знака волновой функции. Оба варианта приемлемы. Этот факт направляет на мысль о возможности выбора знаковой функции в более общем универсальном виде – в виде мультипликатора, как в теории динамического хаоса. Динамический хаос может иметь также вероятностные, статистические закономерности, практически не различающиеся от истинно случайных процессов. Но при этом имеется отличие: реализацию динамического хаоса можно точно восстановить, зная начальные условия. Этот факт позволит более точно различать специфику квантово-размерных эффектов, связанных с геометрией квантовых точек, нитей ям. При использовании мультипликатора в теории добавляется один параметр – степень точности разрешения (наблюдения) C , который принимает значения $0 < C < 1$. По смыслу этот параметр является аналогом меры соотношения величин, базы (сложности) в теории колебаний. Таким образом, для анализа морфологии поверхности наноструктур будем пользоваться универсальным отображением для эволюции фрактальной меры, а для анализа физических (тепловых, электрических, оптических) явлений необходимо дополнительно пользоваться статистическими закономерностями квантовых систем.

Этот подход мы применяем к описанию морфологии поверхностей с квантовыми нанонитями. Для получения поверхности с нанонитями воспользуемся формулой (78) методом реконструкции динамического хаоса (формула (79)). Ниже приведены результаты компьютерного моделирования в среде Matlab морфологии поверхностей, содержащих квантово-размерные структуры, согласно описанной методике. Величина τ принята равной 15. На рисунке 59 приведены реализация и модель поверхности полупроводниковой пленки, содержащей квантовые точки, полученная на основе указанных выше формул. Для квантовых точек должно быть $d = 0, D > 3$, следовательно, $\gamma > 3$. Дробные значения начальных концентраций соответствуют описанию пористости.

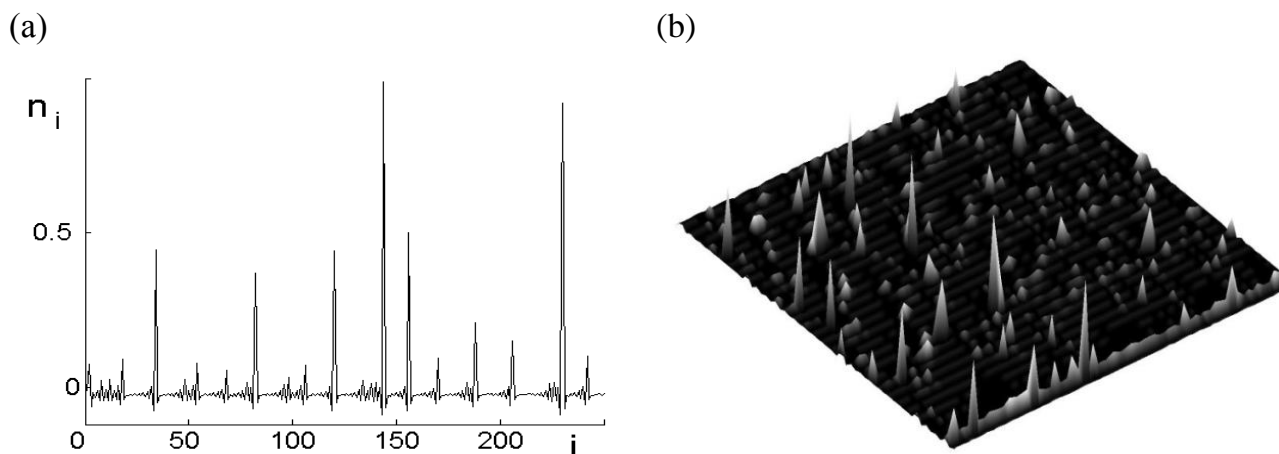


Рисунок 59. Реализация отображения (a) и морфология (b) квантовых точек.
 $C_n = C_p = C_a = 0.9; \gamma_n = \gamma_p = \gamma_a = 3 + I_2; n_0 = p_0 = 1/4, a_0 = 1; \mu_0 = -1.$

На рисунке 60 представлена компьютерная модель морфологии поверхности нанопленки, содержащей квантовые нити. Нить имеет топологическую размерность $d=1$, размерность фрактального объема $D>3$, следовательно, для нитевидной морфологии должно быть $\gamma = D - d > 2$. Аналогично, топологическая размерность квантовых ям $d=2$. Поэтому разность между фрактальной и топологической размерностями должна быть $\gamma = D - d > 1$ (рисунок 61). Модели поверхностей полупроводниковых квантово-размерных структур, приведенные на рисунках 59-61, наблюдаются в эксперименте [30-33, 39, 43, 45, 51, 129].

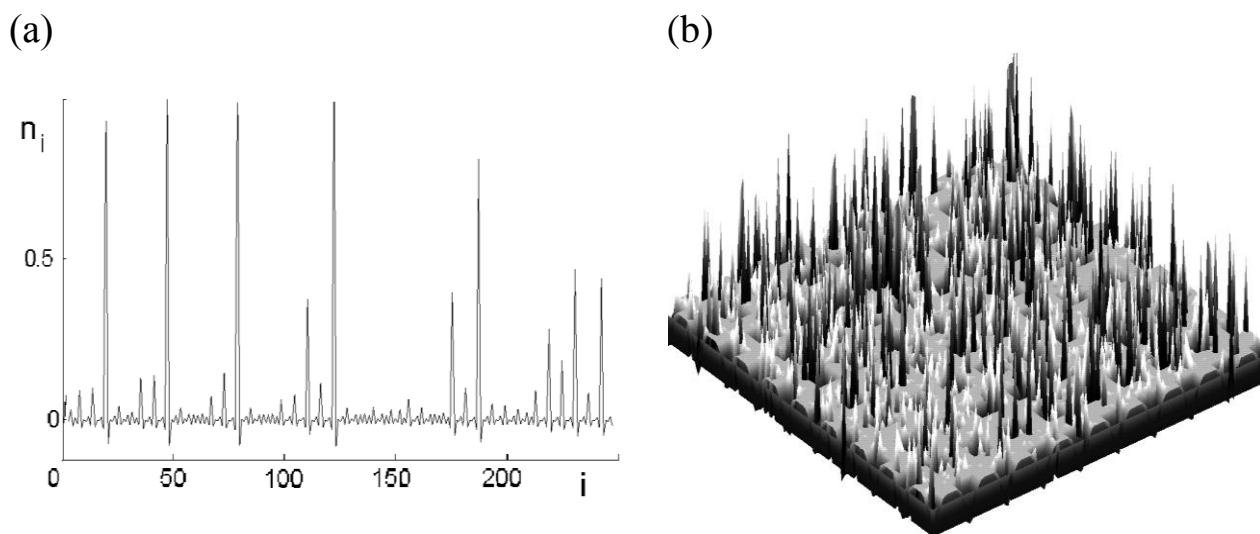


Рисунок 60. Реализация (a) и морфология (b) квантовых нитей.
 $C_n = C_p = C_a = 0.9; \gamma_n = \gamma_p = \gamma_a = 2.8; n_0 = p_0 = 1, a_0 = 1; \mu_0 = -1.$

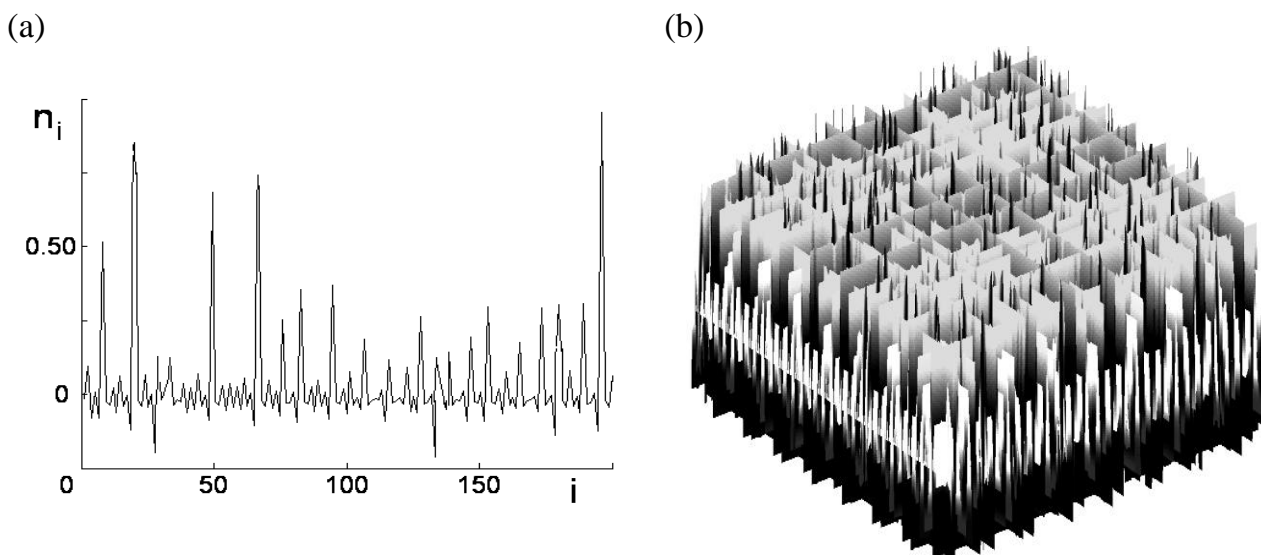


Рисунок 61. Реализация (а) и модель поверхности (b), содержащей квантовые ямы.

$$C_n = C_p = C_a = 0.9; \gamma_n = 1 + I_2; \gamma_p = 1 + I_1; \gamma_a = 2 - I_2; n_0 = p_0 = 1/4, a_0 = 1; \mu = -1.$$

Экспериментальное исследование морфологии поверхностей образцов стало возможным в течение последних трех десятилетий в связи с изобретением новых, современных видов микроскопии – сканирующей туннельной, атомно-силовой, электронной, просвечивающей и т.д. Разрешение таких микроскопов позволяет получать изображения нанокластеров на поверхностях тонких пленок. В том числе были получены фотографии поверхностей полупроводниковых тонких пленок, содержащих квантовые нанонити.

Ниже мы несколько подробнее остановимся на вычислениях, связанных с квантовыми нитями, поскольку использование полупроводниковых пленок с квантовыми нанонитями может привести к улучшению их оптических свойств, а именно к повышению коэффициента поглощения света, что в конечном итоге обеспечит более высокий коэффициент полезного действия солнечных элементов на таких пленках. Это позволяет получить существенный экономический эффект. Поэтому изучение физических, в том числе оптических, свойств полупроводниковых тонких пленок, содержащих квантовые нити, представляется одной из наиболее важных задач нанoeлектроники.

Ниже приведены результаты исследования по изучению влияния различных параметров на морфологию пленок с квантовыми нанонитями, проведенного компьютерным моделированием в среде Matlab. На рисунках 62-66 показано сильное влияние фрактальной размерности на рельеф поверхности полупроводниковой пленки, содержащей квантовые нити, реализации отображения (пространственного распределения концентрации), а также на фазовую плоскость, характеризующую рас-

пределение носителей заряда. Как видно из представленных ниже рисунков, варьируя значение фрактальной размерности в пределах, соответствующих наличию нитевидных структур ($d = 1$), можно получить модели поверхностей с квантовыми нитями, существенно отличающимися друг от друга высотой и расположением. Наличие убегающих фазовых траекторий на фазовых плоскостях свидетельствует о наличии в системе динамического хаоса, близкого к стохастическому процессу.

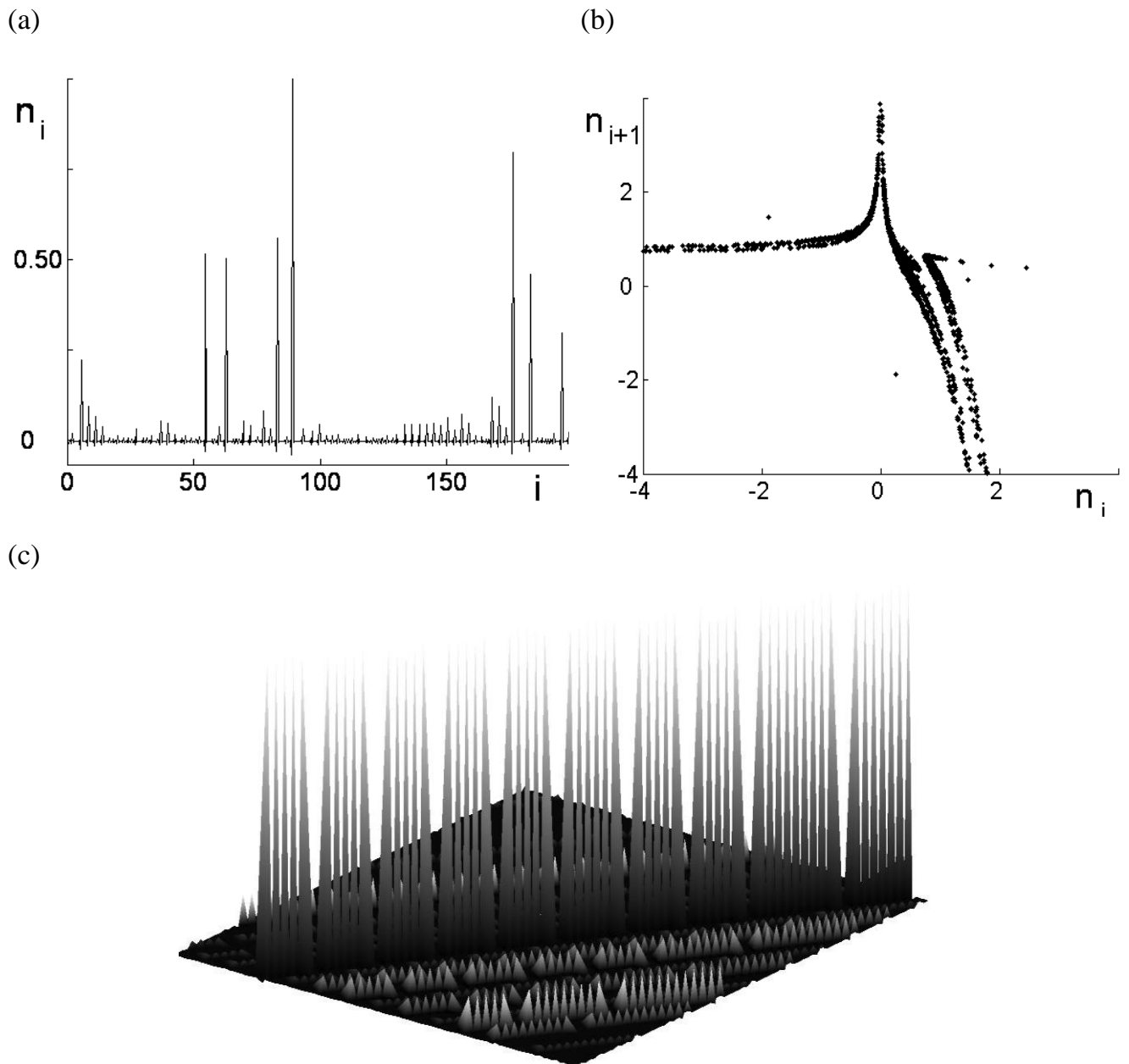


Рисунок 62. Реализация, фазовая плоскость (n_i, n_{i+1}) и модель поверхности, содержащей квантовые нити.

$$\gamma_n = \gamma_p = \gamma_a = 3 - I_2; C_n = C_p = C_a = 0.9; n_0 = p_0 = 1/4, a_0 = 1; \mu_0 = -1.$$

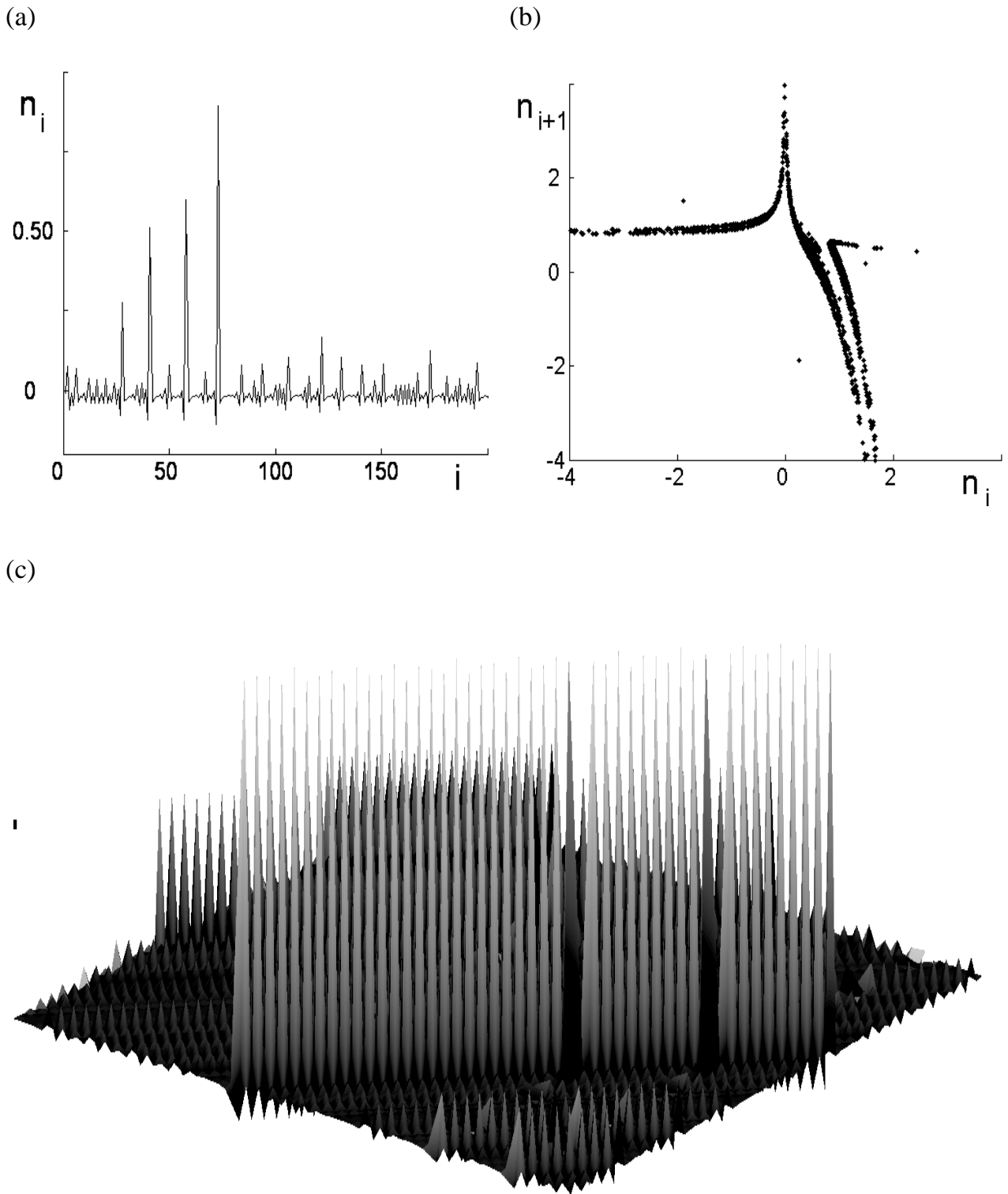
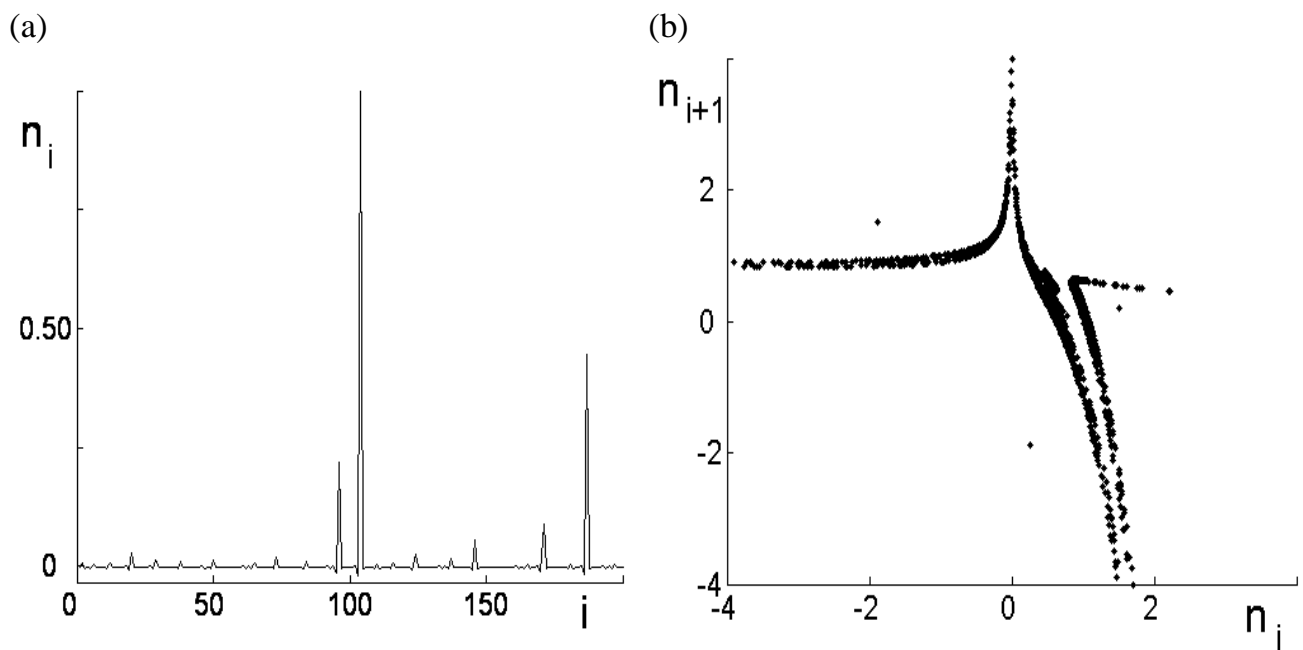


Рисунок 63. Реализация, фазовая плоскость (n_i, n_{i+1}) и модель поверхности, содержащей квантовые нити.

$$\gamma_n = \gamma_p = \gamma_a = 3 - I_1; C_n = C_p = C_a = 0.9;$$

$$n_0 = p_0 = 1/4, a_0 = 1; \mu_0 = -1.$$



(c)

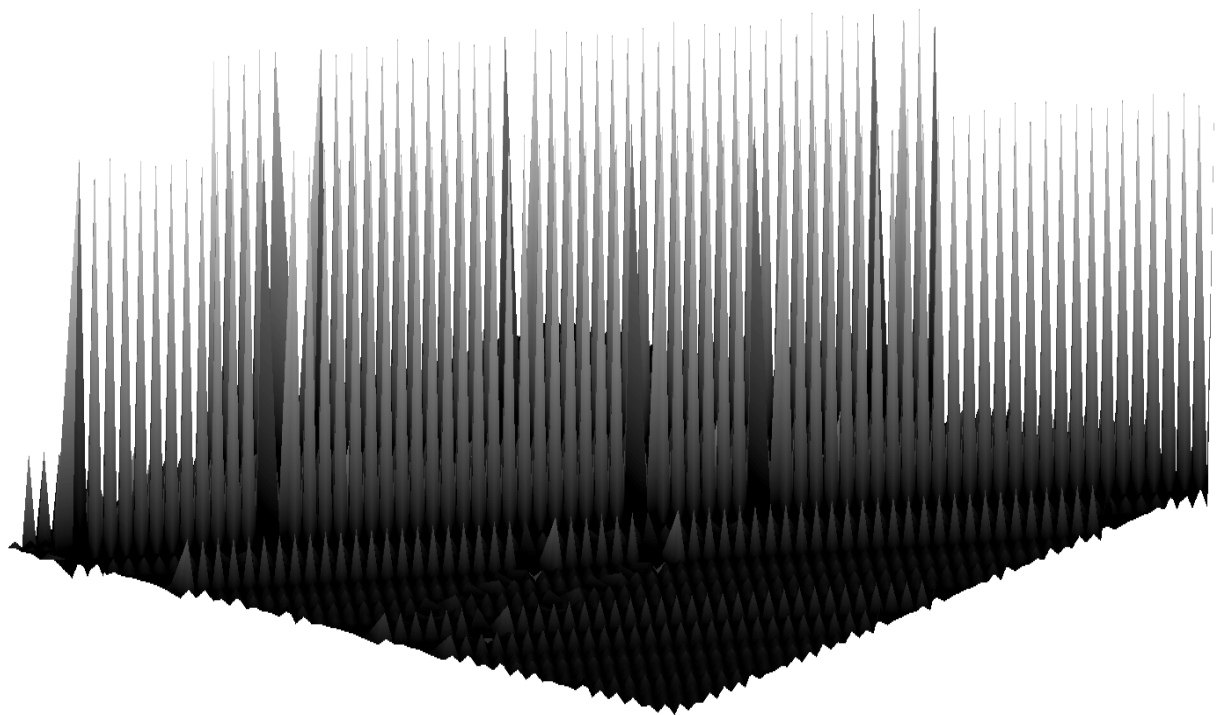


Рисунок 64. Реализация, фазовая плоскость (n_i, n_{i+1}) и модель поверхности, содержащей квантовые нити.

$$\gamma_n = \gamma_p = \gamma_a = 2 + I_{10}; C_n = C_p = C_a = 0.9;$$

$$n_0 = p_0 = 1/4, a_0 = 1; \mu_0 = -1.$$

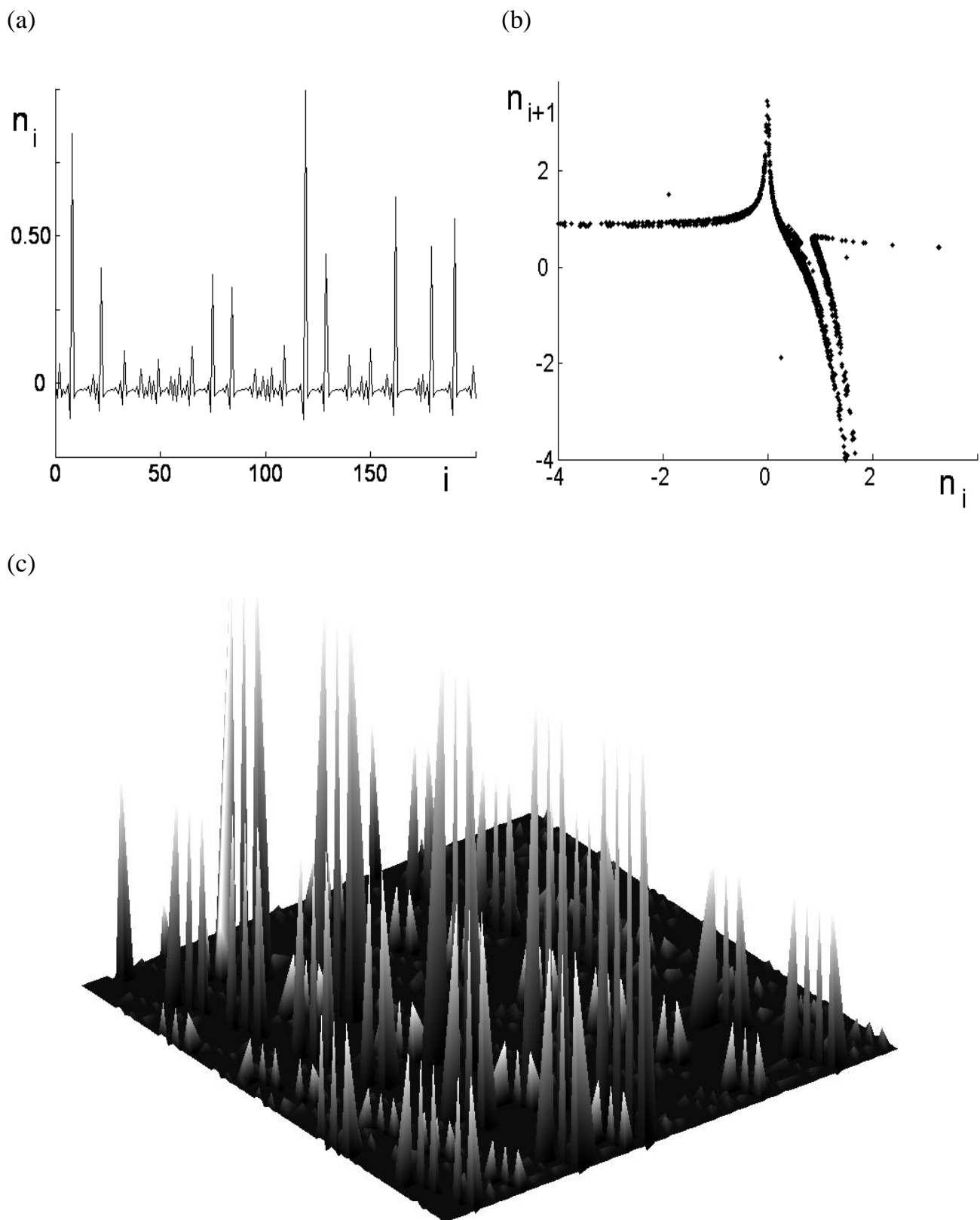


Рисунок 65. Реализация, фазовая плоскость (n_i, n_{i+1}) и модель поверхности, содержащей квантовые нити.

$$\gamma_n = \gamma_p = \gamma_a = 2 + I_1; C_n = C_p = C_a = 0.9;$$

$$n_0 = p_0 = 1/4, a_0 = 1; \mu_0 = -1.$$

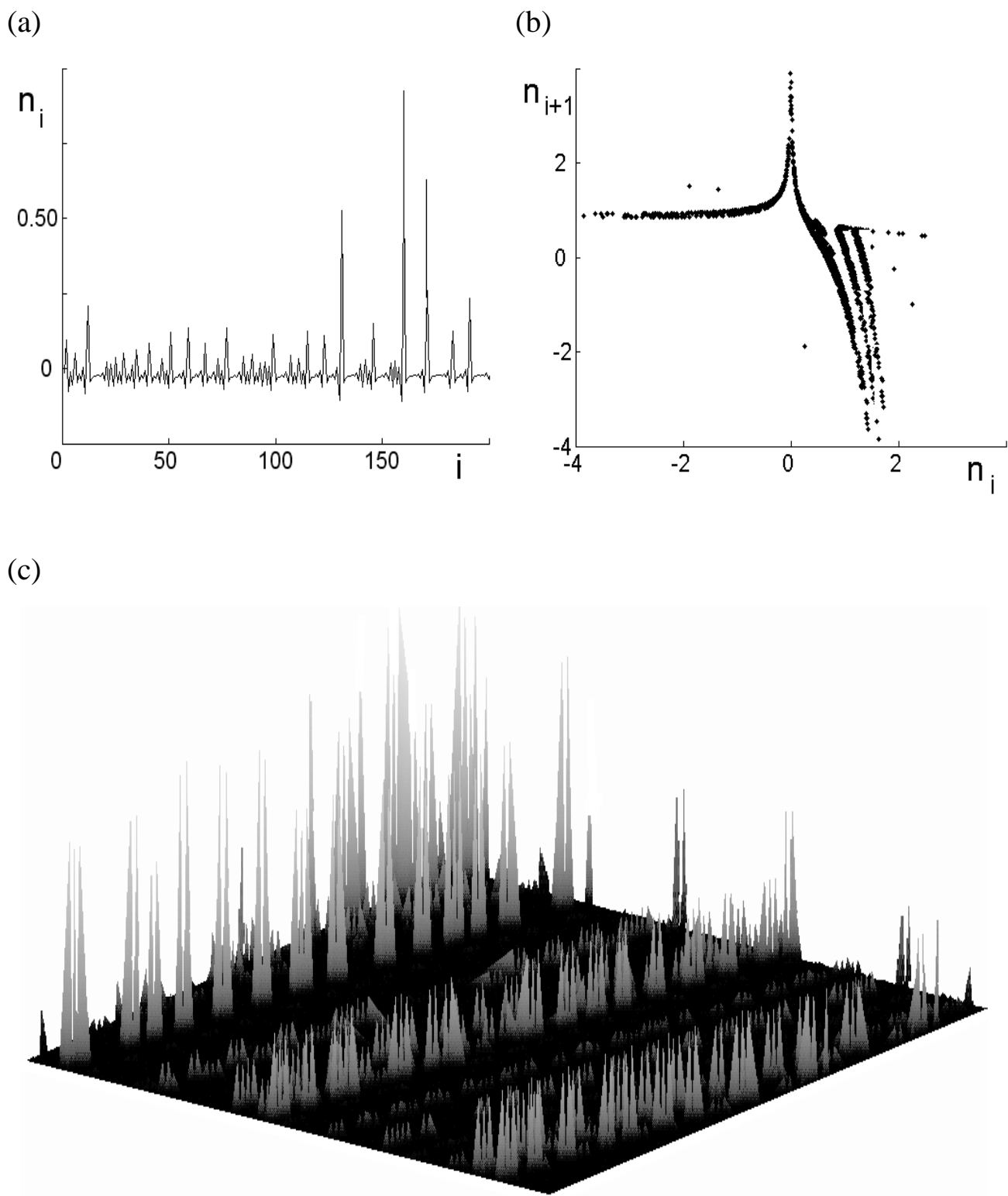
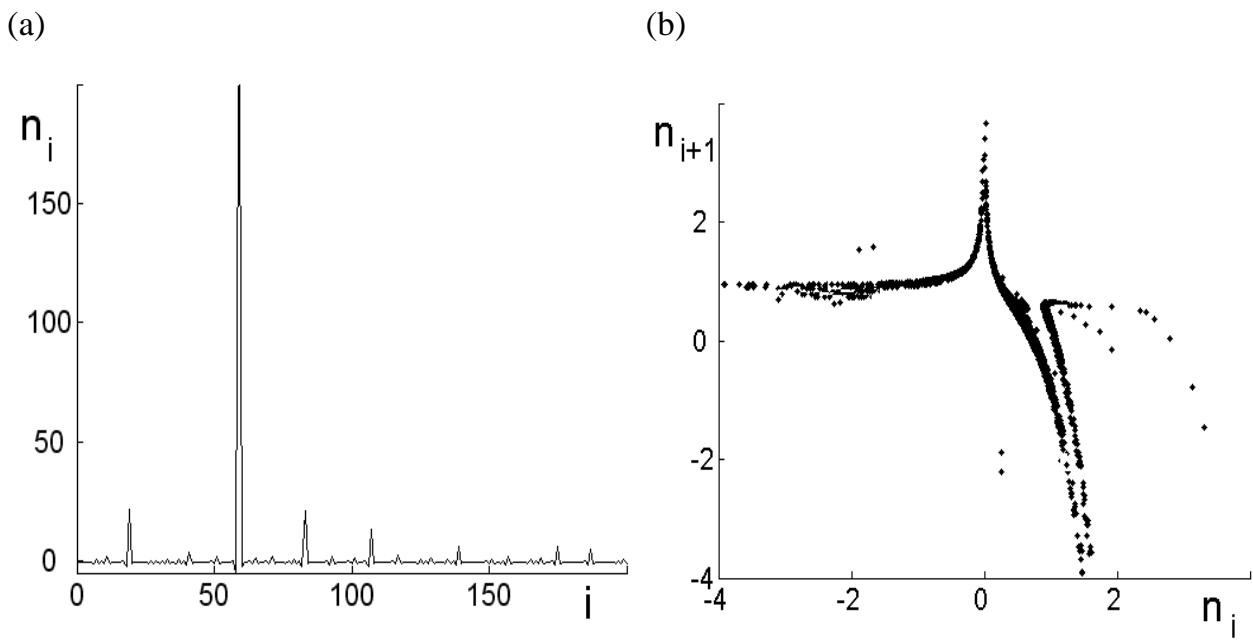


Рисунок 66. Реализация, фазовая плоскость (n_i, n_{i+1}) и модель поверхности, содержащей квантовые нити.

$$\gamma_n = \gamma_p = \gamma_a = 2 + I_{20}; C_n = C_p = C_a = 0.9;$$

$$n_0 = p_0 = 1/4, a_0 = 1; \mu_0 = -1.$$



(c)

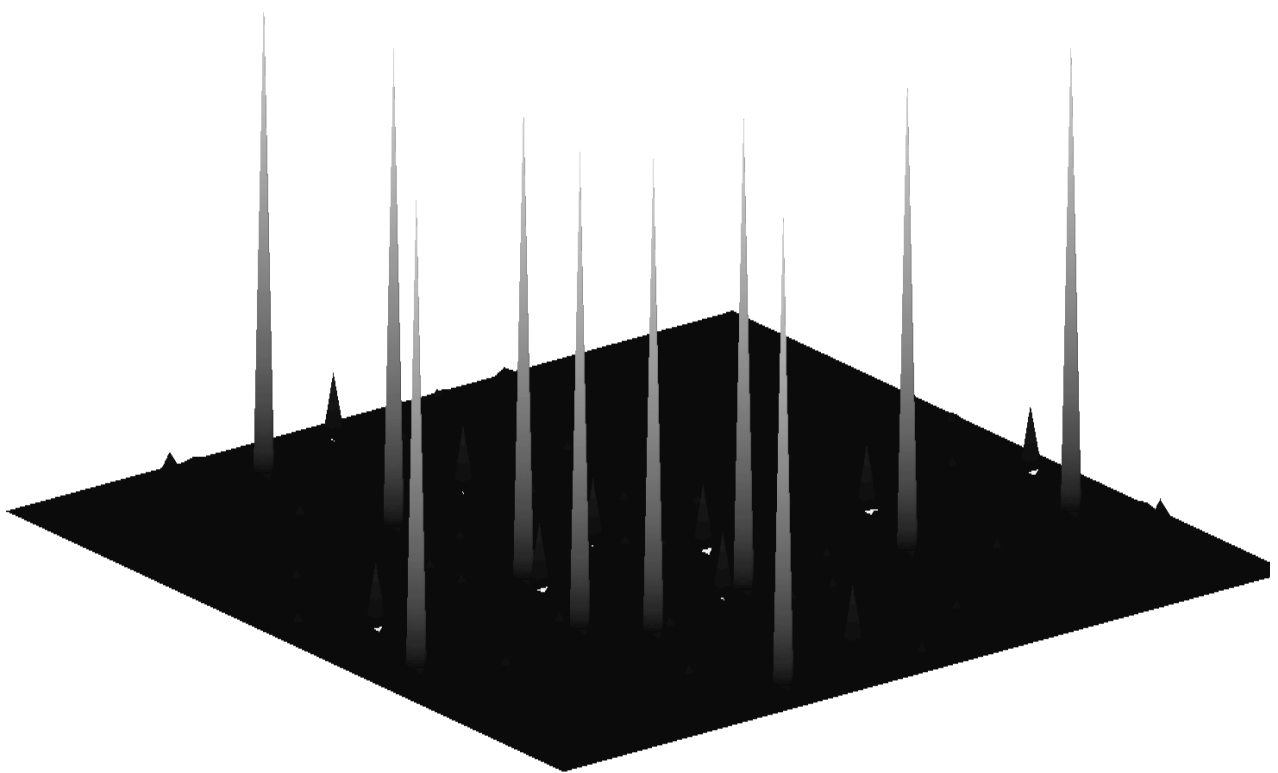


Рисунок 67. Реализация, фазовая плоскость (n_i, n_{i+1}) и модель поверхности, содержащей квантовые нити.

$$\begin{aligned} \gamma_n = \gamma_p = \gamma_a = 2 + I_2; C_n = C_p = C_a = 0.9; \\ n_0 = p_0 = 1/4, a_0 = 1; \mu = -1. \end{aligned}$$

К разнообразным картинам приводит влияние концентрации примесей на морфологию поверхностей, содержащих квантовые нити. Увеличение концентрации примесей в полупроводниковой пленке приводит к сглаживанию рельефа поверхности, высота квантово-размерных структур в виде квантовых нитей уменьшается. Чем выше значения γ , тем быстрее происходит это выравнивание. Даже незначительное изменение концентрации существенно влияет на морфологию поверхности.

Вначале рассмотрим влияние концентрации примесей на рельеф поверхности полупроводниковой пленки, содержащей квантово-размерные структуры в виде квантовых нитей, что показано на приведенных ниже рисунках. Так, на рисунке 68(a) приведена модель поверхности полупроводниковой тонкой пленки с очень малым содержанием примесей ($a_0 = 0.01$). Как видно из рисунка, такая поверхность практически гладкая. Повышение концентрации примесей приводит к увеличению шероховатости поверхности (рисунок 68(b)). Величина относительной концентрации примесей в этом случае выбрана равной 0.17. Дальнейшее увеличение концентрации примесей при неизменных остальных параметрах приводит к появлению на поверхности пленки наноразмерных структур разной высоты. Модель пленки с такой морфологией поверхности показана на рисунке 68(c) (относительная концентрация примесей увеличена до значения 0.23). Дальнейшее увеличение концентрации примесей приводит к увеличению числа пиков с относительно большой высотой (рисунок 68(d)). В этом случае концентрация примесей равна 0.50. До определенного предела дальнейшее увеличение примесей качественно картину не изменяет, однако если концентрация примесей много больше концентрации электронов и дырок в полупроводнике, морфология качественно изменяется. Например, наблюдаются практически прямолинейные горизонтальные квантовые нити (рисунок 68(e)), которые можно рассматривать как набор квантовых точек. В этом случае относительная концентрация примесей выбрана равной 5.00. Дальнейшее увеличение концентрации примесей приводит к утолщению пленки, при этом поверхность мелкозернистая, высоких пиков не содержит (рисунок 68(f)).

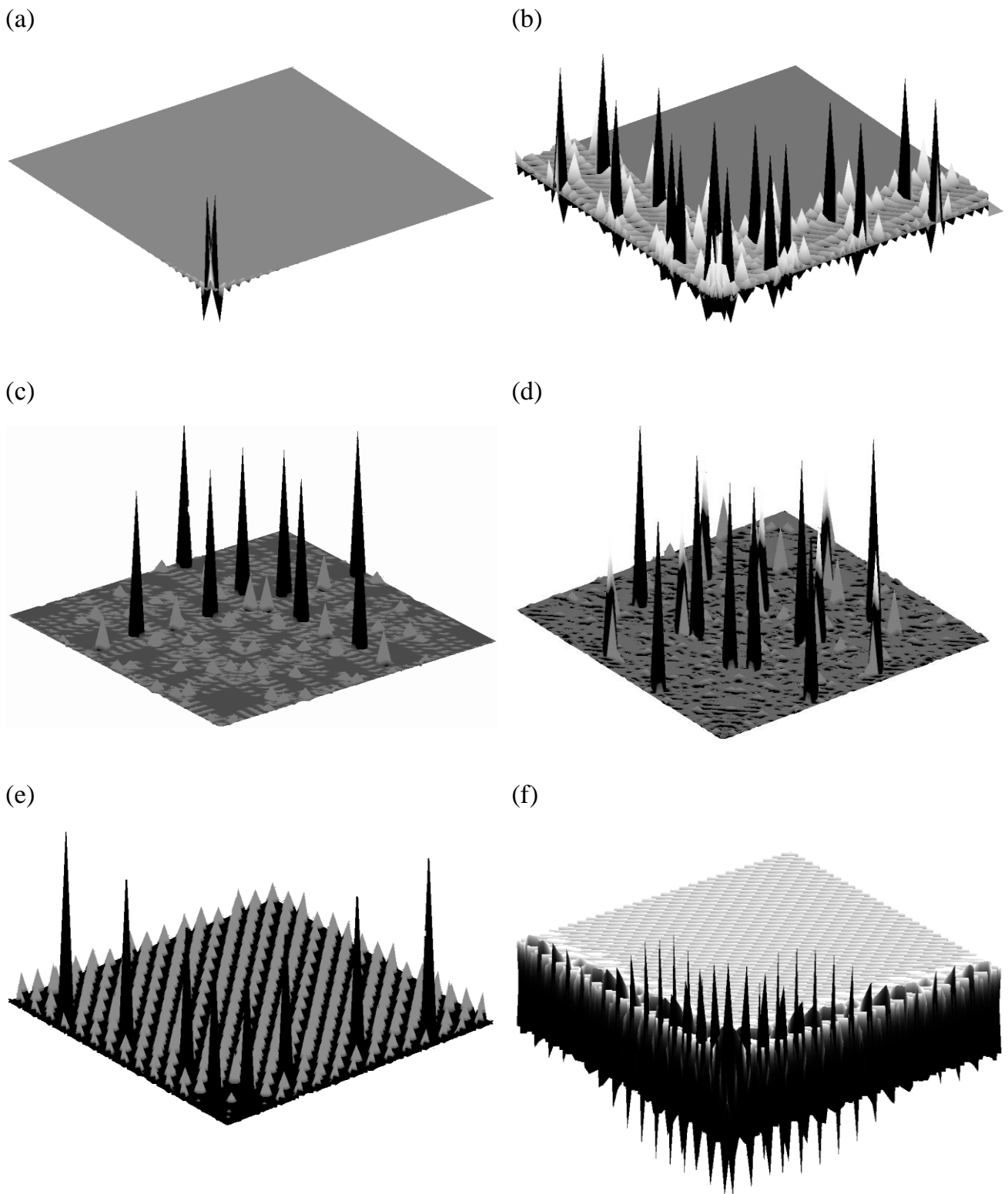


Рисунок 68. Влияние концентрации примесей на рельеф поверхности наноструктурированного полупроводника.

$$n_0 = p_0 = 0.25, C_n = C_p = C_a = 0.999. \gamma_n = \gamma_p = \gamma_a = 2 + I_2,$$

$$(a) - a_0 = 0.01, (b) - a_0 = 0.17, (c) - a_0 = 0.23,$$

$$(d) - a_0 = 0.50, (e) - a_0 = 5.0, (f) - a_0 = 5.7.$$

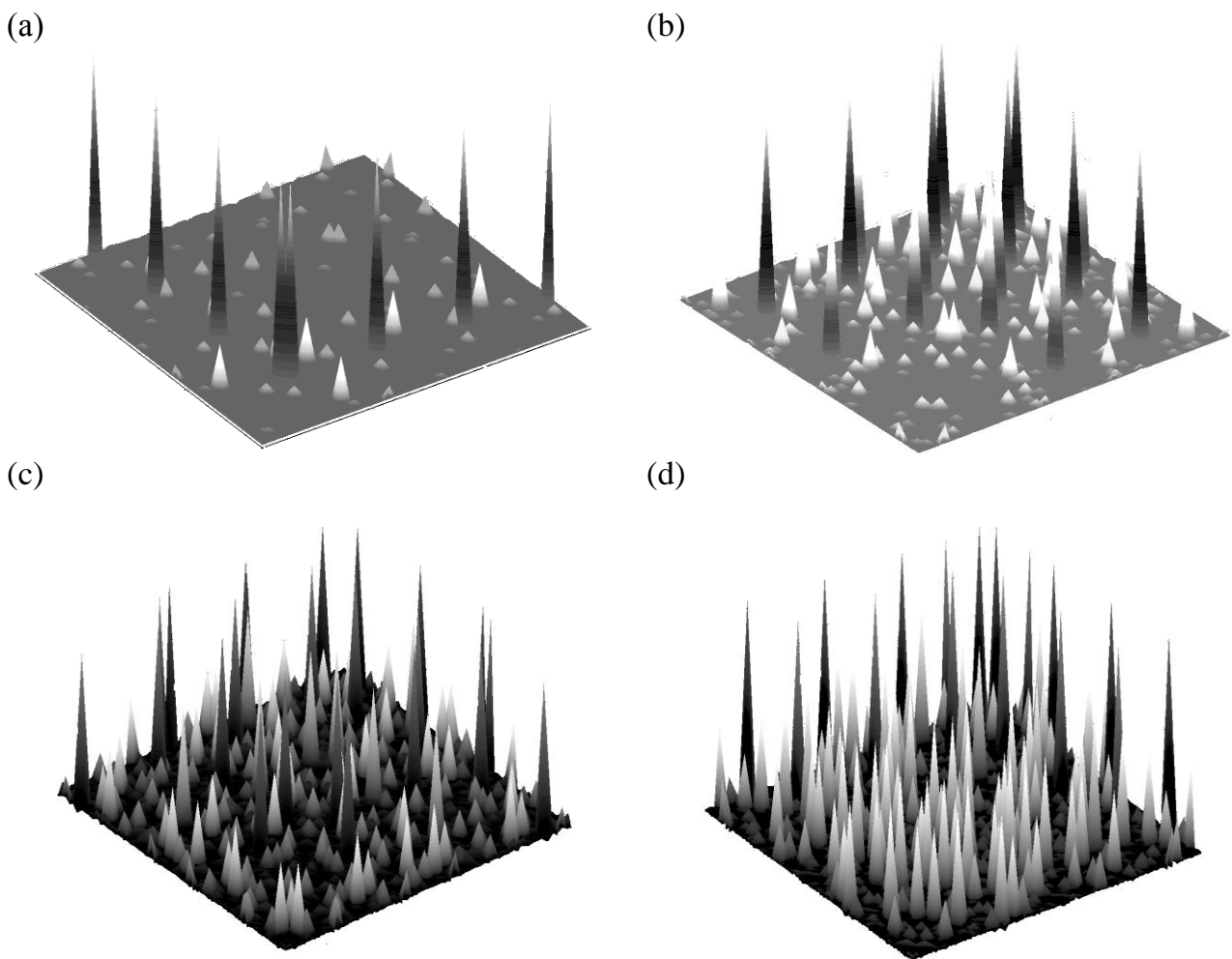


Рисунок 69. Влияние параметра γ_a для выделенной концентрации на морфологию поверхности наноструктурированного полупроводника.

$$n_0 = p_0 = 0.25, C_n = C_p = C_a = 0.999, \gamma_n = \gamma_p = 2 + I_2,$$

$$(a) - \gamma_n = I_2, (b) - \gamma_n = 1 + I_2, (c) - \gamma_n = 2 + I_2, (d) - \gamma_n = 3 + I_2.$$

Значение параметра γ_a , представляющего собой разность между фрактальной и топологической размерностями для примесей (выделенной концентрации), также оказывает заметное влияние на морфологию полупроводниковых пленок. Так, на рисунке 69 показано влияние этого параметра на рельеф пленки при фиксированных значениях остальных параметров.

Компьютерное моделирование позволяет получить изображения поверхностей полупроводниковых пленок, содержащих не только вертикальные квантовые нити, но и горизонтальные. При некоторой комбинации основных параметров длина нитей уменьшается, структура

становится близкой к точечной (длина и толщина одного порядка). Последовательность таких точечных структур образует горизонтальные квантовые нити. Интересно знать, каковы их физические свойства. Видимо, более сильно будут меняться электрические свойства нанопленок [44, 46, 130]. Так, на рисунках 70(a, b) показаны модели поверхностей полупроводниковых пленок с горизонтальными квантовыми нанонитями. Поверхности, представленные на рисунках 70(a) и 70(b) различаются концентрациями примесей. Видно, что горизонтальные квантовые нити более упорядочены при достаточно высоких концентрациях примесей.

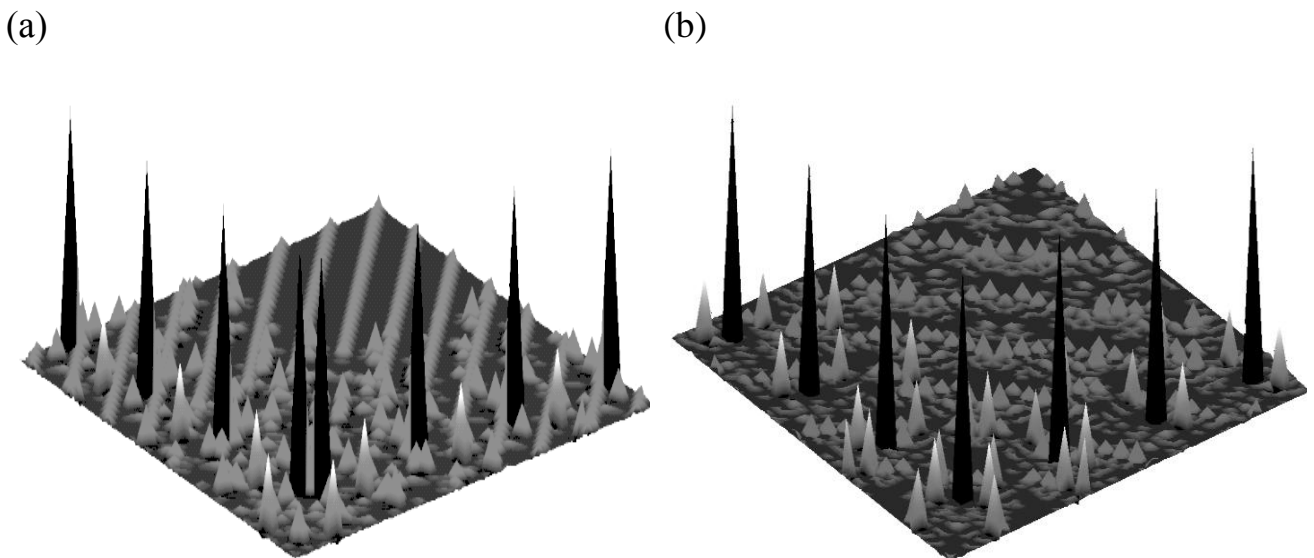
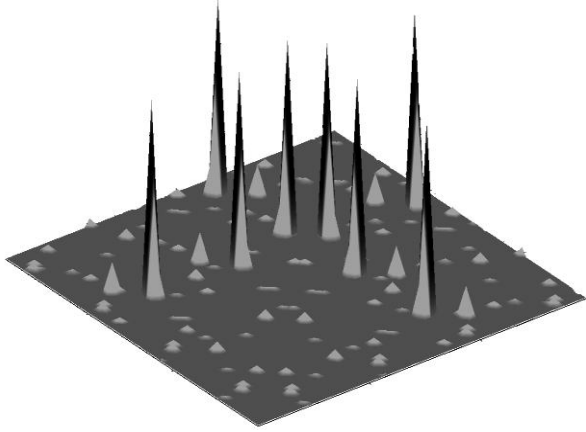


Рисунок 70. Модели поверхностей, содержащих горизонтальные квантовые нити.

$$n_0 = p_0 = 0.25, C_n = C_p = C_a = 0.999, \gamma_n = \gamma_p = \gamma_a = 2 + I_2, \\ (a) - a_0 = 1.05, (b) - a_0 = 0.35.$$

При определенном наборе параметров можно получить модели поверхностей, содержащих сросшиеся квантовые нити (рисунок 40(a)), а также упорядоченные квантово-размерные структуры приблизительно одной высоты (рисунок 40(b)).

(a)



(b)

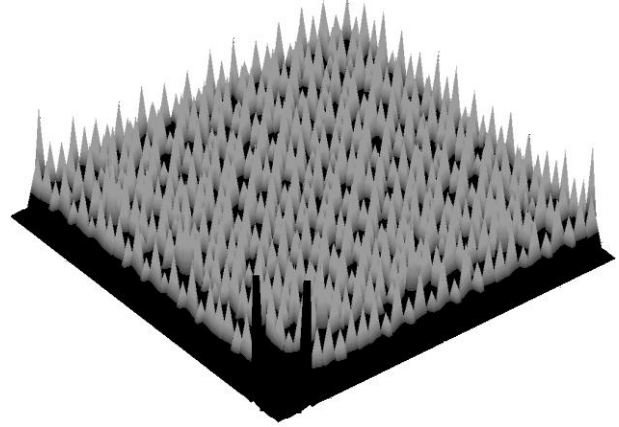


Рисунок 71. Полупроводниковые квантово-размерные структуры.

$$(a) - n_0 = p_0 = 0.25, a_0 = 0.7, C_n = C_p = C_a = 0.999, \gamma_n = \gamma_p = \gamma_a = 1 + I_2,$$

$$(b) - \gamma_n = \gamma_p = 2 + I_1, \gamma_a = 1 + I_1, n_0 = p_0 = 0.25, a_0 = 1, C_n = C_p = C_a = 0.999.$$

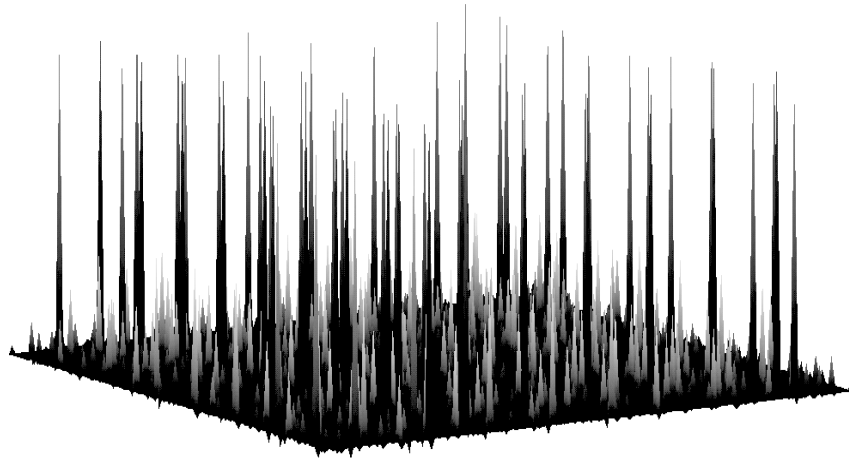


Рисунок 72. Квантовые нити на поверхности кремниевой пленки.

$$C_n = C_p = C_a = 0.999, n_1 = p_1 = 0.25, a_1 = 0.8, \gamma_n = \gamma_p = \gamma_a = 2 + I_2,$$

$$n_0 = p_0 = 0.25, a_0 = 2.25.$$

Использованием динамического хаоса, полученного универсальным отображением фрактальной эволюции меры, построена модель кремниевых квантовых нитей, полученных экспериментально в работе [39] изображение получено сканирующим электронным микроскопом, которое отличается густотой расположения квантовых нитей и их равной высотой. Построенная нами теоретическая модель представлена на рисунке 72.

В теории указанные особенности изображения учитываются выбором большого значения γ и отношения равновесных концентраций.

ГЛАВА 5

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ОПИСАНИЯ ОПТИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

Наши исследования основаны на следующих новых положениях.

Длина волны света сравнима с характерными размерами наноструктур, поэтому обычное приближение среднего эффективного поля для наших целей неприемлемо. Поскольку наноструктуры являются фрактальными объектами, уравнения для эволюции физических величин содержат дробные размерности. Энергия возбуждения среды (сумма ширины энергетической запрещенной зоны и энергии связи экситона) считается фрактальной мерой, зависящей от энергии падающего фотона.

Коэффициенты отражения, поглощения, пропускания света определяются из системы уравнений квантовой формы флуктуационно-диссипационного соотношения и фрактальной эволюции концентрации носителей зарядов. Флуктуациям физических величин соответствуют корреляции носителей заряда, а диссипация задается равновесным распределением фотонов.

Теория описывает экспериментальные спектры фотолюминесценции и оптического поглощения квантовых наноструктур, предсказывает условия локализации света в хаотически наноструктурированных средах. Различный характер зависимости оптических процессов от энергии падающего фотона учитывается фрактальностью пространства волновых чисел, т.е. непрямоzonностью энергетической щели.

Для целей перспективных приложений оптики наноструктур значительный интерес представляет знание закономерностей взаимодействия фотона с экситонными образованиями. Экситон и биэкситон могут рассматриваться как два квантовых бита, которые могут взаимодействовать друг с другом, и являются логическими единицами для квантовых затворов. Вследствие того, что наноразмерные полу-

проводники имеют хаотическую структуру, свойства экситонов не могут быть универсальным образом описаны плавными закономерностями, вытекающими, например, из дифференциальных уравнений. Поэтому известная аналогия экситонов с водородоподобными атомами не может полностью описать специфику энергетического спектра экситонов в некристаллических полупроводниках. В настоящей работе описана новая нелинейная модель фрактальной эволюции экситонов в зависимости от энергии возбуждающих их фотонов.

Флуктуационно-диссипационное соотношение для описания поглощения, отражения и пропускания фотонов

Физические закономерности явлений, происходящих при взаимодействии света с полупроводниками, составляют фундамент развития современных направлений оптоэлектроники, фотоники, технологии производства интегральных схем, наноэлектроники и т.д. Наряду с оптическими явлениями в тонких полупроводниковых пленках как излучение, отражение, преломление, пропускание, наиболее фундаментальным и разнообразным является поглощение света. Известные теоретические модели поглощения света свободными носителями, межзонными переходами, фононными и экситонными механизмами позволяют описать отдельные плавные участки экспериментальных спектров поглощения. Однако спектральные кривые, полученные приборами с высоким разрешением, являются нерегулярными, каждая из указанных областей имеет внутреннюю структуру.

Теория оптических явлений в полупроводниках является обширной и достаточно развитой областью науки. Разработаны методы учета различных атомных процессов для описания взаимодействия фотона с веществом. Используются строгие фундаментальные математические основы – методы квантовой теории поля. Об этом свидетельствуют многочисленные публикации, мы укажем только две известные монографии [54,131].

Однако эти методы не ориентированы на учет образования фрактальных нанокластеров и пространственной, временной эволюции этих структур мелко-степенными закономерностями.

Как было отмечено в предыдущих главах, тонкие полупроводниковые пленки имеют структурное строение в наномасштабах. Эти структуры крайне нерегулярные, в то же время они обладают свойствами самоподобия и самоаффинности, т.е. их можно рассматривать как фрактальные и мультифрактальные объекты. Поэтому можно поставить вопрос о возможности описания сложной

структуры спектра поглощения через фрактальные свойства полупроводниковых пленок [132].

Для описания оптических процессов в наноструктурах мы будем пользоваться спектром мощности – спектральной плотностью корреляционных функций распределения носителей зарядов. Относительно равновесного состояния рассматриваемые колебания представляют собой флуктуации. Источником флуктуаций является сколь угодно малое внешнее возмущение, энергия которого, поглощаясь телом, диссипируется в нем.

Флуктуационно-диссипационная теорема (соотношение) устанавливает связь флуктуаций физической величины x с диссипативными свойствами системы:

$$\left(x_i x_j\right)_w = \hbar \operatorname{Im} \tilde{\alpha}_{ij}(w) \coth \frac{\hbar w}{2kT}. \quad (80)$$

Формула (80) приводится в любой основной литературе по статистической физике. Связь спектральной плотности корреляций с мнимой частью обобщенной восприимчивости $\tilde{\alpha}_{ij}(w) = \alpha'_{ij}(w) + i\alpha''_{ij}(w)$ выводится с учетом выражения для средней энергии осциллятора (в единицах кванта энергии $\hbar w$) при температуре T .

Вид функции $\alpha''(w)$, входящей в формулу (80), должен удовлетворять определенным физическим условиям. В противном случае произвольные значения частоты w не будут соответствовать реальным процессам.

Нас интересуют оптические явления в наноструктурированных полупроводниках. Диссипация энергии падающего фотона $\hbar w$ в тепловую энергию kT происходит через взаимодействие носителей зарядов, описываемое спектральной функцией их корреляций $\left(x^2\right)_w$. Мы должны учесть, что частота колебаний оптического диапазона меньше, чем обратное время релаксации носителей зарядов. Следовательно, мы должны рассматривать квазистационарные флуктуации, для которых время установления неполного равновесия (соответствующее каждому заданному значению x) мало по сравнению с периодом возмущающей силы. Это условие удовлетворяется для широкого круга физических явлений.

Далее мы можем принять, что процесс релаксации величины x зависит от самой величины x и внешней силы $f(t)$:

$$\frac{dx}{dt} = -\lambda x + \frac{\lambda \langle x^2 \rangle}{kT} f(t), \quad (81)$$

где постоянная $1/\lambda$ определяет порядок величины времени релаксации для установления полного равновесия (насыщения значения $x(t)$).

Принимая связь между x_w и f_w в виде

$$x_w = \tilde{\alpha}(w) f_w, \quad (82)$$

из формул (80) и (81) для спектральной плотности корреляций $x(t)$ получим

$$\langle x^2 \rangle = \frac{2\lambda \langle x^2 \rangle}{(\lambda^2 + w^2)} \frac{\hbar w}{2kT} \text{cth} \frac{\hbar w}{2kT} \equiv \alpha''(w) \cdot \hbar w \cdot \text{cth} \frac{\hbar w}{2kT}. \quad (83)$$

По смыслу искомый коэффициент оптического поглощения $\alpha(w)$ пропорционален мнимой части обобщенной восприимчивости $\alpha''(w)$ и плотности состояния $g(w)$ носителя заряда, относительно которого определяется $\langle x^2 \rangle_w$. Учитывая это, из формулы (83) имеем

$$\alpha(w) = \text{th} \left(\frac{\hbar w}{2kT} \right) \langle x^2 \rangle_w \frac{g(w)}{\hbar w}. \quad (84)$$

Специфику оптического поглощения в полупроводниках учтем через плотность состояния $g(\vec{k})$, зависящей от волнового вектора колебаний \vec{k} . Условие инвариантности спектра мощности корреляций относительно переменных w, \vec{k} запишем в виде

$$E(w) g(w) dw = E(\vec{k}) g(\vec{k}) d\vec{k}, \quad E(w) = E(\vec{k}) \frac{g(\vec{k})}{g(w)} \frac{d\vec{k}}{dw}. \quad (85)$$

При переходе одного электрона из валентной зоны в зону проводимости меняется состояние всех остальных электронов. Этот факт можно учесть, рассматривая эффективное взаимодействие между элек-

троном и дыркой, образующейся при освобождении одного из валентных состояний. Связанное состояние электрона и дырки – экситон Ванье-Мотта в полупроводнике с большой диэлектрической проницаемостью имеет энергию, равную энергии поглощенного фотона:

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_*} + E_g, \quad (86)$$

где E_g – энергия щели между дном зоны проводимости и потолком валентной зоны (энергия связи экситона), $\hbar\vec{k}$, m_* – квазиимпульс и эффективная масса экситона.

Наряду с прямыми межзонными фотопереходами, при которых суммарный импульс экситона и фотона не меняется, возможны переходы с его изменением при участии фонона или примеси. В этом случае формула (86) запишется в виде

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_*} + E_C - E_V \pm E_p, \quad (87)$$

где $\pm E_p$ – энергия поглощенного (+) и испущенного (-) фонона, E_C , E_V – различные уровни энергии зоны проводимости и валентной зоны. Далее мы будем пользоваться формулой (86). Энергия фонона будет учтена через спектр мощности корреляций концентрации носителей заряда.

Используя выражение для числа разрешенных колебательных состояний на единицу объема в изотропном \vec{k} -пространстве

$$g(k) dk = \frac{k^2}{2\pi^2} dk, \quad (88)$$

мы можем преобразовать правую часть формулы (85):

$$g(k) \frac{dk}{d\omega} = \frac{m_*}{\pi^2 \hbar} \left(\frac{2m_*}{\hbar^2} (\hbar\omega - E_g) \right)^{1/2}. \quad (89)$$

Коэффициент поглощения $\alpha(\omega)$ пропорционален диссипируемой мощности $Q(\omega)$ и числу состояний $g(\omega)$:

$$\alpha(w) \sim Q(w)g(w), \quad (90)$$

следовательно, из формул (85), (89) имеем:

$$\alpha(\omega, E_g) = \alpha_0(E_g) \frac{1}{\hbar\omega - E_g} th \frac{\hbar\omega}{2kT} E_e(k) (\hbar\omega - E_g)^{\frac{1}{2}}, \quad (91)$$

где $\alpha_0(E_g)$ – размерная постоянная, заданная для края поглощения, $E_e(k)$ – спектр мощности колебаний электронов, зависящий от волнового числа, E_g – энергетическая ширина запрещенной зоны.

Неоднородное, перемежаемое пространственное распределение электронов, дырок и примесей (дефектов различного типа) в наноструктурированных полупроводниковых тонких пленках можно описать системой уравнений (59)-(61) и универсального отображения фрактальной эволюции (78). Зная дискретное распределение носителей заряда, мы можем определить, например, пространственные корреляции плотности электронов $C_{e,e}(m)$ и соответствующие спектры мощности $E_e(k)$:

$$C_{e,e}(m) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=0}^N n_{e,i+m} n_{e,i}, E_e(k) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{m=0}^N \cos(2\pi mk) C_{e,e}(m). \quad (92)$$

Зная закономерности оптического поглощения можно использовать их для описания явления отражения фотонов. Согласно квантовым представлениям явления отражения можно рассматривать как переизлучение фотона. При этом необходимо учесть зависимость свойств среды от энергии падающего фотона. Мы будем учитывать зависимость энергии возбуждения полупроводниковой пленки $E(\omega, \gamma)$ (сумма ширины энергетической запрещенной зоны и энергии связи экситона) от энергии падающего фотона. Тогда мы имеем следующую формулу для коэффициента отражения [133]:

$$R(\omega, E(\omega, \gamma)) = R_0 \frac{1}{\hbar\omega - E_p} th \frac{\hbar\omega}{2kT} E(k) (\hbar\omega - E(\omega, \gamma))^{\frac{1+\gamma}{2}}, \quad (93)$$

где энергия возбуждения среды $E(\omega, \gamma)$ считается фрактальной мерой, зависящей от энергии падающего фотона, γ – разность фрактальной и топологической размерностей множества значений спектра мощности электронных колебаний.

Зная коэффициенты поглощения ($\alpha(\omega)$) и отражения ($R(\omega)$), мы можем определить коэффициент пропускания ($T(\omega)$) для одного слоя тонкой пленки

$$\alpha_1(\hbar\omega) + R_1(\hbar\omega) + T_1(\hbar\omega) = 1 \quad (94)$$

при соответствующем выборе $\alpha_{\max}(\omega_0)$, $R_{\max}(\omega_0)$, $T_{\max}(\omega_0)$ для $\omega = \omega_0$. Введем индекс i – номер слоя. Формулу (94) запишем для слоя $i = 2$:

$$\alpha_2(T_1\hbar\omega) + R_2(T_1\hbar\omega) + T_2(T_1\hbar\omega) = 1. \quad (95)$$

Для произвольного слоя имеем [134]

$$\alpha_{i+1}(T_i\hbar\omega) + R_{i+1}(T_i\hbar\omega) + T_{i+1}(T_i\hbar\omega) = 1, \quad i \geq 1. \quad (96)$$

Экситонное поглощение света

Полупроводниковые наноструктуры характеризуются рядом физических свойств, не свойственных макроскопическим объектам. Например, уникальность наноструктур проявляется в том, что резкие линии оптических спектров излучения и поглощения в них могут наблюдаться вплоть до комнатной температуры. Это обстоятельство позволяет использовать наноструктуры в качестве элементов для осуществления, например, лазерной генерации, что одновременно ведет к решению многих проблем, в частности, таких, как миниатюризация, увеличение интенсивности излучения, осуществление возможности плавной перестройки частоты излучения. Столь яркие особенности оптических спектров наноструктур обусловлены в первую очередь структурой их энергетического спектра, обеспечивающего существование долгоживущих возбужденных состояний, которые можно описать как возникновение и последующее уничтожение неких квазичастиц, называемых экситонами.

Как уже было отмечено выше, экситон представляет собой систему, состоящую из электрона и дырки. Эта система может быть образована в том случае, если образец поглощает фотоны с энергией, большей энергии ширины запрещенной зоны. Система «электрон-дырка» оказывается относительно стабильной из-за кулоновского притяжения между ними. Экситоны представляют собой электрически нейтральные частицы. На зонной диаграмме экситонные уровни расположены в запрещенной зоне.

Энергию экситона можно определить как нелинейную фрактальную меру, выбирая различные масштабы измерения: саму искомую энергию и энергию возбуждающего фотона (приложение 1). Тогда энергия одиночного экситона E_1 может быть описана в виде [118]

$$E_1 = E_0 \left(\left| 1 - \frac{\hbar\omega - E_g}{E_1} \right| \right)^{-\gamma} \equiv f(E_0, E_1), \quad (97)$$

$$E_{1,w} = E_{0,w} \left(\left| 1 - \frac{E_{1,w}}{\hbar\omega - E_g} \right| \right)^{-\gamma} \equiv f(E_{0,w}, E_{1,w}),$$

где $\gamma = D - d$ – разность фрактальной размерности множества значений энергии и топологической размерности носителя меры (энергии), E_0 – энергия экситона на пороге возбуждения его фотоном при $\hbar\omega = E_g$, при этом $E_{0,w} = 0$.

Биэкситоны, трионы и другие кластеры определим через иерархические структуры при помощи соотношений:

$$E_n = f \left(\dots f \left(\frac{E_0}{n}, E_n \right) \dots \right), \quad (98a)$$

$$E_{n,w} = f \left(\dots f \left(\frac{E_{0,w}}{n}, E_{n,w} \right) \dots \right), n = 1, 2, \dots, \quad (98b)$$

где число скобок равно n . Уравнения (98a) соответствуют выбору масштаба измерения фрактальной меры относительно самой меры и описывают эволюцию экситонов, биэкситонов и других структур, существующих и в основном состоянии (без внешнего излучения). Уравнения (98b) записаны относительно энергии фотонов и применимы к описанию только возбужденного состояния. Формулы (97), (98a), (98b) позволяют определить энергию системы, состоящей из экситонных образований в виде

$$E = \sum_{i=1}^n E_i, \quad n = 1, 2, \dots \quad (99)$$

где $n = 1$ описывает экситон, $n = 2$ – биэкситон, $n = 3$ – трион и т.д.

Если, как в простейшем случае собственной проводимости и при отсутствии безызлучательных переходов интенсивность фотолюминесценции и коэффициент поглощения фотонов $\alpha(w)$ определяются плотностью числа состояний, имеем

$$\alpha(w) = \alpha(E_g/\hbar) E(w)^{\frac{1+\gamma}{2}}. \quad (100)$$

В формулу (100) γ входит из-за учета фрактальности пространства импульсов, в котором определяется плотность состояний. После этого мы можем учитывать влияние внешнего поля P на относительную интенсивность фотолюминесценции биекситона $\alpha_2(P)$ и экситона $\alpha_1(P)$:

$$\alpha_2(x, w) = \alpha_2(w) \left(\frac{\langle \alpha_1(w)^2 \rangle}{\langle \alpha_2(w)^2 \rangle} \right)^{1/2} th(x)^{\frac{1+\gamma}{2}}, \quad x = \frac{P}{P_0}, \quad (101)$$

где P_0 – относительная минимальная интенсивность, при которой достигается насыщение $\alpha_2(x, w)$, функция $th(x)$ учитывает известное выражение для изменения числа когерентных осцилляторов, угловые скобки означают усреднение по частоте.

Задержка фотонов по времени в наноструктурированном полупроводнике

В литературе указывается перспективность экспериментально обнаруженного нового эффекта локализации света в пористых средах [84-99, 135]. Ниже мы покажем возможность простого описания этого эффекта.

Мы укажем простой способ оценки времени задержки фотона в наноструктурированной среде через коэффициент поглощения, определенный выше. Убывание по времени числа фотонов n_ω в объеме пропорционально коэффициенту поглощения $\alpha(\hbar\omega)$ и скорости фотона v_ω :

$$\frac{dn_\omega}{dt} = -\alpha(\hbar\omega) n_\omega v_\omega. \quad (102)$$

Отсюда найдем время задержки фотона τ в среде и запишем соответствующее выражение для интенсивности поглощаемой энергии I :

$$\tau = - \int_{n(t_0)}^{n(t)} \frac{dn_\omega}{n_\omega \alpha(\hbar\omega) \nu_\omega} \approx - \frac{1}{\alpha(\hbar\omega)} \int_{n(t_0)}^{n(t)} \frac{dn_\omega}{n_\omega \nu_\omega}, \quad (103)$$

$$I = n_\omega \hbar\omega = n_0 \left\{ \text{cth} \left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T} \right) \right\} \hbar\omega, \quad (104)$$

где n_ω – число фотонов, $\alpha(\hbar\omega)$ – коэффициент поглощения, слабо зависящая от концентрации в пределах от $n(t_0)$ до $n(t)$, τ – время задержки фотона внутри наноструктурированного полупроводника. Из этих двух уравнений найдем зависимость $I(\tau)$. В силу квазистационарности флуктуаций концентрации носителей заряда (время релаксации распределения концентраций намного меньше, чем искомое значение τ) интеграл в правой части формулы (103) можно заменить постоянной величиной.

ГЛАВА 6

**РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ
ОПТИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В
НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ**

**Численное исследование оптического поглощения в
наноструктурированных полупроводниках**

Интенсивное поглощение света в наноструктурированных полупроводниковых пленках и связанные оптические процессы были исследованы системой уравнений, полученной в главе 3:

$$\left\{ \begin{array}{l}
 n_{i+1} = \left\{ n_i + \text{sign}(\xi_i) |\psi_n(a_i, p_i, i)|^2 \right\} \left| \frac{n_i}{n_0} \right|^{\frac{1}{\gamma_a}} \\
 p_{i+1} = \left\{ p_i + \text{sign}(\xi_i) |\psi_n(a_i, n_i, i)|^2 \right\} \left| \frac{p_i}{p_0} \right|^{\frac{1}{\gamma_p}} \\
 a_{i+1} = \left\{ a_i + \text{sign}(\xi_i) |\psi_a(n_i, p_i, i)|^2 \right\} \left| \frac{a_i}{a_0} \right|^{\frac{1}{\gamma_a}} \\
 \psi_n(x) = \psi_p(x) = \psi_a(x) = \cos(k_n x) \cos(k_p x) \cos(k_a x) \\
 \text{sign}(\xi(x)) = \begin{cases} +1, & \xi(x) > 0 \\ -1, & \xi(x) < 0 \end{cases} \\
 C_{n,n}(m) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=0}^N n_{i+m} n_i \\
 E_e(k) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{m=0}^N \cos(2\pi mk) C_{n,n}(m) \\
 \alpha(\omega, E_g) = \alpha_0(E_g) \frac{1}{\hbar\omega - E_g} th \frac{\hbar\omega}{2kT} E_e(k) (\hbar\omega - E_g)^{\frac{1+\gamma}{2}}
 \end{array} \right. \quad (105)$$

Основное отличие моделирования оптических процессов от моделирования морфологии наноструктур состоит в том, что необходимо учитывать взаимодействие фотона как с частицами, имеющими массу покоя, так и с квазичастицами. В первую очередь этот факт в теории будет учитываться выбором значений показателя скейлинга $\gamma = D - d$, где D – фрактальная размерность нанопленки, d – топологическая размерность носителя меры (траектории частиц, квазичастиц). Необходимо учесть возможную разницу γ для разных квазичастиц. Для квазичастиц, непосредственно связанных с частицами, у которых масса покоя стабильна, значение γ можно считать одинаковым. Например, для электрона и дырки можно принять одно и то же значение γ , хотя при необходимости возможны уточнения. Но для учета фрактальности, обусловленной фононами, эта разница может быть существенной. Дело в том, что квазичастицы всегда в движении, следовательно, нужно учесть производные концентраций носителей заряда по времени. Это означает, что параметр γ может определяться в фазовом пространстве. Тогда возможные значения γ тоже будут большими.

Учитывая сказанное, оптические процессы мы моделировали для типичного случая самоподобия нанопленок, принимая значение $\gamma = D - d = 3 - I_2 - 3 = I_2$.

Но в отдельных случаях, когда необходимо учесть сильную неравновесность и связанную с ней преобладающую роль фононных возбуждений, видимо, нужно принять соответствующие значения показателя скейлинга. Также при необходимости можно ввести эффективную шумовую температуру, которая определяется аддитивной суммой энергии теплового движения частиц и колебательного движения фононов.

На основе описанных выше теоретических соотношений может быть определена зависимость спектра мощности колебаний электронов от волнового числа. Результаты численного анализа системы уравнений (105) по исследованию спектра мощности колебаний электронов представлены на рисунке 73. Как видно из графиков, показанных на рисунках 73(a-d), значения скейлинговых показателей $\gamma_n, \gamma_p, \gamma_a$ существенно влияют на вид спектральных зависимостей. Если при малых значениях этих параметров ($\gamma_n = \gamma_p = \gamma_a = I_2$) спектральная зависимость представляет собой спектр обычного шумового сигнала, то в системе с большими фрактальными и малыми топологическими размерностями ($\gamma > I_2$) наблюдается спектр в виде фликкер-шума, что является типичным для перемежаемого шума хаотических процессов.

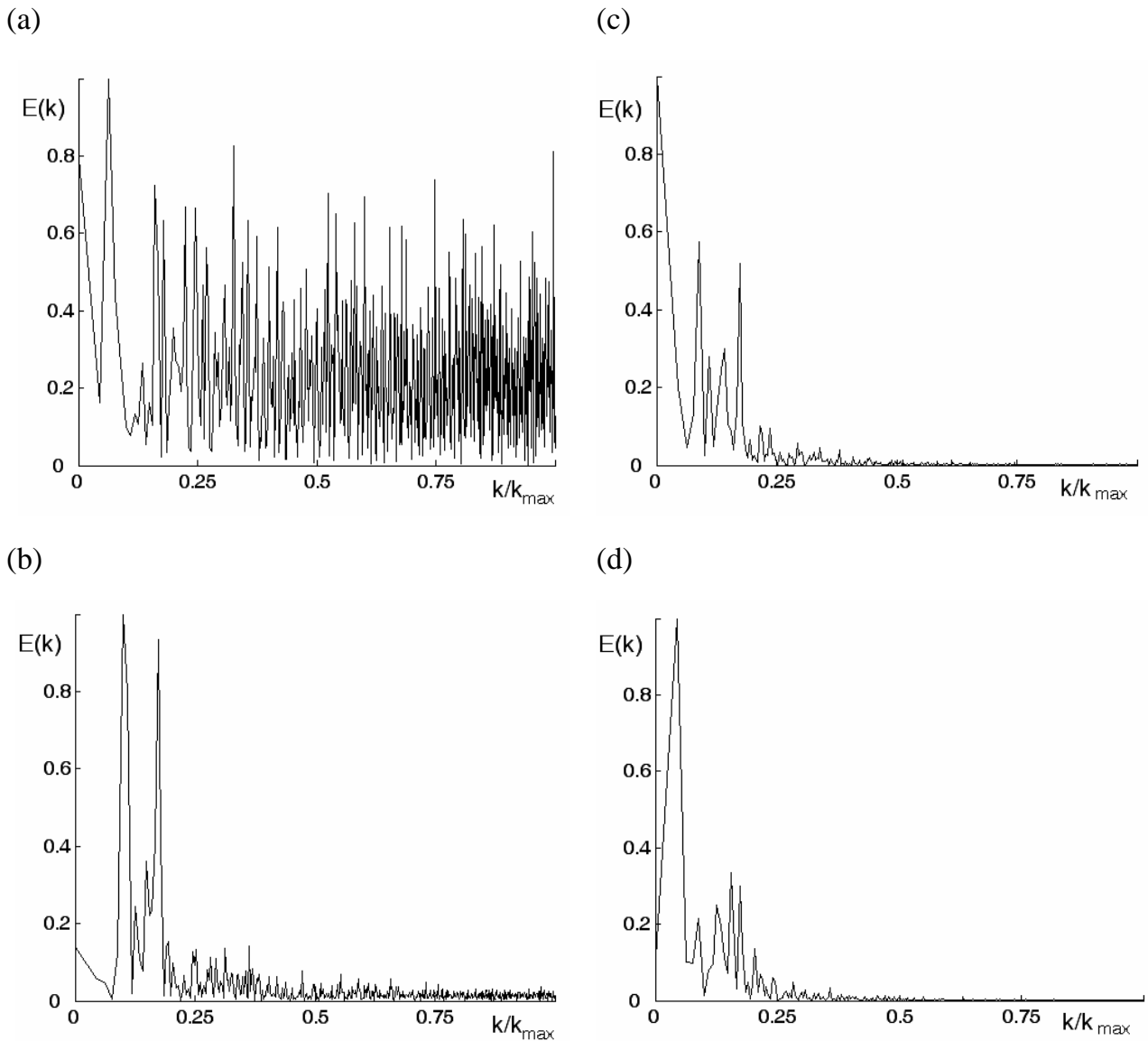


Рисунок 73. Спектры мощности колебаний электронов.

$n_1 = p_1 = a_1 = 1, n_0 = p_0 = a_0 = 1, E_g = 1.5$ эВ, (a) – $\gamma_n = \gamma_p = \gamma_a = I_2$,
 (b) – $\gamma_n = \gamma_p = \gamma_a = 1 + I_2$, (c) – $\gamma_n = \gamma_p = \gamma_a = 2 + I_2$, (d) – $\gamma_n = \gamma_p = \gamma_a = 3 + I_2$.

Волновые числа, определяющие волновые функции в (105),
 приняты одинаковыми: $k_n = k_p = k_a = 1$.

На рисунке 74 приведены теоретические спектры комбинационного рассеяния полупроводниковых пленок, идентичные экспериментальным данным по изучению комбинационного рассеяния пленок $a\text{-As}_2\text{S}_3$ [136]. Рисунок 74(a) соответствует спектру свежеприготовленных, а рисунок 74 (b) – отожженных пленок, полученных термическим испарением в вакуум. Эти спектры характеризуются острым пиком и дополнительными пиками существенно меньшей интенсивности. Можно сделать вывод, что при

отжиге образуются структуры, которым соответствует рост значений параметров γ_n , γ_p , γ_a . При отжиге материала появляется некоторое ограничение на движение в пространстве: электрон может быть локализован в точке ($d = 0$) или двигаться по нитеобразной линии ($d = 1$).

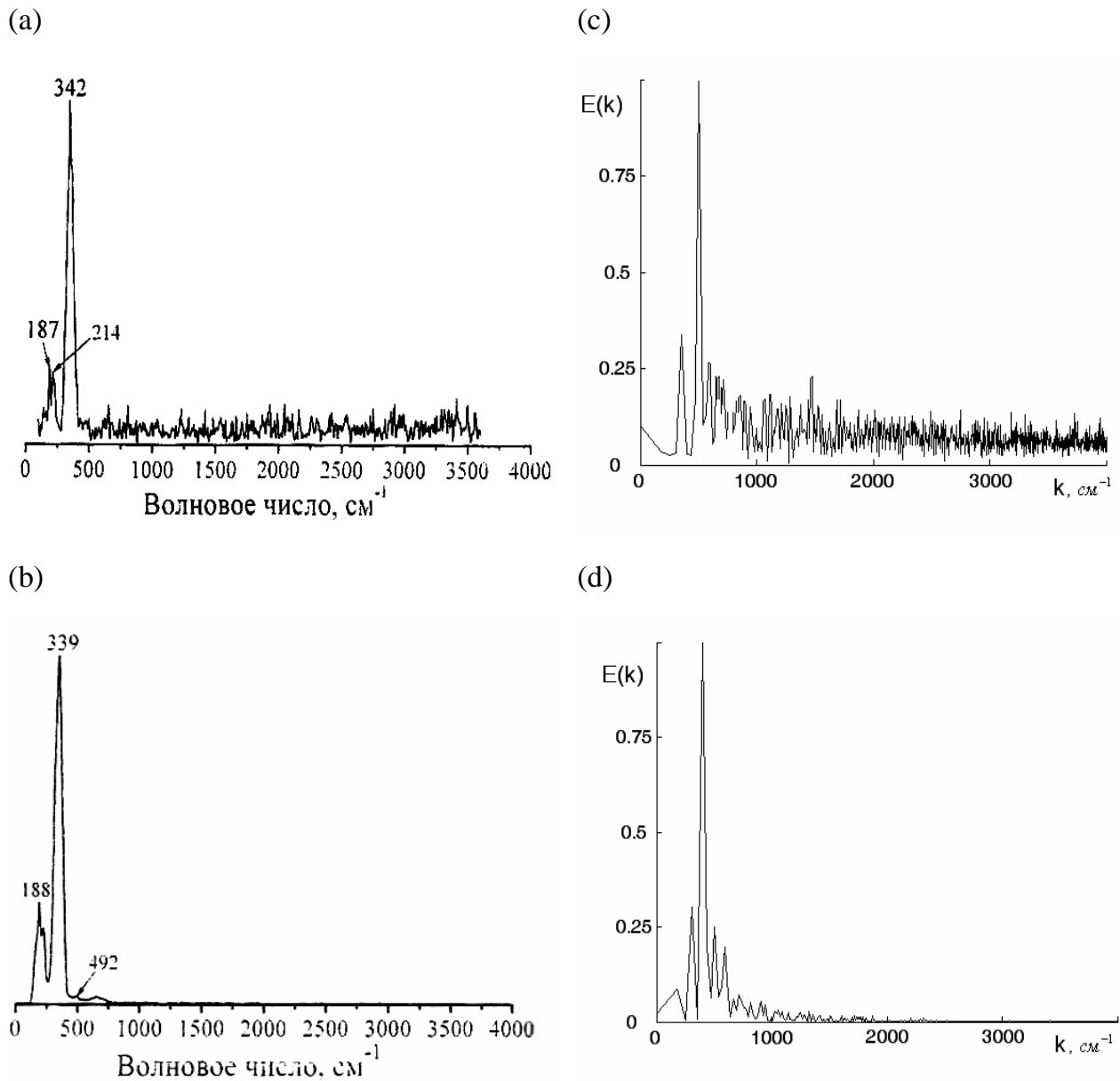


Рисунок 74. Спектр комбинационного рассеяния света свежеприготовленных (а, с) и отожженных (b, d) пленок $a\text{-As}_2\text{S}_3$.

(а, b) – эксперимент; (с, d) – теория:

$$E_g = 1.5 \text{ эВ}, n_1 = p_1 = a_1 = 1, n_0 = p_0 = a_0 = 1,$$

(с) – $\gamma_n = \gamma_p = \gamma_a = 1 + I_2$, (d) – $\gamma_n = \gamma_p = \gamma_a = 3 + I_2$.

Фрактальная размерность наноматериала $D > 2$ или $D > 3$. Тогда, согласно определению, $\gamma = D - d$, т.е. разность фрактальных и топологических размерностей возрастает. Этот вывод согласуется с ранее приведенным объяснением температурной зависимости концентраций электронов (глава 3).

На рисунках 75-78 приведены результаты численного анализа влияния на характер оптического поглощения в полупроводниках температуры, ширины запрещенной зоны, энергии фононов, фрактальной размерности поверхностей, концентрации примесей, равновесной концентрации носителей тока. Графики построены на основе формул (59)-(61) и (91). Как видно из этих рисунков, учет корреляций колебаний носителей заряда (фононов), распределение которых описывается отображениями (59)-(61), приводит к появлению осцилляций в спектре оптического поглощения. Наличие таких осцилляций отмечено в экспериментах, проведенных с использованием современной чувствительной аппаратуры [36, 137-139].

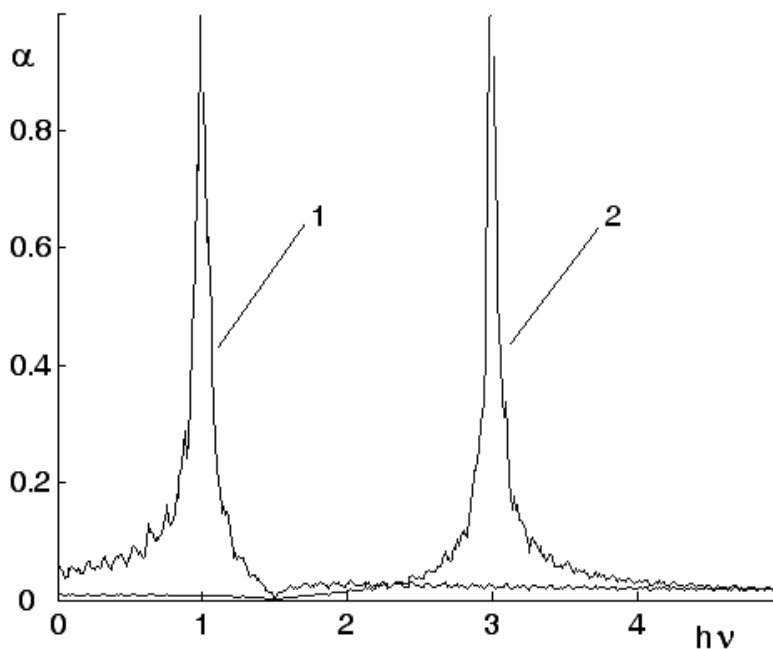


Рисунок 75. Влияние величины ширины запрещенной зоны на оптическое поглощение полупроводниковой нанопленки.

$$n_0 = p_0 = a_0 = 1, n_1 = p_1 = a_1 = 1, \gamma_n = \gamma_p = \gamma_a = I_2, kT = 0.025 \text{ эВ},$$

$$1 - E_g = 1 \text{ эВ}, 2 - E_g = 3 \text{ эВ}.$$

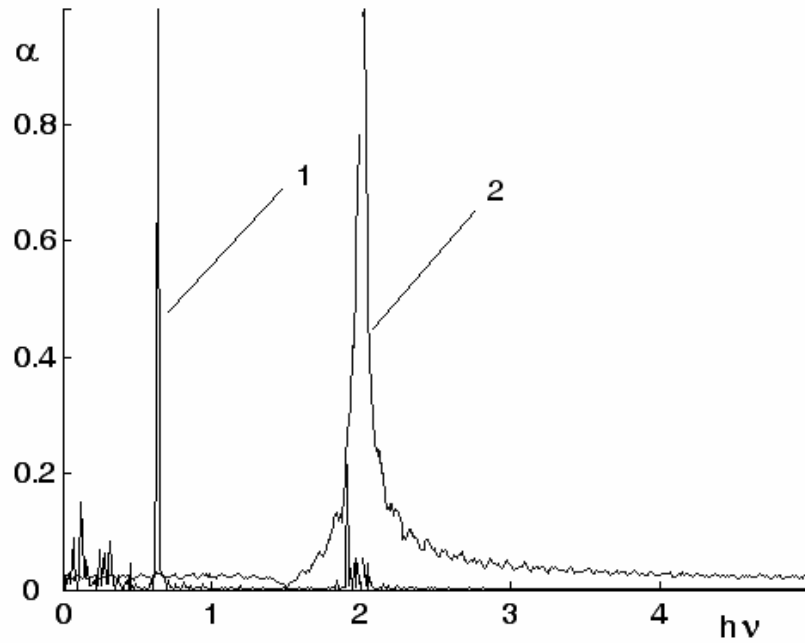


Рисунок 76. Появление дополнительного пика (1) оптического поглощения при большой разности фрактальной размерности нанопленки и топологической размерности, характеризующей движение электронов ($\gamma = D - d$).

$$n_0 = p_0 = a_0 = 1, n_1 = p_1 = a_1 = 1, kT = 0.025 \text{ эВ}, E_g = 2 \text{ эВ},$$

$$1 - \gamma_n = \gamma_p = \gamma_a = 3 + I_2, 2 - \gamma_n = \gamma_p = \gamma_a = I_2.$$

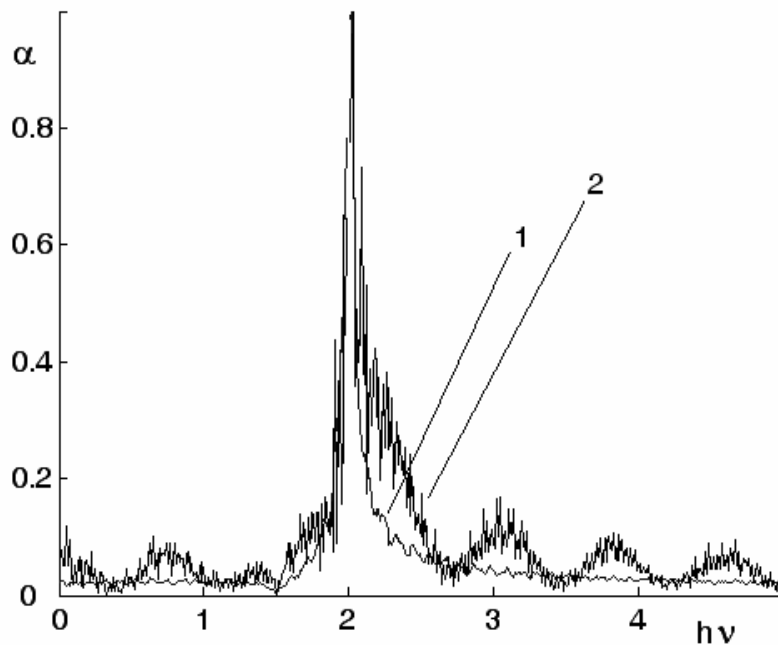


Рисунок 77. Влияние концентрации примесей выделенной концентрации на оптическое поглощение наноструктурированного полупроводника.

$$n_0 = p_0 = a_0 = 1, n_1 = p_1 = 1, kT = 0.025 \text{ эВ}, E_g = 2\infty \text{ эВ},$$

$$\gamma_n = \gamma_p = \gamma_a = I_2, 1 - a_1 = 1, 2 - a_1 = 100.$$

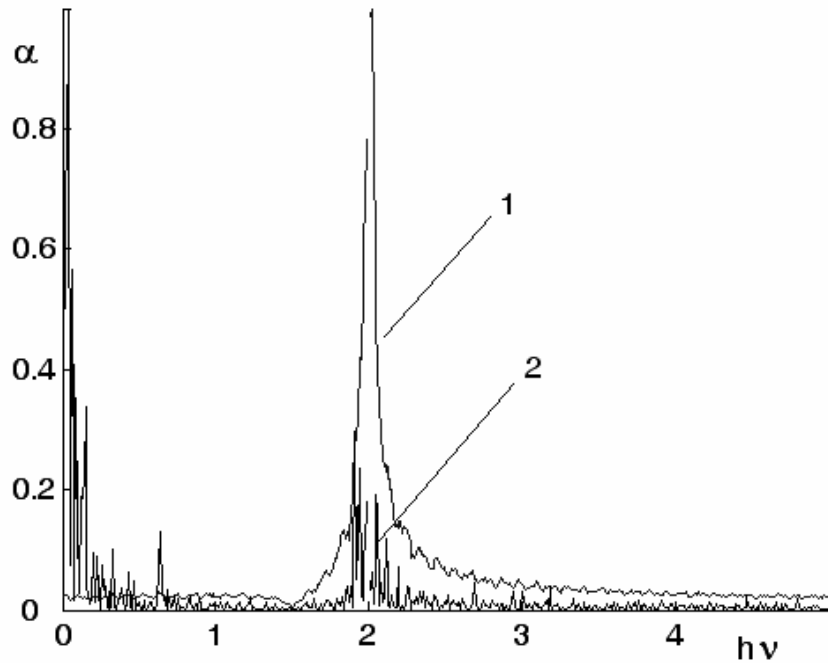


Рисунок 78. Влияние равновесной концентрации на оптическое поглощение полупроводника.

$$n_1 = p_1 = a_1 = 1, \quad kT = 0.025 \text{ эВ}, \quad E_g = 2 \text{ эВ}, \quad \gamma_n = \gamma_p = \gamma_a = I_2,$$

$$1 - n_0 = p_0 = a_0 = 1, \quad 2 - n_0 = p_0 = a_0 = 2.$$

Как видно из приведенных выше результатов численного анализа, при увеличении ширины запрещенной зоны максимум спектра поглощения смещается в область высоких энергий. Более упорядоченное движение электрона (малое значение топологической размерности d) в максимально хаотизированной среде (большие значения фрактальной размерности пленки D) смещает положение максимума спектра поглощения в длинноволновую область. Чем больше температура отжига, тем меньше дефектов в среде и соответственно больше поглощения. Этот факт тоже описывается теорией через учет изменения температуры. Влияние подложки описывается значениями равновесных концентраций (параметром n_0) и может привести к уменьшению максимума спектра поглощения. Таким образом, показано, что имеется возможность описания оптического поглощения полупроводниковых пленок на основе квантовой формы флуктуационно-диссипационного соотношения, записанного для спектра корреляционных функций плотности носителей заряда. Теория учитывает фононные, экситонные механизмы оптических переходов, влияние температуры, ширины запрещенной зоны, значений разности фрактальных и топологических размерностей $\gamma_n, \gamma_p, \gamma_a$, концентрации примесей, равновесной концентрации носителей заряда.

Моделирование экспериментальных спектров поглощения и люминесценции наноструктурированных полупроводниковых пленок

Ниже представлены результаты моделирования спектров оптического поглощения и фотолюминесценции по вышеизложенной теории. Выбор параметров был обоснован условиями физических исследований.

Экспериментальному графику [140] (рисунок 79(a)) сопоставлены теоретические рисунки 79 (b) и 79 (c). Кривые 1 и 2 рисунка 79(b) построены согласно классическим формулам Урбаха и Тауца соответственно. Кривая 3 графика, приведенного на рисунке 79(b) построена без учета спектра мощности носителей тока, при его учете в спектре оптического поглощения наблюдаются осцилляции (рисунок 79(c)). Как видно из сравнения рисунков 79(a-c), формула (91) может быть использована для описания спектра поглощения полупроводников.

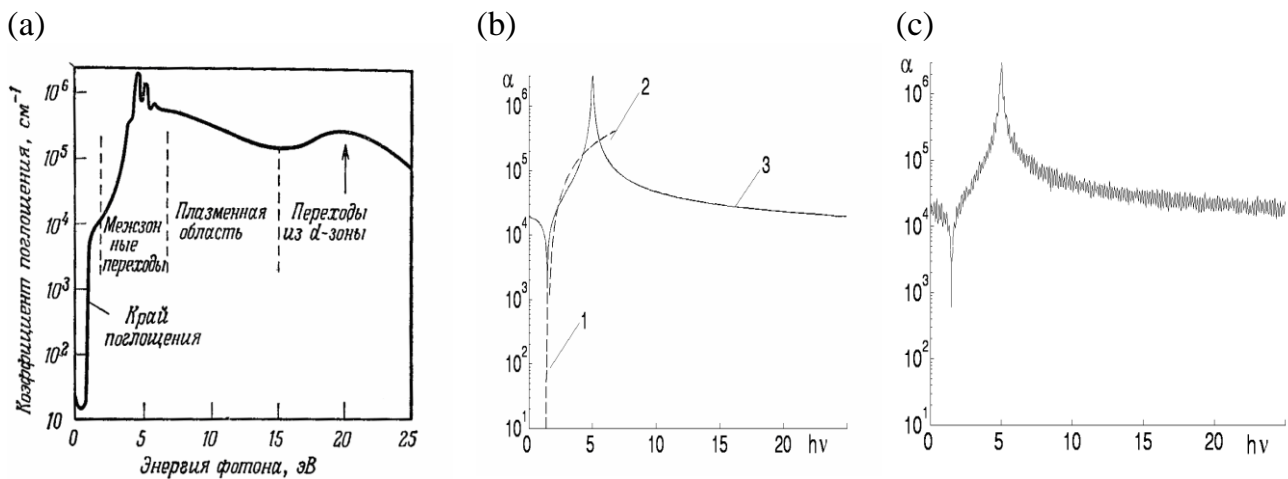


Рисунок 79. Типичный спектр поглощения полупроводника в ультрафиолетовой области.

(a) – эксперимент; (b), (c) – теория:

1 – край поглощения Урбаха,

2 – коэффициент поглощения, построенный по формуле Тауца,

3 – коэффициент поглощения, построенный согласно формуле (91).

$$\hbar\omega_f = 5 \text{ эВ}, \quad kT = 0.023 \text{ эВ}, \quad E_g = 1.5 \text{ эВ},$$

$$n_1 = p_1 = a_1 = 1, \quad n_0 = p_0 = a_0 = 1, \quad \gamma_n = \gamma_p = \gamma_a = I_2.$$

На рисунке 80 показан теоретический спектр фотолюминесценции квантовых точек *InGaAs/GaAs*. Параметры теории выбраны в соответствии с условиями экспериментальной работы [137]. В этой работе авторами были изучены свойства наноструктурированных полупро-

водников, обусловленные квантовым характером поведения квантовых точек – систем с нулевой размерностью. Образцы были выращены методом молекулярной эпитаксии на подложке $GaAs$ (001). Квантовые точки были образованы в результате самоорганизации в местах расположения $In_xGa_{1-x}As$. Толщина монослоев составляла 58 моноуровней, $x=0.24$. Измерение спектров проводилось в криостате при температуре порядка 6К. Выраженная эмиссионная линия обусловлена рекомбинационными процессами, при довольно низких энергиях наблюдаются несколько резких пиков, обусловленных излучением квантовых точек. При проведении расчетов на основе формул (59)-(61) и (91) посредством задания значений разности фрактальных и топологических размерностей множеств электронов, дырок и примесей $\gamma_n, \gamma_p, \gamma_a$ учтено, что квантовые точки представляют собой точечные структуры с топологической размерностью $d = 0$. Результаты численного анализа достаточно хорошо согласуются с экспериментальными данными, кроме того, на теоретическом графике наблюдаются осцилляции, зарегистрированные в эксперименте. Такие осцилляции на спектре свидетельствует о наличии нанокластеров в полупроводниковой пленке.

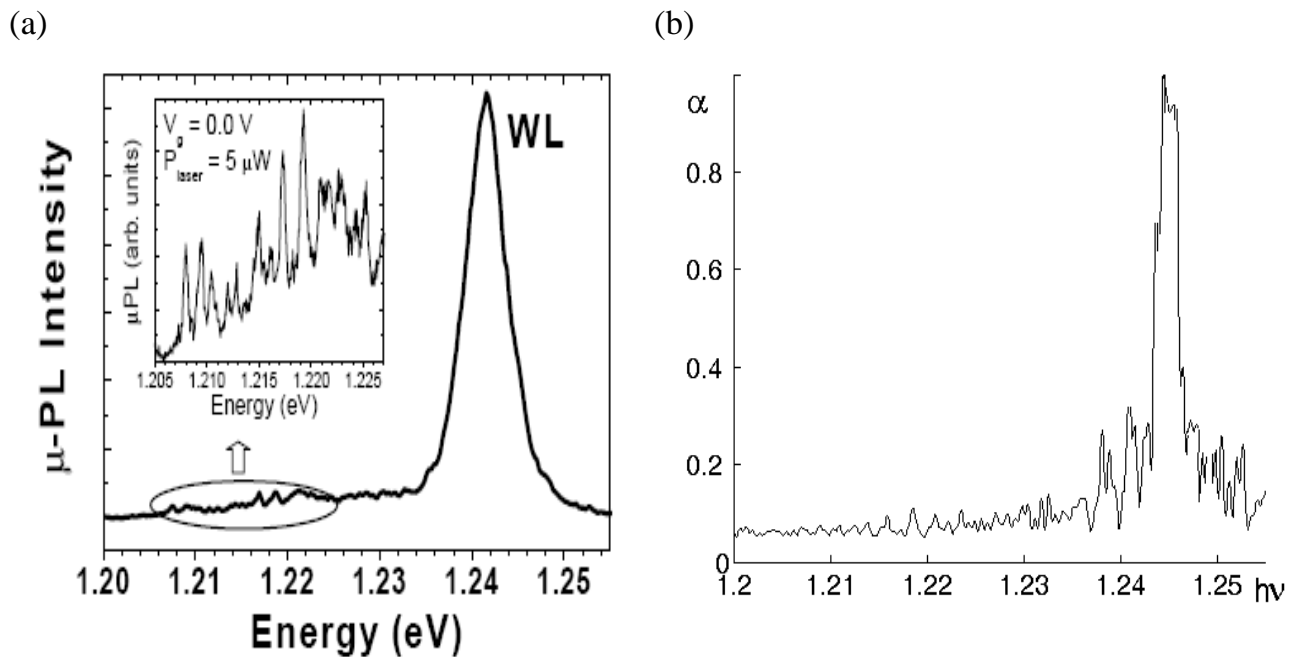


Рисунок 80. Спектр фотолюминесценции квантовых точек $InGaAs/GaAs$.

(a) – эксперимент; (b) – теория:

$$E_{p_0} = 1.245 \text{ эВ}, E_g = 1.1 \text{ эВ}, kT = 0.0005 \text{ эВ},$$

$$\gamma_n = \gamma_p = \gamma_a = I_2, n_1 = p_1 = 1, a_1 = 2, n_0 = p_0 = 1, a_0 = 2.$$

На рисунке 81 показана модель спектра, подобного спектру фотолюминесценции квантовых точек $InP/GaAs$ при облучении их лазером различной мощности [137]. В эксперименте исследуемые структуры были получены химическим осаждением в вакууме при низком давлении. Сначала температура подложки $GaAs$ поддерживалась равной $640^{\circ}C$, затем понижалась до $550^{\circ}C$ без прерывания процесса образования структур. В слое InP в результате самоорганизации образуются квантовые точки. При помощи атомно-силовой микроскопии было установлено, что образования квантовых точек InP имеют высоту 4.5 ± 0.5 нм и диаметр 30 ± 3 нм. В эксперименте наблюдается так называемое фиолетовое смещение спектральной зависимости фотолюминесценции, причину которого авторы видят в излучении, обусловленном наличием квантовых точек $InP/GaAs$. При проведении расчетов было учтено, что увеличение мощности излучения лазера приводит к росту энергии излучаемых фононов. Теория качественно правильно описывает фиолетовое смещение максимума коэффициента поглощения света ростом эффективного значения E_g .

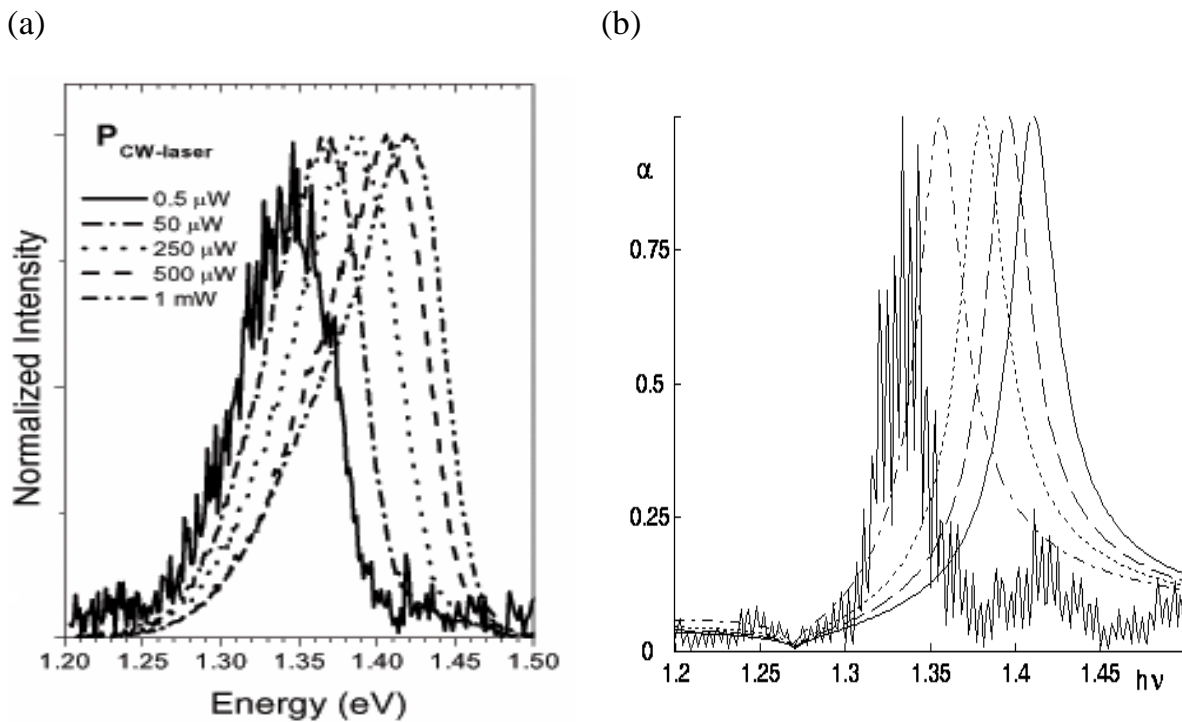


Рисунок 81. Спектр фотолюминесценции квантовых точек $InP/GaAs$ при облучении лазером.
(a) – эксперимент; (b) – теория:

$$kT = 0.01 \text{ эВ}, n_0 = p_0 = a_0 = 1, \gamma_n = \gamma_p = \gamma_a = I_2, n_1 = p_1 = 1, a_1 = 4,$$

- - - - - $E_g = 1.355 \text{ эВ}$, $E_g = 1.38 \text{ эВ}$,
 - - - - - $E_g = 1.395 \text{ эВ}$, ————— $E_g = 1.41 \text{ эВ}$.

В работе [138] приведены экспериментально полученные спектры люминесценции наночастиц CdS . Наночастицы были синтезированы в водных растворах $(NH_4)_2S$ и $Cd(NO_3)_2$, приготовленных отдельно, а затем быстро смешанных для формирования нанокристаллов CdS . После осаждения наночастиц образцы были просушены в вакууме. Образцы были приготовлены таким образом, чтобы соотношение концентраций Cd и S составляло 0.85. Просвечивающей электронной микроскопией и рентгеноструктурным анализом были установлены размеры наночастиц, средний диаметр которых составлял примерно 10 нм. Как предполагают авторы работы [138], наличие широкого пика в спектре фотолюминесценции связано с излучением наночастиц CdS . На рисунке 82 приведена модель такого спектра фотолюминесценции. Положение максимума поглощения также соответствует выбору значения E_g . Ширина спектра возле пика описывается выбором эффективной температуры (значения kT).

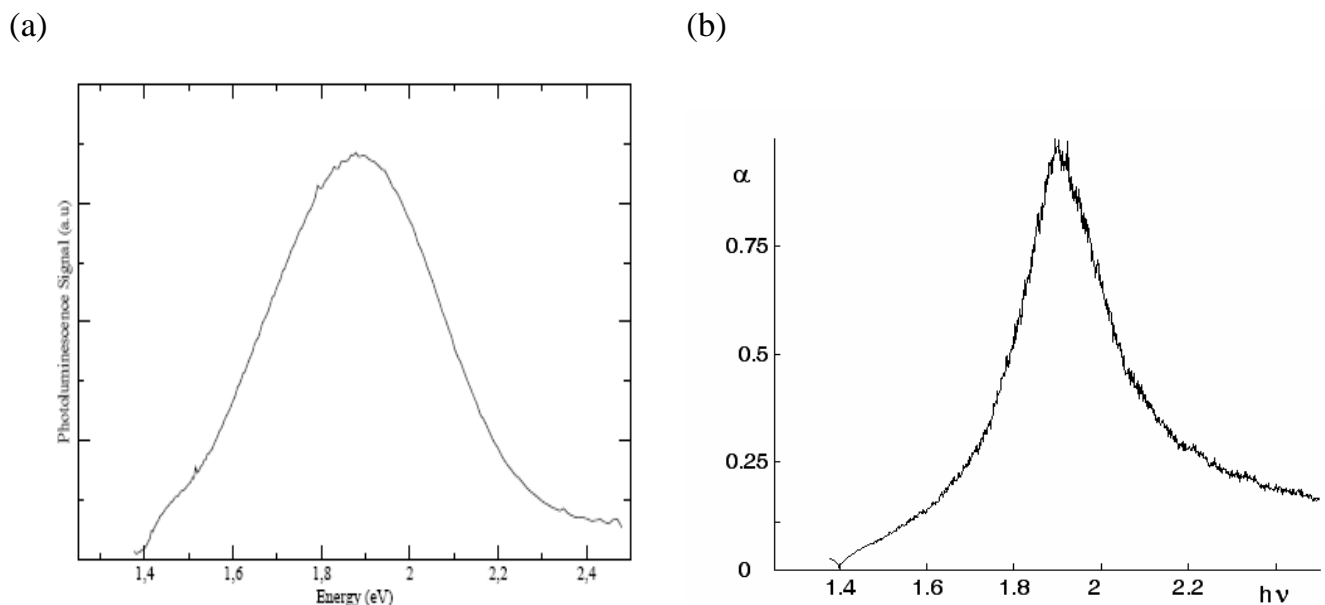


Рисунок 82. Спектр люминесценции наночастиц CdS .

(a) – эксперимент; (b) – теория:

$$E_g = 1.4 \text{ эВ}, \hbar\omega_f = 1.9 \text{ эВ}, kT = 0.035 \text{ эВ},$$

$$n_0 = p_0 = a_0 = 1, \gamma_n = \gamma_p = \gamma_a = I_2, n_1 = p_1 = 1, a_1 = 8.$$

Работа [36] посвящена изучению спектров поглощения матрично-изолированных молекул $C_{60}Cl_{24}$ и кристаллического порошка $C_{60}Cl_{24}$ в матрице хлорбензола. Как показал эксперимент, люминесценция $C_{60}Cl_{24}$

чрезвычайно слаба, что указывает на значительную роль безызлучательных процессов. На рисунке 83 приведены соответствующие результаты численного анализа по моделированию спектров поглощения, подобных полученных в указанной экспериментальной работе. Кривая 1 на рисунке 83 соответствует спектру поглощения матрично-изолированных молекул $C_{60}Cl_{24}$, а кривая 2 – спектру кристаллического порошка $C_{60}Cl_{24}$.

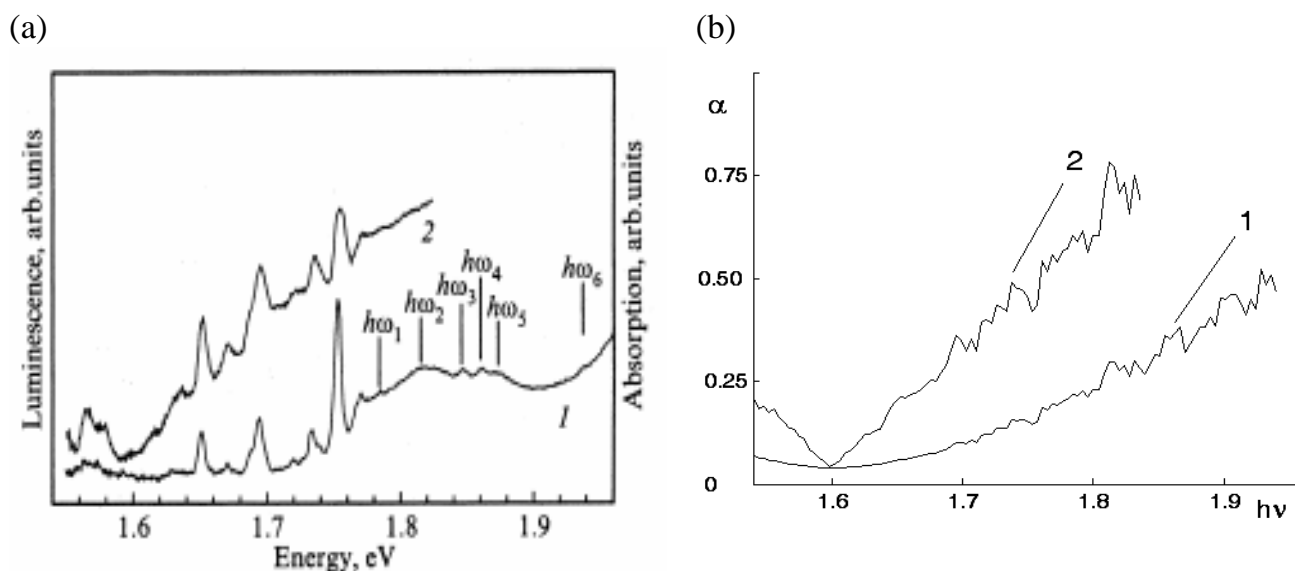


Рисунок 83. Модель спектра поглощения галогенофуллерена $C_{60}Cl_{24}$.

(a) – эксперимент; (b) – теория:

$$kT = 0.001 \text{ эВ}, n_0 = p_0 = a_0 = 1, \gamma_n = \gamma_p = \gamma_a = I_2, n_1 = p_1 = a_1 = 1,$$

$$1 - E_g = 1.2 \text{ эВ}, 2 - E_g = 1.6 \text{ эВ}.$$

В работе [139] исследованы особенности роста, дефектная структура и фотолюминесценция кристаллитов $ZnTe$, полученных на стенках кристаллизатора при температуре 650°C в режиме быстрого роста из пересыщенных паров исходных элементов. Каждый отдельный кристаллит размером до 10 мм имеет общую ось (011), вокруг которой сдвойничено несколько индивидов. Фрагменты отдельных индивидов сложены одной системой плоских макрослоев толщиной в несколько десятков микронметров каждый. Монокристаллическая пластина толщиной 0.8 мм, содержащая на одной стороне слои роста, пересекается системой перпендикулярных к ростовой поверхности двойниковых границ с понижением числа границ на внешней ростовой поверхности. В работе отмечено, что применение широкозонных полупроводников A_2B_6 во многом ограничено сложностями получения низкоомных образцов p - и n - типа проводимости из-за эффекта самокомпенсации и вхождения примесей в кристаллическую решетку. С этой точки зрения представляет

интерес изучение особенностей формирования дефектной структуры таких полупроводников, в частности, пленок $ZnTe$. Неравновесные условия быстрой кристаллизации $ZnTe$ способствуют повышению степени совершенства кристаллов, лидирующими дефектами становятся планарные дефекты (двойники), а не дислокации. В этой работе получен спектр фотолюминесценции $ZnTe$ при температуре 5К с ростовой грани монокристалла. В спектре наблюдаются переходы, обусловленные свободными экситонами и экситонно-примесными комплексами. Экситонно-примесные комплексы представлены тремя акцепторами – Li , Cu , Ag . В длинноволновой части спектра проявляется достаточно интенсивное излучение, связанное с примесью кислорода в подрешетке теллура. На рисунке 84 приведен теоретический спектр фотолюминесценции монокристалла $ZnTe$. Сопоставление результатов численного анализа с экспериментальным спектром показывают возможности теории по описанию оптического поглощения.

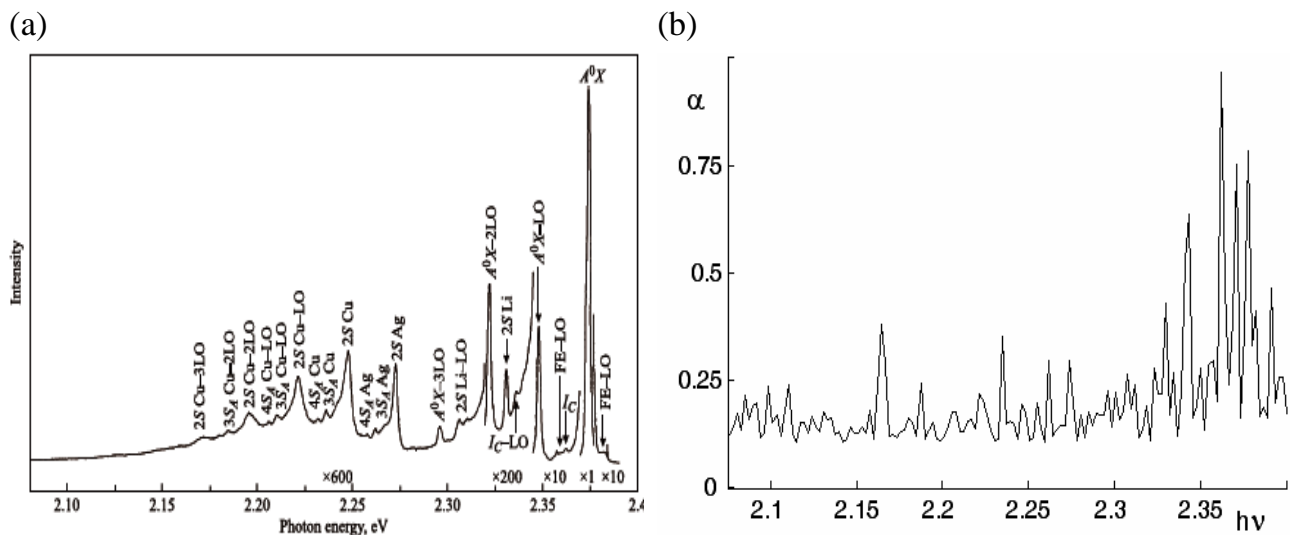


Рисунок 84. Обзорный спектр фотолюминесценции монокристалла $ZnTe$.

(a) – эксперимент; (b) – теория:

$$E_g = 2.37 \text{ эВ}, kT = 0.002 \text{ эВ}, n_0 = p_0 = a_0 = 10, \gamma_n = \gamma_p = \gamma_a = I_2.$$

Экспериментальные спектры фотолюминесценции гидрогенизированного кремния, подвергнутого лазерному облучению в вакууме, приведены в работе [141]. Интенсивность фотолминесценции образцов с гидрогенизированными поверхностями увеличивается при суммарно повторяющемся облучении, но уменьшается при больших значениях лазерных импульсов. Этот факт авторы объясняют присутствием конкурирующего процесса создания нерадиоактивных поверхностных дефектов во время лазерного облучения в импульсном режиме, что связано с локальной перестройкой связей кремниевой поверхности при условии

высокого электронного возбуждения и нагревания, вызванного импульсным лазерным облучением. Различие кривых в теории учитывается значениями фрактальных размерностей, что соответствует локальной перестройкой структуры объекта. Экспериментальному графику [141], полученному при условии наличия оксида кремния, сопоставлен теоретический спектр фотолюминесценции (рисунок 85). При этом приняты большие значения параметров $\gamma_n = \gamma_p = \gamma_a$. Как было уже отмечено, этот факт можно объяснить, видимо, тем, что наличие оксида повышает размерность фазового пространства, т.е. степени свободы системы из-за наличия условий преимущественной роли квазичастиц (фононов, экситонов и т.д.) в оптических явлениях.

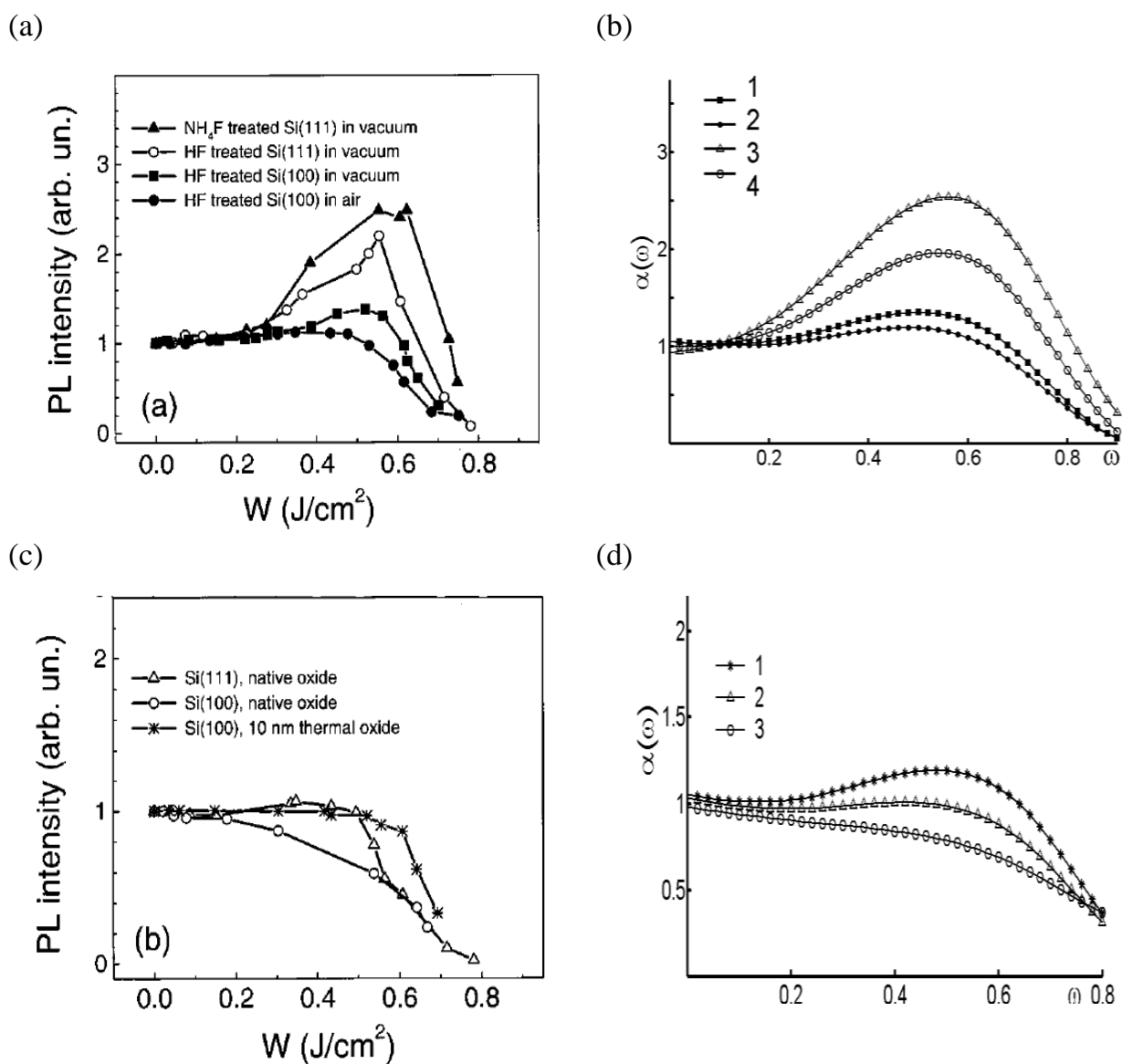


Рисунок 85. Спектры фотолюминесценции гидрогенизированного кремния.

(a, b) – эксперимент; (c, d) – теория:

$$n_1 = p_1 = a_1 = 1; n_0 = p_0 = a_0 = 1; E_g = 3.2 \text{ эВ}; kT = 0.086 \text{ эВ. (c): } 1 - \gamma_n = 3 + I_1; 2 - \gamma_n = 3 + I_2; 3 - \gamma_n = 2 + I_1; 4 - \gamma_n = 2 + I_2; \text{ (d): } 1 - \gamma_n = 2 + I_1; 2 - \gamma_n = 4 + I_2; 3 - \gamma_n = 2 + I_2.$$

Как видно, теория правильно описывает основные закономерности, наблюдающиеся в экспериментальных спектрах поглощения. Уменьшение коэффициента поглощения соответствует и в теоретическом графике повышению температуры. При более сильном отжиге меняется также структура пленки, что учитывается в теории относительно малым значением скейлинговым показателем $\gamma = D - d$.

Таким образом, на приведенных выше графиках показаны различные теоретические спектры оптического поглощения и фотолюминесценции, качественно согласующиеся с соответствующими экспериментальными данными. Все графики получены на основе описанной выше методики, согласно которой диссипация энергии при поглощении фотонов связана через флуктуации в виде спектра мощности корреляций концентраций электронов. Наноструктурированность среды описывается через фрактальные размерности, которые определены теоретически для самоподобного и самоаффинного стохастических объектов. В пределе прямозонности оптических переходов и отсутствия фононов, малости энергии фотонов и постоянства интенсивности флуктуаций полученная нами формула коэффициента поглощения переходит в известную закономерность, пропорциональную плотности состояний экситонных возбуждений. Учет различных значений фрактальных размерностей множества электронов, дырок, кластеров, корреляций структурных элементов среды позволяет описать сложные спектры поглощения с внутренней структурой. Из рассмотрения приведенных в настоящем разделе рисунков следует, что использованной методикой можно описать различные виды спектров оптического поглощения.

Экситонное поглощение в наноструктурированных полупроводниковых пленках

Экситонные и биэкситонные спектры характеризуются наличием в них резких пиков. Моделирование экситонных и мультиэкситонных спектров в наноструктурированных полупроводниковых пленках возможно на основе формул (97)-(99). Варьируя значения параметров E_g , E_0 , γ , можно получить различные типы экситонных спектров.

Фрактальность приводит к росту амплитуды осцилляций и расширению спектра (рисунок 86). Были использованы самоподобное $(1 - I_2)$ и самоаффинное $(1 - I_1)$ значения скейлинговых показателей $\gamma = D - d$.

Увеличение ширины запрещенной зоны E_g приводит к смещению области осцилляций в сторону больших энергий фотонов.

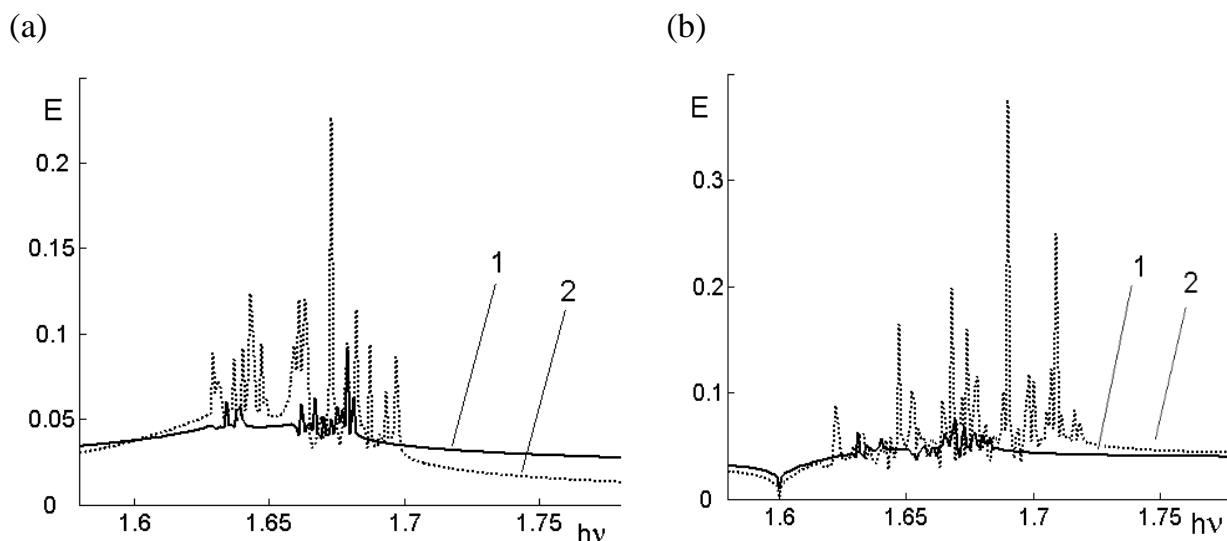


Рисунок 86. Влияние параметра γ на экситонно-биэкситонный спектр.

(a) – формула (98(a)), (b) – формула (98(b)):

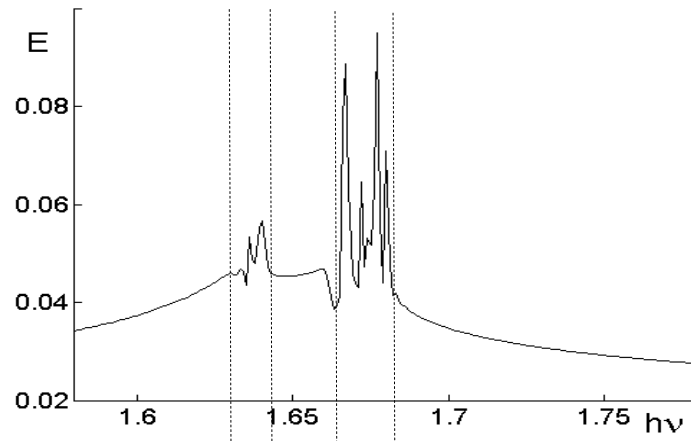
$$E_g = 1.6 \text{ eV}, E_0 = 0.05 \text{ eV}, 1 - \gamma = 1 - I_2, 2 - \gamma = 1 - I_1.$$

На языке «фаза-частота» экситонные и биэкситонные области, соответственно с большими и малыми осцилляциями, четко разделяются (рисунок 87). Этот факт указывает на наличие когерентности в смысле определенной разности фаз между областями осцилляций экситона и биэкситона. Расположение пиков и их количество внутри этих областей зависит от γ и числа точек моделирования. Рисунки 87 получены при шаге $\Delta\hbar\omega = 10^{-3}$ эВ.

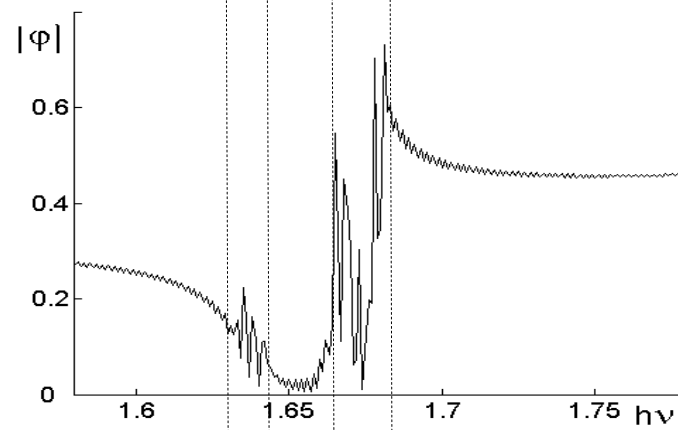
В работе [65] описан эксперимент по исследованию экситонного спектра фотолюминесценции пары квантовых точек *InGaAs*, полученных на подложке *GaAs* методом металлоорганической вакуумной фазовой эпитаксии. Образец имеет два слоя квантовых точек, расстояние между слоями составляет 5 нм. Экситонно-биэкситонный спектр в эксперименте был получен при 4К. Квантовые точки, исследуемые в эксперименте, были созданы в матрице *GaAs* методом металлоорганической вакуумной эпитаксии. Квантовые точки образовались в результате самоорганизации. Каждый пик фотолюминесценции соответствует возбужденному энергетическому состоянию экситона или биэкситона. Результаты моделирования такого спектра по формулам 98(a), (99), (100) представлены на рисунке 88.

В работе [64] исследован экситонно-биэкситонный спектр изолированной квантовой точки *InGaAs*, а на рисунке 89 представлена его модель, также полученная по формулам 98(a), (99), (100). Шаг по оси абсцисс для графиков 88 и 89 равен $\Delta\hbar\omega = 10^{-4}$ eV.

a)



(b)



(c)

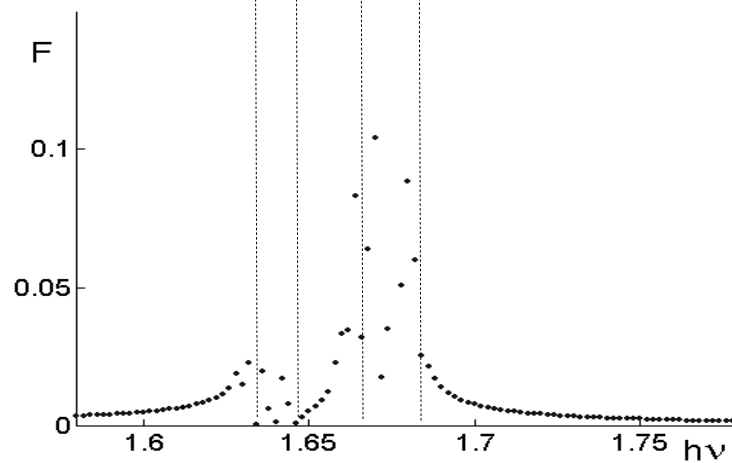
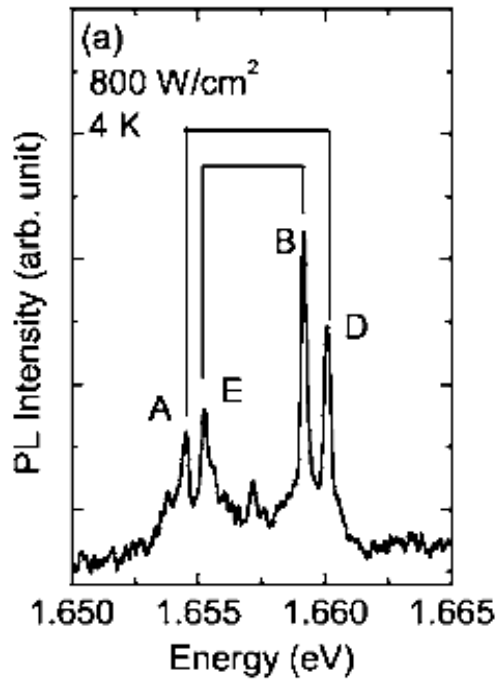


Рисунок 87. Экситонно-биэкситонный спектр (a),
 модуль фазы (b) и средняя частота (c):
 $E_g = 1.6 \text{ eV}$, $E_0 = 0.05 \text{ eV}$, $\gamma = 1 - I_2$.

(a)



(b)

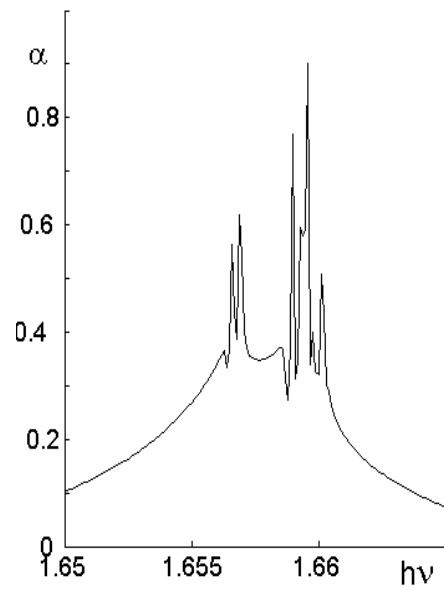
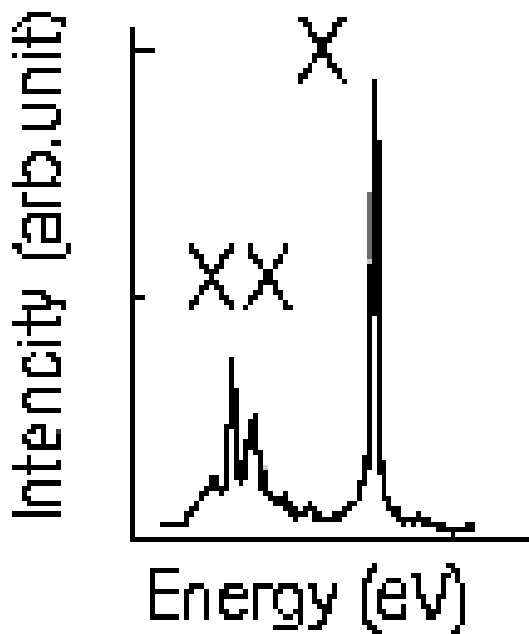


Рисунок 88. Спектр фотолуминесценции квантовых точек двухслойной структуры квантовых точек *InGaAs*.

(a) – эксперимент, (b) – теория:

$$E_g = 1.65 \text{ eV}, \gamma = 1 - I_2, E_0 = 4 \cdot 10^{-3} \text{ eV}.$$

(a)



(b)

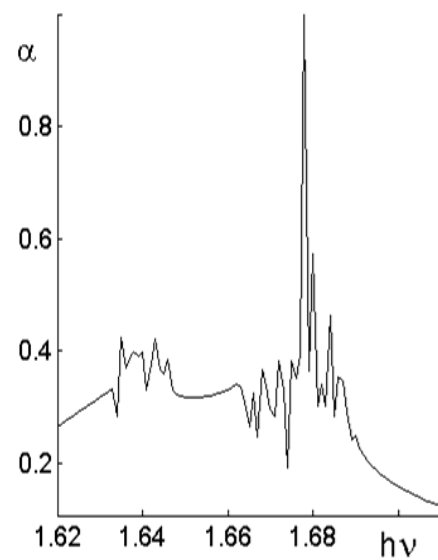


Рисунок 89. Экситонно-биэкситонный спектр фотолуминесценции изолированной квантовой точки *InGaAs*.

(a) – эксперимент, (b) – теория:

$$E_g = 1.60 \text{ eV}, \gamma = 0.244, E_0 = 5 \cdot 10^{-3} \text{ eV}.$$

Как видно из изложенного выше, наша теория может описывать основные закономерности экситонных процессов в наноструктурированных полупроводниковых пленках. Так же, как и в эксперименте, в теоретических графиках наблюдается смещение экситонных и биэкситонных спектров по частоте фотонов. Полученные в теории экситонные пики энергии возникают на тех же интервалах изменения $\hbar\omega$, что и в экспериментах, т.е. на интервалах порядка $10^{-2} \div 10^{-3}$ эВ. Параметры E_0 , E_g адекватно учитывают условия эксперимента. Соотношение амплитуд экситона и их образований соответствует эксперименту. Когерентность ярче наблюдается при меньших значениях параметра E_0 . Пороговое значение энергии образования экситонов E_0 зависит, как и ожидалось, от характера локализации наноструктур, от температуры. По смыслу E_0 может служить верхней оценкой энергии фононов, т.к. при бóльшей энергии фононов экситон распадается.

Заслуживает также внимания тот факт, что в эксперименте [64] биэкситон образуется вокруг квантовой точки, область локализации специально не ограничена. В эксперименте [65] биэкситон образуется между квантовыми точками, расстояние между которыми порядка 5 нм, т.е. узкая локализация способствует образованию экситона при малых E_0 . Это также соответствует теории.

Таким образом, фрактальная модель зависимости энергии электрон-дырочной пары от энергии возбуждающего фотона может быть использована для описания когерентности экситонных образований. Мы хотим указать различие между терминами «квантово-механическая когерентность» и когерентность волновых процессов различной природы. Квантово-механическая когерентность означает только наличие интерференции между волновыми функциями по времени, что обнаруживается в виде осцилляций энергии системы. Когерентность в общем смысле означает постоянство разности фаз эволюции подсистем по некоторым определяющим переменным. В экситонных образованиях когерентность может наблюдаться в этих разных видах.

Моделирование процессов, связанных с задержкой фотонов, в неупорядоченных полупроводниках

На рисунке 90 приведена зависимость средней по частоте значение интенсивности поглощаемой энергии от времени задержки фотона в наноструктурированном полупроводнике, построенная на основе формул (102)-(104).

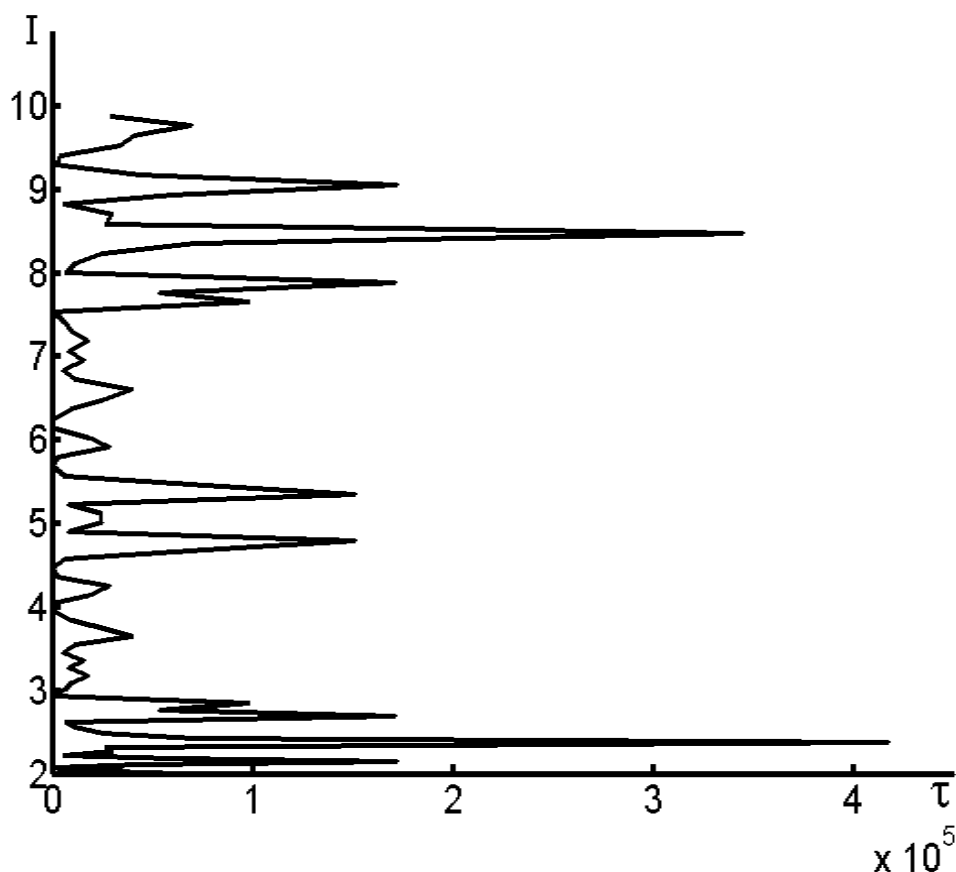
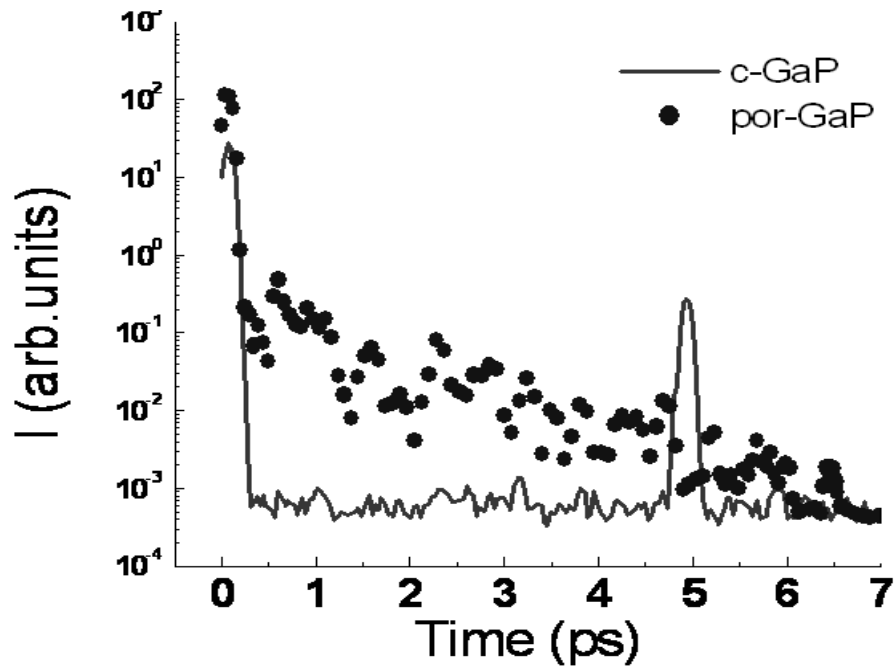


Рисунок 90. Изменение интенсивности поглощения I по времени.

В работе [142] приведены экспериментально полученные данные времени задержки фотона внутри кристаллического и пористого фосфида галлия GaP . На рисунке 91 приведены соответствующие результаты численного анализа по моделированию интенсивности поглощения фотонов в нанокompозитах.

Интервал времени, в котором средняя интенсивность поглощения фотонов остается примерно постоянной, определяет время задержки фотона в среде.

a)



b)

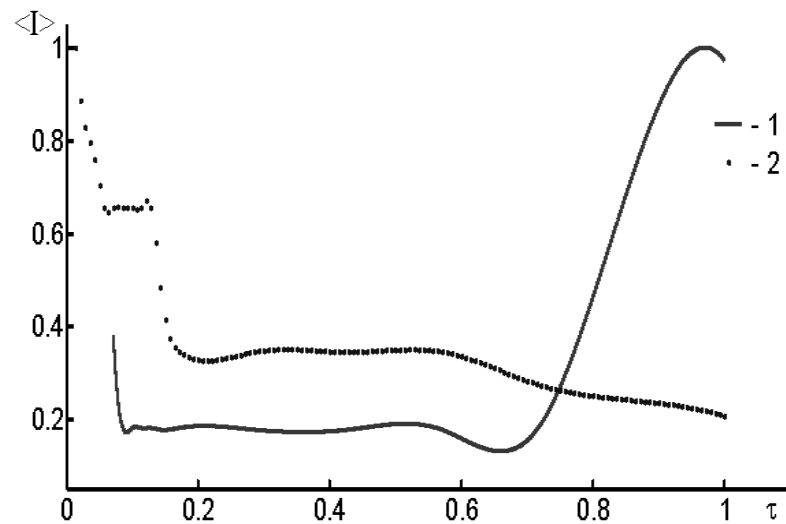


Рисунок 91. Интенсивность поглощения фотона в нанокompозитах.
а) – эксперимент с *c-GaP* и *por-GaP*.

б) – теория: $kT = 0.025$ эВ, $E_p = 1.5$ эВ; $E_0 = 1.5$ эВ; $\gamma = 0.194$; $n_1 = p_1 = a_1 = 1$;
 $k_n = 20$; $k_p = 10$; $k_n = 1$; $\hbar\omega = [0,10]$ эВ: $1 - n_0 = 85$; $\gamma = 0.194$; $2 - n_0 = 200$; $\gamma = 2.433$.

Можно считать, что предлагаемые теоретические модели могут правильно описать основные физические механизмы явления локализации света в наноструктурированных полупроводниках.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исходные уравнения, использованные для моделирования физических свойств наноструктур, основаны на двух особых положениях. Первое то, что любая мера (аддитивная, измеримая физическая величина) считается фрактальной. Второе то, что производная меры по любому аргументу считается ограниченной из-за наличия показателя Липшица-Гёльдера, который определяется фрактальной размерностью множества значений аргумента. Эти уравнения правильно описывают основные закономерности морфологии поверхности наноструктур, кинетики и температурной зависимости концентрации носителей заряда.

Приведенное в работе новое двумерное отображение, реализующее хаотические выбросы, позволяет моделировать различие точечных, линейчатых, плоских и объемных наноструктур с использованием установленных нами количественных критериев самоподобия, самоаффинности множеств.

Для описания оптических процессов в наноструктурированных полупроводниках предложена квантовая форма флуктуационно-диссипационного соотношения для квазистационарных флуктуаций. Теория учитывает фононные, экситонные механизмы поглощения фотонов. Для учета иерархической структуры экситонов (биэкситонов, трионов) предложены формулы меры нелинейного фрактала. Нелинейность фрактала означает зависимость его меры от самой себя при наличии внешнего возмущения.

Процесс отражения фотонов от наноструктур более точно можно описывать именно при выборе спектральной плотности корреляций в виде нелинейной фрактальной меры.

Используя вышеуказанные подходы, удастся объяснить и описывать новые экспериментальные факты о локализации света (задержка фотона) в наноструктурированных полупроводниках, сложные закономерности взаимодействия света с поверхностью пористого (с квантовыми нитями) кремния. Все это позволяет нам верить в то, что результаты настоящей работы могут быть полезными для дальнейших теоретических и экспериментальных исследований в области оптоэлектроники, фотоники, наноэлектроники и в других направлениях перспективных технологий.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Федер Е. Фракталы. – Москва: Мир, 1991. - 254 с.
2. Mandelbrot B.B. Stochastic models of the Earth's relief, the shape and the fractal dimension of the coastlines, and the number-area rule for islands // Proc. Natl. Acad. Sci. USA. – 1975. - № 72. - P. 3825-3828.
3. Mandelbrot B.B. Self-affine fractal sets // Fractals in Physics. – 1986. – P. 3-28.
4. Елецкий А.В., Смирнов Б.М. Фуллерены и структуры углерода // Успехи физических наук. – 1995. - Т.165, №9. - С. 977-1009
5. Кашкин В.Б., Рублева Т.В., Кашкина Л.В., Мосин Р.А. Цифровая обработка электронных изображений углеродных частиц в фуллерено-содержащей саже // Тезисы докладов 2-ой межрегиональной конференции « Ультрадисперсионные порошки, наноструктуры, материалы». – Красноярск, 1999. – С.91-92.
6. Закирничная М.М. Образование фуллеренов в углеродистых сталях и чугунах при кристаллизации и термических воздействиях: автореф. д-ра техн. наук: 05.02.01. – Уфа.:УГНТУ, 2001. – 46 с.
7. Torok G., Лебедев В.Т., Cser L. Исследование аномальной кластеризации C_{60} в толуоле методом малоуглового рассеяния нейтронов // Физика твердого тела. – 2002. – Т.44, вып.3. – С. 546-547.
8. Золотухин И.В., Калинин Ю.Е., Логинова В.И. Твердотельные фрактальные структуры // Альтернативная энергетика и экология. – 2005. - № 9(29). – С. 56-66.
9. Горелик О.П., Дюжев Г.А., Новиков Д.В., Ойченко В.М., Ситникова А.А. Структура фуллереновой сажи на различных стадиях образования при электродуговом испарении графита // Журнал технической физики. – 2002. – Т. 72, вып. 10. – С. 134-137.
10. Золотухин И.В., Соколов Ю.В. Фрактальная структура и некоторые физические свойства углеродного депозита, полученного распылением графита в электрической дуге // Письма в ЖТФ. – 1997. – Т. 23, № 13. – С. 71-75.
11. Золотухин И.В., Голев И.М., Попов А.А., Иевлев В.П. Термоэлектрические свойства нанотрубных и фрактальных углеродных депозитов // Письма в ЖТФ. – 2002. – Т. 28, вып.16. – С.32-36.
12. Золотухин И.В., Голев И.М., Белоногов Е.К., Иевлев В.П., Держнев Д.А., Маркова А.Е. Структура и термо-ЭДС нанотрубного углеродного депозита, полученного в плазме электрического разряда // Письма в ЖТФ. – 2003. – Т. 29, вып. 23. – С. 84-90.
13. Золотухин И.В., Голев И.М., Маркова А.Е., Панин Ю.В., Соколов Ю.В., Ткачев А.Г., Негров В.Л. Некоторые свойства твердотельных фрактальных структур углеродных нановолокон // Письма в ЖТФ. – 2006. – Т. 32, вып. 5. – С. 28-32.
14. Sayles R.S., Thomas T.R. Surface topography as a nonstationary random process // Nature. – 1978. – Vol. 271. – P. 431-434.
15. Berry M., Hanney J. Topography of random surfaces // Nature. – 1978. – Vol. 273. – P. 573-575.
16. Mandelbrot B.B., Passoja D.E., Paullay A.J. Fractal character of fracture surfaces of metals // Nature. – 1984. – Vol. 308. – P. 721-722.
17. Шредер М. Фракталы, хаос, степенные законы. Миниатюры из бесконечного рая. – Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2001. – 528 с.

18. Lando A., Kébaïli N., Cahuzas Ph., Masson A., Bréchigac C. Coarsening and Pearling Instabilities in Silver Nanofractal Aggregates // *Phys. Rev. Lett.* – 2006. – Vol. 97. – P. 133402-133403.
19. Дмитриев С.Г., Маркин Ю.В. Сегрегация подвижных ионов на границах раздела диэлектрик-полупроводник в МДП структурах // *Физика и техника полупроводников.* – 2002. – Т. 36, вып. 2. – С. 205-210.
20. Дроздов Ю.Н., Байдусь Н.В., Звонков Б.Н., Дроздов М.Н., Хрыкин О.И., Шашкин В.И. Сегрегация индия при выращивании квантовых ям *InGaAs/GaAs* в условиях газофазной эпитаксии // *Физика и техника полупроводников.* – 2003. – Т. 37, вып. 2. – С. 203-208.
21. Ремпель С.В., Гусев А.И. Поверхностная сегрегация *ZrC* из карбидного твердого раствора // *Физика твердого тела.* – 2002. – Т. 44, вып. 1. – С. 66-71.
22. Домрачев Г.А., Лазарев А.И., Каверин Б.С., Егорочкин А.Н., Обьедков А.М., Домрачева Е.Г., Домрачева Л.Г., Маркин Г.В., НуириNavaE., Сорокин А.А., Суворова О.Н., Карнацевич В.Л., Кириллов А.И., Закуражнов А.А. Роль углерода в самоорганизации системы железо-углерод при различном содержании компонентов // *Физика твердого тела.* – 2004. – Т. 46, вып. 10. – С. 1901-1915.
23. Болховитянов Ю.Б., Дерябин А.С., Гутаковский А.К., Ревенко М.А., Соколов Л.В. О зарождении дислокаций несоответствия с поверхности при выращивании пленок *GeSi/Si(001)* методом низкотемпературной (300-400°C) молекулярной эпитаксии // *Физика и техника полупроводников.* – 2006. – Т. 40, вып. 3. – С. 324-335.
24. Анкудинов А.В., Евтихийев В.П., Токранов В.Е., Улин В.П., Титков А.Н. Нанорельеф окисленной поверхности скола решетки чередующихся гетерослоев *Ga_{0.7}Al_{0.3}As* и *GaAs* // *Физика и техника полупроводников.* – 1999. – Т. 33, вып. 5. – С. 594-597.
25. Жерихин А.Н., Худобенко А.И., Вилльямс Р.Т., Вилкинсон Дж., Усер К.Б., Хионг Г., Воронов В.В. Лазерное напыление пленок *ZnO* на кремниевые и сапфировые подложки // *Квантовая электроника.* – 2003. – №11. – С. 975-980.
26. Байдуллаева А., Власенко А.И., Кузан Л.Ф., Литвин О.С., Мозоль П.Е. Образование наноразмерных структур на поверхности кристаллов *p-CdTe* при однократном воздействии импульсом излучения рубинового лазера // *Физика и техника полупроводников.* – 2005. – Т.39, вып. 9. – С. 1064-1067.
27. Безрядин Н.Н., Котов Г.И., Арсентьев И.Н., Стародубцев А.А. Формирование наноструктур в системе *Ga₂Se₃/GaAs* // *Физика и техника полупроводников.* – 2005. – Т. 39, вып. 9. – С. 1025-1028.
28. Okamoto H., Tawara T., Gotoh H., Kamada H., Sogawa T. Growth and Characterization of Telecommunication-Wavelength Quantum Dots Using Bi as a Surfactant // *Japanese Journal of Applied Physics.* Vol. 49. – 2010. – P. 06GJ01-1-6.
29. Иванов-Омский В.И., Колобов А.В., Лодыгин А.Б., Ястребов С.Г. Распределение по размерам нанокластеров кобальта в матрице аморфного углерода // *Физика и техника полупроводников.* – 2004. – Т. 38, вып. 12. – С. 1463-1465.
30. Zhou J., Liu J., Wang X., Song J., Tummala R., Xu N.Sh., Wang Zh.L. Vertically Aligned *Zn₂SiO₄* Nanotube / *ZnO* Nanowire Heterojunction Arrays // *Communications.* – 2007. – No 4. – P. 622-626.
31. Krylyuk A.V., Davydov A., Levin I. Tapering Control of *Si* Nanowires Grown from *SiCl₄* at Reduced Pressure // *ACS Nano.* – 2010. – Vol. 5, No 1. – P. 656-666.

32. Heo K., Kim Ch.-J., Jo M.-H., Hong S. Massive Integration of Inorganic Nanowire-Based Structures on Solid Substrates for Device Applications // *Journal of Materials Chemistry*. – 2009. – Vol. 19. – PP. 901-908.
33. Auslaender O.M., Yacoby A., Picciotto R., Baldwin K.W., Pfeiffer L.N., West K.W. Tunneling Spectroscopy of the Elementary Excitations in a One-Dimensional Wire // *Science*. – 2002. – Vol. 295. – P. 825-828.
34. Кардона М. Основы физики полупроводников. – Москва: ФИЗМАТЛИТ, 2002. – 560 с.
35. Lefebvre J., Homma Y., Finnie P. Temperature Dependent Photoluminescence from Single-Walled Carbon Nanotubes // *Phys. Rev. Lett.* – 2003. – Vol. 90. – P. 217401-217420.
36. Разбирин Б.С., Старухин А.Н., Чугреев А.В., Згода А.С., Смирнов В.П., Грушко Ю.С., Колесник С.Г., Коэр П.-Ф., Льевэн Ж., Колэн Р. Линейчатый спектр поглощения гагогенофуллерена $C_{60}Cl_{24}$ // *Физика твердого тела*. – 2002. – Т. 44, вып. 11. – С. 2106-2111.
37. Сухоруков Ю.П., Лошкарева Н.Н., Москвин А.С., Арбузов В.Л., Наумов С.В. Влияние облучения электронами на край фундаментального поглощения монокристалла монооксида меди CuO // *Письма в ЖЭТФ*. – 1998. – Т. 24, № 4. – С. 7-12.
38. Koropecki R.R., Tessler L.D., Sanjurjo J.A., Alvarez F. Photoinduced Effects in Diamondlike Hydrogenated Amorphous Carbon Films // *Journal of non-Crystalline Solids*. – 1991. – № 137. – P. 835-838.
39. Golovan L.A., Gonchar K.A., Osminkina L.A., Timoshenko V.Yu., Petrov G.I., Yakovlev V.V. Coherent anti-Stokes Raman scattering in silicon nanowire ensembles // *Laser Phys. Lett.* – 2004. – No 1. – P.1-5.
40. Tatenko K., Hibino H., Gotoh H., Nakano H. Vertical GaP Nanowires Arranged at Atomic Steps on $Si(111)$ Substrates // *Appl. Phys. Lett.* – 2006. – Vol. 89, No. 3. – P. 033114.
41. Zhang G., Tatenko K., Gotoh H., Sogawa T., Nakano H. Structural, Compositional, and Optical Characterizations of Vertically Aligned $AlAs/GaAs/GaP$ Heterostructure Nanowires Epitaxially Grown on Si Substrate // *Jpn. J. Appl. Phys.* – 2010. – Vol. 49. – P. 015001.
42. Цырлин Г.Э., Tchernycheva M., Patriarche G., Harmand J.-C. Влияние послеростовой термической обработки на структурные и оптические свойства $InP/InAsP/InP$ нитевидных нанокристаллов // *Физика и техника полупроводников*. – 2012. – Том 46, вып. 2. – С. 184-187.
43. Senthil K., Tak Y., Seol M., Yong K. Synthesis and Characterization of ZnO Nanowire – CdO Composite Nanostructures // *Nanoscale Res. Lett.* – 2009. – P. 1329-1334.
44. Стрельчук В.В., Литвин П.М., Коломыс А.Ф., Валах М.Я., Mazur Yu.I., Wang Zh.M., Salamo G.J. Латеральное упорядочение квантовых точек и нитей в многослойных структурах $(In,Ga)As/GaAs(100)$ // *Физика и техника полупроводников*. – 2007. – Том 41, вып. 1. – С. 74-81.
45. Tuan N.A., Mizutani G. Metal-Interface Second Harmonic Generation from Pt/Cu Bimetallic Nanowire Arrays on $NaCl(110)$ Faceted Templates // *e-J. Surf. Sci. Nanotech.* – 2009. – Vol. 7. – P. 831-835.
46. Vengust D., Pfuner F., Degiorgi L., Vilfan I., Nicolosi V., Coleman J. N., Mihailovic D. Optical Properties of $Mo_6S_3I_6$ Nanowires // *Physical Review B* 76. – 2007. – P. 075106-1-7.

47. McCarthy D., Nicolosi V., Vengust D., Mihailovic D., Compagnini G., Blau W.J., Coleman J.N. Dispersion and Purification of $Mo_6S_3I_6$ Nanowires in Organic Solvents // Journal of Applied Physics. – 2007. – Vol. 101. – P. 014317-1-6.
48. Yang Q., Tanaka M., Yasuda T., Tatsuoka H. Growth of ZnO Nanowires Using ZnS Substrates with Ga Droplets // e-Journal of Surface Science and Nanotechnology. – 2009. – Vol 7. – P. 25-28.
49. Czaban J.A., Thompson D.A., LaPierre R.R. GaAs Core-Shell Nanowires for Photovoltaic Applications // Nano Letters. – 2009. – Vol.9, No 1. – P. 148-154.
50. Cai S.M., Matsushita T., Fujii H., Shirai K., Nonomura T., Tatsuoka H. Growth of Cu-Oxide Nanowires on Cu Substrates by Thermal Annealing // e-Journal of Surface Science and Nanotechnology. – 2012. – Vol. 10. – P. 175-179.
51. Rathmell A.R., Bergin S.M., Hua Y-L., Li Zh.-Y., Wiley B.J. The Growth Mechanism of Copper Nanowires and Their Properties in Flexible, Transparent Conducting Films // Advanced Materials. – 2010. – Vol. 22. – P. 3558-3563.
52. Zhou J., Liu J., Wang X., Song J., Tummala R., Xu N.Sh, Wang Zh.L. Vertically Aligned Zn_2SiO_4 Nanotube / ZnO Nanowire Heterojunction Arrays // Communications. – 2007. – No 4. – P. 622-626.
53. Ю.И. Уханов. Оптические свойства полупроводников. М.: Наука. – 1977. – 368 с.
54. Ридли Б. Квантовые процессы в полупроводниках. – Москва: Мир, 1986. – 304 с.
55. Акилбеков А.Т., Бактыбеков К.С., Даулетбекова А.К. Спектры поглощения и термостимулированная люминесценция облученных кристаллов KBr с большим содержанием Na^+ // Журнал прикладной спектроскопии. – 2002. – Т. 69, № 5. – С. 643-645.
56. Белогорохов А.И., Гаврилов С.А., Белогорохов И.А., Тихомиров А.А. Оптические свойства пористого наноразмерного GaAs // Физика и техника полупроводников. – 2005. – Т. 39, вып. 2. – С. 258-263.
57. Мездрогина М.М., Криволапчук В.В., Петров В.Н., Родин С.Н., Черенков А.В. Влияние дополнительно введенных примесей Zn и Eu на вид спектров фотолюминесценции кристаллов GaN, легированных Er // Физика и техника полупроводников. – 2006. – Т. 40, вып. 12. – С. 1412-1419.
58. Данильцев В.М., Гапонова Д.М., Дроздов М.Н., Дроздов Ю.Н., Мурель А.В., Пряхин Д.А., Хрыкин О.И., Шашкин В.И. Влияние параметров процесса МОГФЭ на свойства эпитаксиальных пленок GaInAsN // Физика и техника полупроводников. – 2005. – Т. 39, вып. 1. – С. 13-16.
59. Морозова Н.К., Каретников И.А., Голуб К.В., Данилевич Н.Д., Лисицын В.М., Олешко В.И. Влияние кислорода на электронную зонную структуру ZnS // Физика и техника полупроводников. – 2005. – Т. 39, вып. 5. – С. 513-520.
60. Морозова Н.К., Каретников И.А., Мидерос Д.А., Гаврищук Е.М., Иконников В.Б. Исследование влияния кислорода на спектры катодолюминесценции и ширину запрещенной зоны ZnS_xSe_{1-x} // Физика и техника полупроводников. – 2006. – Т. 40, вып. 10. – С. 1185-1191.
61. Андронов А.А., Ноздрин Ю.Н., Окомельков А.В., Варавин, В.С., Смирнов Р.Н., Икусов Д.Г. Спонтанное и стимулированное излучение из полупроводниковых пленок $Cd_xHg_{1-x}Te$ // Физика и техника полупроводников. – 2006. – Т. 40, вып. 11. – С. 1300-1308.

62. Гуткин А.А., Брунков П.Н., Гладышев А.Г., Крыжановская Н.В., Берт Н.Н., Конников С.Г., Hopkinson M., Patané A., Eaves L. Оптическое исследование резонансных состояний в GaN_xAs_{1-x} // Физика и техника полупроводников. – 2006. – Т. 40, вып. 10. – С. 1192-1195.
63. Zhanabaev Z.Zh., Grevtseva T.Yu. Fractal Properties of Nanostructured Semiconductors // *Physica B: Condensed Matter*. – 2007. – Vol. 391, № 1. – P. 12-17.
64. Gotoh H., Kamada H., et al. Exciton Absorption Properties of Coherently Coupled Exciton-Biexciton Systems in Quantum Dots // *Physical Review B* 71. – 2005. – P. 195334-1 – 9.
65. Gotoh H., Sanada H., Kamada H., Nakano H., Hughes S., Ando H., Temmyo J. Detecting Coupled Excitons with Microphotoluminescence Techniques in Bilayer Quantum Dots // *Physical Review B* 71. – 2006. – P. 115322-1 – 6.
66. Kamada H., Gotoh H., Temmyo J., Takagahara T., Ando H. Exciton Rabi Oscillations in a Single Quantum Dot // *Physical Review*. - Vol. 87, No 24. – 2001. – P. 246401-1 – 4.
67. Qian F., Brewster M., Lim S.K., Ling Y., Greene C., Laboutin O., Johnson J.W., Gradecak S., Cao Yu, Li Y. Controlled Synthesis of AlN/GaN Multiple Quantum Well Nanowire Structures and Their Optical Properties // *Nano Letters*. – 2012. – Vol. 12. – P. 3344-3350.
68. Cheng Ch., Liu B., Sie E.J., Zhou W., Zhang J., Gong H., Huan Ch.H.A., Sum T. Ch., Sun H., Fan H.J. $ZnCdO/ZnO$ Coaxial Multiple Quantum Well Nanowire Heterostructures and Optical Properties // *J. Phys. Chem. C*. – 2010. – Vol. 114. – P. 3863-3868.
69. Renard J., Songmuang R., Bougerol C., Daudin B., Gayral B. Exciton and Biexciton Luminescence from Single GaN/AlN Quantum Dots in Nanowires // – *Nano Letters*. – 2008. – Vol. 8, No 7. – P. 2092-2096.
70. Yang P., Mao S., Russo R., Johnson J., Saykally R., Morris N., Pham J., He R., Choi H.-J. Controlled Growth of ZnO Nanowires and Their Optical Properties // *Advanced Functional Materials*. – 2002. – Vol. 12, No 5. – PP. 323-331.
71. Zhang Y., Xu W., Xu Sh., Fei G., Xiao Y., Hu J. Optical Properties of Ni and Cu Nanowire Arrays and Ni/Cu Superlattice Nanowire Arrays // *Nanoscale Research Letters*. – 2012. – Vol. 7. – P. 569-574.
72. Bao J., Bell D.C., Capasso F. Optical Properties of Rotationally Twinned InP Nanowire Heterostructures // *Nano Letters*. – 2008. – Vol 8. No 3. – P. 836-841.
73. Tourbot G., Bougerol C., Grenier A., Hertog M.D., Sam-Giao D., Cooper D., Gilet P., Gayral B., Daudin B. Structural and Optical Properties of $InGaN/GaN$ Nanowire Heterostructures Grown by PA-MBE // *Nanotechnology*. – 2011. – Vol 22. – P. 0705601-1-8.
74. Gabitov I.R., Indik R.A., Litchinitser N.M., Maimistov A.I., Shalaev V.M., Soneson J.E. Double-resonant optical materials with embedded metal nanostructures // *J. Opt. Soc. Am. B*. – 2006. – Vol. 23, No.3. – P. 535-542.
75. Maimistov A.I., Gabitov I.R., Kazantseva E.V. Quadratic Solitons in Negative Refractive Index Medium // *Optics and Spectroscopy*. – 2007. – Vol. 102, No 1. – P. 104-112.
76. Gabitov I.R. et. al., Negative Refractive Index // *J. Opt. Soc. Am. B*. – 2006. – Vol. 23. – P. 535-542.
77. Nazarenko S., Newell A.C., Zakharov V.E. // *Phys. Plasmas*. - 1994. – No 1. – P. 2827-1-4.

78. Anderson P.W. Absence of Diffusion in Certain Random Lattices // *Phys. Rev.* – 1958. – Vol. 109, No 5. – P. 1492-1505.
79. Labeyrie G., Tomasi F., Bernard J.-C., Müller C.A., Miniatura Ch., Kaiser R. Coherent Backscattering of Light by Cold Atoms // *Phys. Rev. Lett.* – 1999. – Vol. 83. – P. 5266-5270.
80. Golovan L.A., Timoshenko V.Yu., Kashkarov P.K. Optical Properties of Porous-System-Based Nanocomposites // *Успехи физических наук.* – 2007. – Том. 177, вып 6. – С. 619-638.
81. Wiersma D.S., Bartolini P., Lagendijk A., Righin R. Localization of Light in a Disordered Medium // *Nature.* – 1997. – No 390. – P.671-673.
82. Scheffold F., Lenke R., Tweer R., Maret G. Localization or Classical Diffusion of Light? // *Nature.* – 1999. – No 398. – P. 206-207.
83. Alongkarn Ch., Sajeev J. Light Localization for Broadband Integrated Optics in Three Dimensions // *Physical Review B.* – 2005. –Vol. 72. – PP. 161316-1-4.
84. Muller C.A., Jonckheere Th., Miniatura C., Delande D. Weak Localization of Light by Cold Atoms: The Impact of Quantum Internal Structure // *Phys. Rev. A.* – 2001. – Vol. 64. – P. 053804 -1-20.
85. Gattobigio G.L., Michaud F., Javaloyes J., Tabosa J.W.R., Kaiser R. Bunching-Induced Asymmetry in Degenerate Four-Wave Mixing with Cold Atoms // *Phys. Rev. A.* – 2006. – Vol. 74. – P. 043407 -1 -7.
86. Labeyrie G., Delande D., Kaiser R., and Miniatura C. Light Transport in Cold Atoms and Thermal Decoherence // *Phys. Rev. Lett.* – 2006. – Vol. 97. – P. 013004 – 1-4.
87. Labeyrie G., Gattobigio G.L., Chaneliere T., Lippi G.L., Ackemann T., Kaiser R. Nonlinear Lensing Mechanisms in a Cloud of Cold Atoms // *The European Physical Journal D.* – 2007. – Vol. 41. – P. 337-348.
88. Tergas H., Mandonga J.T., Kaiser R. Driven Collective Instabilities in Magneto-Optical Traps: a Fluid-Dynamical Approach // *EPL.* – 2010. – Vol. 89. – P. 53001-1-5.
89. Buxa S., Lucioniac E., Bender H., Bienaimé T., Lauber K., Stehle C., Zimmermann C., Slama S., Courteille Ph.W., Piovella N., Kaiser R. Cooperative Scattering by Cold Atoms // *Journal of Modern Optics.* – 2010. – Vol. 57, No 19. – P. 1841-1848.
90. Bienaimé T., Petruzzo M., Bigerni D., Piovella N., and Kaiser R. Atom and Photon Measurement in Cooperative Scattering by Cold Atoms // *Journal of Modern Optics.* – 2011. – Vol. 58, No 21. – P. 1942-1950.
91. Kaiser R. Disorderly Arrest // *Nature Physics.* – 2012. – P. 1-2.
92. Bienaime T., Barontini G., Lepinay L.M., Bellando L., Chabe J., Kaiser R. Fast Compression of a Cold Atomic Cloud Using a Blue-Detuned Crossed Dipole Trap // *Phys. Rev. A.* – 2012. – Vol. 86. – P. 053412-1-12.
93. Baudouin Q., Mercadier N., Kaiser R. Steady-State Signatures of Radiation Trapping by Cold Multilevel Atoms // *Phys. Rev. A.* – 2013. – Vol. 87. – P. 013412-1-7.
94. Fischer R., Neshev D.N., Lopez-Aguayo S., Desyatnikov A.S., Sukhorukov A.A., Krolikowski W., Kivshar Yu.S. Light Localization in Azimuthally Modulated Bessel Photonic Lattices // *J. Mater Sci.: Mater Electron.* – 2007. – Vol. 10. – P. 10854-1-7.
95. Neshev D.N., Sukhorukov A.A., Krolikowski W., Kivshar Yu.S. Nonlinear Optics and Light Localization in Periodic Photonic Lattices // *Journal of Nonlinear Optical Physics & Materials.* – 2007. – Vol. 16, No 1. – P. 1-25.

96. Jovic D.M., Kivshar Yu.S, Denz C., Belic M.R. Anderson Localization of Light Near Boundaries of Disordered Photonic Lattices // *Phys. Rev. A.* – 2011. – Vol. 83. – P. 033813-1-5.
97. Aegerter Ch.M., Störzer M., Fiebig S., Bührer W., Maret G. Observation of Anderson Localization of Light in Three Dimensions // *Journal of the Optical Society of America.* – 2007. – Vol. 24, No 10. – P. A23-27.
98. Giannini V., Fernandez-Dominguez A.I., Sonnefraud Y., Roschuk T., Fernandez-Garcia R., Maier S.A. Controlling Light Localization and Light-Matter Interactions with Nanoplasmonics // *Nanoplasmonics.* – 2010. – No 22. – P. 2498-2507.
99. Osminkina L.A., Gonchar K.A., Marshov V.S., Bunkov K.V., Petrov D.V., Golovan L.A., Talkenberg F., Sivakov V.A., Timoshenko V.Yu. Optical Properties of Silicon Nanowire Arrays Formed by Metal-Assisted Chemical Etching: Evidences for Light Localization Effect // *Nanoscale Research Letters.* – 2012. – Vol. 7. – P. 524-1-6.
100. Depine R.A., Lakhtakia A. A New Condition to Identify Isotropic Dielectric-Magnetic Materials Displaying Negative Phase Velocity // *Microwave and Optical Technology Letters.* – 2004. – Vol. 41, No 4. – P. 315-316.
101. Valentine J., Zhang Sh., Zentgraf Th., Ulin-Avila E., Genov D.A., Bartal G., Zhang T. Three-Dimensional Optical Metamaterial with a Negative Refractive Index // *Nature.* – 2008. – Vol. 455. – P. 376-379.
102. Newhall K.A., Atkins E.P., Kramer P.R., Kovacic G., Gabitov I.R. Random Polarization Dynamics in a Resonant Optical Medium // *Opt. Lett.* – 2013. – Vol. 38, No 6. – P. 893-1-5.
103. Dolling G., Wegener M., Soukoulis C.M., Linden S. Negative-Index Metamaterial at 780 nm Wavelength // *Opt. Lett.* – 2007. – Vol. 32. – P. 53-55.
104. Litchinitser N.M., Maimistov A.I., Gabitov I.R., Sagdeev R.Z., Shalaev V.M. Metamaterials: Electromagnetic Enhancement at Zero-Index Transition // *Opt. Lett.* – 2008. – Vol. 33, No. 20. – P. 2350-2352.
105. Gibson E.A., Pennybacker M., Maimistov A.I., Gabitov I.R., Litchinitser N.M. Resonant Absorption in Transition Metamaterials: Parametric Study // *J. Opt.* – 2011. – Vol. 13. – P. 024013-1-5.
106. Mozjerin I., Gibson E.A., Furlani E.P., Gabitov I.R., Litchinitser N.M. Electromagnetic Enhancement in Lossy Optical Transition Metamaterials // *Opt. Lett.* – 2010. – Vol. 35. – P. 3240-3242.
107. Rodriguez-Herrera O.G., Lara D., Bliokh K.Y., Ostrovskaya E.A., Dainty C. Optical Nanoprobing via Spin-Orbit Interaction of Light // *Phys. Rev. Lett.* – 2010. – Vol. 104. – P. 253601-1-6.
108. Kildishev A.V., Prokopeva L.J., Narimanov E.E. Cylinder Light Concentrator and Absorber: Theoretical Description // *Optics Express.* – 2010. – Vol. 18, No. 16. – P. 16646-1-5.
109. Klimontovich Yu.L. Information Concerning the States of Open Systems // *Physica Scripta.* – 1998. – Vol. 58. – P. 549.
110. Slomczynski W., Kwapien J., Zyczkowski K. Entropy Computing via Integration over Fractal Measures // *Chaos.* 2010. – Vol. 10, No 1. – P. 180-188.
111. Pietzonero L., Tosatti E. *Fractals in Physics.* – Elsevier Science, 1986. – 274 p.
112. Казанский А.Г., Форш П.А., Хабарова К.Ю., Чукичев М.В. Влияние электронного облучения на оптические и фотоэлектрические свойства монокристаллического гидрированного кремния // *Физика и техника полупроводников.* – 2003. – Т. 37, вып. 9. – С. 1100-1103.

113. Abdullin Kh.A., Gorelkinskii Yu.V., Mukashev B.N., Serikkanov A.S. Electrical Properties of Nanoclusters in Hydrogenised Monocrystalline Silicon // *Physica B.* – 2003. – Vol. 340-342. – P. 692-696.
114. Zeisel R., Bayerl M.W., Goennenwein S.T. B., Dimitrov R., Ambacher O., Brandt M. S., Stutzmann M. DX-Behavior of Si in AlN // *Phys. Rev. B.* – 2000. – No 61 R16283. – P. 283-286.
115. Zhanabaev Z.Zh. Information Properties of Self-Organizing Systems // *Rep. Nat. Acad. of Science RK.* – 1996. – No 5. – P.14-19.
116. Zhanabaev Z.Zh., Grevtseva T.Yu. Fractal Properties of Surfaces of Nanostructured Semiconductor Films // *Eurasian Physical Technical Journal.* – 2006. – Vol. 3, № 2(6). – P. 38-44.
117. Zhanabaev Z.Zh., Grevtseva T.Yu. Fractality of Nanostructured Semiconductor Films // *e-Journal of Surface Science and Nanotechnology.* – 2007. – Vol. 5. – P. 132-135.
118. Zhanabaev Z.Zh., Grevtseva T.Yu., Danegulova T.B., Assanov G.S. Optical Processes in Nanostructured Semiconductors // *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience.* – 2013. – Vol. 10, No 3. – P.673-678.
119. Ridley B.K. *Quantum Processes in Semiconductors.* – Oxford: University of Essex Clarendon Press, 1982. – P. 312.
120. Zhanabaev Z.Zh. Fractal Measures in Nanoelectronics and Neurodynamics // *Eurasian Physical Technical Journal.* – 2012. – No 1(17). – P. 3-13.
121. Nicolis G., Prigogine I. *Exploring Complexity. An Introduction.* – New York: W.H. Freeman and Company, 1990. – p. 342.
122. Matsuda I., Tanikawa T., Hasegawa Sh., Yeom H.W., Tono K., Ohta T. Quantum-Well States in Ultra-Thin Metal Films on Semiconductor Surfaces // *e-Journal of Surface Science and Nanotechnology.* – 2004. – Vol. 2. – P. 169-177.
123. Yamanaka T. Atomic Depth Distribution Analysis and Growth Dynamics of Metals on Metal-Covered Si(111) Surfaces Studied by Incident-Angle-Dependent RHEED-TRAXS (Total-Reflection-Angle X-Ray Spectroscopy) // *e-Journal of Surface Science and Nanotechnology.* – 2003. – Vol. 1. – P. 91-101.
124. Панин А.В., Шугуров А.Р., Калыгина В.М. Влияние серы и селена на рельеф поверхности диэлектрических пленок и электрические характеристики структур металл-диэлектрик-*p-GaAs* // *Физика и техника полупроводников.* – 2001. – Т. 35, вып. 1. – С. 78-83.
125. Торхов Н.А. Формирование структуры собственного оксида на поверхности *n-GaAs* при естественном окислении на воздухе // *Физика и техника полупроводников.* – 2003. – Т 37, вып. 10. – С. 1205-1213.
126. Zheng S.Q., Rahman M.M., Kawashima M., Mori M., Tambo T., Tatsuyama M. Influence of *UTA-i* Buffer Layers on the Growth of *SiGe* Films Analyzed by High Resolution X-ray Reciprocal Space Map // *e-Journal of Surface Science and Nanotechnology.* – 2004. – Vol. 2. – P. 256-260.
127. Gangopadhyay S., Schmidt Th., Einfeldt S., Yamaguchi T., Hommel D., Falta J. Growth and Formation of *InGaN* and *GaN* Nanostructures Studied by STM // *e-Journal of Surface Science and Nanotechnology.* – 2006. – Vol. 4. - P. 90-95.
128. Рембеза С.И., Свистова Т.В., Рембеза Е.С., Борсякова О.И. Микроструктура и физические свойства тонких пленок *SnO₂* // *Физика и техника полупроводников.* – 2001. – Т. 35, вып. 7. – С. 796-800.
129. Xiao Z.L., Han C.Y., Welp U., Wang H.H., Kwok W.K., Willing G.A., Hiller J.M., Cook R.E., Miller D.J., Crabtree G.W. Fabrication of Alumina Nanotubes and

Nanowires by Etching Porous Alumina Membranes // Nano Letters. – 2002. – Vol. 2, No 11. – P. 1293-1297.

130. Tuanand N.A., Mizutani G. Metal-Interface Second Harmonic Generation from Pt/Cu Bimetallic Nanowire Arrays on *NaCl*(110) Faceted Templates // e-Journal of Surface Science and Nanotechnology. – 2009. – Vol. 7. – P. 831-835.

131. Давыдов А.С. Теория твердого тела. – М.: Наука, 1976. – 640 с.

132. Жанабаев З.Ж. Оптические свойства наноструктурированных полупроводников // Вестник КазНУ. Сер. физ.. – 2007. – № 2. – С. 83-88.

133. Жанабаев З.Ж., Данегулова Т.Б., Гревцева Т.Ю. Оптические свойства наноструктурированных полупроводников // Мат. 6-ой Междунар. науч. конф. «Современные достижения физики и фундаментальное физическое образование». посвященной 75-летию КазНУ им. аль-Фараби. – Алматы, 2009. – С. 126-128.

134. Жанабаев З.Ж., Данегулова Т.Б., Гревцева Т.Ю. Оптические процессы в хаотически наноструктурированных полупроводниках // Материалы 7-ой Международной научной конференции. «Хаос и структуры в нелинейных системах. Теория и эксперимент». – Караганды, 2010. – С. 115-126.

135. Vuxab S., Lucioniac E., Benderb H., Bienaiméa T., Lauberb K., Stehleb C., Zimmermannb C., Slamab S., Courteilleabd Ph.W., Piovellac N., Kaiser R. Cooperative Scattering by Cold Atoms // Journal of Modern Optics. – 2010. – Vol. 57, No 19. – P. 1841-1848.

136. Сарсембинов Ш.Ш., Приходько О.Ю., Максимова С.Я. Физические основы модификации электронных свойств некристаллических полупроводников. – Алматы: Қазақ университеті, 2005. – 341 с.

137. Iikawa F., Godoy M.P.F., Nakaema M.K. K., Brasil M. J. S. P., Maialle M. Z., Degani M. A., Ribeiro E., Medeiros-Ribeiro G., Carvalho W. Jr., Brum J. A. Optical properties of type-I and II quantum dots // Brazilian Journal of Physics. – 2004. – Vol. 34, № 2b. – P. 555-559.

138. Favero P.P., Souza-Parise M., Fernandes J.L.R., Miotto R., Ferraz A.C. Surface Properties of *CdS* Nanoparticles // Brazilian Journal of Physics. – 2006. – Vol. 36, № 3b. – P. 1032-1034.

139. Клевков Ю.В., Мартовицкий В.П., Багаев В.С., Кривобок В.С. Морфология, двойникование и фотолюминесценция кристаллов *ZnTe*, выращенных методом химического синтеза компонентов из паровой фазы // Физика и техника полупроводников. – 2006. – Т. 40, вып. 2. – С. 153-159.

140. Мосс Т., Баррел Г., Эллис Б. Полупроводниковая оптоэлектроника. – Москва: Мир, 1976. – 431 с.

141. Timoshenko V.Yu. et al. Annihilation of Nonradiative Defects on Hydrogenated Silicon Surfaces under Pulsed-Laser Irradiation // Applied Physics Letters, 2000. - Vol. 77, No 19. – P. 3006-3008.

142. Mel'nikov V.A., Golovan L.A., Konorov S.O., Muzychenko D.A., Fedotov A.B., Zheltikov A.M., Timoshenko V.Yu., Kashkarov P.K. Second-Harmonic Generation in Strongly Scattering Porous Gallium Phosphide // Applied Physics B: Lasers and Optics 81. – 2004. – P. 1-4.

143. Zhanabaev Z.Zh., Kozhagulov Y.T. A Genetic Model for scale – Invariant Neural Networks // Journal of Neuroscience and Neuroengineering. – 2013. – Vol. 2 – P. 1-5.

НЕЛИНЕЙНЫЕ ФРАКТАЛЬНЫЕ МОДЕЛИ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ

Междисциплинарное научное направление «нейронаука» включает в себя понятия «нейронные сети», «искусственный интеллект», «интеллектуальные измерения» и т.д. Основной проблемой является моделирование самосогласованной работы ансамбля взаимодействующих элементов с различными связями при наличии внешних сигналов. Требуется, чтобы моделируемая нейронная сеть обладала свойствами ассоциативности, устойчивостью к шуму, распределенным характером хранения информации, адаптивностью к формированию связей между элементами, т.е. свойствами работы мозга. С точки зрения физики открытых систем нелинейная динамика нейронной сети должна характеризоваться масштабной инвариантностью, фрактальностью, хаотичностью, определенными фазовыми соотношениями и т.д. Возникла необходимость в создании физической модели, универсальным образом описывающей указанные свойства[143].

Эксперименты по измерению временной зависимости потенциала действия нейронов показывают наличие следующих закономерностей. Под действием стимула (внешнего потенциала) нейрон переходит из основного состояния в возбужденное состояние. Переход наблюдается в виде спайков – всплесков потенциала и их кластеров. Это явление также называется явлением «накопления-взрыва» (bursting). Наряду с берстовыми колебаниями нейрон может генерировать также разнообразные периодические, хаотические и шумоподобные колебания. Поэтому временная реализация потенциала нейрона в общем случае может иметь асимметрично перемежаемый (с чередованием относительного порядка с взрывами) характер.

Амплитуды колебаний после взрыва резко возрастают (явление деполяризации) и наблюдается зависимость фазы спайковых кластеров от амплитуды колебаний (явление фазовой переустановки). Последние два факта говорят о наличии нелинейных эффектов, сопровождаемых некоторой иерархией на различных масштабах, самоподобия в динамике нейронов.

Существуют различные модели, описывающие отдельные свойства нейронов. Целью настоящей работы является построение наиболее простой нелинейной модели, описывающей основные закономерности динамики нейронов: асимметричная перемежаемость, хаотичность, иерархия и самоподобие, деполяризация, фазовая переустановка.

1. Исходные уравнения для нелинейных фрактальных мер

Основными свойствами фракталов являются их самоподобие и зависимость меры от масштаба измерения. Под мерой понимается любая физическая величина, характеризующая аддитивным измеримым множеством. К примеру, мерой геометрического фрактала служит длина, площадь, объем. Удивительное разнообразие физических свойств, например, нанообъектов обусловлено именно нелинейной зависимостью их меры от собственной ее величины. Этот факт убедительно показывает необходимость фрактального анализа в нанонауке.

Известные теории фракталов предполагают независимый выбор минимального масштаба измерения (размера ячеек, покрывающих объект) от величины определяемой меры. Если нас интересует эволюция меры от заданного параметра порядка – определяющей переменной физического процесса, то масштаб измерения выбирается через этот параметр и искомую меру. Следовательно, фрактальная мера будет нелинейной функцией, зависящей от самого процесса.

Запишем традиционное определение фрактальной меры M в виде

$$M = M_0 (|\Delta M|/M_*)^{-\gamma}, \quad \gamma = D - d, \quad \gamma > 0, \quad (1)$$

где M_0 – регулярная (нефрактальная) мера, ΔM – масштаб измерения, M_* – норма M , D – фрактальная размерность множества значений M , d – топологическая размерность носителя меры. Учитывая то, что ΔM не зависит от M , меру, определяемую формулой (1), можно условно назвать линейной. Зависимость ΔM от M предполагает существование некоторого условия в виде внешнего возмущения, в общем случае – параметра порядка.

При наличии параметра порядка λ можно выбрать ΔM в следующих формах:

$$\Delta M_M = \frac{|M - \lambda|}{M} = \left| 1 - \frac{\lambda}{M} \right|, \quad \Delta M_\lambda = \frac{|M - \lambda|}{\lambda} = \left| 1 - \frac{M}{\lambda} \right|, \quad (2)$$

где индексы M , λ соответствуют нормам ΔM . С учетом (2) формула (1) запишется в виде

$$M_M = M_0 \left(\left| 1 - \frac{\lambda}{M} \right| \right)^{-\gamma}, \quad M_\lambda = M_0 \left(\left| 1 - \frac{M}{\lambda} \right| \right)^{-\gamma}. \quad (3)$$

В пределе $\gamma \rightarrow 0$ имеем $M_M = M_\lambda = M_0$, что соответствует смыслу M_0 . При $\lambda = 0$ имеем $M_M = M_0$, $M_\lambda = 0$. Это означает, что фрактальная мера, определяемая собственной нормой, существует и в случаях отсутствия внешнего воздействия, характеризуемого параметром λ .

Применим формулы (3) к описанию потенциала действия нейронов. Используя упрощенные обозначения $M_M = M = V$, $M_0 = V_0$, $\lambda = F(t)$, $M_\lambda = V_F$, из формул (3) получим для потенциала нейрона V выражения

$$V = V_0 \left(\left| 1 - \frac{F(t)}{V} \right| \right)^{-\gamma} \equiv f(V_0, V), \quad V_F = V_{0,F} \left(\left| 1 - \frac{V_F}{F(t)} \right| \right)^{-\gamma} \equiv f(V_{0,F}, V_F), \quad (4)$$

где $V_0, V_{0,F}$ – пороговые потенциалы возбуждения. Нейронам присущи свойства квазичастиц, они не могут существовать без движения и вне среды, колебаниями которой они и являются. Нейроны взаимодействуют путем передачи потенциалов действия. Поэтому естественно принять, что действие потенциалов носит модуляционно-периодический характер и в уравнении (4) мы можем принять внешнее поле в виде

$$F(t) = A(1 + B \sin(\Omega t)), \quad (4a)$$

учитывая только низкочастотное изменение амплитуды модулированных колебаний. Для системы N нейронов с целью удобства численного анализа уравнения (4) запишем в итерационном виде

$$V_{i+1}^{(k)} = V_0^{(k)} \left(\left| 1 - \frac{F^{(k)}(t)}{\sum_{k=1}^N V_i^{(k)}} \right| \right)^{-\gamma_k}, \quad (5a)$$

$$V_{i+1,F}^{(k)} = V_{0,F}^{(k)} \left(\left| 1 - \frac{\sum_{k=1}^N V_{i,F}^{(k)}}{F^{(k)}(t)} \right| \right)^{-\gamma_k}. \quad (5b)$$

k – порядковый номер нейрона. Уравнение (5a) учитывает возможность собственных подпороговых колебаний нейрона и при $F(t) = 0$, а уравнение для (5b) – только наличие стимула $F(t) \neq 0$.

Уравнения для системы нейронов, в которой потенциал действия нейрона зависит только от соседнего нейрона, а модуляционно-периодическое внешнее поле будет влиять лишь на первый нейрон ($V^{(1)} = F, k \geq 2$), имеют вид

$$V_{i+1}^{(k)} = V_0^{(k)} \left(\left| 1 - V_i^{(k-1)} / \sum_{k=1}^N V_i^{(k)} \right| \right)^{-\gamma_k}, \quad (6a)$$

$$V_{i+1,F}^{(k)} = V_{0,F}^{(k)} \left(\left| 1 - \sum_{k=1}^N V_{i,F}^{(k)} / V_{i,F}^{(k-1)} \right| \right)^{-\gamma_k}. \quad (6b)$$

Более сложные кластеры определим в виде ансамблей нейронов, имеющих иерархические структуры порядка n :

$$V_n = f \left(\dots f \left(\frac{V_0}{n}, V_n \right) \dots \right), \quad (7a)$$

$$V_{n,F} = f \left(\dots f \left(\frac{V_{0,F}}{n}, V_{n,F} \right) \dots \right), \quad n = 1, 2, \dots, \quad (7b)$$

где число скобок равно n .

2. Результаты численного анализа

Ниже приведены результаты численного анализа системы уравнений (5, 6, 7). Используются самоподобное $(1 - I_2)$ и самоаффинное $(1 - I_1)$ значения фрактальных размерностей, где $I_1 = 0.567$, $I_2 = 0.806$ – неподвижные точки нормированной информации и информационной энтропии. Мы также использовали комбинации I_1, I_2 с топологической размерностью $d = 1, 2, 3$.

На рисунке 1 показана временная зависимость потенциала действия нейрона согласно (5b).

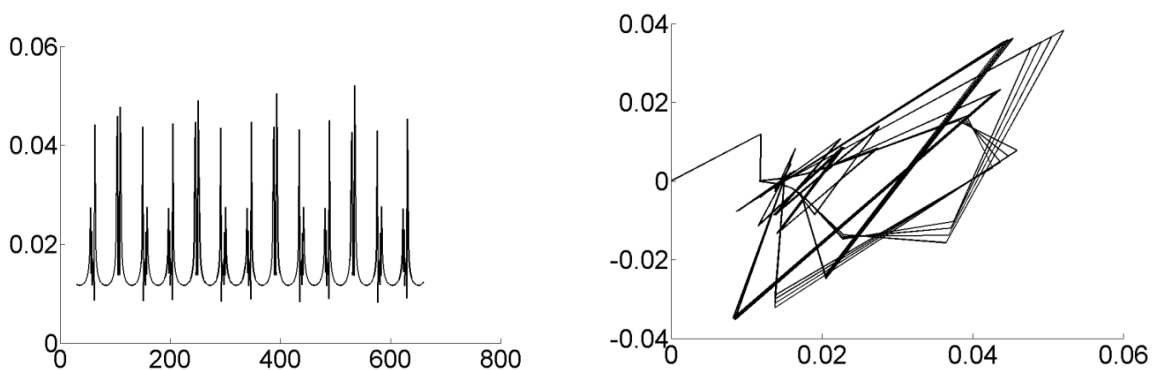


Рисунок 1. Реализация системы (5b) при $1 - \gamma_1 = 1 - I_1$, $\gamma_2 = 1 - I_1$, $\gamma_3 = 1 - I_2$, $A^{(k)} = 0.1$, $B^{(k)} = 0.4$, $V_0^{(k)} = 0.01$, $1 \leq k \leq 3$.

На рисунке 2 показана реализация системы (6б) в виде хаотических спайк-берстовых колебаний и их фазовые портреты.

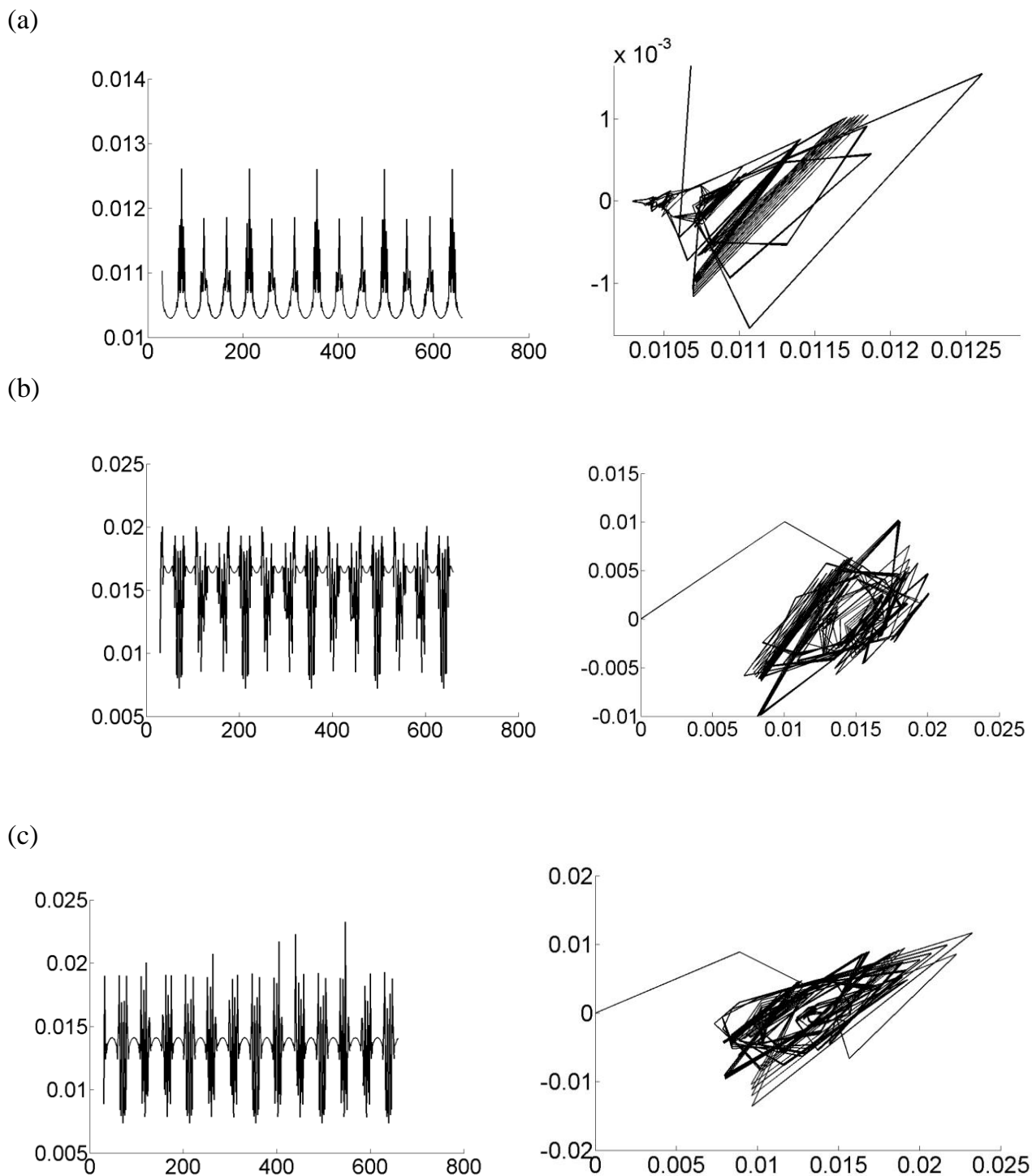


Рисунок 2. Реализация системы (6б) при $1-\gamma_1=1-I_1, \gamma_2=1-I_1, \gamma_3=1-I_2,$
 $V_0^{(k)}=0.01$: а) $k=1, A^{(1)}=0.1, B^{(1)}=0.4$, б) $k=2$, в) $k=3$.

Из полученного результата видна зависимость соседних нейронов, где реализация рисунка 2а соответствует первому нейрону на который

подаётся внешнее поле (4a), а рисунок 2б,в показывает изменение потенциала соседних нейронов, зависящих от самой системы (потенциал действия подаётся от соседнего нейрона).

На рисунке 3(a) приводится экспериментальный результат активности гигантского нейрона первого порядка из системы гигантских волокон кальмаров.

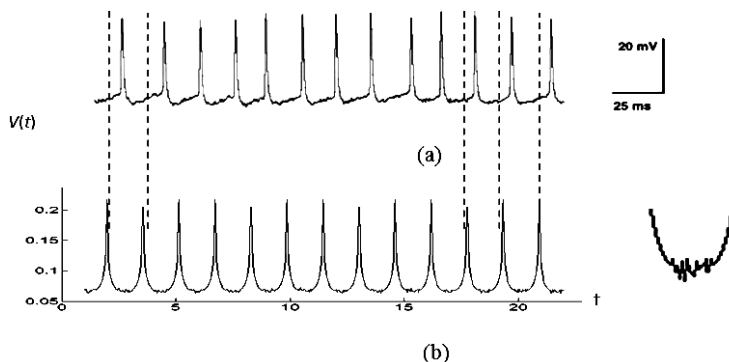


Рисунок 3. а) Потенциал действия гигантских нейронов первого порядка; б) реализация системы (5a), (7a) для разных фрактальных характеристик:

$$\gamma_1 = 0.232, \gamma_2 = 1 - I_1, 1 - \gamma_3 = 1 - I_1, A^{(k)} : \\ A^{(1)} = 0.3, A^{(2)} = 0.43, A^{(3)} = 0.53, B^{(k)} = 0.565, V_0^{(k)} = 0.194, 1 \leq k \leq 3.$$

На рисунке 3(b) показан результат настоящей теории для одиночных спайков согласно (5a) и (7a) при $n=2$. Наша теория описывает не только разнообразие спайков но и наличие хаотичных вибраций (разной сложности) в состоянии покоя нейрона.

Р.С. Elson, Y.V. Panchin и другие авторы проводили эксперименты в препаратах стоматогастрального нерва Тихоокеанских лангустов – spinylobster (*Panulirus interruptus*).

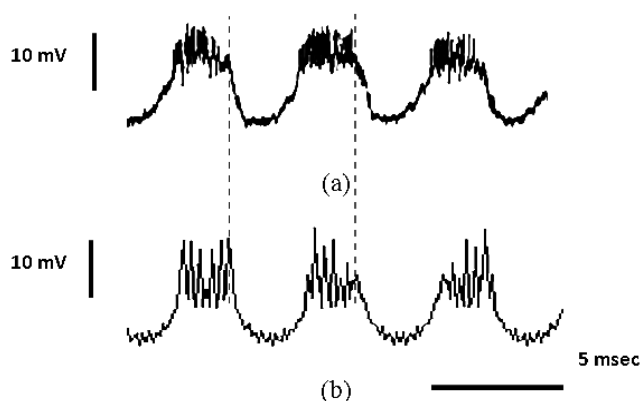


Рисунок 4. (a) Периодическая стимуляция берстовых колебаний лангустов (*Panulirus interruptus*), (b) реализации системы (5a), (7a).

$$n = 2, \gamma = \gamma_1 = \gamma_2 = \gamma_3 = 1 - I_2, A^{(k)} : A^{(1)} = 0.377, A^{(2)} = 0.512, A^{(3)} = 0.397, \\ B^{(k)} = 0.5129, V_0^{(k)} = 0.194, 1 \leq k \leq 3.$$

Экспериментальные результаты R. Baker, W. Precht и R. Linas для животных с нормальной и нарушенной мозговой деятельностью были получены от кошек под действием наркоза (рис. 5a). Близкую картину временной эволюции потенциала действия нейронов можно получить системой (6a).

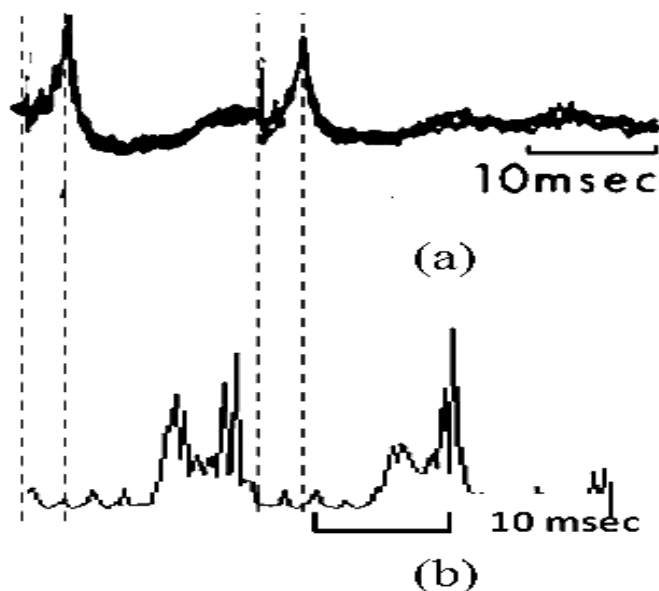


Рисунок 5. а) Потенциалы действия нейронов животных с нормальной мозговой деятельностью, б) реализация системы (6a) при $n = 1$.

$$\gamma = \gamma_1 = \gamma_2 = \gamma_3 = 1 - I_1, \quad A^{(k)} = 0.433, \quad B^{(k)} = 0.8, \quad V_0^{(k)} = 0.1, \quad 1 \leq k \leq 3.$$

Нейронные колебания характеризуются не только изменением амплитуды, но и изменением фазы. На рисунке 6 представлены потенциалы действия шести нейронов с различными фазами согласно (5a). После деполяризации под действием стимула (надпороговые колебания) фазы колебаний захватываются, наблюдается близкий режим к когерентному. Такой же эффект дает и формула (5b). Фазовая синхронизация, наблюдаемая после сильного всплеска, является следствием нелинейного характера колебаний. Значение этого эффекта для нейродинамики крайне важное. Этим эффектом можно объяснить притяжение реализаций к нечеткому множеству, то есть описать один из механизмов памяти.

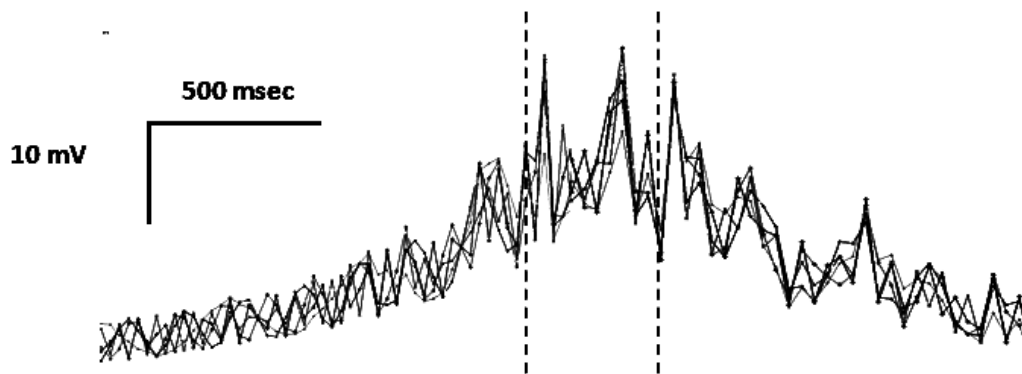


Рисунок 6. Реализация фазовой переустановки для нейронной сети при

$$\gamma = \gamma_1 = \gamma_2 = \gamma_3 = \gamma_4 = \gamma_5 = \gamma_6 = 1 - I_2, V_0^{(k)} = 0.1, 1 \leq k \leq 6,$$

$$\Omega_1 = 1, \Omega_2 = 3, \Omega_3 = 5, \Omega_4 = 7, \Omega_5 = 10, \Omega_6 = 13.$$

Численный анализ исходных уравнений показывает возможность описания основных экспериментальных закономерностей динамики нейронной активности. Модель чувствительна к малым изменениям параметров, интервалы изменения переменных и параметров соответствуют экспериментальным фактам. Предлагаемая модель является универсальной физической моделью: исходным фундаментом является наша новая идея о существовании нелинейных фракталов, масштабы наблюдения которых должны зависеть от параметров системы.