

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ДРОГОБИЦЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ ПЕДАГОГІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ІВАНА ФРАНКА

Кваліфікаційна наукова
праця на правах рукопису

Бандура Галина Ярославівна

УДК 538.9

ДИСЕРТАЦІЯ

**ЕЛЕКТРОННІ ТА ДІРКОВІ СТАНИ НЕВЗАЄМОДІЮЧИХ
КВАНТОВИХ ТОЧОК ТА ЇХ ВПОРЯДКОВАНИХ МАСИВІВ**

105 «Прикладна фізика та наноматеріали»
(шифр і назва спеціальності)

10 «Природничі науки»
(галузь знань)

Подається на здобуття наукового ступеня доктора філософії

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

_____ Г.Я. Бандура

Науковий керівник – **Білинський Ігор Васильович**, доктор фізико-математичних наук, професор

ДРОГОБИЧ – 2026

АНОТАЦІЯ

Бандура Г. Я. Електронні та діркові стани невзаємодіючих квантових точок та їх впорядкованих масивів. Кваліфікаційна наукова робота на правах рукопису. Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора філософії за спеціальністю **105 «Прикладна фізика та наноматеріали»** – Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка, Міністерство освіти і науки України, Дрогобич, 2026.

Дисертація містить теоретичні дослідження електронних та діркових станів в ізольованих квантових точках та різних масивах впорядкованих квантових точок. Дослідження проводилися для квантових точок сферичної та кубічної форми у рамках багатозонної теорії ефективної маси з використанням теорії суцільного пружного та діелектричного середовищ. Електронні та діркові стани обчислено за допомогою точних розв'язків рівняння Шредінгера для одностійної та багатостійних моделей ефективної маси, методу сильного зв'язку та методу плоских хвиль.

Результати дослідження є важливими з точки зору удосконалення теорії електронних та діркових станів в ізольованих квантових точках, зокрема при наявності домішок і прикладених електричних полів. Результати дисертаційної роботи також можуть бути використані при теоретичному та практичному прогнозуванні електричних й оптичних властивостей масивів впорядкованих квантових точок з різним типом впорядкування.

У **вступі** обґрунтовано важливість обраної теми дисертації, висвітлено її зв'язок із науковими дослідженнями, що проводяться на кафедрі та в університеті. Сформульовано мету та основні завдання дослідження, окреслено його наукову новизну та практичну цінність отриманих результатів. Також подано відомості про наукові публікації здобувачки, апробацію результатів, особистий внесок авторки, а також наведено опис структури та обсягу дисертаційної роботи.

У **першому** розділі проаналізовано наукових публікацій, що стосуються багатозонної теорії ефективної маси, зокрема теорію Латтінджера. Проведено огляд літературних джерел, які стосуються масивів впорядкованих квантових точок, описано методи їхнього практичного отримання і теоретичного аналізу та їхні характеристики. Встановлено, що недослідженими є діркові стани у квантовій точці у рамках багатозонної моделі ефективної маси, яка враховує деформацію КТ-матриця і поляризацію гетеромежі одночасно. Також встановлено, що відсутня теорія впорядкованих масивів квантових точок, яка враховує чергування різних квантових точок (різних за матеріалом і різних за розмірами).

У **розділі 2** у рамках теорії багатозонної ефективної маси у наближенні (теорії Латтінджера-Кона) у сферичному наближенні Балдареші-Ліпарі описано діркові стани у простій сферичній ізольованій квантовій точці у матриці. Розглянуто модель з гамільтоніаном 6×6 , а також наближення, яке враховує сильну спіно-орбітальну взаємодію, коли спіно-відщепленою зоною можна знехтувати (гамільтоніан 4×4). Враховано вплив деформації та поляризації на гетеромежі квантова точка-матриця. Розраховано залежності енергії дірки від радіуса квантової точки. Показано, що для квантової точки гетеросистеми InAs/GaAs поляризація та деформація чинять протилежні впливи, які частково компенсуються. Це дає змогу стверджувати, що для інших гетеросистем, де параметр неузгодження кристалічної ґратки і різниця діелектричних проникностей є ще меншими, можна нехтувати поляризацією і деформацією як в рамках багатозонної, так і однозонної теорій ефективної маси. Також встановлено межі застосування багатозонних моделей ефективної маси « 4×4 » та « 6×6 » і граничний випадок переходу в однозонну модель. Отримані результати у граничних випадках узгоджуються з теоретичними результатами інших робіт.

У **розділі 3** досліджено спільний вплив водневоподібної акцепторної домішки та зовнішнього електричного поля на діркові енергетичні спектри у

сферичній квантовій точці гетеросистеми GaAs/Al_xGa_{1-x}As/матриця у рамках багатозонної моделі ефективної маси зі сильною спін-орбітальною взаємодією (модель «4x4»). Також обґрунтовано вибір моделі «4x4». Показано, що зміщення домішки у напрямку електричного поля посилює розщеплення енергії діркових станів (в тому числі й основного стану), а у протилежному — зменшує це розщеплення. Доведено існування критичного електричного поля (яке паралельне до зміщення домішки відносно центра квантової точки), при якому відновлюється сферична симетрія розподілу діркової густини. А загалом при паралельному напрямку електричного поля до напрямку зміщення домішки від центра КТ зберігається циліндрична симетрія. У випадку прикладання перпендикулярного електричного поля до напрямку зміщення домішки від центра квантової точки руйнується і циліндрична симетрія, тому енергетичні рівні дірки розщеплюються за всіма значеннями повного магнітного квантового числа. Також проаналізовано залежність енергетичних рівнів від довільного напрямку електричного поля і розташування домішки.

У **четвертому розділі** використано моделі однозонної ефективної маси для електрона і дірки. На основі цих моделей розглянуто лінійний, двомірний та тримірний впорядковані масиви (надґратки) однакових за розмірами і складом квантових точок сферичної та кубічної форм. Використовуючи метод плоских хвиль, отримано мінізонну структуру для електрона і дірки, яка утворена внаслідок тунелювання електрона чи дірки між сусідніми квантовими точками. Проведено порівняння енергії електрона та дірки для сферичних та кубічних надґраток квантових точок. Визначено енергії у симетричних точках мінізони Брілюена. При порівнянні мінізон квантових точок кубічної і сферичної форми враховано, що їхні об'єми однакові. Також встановлено, що ширина мінізони для масиву кубічних квантових точок є більшою, ніж для масивів сферичних для будь-яких об'ємів квантової точки.

У **розділі 5** розглянуто впорядковані надґратки квантових точок з двома різними квантовими точками у примітивній комірці надґратки. Побудовано

теорію мінізонного спектру таких надґраток з використанням однозонної теорії ефективної маси, моделей прямокутних ям і бар'єрів з використанням методу сильного зв'язку та наближення найближчих сусідів. Розглядаються два випадки: матеріали квантових точок А і В різні, але їхні розміри однакові, та матеріали квантових точок А і В однакові, але їхні розміри різні. Застосування цієї теорії дозволило обчислити дисперсійні залежності та ширини мінізон. Наявність різних квантових точок призводить до розщеплення основної мінізони на верхню та нижню зони, що спричиняє появу додаткових піків в спектрах поглинання. Також показано, що ширини верхніх зон завжди більші, ніж нижніх. Зміна розмірів сусідніх КТ у надґратці при фіксованій ширині зони Брілюена також призводить до розщеплення на верхні та нижні міні-зони, навіть якщо матеріал точок А і В однаковий. За однакових розмірів і матеріалів КТ заборонена мінізона, яка може утворюватися між верхньою і нижньою мінізонами, відсутня. Отримані результати переходять у результати теорії надґратки квантових точок однакових розмірів і узгоджуються з результатами інших авторів.

Практичне значення отриманих результатів

Одержані в роботі результати і теоретичні моделі дозволяють всебічно аналізувати вплив різних фізичних факторів — таких як розмір, матеріал, поляризація, деформація, наявність домішок та зовнішніх полів — на енергетичні спектри носіїв заряду в квантових точках і надґратках. Розроблені підходи в межах багатозонної теорії ефективної маси (4×4 , 6×6) можуть бути використані для точного моделювання діркових станів у реалістичних наноструктурах. Показана здатність цих моделей до переходу в однозонну теорію дозволяє обирати спрощену або повну модель залежно від задачі та потрібної точності. Виявлені закономірності компенсації поляризації і деформації є корисними при проєктуванні структур з мінімальними небажаними ефектами. Це робить розроблену теорію цінним інструментом для розрахунків у фотоніці, оптоелектроніці та квантових технологіях.

Дослідження впливу акцепторних домішок і зовнішнього електричного поля на енергетичні рівні дірок поглиблює розуміння керування квантовими станами у наноструктурах за допомогою зовнішніх параметрів. Встановлені умови для відновлення сферичної симетрії та втрати циліндричної симетрії відкривають нові можливості для створення структур з керованими квантовими властивостями.

Отримані мінізонні спектри і дисперсійні залежності дозволяють спрогнозувати поглинальні властивості матеріалів та їхню здатність до керованого тунелювання. Запропонована теорія також може бути адаптована до структур зі складнішою геометрією та багатоконпонентними примітивними комітками, що дозволяє моделювати нові типи квантових надґраток. Крім того, теорія мінізонного спектру з двома типами квантових точок у комітці надґратки відкриває можливість моделювання складніших періодичних структур, що складаються з декількох компонентів. Зокрема, вона може бути використана для розрахунку спектральних характеристик новітніх багат шарових наноструктур, які використовуються у фотоелементах або термоелектричних матеріалах. Отримані залежності ширини зон і умов для розщеплення міні-зон можуть лягти в основу алгоритмів оптимізації структури нанокомпозитів із заданими властивостями. Усе це створює теоретичне підґрунтя для практичного застосування в розробці сучасних наноелектронних пристроїв, квантових сенсорів і елементів пам'яті.

Ключові слова: електронні і діркові стани, енергетичний спектр, деформація і поляризація, масиви квантових точок, акцепторна домішка, електричне поле.

SUMMARY

Bandura H. Ya. Electronic and hole states of noninteracting quantum dots and their ordered arrays. Qualification thesis (manuscript). Dissertation for the degree of Doctor of Philosophy (Candidate of Physical and Mathematical Sciences)

in specialty 105 “Applied Physics and Nanomaterials” – Drohobych Ivan Franko State Pedagogical University, Ministry of Education and Science of Ukraine, Drohobych, 2025.

The dissertation presents theoretical studies of the electronic and hole states in isolated quantum dots (QDs) and various ordered arrays of quantum dots. The research was carried out for spherical and cubic QDs within the multiband effective mass theory, using the framework of the continuum elastic and dielectric media theories. The electronic and hole states were calculated using exact solutions of the Schrödinger equation for single- and multiband effective mass models, the tight-binding method, and the plane-wave method.

The obtained results are significant for improving the theoretical understanding of electronic and hole states in isolated quantum dots, particularly in the presence of impurities and external electric fields. The outcomes can also be used for theoretical and practical prediction of the electrical and optical properties of ordered QD arrays with different types of spatial ordering.

The **Introduction** substantiates the relevance of the dissertation topic and its connection with ongoing research at the department and the university. It defines the purpose and main objectives of the study, outlines the scientific novelty and practical significance of the obtained results, and presents information about the author’s publications, the approbation of the results, the author’s personal contribution, and the structure and scope of the dissertation.

Chapter 1 reviews scientific publications related to multiband effective mass theory, in particular the Luttinger model. Literature sources concerning ordered quantum dot arrays, methods of their experimental fabrication and theoretical analysis, and their physical properties are analyzed. It was found that hole states in QDs within a multiband effective mass model that simultaneously accounts for deformation of the QD–matrix system and interface polarization remain insufficiently studied. Furthermore, there is no theoretical description of ordered QD arrays composed of alternating dots of different materials or sizes.

Chapter 2 describes hole states in an isolated spherical QD embedded in a matrix within the multiband effective mass theory in the Luttinger–Kohn framework using the spherical Baldereschi–Lipari approximation. Models based on the 6×6 Hamiltonian and a reduced 4×4 Hamiltonian (strong spin–orbit coupling approximation) were considered. The effects of strain and interfacial polarization at the QD–matrix boundary were taken into account. The dependence of the hole energy on the QD radius was calculated. It was shown that, for an InAs/GaAs heterosystem, the polarization and strain effects are opposite and partially compensate each other. Therefore, for heterosystems with smaller lattice mismatch and dielectric constant differences, polarization and strain can be neglected in both single- and multiband effective mass models. The applicability limits of the 4×4 and 6×6 models and their reduction to the single-band model were established. The results agree with known theoretical results in limiting cases.

Chapter 3 investigates the combined effect of a hydrogen-like acceptor impurity and an external electric field on the hole energy spectrum in a spherical GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ QD embedded in a matrix within the 4×4 multiband effective mass model (strong spin–orbit coupling). The use of the 4×4 model is justified. It was shown that displacement of the impurity along the direction of the electric field enhances the energy splitting of the hole states (including the ground state), while displacement in the opposite direction reduces it. A critical electric field (parallel to the impurity displacement) was found at which the spherical symmetry of the hole density distribution is restored. In general, when the electric field is parallel to the impurity displacement, cylindrical symmetry is preserved, while a perpendicular field destroys it, leading to the splitting of all hole energy levels regardless of total angular momentum. Dependencies on arbitrary field direction and impurity location were also analyzed.

Chapter 4 employs the single-band effective mass model for electrons and holes to study one-, two-, and three-dimensional ordered arrays (superlattices) of identical spherical and cubic QDs. Using the plane-wave method, the miniband structures for

electrons and holes arising from interdot tunneling were obtained. The electron and hole energies were compared for spherical and cubic superlattices, and energies at the symmetry points of the Brillouin minibands were determined. When comparing minibands of cubic and spherical QDs of equal volume, it was found that cubic-dot arrays exhibit larger miniband widths than spherical-dot arrays for any QD volume.

Chapter 5 considers ordered QD superlattices with two different QDs in the primitive cell. A theory of the miniband spectrum of such superlattices was developed within the single-band effective mass approximation using rectangular well and barrier models and the tight-binding method with nearest-neighbor approximation. Two cases were analyzed: (1) QDs of different materials but equal size, and (2) QDs of the same material but different sizes. This theory enabled the calculation of dispersion relations and miniband widths. The presence of different QDs leads to splitting of the fundamental miniband into upper and lower subbands, causing additional peaks in absorption spectra. It was also shown that upper minibands are always wider than lower ones. Varying the sizes of adjacent QDs at fixed Brillouin zone width also causes such splitting even if the QDs are made of the same material. When both material and size are identical, the forbidden miniband that could appear between upper and lower minibands vanishes. The obtained results reduce to the known theory of uniform QD superlattices and agree with other authors' findings.

Practical significance of the results

The developed theoretical models enable comprehensive analysis of how various physical factors—such as QD size, material, polarization, strain, impurities, and external fields—affect charge-carrier spectra in QDs and superlattices. The approaches based on multiband effective mass theory (4×4 , 6×6) can be applied for accurate modeling of hole states in realistic nanostructures. Their demonstrated reducibility to the single-band model allows one to select the appropriate model depending on the desired accuracy. The identified compensation effects of polarization and strain are valuable for designing structures with minimized

unwanted interactions, making the developed theory a useful tool for calculations in photonics, optoelectronics, and quantum technologies.

The study of acceptor impurities and external electric fields deepens the understanding of quantum-state control in nanostructures via external parameters. The identified conditions for restoring spherical symmetry and breaking cylindrical symmetry open opportunities for engineering structures with tunable quantum properties.

The obtained miniband spectra and dispersion relations allow prediction of the optical absorption properties and tunneling behavior of materials. The proposed theory can be extended to more complex geometries and multi-component primitive cells, enabling modeling of novel types of QD superlattices. Moreover, the theory of miniband spectra with two types of QDs per supercell provides a basis for modeling multi-component periodic nanostructures, such as advanced multilayered systems used in solar cells and thermoelectric materials. The derived dependencies of miniband widths and splitting conditions can be used to optimize nanocomposite structures with desired properties. Altogether, these results form a theoretical foundation for practical applications in modern nanoelectronic devices, quantum sensors, and memory elements.

Keywords: electronic and hole states, energy spectrum, deformation and polarization, quantum dot arrays, acceptor impurity, electric field.

СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

Наукові статті, опубліковані у виданнях, що входять до списку наукових фахових видань України та проіндексованих у наукометричних базах даних Web of Science Core Collection та/або Scopus

1. Bilynskyi I., Leshko R., Bandura H. Influence of quantum dot shape on energy spectra of three-dimensional quantum dots superlattices. *Physics and Chemistry of Solid State*. 2020. Vol. 21, No 4. P. 584–590.

(Особистий внесок автора: розраховано енергії мінізон, визначено їхні ширини).

2. Bilynskyi I., Leshko R., Bandura H. Electron and hole spectrum taking into account deformation and polarization in the quantum dot heterostructure InAs/GaAs. *Physics and Chemistry of Solid State*. 2023. Vol. 24, No 1. P. 146–152.

(Особистий внесок автора: розраховано енергію електрона та дірки в рамках однозонної та багато зонних моделей ефективної маси, проведено порівняння результатів моделей).

Наукові статті, опубліковані у періодичних наукових виданнях, проіндексованих у наукометричних базах даних Web of Science Core Collection та/або Scopus

3. Leshko R. Ya., Bandura H. Ya., Bilynskyi I. V., Karpyn A.V., Kvyk M.V., Melnyk Ya.Yu., Ocheretyanyi A.O., Popov M.Yu. Effect of arbitrarily directed electric field on hole spectra and absorption in a quantum dot with off-center impurity. *Physics Letters A*. 2025. Vol. 559. P. 130898:1-8.

(Особистий внесок автора: виконано аналітичні та числові розрахунки енергетичних спектрів і коефіцієнтів поглинання).

4. Leshko R., Bandura H., Bilynskyi I., Slusarenko M. The band structure of a chain of periodically ordered different quantum dots. *Physica B: Condensed Matter*. 2024. Vol. 690. P. 416272:1-5.

(Особистий внесок автора: виконано аналітичні та числові розрахунки зонної структури, побудовано графічно усі залежності).

Наукові статті, опубліковані у виданнях, що входять до списку наукових фахових видань України категорії Б

5. Leshko R. Ya., Bandura H. Ya., Bilynskyi I. V., Melnyk Ya. Yu., Kvyk M. V. The intersubband optical absorption coefficient of the QD with acceptor impurity under applied electric field. *Sensor Electronics and Microsystem Technologies*. 2024. Vol. 21, No 4. P. 14-24.

(Особистий внесок автора: виконано аналітичні та числові розрахунки коефіцієнта поглинання у КТ з акцепторною домішкою за наявності незмінного зовнішнього електричного поля).

Наукові праці, які засвідчують апробацію матеріалів дисертації

6. Bilynskiy I.V., Leshko R.Ya., Bandura H.Ya. The dependence of energy on the QD deformation and polarization charges. *XVII International Freik Conference on Physics and Technology of Thin Films and Nanosystems*. Ivano-Frankivsk, October 11-16, 2021. P. 11.

(Особистий внесок автора: обчислено енергію електрона та дірки у квантовій точці з урахуванням деформації та поляризації на межі квантова точка-матриця).

7. Bilynskiy I.V., Leshko R.Ya., Bandura H.Ya. Miniband energy spectrum of quantum dot chains containing two different quantum dot in basis. *IX Ukrainian Scientific Conference on Physics of Semiconductors*. Uzhhorod, Ukraine, May 22-26, 2023. P. 217

(Особистий внесок автора: обчислено залежність енергії мінізон надгратки з квантових точок від хвильового вектора та розмірів квантових точок).

8. Bilynskiy I.V., Leshko R.Ya., Bandura H.Ya. Theory of Superlattices with Two Atoms in the Basis. *XIX International Freik Conference on Physics and Technology of Thin Films and Nanosystems*. Ivano-Frankivsk, October 9-14, 2023. P. 84.

(Особистий внесок автора: отримано енергетичні мінізони надгратки квантових точок з двома квантовими точками у примітивній комірни надгратки).

9. Bandura H., Bilynskiy I. Dependence of the intersubband optical absorption coefficient on the direction of the electric field in the GaAs/AlAs quantum dot heterostructure in the presence of an impurity. *VIII Всеукраїнська науково-*

практична конференція MEICS-2024. Дніпро, 27-29 листопада 2024 р. С. 274-275.

(Особистий внесок автора: обчислено оптичний коефіцієнт поглинання, зумовлений міжрівневими переходами дірки у квантовій точці в електричному полі за наявності домішки).

10. Bandura H.Ya., Bilynskiy I.V. The influence of the electric field and the position of the acceptor on the energy spectrum and the intersubband optical absorption coefficient in the GaAs/AlAs quantum dot heterostructure. *Materials and Abstracts of Reports Presented at the International Conference (for the 100th anniversary of the birth of Professor Yu.M. Lomsadze)*. Uzhhorod, December 17-19, 2024. P. 221-222.

(Особистий внесок автора: обчислено залежність коефіцієнта поглинання, зумовленого міжрівневими переходами дірки у квантовій точці в електричному полі за наявності домішки, від величини електричного поля і розмірів квантової точки)

11. Bilynskiy I.V., Leshko R.Ya., Bandura H.Ya. An ordered array with two different quantum dots in a unit cell. *XI-th International Conference Topical Problems of Semiconductor Physics*. Drohobych, May 27-31, 2024. P. 58.

(Особистий внесок автора: обчислено ширини мінізон надґратки з квантових точок).

12. Bandura H. Ya., Bilynskiy I.V. Dependence of the energy spectrum of a quantum dot with an acceptor impurity on the angle of inclination of the electric field. «*Lashkaryov's readings*». *Young Scientists Conference on Semiconductor Physics*. Kyiv, April 3-4, 2025. P. 35-36.

(Особистий внесок автора: обчислено залежність енергетичного спектру дірки акцепторної домішки у квантовій точці від напрямку прикладання електричного поля).

13. Bandura H. Ya., Leshko R. Ya., Bilynskiy I.V. The energy spectra and band characteristics of two- and threedimensional superlattices of inhomogeneous

quantum dots // *XX International Freik Conference on Physics and Technology of Thin Films and Nanosystems*. Ivano-Frankivsk, October 06-10, 2025. P. 74.

(Особистий внесок автора: теоретично виведено і розраховано енергетичні спектри електрона у дво- і тривимірній надґратці з квантових точок).

ЗМІСТ

Перелік умовних скорочень.....	17
Вступ.....	18
Розділ 1. Теорія та експериментальні дослідження ізольованих квантових точок та впорядкованих їхніх масивів.....	28
1.1. Отримання та характеристики простих квантових точок і їхніх впорядкованих масивів.....	29
1.2. Метод сильного зв'язку у моделюванні енергетичних спектрів.....	36
1.3. Багатозонна теорія ефективної маси.....	40
Висновки до розділу 1.....	48
Розділ 2. Енергетичний спектр дірки та електрона у квантовій точці з урахуванням поляризації та деформації на гетеромежі квантова точка-матриця.....	49
2.1. Теорія діркового спектру сферичної квантової точки у рамках багатозонної моделі ефективної маси 6×6	50
2.2. Теорія діркового спектру сферичної квантової точки в моделі 4×4	61
2.3. Розрахунок енергетичного спектру дірки у сферичній квантовій точці та порівняння результатів різних моделей.....	64
Висновки до розділу 2.....	71
Розділ 3. Нецентральна акцепторна домішка у квантовій точці в електричному полі довільного напрямку.....	72
3.1. Модель сферичної квантової точки з акцепторною домішкою в електричному полі.....	73
3.2. Енергетичний спектр дірки у сферичній квантовій точці за наявності акцепторної домішки та електричного поля.....	80
3.3. Вплив електричного поля та домішки на спектральний коефіцієнт поглинання електромагнітних хвиль.....	88

	16
Висновки до розділу 3.....	95
Розділ 4. Енергетичний спектр впорядкованих масивів однакових квантових точок.....	96
4.1. Теорія плоских хвиль для одно-, дво-, та тривимірних масивів однакових квантових точок різної форми.....	97
4.2. Розрахунок мінізонної структури надґраток квантових точок.....	100
Висновки до розділу 4.....	108
Розділ 5. Надґратки квантових точок з двома різними квантовими точками у базисі.....	110
5.1. Модель і розрахунок електронних мінізон методом сильного зв'язку.....	111
5.1.1. Одновимірна надґратка квантових точок.....	114
5.1.2. Двовимірна надґратка квантових точок.....	116
5.1.3. Тривимірна надґратка квантових точок.....	131
5.2. Енергетичні мінізони електрона та їхні ширини у надґратках квантових точок різної вимірності та сорту	139
5.2.1. Одновимірна надґратка квантових точок.....	139
5.2.2. Двовимірна надґратка квантових точок.....	144
5.2.3. Тривимірна надґратка квантових точок.....	148
Висновки до розділу 5.....	152
Основні результати та висновки.....	153
Список використаних джерел.....	156
Додаток.....	166

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ СКОРОЧЕНЬ

КТ – квантова точка;

ХВ – хвильова функція;

НКТ – надґратка квантових точок;

МПХ – метод плоских хвиль;

МСЗ – метод сильного зв'язку;

ВСТУП

Актуальність теми дослідження

Напівпровідникові квантові точки (КТ) є одними з найбільш цікавих і перспективних нанооб'єктів сучасної нанофізики. Вони зображають собою малі напівпровідникові структури, розміри яких обмежені в усіх трьох просторових вимірах, що призводить до появи квантових ефектів. Ці ефекти, зокрема, впливають на енергетичні рівні, оптичні та електричні властивості матеріалу, даючи численні переваги застосувань у різних галузях науки і техніки. Знання про властивості КТ є необхідним для розробки нових матеріалів і пристроїв на основі нанотехнологій.

Використання КТ у таких сферах, як оптоелектроніка [1], фотоніка [2], сенсори [3-4], а також у квантових обчисленнях [5-7], привертає значну увагу вчених у всьому світі. КТ вже активно застосовуються для створення лазерів, фотодіодів, сонячних елементів і квантових комп'ютерів. Вони використовуються для розробки нових високоефективних сенсорних пристроїв, а також у системах, що використовують квантові властивості матеріалів, зокрема для підвищення ефективності сонячних елементів [8-11] і інших енергозберігаючих технологій. Оскільки КТ мають унікальні квантові властивості, це дає нові можливості для їхнього використання у промисловості та науці.

Керування властивостями КТ є однією з основних задач на шляху до їх практичного застосування. Завдяки можливості контролювати розмір, форму, склад КТ, легуванню, можна досягти бажаних оптичних і електричних характеристик, таких як ефективна ширина забороненої зони, спектр поглинання або випромінювання. Зазначені характеристики можна визначати на етапі отримання КТ. Іншим способом контролю властивостей є прикладання зовнішніх полів, зокрема електричного поля, яке в першу чергу вплине одночастинкові енергетичні спектри електронів і дірок у КТ. Теоретичний опис

дірок варто проводити з використанням багатозонної теорії ефективної маси, яка, з урахуванням впливу домішок та прикладених електричних полів, може пояснити цікаві особливості у енергетичних спектрах дірки та оптичних спектрах поглинання. Ще одним фактором, що впливає на енергію квазічастинок у КТ є ефекти деформації (внаслідок неузгодженості ґраток матеріалів) та поляризації (різниці діелектричних проникностей матеріалів) на гетеромежі КТ-матриця. Їхній теоретичний аналіз дасть змогу оцінити ці впливи як якісно, так і кількісно.

Вирощування нанооб'єктів методами самозбірки залежно від енергетичного балансу системи та неузгодженості ґратки (методи Странського-Крастанова, Франка–ван дер Мерве та Вольмера–Вебера) зумовлюють появу масивів КТ на підкладці, які можуть бути впорядкованими. Однак через закладені особливості цих експериментальних методів існують обмеження процесу самозбірки (цей підхід не є ідеальним і ускладнений випадковістю розподілу розміру КТ та невідворотним утворенням зволожуючого шару), коливання розмірів КТ, змішування матеріалів і випадкове розподілення ділянок. Велика варіативність розміру цих КТ зазвичай призводить до значного неоднорідного розширення спектра, що зменшує потенційні переваги їх використання в оптоелектронних пристроях. Для ідеального випадку енергетичні рівні всіх КТ мають бути однаковими. Це означає, що розмір, форма і склад КТ повинні бути максимально ідентичними. Тоді неоднорідним розширенням люмінесценції КТ через коливання розміру можна знехтувати [12]. Ще одним важливим аспектом використання впорядкованих масивів КТ є досягнення високого коефіцієнта ефективності (>60%) сонячних елементів, яке реалізовується завдяки наявності проміжної електронної мінізони надґратці КТ (НКТ) [8, 9, 12].

Методи молекулярно-променевої епітаксії вирощування високооднорідних і впорядкованих масивів КТ на основі напівпровідників III–V груп досить часто веде до вертикального нашарування шарів КТ, що дозволяє

КТ впорядковуватися по горизонталі у вигляді ланцюжків із однаковими розмірами та формою. Однак по вертикалі можна спостерігати різні розміри КТ і розглядати їх як тривимірні НКТ з різними КТ у елементарній комірці надґратки. Це в свою чергу змінить електронні та діркові мінізони, їхнє розташування по енергетичній шкалі та їхні ширини. Теоретичне описання цих мінізон дає можливість прогнозувати ефективність роботи сонячних комірок та їхні коефіцієнти корисної дії.

Таким чином, дослідження електронних і діркових станів в ізольованих КТ в рамках багатозонної моделі ефективної маси з урахуванням поляризації та деформації на гетеромежі КТ-матриця за наявності домішок у КТ та прикладених електричних полів є **актуальним завданням** з точки зору побудови теорії та практичного керування властивостями таких КТ. На основі отриманих результатів також актуальним є побудова теорії електронних і діркових мінізон у впорядкованих НКТ, які містять одну і дві КТ у базисі надґратки, що є важливим для подальшого удосконалення теорії НКТ та прогнозування ефективності роботи сонячних комірок на їхній основі.

Об'єкт дослідження – сферичні ізольовані КТ гетеросистем InAs/GaAs та GaAs/Al_xGa_{1-x}As, НКТ на їхній основі.

Предмет дослідження – електронні та діркові енергетичні стани у сферичних ізольованих КТ гетеросистем InAs/GaAs та GaAs/Al_xGa_{1-x}As, а також у впорядкованих НКТ, з урахуванням впливу поляризаційних, деформаційних ефектів та домішок і зовнішнього електричного поля.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Дисертаційна робота відповідає основним напрямкам наукової діяльності кафедри фізики та інформаційних систем Дрогобицького державного педагогічного університету імені Івана Франка. Основні результати дисертанткою отримані під час виконання таких тем:

1. “Отримання та дослідження фізичних властивостей нанокompозитних матеріалів на основі широкозонних напівпровідників” наукова теми кафедри фізики на інформаційних систем (2022–2025).

2. “Фотополімерні матриці та наноносії при конструюванні біосенсорів для моніторингу стану довкілля та якості питної води” (державний реєстраційний номер 0121U109539; 2021–2023).

3. “Вплив зовнішніх полів на синтез, сенсорні властивості квантових точок для медичних застосувань в умовах війни.” (державний реєстраційний номер 0124U001093; 2024–2025).

4. “Біонанокompлекси напівпровідникова квантова точка – протеїн для біомедичних застосувань: синтез, дослідження, характеристика з використанням машинного навчання” (державний реєстраційний номер 0125U002002; 2025–2027).

Дисертантка провела дослідження електронних і діркових станів ізольованих КТ з домішками та прикладеним зовнішнім електричним полем; мінізонного спектру НКТ з одною і двома КТ у базисі.

Метою дисертаційного дослідження є дослідження впливу електричного поля на енергетичні спектри ізольованої КТ з акцепторною домішкою у рамках багатозонних моделей ефективної маси та розроблення аналітичної теорії мінізонної структури НКТ з однією і двома КТ у базисі.

Для досягнення мети у дисертації сформульовано такі **завдання**:

1. Отримати залежність діркового енергетичного спектру ізольованої сферичної КТ у рамках багатозонної теорії ефективної маси з урахуванням впливу поляризації та деформації на межі КТ-матриця. Проаналізувати вплив вибору моделі валентної зони на отримані результати.
2. Дослідити вплив довільно орієнтованого електричного поля на діркові енергетичні спектри в ізольованій сферичній КТ за наявності акцепторної домішки, зміщеної від центра КТ.

3. Отримати залежності спектрального коефіцієнта поглинання від величини прикладеного електричного поля та розташування акцепторної домішки.
4. Обчислити електронні мінізони для надграток однакових КТ кубічної та сферичної форм, використовуючи метод плоских хвиль та модель сильного зв'язку, з урахуванням геометричних параметрів надгратки, розмірів КТ і потенціальних бар'єрів між ними.
5. Удосконалити теорію електронного спектру надграток сферичних КТ з двома КТ у базисі НКТ різного розміру та матеріалів.
6. Провести порівняння електронних мінізон у випадку лінійного, плоского та просторового масиву КТ.

Методи досліджень

Енергетичні спектри електронів та дірок в ізольованій КТ розраховано шляхом розв'язання стаціонарного рівняння Шредінгера з використанням моделі багатозонної ефективної маси і моделі прямокутних потенціальних ям для описання просторового конфайнменту. Поляризацію та деформацію на гетеромежі КТ-матриця враховано в рамках моделей неперервного діелектричного і пружного континууму відповідно. Мінізонну енергетичну структуру НКТ розраховано методами сильного зв'язку (МСЗ) та методу плоских хвиль (МПХ), які дозволяють адекватно описати квантово-механічну поведінку носіїв заряду у періодичних наноструктурах.

Наукова новизна одержаних результатів полягає у тому, що вперше:

- встановлено внески поляризації та деформації на гетеромежі КТ-матриця гетеросистеми InAs/GaAs в енергетичний спектр дірки та показано, що у рамках моделі з проміжною спіно-орбітальною взаємодією вплив деформації та поляризації повністю компенсується для радіусів КТ більших 40 Å, а для менших радіусів — частково;
- показано, що для КТ гетеросистеми InAs/GaAs енергія основного стану дірки у рамках моделі з проміжною спіно-орбітальною взаємодією є

меншою, ніж така ж енергія в моделі з сильною спін-орбітальною взаємодією на 33% при радіусах КТ 40 Å. Для більших радіусів ця різниця зменшується (зокрема для радіуса КТ 60 Å ця різниця становить 11%). А для гетеросистеми GaAs/AlAs ця різниця становить 8% та 4% для зазначених радіусів відповідно;

- розраховано розщеплення енергетичних рівнів дірки у сферичній КТ у межах моделі з сильною спін-орбітальною взаємодією за наявності нецентральної акцепторної домішки та електричного поля;
- доведено існування критичного значення абсолютної величини та напрямку електричного поля для сферичної КТ, при якому енергетичні рівні дірки, що є розщеплені внаслідок нецентрального розміщення акцептора, знову вироджуються;
- розраховано енергетичні мінізони для *InAs/GaAs* НКТ (кубічних і сферичних) з одною КТ у базисі та встановлено, що ширини s-подібних зон для надґраток кубічних КТ є більші, ніж для сферичних при однакових об'ємах КТ;
- встановлено, що одномірні НКТ з одною КТ у базисі мають найвужчі ширини мінізони, а тримірні — найширші для усіх радіусів КТ, які утворюють НКТ;
- запропоновано теорію енергетичного мінізонного спектру НКТ, з двома КТ у базисі різного розміру та матеріалів; розрахунки проведено, ґрунтуючись на МСЗ та наближенні найближчих сусідів;
- показано, що в НКТ з двома різними КТ в базисі мінізона розщеплюється на дві, причому верхня мінізона має завжди більшу ширину, ніж нижня.

Практичне значення одержаних результатів

Одержані теоретичні результати можуть бути використані для цілеспрямованого проєктування та оптимізації наноструктур на основі напівпровідникових КТ із врахуванням впливу електричного поля і

локалізованих акцепторних домішок. Аналітична модель впливу нецентрально розміщеної домішки й різних орієнтацій електричного поля дозволяє оптимізувати процес легування та керувати фотолюмінесцентними властивостями КТ у світлодіодних структурах із мінімальними втратами на безвипромінювальні процеси. Розвинена теорія електронних і діркових мінізон у впорядкованих НКТ, що містять одну або дві КТ в базисі, дає змогу передбачати ефективність роботи пристроїв із проміжною зоною. Це стає можливим завдяки оптимальному формуванню ширини, розташування та перекриття мінізон у загальному енергетичному спектрі структури.

Отримані закономірності залежності ширини мінізон від геометрії надґратки (лінійної, плоскої та об'ємної) можуть бути використані для конструювання гетероструктур із заданими швидкісними та спектральними характеристиками електронного переносу, що важливо для квантових комп'ютерів, елементів пам'яті та високошвидкісних електронних перемикачів.

Таким чином, результати дисертації удосконалюють теоретичну базу для керування оптоелектронними властивостями КТ та їх надґраток, починаючи від високоефективних сонячних батарей нового покоління до гнучких сенсорних і лазерних приладів.

Достовірність отриманих результатів підтверджується використанням широко відомих і апробованих теоретичних методів та наближень квантової механіки й теорії твердого тіла, зокрема методу ефективної маси, наближення діелектричного та пружного континуумів, а також МПХ та МСЗ. Застосовані підходи дозволили побудувати фізично обґрунтовані моделі, які враховують реалістичні параметри та особливості мікроскопічної будови матеріалів. Обчислення проводилися з урахуванням граничних умов та фізичних обмежень, що забезпечує внутрішню узгодженість і математичну коректність отриманих розв'язків. Надійність результатів додатково підтверджується їхньою відповідністю даним, отриманим у низці незалежних теоретичних досліджень інших авторів. Окрім того, проведено детальне порівняння з

розв'язками для інших спрощених моделей, де доступні точні аналітичні або добре досліджені числові результати, що також слугує вагомим аргументом на користь достовірності та фізичної обґрунтованості наведених у роботі висновків.

Особистий внесок здобувачки

Дисертанткою проведено обчислення енергетичного спектру дірки сферичній КТ у рамках багатозонної моделі ефективної маси [2*, 6*], де враховано вплив поляризаційних зарядів та деформації на гетеромежі КТ-матриця. Показано для яких гетеросистем доцільно користуватися моделлю з проміжною спін-орбітальною взаємодією та моделлю з сильною спін-орбітальною взаємодією і коли можна нехтувати впливом поляризації та деформації на межі КТ-матриця при обчисленні енергетичних спектрів дірки. На основі цих висновків у роботах [3*, 5*, 9*, 10*, 12*] досліджено енергетичні спектри дірки у сферичній КТ з наявною акцепторною домішкою і прикладеним електричним полем у довільному напрямку. Встановлено, що існують критичні величини напруженостей електричних полів і їхні напрямки, що ведуть до відновлення виродження енергетичних рівнів дірки. Показано, що електричним полем можна керувати висотою і розташуванням смуг оптичного поглинання КТ з акцептором, яке зумовлене міжрівневими переходами дірки [5*, 10*]. Також обчислено електронний енергетичний спектр у НТК з одною КТ у базисі [1*, 7*], розраховано ширини мінізон для одномірного, двомірного і тримірного випадків. Розглянуто надґратки сферичних і кубічних КТ. А в [4*, 7*, 8*, 11*, 13*] проведено аналітичні та числові розрахунки електронних мінізон у НКТ з двома різними КТ у базисі. Розглянуто випадки КТ з однакових матеріалів (але різних розмірів) та різних розмірів (але однакових матеріалів). Для цих випадків отримано мінізонну структуру та їхні ширини для НКТ. Авторка дисертаційної роботи безпосередньо брала участь у формулюванні наукових завдань, побудові математичних моделей, розробці програмного забезпечення для проведення обчислень, обробці, аналізі та графічному поданні

результатів. Вона самостійно здійснювала всі чисельні розрахунки з використанням систем комп'ютерної математики. Також дисертантка брала активну участь у підготовці наукових публікацій, оформленні рукописів статей і виступах на наукових конференціях. Її внесок охоплює як теоретичні, так і прикладні аспекти виконаної роботи. Усі етапи дослідження були проведені за безпосередньої участі авторки цієї дисертації.

Публікації. Результати дисертаційного дослідження опубліковані в 13 роботах, з них: 5 статей (5 статей видані у фахових фізичних журналах, 4 з них індексуються у базі Scopus/Web of Science, 2 з них у журналах з квантилями Q1-Q2, а 2 – у журналах з квантилями Q3-Q4; 1 у журналі категорії Б) та 8 робіт, що є матеріалами всеукраїнських чи міжнародних конференцій.

Апробація матеріалів дисертації

Результати дисертаційної роботи пройшли всебічну апробацію шляхом представлення основних положень та висновків на ряді наукових всеукраїнських та міжнародних конференціях:

1. “XVII international Freik conference on physics and technology of thin films and nanosystems”. (Ivano-Frankivsk, October 11-16, 2021);
2. “IX Ukrainian scientific conference on physics of semiconductors (USCPS-9)” (Uzhhorod, Ukraine, May 22-26, 2023);
3. “XIX international Freik conference on physics and technology of thin films and nanosystems” (Ivano-Frankivsk, October 09-14, 2023);
4. “VIII Всеукраїнська науково-практична конференція MEICS-2023” (Дніпро, 27-29 листопада 2024);
5. “International Conference (for the 100th anniversary of the birth of Professor Yu.M. Lomsadze)”. (Uzhhorod, December 17-19, 2024);
6. XI-th International Conference “Topical problems of semiconductor physics” (Prykarpattya, Drohobych, Ukraine, May 27-31, 2024);
7. “Lashkaryov’s readings. Young scientists conference on semiconductor physics”. (Kyiv, Arpil 3-4, 2025).

8. “XX international Freik conference on physics and technology of thin films and nanosystems” (Ivano-Frankivsk, October 06-10, 2025).

Структура та об’єм дисертації. Дисертаційна робота складається зі вступу, п’яти розділів, висновків та списку із 91 джерел використаної літератури, одного додатку. Повний обсяг роботи становить 169 сторінок.

РОЗДІЛ 1

ТЕОРІЯ ТА ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНІ ДОСЛІДЖЕННЯ ІЗОЛЬОВАНИХ КВАНТОВИХ ТОЧОК ТА ВПОРЯДКОВАНИХ ЇХНІХ МАСИВІВ

У цьому розділі проведено аналіз теоретичних, експериментальних та прикладних робіт, в яких описано поширені методи отримання КТ. Значну увагу приділено методу молекулярно-променевої епітаксії та описано можливості отримання вертикально і латерально впорядкованих масивів КТ. Такі масиви КТ проаналізовано щодо довжини впорядкування, однорідності КТ, які утворюють надґратки КТ. Для таких систем розглянуто теоретичні моделі, які дають змогу описати НКТ. Зокрема описано метод сильного зв'язку та його застосування до НКТ. Розглянуто роботи, що описують енергетичні мінізонні спектри НКТ, які утворені КТ різної форми. Також переглянуто роботи, що стосуються одно-, дво- і тримірних НКТ. Проведений аналіз НКТ показав, що недослідженими залишаються НКТ, які містять дві різні КТ у базисі надґратки, а також малодослідженими залишаються залежності ширин міні- і заборонених зон НКТ. Ці питання і вирішуються у дисертаційній роботі.

Не менш важливим залишається вплив поляризації і деформації КТ-матриця на діркові стани у КТ у рамках багатозонних моделей ефективної маси. Тому у цьому параграфі проаналізовано теорію багатозонної ефективної маси і метод огинаючих функцій, описано матричний гамільтоніан 8×8 і випадки, коли він трансформується у 6×6 та 4×4 . Для цих випадків розглянуто роботи, в яких обчислено діркові стани, вплив електричного поля і домішок. Проведений аналіз показав, що недослідженими залишаються діркові стани у сферичній КТ з акцепторною домішкою за умови прикладення електричного поля у довільному напрямку. Тому ці дослідження є актуальними.

1.1. Отримання та характеристики простих квантових точок і їхніх впорядкованих масивів

Отримання простих КТ і впорядкованих масивів ґрунтується на сучасних методах нанофабрикації, які забезпечують контроль розміру, форми та просторової організації наноструктур. Сучасні експериментальні дослідження спрямовані на синтез нових, малодосліджених низьковимірних систем, зокрема на основі сполук III-V груп періодичної системи елементів (GaAs, InAs, InGaAs, AlGaAs). Багато електричних і оптичних застосувань напівпровідників можна розширити, використовуючи гетероструктури у пристроях. На нанорівні існує ціла низка структур, що забезпечують обмеження руху електронів в одному, двох або трьох вимірах. Коли рух носіїв заряду обмежується розміром, порівняним із радіусом Бора екситона чи довжиною хвилі де Бройля для електрона у об'ємному матеріалі, то проявляється квантоворозміний ефект. Тоді електрони стають просторово локалізованими, і енергетичні рівні набувають дискретного характеру на відміну від класичного неперервного спектра у масивних кристалах. Із поступовим зменшенням розміру об'ємного матеріалу до тонкої плівки і подальшим обмеженням руху електрона у всіх трьох напрямках формується наноструктура — КТ, у якій квантові властивості можна цілеспрямовано змінювати і це відкриває шлях до створення принципово нових пристроїв.

Найдешевшою технологією отримання КТ є колоїдні методи синтезу. КТ, що вирощені таким способом часто називають колоїдними КТ. Колоїдні КТ характеризуються точно визначеними розмірами, формою (переважно сферичною) та структурою. Цей метод є одним із найпоширеніших на практиці, оскільки забезпечує отримання КТ з малою дисперсією розмірів [13-14] і широким спектром поглинання. Саме [13] є однією з перших робіт, автори якої отримали КТ CdSe.

Традиційно колоїдні КТ отримують шляхом синтезу в неполярному середовищі. Для цього спочатку формують монодисперсний колоїдний розчин I типу через конденсацію фази із перенасиченого розчину. Утворені частинки мають специфічну кристалічну будову та високу схильність до агрегації. Далі до органічного розчинника додають сполуки, що містять елементи II або IV груп періодичної системи елементів, які осідають на молекулах розчинника. Такий підхід дозволив розробити методику синтезу колоїдних КТ із порівняно високою однорідністю за розмірами (монодисперсністю) завдяки розділенню у часі процесів нуклеації та росту наночастинок. Відповідно до методу, синтез відбувається у декілька стадій: нуклеація, зростання зародку, оствальдівське дозрівання.

Отже, на початковій стадії у гаряче середовище додається речовини з реагентами, які містять елементи потрібних груп елементів. Внаслідок швидких реакцій утворюються перші зародки твердої фази з перенасиченого розчину. Іншими словами, у контексті синтезу КТ, нуклеація означає утворення перших стабільних зародків частинок, які згодом можуть рости. Далі стадія росту відбувається досить швидко, бо розчин є перенасичений. А на останньому етапі відбувається ріст наночастинок. Його суть полягає в тому, що менші частинки розчиняються, а більші ростуть за рахунок переносу речовини з менших на більші. Це явище виникає через те, що менші частинки мають більшу поверхневу енергію, а отже, і кращу розчинність, ніж більші. Тобто у перенасиченому розчині всі частинки можуть спочатку зростати. А з часом менші частинки починають розчинятись, а речовина, що вивільняється, осідає на більших частинках. Внаслідок цього середній розмір частинок у системі зростає, а розмірна однорідність знижується. Зважаючи на це, у таких системах існує критичний розмір, більше від якого наночастинок ростуть у розмірі, а менше якого — розчинюються. Цей критичний розмір (а відповідно і розміри КТ), керується різними зовнішніми факторами та умовами росту [15-17].

Іншим способом отримання КТ є молекулярно-променева епітаксія, яка була розроблена наприкінці 1970-х років і відіграла фундаментальну роль у розвитку електроніки та оптики на основі наногетероструктур. Цей метод дозволяє створювати високоякісні шари з чіткими межами, а також забезпечує належний контроль товщини, складу і легування.

Під час процесу вирощування методом молекулярно-променевої епітаксії підкладку розміщують в ультра високовакуумному середовищі, яке містить масив печей із затворами, наповнених різними матеріалами. Коли ці джерела нагрівають до певної температури, випаровування з рідкого або твердого матеріалу утворює молекулярний пучок, який, завдяки великому середньому вільному пробігу в умовах ультрависокого вакууму, поширюється по камері й падає на підкладку. Змінюючи температуру випаровування джерела, можна керувати потоком пучка. Низька швидкість росту (близько 1 моношар на секунду) забезпечує міграцію частинок, що падають, по поверхні, яка росте. Адсорбовані атоми мігрують по поверхні і врешті-решт вбудовуються в підкладку. Для переривання потоку пучка — тобто для початку та завершення осадження — використовуються прості механічні затвори, розташовані перед кожною коміркою. Завдяки високому рівню контролю над осадженням матеріалів, молекулярно-променева епітаксія стала цінним інструментом у розробці електронних та оптичних пристроїв. Також слід відзначити, що під час епітаксійного росту необхідна чиста поверхня, оскільки домішки з атмосфери або інших джерел можуть легко потрапити на чисту пластину і викликати кристалічні дефекти або змінити оптичні й електричні характеристики епітаксійного шару.

Залежно від енергетичного балансу системи та невідповідності ґратки існують три основні режими росту: Франка–Ван дер Мерве, Фольмера–Вебера та Странського–Крастанова (рисунок 1.1).

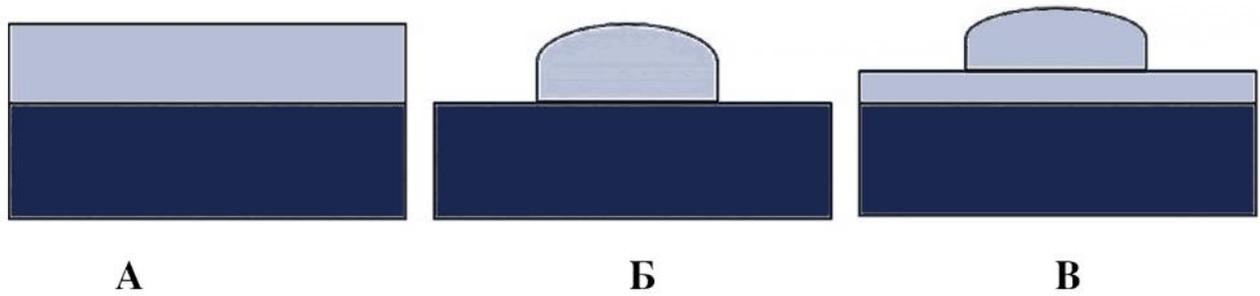


Рисунок 1. Схеми трьох можливих режимів росту: А – Франка–Ван дер Мерве (шар за шаром), Б – Фольмера–Вебера (острівцевий ріст), В – Странського–Крастанова (спочатку шаровий, потім острівцевий).

Взаємозв'язок між енергією інтерфейсу та поверхневою енергією визначає режим росту в системах зі співпадаючими ґратками. Якщо поверхнева енергія епітаксійного шару — γ_e , поверхнева енергія підкладки — γ_s , а енергія інтерфейсу — γ_{se} , і виконується умова $\gamma_e + \gamma_{se} < \gamma_s$, тоді нанесений матеріал змочує поверхню підкладки [18-19]. У такому випадку ріст відбувається за режимом Франка–Ван дер Мерве. Якщо ж енергія інтерфейсу між двома матеріалами є високою ($\gamma_e + \gamma_{se} > \gamma_s$), тоді ріст розвивається за режимом Фольмера–Вебера, коли матеріал одразу утворює острівці, щоб зменшити площу інтерфейсу за рахунок збільшення загальної поверхні. Для напруженого епітаксійного шару з малою енергією інтерфейсу початковий ріст може йти пошарово, однак при збільшенні товщини шар накопичує значну пружну енергію. Він може зменшити свою енергію шляхом утворення ізольованих острівців, у яких напруження зникає. У такому випадку реалізується режим росту Странського–Крастанова [18].

Ріст структури, що містить багаточарові квантові точки InGaAs, розділені прошарками з GaAs називають вертикальним впорядкуванням КТ. Вертикальне впорядкування КТ є важливим для більшості прикладних пристроїв, оскільки дозволяє збільшити коефіцієнт заповнення КТ в зразку, а отже — підвищити квантову ефективність пристрою.

Різні ефекти та морфології виникають залежно від товщини прошарку GaAs між шарами вертикально впорядкованих КТ InGaAs, а також від інших факторів росту. Напруження від шару квантових точок InGaAs передається через прошарок GaAs і створює поле напруження на його поверхні, яке змінює хімічний потенціал поверхневих ад-атомів [20, 21]. Мінімум хімічного потенціалу на поверхні відповідає максимуму напруження розтягу, що виникає безпосередньо над вбудованими острівцями. Таким чином, ад-атоми тяжіють до цих точок як до центрів зародження, і КТ вирівнюються вертикально згідно з розташуванням вбудованих острівців при нарощуванні нових шарів.

Поле напруження, створене малими острівцями, перекривається полем напруження від сусідніх великих острівців, що призводить до зникнення малих острівців у наступному шарі. Цей процес повторюється для кожного наступного шару, і відстань між острівцями та їх розміри поступово стають більш однорідними.

Іншим варіантом отримання масивів КТ є латеральне впорядкування. Вертикальне нашарування КТ може, за певних умов вирощування, призвести до їхнього латерального впорядкування на поверхні. При вирощуванні InGaAs КТ із низьким вмістом індію за відносно високої температури підкладки (540 °C) і відповідної товщини прошарку (15–20 нм) можна досягти бічного впорядкування InGaAs [22]. У цій роботі осаджували КТ $\text{In}_{0.36}\text{Ga}_{0.64}\text{As}$ 2 нм товщиною, розділені 16 нм прошарками GaAs. Вертикальна кореляція зумовлена вертикальним полем напруження між шарами КТ, як уже обговорювалося раніше, тоді як бічне впорядкування пов'язане зі збільшеною довжиною міграції ад-атомів і зменшенням поля напруження вздовж напрямку [011] при високій температурі росту. Через нашарування КТ стають більшими, щільність зменшується, що й призводить до латерального впорядкування.

Існує три типи масивів КТ залежно від розмірності системи: одномірні (1D), двовимірні (2D) та тривимірні (3D), як показано на рисунку 1.2. Висока однорідність і впорядкованість 1D та 2D масивів КТ може бути досягнута

шляхом епітаксійного росту на підкладках зі спеціальним шаблоном [23, 24]. Тривимірні масиви КТ формуються в результаті послідовного осадження епітаксійних шарів КТ; після формування першого шару КТ, наступні шари, як правило, формуються так, що КТ у кожному новому шарі розміщуються над точками попереднього шару.

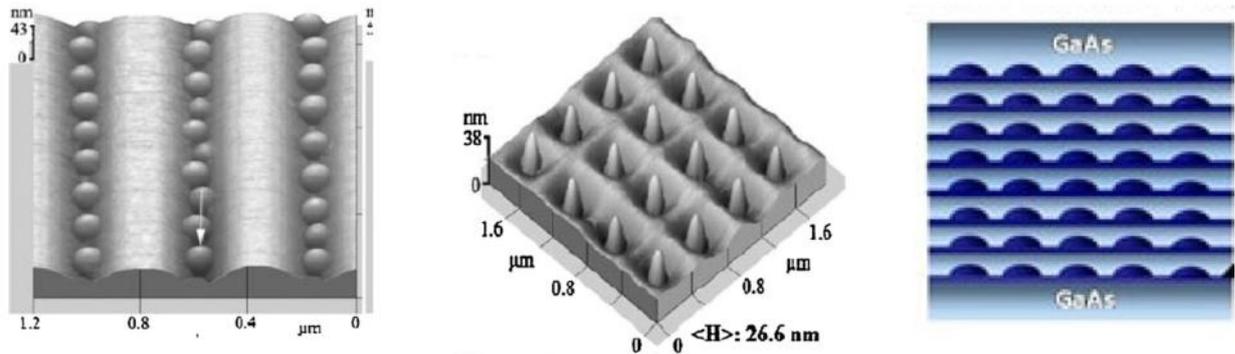


Рисунок 1.2. 1D, 2D, 3D масиви квантових точок [23].

На сьогодні добре розвинута теорія електронного спектру у впорядкованих надгратках КТ, що містять одну КТ у базисі, наприклад роботи [25-31]. Для розрахунку використовується метод ефективної маси, моделі прямокутних потенціальних ям і бар'єрів. А для врахування періодичності у розташуванні КТ — метод сильного зв'язку [26-28], метод плоских хвиль [25] та метод приєднаних плоских хвиль [29]. Розраховуються сферичні [26-28], циліндричні [25, 29], еліптичні та конусоподібні [30] КТ. Розраховано також масиви КТ із використанням нанодротів з обрізаними краями [31].

Незважаючи на існуючу теорію впорядкованих масивів КТ з одною КТ у базисі надгратки і обчислення, що проведені з ними, актуальним залишається порівняння різних форм КТ, що утворюють масиви, дослідження ширин і розташування мінізон як функцій розмірів КТ, їхнього розташування і форми. Зокрема дослідження періодично впорядкованих КТ кубічної форми та порівняння з сферичними проведено у цій дисертаційній роботі.

Крім просторової впорядкованості розрізняють також і масштаб впорядкування: впорядкованість на великій відстані (Long Range Ordering) — регулярна ґратка; локальна впорядкованість (Short Range Ordering), а глобально структура може бути аморфною. Отже, при локальному впорядкуванні КТ можуть бути подібними або однаковими в межах окремих локальних областей, але між цими локальними областями їх розмір, форма або склад можуть суттєво змінюватися. Такий тип розташування у НКТ не утворює впорядкованої ґратки на великі відстані, але демонструє локальну структурну організацію.

У деяких масивах КТ спостерігається періодичне чергування локально впорядкованих областей [12], які відрізняються розміром, формою або матеріальним складом. Така структура являє собою надґратку з модульованою впорядкованістю, де елементарна комірка включає не одну, а декілька різних локальних конфігурацій, що повторюються у просторі з певним періодом. Це перехідна форма між короткодіапазонним і довгодіапазонним впорядкуванням, яка характеризується високим ступенем контролю над морфологією системи. А якщо локальні області малі, то в них може бути по невеликій кількості КТ.

Таким чином, на підставі викладеного можна припустити, що існують області надґраток КТ, де в елементарній комірни надґратки можуть бути різні КТ. Саме удосконаленню теорії й розрахунку енергетичного мінізонного спектру таких надґраток присвячена дисертаційна робота. Зокрема запропонована теорія електронного спектру надґраток КТ з двома різними КТ у базисі.

1.2. Метод сильного зв'язку у моделюванні енергетичних спектрів

У сучасній нанофізиці особливу увагу привертають впорядковані надґратки квантових точок (НКТ), які демонструють унікальні електронні та оптичні властивості завдяки квантовому конфайнменту в окремо взятій КТ та колективній взаємодії між КТ. У таких системах, коли відстань між КТ є малою, електронні рівні окремих КТ можуть перекриватися, що призводить до утворення мінізон енергії, аналогічно до енергетичних зон у кристалах.

Опис таких структур вимагає підходу, який враховує локалізовану природу електронних станів у кожній КТ та їхню взаємодію з сусідніми КТ. У цьому контексті МСЗ виявляється достатньо ефективним. Він базується на уявленні, що електрон переважно локалізований у межах окремої КТ, але має ненульову ймовірність тунелювати до сусідніх КТ завдяки перекриванню хвильових функцій.

Такий підхід дозволяє побудувати модель мінізонної структури впорядкованого масиву КТ, де енергетичні рівні одиначної КТ розщеплюються внаслідок колективних ефектів. МСЗ дає змогу розрахувати вплив геометрії НКТ, типу зв'язку, розміру та форми КТ на розподіл енергетичних зон і квантові переходи. Крім того, цей метод дозволяє враховувати дискретність ґратки масиву КТ, анізотропію тунельного зв'язку та вплив зовнішніх полів, що робить його придатним як для аналітичного аналізу, так і для чисельного моделювання фізичних властивостей НКТ.

Нехай електрон у кожній КТ перебуває у квантовому стані ψ_0 , де ψ_0 є розв'язком рівняння Шредінгера для електрона у сферичній КТ:

$$\hat{H}_0 \psi_0(\vec{r}) = \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\vec{r}) \right) \psi_0(\vec{r}) = E_0 \psi_0(\vec{r}), \quad (1.1)$$

де $V(\vec{r})$ – сферично-симетричне поле окремої КТ, E_0 – енергія електрона у розглядуваному квантовому стані.

Систему координат вибрано так, що початок перебуває в центрі заданої КТ. Щоб отримати НКТ, слід розташувати такі ж КТ у вузлах надгратки. Згідно з теорією, спочатку слід абстрагуватися від того, що розташовані на близькій відстані КТ можуть взаємодіяти між собою. Тоді хвильова функція електрона КТ, що перебуває в n -ому вузлі матиме такий самий вигляд, як і для КТ у початку координат, тобто $\psi_0(\vec{r}-\vec{n})$, а енергія електрона буде E_0 , де $\vec{n}=n_1\vec{a}_1+n_2\vec{a}_2+n_3\vec{a}_3$ – вектор трансляції надгратки.

Цих станів буде така ж кількість, як і кількість КТ у масиві. Цю кількість позначено N . Саме тому енергетичний рівень E_0 є N кратно виродженим (без врахування спіну електрона). Тому хвильову функцію електрона у такій системі слід записати як лінійну комбінацію функцій всіх вузлів [32]:

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r})=\frac{1}{N}\sum_{\vec{n}}C_{\vec{k},\vec{n}}\psi_0(\vec{r}-\vec{n}). \quad (1.2)$$

Хвильова функція електрона у періодичній системі, володіє трансляційними властивостями:

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}+\vec{n})=e^{i\vec{k}\vec{n}}\psi_{\vec{k}}(\vec{r}), \quad (1.3)$$

де \vec{k} – хвильовий вектор. Підставляючи (1.3) в (1.2), отримано

$$C_{\vec{k},\vec{n}}=e^{i\vec{k}\vec{n}}. \quad (1.4)$$

Якщо КТ перебуває в кожній точці \vec{n} надгратки, тоді гамільтоніан електрона у такій системі можна записати у вигляді:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= -\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + \sum_{\vec{n}}V(\vec{r}-\vec{n}) = -\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + V(\vec{r}) + \sum_{\vec{n}\neq 0}V(\vec{r}-\vec{n}) = \hat{H}_0 + \sum_{\vec{n}\neq 0}V(\vec{r}-\vec{n}) = \\ &= \hat{H}_0 + \tilde{V}(\vec{r}). \end{aligned} \quad (1.5)$$

Потенціальна енергія у цьому гамільтоніані має періодичність кристалічної ґратки. Крім того сумарну потенціальну енергію вважають такою, що складається з суми потенціальних енергії окремих КТ. Праву ж частину рівняння можна інтерпретувати як можливість розділити цей потенціал будь-яким зручним способом, наприклад, як потенціал КТ в початку системи

координат і потенціал решти надгратки. Також це можна розглядати як гамільтоніан для КТ в початку координат із додатковим коригувальним потенціалом $\tilde{V}(\vec{r})$, що створений іншими КТ.

Після підстановки (1.2) у рівняння Шредінгера з гамільтоніаном (1.5), отримано:

$$E(\vec{k}) = \int \psi_{\vec{k}}^* \hat{H} \psi_{\vec{k}} d\vec{r} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{n}, \vec{n}'} e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{n}')} \int \psi_0^*(\vec{r}-\vec{n}') \hat{H} \psi_0(\vec{r}-\vec{n}) d\vec{r}. \quad (1.6)$$

Тут обидві суми беруться по всіх вузлах НКТ. Через еквівалентність всіх КТ НКТ вираз (1.6) не залежить окремо від \vec{n} і \vec{n}' , а залежить від їхньої різниці, тобто від відносного розташування КТ. Тому можна вибрати довільний вузол (довільну КТ) і покласти, що $\vec{n}'=0$ і ми можемо позбутися подвійного підсумовування, врахувавши, що маємо N таких сум:

$$E(\vec{k}) = \sum_{\vec{n}} e^{i\vec{k}(\vec{n})} \int \psi_0^*(\vec{r}) \hat{H} \psi_0(\vec{r}-\vec{n}) d\vec{r}. \quad (1.7)$$

Суму розбиваємо на дві: коли $\vec{n}=0$ і $\vec{n} \neq 0$.

$$E(\vec{k}) = \int \psi_0^*(\vec{r}) \hat{H} \psi_0(\vec{r}) d\vec{r} + \sum_{\vec{n} \neq 0} e^{i\vec{k}\vec{n}} \int \psi_0^*(\vec{r}) \hat{H} \psi_0(\vec{r}-\vec{n}) d\vec{r}.$$

Перша сума

$$\begin{aligned} \int \psi_0^*(\vec{r}) \hat{H} \psi_0(\vec{r}) d\vec{r} &= \int \psi_0^*(\vec{r}) (\hat{H}_0 + \tilde{V}(\vec{r})) \psi_0(\vec{r}) d\vec{r} = \\ &= E_0 + \int \psi_0^*(\vec{r}) \tilde{V}(\vec{r}) \psi_0(\vec{r}) d\vec{r} = E_0 + \beta. \end{aligned} \quad (1.8)$$

Тому

$$E(\vec{k}) = E_0 + \beta + \sum_{\vec{n} \neq 0} e^{i\vec{k}\vec{n}} \int \psi_0^*(\vec{r}) \hat{H} \psi_0(\vec{r}-\vec{n}) d\vec{r}. \quad (1.9)$$

Розглянемо останній інтеграл (1.9) і знову розіб'ємо його на два

$$\begin{aligned} &\int \psi_0^*(\vec{r}) (\hat{H}_0 + \tilde{V}(\vec{r})) \psi_0(\vec{r}-\vec{n}) d\vec{r} = \\ &= E_0 \int \psi_0^*(\vec{r}) \psi_0(\vec{r}-\vec{n}) d\vec{r} + \int \psi_0^*(\vec{r}) \tilde{V}(\vec{r}) \psi_0(\vec{r}-\vec{n}) d\vec{r} = \gamma_1(\vec{n}) + \gamma_2(\vec{n}) = \gamma(\vec{n}). \end{aligned} \quad (1.10)$$

Досить часто вважають, що перший інтеграл $\gamma_1(\vec{n})$ є малий через слабке перекриття хвильових функцій сусідніх КТ і ним нехтують [32]. Однак ми його залишимо, щоб не зменшувати точність у випадку, коли КТ перебувають

близько одна до одної або коли потенціальні ями окремо взятих КТ є малі. Таким чином,

$$E(\vec{k}) = E_0 + \beta + \sum_{\vec{n} \neq 0} e^{i\vec{k}\vec{n}} \gamma(\vec{n}) . \quad (1.11)$$

Формулу (1.11) використовують для обчислення мінізонної структури НКТ. Хоча формула (1.11) передбачає сумування по всіх вузлах надгратки. Проте, оскільки хвильові функції дуже швидко спадають із відстанню від КТ, у якій вони зосереджені, можна знехтувати всіма внесками в сумі, що відповідають КТ надгратки, які перебувають даліше ніж одна КТ від початку координат. Таким чином, обмежуємо суми в (1.11) обмежуються лише найближчими сусідами. Відповідне наближення часто називають наближенням найближчих сусідів.

Аналогічна теорія була застосована у роботах [26-28] для розрахунку мінізон 1D, 2D, 3D НКТ. Окрім МСЗ досить часто застосовується і метод плоских хвиль (МПХ) [25, 30], який також дає змогу отримати енергетичний спектр електрона у НКТ. Однак для повнішого розуміння фізичних процесів, що відбуваються в НКТ, доцільно порівняти результати, отримані за допомогою різних підходів, зокрема МСЗ та МПХ. Таке порівняння дозволяє оцінити точність та межі застосовності кожного з методів для конкретних геометрій та потенціальних профілів. Окрім того, важливо проаналізувати КТ різних форм (сферичні і кубічні), оскільки геометрія впливає на енергетичний спектр [33-37], густину станів та просторову локалізацію хвильових функцій. Саме такі дослідження проведені у цій дисертаційній роботі. Ці дослідження є важливим для цілеспрямованого проектування наноструктур з наперед заданими електронними та оптичними властивостями, що мають практичне значення для застосувань у нанотехнологіях, зокрема сонячних панелях на основі КТ.

1.3. Багатозонна теорія ефективної маси

Теорія ефективної маси тісно пов'язана з методом огинаючих функцій. У свій час метою розроблення методу огинаючих функцій було обчислення реакції носіїв заряду на слабкі та повільно змінні зовнішні збурення, такі як електромагнітні поля або потенціальні збурення, викликані домішковими атомами. Це чітко описано у роботах Латтінджера [38, 39]. Основна ідея полягає в тому, що збурена хвильова функція є добутком повільно змінної частини (огинаючої функції) та швидко осцилюючої частини з періодом, що відповідає міжвузловій відстані кристалічної ґратки. Зазвичай як швидко осцилюючу частину вибирають функції Блоха в точках екстремуму зони (у напівпровідниках вільні носії знаходяться поблизу цих екстремумів). Наприклад, функцію Блоха зони провідності в точці Γ зони Брілюена часто використовують як швидко осцилюючу частину. Аргументація цієї ідеї є досить простою: якщо \hat{H}_0 — це початковий гамільтоніан, а зовнішнє збурення $U(\vec{r})$, то природно будувати нові власні функції повного гамільтоніана \hat{H} на основі власних функцій \hat{H}_0 .

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + U(\vec{r}), \quad (1.12)$$

$$\psi(\vec{r}) = \int c(\vec{k}) e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) d\vec{k}, \quad (1.13)$$

де $e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$ — функція Блоха зони n з хвильовим вектором \vec{k} , а $u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$ — періодична функція ґратки. Цю функцію, згідно з методом Латтінджера, розкладають по повному наборі функцій $u_{n',\vec{k}_0}(\vec{r})$ з такою самою періодичністю [38, 40].

$$u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{n'} b_{n,n'}(\vec{k}) u_{n',\vec{k}_0}(\vec{r}) \quad (1.14)$$

Підставляючи (1.14) в (1.13), отримується

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{n'} \int c(\vec{k}) e^{i\vec{k}\vec{r}} b_{n,n'}(\vec{k}) u_{n',\vec{k}_0}(\vec{r}) d\vec{k}. \quad (1.15)$$

Вводячи нову функцію

$$f_{n'}(\vec{r}) = \int c(\vec{k}) e^{i\vec{k}\vec{r}} b_{n,n'}(\vec{k}) d\vec{k}, \quad (1.16)$$

яку називають огинаючою, отримаємо

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{n'} f_{n'}(\vec{r}) u_{n',\vec{k}_0}(\vec{r}). \quad (1.17)$$

Якщо потенціал $U(\vec{r})$ є плавномінім і взаємодією між зонами можна знехтувати, тоді

$$\psi(\vec{r}) \simeq f_n(\vec{r}) u_{n,\vec{k}_0}(\vec{r}). \quad (1.18)$$

У такому випадку задача з відшукування хвильової функції $\psi(\vec{r})$ зводиться до задачі на відшукування розв'язку для огинаючої функції:

$$(\hat{H}_0 + U(\vec{r})) f_n(\vec{r}) u_{n,\vec{k}_0}(\vec{r}) = E f_n(\vec{r}) u_{n,\vec{k}_0}(\vec{r}). \quad (1.19)$$

Якщо $E_n(\vec{k})$ - енергія блохівського стану зони n з хвильовим вектором \vec{k} , тоді для огинаючої функції справедливе рівняння [38]:

$$(E_n(-i\vec{\nabla}) + U(\vec{r})) f_n(\vec{r}) = E f_n(\vec{r}). \quad (1.20)$$

У попередньому рівнянні проведена формальна заміна $\vec{k} \rightarrow (-i\vec{\nabla})$. Ця заміна пов'язана з кр-методом для обчислення зонної структури об'ємного матеріалу. Насправді, процедура методу кр-методу майже ідентична методу огинаючих функцій [41, 42]. Усюди, де в методі огинаючих функцій з'являється $(-i\vec{\nabla})$, у кр-методі відповідно з'являється \vec{k} . Усі інші параметри збігаються.

Хоча метод огинаючих функцій успішно використовується для обчислення електронних станів у квантових ямах, він викликає багато суперечок. Раніше для отримання рівнянь для огинаючих функцій просто заміняли \vec{k} у $E_n(\vec{k})$ оператором $(-i\vec{\nabla})$. Такий підхід викликає сумніви, особливо для неоднорідних структур. Проблема полягає у правильному виборі граничних умов на межі двох різних матеріалів.

Для однозонної огинаючої функції однією з граничних умов є неперервність огинаючої функції на межі. Друге граничне рівняння отримують шляхом інтегрування рівняння для огинаючої функції через межу. У результаті

виникає рівняння для першої похідної огинаючої функції. Очевидно, що наступні два рівняння матимуть різні граничні умови, якщо ефективна маса відрізняється по обидва боки межі. Але правильний порядок операторів ще не гарантує правильність граничних умов. Викликає сумніви також отримання другої граничної умови, яка містить першу похідну, шляхом інтегрування рівняння для огинаючих функцій. Історично метод огинаючих функцій був призначений для опису повільно змінних зовнішніх збурень. Проте в нанокристалах або квантових ямах на межі відбуваються різкі зміни властивостей матеріалу. Потенціал змінюється не поступово й не плавно. Тому невідомо, чи є метод огинаючих функцій є придатним для опису області поблизу межі. Якщо в цій області диференціальна форма рівняння для огинаючої функції не існує, то друга гранична умова залишається невизначеною.

У класичних роботах Берта [43-45] було доведено, що точна огинаюча функція та її перша похідна є неперервними на різкій межі гетероструктури. Він також показав, що наближення можуть призводити до “зламів” (kinks) огинаючих функцій на межі. Ці злами узгоджуються з розривами першої похідної, що впливають із другої граничної умови та розривної ефективної маси.

Для матеріалів із широкою забороненою зоною та слабким квантовим обмеженням однозонна огинаюча функція зони провідності є цілком придатною для обчислення дискретних енергетичних рівнів електронів вище дна зони провідності. Поблизу екстремуму зона є параболічною, тому оператор кінетичної енергії для огинаючої функції має просту форму: $-\hbar^2 \nabla^2 / (2m^*)$, де m^* — ефективна маса електрона на дні зони. Але якщо квантове обмеження є дуже сильним, то енергії цих рівнів значно перевищують край зони провідності. А на таких високих енергіях залежність $E(\vec{k})$ вже не є параболічною. Тоді щоб отримати точні результати, замість сталої ефективної маси слід використовувати ефективну масу, що залежить від енергії.

Стани у валентній зоні мають іншу природу. Зазвичай у валентній зоні об'ємних матеріалів спостерігається виродження на максимумі валентної зони. На рисунку 1.3 зображено зонну структуру масивних напівпровідників із кристалічною ґраткою типу цинкової обманки поблизу точки Γ . Важка та легка діркові зони вироджені в точці Γ .

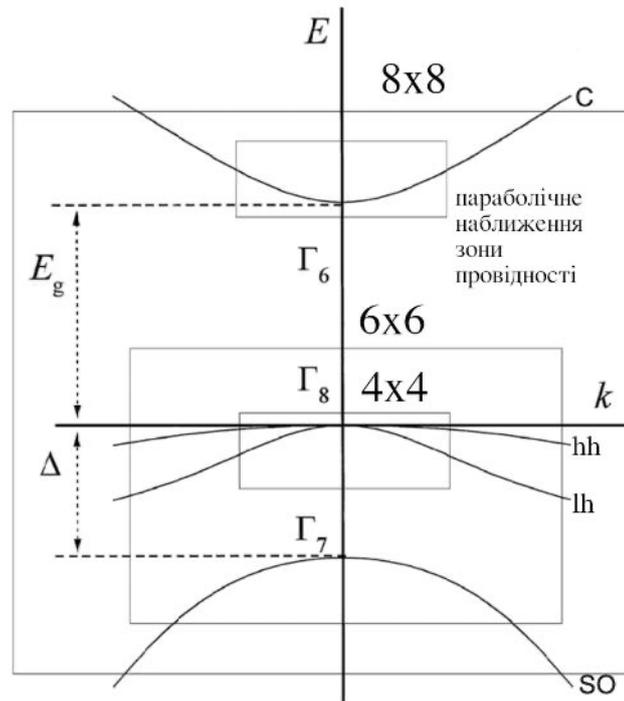


Рисунок 1.3. Схематична зонна структура в околі центра зони Бріллюена. hh — зона важких дірок, lh — зона легких дірок, SO — спін-відщеплена зона, C — зона провідності.

Якщо енергія спін-орбітального розщеплення Δ_{so} більша, ніж енергія, що виникає внаслідок квантового обмеження, тоді діркові стани у валентній зоні можуть формуватися з легких і важких діркових зон об'ємного матеріалу. У такому випадку існує чотири огинаючі функції: по дві для легких і важких дірок, якщо враховується спін, тобто так звана модель 4x4.

Якщо ж Δ_{so} мала, і енергія, обумовлена квантовим обмеженням, співрозмірна Δ_{so} , то для обчислення діркових станів у валентній зоні

необхідно враховувати всі три типи валентних зон. Тоді буде шість огинаючих функцій. Таку модель часто називають моделлю 6x6.

Для матеріалів з малою забороненою зоною між зоною провідності і валентною зонами існує взаємодія між зонами. В цьому випадку слід враховувати вісім огинаючих функцій, тобто користуватися моделлю 8x8.

Якщо розглянути кристали зі структурою типу цинкової обманки, то мінімум зони провідності, так і максимум валентної зони розташовані в точці Г. Функція $|S\rangle$ — це хвильова функція Блоха зони провідно в точці Г. Інші функції $|X\rangle$, $|Y\rangle$ та $|Z\rangle$ — це три вироджені хвильові функції Блоха валентної зони в точці Г. Щоб врахувати спінове виродження та спін-орбітальну взаємодію, як базис для розрахунку методом огинаючих функцій у восьмизонній моделі використовуються наступні вісім хвильових функцій:

$$\begin{aligned}
 u_{1/2}^c &= |S \uparrow\rangle, \\
 u_{-1/2}^c &= |S \downarrow\rangle, \\
 u_{3/2,3/2}^v &= \frac{1}{\sqrt{2}} |(X+iY) \uparrow\rangle, \\
 u_{3/2,1/2}^v &= \frac{i}{\sqrt{6}} |(X+iY) \downarrow - 2Z \uparrow\rangle, \\
 u_{3/2,-1/2}^v &= \frac{1}{\sqrt{6}} |(X-iY) \uparrow + 2Z \downarrow\rangle, \\
 u_{3/2,-3/2}^v &= \frac{i}{\sqrt{2}} |(X-iY) \downarrow\rangle, \\
 u_{1/2,1/2}^v &= \frac{1}{\sqrt{3}} |(X+iY) \downarrow + Z \uparrow\rangle, \\
 u_{1/2,-1/2}^v &= \frac{i}{\sqrt{3}} |-(X-iY) \uparrow + Z \downarrow\rangle.
 \end{aligned} \tag{1.21}$$

Вони власне і є швидко осцилюючими складовими хвильових функцій у методі огинаючих функцій.

Вищенаведені вісім базисних функцій записані у вигляді, де індекс c позначає зону провідності, v — валентну зони. j — квантове число, що відповідає за кутовий момент, а j_z — квантове число, що відповідає за проекцію кутового моменту на вісь z . Базисні функції для зон важких дірок

(heavy-hole) та легких дірок (light-hole) мають $j = 3/2$. Спін-відщеплена зона має $j = 1/2$. На основі цих функцій можна записати повну хвильову функцію:

$$\psi(r) = \sum_{j_z=-1/2}^{1/2} f_{j_z}^c u_{j_z}^c + \sum_{j_z=-3/2}^{3/2} f_{3/2,j_z}^v u_{3/2,j_z}^v + \sum_{j_z=-1/2}^{1/2} f_{1/2,j_z}^v u_{1/2,j_z}^v. \quad (1.22)$$

Для нанокристалів хвильові функції розкладають за базисними функціями в кожному шарі. Базисні функції мають однакову форму в усіх шарах. Відмінними є лише коефіцієнти f - огинаючі функції, які можна знайти у кожному шарі з матричного диференціального рівняння [46]:

$$\hat{H} f = E f, \quad (1.23)$$

де

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} Eg + \frac{\alpha}{2m_e} \hat{p}^2 & 0 & \frac{i}{\sqrt{2}} \hat{V} \hat{p}_+ & \sqrt{\frac{2}{3}} \hat{V} \hat{p}_z & \frac{i}{\sqrt{6}} \hat{V} \hat{p}_- & 0 & \frac{i}{\sqrt{3}} \hat{V} \hat{p}_z & \frac{1}{\sqrt{3}} \hat{V} \hat{p}_- \\ 0 & Eg + \frac{\alpha}{2m_e} \hat{p}^2 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{6}} \hat{V} \hat{p}_+ & i\sqrt{\frac{2}{3}} \hat{V} \hat{p}_z & -\frac{1}{\sqrt{2}} \hat{V} \hat{p}_- & \frac{i}{\sqrt{3}} \hat{V} \hat{p}_+ & -\frac{1}{\sqrt{3}} \hat{V} \hat{p}_z \\ -\frac{i}{\sqrt{2}} \hat{V} \hat{p}_- & 0 & -(\hat{P} + \hat{Q}) & -\hat{L} & -\hat{M} & 0 & -i\sqrt{\frac{1}{2}} \hat{L} & i\sqrt{2} \hat{M} \\ \sqrt{\frac{2}{3}} \hat{V} \hat{p}_z & -\frac{1}{\sqrt{6}} \hat{V} \hat{p}_- & -\hat{L}^* & -(\hat{P} - \hat{Q}) & 0 & -\hat{M} & i\sqrt{2} \hat{Q} & -i\sqrt{\frac{3}{2}} \\ -\frac{i}{\sqrt{6}} \hat{V} \hat{p}_+ & -i\sqrt{\frac{2}{3}} \hat{V} \hat{p}_z & -\hat{M}^* & 0 & -(\hat{P} - \hat{Q}) & \hat{L} & i\sqrt{\frac{3}{2}} \hat{L}^* & i\sqrt{2} \hat{Q} \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} \hat{V} \hat{p}_+ & 0 & -\hat{M}^* & \hat{L}^* & -(\hat{P} + \hat{Q}) & i\sqrt{2} \hat{M}^* & i\sqrt{\frac{1}{2}} \hat{L}^* \\ -\frac{i}{\sqrt{3}} \hat{V} \hat{p}_z & -\frac{i}{\sqrt{3}} \hat{V} \hat{p}_- & i\sqrt{\frac{1}{2}} \hat{L}^* & -i\sqrt{2} \hat{Q} & -i\sqrt{\frac{3}{2}} \hat{L} & -i\sqrt{2} \hat{M} & -\Delta_{so} - \hat{P} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{3}} \hat{V} \hat{p}_+ & -\frac{1}{\sqrt{3}} \hat{V} \hat{p}_z & -i\sqrt{2} \hat{M} & i\sqrt{\frac{3}{2}} \hat{L}^* & -i\sqrt{2} \hat{Q} & -i\sqrt{\frac{1}{2}} \hat{L} & 0 & -\Delta_{so} - \hat{P} \end{pmatrix} \quad (1.24)$$

— матричний гамільтоніан 8×8 , E — енергія дірки (власне значення гамільтоніана), f — вектор-стовпець огинаючих функцій:

$$\mathbf{f} = \begin{pmatrix} f_{1/2}^c \\ f_{-1/2}^c \\ f_{3/2,3/2}^v \\ f_{3/2,1/2}^v \\ f_{3/2,-1/2}^v \\ f_{3/2,-3/2}^v \\ f_{1/2,1/2}^v \\ f_{1/2,-1/2}^v \end{pmatrix}. \quad (1.25)$$

Оператори в (1.24) виражаються через проекції операторів імпульсу

$$\begin{aligned} \hat{p}_+ &= \hat{p}_x + i \hat{p}_y, & \hat{p}_- &= \hat{p}_x - i \hat{p}_y, & \hat{p}_{\text{перп}}^2 &= \hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2, \\ \hat{P} &= \frac{\gamma_1}{2m_0} \hat{p}^2, & \hat{Q} &= \frac{\gamma}{2m_0} (\hat{p}_{\text{перп}}^2 - \hat{p}_z^2), & \hat{L} &= \frac{-i\sqrt{3}\gamma}{m_0} \hat{p}_z \hat{p}_-, & \hat{M} &= \frac{\sqrt{3}\gamma}{2m_0} \hat{p}_-^2 \end{aligned} \quad (1.26)$$

та параметри Латтінджера γ_1 , γ , які пов'язані з ефективними масами важкої і легкої дірок співвідношеннями:

$$m_{hh} = \frac{m_e}{\gamma_1 - 2\gamma}, \quad m_{lh} = \frac{m_e}{\gamma_1 + 2\gamma}. \quad (1.27)$$

E_g — енергія забороненої зони, Δ_{so} — енергія спин-орбітального розщеплення,

$$\hat{V} = \frac{-i}{m_e} \langle S | \hat{p}_z | Z \rangle. \quad (1.28)$$

Тут слід відзначити, що гамільтоніан (1.24) написаний у сферичному наближенню Балдареші-Ліпарі [47-49], де знехтувано гофрованістю ізоенергетичних поверхонь у k-просторі.

Запропонований гамільтоніан використано для обчислення діркових та електронних станів у сферичній КТ [50]. Також автори вивели несиметризований гамільтоніан 8x8 у представленні огинаючих функцій Барта (Burt's envelope-function representation). Якщо величина забороненої зони є великою, тоді в (1.24) слід відкинути перші два рядки і перші два стовпці. У результаті отримується гамільтоніан 6x6, який описує тільки діркові стани в центрі зони Бріллюена. Цю модель використано для обчислення діркових станів у сферичній КТ [51] GaAs/AlAs, де визначено залежності енергетичних рівнів від радіуса КТ, порівняно отримані результати з результатами

однозонних моделей. Однак важливим залишається встановлення чітких меж застосування моделей, зокрема і у випадках, коли враховується деформація і поляризація на межі КТ-матриця. Як показано у роботах [52-54] вплив поляризаційних зарядів може збільшувати енергію електрона у КТ, якщо діелектрична проникність КТ більша від діелектричної проникності матриці. Деформація може також як збільшувати, так і зменшувати енергію електрона залежно від розтягу-стиску КТ-матриці. Зокрема для КТ InAs/GaAs, де неузгодженість сталих ґраток становить 7%, врахування деформаційних ефектів у гамільтоніані зумовлює зменшення енергії електрона [55-57]. Тому щоб чітко визначити внески і поляризації, і деформації КТ-матриця у моделі 6x6 у дисертаційні роботі проведено ці дослідження і розрахунки.

Коли ж величина спін-орбітальної взаємодії велика, тоді можна відкинути ще і два останні рядки і два стовпці. Тоді отримаємо гамільтоніан 4x4, який часто застосовують для діркових станів у КТ, що утворені матеріалами, які мають великі E_g і Δ_{so} . Саме таку модель використано для розрахунку діркових та акцепторних станів у сферичній одношаровій КТ [58-60]. Також цю модель використано для обчислення квазістаціонарних діркових станів у відкритій сферичній КТ [61]. Вплив електричного поля на діркові стани визначено у сферичній КТ [62]. Показано, що електричне поле зумовлює розщеплення діркових рівнів, зокрема найнижчий дірковий рівень, що є чотирикратно виродженим, розщеплюється за модулем магнітного числа M . В однозонній моделі цей ефект відсутній (енергія основного стану не розщеплюється в електричному полі). Енергетичний рівень основного стану дірки також розщеплюється при наявності нецентральної домішки у КТ [63]. Тому дослідження сумарного впливу нецентральної домішки і довільно прикладеного зовнішнього електричного поля може зумовити або посилення розщеплення, або його зменшення при певних значеннях електричного поля і його напрямку відносно домішки. Ці питання також досліджені у дисертаційній роботі.

Висновки до розділу 1

1. Проведено огляд робіт, в яких описано методи отримання КТ, зокрема впорядкованих масивів КТ.
2. Проаналізовано прикладні роботи, в яких показано, що впорядкування КТ у масиви різної розмірності дозволяє керувати їхніми електронними властивостями й мінізонами. А це важливо для створення високоефективних сонячних батарей на основі НКТ.
3. Описано МСЗ і показано на можливості його застосування до НКТ з двома КТ у базисі НКТ.
4. Встановлено, що у літературних джерелах наявна тільки теорія, що описує НКТ з однією КТ у базисі.
5. Проаналізовано багатозонну теорію ефективної маси, вказано на потребу її застосування до обчислення діркових станів у КТ.

Як видно з запропонованого огляду, відсутня теорія НКТ з двома КТ у базисі. Не достатньо з'ясованими залишаються задачі про вплив довільно орієнтованого електричного поля та акцепторів на діркові стани сферичної КТ. Також не досліджено вплив поляризації та деформації на діркові стани у КТ в рамках у багатозонних моделей. Вирішення цих питань запропоновано у дисертаційній роботі [1*-13*].

РОЗДІЛ 2

ЕНЕРГЕТИЧНИЙ СПЕКТР ДІРКИ ТА ЕЛЕКТРОНА У КВАНТОВІЙ ТОЧЦІ З УРАХУВАННЯМ ПОЛЯРИЗАЦІЇ ТА ДЕФОРМАЦІЇ НА ГЕТЕРОМЕЖІ КВАНТОВА ТОЧКА-МАТРИЦЯ

У цьому розділі здійснюється детальне дослідження діркових енергетичних спектрів сферичної КТ у рамках моделі Латтінджера, яка базується на використанні повного гамільтоніану розмірності 6×6 . У розрахунках враховується вплив поляризаційних зарядів, які виникають на гетеромежі між матеріалом КТ та матрицею, що її оточує. Крім того, до моделі включається електрон-деформаційна взаємодія, яка є наслідком всесторонньої деформації КТ-матриці, що виникає в результаті неузгодженості параметрів сталих ґраток матеріалів, з яких утворена гетероструктура. У рамках моделі Латтінджера виведено систему радіальних диференціальних рівнянь, яку вдалося розв'язати точно, без використання наближень. Потенціальна енергія, що враховує деформаційний вплив, інтегрована безпосередньо в точні аналітичні розв'язки. Водночас вплив поляризації, спричинений особливостями гетеромежі, обчислюється на основі теорії збурень першого порядку.

У цьому ж розділі проводиться порівняльний аналіз енергетичних спектрів дірок у моделі 4×4 , яка є коректною у випадку, коли впливом спін-відщепленої зони можна знехтувати. У межах цієї моделі виконуються аналогічні обчислення діркових станів, як і для моделі 6×6 .

На основі отриманих результатів здійснюється зіставлення їх для обох моделей, окреслено межі їхньої придатності, а також проаналізовано характер і ступінь впливу поляризаційних і деформаційних ефектів на діркові спектри. У підсумку розглядаються фізичні умови, за яких зазначені ефекти можуть бути знехтувані — як через їхній малий внесок, так і завдяки можливій взаємній компенсації впливів на енергетичну структуру.

Результати цих досліджень опубліковано у роботах [2*, 6*].

2.1. Теорія діркового спектру сферичної квантової точки у рамках багатозонної моделі ефективної маси 6x6

Розглядається сферична напівпровідникова КТ InAs у матриці GaAs. Ця гетеросистема утворена матеріалами, що мають досить великі значення забороненої зони. Радіус КТ становить a . Параметри Латтінджера КТ – $\gamma_1^{(I)}$, $\gamma^{(I)}$, а матриці – $\gamma_1^{(II)}$, $\gamma^{(II)}$, (I)=InAs, (II)=GaAs. Гетеросистема характеризується діелектричною проникністю $\epsilon^{(I)}$ і $\epsilon^{(II)}$ у КТ і матриці відповідно. Параметри ґраток матеріалів становлять $a_0^{(I)}$ і $a_0^{(II)}$.

У найбільш загальному випадку гамільтоніан такої системи можна записати у вигляді:

$$\hat{H} = \hat{H}_{8 \times 8} + U(\vec{r}), \quad (2.1)$$

де $\hat{H}_{8 \times 8}$ визначається формулою (1.24)

$$\hat{H}_{8 \times 8} = \begin{pmatrix} Eg + \frac{\alpha}{2m_e} \hat{p}^2 & 0 & \frac{i}{\sqrt{2}} \hat{V} \hat{p}_+ & \sqrt{\frac{2}{3}} \hat{V} \hat{p}_z & \frac{i}{\sqrt{6}} \hat{V} \hat{p}_- & 0 & \frac{i}{\sqrt{3}} \hat{V} \hat{p}_z & \frac{1}{\sqrt{3}} \hat{V} \hat{p}_- \\ 0 & Eg + \frac{\alpha}{2m_e} \hat{p}^2 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{6}} \hat{V} \hat{p}_+ & i\sqrt{\frac{2}{3}} \hat{V} \hat{p}_z & -\frac{1}{\sqrt{2}} \hat{V} \hat{p}_- & \frac{i}{\sqrt{3}} \hat{V} \hat{p}_+ & -\frac{1}{\sqrt{3}} \hat{V} \hat{p}_z \\ -\frac{i}{\sqrt{2}} \hat{V} \hat{p}_- & 0 & -(\hat{P} + \hat{Q}) & -\hat{L} & -\hat{M} & 0 & -i\sqrt{\frac{1}{2}} \hat{L} & i\sqrt{2} \hat{M} \\ \sqrt{\frac{2}{3}} \hat{V} \hat{p}_z & -\frac{1}{\sqrt{6}} \hat{V} \hat{p}_- & -\hat{L}^* & -(\hat{P} - \hat{Q}) & 0 & -\hat{M} & i\sqrt{2} \hat{Q} & -i\sqrt{\frac{3}{2}} \\ -\frac{i}{\sqrt{6}} \hat{V} \hat{p}_+ & -i\sqrt{\frac{2}{3}} \hat{V} \hat{p}_z & -\hat{M}^* & 0 & -(\hat{P} - \hat{Q}) & \hat{L} & i\sqrt{\frac{3}{2}} \hat{L}^* & i\sqrt{2} \hat{Q} \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} \hat{V} \hat{p}_+ & 0 & -\hat{M}^* & \hat{L}^* & -(\hat{P} + \hat{Q}) & i\sqrt{2} \hat{M}^* & i\sqrt{\frac{1}{2}} \hat{L}^* \\ -\frac{i}{\sqrt{3}} \hat{V} \hat{p}_z & -\frac{i}{\sqrt{3}} \hat{V} \hat{p}_- & i\sqrt{\frac{1}{2}} \hat{L}^* & -i\sqrt{2} \hat{Q} & -i\sqrt{\frac{3}{2}} \hat{L} & -i\sqrt{2} \hat{M} & -\Delta_{so} - \hat{P} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{3}} \hat{V} \hat{p}_+ & -\frac{1}{\sqrt{3}} \hat{V} \hat{p}_z & -i\sqrt{2} \hat{M} & i\sqrt{\frac{3}{2}} \hat{L}^* & -i\sqrt{2} \hat{Q} & -i\sqrt{\frac{1}{2}} \hat{L} & 0 & -\Delta_{so} - \hat{P} \end{pmatrix} \quad (2.2)$$

Оскільки розглядаються діркові стани та гетероструктура утворена матеріалами з широкими забороненими зонами, то матричний елемент проекції імпульсу на Блохівських функціях зони провідності $|S\rangle$ та валентної зони $|Z\rangle$ у точці Γ $\hat{V} = \frac{-i}{m_e} \langle S | \hat{p}_z | Z \rangle$ є малим. Тому ним можна знехтувати. Тоді $\hat{H}_{8 \times 8}$ можна подати у блочно-діагональному вигляді:

$$\hat{H}_{8 \times 8} = \begin{pmatrix} \hat{H}_{2 \times 2} & 0 \\ 0 & \hat{H}_{6 \times 6} \end{pmatrix}. \quad (2.3)$$

З математичної точки зору це означає, що перші два і останні шість компонентів гамільтоніану $\hat{H}_{8 \times 8}$, не зв'язані між собою, тобто жодна з частин не впливає на іншу. У цій фізичній моделі це вказує на розділення системи: 2 компоненти $\hat{H}_{2 \times 2}$, що відповідають електронам з певним спіном (вверх і вниз), а $\hat{H}_{6 \times 6}$ – зонам важким і легких дірок та спін-відщепленій зоні, який має вигляд:

$$\hat{H}_{6 \times 6} = \begin{pmatrix} -(\hat{P} + \hat{Q}) & -\hat{L} & -\hat{M} & 0 & -i\sqrt{\frac{1}{2}}\hat{L} & i\sqrt{2}\hat{M} \\ -\hat{L}^* & -(\hat{P} - \hat{Q}) & 0 & -\hat{M} & i\sqrt{2}\hat{Q} & -i\sqrt{\frac{3}{2}} \\ -\hat{M}^* & 0 & -(\hat{P} - \hat{Q}) & \hat{L} & i\sqrt{\frac{3}{2}}\hat{L}^* & i\sqrt{2}\hat{Q} \\ 0 & -\hat{M}^* & \hat{L}^* & -(\hat{P} + \hat{Q}) & i\sqrt{2}\hat{M}^* & i\sqrt{\frac{1}{2}}\hat{L}^* \\ i\sqrt{\frac{1}{2}}\hat{L}^* & -i\sqrt{2}\hat{Q} & -i\sqrt{\frac{3}{2}}\hat{L} & -i\sqrt{2}\hat{M} & -\Delta_{so} - \hat{P} & 0 \\ -i\sqrt{2}\hat{M} & i\sqrt{\frac{3}{2}}\hat{L}^* & -i\sqrt{2}\hat{Q} & -i\sqrt{\frac{1}{2}}\hat{L} & 0 & -\Delta_{so} - \hat{P} \end{pmatrix}, \quad (2.4)$$

де

$$\begin{aligned} \hat{p}_+ &= \hat{p}_x + i\hat{p}_y, & \hat{p}_- &= \hat{p}_x - i\hat{p}_y, & \hat{p}_{\text{перп}}^2 &= \hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2, \\ \hat{P} &= \frac{\gamma_1}{2m_0} \hat{p}^2, & \hat{Q} &= \frac{\gamma}{2m_0} (\hat{p}_{\text{перп}}^2 - \hat{p}_z^2), \\ \hat{L} &= \frac{-i\sqrt{3}\gamma}{m_0} \hat{p}_z \hat{p}_-, & \hat{M} &= \frac{\sqrt{3}\gamma}{2m_0} \hat{p}_-^2, \end{aligned} \quad (2.5)$$

а $\gamma_1 = \gamma_1^{(I)}$ і $\gamma = \gamma^{(I)}$ у КТ, а в матриці $\gamma_1 = \gamma_1^{(II)}$ і $\gamma = \gamma^{(II)}$. Таким чином повний гамільтоніан для дірок набуде вигляду:

$$\hat{H} = \hat{H}_{6 \times 6} + U_{conf}(r) + V_p(r) + V_d(r), \quad (2.6)$$

де

$$U_{conf}(r) = \begin{cases} 0 & r \leq a, \\ U_0 & r > a, \end{cases} \quad (2.7)$$

потенціальна енергія обмеження носіїв заряду (дірок), $V_p(r), V_d(r)$ – потенціальні енергії, що зумовлені поляризаційними та деформаційними ефектами.

Для отримання потенціальної енергії, що описує взаємодію дірки з поляризаційними зарядами, які дірка індукує на гетеромежі, розв'язується рівняння Пуассона, яке для сферично-симетричної КТ має вигляд [54]:

$$\nabla^2 \varphi(r, r_0) + \frac{d}{dr} [\ln[\varepsilon(r)]] \cdot \frac{\partial \varphi(r, r_0)}{\partial r} = -\frac{4\pi q}{\varepsilon(r)} \delta(\vec{r} - \vec{r}_0), \quad (2.8)$$

де \vec{r}_0 – точка перебування заряду, а \vec{r} – точка спостереження. Діелектрична проникність

$$\varepsilon(r) = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{\varepsilon^{(I)} - \varepsilon^{(II)}}{\varepsilon^{(I)} + \varepsilon^{(II)}} \operatorname{th} \left(\frac{r-a}{L} \right) \right] \sum_{i=1}^2 \varepsilon^{(i)}, \quad (2.9)$$

є плавною функцією координат [54], де L – параметр перехідного шару, в межах якого діелектрична проникність змінюється від $\varepsilon^{(I)}$ до $\varepsilon^{(II)}$. Щоб величина перехідного шару дорівнювала сталій ґратці, то необхідно, щоб $L \sim a_0/4$. Потенціальна енергія заряду визначається через взаємодію точкової зарядженої частинки (дірки) із поляризаційними зарядами межі поділу:

$$V_{pol}(r) = \frac{q}{2} \int_S dS \frac{\sigma}{|\vec{r} - \vec{R}|}, \quad (2.10)$$

де $\vec{R} = a(\vec{i} + \vec{j} + \vec{k})$, а поверхнева густина зарядів σ на поверхні КТ-матриця визначається з граничних умов для вектора поляризації:

$$\sigma = \vec{P}_{1n} - \vec{P}_{2n} = \frac{1}{4\pi} \left(\frac{\partial \varphi_1}{\partial r} - \frac{\partial \varphi_2}{\partial r} \right) \Big|_{r=a} \quad (2.11)$$

При врахуванні ж проміжного шару, формула (2.10) записується у більш загальному вигляді [53, 54, 64]. Тобто

$$V_{pol}(\vec{r}) = \frac{q}{2} \varphi(\vec{r}), \quad (2.12)$$

де

$$\varphi(\vec{r}) = \lim_{\vec{r}_0 \rightarrow \vec{r}} \left\{ \varphi(\vec{r}, \vec{r}_0) - \frac{q}{\varepsilon(\vec{r})} \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}_0|} \right\}. \quad (2.13)$$

Таким чином, розв'язавши рівняння Пуассона (2.8) з використанням нульового і першого наближення класичного методу функцій Гріна, як у [54], отримано потенціальну енергію, яка описує енергію взаємодії дірки з поляризаційними зарядами, що виникають на межі КТ-матриця у вигляді:

$$V_{pol}(r) = \frac{e^2}{4\varepsilon(r)} \frac{\varepsilon^{(I)} - \varepsilon^{(II)}}{\varepsilon^{(I)} + \varepsilon^{(II)}} \int_0^\infty dr_0 \frac{\operatorname{th}\left(\frac{r_0 - a}{L}\right) + \frac{r_0}{L} \cdot \operatorname{sech}\left(\frac{r_0 - a}{L}\right)}{r_0^2 - r^2}. \quad (2.14)$$

Щоб отримати потенціальну енергію дірки, що зумовлена всесторонньою деформацією на межі КТ-матриця було розглянуто неперервне пружне середовище. Далі розв'язано рівняння рівноваги для зміщень елементів об'єму у КТ та матриці:

$$\vec{\nabla} \operatorname{div} \vec{u} = 0. \quad (2.15)$$

У випадку сферичної КТ розв'язок (2.15) можна подати для радіальної складової у області КТ та матриці:

$$u_r^{(1)} = C_1 r + \frac{C_2}{r^2}, \quad r < a, \quad (2.16)$$

$$u_r^{(2)} = C_3 r + \frac{C_4}{r^2}, \quad a \leq r < R_0, \quad (2.17)$$

де R_0 – радіус сфери релаксації механічних напруг (велике число, $R_0 \gg a$). У точці початку координат (центр КТ) зміщення має бути скінченним. Тому коефіцієнт $C_2 = 0$. На основі поля зміщень було знайдено компоненти тензора деформації у сферичній системі координат:

$$\tilde{\gamma}_{rr} = \frac{\partial u_r}{\partial r}, \quad \tilde{\gamma}_{\theta,\theta} = \frac{1}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + \frac{u_r}{r}, \quad \tilde{\gamma}_{\varphi\varphi} = \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial u_\varphi}{\partial \varphi} + \frac{u_\theta}{r} \operatorname{ctg} \theta + \frac{u_r}{r}. \quad (2.18)$$

Тому

$$\tilde{\gamma}_{rr}^{(1)} = \tilde{\gamma}_{\varphi\varphi}^{(1)} = \tilde{\gamma}_{\theta\theta}^{(1)} = C_1, \quad (2.19)$$

$$\tilde{\gamma}_{rr}^{(2)} = C_3 - \frac{2C_4}{r^3}, \quad \tilde{\gamma}_{\varphi\varphi}^{(2)} = \tilde{\gamma}_{\theta\theta}^{(2)} = C_3 + \frac{C_4}{r^3}. \quad (2.20)$$

Компоненти тензора механічного напруження в радіальному напрямку, у свою чергу, пов'язані з компонентами тензора деформації.

$$\sigma_{rr}^{(i)} = \frac{E^{(i)}}{(1+\nu^{(i)})(1-2\nu^{(i)})} \left[(1+\nu^{(i)}) \tilde{\gamma}_{rr}^{(i)} + \nu^{(i)} (\tilde{\gamma}_{\varphi\varphi}^{(i)} + \tilde{\gamma}_{\theta\theta}^{(i)}) \right], \quad (2.21)$$

де E, ν – модуль Юнга та коефіцієнт Пуассона відповідно, $i=1$ (InAs), 2 (GaAs). А сума діагональних елементів тензора деформації $\tilde{\gamma}^{(i)}$ помножена на параметр гідростатичного деформаційного потенціалу b валентної зони дає потенціальну енергію зміщення валентної зони

$$\Delta V^{(i)} = b^{(i)} \gamma^{(i)} = b^{(i)} \operatorname{Sp}(\tilde{\gamma}^{(i)}). \quad (2.22)$$

Отже, знаходимо

$$\gamma^{(1)} = \operatorname{Sp}(\tilde{\gamma}^{(1)}) = 3C_1, \quad (2.23)$$

$$\gamma^{(2)} = \operatorname{Sp}(\tilde{\gamma}^{(2)}) = 3C_3. \quad (2.24)$$

Для однозначного визначення потенціальної енергії, що зумовлена деформацією, визначено коефіцієнти C_1, C_3 з граничних умов для зміщень і механічних напружень [65-68]:

$$\begin{cases} 4/3 \pi r_0^2 (u_r^{(2)}|_{r=a} - u_r^{(1)}|_{r=a}) = 4/3 \pi a^3 f, \\ \sigma_{rr}^{(1)}|_{r=a} = \sigma_{rr}^{(2)}|_{r=a} + P_l, \quad P_l = \frac{2\alpha}{a}, \\ \sigma_{rr}^{(2)}|_{r=R_0} = -\sigma_{ef}(N-1), \end{cases} \quad (2.25)$$

де перше рівняння — це геометрична різниця об'ємів сферичного включення і порожнини, u_r – радіальне зміщення, f – параметр неузгодженості сталих ґраток матеріалів КТ і матриці:

$$f = \frac{a^{\text{InAs}} - a^{\text{GaAs}}}{a^{\text{InAs}}} \approx 7\% ,$$

P_l – тиск Лапласа, α – поверхнева енергія КТ, σ_{ef} – усереднене поле пружних деформацій [65-68].

Отже, з рівнянь (2.25) знайдено коефіцієнти C_1, C_3 , а значить і визначено $\gamma^{(1)}, \gamma^{(2)}$ та відповідно і величину зміщення зон $\Delta V_j^{(j)} = b_j^{(j)} \gamma^{(i)}$. Тому, додаткова потенціальна енергія дірки, що зумовлена деформацією на межі КТ-матриця визначається так:

$$V_d(r) = \begin{cases} 0 & r \leq a, \\ V_{0,d} & r > a, \end{cases} \quad (2.26)$$

де

$$V_{0,d} = -|b_j^{(1)} \gamma^{(1)}| - |b_j^{(2)} \gamma^{(2)}| ,$$

а $\gamma^{(i)}$ визначається з формул (2.23)-(2.24) і не залежить від радіус-вектора.

Отже, знайдено усі доданки гамільтоніана для дірки (2.6). Щоб розв'язати рівняння Шредінгера з гамільтоніаном (2.6) розв'язки подано у вигляді шестикомпонентних функцій для парних і непарних станів [45, 69, 70]:

$$\psi_f^+ = \begin{pmatrix} \frac{R_{h2}^+}{\sqrt{2f(2f-1)(2f-2)}} \Phi_{f-3/2}^{(4)} + \frac{R_{h1}^+}{\sqrt{2f(2f+2)(2f+3)}} \Phi_{f+1/2}^{(4)} \\ R_s^+ \Phi_{f+1/2}^{(2)} \end{pmatrix}, \quad (2.27)$$

$$\psi_f^- = \begin{pmatrix} \frac{R_{h2}^-}{\sqrt{2(f+1)(2f+3)(2f+4)}} \Phi_{f+3/2}^{(4)} + \frac{R_{h1}^-}{\sqrt{2f(2f-1)(2f+2)}} \Phi_{f-1/2}^{(4)} \\ R_s^- \Phi_{f-1/2}^{(2)} \end{pmatrix},$$

де

$$\Phi_{f-3/2}^{(4)} = \begin{pmatrix} -\sqrt{(f+M)(f+M-1)(f+M-2)} Y_{f-3/2, M-3/2} \\ i\sqrt{3(f-M)(f+M-1)(f+M)} Y_{f-3/2, M-1/2} \\ \sqrt{3(f+M)(f-M)(f-M-1)} Y_{f-3/2, M+1/2} \\ i\sqrt{(f-M)(f-M-1)(f-M-2)} Y_{f-3/2, M+3/2} \end{pmatrix}, \quad (2.28)$$

$$\Phi_{f-1/2}^{(4)} = \begin{pmatrix} \sqrt{3(f+M)(f-M+1)(f+M-1)} Y_{f-1/2, M-3/2} \\ i(f-3M+1)\sqrt{f+M} Y_{f-1/2, M-1/2} \\ (f+3M+1)\sqrt{f-M} Y_{f-1/2, M+1/2} \\ i\sqrt{3(f+M+1)(f-M)(f-M-1)} Y_{f-1/2, M+3/2} \end{pmatrix}, \quad (2.29)$$

$$\Phi_{f+1/2}^{(4)} = \begin{pmatrix} \sqrt{3(f+M)(f-M+1)(f-M+2)} Y_{f+1/2, M-3/2} \\ i(f+3M)\sqrt{f-M+1} Y_{f+1/2, M-1/2} \\ (f-3M)\sqrt{f+M+1} Y_{f+1/2, M+1/2} \\ i\sqrt{3(f-M)(f+M+1)(f+M+2)} Y_{f+1/2, M+3/2} \end{pmatrix}, \quad (2.30)$$

$$\Phi_{f+3/2}^{(4)} = \begin{pmatrix} -\sqrt{(f-M+1)(f-M+2)(f-M+3)} Y_{f+3/2, M-3/2} \\ -i\sqrt{3(f+M+1)(f-M+2)(f-M+1)} Y_{f+3/2, M-1/2} \\ \sqrt{3(f-M+1)(f+M+1)(f+M+2)} Y_{f+3/2, M+1/2} \\ -i\sqrt{(f+M+1)(f+M+2)(f+M+3)} Y_{f+3/2, M+3/2} \end{pmatrix} \quad (2.31)$$

– чотирикомпонентні сферичні спінори, а

$$\Phi_{f-1/2}^{(2)} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{(f+M)}{2f}} Y_{f-1/2, M-1/2} \\ i\sqrt{\frac{f-M}{2f}} Y_{f-1/2, M+1/2} \end{pmatrix}, \quad (2.32)$$

$$\Phi_{f+1/2}^{(2)} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{f-M+1}{2(f+1)}} Y_{f+1/2, M-1/2} \\ i\sqrt{\frac{f+M+1}{2(f+1)}} Y_{f+1/2, M+1/2} \end{pmatrix} \quad (2.33)$$

– двокомпонентні сферичні спінори. Квантове число f відповідає за повний момент імпульсу: $\hbar^2 f(f+1)$ – власне значення оператора $\vec{F} = \vec{L} + \vec{J}$, $\hbar M$ – власне значення оператора \hat{F}_z , \vec{L} – оператор, що описує макроскопічний рух дірки, що описується методом ефективної маси, а \vec{J} – оператор спіну дірки $j=3/2$. Тут вжито термін „спін“ для того, щоб використати математичний апарат квантової механіки для опису дірки. Насправді цей спін пов'язаний з орбітальним розщепленням атомних рівнів, що утворюють валентну зону. Відповідно власні

значення \hat{L}^2 будуть $\hbar^2 l(l+1)$, а проєкції $\hat{L}_z - \hbar m_l$. Власні значення ж квадрату спінового моменту та його проєкції такі: $\hbar^2 j(j+1)$ та $\hbar m_j$ відповідно. Сферично-симетричний гамільтоніан (2.6) комує з оператором повного моменту імпульсу $\vec{\hat{F}} = \vec{\hat{L}} + \vec{\hat{J}}$ і саме тому розв'язки можна подати у формі (2.27).

Після підстановки функцій (2.27) у рівняння Шредінгера з гамільтоніаном (2.6) отримано систему рівнянь для парних і непарних станів відповідно:

$$\begin{aligned} & -\left(\frac{Y_1}{2} - \frac{Y}{2} \frac{2f-3}{2f}\right) (\Delta_{f+1/2} R_{h1}^+) - \gamma \frac{\sqrt{3(2f-1)(2f+3)}}{4f} (\hat{A}_{f-3/2}^+ R_{h2}^+) - \frac{Y}{2} \sqrt{\frac{2f+3}{f}} (\Delta_{f+1/2} R_s^+) - \tilde{E} R_{h1}^+ = 0, \\ & -\left(\frac{Y_1}{2} + \frac{Y}{2} \frac{2f-3}{2f}\right) (\Delta_{f-3/2} R_{h2}^+) - \gamma \frac{\sqrt{3(2f-1)(2f+3)}}{4f} (\hat{A}_{f+1/2}^- R_{h1}^+) - \frac{Y}{2} \sqrt{\frac{(2f-1)3}{f}} (\hat{A}_{f+1/2}^- R_s^+) - \tilde{E} R_{h2}^+ = 0, \\ & -\frac{Y}{2} \sqrt{\frac{2f+3}{f}} (\Delta_{f+1/2} R_{h1}^+) - \frac{Y}{2} \sqrt{\frac{3(2f-1)}{f}} (\hat{A}_{f-3/2}^+ R_{h2}^+) - \frac{Y_1}{2} (\Delta_{f+1/2} R_s^+) - (\tilde{E} - \delta) R_s^+ = 0, \end{aligned} \quad (2.34)$$

$$\begin{aligned} & -\left(\frac{Y_1}{2} - \frac{Y}{2} \frac{2f+5}{2(f+1)}\right) (\Delta_{f-1/2} R_{h1}^-) + \gamma \frac{\sqrt{3(2f-1)(2f+3)}}{4(f+1)} (\hat{A}_{f+3/2}^- R_{h2}^-) + \frac{Y}{2} \sqrt{\frac{2f-1}{f+1}} (\Delta_{f-1/2} R_s^-) - \tilde{E} R_{h1}^- = 0, \\ & -\left(\frac{Y_1}{2} + \frac{Y}{2} \frac{2f+5}{2(f+1)}\right) (\Delta_{f+3/2} R_{h2}^-) + \gamma \frac{\sqrt{3(2f-1)(2f+3)}}{4(f+1)} (\hat{A}_{f-1/2}^+ R_{h1}^-) - \frac{Y}{2} \sqrt{\frac{3(2f+3)}{f+1}} (\hat{A}_{f-1/2}^+ R_s^-) - \tilde{E} R_{h2}^- = 0, \\ & \frac{Y}{2} \sqrt{\frac{2f-1}{f+1}} (\Delta_{f-1/2} R_{h1}^-) - \frac{Y}{2} \sqrt{\frac{3(2f+3)}{f+1}} (\hat{A}_{f+3/2}^- R_{h2}^-) - \frac{Y_1}{2} (\Delta_{f-1/2} R_s^-) - (\tilde{E} - \delta) R_s^- = 0, \end{aligned} \quad (2.35)$$

де

$$\begin{aligned} \Delta_l &= \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2}, \\ \hat{A}_l^- &= \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2l+1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{l^2-1}{r^2}, \\ \hat{A}_l^+ &= \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{2l-1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{l(l-2)}{r^2}, \\ \tilde{E} &= \frac{E - U_{conf}(r) - V_p(r) - V_d(r)}{(\hbar^2/m_h a^2)}, \quad \delta = \frac{\Delta_{so}}{(\hbar^2/m_h a^2)}. \end{aligned}$$

Якщо у гамільтоніані (2.6) і відповідно у \tilde{E} відкинути доданок $V_p(r)$ (що відповідає за поляризаційну взаємодію), то рівняння (2.34) і (2.35)

розв'язуються точно в КТ і матриці. У КТ ці розв'язки можна подати за допомогою функцій Бесселя першого роду для парних станів:

$$R_{h1}^{f+}(r) = c_1 J_{f+1/2}(k_l r) + c_2 J_{f+1/2}(k_h r) + c_3 J_{f+1/2}(k_s r), \quad (2.36)$$

$$R_{h2}^{f+}(r) = -c_1 \sqrt{3 \frac{2f-1}{2f+3}} J_{f-3/2}(k_l r) + c_2 \sqrt{\frac{2f+3}{3(2f-1)}} J_{f-3/2}(k_h r) - c_3 \sqrt{3 \frac{2f-1}{2f+3}} J_{f+3/2}(k_s r), \quad (2.37)$$

$$R_s^{f+}(r) = c_1 \sqrt{\frac{f}{(2f+3)}} \frac{2\tilde{E} - (\gamma_1 + 2\gamma)k_l^2}{\gamma k_l^2} J_{f+1/2}(k_l r) + c_3 \sqrt{\frac{j}{(2f+3)}} \frac{2\tilde{E} - (\gamma_1 + 2\gamma)k_s^2}{\gamma k_s^2} J_{f+1/2}(k_s r), \quad (2.38)$$

а для непарних

$$R_{h1}^{f-}(r) = c_4 \sqrt{2f-1} J_{f-1/2}(k_l r) + c_5 \sqrt{2f-1} J_{f-1/2}(k_h r) + c_6 \sqrt{2f-1} J_{f-1/2}(k_s r), \quad (2.39)$$

$$R_{h2}^{f-}(r) = c_4 \sqrt{3(2f+3)} J_{f+3/2}(k_l r) - c_5 \sqrt{\frac{2f-1}{3(2f+3)}} J_{f+3/2}(k_h r) + c_6 \sqrt{3(2f+3)} J_{f+3/2}(k_s r), \quad (2.40)$$

$$R_s^{f-}(r) = c_4 \sqrt{f+1} \frac{(\gamma_1 + 2\gamma)k_l^2 - 2\tilde{E}}{\gamma k_l^2} J_{f-1/2}(k_l r) + c_6 \sqrt{f+1} \frac{(\gamma_1 + 2\gamma)k_s^2 - 2\tilde{E}}{\gamma k_s^2} J_{f-1/2}(k_s r), \quad (2.41)$$

де

$$k_h^2 = \frac{2\tilde{E}}{(\gamma_1 - 2\gamma)},$$

$$k_{l,s}^2 = \frac{2\tilde{E}(\gamma_1 + \gamma) - \delta(\gamma_1 + 2\gamma) \pm \sqrt{[2\tilde{E}(\gamma_1 + \gamma) - \delta(\gamma_1 + 2\gamma)]^2 - 4\tilde{E}(\tilde{E} - \delta)(\gamma_1 - 2\gamma)(\gamma_1 + 4\gamma)}}{(\gamma_1 - 2\gamma)(\gamma_1 + 4\gamma)}. \quad (2.42)$$

У матриці аналогічні розв'язки можна подати за допомогою модифікованих функцій Бесселя другого роду. Для парних станів:

$$R_{h1}^{f+}(r) = b_1 K_{f+1/2}(k_l r) + b_2 K_{f+1/2}(k_h r) + b_3 K_{f+1/2}(k_s r), \quad (2.43)$$

$$R_{h2}^{f+}(r) = -b_1 \sqrt{3 \frac{2f-1}{2f+3}} K_{f-3/2}(k_l r) + b_2 \sqrt{\frac{2f+3}{3(2f-1)}} K_{f-3/2}(k_h r) - b_3 \sqrt{3 \frac{2f-1}{2f+3}} K_{f+3/2}(k_s r), \quad (2.44)$$

$$R_s^{f+}(r) = b_1 \sqrt{\frac{f}{2f+3}} \sqrt{\frac{2\tilde{E} - (\gamma_1 + 2\gamma)k_l^2}{\gamma k_l^2}} K_{f+1/2}(k_l r) + b_3 \sqrt{\frac{f}{2f+3}} \sqrt{\frac{2\tilde{E} - (\gamma_1 + 2\gamma)k_s^2}{\gamma k_s^2}} K_{f+1/2}(k_s r). \quad (2.45)$$

А для непарних:

$$R_{h1}^{f-}(r) = b_4 \sqrt{2f-1} K_{f-1/2}(k_l r) + b_5 \sqrt{2f-1} K_{f-1/2}(k_h r) + b_6 \sqrt{2f-1} K_{f-1/2}(k_s r), \quad (2.46)$$

$$R_{h2}^{f-}(r) = b_4 \sqrt{3(2f+3)} K_{f+3/2}(k_l r) - b_5 \sqrt{\frac{2f-1}{3(2f+3)}} K_{f+3/2}(k_h r) + b_6 \sqrt{3(2f+3)} K_{f+3/2}(k_s r), \quad (2.47)$$

$$R_s^{f-}(r) = b_4 \sqrt{f+1} \frac{(\gamma_1 + 2\gamma)k_l^2 - 2\tilde{E}}{\gamma k_l^2} K_{f-1/2}(k_l r) + b_6 \sqrt{f+1} \frac{(\gamma_1 + 2\gamma)k_s^2 - 2\tilde{E}}{\gamma k_s^2} K_{f-1/2}(k_s r) \quad (2.48)$$

Для зручності розв'язки записано у матричні форми

$$R^{(p)} = \begin{pmatrix} R_{h1}^{f,(p)}(r) \\ R_{h2}^{f,(p)}(r) \\ R_s^{f,(p)}(r) \end{pmatrix}, \quad (2.49)$$

де $p = +$ або $p = -$ для парних і непарних станів відповідно.

Для знаходження енергії дірки та невідомих коефіцієнтів у радіальних хвильових функціях використано умови неперервності самої хвильової функції та потоку густини ймовірності [50, 51]:

$$R^{(p),(I)}(r)|_{r=a} = R^{(p),(II)}(r)|_{r=a}, \quad (2.50)$$

$$\hat{T}^{(p),(I)} R^{(p),(I)}(r)|_{r=a} = \hat{T}^{(p),(II)} R^{(p),(II)}(r)|_{r=a}, \quad (2.51)$$

де матриця \hat{T} має вигляд:

$$\hat{T}^{(p)} = \begin{pmatrix} \gamma_1 \frac{\partial}{\partial r} - c_f^p \gamma \hat{D}_r + u_{-8}^{f,p} \frac{\chi}{r} & p a_f^p b_f^p \gamma \hat{A}_{f-3p/2}^{(p)} & p \sqrt{2} a_f^p (\gamma \hat{D}_r + u_1^{f,p} \frac{\chi}{r}) \\ -p a_f^p b_f^p \gamma \hat{A}_{f+p/2}^{(-p)} & \gamma_1 \frac{\partial}{\partial r} + c_f^p \gamma \hat{D}_r - 3 u_4^{f,p} \frac{\chi}{r} & -\sqrt{2} a_f^p \gamma \hat{A}_{f+p/2}^{(-p)} \\ p \sqrt{2} a_f^p (\gamma \hat{D}_r + u_1^{f,p} \frac{\chi}{r}) & \sqrt{2} a_f^p \gamma \hat{A}_{f-3p/2}^{(p)} & \gamma_1 \frac{\partial}{\partial r} + 2 u_{-2}^{f,p} \frac{\chi}{r} \end{pmatrix}, \quad (2.52)$$

де

$$\begin{aligned} \hat{D}_r &= \frac{\partial}{\partial r} + \frac{3/2}{r}, \\ u_n^{f,p} &= p \left(f + \frac{1}{2} - \frac{np}{2} \right), \\ \chi &= (5\gamma - \gamma_1 - 1)/3, \\ a_f^p &= \sqrt{1 + 3\eta_f^p}, \\ b_f^p &= \sqrt{3(1 - \eta_f^p)}, \\ \eta_f^p &= p/(2f + 1 - p). \end{aligned}$$

Таким чином, застосовуючи граничні умови (2.50) і (2.51), отримано систему рівнянь відносно коефіцієнтів, з якої знайдено енергію дірки. Доповнюючи граничні умови умовою нормування, знайдено також усі невідомі коефіцієнти.

До цього моменту рівняння Шредінгера з гамільтоніаном (2.6) розв'язувалося точно (за умови нехтування поляризаційними зарядами). Як відомо з інших робіт [53, 54, 64, 71, 72] вплив поляризаційних зарядів є малим, особливо коли діелектричні проникності матеріалів близькі за значеннями. Тому потенціал $V_p(r)$ враховано у першому порядку теорії збурень.

Безпосередні обчислення проведено у параграфі 2.3.

2.2. Теорія діркового спектру сферичної квантової точки в моделі 4x4

Якщо припустити, що величина спіно-орбітальної взаємодії у матеріалах, що утворюють гетеросистему, є великою, то впливом спіно-відщепленої зони можна знехтувати при обчисленні діркових станів. У такому випадку у гамільтоніані (2.4) слід відкинути два останні рядки і стовпці. У результаті отримуємо гамільтоніан 4x4:

$$\hat{H}_{4 \times 4} = \begin{pmatrix} -(\hat{P} + \hat{Q}) & -\hat{L} & -\hat{M} & 0 \\ -\hat{L}^* & -(\hat{P} - \hat{Q}) & 0 & -\hat{M} \\ -\hat{M}^* & 0 & -(\hat{P} - \hat{Q}) & \hat{L} \\ 0 & -\hat{M}^* & \hat{L}^* & -(\hat{P} + \hat{Q}) \end{pmatrix}, \quad (2.53)$$

який зручно записати в компактному вигляді з використанням матриць \vec{J} спінового моменту дірки $j=3/2$:

$$\hat{H}_{4 \times 4} = \frac{1}{2} (\gamma_1 + 5/2 \gamma) \hat{p}^2 - \gamma (\vec{\hat{p}} \cdot \vec{\hat{J}}). \quad (2.54)$$

Отже, гамільтоніан дірки у сферичній КТ у раках моделі 4x4 набуде вигляду:

$$\hat{H} = \hat{H}_{4 \times 4} + U_{conf}(r) + V_p(r) + V_d(r). \quad (2.55)$$

Хвильову функцію, яка буде розв'язком рівняння Шредінгера з гамільтоніаном (2.55), подано у загальному вигляді:

$$\psi_{f,M;n}^{(0)}(r, \theta, \varphi) = \sqrt{2f+1} \sum_{l=|f-j|}^{f+j} (-1)^{l-j+M} R_l^f(r) \sum_{m_l} \sum_{m_j} \begin{pmatrix} l & j & f \\ m_l & m_j & -M \end{pmatrix} Y_l^{m_l}(\theta, \varphi) \chi_{m_j}, \quad (2.56)$$

де χ_{m_j} – спінові функції, а $\begin{pmatrix} l & j & f \\ m_l & m_j & -M \end{pmatrix}$ – 3j-символи. Структура функції (2.56)

дає змогу розділити її на три функції для трьох різних типів станів [47-49, 62]:

$$\begin{cases} \psi_{f,M}^{I\text{-type}} = R_f^{f-3/2}(r) \Phi_{f,M}^{f-3/2}(\theta, \varphi) + R_f^{f+1/2}(r) \Phi_{f,M}^{f+1/2}(\theta, \varphi), & f \geq 3/2, (l=f-3/2, f+1/2), \\ \psi_{f,M}^{II\text{-type}} = R_f^{f-1/2}(r) \Phi_{f,M}^{f-1/2}(\theta, \varphi) + R_f^{f+3/2}(r) \Phi_{f,M}^{f+3/2}(\theta, \varphi), & f \geq 3/2, (l=f-1/2, f+3/2), \\ \psi_{f,M}^{III\text{-type}} = R_{1/2}^l(r) \Phi_{1/2,M}^l(\theta, \varphi), & f = 1/2, (l=1, 2). \end{cases} \quad (2.57)$$

Підстановка (2.57) у рівняння Шредінгера з гамільтоніаном (2.54) дає змогу отримати три групи радіальних рівнянь. Радіальні рівняння для I та II групи станів можна записати разом [62]:

$$\frac{\hbar}{2} Y_1 \begin{pmatrix} -(1+C_1)\Delta_l & C_2 \hat{B}_{l+1}^- \hat{B}_{l+2}^- \\ C_2 \hat{B}_{l+1}^+ \hat{B}_l^+ & -(1+C_3)\Delta_{l+2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R_2^i(r) \\ R_1^i(r) \end{pmatrix} + (U_{conf}(r) + V_p(r) + V_d(r) - E) \begin{pmatrix} R_2^i(r) \\ R_1^i(r) \end{pmatrix} = 0, \quad (2.58)$$

де $i = \text{I-type}$ або II-type , $R_1^i = \{R_f^{f+1/2}, R_f^{f+3/2}\}$, $R_2^i = \{R_f^{f-3/2}, R_f^{f-1/2}\}$ відповідно, а оператори

$$\hat{B}_l^+ = -\frac{\partial}{\partial r} + \frac{l}{r}, \quad \hat{B}_l^- = \frac{\partial}{\partial r} + \frac{l+1}{r}, \quad \Delta_l = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2}.$$

Коефіцієнти виражаються через 6j-символи

$$C_1 = C_1(f, l) = \mu \sqrt{5} (-1)^{3/2+l+f} \begin{Bmatrix} l & l & 2 \\ 3/2 & 3/2 & f \end{Bmatrix} \sqrt{\frac{2l(2l+1)(2l+2)}{(2l+3)(2l-1)}},$$

$$C_2 = C_2(f, l) = \mu \sqrt{30} (-1)^{3/2+l+f} \begin{Bmatrix} l+2 & l & 2 \\ 3/2 & 3/2 & f \end{Bmatrix} \sqrt{\frac{(l+1)(l+2)}{2l+3}},$$

$$C_3 = -C_1, \quad (C_1)^2 + (C_2)^2 = \mu^2, \quad C_2/\mu > 0, \quad \mu = \frac{2\gamma}{Y_1}.$$

Для типу станів III отримано лише одне рівняння:

$$-\frac{\hbar}{2} (1+\mu) \Delta_l R_{1/2}^l + (U_{conf}(r) + V_p(r) + V_d(r)) R_{1/2}^l = E R_{1/2}^l. \quad (2.59)$$

Якщо знехтувати потенціалом поляризації, тоді розв'язки рівняння (2.58) запишуться у вигляді [72]:

$$R_2^{i(I)}(r) = A_1^{(I)} \frac{(C_1-1) J_{l+1/2}(k_{hh}^{(I)} r)}{C_2 \sqrt{r}} + A_2^{(I)} \frac{(C_1+1) J_{l+1/2}(k_{lh}^{(I)} r)}{C_2 \sqrt{r}}, \quad (2.60)$$

$$R_1^{i(I)}(r) = A_1^{(I)} \frac{J_{l+5/2}(k_{hh}^{(I)} r)}{\sqrt{r}} + A_2^{(I)} \frac{J_{l+5/2}(k_{lh}^{(I)} r)}{\sqrt{r}} \quad (2.61)$$

у КТ. У матриці радіальні рівняння мають такий розв'язок [72]:

$$R_2^{i(II)}(r) = A_1^{(II)} \frac{(-C_1+1) K_{l+1/2}(k_{hh}^{(II)} r)}{C_2 \sqrt{r}} + A_2^{(II)} \frac{-(C_1+1) K_{l+1/2}(k_{lh}^{(II)} r)}{C_2 \sqrt{r}}, \quad (2.62)$$

$$R_1^{i,(II)}(r) = A_1^{(II)} \frac{K_{l+5/2}(k_{hh}^{(II)} r)}{\sqrt{r}} + A_2^{(II)} \frac{K_{l+5/2}(k_{lh}^{(II)} r)}{\sqrt{r}}, \quad (2.63)$$

де

$$k_{hh}^{(I)} = \sqrt{2m_{hh}^{(I)} E / \hbar^2}, \quad k_{lh}^{(I)} = \sqrt{2m_{lh}^{(I)} E / \hbar^2}.$$

У випадку нехтування електрон-деформаційним потенціалом

$$k_{hh}^{(II)} = \sqrt{2m_{hh}^{(II)}(U_0 - E) / \hbar^2}, \quad k_{lh}^{(II)} = \sqrt{2m_{lh}^{(II)}(U_0 - E) / \hbar^2},$$

а за умови його врахування

$$k_{hh}^{(II)} = \sqrt{2m_{hh}^{(II)}(U_0 + V_{0,d} - E) / \hbar^2}, \quad k_{lh}^{(II)} = \sqrt{2m_{lh}^{(II)}(U_0 + V_{0,d} - E) / \hbar^2}.$$

Використовуючи граничні умови [61] до розв'язків (2.60)-(2.63), отримано дисперсійне рівняння, з якого можна визначити енергію дірки.

Маючи точні розв'язки, які враховують електрон-деформаційний потенціал, визначено також і вплив поляризаційного потенціалу самодії у першому порядку теорії збурень:

$$E_p = \langle \psi_{f,M}^{i-type} | V_p(r) | \psi_{f,M}^{i-type} \rangle. \quad (2.64)$$

Враховуючи те, що спінори, які входять в (2.57), ортогональні, і центрально-симетричний характер потенціалу самодії $V_p(r)$, вираз (2.64) набуде вигляду:

$$E_p = \int_0^\infty dr r^2 (|R_1^i(r)|^2 + |R_2^i(r)|^2) V_p(r). \quad (2.65)$$

Таким чином у рамках моделі валентної зони 4x4 можна визначити енергію дірки з врахуванням і нехтуванням як поляризаційних зарядів, так і деформації на поверхні КТ-матриця. Числові розрахунки проведено у наступному параграфі.

2.3. Розрахунок енергетичного спектру дірки у сферичній квантовій точці та порівняння результатів різних моделей

Для розрахунку енергетичних спектрів дірки у різних моделях валентної зони з врахуванням взаємодії з поляризаційними зарядами та деформацією на гетеромежі КТ-матриця вибрано КТ InAs/GaAs. Для цієї гетеросистеми характерне значене неузгодження сталих ґратки та діелектричних проникностей середовищ. Зокрема [73],

$$\begin{aligned}
 b_e^{(\text{InAs})} &= -5.08 \text{ eV}, & b_h^{(\text{InAs})} &= 1 \text{ eV}, \\
 b_e^{(\text{GaAs})} &= -7.17 \text{ eV}, & b_h^{(\text{GaAs})} &= 1.16 \text{ eV}, \\
 \varepsilon_1 &= 15.15, & \varepsilon_2 &= 12.9, \\
 m_e^{(1)} &= 0.023 m_e, & m_e^{(2)} &= 0.063 m_e, \\
 m_{hh}^{(1)} &= 0.41 m_e, & m_{hh}^{(2)} &= 0.51 m_e, \\
 m_{lh}^{(1)} &= 0.026 m_e, & m_{lh}^{(2)} &= 0.082 m_e, \\
 U_{0;e} &= 830 \text{ meV}, & U_{0;h} &= 262 \text{ meV}.
 \end{aligned}$$

Ефективні маси важкої та легкої дірки пов'язані з параметрами Латтінджера співвідношеннями:

$$m_{hh} = \frac{m_e}{\gamma_1 - 2\gamma}, \quad m_{lh} = \frac{m_e}{\gamma_1 + 2\gamma}.$$

Для зручності у всіх обчисленнях вісь відліку енергії дірки спрямована «вниз», тобто максимум зони валентної переходить у мінімум.

Для визначення впливу потенціалів поляризації та деформації розглянуто модель валентної зони з гамільтоніаном 6x6. Розрахунок виконано для енергії основного стану дірки як функції радіуса КТ (рисунок 2.1). З графіка залежності видно, що врахування впливу лише поляризаційних зарядів збільшує енергію дірки (крива 2), тоді як врахування лише деформації на гетеромежі КТ-матриця, її зменшує (крива 3). Оскільки ці ефекти дають внески

до енергії з протилежними знаками, то їхній сумарний вплив частково компенсує один одного. У цьому випадку енергія дірки описується кривою 4.

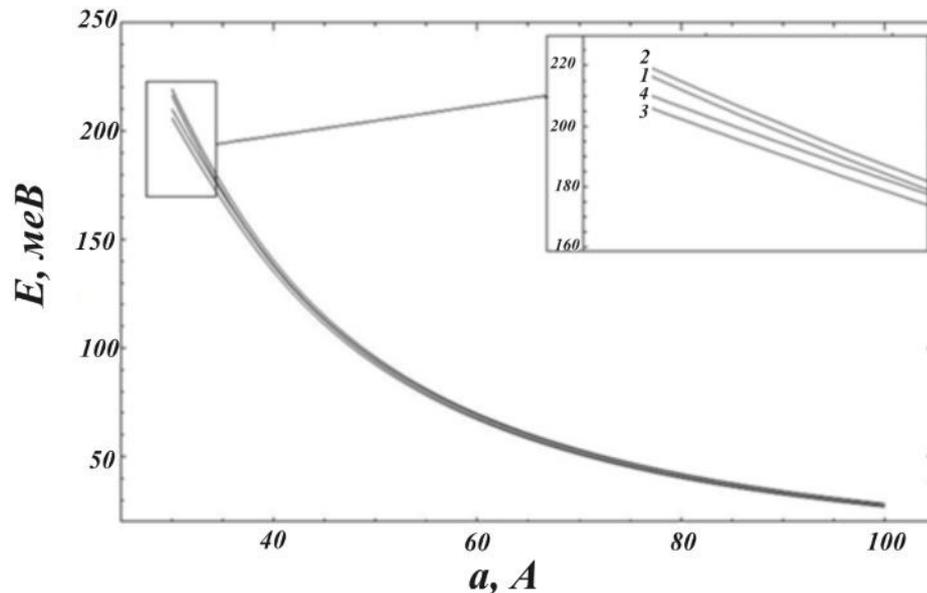


Рисунок 2.1. Залежності енергії дірки в основному стану від радіуса КТ InAs/GaAs в моделі 6x6: 1 – без урахування ефектів поляризації та деформації; 2 – з урахуванням лише поляризаційних зарядів; 3 – з урахуванням лише деформації; 4 – з урахуванням як поляризації, так і деформації.

Загалом сумарний вплив залишається, але при збільшенні радіуса КТ більше 36 Å відбувається майже повна компенсація впливу поляризаційного потенціалу та потенціалу деформації.

Аналогічні обчислення проведено у моделі 4x4 (коли вплив спин-відщепленої зони нехтується). Результати подано на рисунку 2.2. Як і в попередній моделі 6x6 вплив поляризації і деформації компенсуються, однак повна компенсація спостерігається для дещо більших радіусів КТ (більше 45 Å). Для менших розмірів загалом сумарний вплив залишається, але є досить малим. Наприклад, для радіуса КТ 30 Å, різниця між випадком неврахування поляризації і деформації та випадком їхнього врахування становить 4 меВ. Для моделі 6x6 при цих самих розмірах відповідна різниця складає 8 меВ.

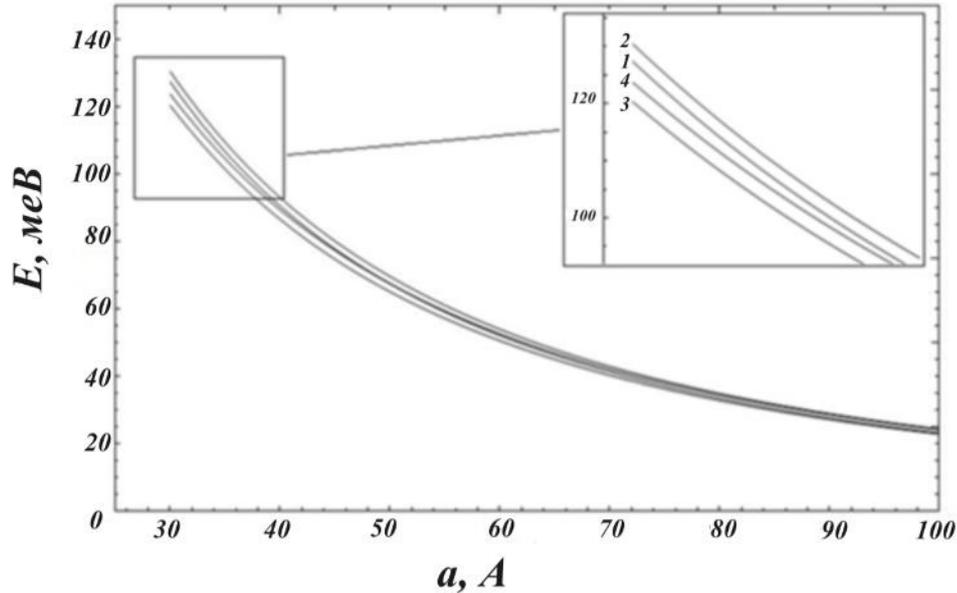


Рисунок 2.2. Залежність енергії дірки в основному стані від радіуса КТ InAs/GaAs в 4x4 наближенні моделі валентної зони: 1 – без урахування ефектів поляризації та деформації; 2 – з урахуванням лише поляризаційних зарядів; 3 – з урахуванням лише деформації; 4 – з урахуванням як поляризації, так і деформації.

Якщо ж у моделі 4x4 прийняти, що важка і легка дірки мають однакову масу, яка дорівнює масі важкої дірки, тоді отримуються результати, що і у випадку простої структури валентної зони, яка описується параболічним законом дисперсії. Відповідні результати обчислень подано на рисунку 2.3. Тут відмінність результатів зумовлена тим, що енергія дірки є меншою. А також тим, що сумарний ефект поляризації та деформації збільшує енергію дірки. Тоді як у багатозонних моделях енергія дірки (за умови врахування сумарного ефекту поляризації і деформації) зменшувалася. Однак різниця між випадками врахування і нехтування ефектами поляризації та деформації і їхнім врахуванням становить 3 меВ і монотонно зменшується при зростанні радіуса КТ.

Таким чином, у всіх моделях валентної зони ефекти поляризації та деформації частково компенсуються для більшості радіусів КТ InAs/GaAs. В областях, де є неповна компенсація сумарний їхній вплив не перевищує 10 меВ.

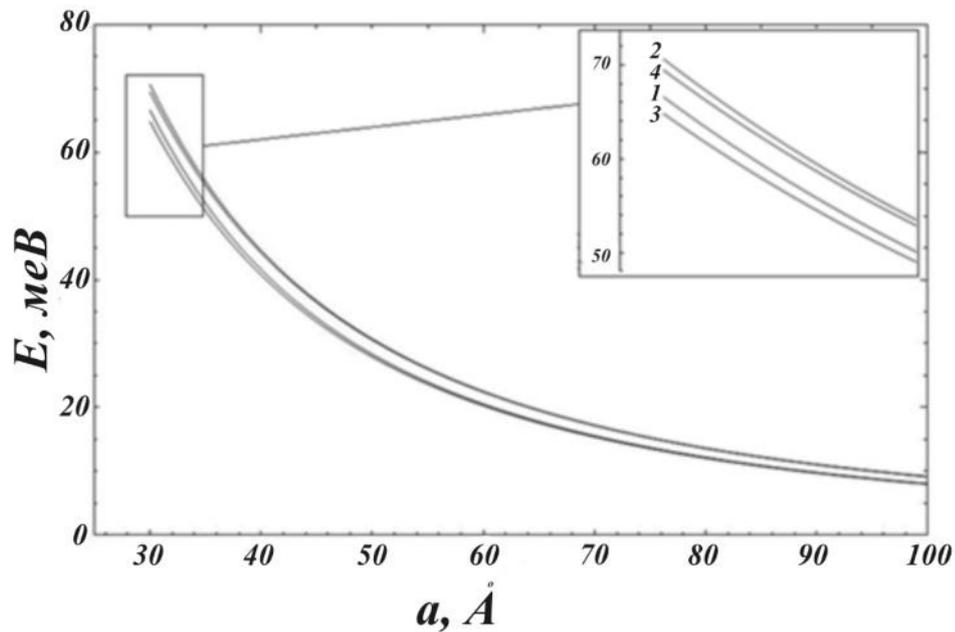


Рисунок 2.3. Залежність енергії важкої дірки в основному стані від радіуса КТ InAs/GaAs в наближенні однозонної моделі валентної зони: 1 – без урахування ефектів поляризації та деформації; 2 – з урахуванням лише поляризаційних зарядів; 3 – з урахуванням лише деформації; 4 – з урахуванням як поляризації, так і деформації.

Окрім діркових станів, було проведено також обчислення енергетичного спектра електрона в основному стані. Це може дати змогу сформувати повну картину зонної структури КТ та правильно визначати ефективну оптичну щільність. Тому на рисунку 2.4 подано залежність енергії електрона в основному стані від радіуса КТ. Як і для дірки потенціал поляризації збільшує енергію електрона, а деформація на межі КТ-матриця її зменшує. Однак тут ефекти, що пов'язані з деформацією є більшими, ніж з поляризацією порівняно з дірковими станами в однозонній моделі, що узгоджується також з результатами роботи [72]. Сумарний внесок обидвох впливів зумовлює відмінність енергії електрона

від випадку не врахування їх. Наприклад, для радіуса КТ 30 Å ця різниця становить 44 меВ і при зростанні радіуса КТ InAs/GaAs монотонно спадає. Зокрема при радіусі КТ 50 Å ця різниця вже у два рази менша (22 меВ). Для радіусів КТ більших 50 Å ця різниця прямує до нуля. Хоча у цифрових значеннях сумарний внесок ефектів поляризації та деформації в енергію електрона в основному стані становить 44 меВ (для радіуса КТ 30 Å), однак у відсотковому значенні відносно енергії становить 9%, а для КТ радіусом 50 Å — 8%. Ці значні відсоткові значення пов'язані з значеннями гідростатичними константами деформаційного потенціалу для електрона $b_e^{(\text{InAs})} = -5.08$ і $b_e^{(\text{GaAs})} = -7.17$. Для дірки ці значення близькі, що зменшує відповідні різниці.

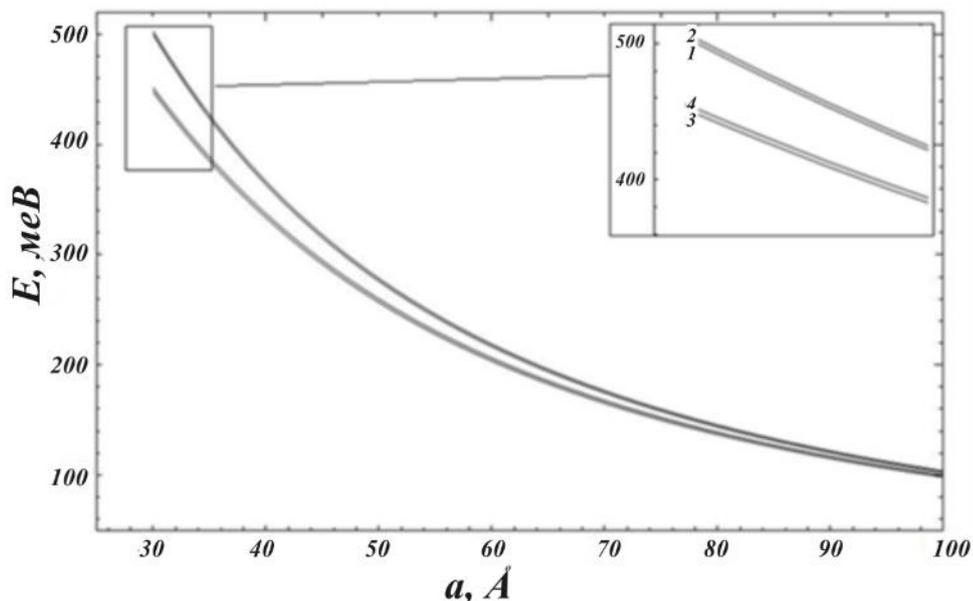


Рисунок 2.4. Залежність енергії основного стану електрона від радіуса КТ InAs/GaAs: 1 – без урахування ефектів поляризації та деформації; 2 – з урахуванням лише поляризаційних зарядів; 3 – з урахуванням лише деформації; 4 – з урахуванням як поляризації, так і деформації.

Провівши обчислення енергій основного стану електрона і дірки у різних моделях валентної зони, було проведено порівняння результатів цих моделей (рисунок 2.5) без врахування поляризаційних та деформаційних ефектів.

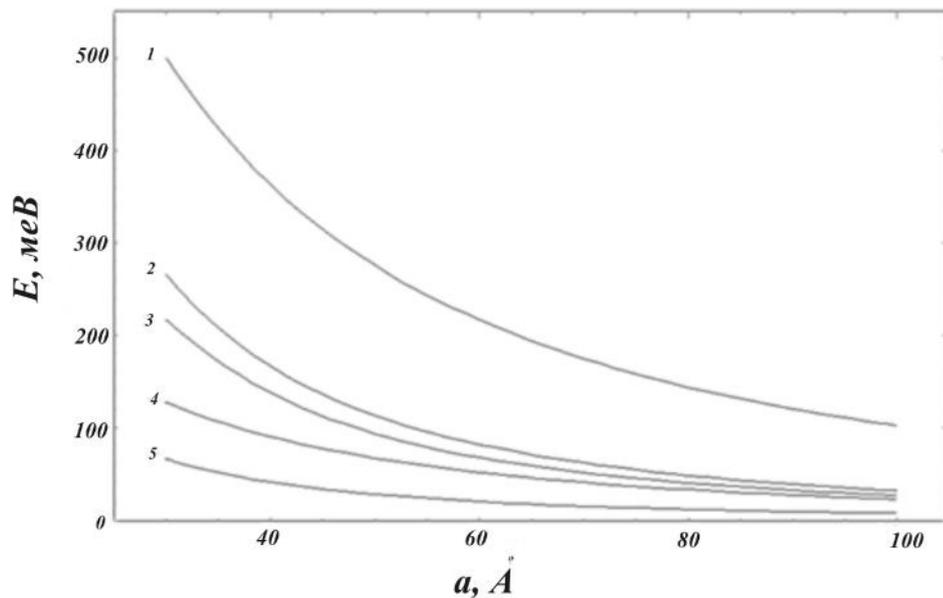


Рисунок 2.5. Залежність енергії основного стану квазічастинки від радіуса КТ InAs/GaAs для: 1 – для електрона; 2 – однозонної моделі для легкої дірки; 3 – 6-зонної моделі для дірки; 4 – 4-зонної моделі для дірки; 5 – однозонної моделі для важкої дірки.

З рисунка 2.5 видно, що модель 6x6 дає дещо більші значення енергії, ніж модель 4x4. Зокрема при радіусі КТ 40 Å ця різниця становить близько 40 меВ. Тому для КТ гетеросистеми InAs/GaAs вибір моделі валентної зони значно впливає на результати діркових станів.

Зовсім інша «картина» спостерігається для КТ гетеросистеми GaAs/AlAs, коли порівнювати результати моделі 4x4 і 6x6 (рисунок 2.6). Для цих матеріалів практично відсутнє узгодження сталих ґратки і ці матеріали є більш електрично сумісні (діелектричні проникності відрізняються менше, ніж в InAs/GaAs). Тому для діркових станів впливом поляризації та деформації можна знехтувати. У такій моделі обчислено енергію дірки для КТ гетеросистеми GaAs/AlAs (рисунок 2.6) у рамках різних зонних наближень.

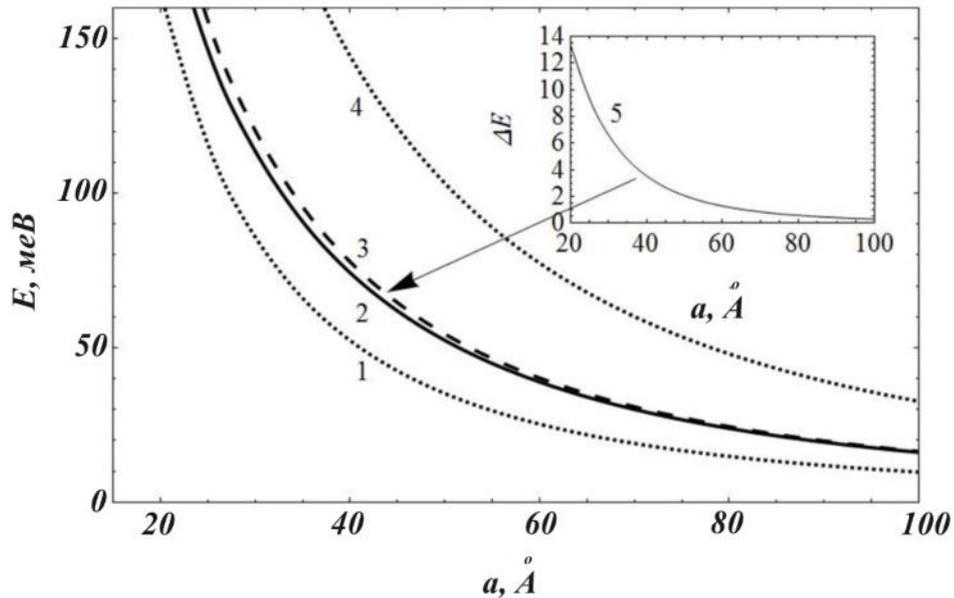


Рисунок 2.6. Залежність енергії основного стану дірки від радіуса КТ GaAs/AlAs, розрахована з урахуванням моделі 4x4 наближення (штрихова крива 3), моделі 6x6 (крива 2), зони важких дірок (пунктирна крива 1), зони легких дірок (пунктирна крива 4) та різниці ΔE (вставка) між чотиризонним та шестизонним наближенням.

З рисунка 2.6. видно, що різниця енергій дірки у рамках моделей валентної зони 6x6 та 4x4 є незначною і спадає зі збільшенням радіуса КТ. Зокрема для радіуса КТ 40 Å енергія дірки у зазначених моделях відрізняється на $\Delta E = 4$ меВ. Це дає підстави для розрахунків домішкових станів, впливів зовнішніх електричних полів у КТ GaAs/AlAs використовувати простішу модель 4x4, не втрачаючи точності. Це реалізовано у наступному розділі.

Висновки до розділу 2

У цьому розділі проведено розрахунок енергії дірки у КТ InAs/GaAs та GaAs/AlAs з врахуванням і без врахування поляризаційних зарядів та деформації на гетеромежі КТ-матриця. У межах цього дослідження:

1. Розраховано енергію дірки у моделях валентної зони 4x4, 6x6 та простої однозонної моделі. Показано, що у всіх моделях спостерігається компенсація впливу поляризаційних і деформаційних ефектів на енергію основного стану дірки для великих радіусів КТ InAs/GaAs. Для менших радіусів (~ 40 Å) сумарний вплив залишається, але не перевищує 10 меВ. Тобто для гетеросистем з кращою діелектричною сумісністю та меншим параметром неузгодження ґраток (як КТ гетеросистеми GaAs/AlAs) впливом поляризації та деформації можна знехтувати внаслідок їх малості та взаємної компенсації.
2. Встановлено, що для КТ гетеросистеми InAs/GaAs вибір моделі валентної зони значно впливає на енергію дірки, зокрема при радіусі КТ 40 Å ця різниця енергій в моделях становить близько 40 меВ. А для КТ гетеросистеми GaAs/AlAs аналогічна різниця енергій становить 4 меВ, що робить КТ гетеросистеми GaAs/AlAs менш чутливою до вибору зонної моделі валентної зони.
3. Показано, що енергія електрона для КТ InAs/GaAs зазнає впливу деформаційних ефектів більше, ніж поляризаційних, порівняно з енергією дірки. Це пов'язано з більшою різницею параметрів гідростатичного деформаційного потенціалу для електрона, ніж для дірки. Для КТ гетеросистеми GaAs/AlAs різниця цих констант і для електрона, і для дірки є не великою, тому у цій КТ електрон задає однакового впливу як деформаційного потенціалу, так і поляризаційного потенціалу самодії. Причому ними можна нехтувати внаслідок взаємної компенсації.

РОЗДІЛ 3

НЕЦЕНТРАЛЬНА АКЦЕПТОРНА ДОМІШКА У КВАНТОВІЙ ТОЧЦІ В ЕЛЕКТРИЧНОМУ ПОЛІ ДОВІЛЬНОГО НАПРЯМКУ

У розділі розглядається сферична КТ з акцепторною домішкою, яка розташована на будь-якій відстані від центра КТ. До такої системи прикладається електричне поле, що має довільний напрямок відносно розташування домішки. Для розрахунку енергетичного спектру дірки у такій КТ використовується модель валентної зони 4×4 , яка є справедливою для КТ гетеросистеми GaAs/AlAs і дає результати, що майже не відрізняються від моделі 6×6 . Розв'язання рівняння Шредінгера проводиться шляхом розкладу хвильової функції за функціями задачі без домішки й електричного поля. У результаті отримано аналітично усі матричні елементи, що стосуються кутових змінних.

Розглянуто випадок довільного напрямку напруженості електричного поля, яке розкладено на дві взаємно перпендикулярні складові: вздовж осі Oz та вздовж осі Ox. Внаслідок симетрії задачі цього достатньо, щоб врахувати довільний напрямок електричного поля.

У розділі аналізується залежність енергії дірки від розташування акцепторної домішки та величини електричного поля, яке напрямлене як вздовж напрямку зміщення домішки, так і в довільному напрямку.

На основі отриманих хвильових функцій та енергій у розділі обчислюється спектральний коефіцієнт поглинання електромагнітних хвиль як функція розташування домішки, величини та напрямку електричного поля, яке прикладене до сферичної КТ.

Результати цих досліджень опубліковано у роботах [3*, 5*, 9*, 10*, 12*].

3.1. Модель сферичної квантової точки з акцепторною домішкою в електричному полі

Розглядається гетероструктура, що містить КТ з акцепторною домішкою, розташованою на відстані D від її центра вздовж осі Oz. Радіус КТ становить a . Досліджувана гетероструктура характеризується широкими забороненими зонами та сильною спін-орбітальною взаємодією. У зв'язку з цим для опису станів дірки використовується гамільтоніан Латтінджера у матричному вигляді розміром 4×4 [46-50], при цьому нехтується гофрованість ізоенергетичних поверхонь у k -просторі. За таких припущень сферичний гамільтоніан Латтінджера має вигляд:

$$\hat{H} = \frac{1}{2}(\gamma_1 + \frac{5}{2}\gamma)\hat{p}^2 - \gamma(\vec{\hat{p}}\vec{\hat{J}}) + U(r) + V_{el}(\vec{r}) + V_a(\vec{r}, \vec{D}) = \hat{H}^{(0)} + V_{el}(\vec{r}) + V_a(\vec{r}, \vec{D}) \quad (3.1)$$

де $\vec{\hat{J}}$ – оператор спіна дірки ($j=3/2$), γ_1, γ – параметри Латтінджера.

Потенціальну енергію обмеження дірки вибрано у вигляді сферично-симетричної прямокутної потенціальної ями

$$U(r) = \begin{cases} 0, & r \leq a, \\ U_0, & r > a. \end{cases} \quad (3.2)$$

Система координат вибрана так, що її центр, т. О., перебуває у центрі КТ, а вісь Oz напрямлена через іон акцепторної домішки (рисунок 3.1). Взаємодію між діркою та іоном акцепторної домішки виражено через кулонівську енергію взаємодії:

$$V_a(\vec{r}, \vec{D}) = -\frac{Ze^2}{\epsilon|\vec{r} - \vec{D}|}, \quad (3.3)$$

де $\vec{D} = (0, 0, D)$ – вектор, що описує розташування акцепторної домішки. ϵ – середнє значення діелектричної проникності. $Z = 1$ або 0 залежно від того чи наявна домішка у КТ чи відсутня.

До КТ прикладено зовнішнє електричне поле напруженістю F_{el} . Потенціальна енергія взаємодії дїрки з електричним полем має вигляд:

$$V_{el}(\vec{r}) = -\vec{d} \cdot \vec{F}_{el} = -e \vec{r} \cdot \vec{F}_{el}, \quad (3.4)$$

де \vec{d} – дипольний момент, а e – елементарний заряд.

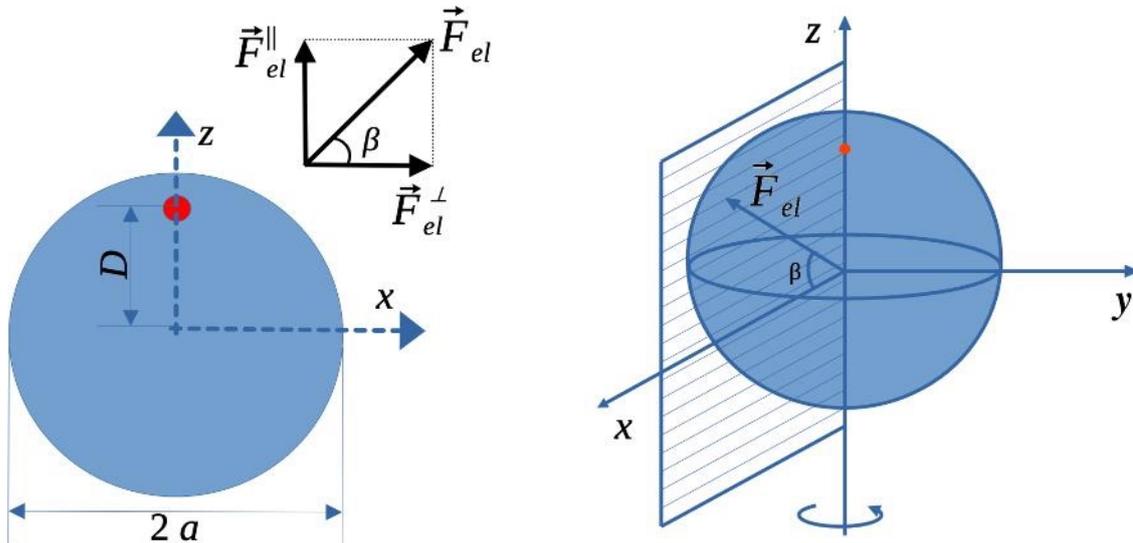


Рисунок 3.1. Геометрична модель КТ в довільно напрямленому електричному полі з акцепторною домішкою у точці $\vec{D} = (0, 0, D)$.

Електричне поле може бути напрямлене в будь-якому напрямку відносно осі Oz (рисунок 3.1):

$$\vec{F}_{el} = \vec{i} F_{el}^{\perp} + \vec{k} F_{el}^{\parallel}, \quad F_{el}^{\perp} = F_{el} \cos \beta, \quad F_{el}^{\parallel} = F_{el} \sin \beta, \quad (3.5)$$

де \vec{i}, \vec{k} – орти декартової системи координат. У подальшому розглядається напрям зовнішнього електричного поля в площині xOz, причому домішка розташована вздовж осі Oz. Такий вибір є достатнім для опису загального випадку, оскільки площину, що містить вектор електричного поля, можна обертати навколо осі Oz без зміни фізичних результатів завдяки аксіальній симетрії системи. Таким чином, у сферичній системі координат отримано:

$$\begin{aligned} V_{el}(\vec{r}) &= -e x F_{el}^{\perp} - e z F_{el}^{\parallel} = -e r \sin \theta \cos \varphi F_{el}^{\perp} - e r \cos \theta F_{el}^{\parallel} = \\ &= -e r \sin \theta \cos \varphi F_{el} \cos \beta - e r \cos \theta F_{el} \sin \beta = \\ &= V_{el}^{\perp} \cos \beta + V_{el}^{\parallel} \sin \beta. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Якщо $\beta = \pi/2$, то електричне поле паралельне осі Oz:

$$V_{el}(\vec{r}) = V_{el}^{\parallel} = -erF_{el} \cos \theta. \quad (3.7)$$

Якщо ж $\beta = 0$, то електричне поле перпендикулярне осі z:

$$V_{el}(\vec{r}) = V_{el}^{\perp} = -eF_{el}r \sin \theta \cos \varphi. \quad (3.8)$$

Хвильову функцію, що є розв'язком рівняння Шредінгера з гамільтоніаном (3.1), подано в вигляді розкладу за повною системою функцій гамільтоніана $\hat{H}^{(0)}$ аналогічно як і в роботі [74]

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \sum_{f, M, n} c_{f, M; n} \psi_{f, M; n}^{(0)}(r, \theta, \varphi). \quad (3.9)$$

Число доданків у розкладі вибиралося таким, щоб похибка обчислень не перевищувала 5%. І зрозуміло, що ця кількість доданків також залежить як і від радіуса КТ, так і від положення домішки.

Після підстановки (3.9) у рівняння Шредінгера з гамільтоніаном (3.1) отримано лінійну однорідну систему рівнянь:

$$\sum_{f, M, n} c_{f, M; n} \left[(E^{(0)} - E) \delta_{f', n'; f, n} + \langle \psi_{f', M'; n'}^{(0)} | V_{el} + V_a | \psi_{f, M; n}^{(0)} \rangle \right] = 0. \quad (3.10)$$

Після проведення математичних перетворень, отримано матричний елемент кулонівської потенціальної енергії:

$$\langle \psi_{f', M'; n'}^{(0)}(\vec{r}) | V_a | \psi_{f, M; n}^{(0)}(\vec{r}) \rangle = -\frac{Ze}{\varepsilon} \sqrt{(2f'+1)(2f+1)} \sum_{l'=|f'-3/2|}^{f'+3/2} \sum_{l=|f-3/2|}^{f+3/2} (-1)^{l'+l-3+2M} Q_{l', l; f', f; M; n}, \quad (3.11)$$

де

$$Q_{l', l; f', f; M; n} = \sum_{s=|l-l'|}^{l+l'} \int dr r^2 R_{l', n'}^{f' *}(r) \begin{cases} \frac{D^s}{r^{s+1}}, & r < D \\ r^s, & D > r \\ \frac{r^s}{D^{s+1}}, & D > r \end{cases} R_{l, n}^f(r) \begin{pmatrix} l & s & l' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}_{m_l} \sum_{m_l} (-1)^{2l-2s+m_l} \begin{pmatrix} l' & \frac{3}{2} & f' \\ m_l & M-m_l & -M \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & \frac{3}{2} & f \\ m_l & M-m_l & -M \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & s & l' \\ m_l & 0 & -m_l \end{pmatrix}. \quad (3.12)$$

При обчисленні інтеграла (3.11) використано розклад $\frac{1}{|\vec{r}-\vec{D}|}$ за сферичними функціями [75-76]:

$$\frac{1}{|\vec{r}-\vec{D}|} = \sum_{s=0}^{\infty} P_s(\cos(\theta)) \begin{cases} \frac{D^s}{r^{s+1}}, & r < D, \\ \frac{r^s}{D^{s+1}}, & D > r. \end{cases}$$

Матричний елемент, що пов'язаний з електричним полем, відповідно до формули (3.6) розділено на перпендикулярну і паралельну складові:

$$\begin{aligned} & \langle \psi_{f',M';n'}^{(0)} | V_{el} | \psi_{f,M;n}^{(0)} \rangle = \\ & -e \cos \beta F_{el} \langle \psi_{f',M';n'}^{(0)} | r \sin \theta \cos \varphi | \psi_{f,M;n}^{(0)} \rangle - e \sin \beta F_{el} \langle \psi_{f',M';n'}^{(0)} | r \cos \theta | \psi_{f,M;n}^{(0)} \rangle. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Кожну складову (3.13) обчислено окремо. Паралельна складова запишеться у вигляді:

$$\begin{aligned} & \langle \psi_{f',M';n'}^{(0)} | r \cos \theta | \psi_{f,M;n}^{(0)} \rangle = \sqrt{(2f'+1)(2f+1)} \sum_{l'=\lfloor f'-\frac{3}{2} \rfloor}^{f'+\frac{3}{2}} \sum_{l=\lfloor f-\frac{3}{2} \rfloor}^{f+\frac{3}{2}} (-1)^{l'+l-3+M'+M} \times \\ & \times \int dr r^3 R_{l',n'}^{*f'} R_{l,n}^f \sum_{m'_l, m_l, m'_j, m_j} \begin{pmatrix} l' & \frac{3}{2} & f' \\ m'_l & m'_j & -M' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & \frac{3}{2} & f \\ m_l & m_j & -M \end{pmatrix} \chi_{m'_j}^+ \chi_{m_j} \int d\Omega Y_{l'}^{*m'_l} \cos(\theta) Y_l^{m_l}. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Далі використано властивість ортонормованості спінових функцій $\chi_{m'_j}^+ \chi_{m_j} = \delta_{m'_j, m_j}$:

$$\begin{aligned} & \langle \psi_{f',M';n'}^{(0)} | r \cos \theta | \psi_{f,M;n}^{(0)} \rangle = \sqrt{(2f'+1)(2f+1)} \sum_{l'=\lfloor f'-\frac{3}{2} \rfloor}^{f'+\frac{3}{2}} \sum_{l=\lfloor f-\frac{3}{2} \rfloor}^{f+\frac{3}{2}} (-1)^{l'+l-3+M'+M} \times \\ & \times \int dr r^3 R_{l',n'}^{*f'} R_{l,n}^f \sum_{m'_l, m_l, m'_j, m_j} \begin{pmatrix} l' & \frac{3}{2} & f' \\ m'_l & m'_j & -M' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & \frac{3}{2} & f \\ m_l & m_j & -M \end{pmatrix} \int d\Omega Y_{l'}^{*m'_l} \cos(\theta) Y_l^{m_l}. \end{aligned} \quad (3.15)$$

$\cos(\theta)$ подано через сферичну гармоніку $\cos(\theta) = \sqrt{4\pi/3} Y_1^0$ і враховано властивість сферичних функцій, що $Y_l^{*m_l} = (-1)^{m_l} Y_l^{-m_l}$. Таким чином, під

інтегралом за кутовими змінними буде сума добутків сферичних гармонік, для яких характерна властивість [75-76]:

$$\int Y_{l_1}^{m_1} Y_{l_2}^{m_2} Y_{l_3}^{m_3} d\Omega = \sqrt{\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)(2l_3+1)}{4\pi}} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}. \quad (3.16)$$

Також цей добуток часто називають коефіцієнтами Гаунта [77-78]. Це дало змогу обчислити інтеграл за кутовими змінними аналітично

$$\begin{aligned} \int d\Omega Y_{l'}^{*m'} \cos(\theta) Y_l^{m_l} &= \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \int d\Omega Y_{l'}^{*m'} Y_1^0 Y_l^{m_l} = \\ &= \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \left(\int d\Omega (-1)^{m'} Y_{l'}^{-m'} Y_1^0 Y_l^{m_l} \right) = \\ &= (-1)^{m'} \sqrt{(2l'+1)(2l+1)} \begin{pmatrix} l' & 1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & 1 & l \\ -m' & 0 & m_l \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.17)$$

В останньому виразі 3j-символи не дорівнюють нулю лише, якщо $-m'_l + m_l = 0$, що дає змогу домножити цей 3j-символ на дельта-символ Кронекера $\delta_{m'_l, m_l}$. Це врахуємо у (3.17) і разом підставимо (3.15):

$$\begin{aligned} \langle \psi_{f', M'; n'}^{(0)} | r \cos \theta | \psi_{f, M; n}^{(0)} \rangle &= \sqrt{(2f'+1)(2f+1)} \sum_{l' = |f' - \frac{3}{2}|}^{f' + \frac{3}{2}} \sum_{l = |f - \frac{3}{2}|}^{f + \frac{3}{2}} (-1)^{l'+l-3+M'+M} \sqrt{(2l'+1)(2l+1)} \times \\ &\times \int dr r^3 R_{l', n'}^{*f'} R_{l, n}^f \sum_{m'_l, m_l, m_j} \begin{pmatrix} l' & \frac{3}{2} & f' \\ m'_l & m_j & -M' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & \frac{3}{2} & f \\ m_l & m_j & -M \end{pmatrix} (-1)^{m'_l} \begin{pmatrix} l' & 1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & 1 & l \\ -m'_l & 0 & m_l \end{pmatrix} \delta_{m'_l, m_l}. \end{aligned} \quad (3.18)$$

Просумуємо по m'_l

$$\begin{aligned} \langle \psi_{f', M'; n'}^{(0)} | r \cos \theta | \psi_{f, M; n}^{(0)} \rangle &= \sqrt{(2f'+1)(2f+1)} \sum_{l' = |f' - \frac{3}{2}|}^{f' + \frac{3}{2}} \sum_{l = |f - \frac{3}{2}|}^{f + \frac{3}{2}} (-1)^{l'+l-3+M'+M} \sqrt{(2l'+1)(2l+1)} \times \\ &\times \int dr r^3 R_{l', n'}^{*f'} R_{l, n}^f \sum_{m_l, m_j} \begin{pmatrix} l' & \frac{3}{2} & f' \\ m_l & m_j & -M' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & \frac{3}{2} & f \\ m_l & m_j & -M \end{pmatrix} (-1)^{m_l} \begin{pmatrix} l' & 1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & 1 & l \\ -m_l & 0 & m_l \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.19)$$

Для другого 3j-символа в (3.19), щоб він мав не нульове значення виконується умова $m_j = M - m_l$, що дозволяє домножити цей вираз на $\delta_{m_j, M - m_l}$. Після сумування по m_j отримано:

$$\begin{aligned} \langle \psi_{f', M'; n'}^{(0)} | r \cos \theta | \psi_{f, M; n}^{(0)} \rangle &= \sqrt{(2f' + 1)(2f + 1)} \sum_{l' = |f' - \frac{3}{2}|}^{f' + \frac{3}{2}} \sum_{l = |f - \frac{3}{2}|}^{f + \frac{3}{2}} (-1)^{l' + l - 3 + M' + M} \sqrt{(2l' + 1)(2l + 1)} \times \\ &\times \int dr r^3 R_{l', n'}^{*f'} R_{l, n}^f \sum_{m_l} \begin{pmatrix} l' & \frac{3}{2} & f' \\ m_l & M - m_l & -M' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & \frac{3}{2} & f \\ m_l & M - m_l & -M \end{pmatrix} (-1)^{m_l} \begin{pmatrix} l' & 1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & 1 & l \\ -m_l & 0 & m_l \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.20)$$

Також перші два 3j-символи в (3.20) не дорівнюють нулю, якщо $M' = M$. Тому

$$\begin{aligned} \langle \psi_{f', M'; n'}^{(0)} | r \cos \theta | \psi_{f, M; n}^{(0)} \rangle &= \delta_{M', M} \sqrt{(2f' + 1)(2f + 1)} \sum_{l' = |f' - \frac{3}{2}|}^{f' + \frac{3}{2}} \sum_{l = |f - \frac{3}{2}|}^{f + \frac{3}{2}} (-1)^{l' + l - 3 + M' + M} \sqrt{(2l' + 1)(2l + 1)} \times \\ &\times \int dr r^3 R_{l', n'}^{*f'} R_{l, n}^f \sum_{m_l} \begin{pmatrix} l' & \frac{3}{2} & f' \\ m_l & M - m_l & -M' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & \frac{3}{2} & f \\ m_l & M - m_l & -M \end{pmatrix} (-1)^{m_l} \begin{pmatrix} l' & 1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & 1 & l \\ -m_l & 0 & m_l \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Перпендикулярна складова запишеться у вигляді:

$$\begin{aligned} \langle \psi_{f', M'; n'}^{(0)} | r \sin \theta \cos \varphi | \psi_{f, M; n}^{(0)} \rangle &= \sqrt{(2f' + 1)(2f + 1)} \sum_{l' = |f' - \frac{3}{2}|}^{f' + \frac{3}{2}} \sum_{l = |f - \frac{3}{2}|}^{f + \frac{3}{2}} (-1)^{l' + l - 3 + M' + M} \times \\ &\times \int dr r^3 R_{l', n'}^{*f'} R_{l, n}^f \sum_{m'_l, m_l, m'_j, m_j} \begin{pmatrix} l' & \frac{3}{2} & f' \\ m'_l & m'_j & -M' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & \frac{3}{2} & f \\ m_l & m_j & -M \end{pmatrix} \chi_{m'_j}^+ \chi_{m_j} \int d\Omega Y_{l'}^{*m'_l} \sin \theta \cos \varphi Y_l^{m_l}. \end{aligned} \quad (3.22)$$

Далі $\sin \theta \cos \varphi$ визначено також через суму сферичних гармонік:

$$\sin \theta \cos \varphi = \sqrt{\frac{2\pi}{3}} (Y_1^{-1} - Y_1^1).$$

Проводячи аналогічні викладки як у (3.15)-(3.21), отримано:

$$\begin{aligned}
\langle \psi_{f',M';n}^{(0)} | r \sin \theta \cos \varphi | \psi_{f,M;n}^{(0)} \rangle = & \sqrt{2f'+1} \sqrt{2f+1} \sum_{l'=f'-\frac{3}{2}}^{f'+\frac{3}{2}} \sum_{l=f-\frac{3}{2}}^{f+\frac{3}{2}} \sum_{m_l=-l}^l (-1)^{l'+l-4+2M} \\
& \sqrt{\frac{(2l+1)(2l'+1)}{2}} \begin{pmatrix} l & 3/2 & f \\ m_l & M-m_l & -M \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & 1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \int_0^\infty dr r^3 R_{l',n'}^{f'*}(r) R_{l,n}^f(r) \\
& \left((-1)^{m_l-1} \begin{pmatrix} l' & 3/2 & f' \\ m_l-1 & M-m_l & -M+1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & 1 & l \\ 1-m_l & -1 & m_l \end{pmatrix} + \right. \\
& \left. - (-1)^{m_l+1} \begin{pmatrix} l' & 3/2 & f' \\ m_l+1 & M-m_l & -M-1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & 1 & l \\ -m_l-1 & 1 & m_l \end{pmatrix} \right). \tag{3.23}
\end{aligned}$$

Отже, отримано усі матричні елементи з системи рівнянь (3.10), розв'язуючи яку отримано енергію дірки за наявності нецентральної домішки у КТ, до якої прикладено довільно напрямлене електричне поле. Безпосередні обчислення проведено у наступному параграфі.

3.2. Енергетичний спектр дірки у сферичній квантовій точці за наявності акцепторної домішки та електричного поля

Конкретні обчислення проведено для діркових станів КТ гетероструктури GaAs/AlAs. Радіус КТ вибрано 40 \AA , що відповідає типовим середнім значенням радіусів КТ у таких структурах. Спочатку розглянуто випадок, коли електричне поле напрямлене вздовж осі Oz (вздовж напрямку зміщення іона акцептора від центра КТ). З робіт [62, 74] відомо, що електричне поле розщеплює енергетичні рівні дірки у КТ без домішки за $|M|$. Також розщеплення енергетичних рівнів дірки зумовлює і наявність нецентральної акцепторної домішки у КТ без електричного поля [63, 74]. Особливістю діркових станів у моделі 4×4 є те, що при порушенні сферичної симетрії розщеплюються енергетичні рівні також і основного стану. Для електронних станів енергетичний рівень основного стану не розщеплюється в електричних полях чи за наявності нецентральної домішки [79-81].

Якщо в КТ є як нецентральна акцепторна домішка, так і прикладене електричне поле, значення енергії розщеплення діркових рівнів у КТ може збільшуватися або зменшуватися залежно від величини електричного поля та його напрямку. Це може призвести навіть до виродження енергетичних рівнів дірки, яке наявне у КТ без домішки та електричного поля. Отже, прикладене поле до КТ (з нецентральною акцепторною домішкою) у певному напрямку може збільшувати або зменшувати величину розщеплення діркових рівнів.

Спочатку розглянуто випадок, коли електричне поле паралельне осі Oz, $\beta = \pi/2$ (рисунок 3.1). Якщо домішка розташована на відстані $D = 20 \text{ \AA}$ від центра КТ (радіус КТ становить 40 \AA , $F_{el} = 0$), то максимум ймовірності перебування дірки (максимум хвильової функції дірки) знаходиться поблизу йона домішки (рисунок 3.2, $F_{el} = 0$) у області $z > 0$. Якщо прикладене зовнішнє електричне поле $F_{el} \uparrow \downarrow Oz$, то максимум ймовірності локалізації дірки починає “зсуватись” уздовж напрямку електричного поля (рисунок 3.2, $F_{el} = -0.75 \cdot 10^7 \text{ В/м}$). Якщо електричне

поле набуває “критичного” значення, то максимум ймовірності розташування дірки одночасно знаходиться у двох областях (рисунок 3.2, $F_{el} = -1.25 \cdot 10^7 \text{ В/м}$). При більших значеннях електричного поля максимум ймовірності локалізації дірки зміщується на протилежний бік відносно йона домішки (рисунок 3.2, $F_{el} = -2 \cdot 10^7 \text{ В/м}$) в область $z < 0$. Якщо ж $F_{el} \uparrow \uparrow Oz$, то максимум ймовірності локалізації дірки не “переміщується” в область $z < 0$.

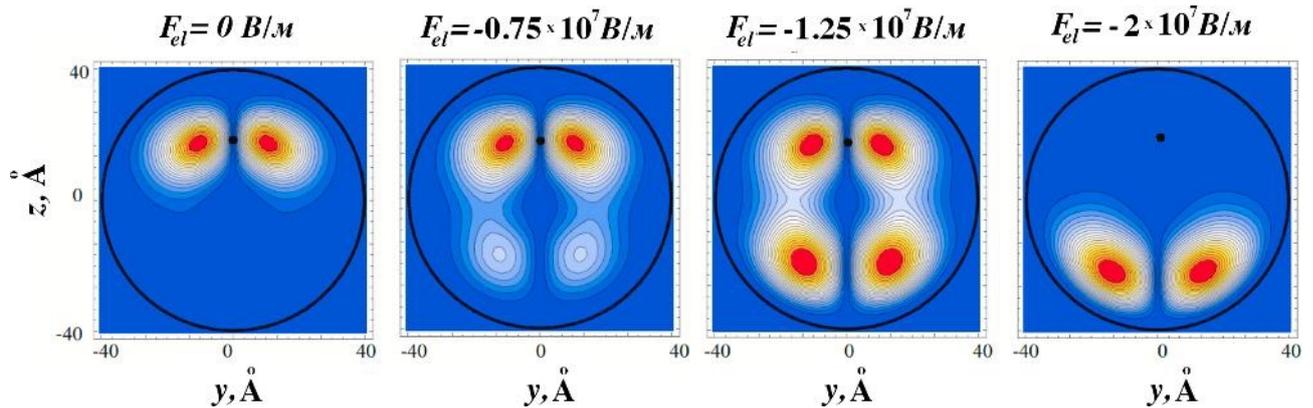


Рисунок 3.2. Розподіл густини ймовірності локалізації дірки (в основному стані $|M|=3/2$) у КТ з йоном акцепторної домішки, розташованим на відстані $D = 20 \text{ \AA}$ від центра КТ, за наявності прикладеного електричного поля. Радіус КТ становить 40 \AA . Чорна суцільна точка позначає йон домішки.

Такі залежності розподілу густини ймовірності впливають на енергетичний спектр дірки у КТ з нецентральною домішкою (рисунок 3.3). На рисунку 3.3 подано енергії діркових станів $1S_{3/2}$ та $1P_{3/2}$ як функцію від зовнішнього електричного поля, яке напрямлене вздовж осі Oz . Видно, що при $F_{el} \uparrow \uparrow z$ ($F_{el} > 0$) розщеплення енергетичних рівнів дірки зростає. У випадку $F_{el} \uparrow \downarrow z$ ($F_{el} \leq 0$) розщеплення енергетичних рівнів має немонотонний характер: у відсутності електричного поля наявне розщеплення діркових рівнів, яке зумовлене нецентральною домішкою, далі при зростанні абсолютної величини напруженості електричного поля спочатку відстань між рівнями зменшується, а після досягнення “критичного” значення величини електричного поля

розщеплення знову зростає. Такі залежності добре узгоджуються з розподілом густини ймовірності (рисунк 3.2).

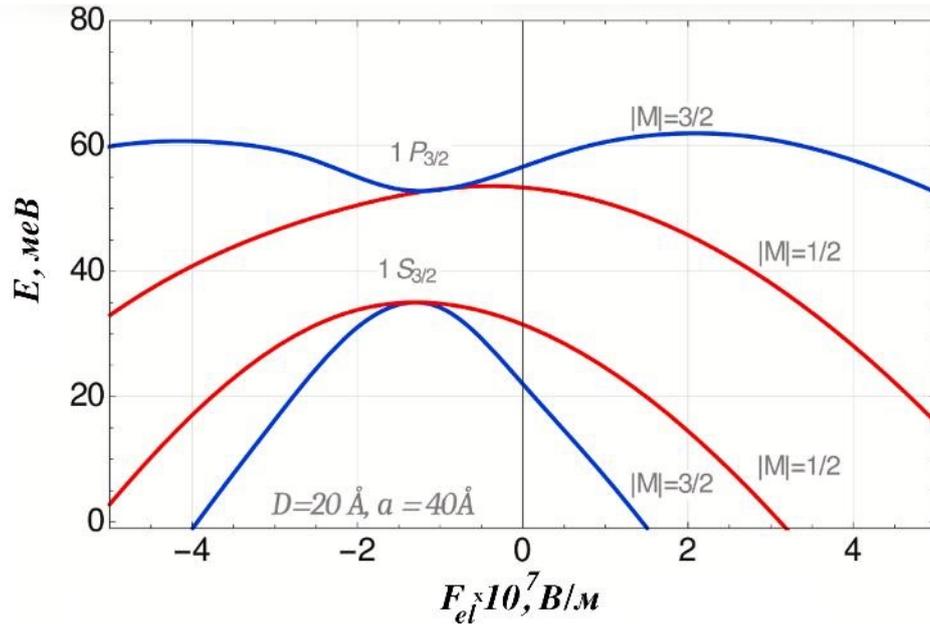


Рисунок 3.3. Енергії діркових станів $1S_{3/2}$ та $1P_{3/2}$ як функція зовнішнього електричного поля напрямленого паралельно осі Oz. Радіус КТ 40 \AA , акцепторна домішка розташована на відстані $D = 20 \text{ \AA}$.

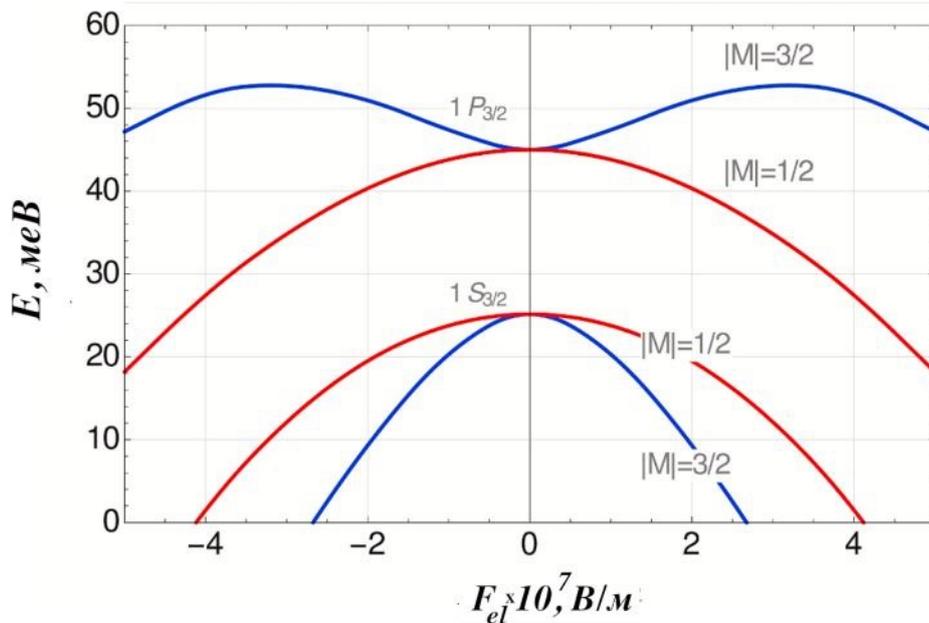


Рисунок 3.4. Енергії діркових станів $1S_{3/2}$ та $1P_{3/2}$ як функція зовнішнього електричного поля напрямленого паралельно осі Oz. Радіус КТ 40 \AA , акцепторна домішка розташована у центрі КТ ($D = 0 \text{ \AA}$).

Якщо ж іон акцепторної домішки перебуває у центрі КТ, то енергії дірки у прикладеному електричному полі матимуть таку залежність (рисунок 3.4). Порівнюючи залежності на рисунках 3.3 і 3.4, видно що зміщення домішки вздовж осі Oz наче зсуває точку виродження енергетичних рівнів у бік від'ємних значень напруженості електричного поля. Однак завжди існує таке «критичне» значення напруженості електричного поля, при якому діркові енергетичні рівні вироджуються. Залежність «критичного» значення напруженості електричного поля від величини розташування домішки подано на рисунку 3.5, з якого видно, що протилежно напрямлене електричне поле до напрямку зміщення домішки може компенсувати вплив нецентральної домішки щодо розщеплень. Однак величини енергії дірки за наявності домішки у центрі КТ і поза ним відрізняються навіть у «критичних» точках значень напруженості електричного поля.

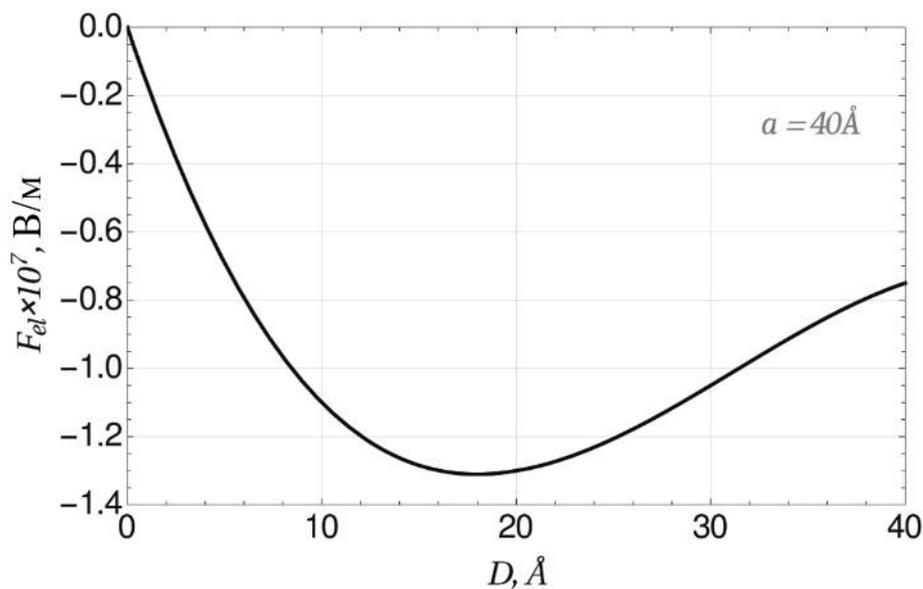


Рисунок 3.5. Залежність «критичного» значення напруженості електричного поля, яке напрямлене паралельно осі Oz, від розташування акцептора у КТ. Радіус КТ 40 Å.

Далі розглянуто інший випадок, коли електричне поле напрямлено перпендикулярно осі Oz, $\beta=0$ (перпендикулярно до напрямку зміщення іона домішки).

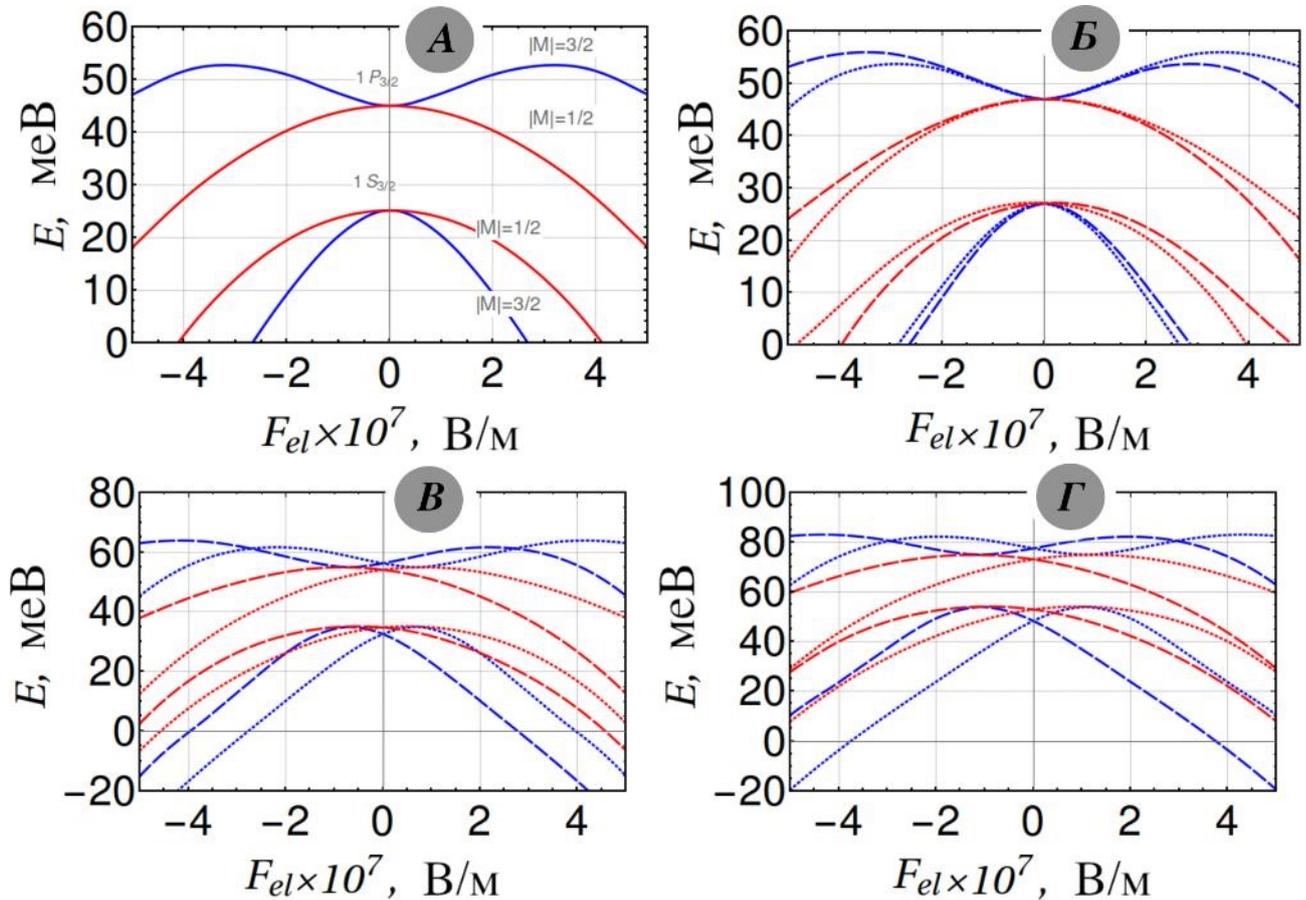


Рисунок 3.6. Енергетичні рівні дірок як функція електричного поля, прикладеного вздовж осі Oх ($\beta = 0$). Радіус КТ $a = 40 \text{ \AA}$. Розташування акцептора: $D = 0 \text{ \AA}$ (рисунок А), $D = 5 \text{ \AA}$ (рисунок Б), $D = 20 \text{ \AA}$ (рисунок В), $D = 40 \text{ \AA}$ (рисунок Г). Пунктирними лініями позначено енергетичні рівні з $M = -1/2, -3/2$. Штрихпунктирними лініями позначено рівні з $M = 1/2, 3/2$. Сині лінії відповідають $|M| = 3/2$, червоні лінії — $|M| = 1/2$.

Як показано на рисунок 3.6, зміщення домішки від центру КТ спричиняє розщеплення енергетичних рівнів дірок відповідно до квантового числа M в електричному полі, яке є перпендикулярним до напрямку зміщення акцептора. Слід зазначити, що у випадку центральної домішки рівні дірок розщеплюються

за модулем $|M|$ (рисунок 3.6 А). Коли домішка зміщена від центру КТ в напрямку, перпендикулярному до електричного поля, у розщепленні виникає певна симетрія відносно квантового числа M , відносно напрямку електричного поля вздовж осі Ox . Наприклад (рисунок 3.6 Г), якщо електричне поле паралельне осі Ox , то енергія стану з симетрією $M = -3/2$ є найнижчою. Однак, коли електричне поле спрямоване антипаралельно осі Ox , то стан з $M = 3/2$ має найнижчу енергію. Подібна закономірність спостерігається й для інших станів. Окрім розщеплення енергетичних рівнів дірок у електричному полі ($\beta = 0$), енергія дірки також зростає при зміщенні домішки від центру КТ.

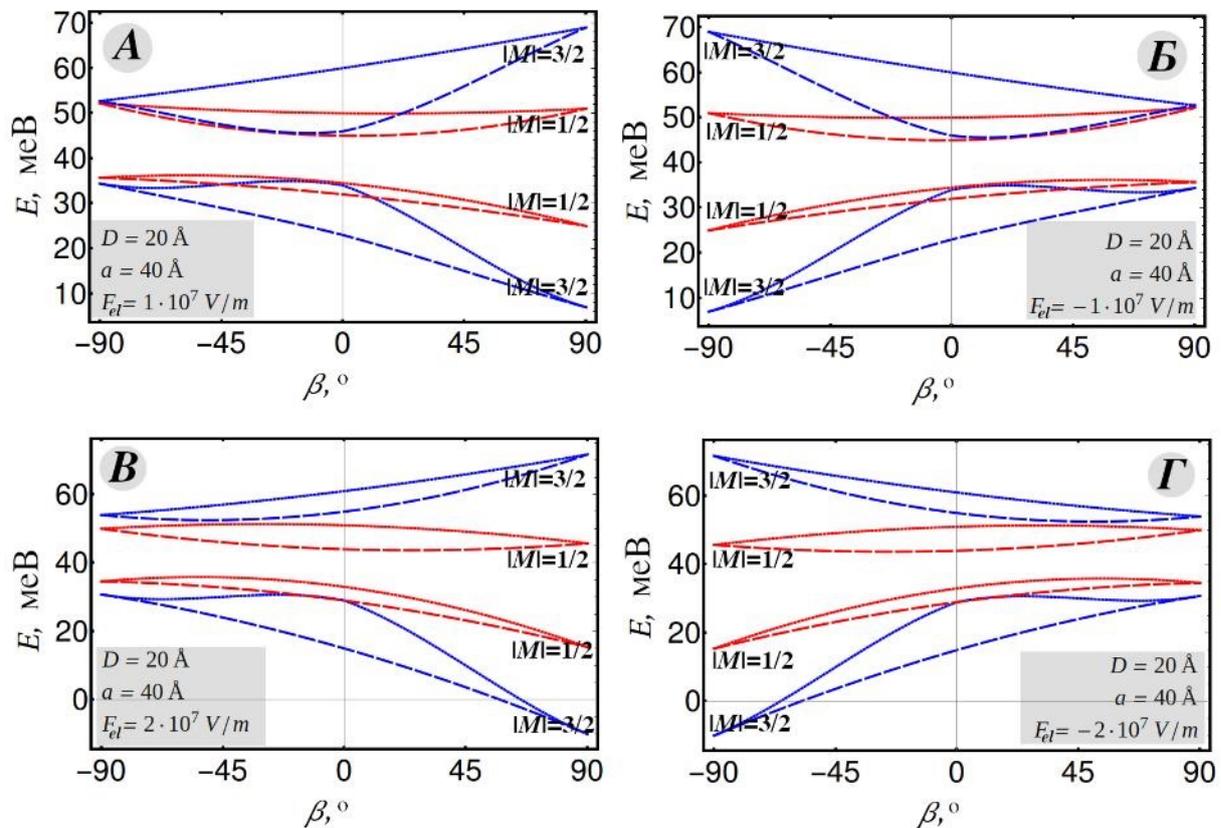


Рисунок 3.7. Енергетичні рівні дірки як функція напрямку електричного поля. Радіус КТ та значення напруженості електричного поля наведені на рисунку. Домішка розташована на відстані $D = 20$ Å. Пунктирними лініями позначено енергетичні рівні з $M = -1/2, -3/2$. Штрихпунктирними лініями позначено рівні з $M = 1/2, 3/2$. Сині лінії відповідають $|M| = 3/2$, червоні лінії — $|M| = 1/2$.

Зростання енергії у прикладеному електричному полі зумовлене зменшенням симетрії сферичної системи до циліндричної (при $D = 0$) і подальшим порушенням циліндричної симетрії (при $D \neq 0$) до симетрії, подібної до симетрії прямокутного паралелепіпеда.

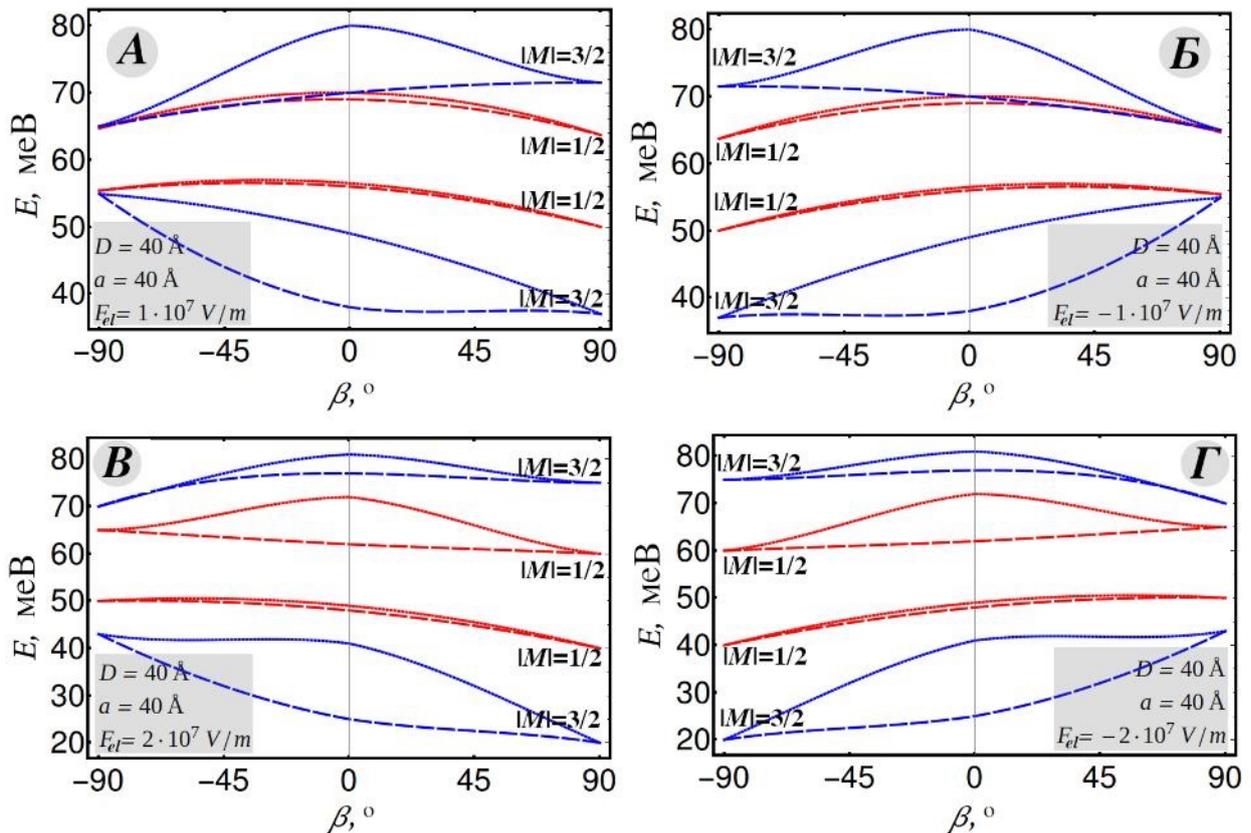


Рисунок 3.8. Енергетичні рівні дірки як функція напрямку електричного поля. Радіус КТ та значення інтенсивності електричного поля наведені на рисунку. Домішка розташована на поверхні КТ ($D = 40 \text{ \AA}$). Пунктирними лініями позначено енергетичні рівні з $M = -1/2, -3/2$. Штрихпунктирними лініями позначено рівні з $M = 1/2, 3/2$. Сині лінії відповідають $|M| = 3/2$, червоні лінії — $|M| = 1/2$.

Для всебічного дослідження залежності енергії дірки від величини та напрямку прикладеного електричного поля в КТ із нецентральною домішкою

були виконані розрахунки енергії дірки як функції напрямку електричного поля (рисунки 3.7, 3.8). Із рисунків 3.7 та 3.8 видно, що коли електричне поле спрямоване вздовж напрямку зміщення домішки ($\beta = 90^\circ$), енергія дірки у станах типу $1S_{3/2}$ ($|M| = 3/2$; дві найнижчі сині криві на рисунках 3.7 і 3.8) є найнижчою порівняно з іншими напрямками. Натомість, коли електричне поле прикладене в протилежному напрямку ($\beta = -90^\circ$), енергія дірки у станах типу $1S_{3/2}$ є найвищою (порівняно з іншими напрямками електричного поля). Аналогічний висновок справедливий і для енергії дірки у станах типу $1S_{3/2}$ ($|M| = 1/2$; дві найнижчі червоні криві на рисунках 3.7 і 3.8).

Отримані залежності енергії діркових рівнів від величини електричного поля і його напрямку у сферичній КТ з нецентральною акцепторною домішкою визначають положення і кількість смуг поглинання електромагнітних хвиль такою системою. Ці результати подано у наступному параграфі.

3.3. Вплив електричного поля та домішки на спектральний коефіцієнт поглинання електромагнітних хвиль

Спектральний коефіцієнт поглинання електромагнітних хвиль, що виникає внаслідок міжрівневих квантових переходів, індукованих лінійно поляризованою електромагнітною хвилею вздовж осі Oz, задається виразом [63, 82, 83]:

$$\alpha_{1,2}(\omega) = \omega \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0 \varepsilon}} \frac{N \hbar \Gamma |e z_{21}|^2}{(E_2 - E_1 - \hbar \omega)^2 + (\hbar \Gamma)^2}, \quad (3.24)$$

де ω – частота падаючої електромагнітної хвилі, μ_0 – магнітна стала. N відповідає концентрації КТ. Енергії E_1 та E_2 – енергії початкового та кінцевого станів відповідно. $e z_{21}$ – матричний елемент дипольного моменту міжрівневих переходів. $\hbar \Gamma$ – енергія релаксації, що зумовлена різними факторами розсіювання, зокрема й електрон-фононою взаємодією. Було застосовано дворівневу модель, зосереджену на переході $1S_{3/2} \rightarrow 1P_{3/2}$, який є дипольно дозволеним і дає основний внесок у поглинання в розглянутому енергетичному діапазоні. Інші переходи мають значно меншу силу осцилятора, що підтверджує доцільність використання спрощеного дворівневого опису. Коли $\hbar \Gamma \rightarrow 0$, отримано:

$$\alpha_{1,2}(\omega) = \omega \pi \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0 \varepsilon}} N |e z_{21}|^2 \delta(E_2 - E_1 - \hbar \omega). \quad (3.25)$$

На практиці отримуються набори КТ, поміщених у матрицю. Незалежно від використаного методу вирощування, будь-який набір КТ завжди характеризується дисперсією за розмірами. Нехай розподіл КТ за розмірами описується гаусовою функцією:

$$g(\bar{a}, a) = \frac{1}{s \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(a - \bar{a})^2}{2s^2}\right), \quad (3.26)$$

де a – змінна (радіус КТ), s – півширина розподілу, яку часто виражають через середній радіус КТ \bar{a} і величину σ , яка задає відхилення за розмірами у відсотках: $s = \bar{a} \sigma / 100$. Враховуючи розподіл (3.26), спектральний коефіцієнт поглинання (3.25) набуде вигляду:

$$\alpha_{1,2;system}(\omega) = \int \alpha_{1,2}(\omega) g(\bar{a}, a) da = \omega \pi \sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0 \epsilon}} N \sum_i \frac{|e z_{21}|^2 g(\bar{a}, a_{0i})}{\left. \frac{d}{da} (E_2(a) - E_1(a) - \hbar \omega) \right|_{a=a_{0i}}}, \quad (3.27)$$

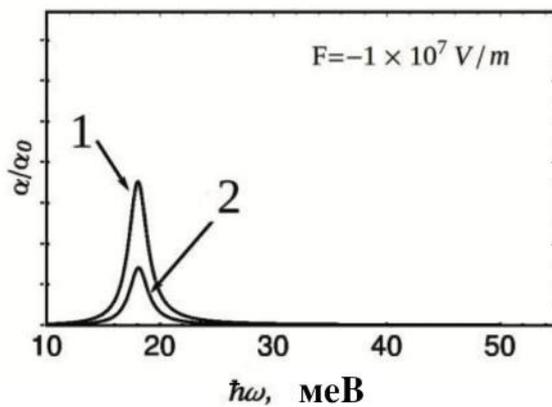
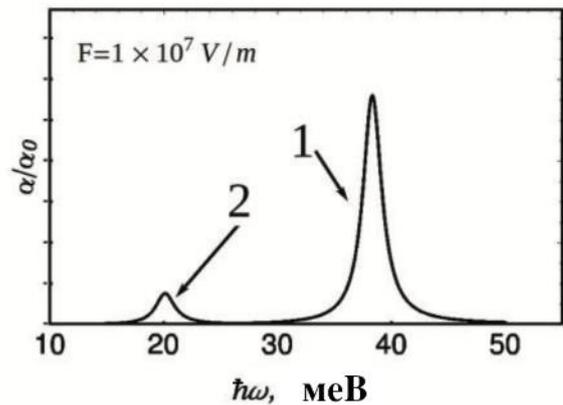
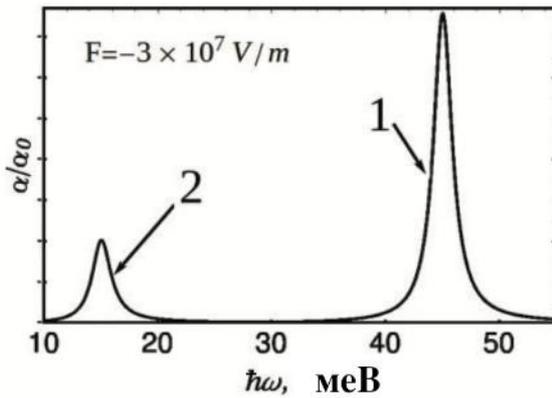
де a_{0i} – прості нулі функції $(E_2(a) - E_1(a) - \hbar \omega)$.

Використовуючи формулу (3.27), можна визначити спектральний коефіцієнт поглинання електромагнітних хвиль КТ з нецентральною акцепторною домішкою, що зумовлений міжрівневими переходами дірки у прикладеному електричному полі довільного напрямку.

Спочатку було розглянуто поглинання електромагнітних хвиль КТ, що зумовлене міжрівневими переходами дірки у випадку прикладання електричного поля, яке паралельне осі Oz. У цьому випадку зберігається циліндрична симетрія і тому квантові переходи між рівнями можливі, якщо модуль магнітного квантового числа змінюється на 1. Тому завдяки розщепленню отримано дві смуги поглинання (між станами з $|M|: 3/2 \rightarrow 3/2$ та $1/2 \rightarrow 1/2$) замість одної смуги у випадку сферичної симетрії.

Коефіцієнти спектрального оптичного поглинання для різних значень електричного поля (коли $\beta = \pi/2$), зокрема для $-3 \cdot 10^7$, $-1 \cdot 10^7$ та $1 \cdot 10^7$ В/м, за наявності акцептора на відстані $D = 20 \text{ \AA}$. Результати показують (рисунки 3.9 і 3.10), що присутність електричного поля у поєднанні з домішкою призводить до існування двох смуг поглинання, що відповідають $|M| = 1/2$ та $3/2$. Як і у випадку без електричного поля, але з нецентральною акцепторною домішкою, смуги поглинання, що відповідають переходам між станами з $|M| = 3/2$, є інтенсивнішими, ніж ті, що відповідають переходам між станами з $|M| = 1/2$.

Відстань між смугами для випадків $F=-3 \cdot 10^7$ та $F=1 \cdot 10^7$ В/м є значною. Якщо дисперсія за розмірами КТ є малою, близько 5% (рисунок 3.9), ці смуги добре розрізняються. Проте за більшої дисперсії у 20% (рисунок 3.10) смуги поглинання «накладаються» одна на одну, що робить їх експериментальне виявлення практично складним (а часто і неможливим), особливо з урахуванням температури.



$$1 - (1S_{3/2}, |M|=3/2); (1P_{3/2}, |M|=3/2)$$

$$2 - (1S_{3/2}, |M|=1/2); (1P_{3/2}, |M|=1/2)$$

Рисунок 3.9. Спектральний коефіцієнт поглинання, зумовлений міжрівневим переходом дірки між дозволеними станами для різних електричних полів. Радіус КТ становить 40 \AA , акцепторний іон розташований на відстані $D=20 \text{ \AA}$ від центру КТ, дисперсія розмірів КТ — 5%.

Водночас, навіть без прикладеного електричного поля, нецентральна домішка розщеплює стани, і дві смуги існують, хоча вони погано ідентифікуються. Це розмиття, однак, розширює широкосмуговий «хвіст» поглинання, що часто є небажаним.

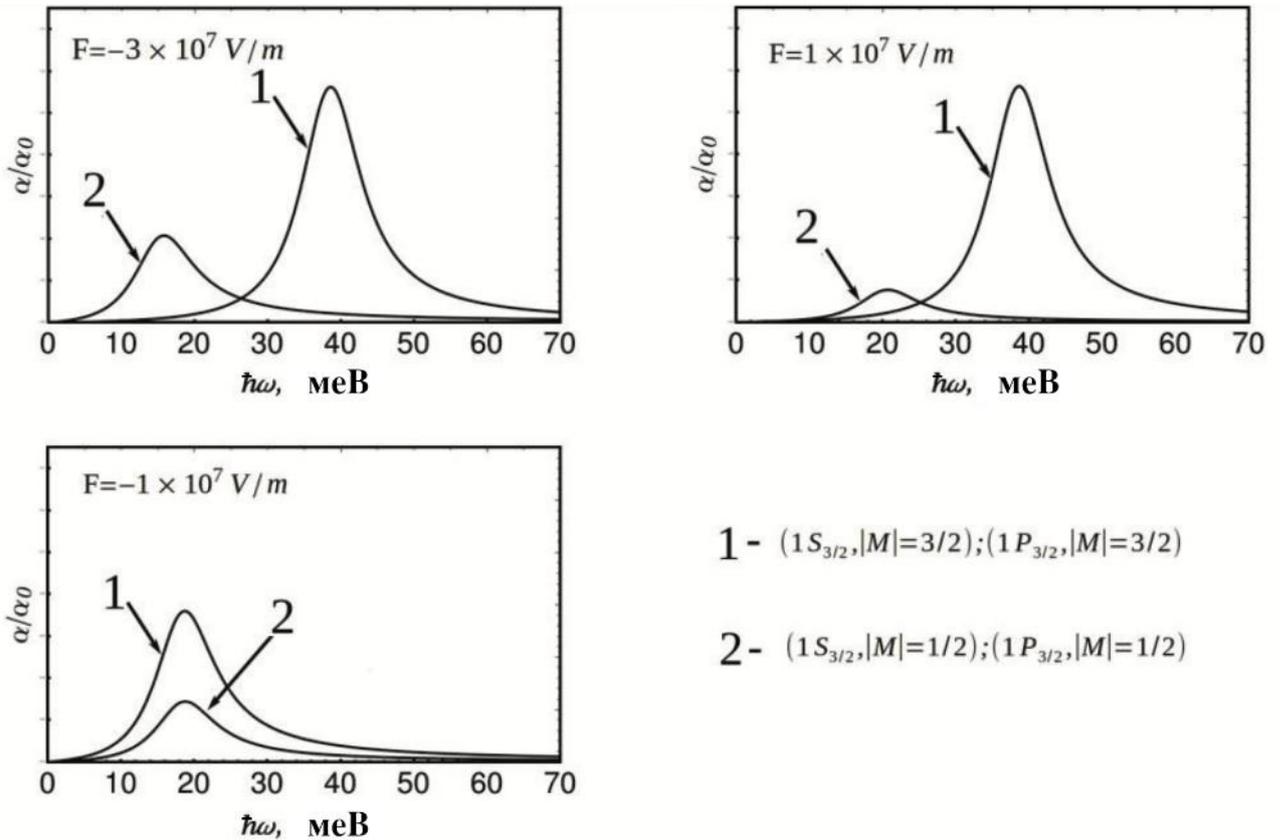


Рисунок 3.10. Спектральний коефіцієнт поглинання, зумовлений міжрівневим переходом дірки між дозволеними станами для різних електричних полів. Радіус КТ становить 40 \AA , акцепторний іон розташований на відстані $D=20 \text{ \AA}$ від центру КТ, дисперсія розмірів КТ — 20%.

Для будь-якого довільного положення домішки завжди існує певне значення електричного поля, яке відновлює виродження енергетичних рівнів (коли $\beta = \pi/2$). Наприклад, при $D = 20 \text{ \AA}$ і $a = 40 \text{ \AA}$ таке значення поля становить приблизно $-1 \cdot 10^7 \text{ В/м}$. У цьому випадку смуги поглинання збігаються, і в цілому широкосмуговий «хвіст» поглинання стає вузьким навіть за малої чи великої дисперсії розмірів.

У реальному експерименті дуже важко, а часто і неможливо напрямити електричне поле саме у напрямку зміщення акцепторної домішки. Тому в експериментах електричне поле напрямлено довільно по відношенні до

зміщення акцептора. Надалі розглянуто залежності коефіцієнта поглинання від кута β (рисунок 3.11).

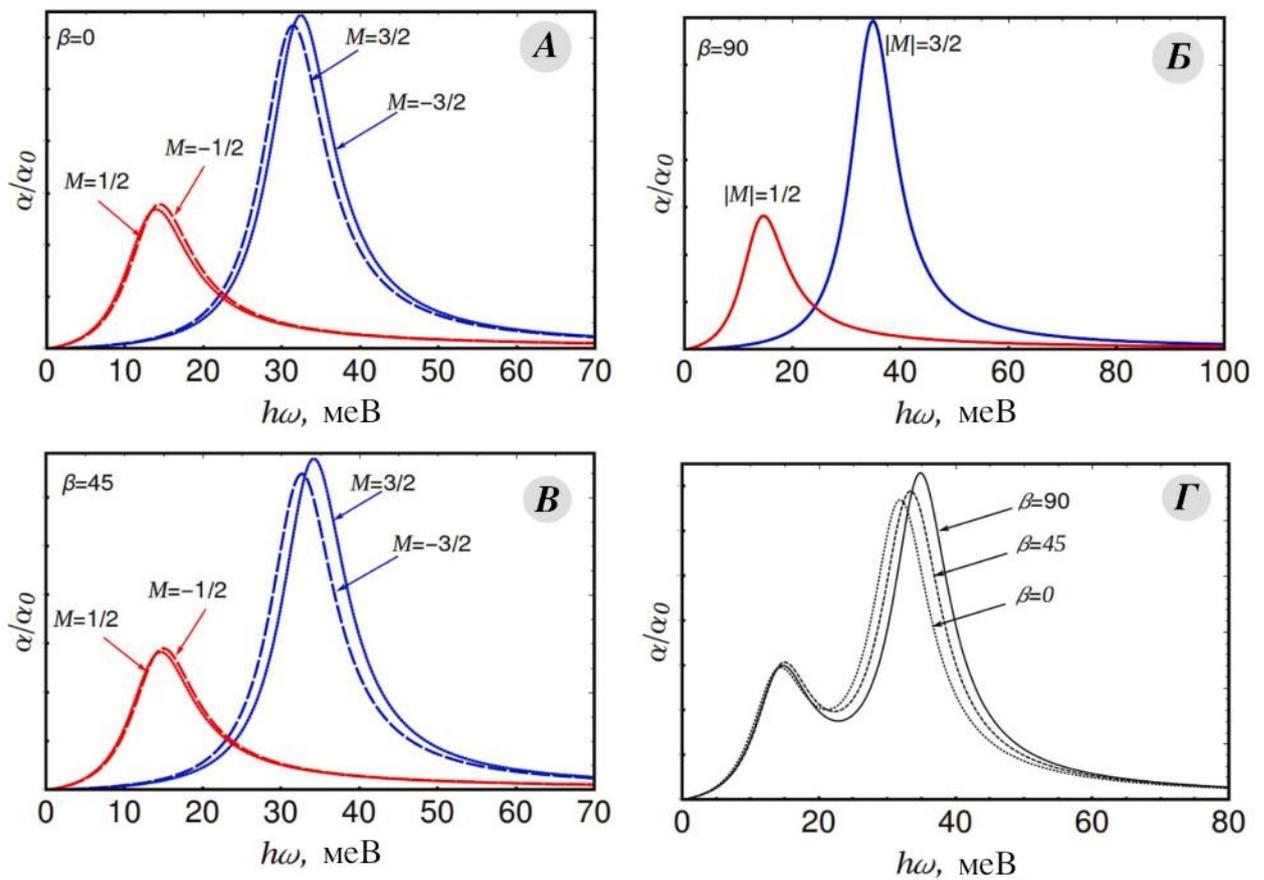


Рисунок 3.11. Спектральний коефіцієнт поглинання як функція енергії кванта електромагнітного поля. $F_{el} = 10^7$ В/м, $D = 40$ Å, $a=40$ Å. Спектральні коефіцієнти поглинання, зумовлені квантовими переходами між станами з однаковим значенням квантового числа M , показані на рисунку А ($\beta=0$), рисунок Б ($\beta=90^\circ$), рисунок В ($\beta=45^\circ$). На рисунку Г наведено повний коефіцієнт поглинання, що відповідає всім можливим переходам між станами $1S_{3/2}$ та $1P_{3/2}$ для різних β . $\alpha_0=\max(\alpha)$. Дисперсія розмірів КТ становить $\sigma=10\%$.

На рисунку 3.11 (А, Б, В) видно, що піки поглинання електромагнітних хвиль, які відповідають квантовим переходам між станами з $M=\pm 1/2$, є нижчими за ті, що відповідають переходам між станами з $M=\pm 3/2$. Подібний результат було отримано і для випадку акцепторної домішки у КТ без електричного поля [63]. А якщо врахувати всі можливі квантові переходи, то

повний коефіцієнт поглинання подано кривими на рисунку 3.11 Г. Очевидно, що прикладення електричного поля в різних напрямках змінює як положення піків поглинання (рисунок 3.11 Г), так і їх висоти. Наприклад, при $F_{el}=10^7$ В/м найвищий пік відповідає випадку, коли електричне поле спрямоване паралельно зміщенню акцептора від центру КТ. Коли напрям електричного поля поступово повертається до кута 45° або 0° (перпендикулярний напрям), висоти піків зменшуються, а їхні положення зміщуються в область нижчих енергій. Зсув положень піків для різних напрямків електричного поля відносно невеликий: для кута 90° пік поглинання розташований для значення $\hbar\omega = 35.1$ меВ, а для 0° — 31.2 меВ. Подібні результати отримано і для інших положень акцептора. Це свідчить про те, що для КТ з нецентральною акцепторною домішкою зміна напрямку електричного поля має лише незначний вплив на положення піків поглинання. Натомість величина інтенсивності електричного поля відіграє значно більшу роль [74]. У сумарному спектрі поглинання (рисунок 3.11. Г) найбільш інтенсивні піки зумовлені в основному переходами з $|M|=3/2$, які домінують у високочастотній (високоенергетичній) частині спектра, тоді як переходи з $|M|=1/2$ формують особливості в низькоенергетичній області. Із зміною напрямку електричного поля (β від 90° до 0°) сили осцилятора як для переходів з $|M|=3/2$, так і з $|M|=1/2$ зменшуються, що призводить до зниження загальної висоти піка. Положення піка на рисунку 3.11 Г визначається домінантними переходами з $|M|=3/2$, що пояснює невеликий загальний зсув енергії зі зміною β .

Абсолютне значення M , а також нецентральне розташування домішки призводять до асиметричного розщеплення, яке залежить від напрямку поля. Найнижчий енергетичний стан змінюється між $M=-3/2$ та $M=3/2$ залежно від того, чи поле спрямоване паралельно, чи антипаралельно зміщенню домішки. Із віддаленням домішки від центру симетрія системи зменшується: від сферичної до циліндричної та ще нижчої (при прикладеному полі), що підвищує енергію дірки. Розрахунки показують, що енергія дірки досягає мінімуму, коли поле

спрямоване вздовж напрямку зміщення домішки, і максимуму — у протилежному випадку. Ці зміни впливають на спектр оптичного поглинання: піки поглинання є вищими для переходів із $|M|=3/2$ порівняно з $|M|=1/2$. Напрямок електричного поля дещо змінює висоти та положення піків поглинання, причому найбільші зсуви спостерігаються тоді, коли поле паралельне зміщенню домішки. Проте інтенсивність електричного поля має значно більший вплив на спектр поглинання, ніж його напрям.

Висновки до розділу 3

У цьому розділі досліджено вплив акцепторної домішки та величини зовнішнього електричного поля на енергетичний спектр і спектральні характеристики поглинання КТ.

1. Наявність акцепторної домішки у нецентральному положенні порушує симетрію системи та призводить до розщеплення енергетичних рівнів дірок, що формує дві групи смуг поглинання.
2. Зовнішнє електричне поле у поєднанні з акцепторною домішкою змінює положення та інтенсивність піків спектрального коефіцієнта поглинання.
3. Основний внесок у спектр роблять переходи з $|M|=3/2$, тоді як переходи з $|M|=1/2$ формують менш виражені особливості у низькоенергетичній області.
4. Врахування дисперсії розмірів КТ помітно впливає на форму спектра: при малих значеннях ($\sigma \approx 5\%$) смуги, зумовлені впливом акцепторної домішки та електричного поля, чітко розрізняються, а при більших ($\sigma \approx 20\%$) вони перекриваються.
5. Сумарний коефіцієнт поглинання формується з урахуванням усіх можливих переходів і визначається переважно переходами з $|M|=3/2$, що зумовлює домінування високочастотної частини спектра. Його висота та положення змінюються під дією акцепторної домішки та зовнішнього електричного поля, причому величина напруженості поля має вирішальне значення. Величина напруженості електричного поля є основним фактором, що визначає зміни у спектрі поглинання, тоді як його напрям впливає переважно на інтенсивність та дещо зміщує положення піків. Найбільші зсуви спостерігаються при паралельній орієнтації поля відносно зміщення акцепторної домішки.

РОЗДІЛ 4

ЕНЕРГЕТИЧНИЙ СПЕКТР ВПОРЯДКОВАНИХ МАСИВІВ ОДНАКОВИХ КВАНТОВИХ ТОЧОК

КТ, що розташовані у впорядкованих масивах, становлять значний інтерес для сучасної наноелектроніки та оптоелектроніки. Вони дозволяють керувати спектром енергетичних станів і створювати штучні кристали з наперед заданими властивостями.

У цьому розділі досліджуються впорядковані масиви КТ різної розмірності: одновимірні, двовимірні та тривимірні. Розглядаються системи, у яких усі КТ мають однакові параметри та періодично розташовані у відповідній ґратці. Як базові геометричні форми обрано сферичні та кубічні КТ, що дозволяє провести порівняльний аналіз впливу форми на спектр енергетичних станів.

Для розрахунку зонної структури використовується метод плоских хвиль. На основі отриманих результатів побудовано зонні спектри та проаналізовано їх поведінку у характерних симетричних точках зони Брілюена.

Особлива увага приділяється порівнянню спектрів енергії для масивів із сферичними та кубічними КТ у базисі. Показано, що форма КТ впливає на ширину мінізон, а також на розподіл підзон, зокрема в області точок високої симетрії зони Брілюена. Отримані результати дозволяють оцінити роль геометрії КТ у формуванні мінізонної структури та є важливими для прогнозування оптичних і транспортних властивостей квазічастинок у масивах із різною симетрією. Вони відкривають можливості для практичного використання впорядкованих масивів КТ у створенні нових матеріалів із заданими електронними характеристиками, зокрема у фотоніці, сенсорних системах та елементах наноелектроніки.

Отримані результати опубліковано у роботах [1*, 7*, 8*, 11*].

4.1. Теорія плоских хвиль для одно-, дво-, та тривимірних масивів однакових квантових точок різної форми

Розглядається тривимірний впорядкований масив КТ, центри яких перебувають на відстані L . Розглядаються два випадки: КТ, що утворюють надгратку КТ є сферичної форми і кубічної. Розміри кубічної КТ вибиралися так, щоб її об'єм дорівнював би відповідному об'єму сферичної КТ, тобто $a_{\text{куб}}^3 = 4/3 \pi a^3$ (рисунок 4.1).

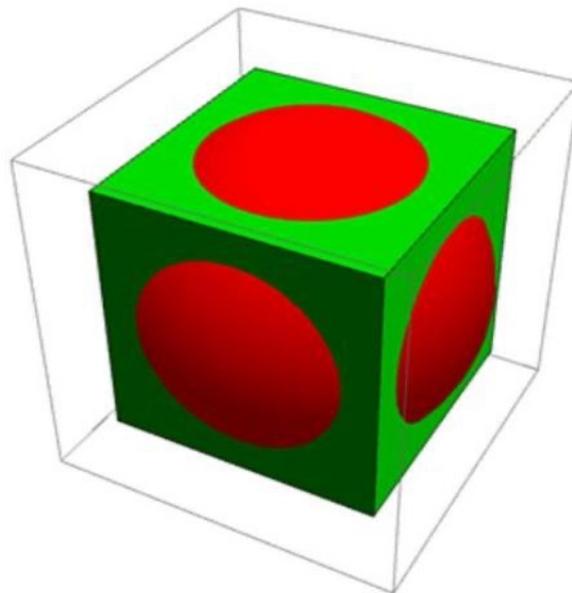


Рисунок 4.1. Схематичне зображення КТ різних форм (сферична і кубічна), але однакового об'єму.

У випадку двовимірного масиву ці впорядковані системи матимуть вигляд, як на рисунку 4.2. Тут a — радіус сферичної КТ, а $a_{\text{куб}}$ — сторона кубічної КТ.

Гамільтоніан електрона у періодичній системі впорядкованих КТ матиме вигляд:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \vec{\nabla} \frac{1}{m(\vec{r})} \vec{\nabla} + U(\vec{r}), \quad (4.1)$$

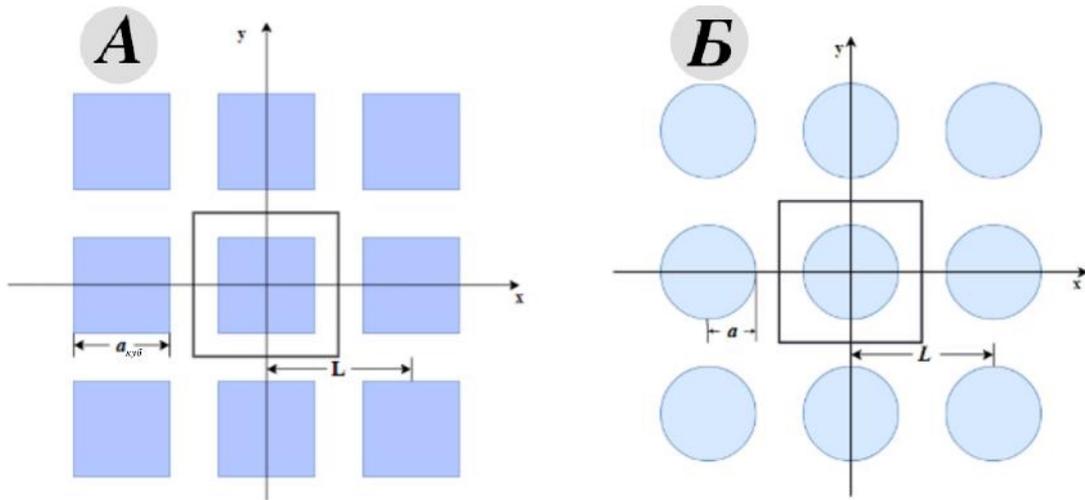


Рисунок 4.2. Геометричні моделі двовимірної надґратки впорядкованих КТ кубічної (А) та сферичної (Б) форм.

де $U(\vec{r})$ – періодична потенціальна енергія електрона в надґратці КТ. Зокрема,

$$U(\vec{r}) = \begin{cases} 0, & \text{у КТ,} \\ U_0, & \text{у матриці.} \end{cases} \quad (4.2)$$

Аналогічно і з ефективною масою

$$m(\vec{r}) = \begin{cases} m_1, & \text{у КТ,} \\ m_2, & \text{у матриці.} \end{cases} \quad (4.3)$$

Хвильова функція, що є розв'язком рівняння Шредінгера з гамільтоніаном (4.1) має задовольняти періодичним умовам. Відповідно до МПХ такою функцією є лінійна комбінація плоских хвиль [84-87]:

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{L^3} \sum_{n_x, n_y, n_z} C_{n_x, n_y, n_z} \exp[i(k_{n_x} x + k_{n_y} y + k_{n_z} z)], \quad (4.4)$$

де $k_{n_i} = k_i + n_i K$, $i = x, y, z$, $K = 2\pi/L$, k_i – компоненти хвильового вектора.

Підставляючи функцію (4.4) у рівняння Шредінгера з гамільтоніаном (4.1), домножуючи зліва на спряжену функцію до (4.4), отримано систему лінійних однорідних рівнянь відносно коефіцієнтів розкладу C_{n_x, n_y, n_z} . Цю систему також можна записати у вигляді матриці. Матричні елементи гамільтоніана (4.1) подано у вигляді:

$$H_{n'_x, n_x; n'_y, n_y; n'_z, n_z} = -\hbar^2 \left[\frac{1}{2m_2} \delta_{n'_x, n_x} \delta_{n'_y, n_y} \delta_{n'_z, n_z} + \frac{1}{2m_{12} L^3} Q \right] (k'_{n_x} k_{n_x} + k'_{n_y} k_{n_y} + k'_{n_z} k_{n_z}) + \left(\delta_{n'_x, n_x} \delta_{n'_y, n_y} \delta_{n'_z, n_z} - \frac{Q}{L^3} \right) U_0 \quad (4.5)$$

для тривимірного масиву сферичних КТ. Для тривимірного впорядкованого масиву кубічних КТ аналогічний матричний елемент запишеться у вигляді:

$$H_{n'_x, n_x; n'_y, n_y; n'_z, n_z} = -\hbar^2 \left[\frac{1}{2m_2} \delta_{n'_x, n_x} \delta_{n'_y, n_y} \delta_{n'_z, n_z} + \frac{D_x D_y D_z}{2m_{12} L^3} \right] (k'_{n_x} k_{n_x} + k'_{n_y} k_{n_y} + k'_{n_z} k_{n_z}) + \left(\delta_{n'_x, n_x} \delta_{n'_y, n_y} \delta_{n'_z, n_z} - \frac{D_x D_y D_z}{L^3} \right) U_0, \quad (4.6)$$

$$\frac{1}{m_{12}} = \frac{1}{m_1} - \frac{1}{m_2}, \quad k'_{n_x} = k_x + n'_x, \quad k'_{n_y} = k_y + n'_y, \quad k'_{n_z} = k_z + n'_z,$$

$$Q = \begin{cases} \frac{4}{3} \pi a^3, & n'_x = n_x \wedge n'_y = n_y \wedge n'_z = n_z, \\ \frac{4\pi (\sin(aK\lambda) - aK\lambda \cos(aK\lambda))}{(K\lambda)^3}, & n'_x \neq n_x \vee n'_y \neq n_y \vee n'_z \neq n_z, \end{cases}$$

$$D_s = \begin{cases} a_{\text{куб}}, & n'_x = n_x \wedge n'_y = n_y \wedge n'_z = n_z, \\ \frac{\sin(\pi(n_s - n'_s)a/L)}{\pi(n_s - n'_s)}, & n'_x \neq n_x \vee n'_y \neq n_y \vee n'_z \neq n_z, \end{cases}$$

$$\lambda = \sqrt{(n_x - n'_x)^2 + (n_y - n'_y)^2 + (n_z - n'_z)^2}, \quad s = x, y, z,$$

$$\delta_{n_q, n'_q} = \frac{1}{L} \sum_{n_q, n'_q} \int_{-L/2}^{L/2} e^{i(k_{n_q} - k_{n'_q})q} dq, \quad q = (x, y, z).$$

Для двовимірного чи одновимірного масивів КТ отримуються аналогічні формули за умови, що трансляція існує у двовимірному чи одновимірному випадках.

Практично для обчислення енергії як функції хвильового вектора задається значення хвильового вектора і діагоналізується матриця з матричними елементами $H_{n'_x, n_x; n'_y, n_y; n'_z, n_z}$ (4.5) для сферичних чи (4.6) для кубічних надґраток КТ. Результати обчислень подано у наступному параграфі.

4.2. Розрахунок мінізонної структури над'раток квантових точок

Конкретні розрахунки електронної мінізонної структури були виконані для гетеросистеми InAs/GaAs з такими параметрами: $m_1=0.067m_e$, $m_2=0.023m_e$, $U_0=0.77\text{eV}$ [72, 73]. Використано таку кількість плоских хвиль, тобто діапазон значень n_x, n_y, n_z , який забезпечує точність обчислень із похибкою не більше 0,1 %. На практиці $n_x, n_y, n_z \in [-n_{max}, n_{max}]$, де $n_{max} = 7$.

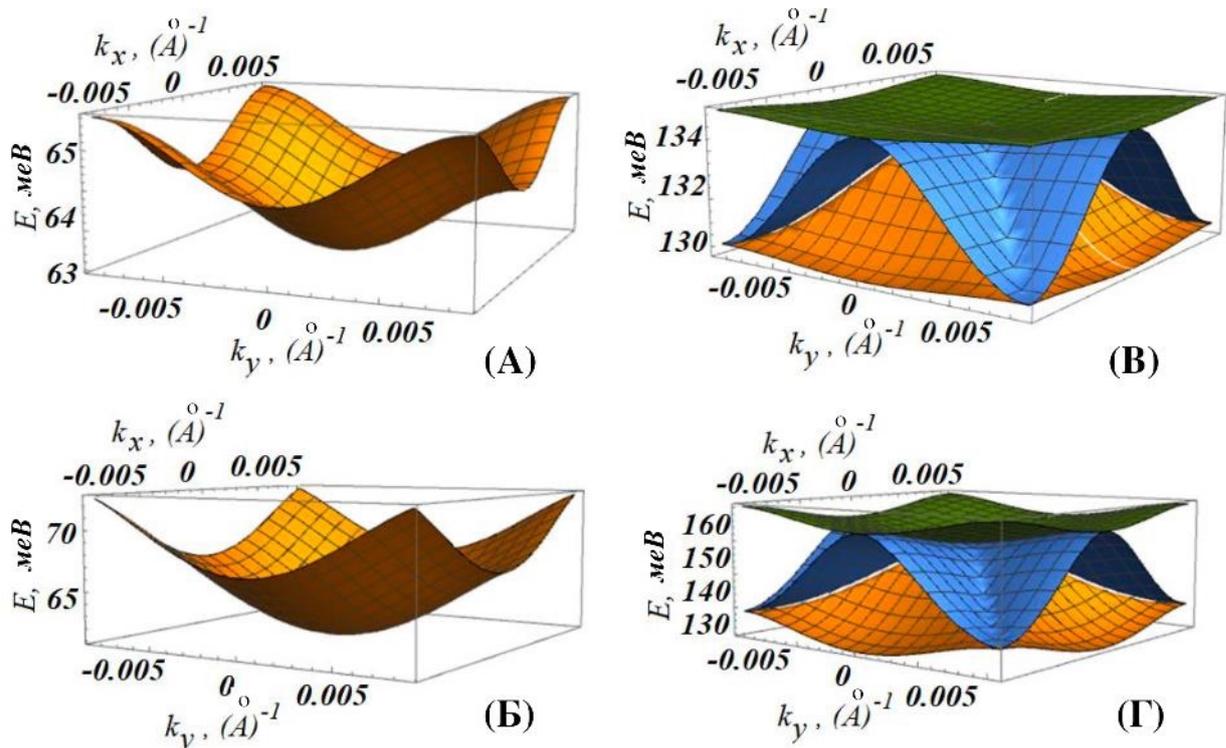


Рисунок 4.3. Мінізонний спектр тривимірної НКТ. Енергетична залежність першої мінізони електрона для: А) кубічних НКТ; Б) сферичних НКТ від проєкцій двовимірного хвильового вектора (k_x, k_y) , $k_z = 0$. Енергетична залежність наступних мінізон для: В) кубічних НКТ; Г) сферичних НКТ від проєкцій двовимірного хвильового (k_x, k_y) , $k_z = 0$, де $a = 90 \text{ \AA}$, $L = 192 \text{ \AA}$. Сторона куба і радіус сфери пов'язані співвідношенням $a_{\text{куб}}^3 = 4/3 \pi a^3$.

Для порівняння впливу форми КТ на енергетичний мінізонний спектр було зроблено дві апроксимації: по-перше, КТ мають однакові об'єми, тому їхні розміри пропорційні; по-друге, у всіх типах над'раток елементарна комірка є

кубом. Друга апроксимація еквівалентна твердженню, що надгратки мають однакову густину КТ.

Спочатку розглянуто тривимірну надгратку КТ. У сферичній НКТ основна мінізона (рисунок 4.3 Б) утворена s-електронними рівнями, а наступна — p-рівнями (рисунок 4.3 Г), які розщеплюються на три мінізони, що частково перекриваються. Обчислений енергетичний мінізоний спектр електрона в кубічній надгратці КТ якісно схожий до сферичної (рисунок 4.3 А, В). Однак енергії у точці Γ першої мінізони Брілюена для кубічних НКТ є меншими.

Для повного і всебічного аналізу енергетичної залежності мінізон побудованого графіки у симетричних точках зони Брілюена. Схематично тривимірну і двовимірну зони Брілюена та характерні точки подано на рисунку 4.4.

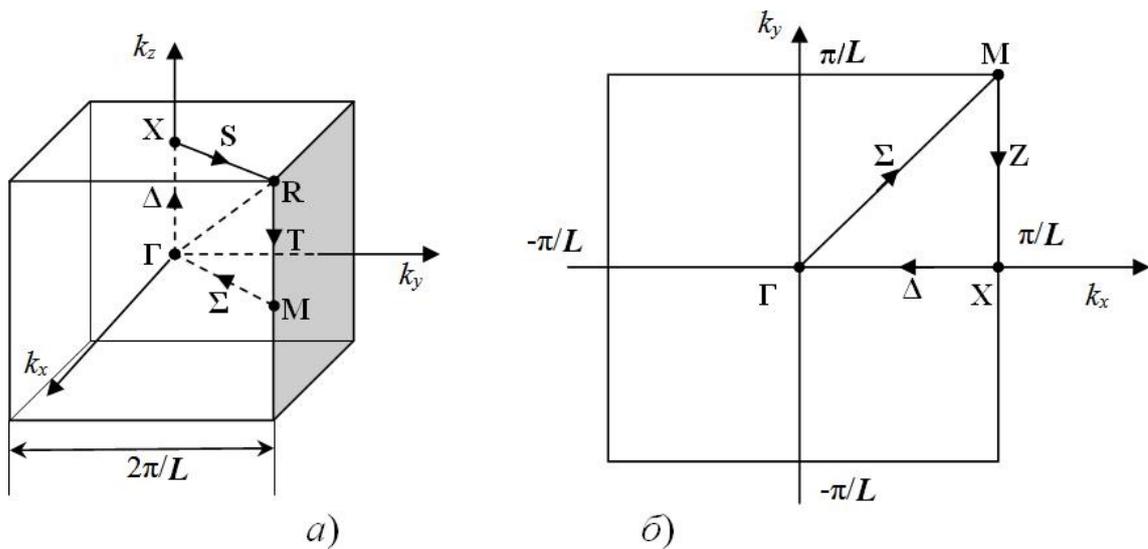


Рисунок 4.4. Зона Брілюена для тривимірної (а) і двовимірної (б) НКТ.

Координати симетричних точок такі: Γ (0, 0, 0), X (0, 0, π/L), R (π/L , π/L , π/L), M (π/L , π/L , 0). А характерні напрямки: Δ { $\Gamma \rightarrow X$ }, S { $X \rightarrow R$ }, T { $R \rightarrow M$ }, Σ { $M \rightarrow \Gamma$ }. У випадку двовимірної НКТ – Γ (0, 0), X (π/L , 0), M (π/L , π/L). А характерні напрямки прийнято позначати так: Σ { $\Gamma \rightarrow M$ }, Z { $M \rightarrow X$ }, Δ { $X \rightarrow \Gamma$ }.

На рисунку 4.5 подано електронні спектри у симетричних точках зони Брілюена для чотирьох s -, p -мінізон для НКТ різної форми, розраховані як для сферичних, так і для кубічних НКТ. Характер залежності енергетичного спектра залишається однаковим. З рисунка видно, що максимальне значення енергії першої мінізони досягається в точці R , а мінімальне — в точці Γ . Графіки також демонструють, що зони II, III та IV є трикратно виродженими в точках Γ та R .

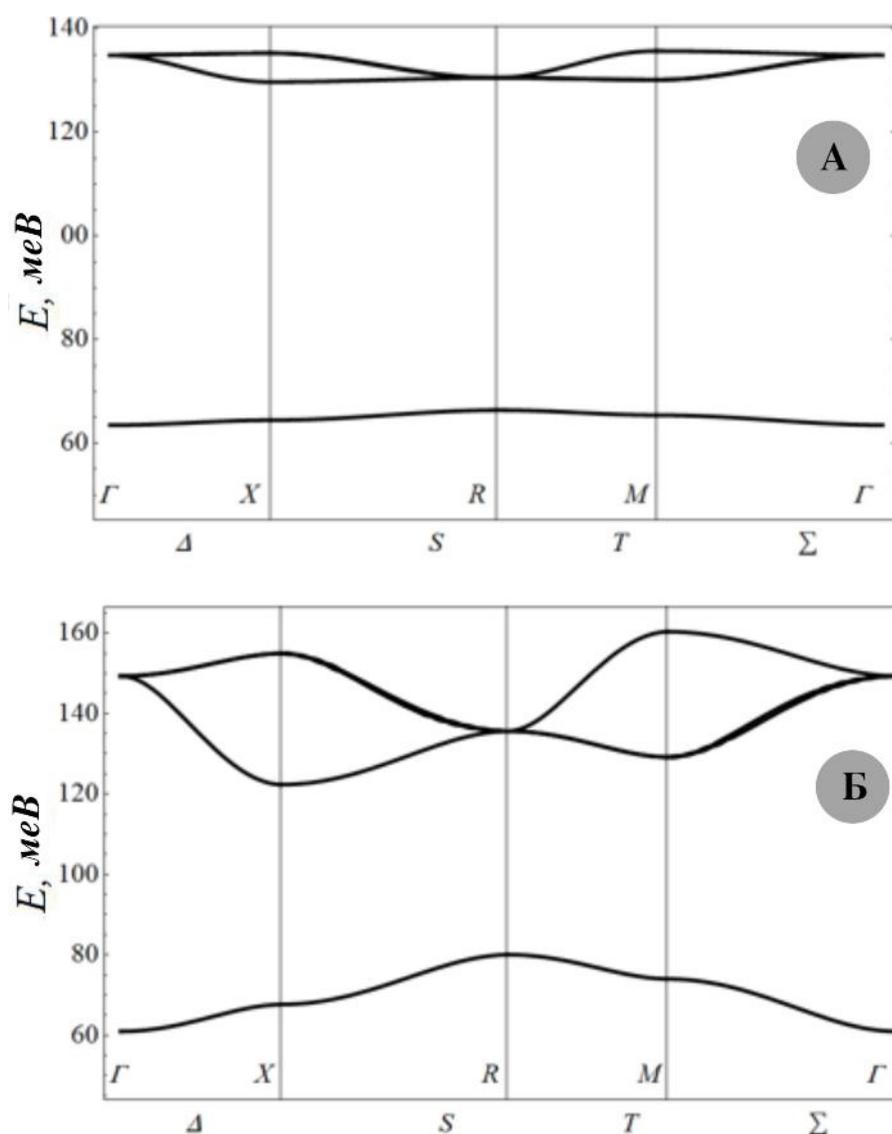


Рисунок 4.5. Електронний мінізонний спектр НКТ сферичної форми (А) і кубічної форми (Б). $a = 90 \text{ \AA}$, $L = 192 \text{ \AA}$. Сторона куба і радіус сфери пов'язані співвідношенням $a_{\text{куб}}^3 = 4/3 \pi a^3$.

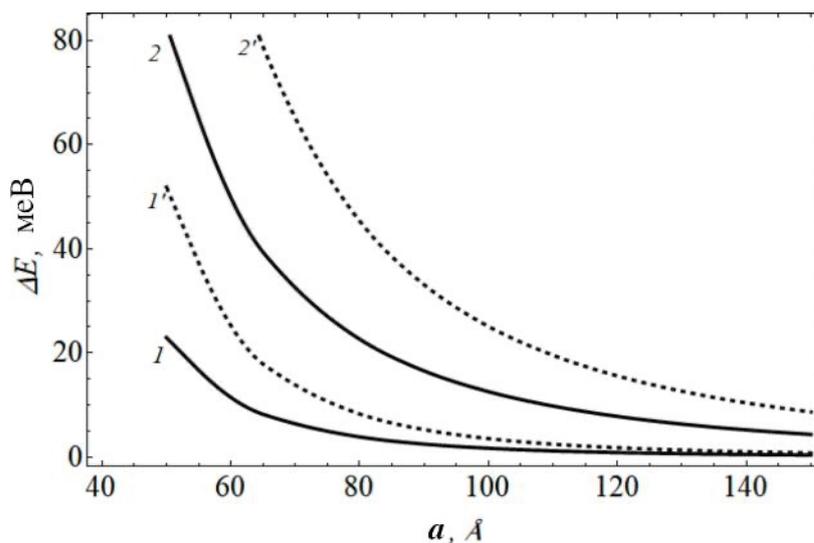


Рисунок 4.6. Залежність ширини електронних мінізон від радіуса сферичних і кубічних НКТ. Суцільна лінія позначає ширину першої зони надгратки (1, 2), а штрихова — ширину другої зони (1', 2'). 1, 1' — ширини зон для НКТ сферичної форми; 2, 2' — для НКТ кубічної форми. Сторона куба і радіус сфери пов'язані співвідношенням $a_{\text{куб}}^3 = 4/3\pi a^3$.

Було проведено порівняння ширини мінізон у НКТ, сформованих КТ різної форми (рисунок 4.6). Графіки показують, що зі збільшенням радіуса (тобто зі зростанням об'єму КТ) енергія всіх станів зменшується, незалежно від форми КТ. Це зумовлено тим, що енергія електрона в ізольованій КТ знижується, тоді як імовірність перебування електрона всередині КТ зростає.

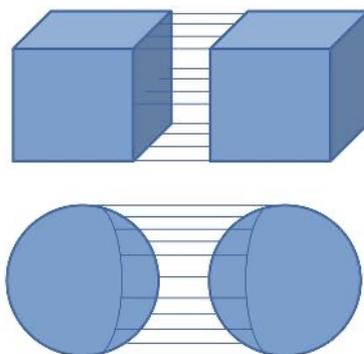


Рисунок 4.7. Схематичне порівняння сусідніх поверхонь НКТ кубічної та сферичної форм.

Відповідно, імовірність тунелювання електрона в сусідні КТ зменшується. Крім того, видно, що кубічна КТ характеризується більшою шириною зон порівняно зі сферичною КТ. Це пояснюється тим, що в кубічній КТ рух електрона має більші обмеження, ніж у сферичній КТ. Однак енергія електрона у точці Γ для НКТ кубічної форми має меншу енергію. А це зумовлено тим, що при однакових об'ємах (кубічна і сферична) загальна поверхня кубічної КТ (яка перебуває у сусідстві з іншою КТ) розташована ближче, ніж для сферичних КТ (рисунок 4.7).

Аналогічні обчислення проведено також і для масивів КТ GaAs/AlAs для випадків одно-, дво- і тривимірних НКТ (рисунок 4.8).

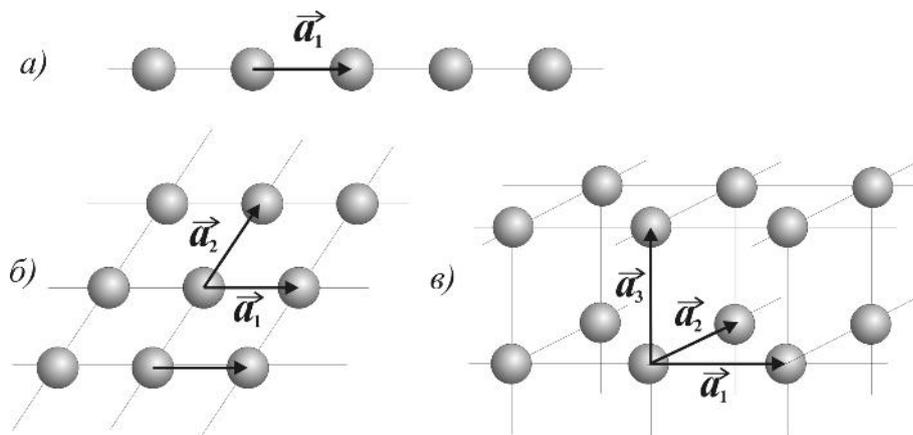


Рисунок 4.8 Моделі одно- (а), дво- (б) і тривимірних (в) НКТ, $a_1 = a_2 = a_3 = L$.

На рисунку 4.9 подано електронну мінізонну структуру сферичної НКТ для $a=30 \text{ \AA}$ та $a=36 \text{ \AA}$. Обчислення показали, що в окремій КТ з радіусом $a=30 \text{ \AA}$ існують s - і три p -стани електрона, а коли $a=36 \text{ \AA}$, то у КТ виникають ще п'ять d -станів.

Розрахунок закону дисперсії НКТ з $a=30 \text{ \AA}$ проводився з використанням хвильової функції електрона НКТ у вигляді (4.4). Коли ж провести обчислення методом сильного зв'язку, як у [26-28], то отримуємо закон дисперсії, що зображений штриховими лініями на рисунку 4.9 а. Нижня s -мінізона (крива 1') описується плавною залежністю енергій від k з максимальним значенням в т. R

зони Брілюена. Для р-мінізон отримано два типи залежностей енергії електрона від k : р-мінізона (крива 2') і вироджена p_x - p_y -мінізона (крива 3'-4'). З графіків видно, що точки симетрії зони Брілюена X та M є точками екстремуму законів дисперсії.

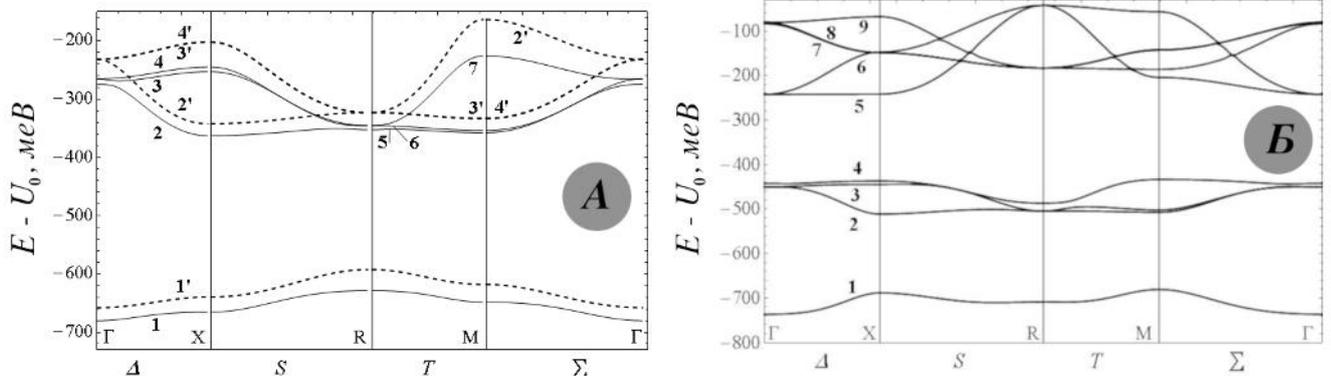


Рисунок 4.9. Електронні енергетичні мінізони в зоні Брілюена в тривимірній НКТ сферичної форми для $a=30 \text{ \AA}$ (А) та $a=36 \text{ \AA}$ (Б). Штрихові лінії — результати, що отримані методом сильного зв'язку, суцільні — методом плоских хвиль. Гетеросистема GaAs/AlAs.

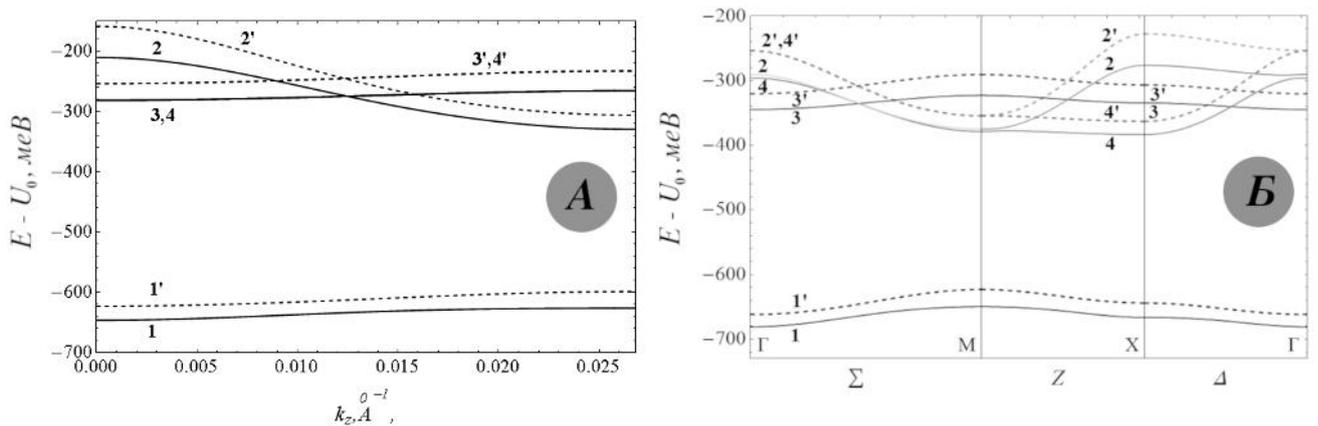


Рисунок 4.10. Мінізонний спектр електрона в одновимірній (А) і в двовимірній НКТ (Б) утвореній КТ сферичної форми. Радіус КТ $a=30 \text{ \AA}$. Штрихові лінії — результати, що отримані методом сильного зв'язку, суцільні — методом плоских хвиль. Гетеросистема GaAs/AlAs.

Закони дисперсії для електрона одновимірної та двовимірної НКТ зображено на рисунку 4.10. З рисунка видно, що для одновимірної НКТ (рисунок 4.10 А) максимум та мінімум для p -мінізон перебуває на краях зони Брілюена, а їхній перетин є посередині зони. Також видно, що існує характерне виродження зон: лінія 2',3' відповідає x, y -мінізонам, а лінія 4' – z -мінізоні.

Як видно з рисунків 4.9 і 4.10 енергії, що отримані методом плоских хвиль є меншими, ніж енергії, що отримані методом сильного зв'язку у наближенні найближчих сусідів. Це пояснюється тим, що у методі плоских хвиль можна збільшувати точність шляхом врахування більшої кількості хвиль (змінюючи n_{max}). Однак похибка між методами не перевищує 5% для всіх енергій у симетричних точках зони Брілюена.

У двовимірній НКТ (рисунок 4.10 Б) характерні залежності енергій є проміжними між одно- і тривимірним випадками. Для p -мінізон величини максимумів і мінімумів перебувають в точках Γ, M, X . У напрямку S зони Брілюена отримано виродження мінізон p_x-p_y .

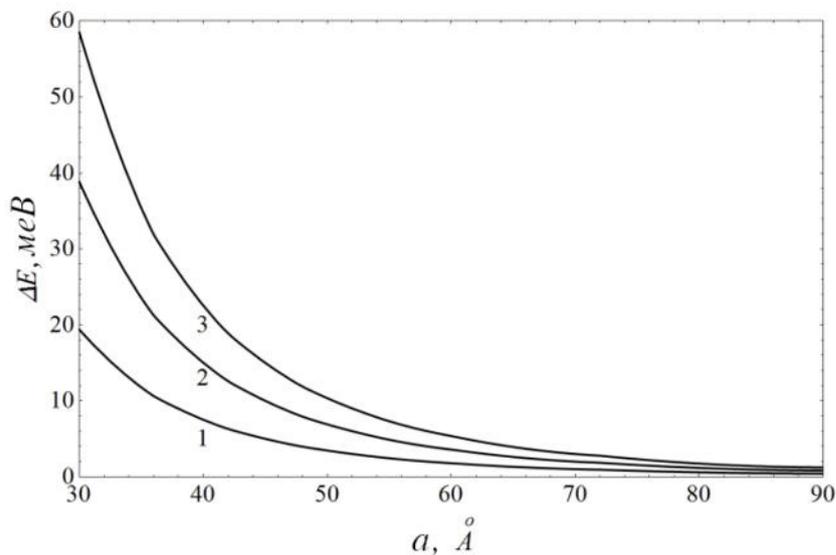


Рисунок 4.11. Залежність ширини найнижчої електронної мінізони у НКТ GaAs/AlAs утвореній КТ сферичної форми. Крива 1 – для одновимірної, 2 – двовимірної, 3 – тривимірної НКТ.

Далі проаналізовано вплив розміру КТ на ширину електронних мінізон. Ширини мінізон обчислено на основі методу плоских хвиль. З рисунка 4.11 видно, що для s-мінізон незалежно від вимірності НКТ ширина мінізон монотонно спадає при збільшенні радіуса КТ. Однак величина ширини мінізони для фіксованого значення радіуса КТ для тривимірної НКТ є найбільшою, а для одновимірної – найменшою. Розрахунки також показали, що зменшення періоду НКТ зростає ширина енергетичних зон і відбувається їхній зсув у область більших енергій. Отримані результати також пояснюються збільшенням перекриття електронних ХВ, що перебувають у сусідніх КТ. Схожі залежності отримано і для наступних електронних р-, d-мінізон НКТ.

Висновки до розділу 4

1. Обчислення показали, що ширина мінізон та характер електронного енергетичного спектра вагомо залежать від вимірності НКТ. Для тривимірних структур ширина мінізон є найбільшою завдяки сильнішому перекриттю хвильових функцій сусідніх КТ у всіх просторових напрямках, що підсилює тунельну взаємодію. У двовимірних надґратках ширини мінізон займають проміжне значення, тоді як в одновимірних — вони найвужчі, оскільки електрона тунелює лише вздовж одного напрямку, і можливості для перекриття хвильових функцій є малими. Таким чином, збільшення вимірності НКТ призводить до зростання ширини мінізон.
2. Характер мінізонного спектра для кубічних та сферичних НКТ загалом подібний: у сферичній структурі перша мінізона формується з s -рівнів, наступна — з трьох вироджених p -рівнів, аналогічна структура спостерігається й для випадку кубічної КТ. Проте кількісні відмінності суттєві: кубічні НКТ мають більшу ширину мінізон порівняно зі сферичними, що зумовлено відмінностями у геометрії — для кубічних КТ ефективна площа контакту з сусідніми КТ є більшою, а отже, ймовірність тунелювання електрона зростає. У той же час енергії у точці Γ першої мінізони для кубічних НКТ є меншими, ніж для сферичних, через близьке розташування поверхонь сусідніх КТ. Отже, форма КТ прямо впливає на ширину зон та положення енергетичних рівнів, при цьому кубічні НКТ забезпечують сильніший зв'язок і ширші мінізони.
3. Залежність ширини мінізон від радіуса КТ виявила загальну закономірність: зі зростанням розміру КТ ширина мінізон зменшується, незалежно від вимірності НКТ. Це пояснюється зменшенням енергії електрона в ізольованій КТ та зниженням можливості тунелювання.

Проте величини ширин мінізон для фіксованого радіуса КТ суттєво відрізняються: у тривимірних НКТ вони максимальні, у двовимірних — проміжні, а в одновимірних — мінімальні. Таким чином, на ширину зон впливають два чинники: розмір окремих КТ та вимірність самої надгратки. При цьому ефект вимірності переважає, оскільки саме кількість напрямків тунельного перекриття визначає масштаб розширення мінізон.

4. Аналіз показав, що результати, отримані методом плоских хвиль, і методом сильного зв'язку якісно узгоджуються: у обох випадках відтворюється структура s- та p-мінізон, їхні екстремуми в симетричних точках зони Брілюена та характерні виродження. Водночас є певні кількісні відмінності: енергії, розраховані методом плоских хвиль, виявляються меншими за результати методу сильного зв'язку у наближенні найближчих сусідів. Це пов'язано з тим, що метод плоских хвиль дозволяє регулювати точність шляхом збільшення кількості базисних функцій, тоді як у методі сильного зв'язку точність обмежена апроксимацією найсильніших локальних зв'язків. Попри це, розбіжність не перевищує 5%, що підтверджує надійність обох методів і доцільність їхнього комбінованого використання для аналізу мінізонної структури НКТ.

РОЗДІЛ 5

НАДҐРАТКИ КВАНТОВИХ ТОЧОК З ДВОМА РІЗНИМИ КВАНТОВИМИ ТОЧКАМИ У БАЗИСІ

У цьому розділі проведено побудову теорії НКТ з двома КТ у базисі. Для опису енергетичної структури використано метод сильного зв'язку у наближенні найближчих сусідів. Такий підхід дозволяє врахувати як локалізовані стани в окремих КТ, так і їхнє взаємне тунельне перекриття у межах надґратки.

Обчислення проведено для одновимірних, двовимірних та тривимірних НКТ з двома різними КТ у базисі. У всіх випадках КТ вважалися сферичними, що забезпечує коректне врахування симетрії хвильових функцій та спрощує інтерпретацію отриманих мінізонних спектрів.

Розглянуто два принципово різних випадки. По-перше, коли дві КТ у базисі є однаковими за розмірами, але складаються з різних матеріалів. По-друге, проаналізовано ситуацію, коли КТ у базисі є з однакового матеріалу, але мають різні розміри. Для кожної з розглянутих конфігурацій досліджено залежність ширини мінізон від розмірів КТ та від періоду надґратки. Встановлено умови, за яких спостерігається посилення або послаблення тунельної взаємодії між різними КТ у базисі. Окрему увагу приділено відмінностям у дисперсійних залежностях для одно-, дво- і тривимірних випадків, що демонструють певні відмінності у перекритті хвильових функцій.

Отримані результати створюють основу для подальшого аналізу оптичних та транспортних властивостей НКТ з двома різними КТ у базисі та можуть бути використані для проєктування структур з наперед заданими енергетичними характеристиками.

Результати проведених досліджень опубліковані у наукових роботах [4*, 7*, 8*, 11*].

5.1. Модель і розрахунок електронних мінізон методом сильного зв'язку

МСЗ для обчислення електронної зонної структури широко використовується у фізиці твердого тіла і ґрунтується на хвильових функціях окремих атомів [88-90]. Аналогічний підхід застосовується до і КТ.

Спочатку розглядається НКТ, де КТ розташовані вздовж одного напрямку. Система моделюється сферичними КТ. В цій НКТ існують два типи КТ (вони відрізняються розмірами або матеріалом), які чергуються у просторі. Відстань між центрами КТ одного типу дорівнює a , а між центрами КТ різних типів — $a/2$. Відстань між поверхнями КТ різних типів позначено d .

Для зручності введено індекс $i=A, B$, який відповідає за тип КТ (різні розміри та різні матеріали). Радіуси КТ дорівнюють R_A та R_B відповідно. У задачі розглядаються такі розміри КТ, за яких у кожній КТ існує лише один s -стан електрона, а збуджені стани відсутні. Це досягається шляхом вибору відповідного матеріалу КТ та її розміру. Для розрахунків використовується МСЗ в наближенні найближчих сусідів. Як показують обчислення, внесок взаємодії з більш віддаленими сусідами становить менше ніж 0,5 %.

Гамільтоніан такої системи матиме вигляд:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \frac{1}{m(\vec{r})} \vec{\nabla} + V(\vec{r}) \quad (5.1)$$

або його можна подати у такому вигляді

$$\hat{H} = \hat{H}_{KT}^A + \hat{H}_{KT}^B + \Delta V(\vec{r}), \quad (5.2)$$

де

$$\hat{H}_{KT}^A = -\frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \frac{1}{m_A(\vec{r})} \vec{\nabla} + V_0^A(\vec{r}) \quad (5.3)$$

і

$$\hat{H}_{KT}^B = -\frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \frac{1}{m_B(\vec{r})} \vec{\nabla} + V_0^B(\vec{r}) \quad (5.4)$$

— гамільтоніани КТ типу А та В відповідно. Потенціальна енергія у гамільтоніані (5.1) має вигляд:

$$V(\vec{r}) = V_0^A(\vec{r}) + V_0^B(\vec{r}) + \Delta V(\vec{r}). \quad (5.5)$$

Тому

$$\Delta V(\vec{r}) = \sum_{R_A \neq 0} V_0^A(\vec{r} - \vec{R}_A) + \sum_{R_B \neq 0} V_0^B(\vec{r} - \vec{R}_B). \quad (5.6)$$

Тут $V_A^0(\vec{r}), V_B^0(\vec{r}), m_A(\vec{r}), m_B(\vec{r})$ — потенціальна енергія та ефективна маса електрона у відповідних КТ. Як і попередніх розділах, використовується модель прямокутних потенціальних ям і бар'єрів:

$$V_0^{A,B}(\vec{r}) = \begin{cases} -U_0^{A,B}, & \vec{r} \in \text{у КТ}, \\ 0, & \vec{r} \in \text{матриця}. \end{cases} \quad (5.7)$$

Хвильова функція розглядуваної системи повинна задовольняти теорему Блоха. Для i -того сорту КТ її можна записати у вигляді:

$$\Phi_{i\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N_i}} \sum_{\vec{R}_i} e^{i\vec{k}\vec{R}_i} \varphi(\vec{r} - \vec{R}_i), \quad (5.8)$$

де \vec{R}_i — вектор трансляції для КТ сорту i . Оскільки кількість КТ в моделі НКТ є нескінченною, то ми вважаємо $N_A = N_B = N$ (кількість КТ різних сортів однакова). Отже, хвильову функцію НКТ зображено лінійною комбінацією функцій Блоха:

$$\psi_{\vec{k}} = \sum_{i=A,B} c_i(\vec{k}) \Phi_{i\vec{k}}(\vec{r}) = c_A(\vec{k}) \Phi_{A\vec{k}}(\vec{r}) + c_B(\vec{k}) \Phi_{B\vec{k}}(\vec{r}) \quad (5.9)$$

або з врахуванням (5.8) компактно

$$\psi_{\vec{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i,R_i} c_i(\vec{k}) e^{i\vec{k}\vec{R}_i} \varphi_i(\vec{r} - \vec{R}_i). \quad (5.10)$$

Після підстановки (5.10) у рівняння Шредінгера з гамільтоніаном (5.2) рівняння домножено зліва на спряжену функцію $\sum_{\vec{R}_j'} e^{-i\vec{k}\vec{R}_j'} \varphi_j^*(\vec{r} - \vec{R}_j')$. Отриманий вираз проінтегровано по всій області визначення. У результаті отримано систему лінійних однорідних рівнянь відносно коефіцієнтів c_A, c_B . Умова нетривіальності розв'язку такої системи рівнянь має вигляд:

$$\begin{vmatrix} H_{AA}(\vec{k}) - E(\vec{k})S_{AA}(\vec{k}) & H_{AB}(\vec{k}) - E(\vec{k})S_{AB}(\vec{k}) \\ H_{BA}(\vec{k}) - E(\vec{k})S_{BA}(\vec{k}) & H_{BB}(\vec{k}) - E(\vec{k})S_{BB}(\vec{k}) \end{vmatrix} = 0, \quad (5.11)$$

де

$$H_{ji} = \sum_{\vec{R}_i, \vec{R}_j'} e^{i\vec{k}(\vec{R}_i - \vec{R}_j')} \langle \varphi_j(\vec{r} - \vec{R}_j') | \hat{H} | \varphi_i(\vec{r} - \vec{R}_i) \rangle, \quad (5.12)$$

$$S_{ji} = \sum_{\vec{R}_i, \vec{R}_j'} e^{i\vec{k}(\vec{R}_i - \vec{R}_j')} \langle \varphi_j(\vec{r} - \vec{R}_j') | \varphi_i(\vec{r} - \vec{R}_i) \rangle, \quad (5.13)$$

$i, j = A, B$. Усі матричні елементи обчислено детально.

$$S_{AA}(\vec{k}) = \sum_{\vec{R}_A, \vec{R}_A'} e^{i\vec{k}(\vec{R}_A - \vec{R}_A')} \langle \varphi_A(\vec{r} - \vec{R}_A') | \varphi_A(\vec{r} - \vec{R}_A) \rangle, \quad (5.14)$$

$$H_{AA}(\vec{k}) = \sum_{\vec{R}_A, \vec{R}_A'} e^{i\vec{k}(\vec{R}_A - \vec{R}_A')} \langle \varphi_A(\vec{r} - \vec{R}_A') | \hat{H} | \varphi_A(\vec{r} - \vec{R}_A) \rangle. \quad (5.15)$$

Після заміни змінних

$$\begin{aligned} \vec{R}_A - \vec{R}_A' &= \vec{n}_{AA} \\ \vec{r} - \vec{R}_A' &= \vec{x} \\ \vec{r} - \vec{R}_A &= \vec{x} + \vec{R}_A' - \vec{R}_A = \vec{x} - \vec{n}_{AA} \end{aligned}$$

у виразах (5.14) і (5.15) залишиться одна сума

$$S_{AA}(\vec{k}) = \sum_{\vec{n}_{AA}} e^{i\vec{k}\vec{n}_{AA}} \langle \varphi_A(\vec{r}) | \varphi_A(\vec{r} - \vec{n}_{AA}) \rangle, \quad (5.16)$$

$$H_{AA}(\vec{k}) = \sum_{\vec{n}_{AA}} e^{i\vec{k}\vec{n}_{AA}} \langle \varphi_A(\vec{r}) | \hat{H} | \varphi_A(\vec{r} - \vec{n}_{AA}) \rangle. \quad (5.17)$$

Аналогічно

$$S_{BB}(\vec{k}) = \sum_{\vec{n}_{BB}} e^{i\vec{k}\vec{n}_{BB}} \langle \varphi_B(\vec{r}) | \varphi_B(\vec{r} - \vec{n}_{BB}) \rangle, \quad (5.18)$$

$$H_{BB}(\vec{k}) = \sum_{\vec{n}_{BB}} e^{i\vec{k}\vec{n}_{BB}} \langle \varphi_B(\vec{r}) | \hat{H} | \varphi_B(\vec{r} - \vec{n}_{BB}) \rangle. \quad (5.19)$$

Для матричних елементів між КТ типу А і В отримано:

$$S_{AB}(\vec{k}) = \sum_{\vec{R}_B, \vec{R}_A'} e^{i\vec{k}(\vec{R}_B - \vec{R}_A')} \langle \varphi_A(\vec{r} - \vec{R}_A') | \varphi_B(\vec{r} - \vec{R}_B) \rangle, \quad (5.20)$$

$$H_{AB}(\vec{k}) = \sum_{\vec{R}_B, \vec{R}_A'} e^{i\vec{k}(\vec{R}_B - \vec{R}_A')} \langle \varphi_A(\vec{r} - \vec{R}_A') | \hat{H} | \varphi_B(\vec{r} - \vec{R}_B) \rangle. \quad (5.21)$$

Далі, провівши заміну змінних

$$\begin{aligned}\vec{R}_B - \vec{R}_A' &= \vec{n}_{AB} \\ \vec{r} - \vec{R}_A' &= \vec{x} \\ \vec{r} - \vec{R}_B &= \vec{x} + \vec{R}_A' - \vec{R}_B = \vec{x} - \vec{n}_{AB},\end{aligned}$$

отримано:

$$S_{AB}(\vec{k}) = \sum_{\vec{n}_{AB}} e^{i\vec{k}\vec{n}_{AB}} \langle \varphi_A(\vec{r}) | \varphi_B(\vec{r} - \vec{n}_{AB}) \rangle, \quad (5.22)$$

$$H_{AB}(\vec{k}) = \sum_{\vec{n}_{AB}} e^{i\vec{k}\vec{n}_{AB}} \langle \varphi_A(\vec{r}) | \hat{H} | \varphi_B(\vec{r} - \vec{n}_{AB}) \rangle. \quad (5.23)$$

Аналогічно

$$S_{BA}(\vec{k}) = \sum_{\vec{n}_{BA}} e^{i\vec{k}\vec{n}_{BA}} \langle \varphi_B(\vec{r}) | \varphi_A(\vec{r} - \vec{n}_{BA}) \rangle, \quad (5.24)$$

$$H_{BA}(\vec{k}) = \sum_{\vec{n}_{BA}} e^{i\vec{k}\vec{n}_{BA}} \langle \varphi_B(\vec{r}) | \hat{H} | \varphi_A(\vec{r} - \vec{n}_{BA}) \rangle. \quad (5.25)$$

Надалі було розглянуто одновимірну, двовимірну і тривимірну НКТ у наближенні найближчих сусідів.

5.1.1. Одновимірна НКТ

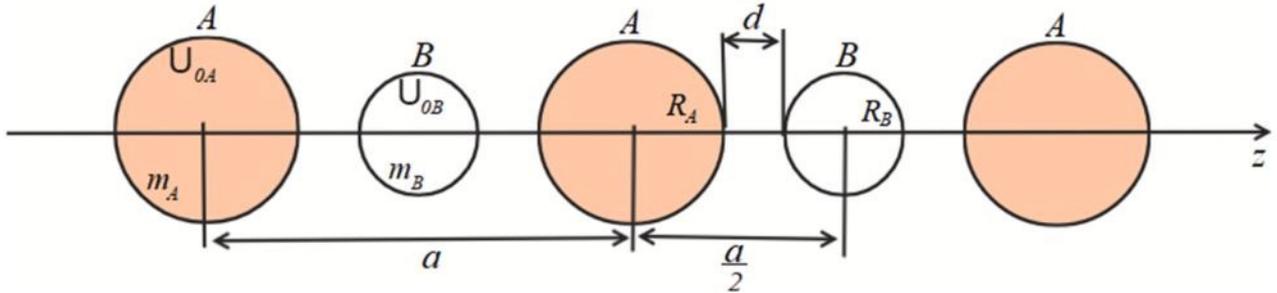


Рисунок 5.1. Геометрична модель одновимірної НКТ.

У цьому випадку $\vec{R}_A = \vec{n}_1 a = n_1 a_1 \vec{e}_z$ — вектор трансляції для КТ сорту А, а $\vec{R}_B = \frac{a}{2} \vec{e}_z + n_1 a \vec{e}_z = \vec{e}_z \left(\frac{1}{2} + n_1 \right) a = \vec{e}_z n_2 a$ — для сорту В. Тоді $\vec{n}_{AA} = \vec{a} = a \vec{e}_z$, $\vec{k} = k \vec{e}_z$ і

$$\begin{aligned}
S_{AA}(k) &= \langle \varphi_A(\vec{r}) | \varphi_A(\vec{r}) \rangle + e^{ika} \langle \varphi_A(\vec{r}) | \varphi_A(\vec{r} - \vec{a}) \rangle + e^{-ika} \langle \varphi_A(\vec{r}) | \varphi_A(\vec{r} + \vec{a}) \rangle, \\
\langle \varphi_A(\vec{r}) | \varphi_A(\vec{r}) \rangle &= 1, \quad \langle \varphi_A(\vec{r}) | \varphi_A(\vec{r} - \vec{a}) \rangle = \langle \varphi_A(\vec{r}) | \varphi_A(\vec{r} + \vec{a}) \rangle, \\
e^{ika} + e^{-ika} &= 2 \cos(ka), \\
S_{AA}(k) &= 1 + 2 \cos(ka) \langle \varphi_A(\vec{r}) | \varphi_A(\vec{r} - \vec{a}) \rangle.
\end{aligned} \tag{5.26}$$

Аналогічно

$$S_{BB}(k) = 1 + 2 \cos(ka) \langle \varphi_B(\vec{r} - \frac{\vec{a}}{2}) | \varphi_B(\vec{r} + \frac{\vec{a}}{2}) \rangle. \tag{5.27}$$

Для S_{AB} вектор $\vec{n}_{AB} = \vec{a}/2$, тоді

$$S_{AB}(k) = e^{\frac{ika}{2}} \langle \varphi_A(\vec{r}) | \varphi_B(\vec{r} - \frac{\vec{a}}{2}) \rangle + e^{-\frac{ika}{2}} \langle \varphi_A(\vec{r}) | \varphi_B(\vec{r} + \frac{\vec{a}}{2}) \rangle = 2 \cos(\frac{ka}{2}) \langle \varphi_A(\vec{r}) | \varphi_B(\vec{r} - \frac{\vec{a}}{2}) \rangle. \tag{5.28}$$

Аналогічно

$$S_{BA}(k) = 2 \cos(\frac{ka}{2}) \langle \varphi_B(\vec{r} - \frac{\vec{a}}{2}) | \varphi_A(\vec{r}) \rangle. \tag{5.29}$$

Матричні елементи H_{AA}, H_{BB} визначаються таким чином:

$$\begin{aligned}
H_{AA}(k) &= \sum_{\vec{n}_{AA}} e^{i\vec{k}\vec{n}_{AA}} \langle \varphi_A(\vec{r}) | H_{KT}^A + \Delta V(\vec{r}) | \varphi_A(\vec{r} - \vec{n}_{AA}) \rangle, \\
H_{AA}(k) &= \langle \varphi_A(\vec{r}) | \hat{H}_{KT}^A + \Delta V(\vec{r}) | \varphi_A(\vec{r}) \rangle + \\
&+ e^{ika} \langle \varphi_A(\vec{r}) | \hat{H}_{KT}^A + \Delta V(\vec{r}) | \varphi_A(\vec{r} - \vec{a}) \rangle + e^{-ika} \langle \varphi_A(\vec{r}) | \hat{H}_{KT}^A + \Delta V(\vec{r}) | \varphi_A(\vec{r} + \vec{a}) \rangle, \\
H_{AA}(k) &= E_{KT}^A + \langle \varphi_A(\vec{r}) | V_0^A(\vec{r} - \vec{a}) + V_0^A(\vec{r} + \vec{a}) | \varphi_A(\vec{r}) \rangle + \\
&+ 2 \cos(ka) [E_{KT}^A + \langle \varphi_A(\vec{r}) | V_0^A(\vec{r} + \vec{a}) | \varphi_A(\vec{r} - \vec{a}) \rangle].
\end{aligned} \tag{5.30}$$

$$\begin{aligned}
H_{BB}(k) &= E_{KT}^B + \langle \varphi_B(\vec{r} - \frac{\vec{a}}{2}) | V_0^B(\vec{r} - \frac{3\vec{a}}{2}) + V_0^B(\vec{r} + \frac{\vec{a}}{2}) | \varphi_B(\vec{r} - \frac{\vec{a}}{2}) \rangle + \\
&+ 2 \cos(ka) [E_{KT}^B + \langle \varphi_B(\vec{r} - \frac{\vec{a}}{2}) | V_0^B(\vec{r} - \frac{3\vec{a}}{2}) | \varphi_B(\vec{r} + \frac{\vec{a}}{2}) \rangle].
\end{aligned} \tag{5.31}$$

Матричні елементи H_{AB}, H_{BA} визначаються так:

$$\begin{aligned}
H_{AB}(k) &= e^{\frac{ika}{2}} \langle \varphi_A(\vec{r}) | \hat{H}_{KT}^A + \hat{H}_{KT}^B + \Delta V(\vec{r}) | \varphi_B(\vec{r} - \frac{\vec{a}}{2}) \rangle + \\
&+ e^{-\frac{ika}{2}} \langle \varphi_A(\vec{r}) | \hat{H}_{KT}^A + \hat{H}_{KT}^B + \Delta V(\vec{r}) | \varphi_B(\vec{r} + \frac{\vec{a}}{2}) \rangle, \\
\vec{n}_{AB} &= \frac{\vec{a}}{2},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 H_{AB}(k) &= 2 \cos\left(\frac{ka}{2}\right) \langle \varphi_A(\vec{r}) | \hat{H}_{KT}^A + \hat{H}_{KT}^B + \Delta V(\vec{r}) | \varphi_B(\vec{r} - \frac{\vec{a}}{2}) \rangle = \\
 &= 2 \cos\left(\frac{ka}{2}\right) [(E_{KT}^A + E_{KT}^B) \langle \varphi_A(\vec{r}) | \varphi_B(\vec{r} - \frac{\vec{a}}{2}) \rangle + \langle \varphi_A(\vec{r}) | V_0^B(\vec{r} + \frac{\vec{a}}{2}) | \varphi_B(\vec{r} - \frac{\vec{a}}{2}) \rangle],
 \end{aligned} \tag{5.32}$$

$$\begin{aligned}
 H_{BA}(k) &= 2 \cos\left(\frac{ka}{2}\right) \langle \varphi_B(\vec{r} - \frac{\vec{a}}{2}) | \hat{H}_{KT}^A + \hat{H}_{KT}^B + \Delta V(\vec{r}) | \varphi_A(\vec{r}) \rangle = \\
 &= 2 \cos\left(\frac{ka}{2}\right) [(E_{KT}^A + E_{KT}^B) \langle \varphi_B(\vec{r} - \frac{\vec{a}}{2}) | \varphi_A(\vec{r}) \rangle + \langle \varphi_B(\vec{r} - \frac{\vec{a}}{2}) | V_0^A(\vec{r} - \vec{a}) | \varphi_A(\vec{r}) \rangle].
 \end{aligned} \tag{5.33}$$

Ці матричні елементи використано у визначнику (5.11) для обчислення дисперсійних залежностей одновимірних НКТ з двома різними КТ у базисі.

5.1.2. Двовимірна надгратка квантових точок

Розглянуто два випадки: а) коли КТ сортів А і В розташовані смугами (рисунок 5.2) і б) коли розташовані у шаховому порядку (рисунок 5.3). В обидвох випадках відстані між КТ є однаковими (як і в одновимірній НКТ). У цих випадках можливо отримати квазіодновимірні масиви КТ (ланцюжки або смуги), де КТ можуть впорядковуватися завдяки напруженням ґратки та анізотропії поверхні підкладки або при безпосередньому вирощуванні методом молекулярно-променевої епітаксії.

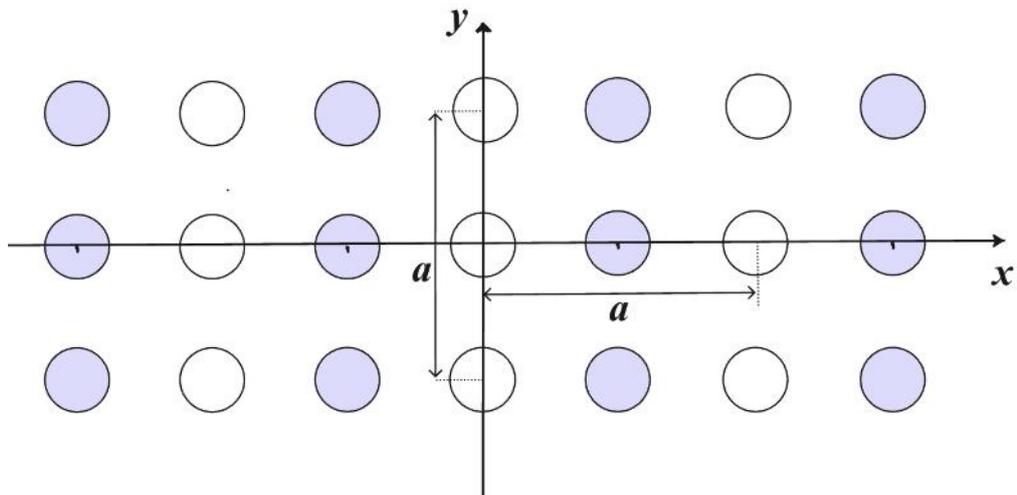


Рисунок 5.2. Двовимірна НКТ. КТ сортів А і В розташовані вертикальними смугами.

Залежно від анізотропії поверхні підкладки та напрямів росту, КТ можуть впорядковуватись у ряди або смуги (одновимірні надгратки, які розташовані близько одна до одної), або у шаховому порядку (двовимірні надгратки).

У випадку а) (рисунок 5.2) КТ вздовж осі Oy розташовані ланцюжками однакових КТ. А у перпендикулярному напрямку (напрямку осі Ox) — ланцюжками КТ різних сортів, що періодично повторюються. У цьому випадку маємо двовимірний хвильовий вектор $\vec{k} = \vec{i}k_x + \vec{j}k_y$. Розглядається наближення найближчих сусідів. Матричні елементи визначаються формулами:

$$S_{AA}(k_x, k_y) = \sum_{n_x, n_y} \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x - n_x, y - n_y, z) \rangle,$$

де n_x, n_y — компоненти вектора трансляції.

$$\begin{aligned} S_{AA}(k_x, k_y) = & \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x, y, z) \rangle + e^{ik_x a} \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x - a, y, z) \rangle + \\ & + e^{-ik_x a} \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x + a, y, z) \rangle + e^{ik_y \frac{a}{2}} \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x, y - \frac{a}{2}, z) \rangle + \\ & + e^{-ik_y \frac{a}{2}} \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x, y + \frac{a}{2}, z) \rangle + e^{ik_y a} \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x, y - a, z) \rangle + \\ & + e^{ik_y a} \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x, y + a, z) \rangle + e^{i(k_x a + k_y \frac{a}{2})} \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x - a, y - \frac{a}{2}, z) \rangle + \\ & + e^{i(k_x a + k_y a)} \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x - a, y - a, z) \rangle + e^{i(k_x a - k_y \frac{a}{2})} \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x - a, y + \frac{a}{2}, z) \rangle + \\ & + e^{i(k_x a - k_y a)} \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x - a, y + a, z) \rangle + e^{i(-k_x a - k_y a)} \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x + a, y + a, z) \rangle + \\ & + e^{i(-k_x a - k_y \frac{a}{2})} \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x + a, y + \frac{a}{2}, z) \rangle + e^{i(-k_x a + k_y \frac{a}{2})} \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x + a, y - \frac{a}{2}, z) \rangle + \\ & + e^{i(-k_x a + k_y a)} \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x + a, y - a, z) \rangle. \end{aligned}$$

Оскільки

$$\begin{aligned} \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x, y, z) \rangle &= 1, \\ \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x - a, y, z) \rangle &= \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x + a, y, z) \rangle, \\ \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x, y - \frac{a}{2}, z) \rangle &= \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x, y + \frac{a}{2}, z) \rangle, \\ \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x, y - a, z) \rangle &= \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x, y + a, z) \rangle, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x-a, y-\frac{a}{2}, z) \rangle = \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x-a, y+\frac{a}{2}, z) \rangle = \\
& = \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x+a, y+\frac{a}{2}, z) \rangle = \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x+a, y-\frac{a}{2}, z) \rangle, \\
& \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x-a, y-a, z) \rangle = \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x-a, y+a, z) \rangle = \\
& = \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x+a, y+a, z) \rangle = \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x+a, y-a, z) \rangle,
\end{aligned}$$

ТО

$$\begin{aligned}
S_{AA}(k_x, k_y) &= 1 + 2 \cos(k_x a) \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x-a, y, z) \rangle + \\
& + 2 \cos \frac{k_y a}{2} \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x, y-\frac{a}{2}, z) \rangle + \\
& + 2 \cos(k_y a) \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x, y-a, z) \rangle + \\
& + 4 \cos(k_x a + k_y \frac{a}{2}) \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x-a, y-\frac{a}{2}, z) \rangle + \\
& + 4 \cos(k_x a + k_y a) \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x-a, y-a, z) \rangle.
\end{aligned} \tag{5.34}$$

Матричний елемент H_{AA} буде визначатися так:

$$\begin{aligned}
H_{AA}(k_x, k_y) &= E_{KT}^A + A_1 + 2 \cos(k_x a) A_2 + 2 \cos \frac{k_y a}{2} A_3 + 2 \cos(k_y a) A_4 + \\
& + 4 \cos(k_x a + k_y \frac{a}{2}) A_5 + 4 \cos(k_x a + k_y a) A_6,
\end{aligned} \tag{5.35}$$

де

$$\begin{aligned}
A_1 &= \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x-a, y, z) + V_0^A(x+a, y, z) + V_0^A(x-a, y-a, z) | \varphi_A(x, y, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x-a, y-\frac{a}{2}, z) + V_0^A(x-a, y+\frac{a}{2}, z) + V_0^A(x-a, y+a, z) | \varphi_A(x, y, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x+a, y-a, z) + V_0^A(x+a, y-\frac{a}{2}, z) + V_0^A(x+a, y+\frac{a}{2}, z) | \varphi_A(x, y, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x+a, y+a, z) + V_0^A(x, y+a, z) + V_0^A(x, y-a, z) | \varphi_A(x, y, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x, y+\frac{a}{2}, z) + V_0^A(x, y-\frac{a}{2}, z) | \varphi_A(x, y, z) \rangle,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
A_2 = & E_{KT}^A \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x-a, y, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x+a, y, z) + V_0^A(x-a, y-a, z) | \varphi_A(x-a, y, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x-a, y-\frac{a}{2}, z) + V_0^A(x-a, y+\frac{a}{2}, z) + V_0^A(x-a, y+a, z) | \varphi_A(x-a, y, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x+a, y-a, z) + V_0^A(x+a, y-\frac{a}{2}, z) + V_0^A(x+a, y+\frac{a}{2}, z) | \varphi_A(x-a, y, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x+a, y+a, z) + V_0^A(x, y+a, z) + V_0^A(x, y-a, z) | \varphi_A(x-a, y, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x, y+\frac{a}{2}, z) + V_0^A(x, y-\frac{a}{2}, z) | \varphi_A(x-a, y, z) \rangle,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
A_3 = & E_{KT}^A \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x, y-\frac{a}{2}, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x-a, y, z) + V_0^A(x+a, y, z) + V_0^A(x-a, y-a, z) | \varphi_A(x, y-\frac{a}{2}, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x-a, y-\frac{a}{2}, z) + V_0^A(x-a, y+\frac{a}{2}, z) + V_0^A(x-a, y+a, z) | \varphi_A(x, y-\frac{a}{2}, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x+a, y-a, z) + V_0^A(x+a, y-\frac{a}{2}, z) + V_0^A(x+a, y+\frac{a}{2}, z) | \varphi_A(x, y-\frac{a}{2}, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x+a, y+a, z) + V_0^A(x, y+a, z) | \varphi_A(x, y-\frac{a}{2}, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x, y-a, z) + V_0^A(x, y+\frac{a}{2}, z) | \varphi_A(x, y-\frac{a}{2}, z) \rangle,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
A_4 = & E_{KT}^A \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x, y-a, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x-a, y, z) + V_0^A(x+a, y, z) | \varphi_A(x, y-a, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x-a, y-a, z) + V_0^A(x-a, y-\frac{a}{2}, z) | \varphi_A(x, y-a, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x-a, y+\frac{a}{2}, z) + V_0^A(x-a, y+a, z) + V_0^A(x+a, y-a, z) | \varphi_A(x, y-a, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x+a, y-\frac{a}{2}, z) + V_0^A(x+a, y+\frac{a}{2}, z) + V_0^A(x+a, y+a, z) | \varphi_A(x, y-a, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x, y+a, z) + V_0^A(x, y+\frac{a}{2}, z) + V_0^A(x, y-\frac{a}{2}, z) | \varphi_A(x, y-a, z) \rangle,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
A_5 = & E_{KT}^A \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x-a, y-\frac{a}{2}, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x-a, y, z) + V_0^A(x+a, y, z) + V_0^A(x-a, y-a, z) | \varphi_A(x-a, y-\frac{a}{2}, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x-a, y+\frac{a}{2}, z) + V_0^A(x-a, y+a, z) | \varphi_A(x-a, y-\frac{a}{2}, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x+a, y-a, z) + V_0^A(x+a, y-\frac{a}{2}, z) | \varphi_A(x-a, y-\frac{a}{2}, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x+a, y+\frac{a}{2}, z) + V_0^A(x+a, y+a, z) | \varphi_A(x-a, y-\frac{a}{2}, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x, y+a, z) + V_0^A(x, y-a, z) | \varphi_A(x-a, y-\frac{a}{2}, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x, y+\frac{a}{2}, z) + V_0^A(x, y-\frac{a}{2}, z) | \varphi_A(x-a, y-\frac{a}{2}, z) \rangle,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
A_6 = & E_{KT}^A \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x-a, y-a, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x-a, y, z) + V_0^A(x+a, y, z) | \varphi_A(x-a, y-a, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x-a, y-\frac{a}{2}, z) + V_0^A(x-a, y+\frac{a}{2}, z) | \varphi_A(x-a, y-a, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x-a, y+a, z) + V_0^A(x+a, y-a, z) | \varphi_A(x-a, y-a, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x+a, y-\frac{a}{2}, z) + V_0^A(x+a, y+\frac{a}{2}, z) | \varphi_A(x-a, y-a, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x+a, y+a, z) + V_0^A(x, y+a, z) | \varphi_A(x-a, y-a, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x, y-a, z) + V_0^A(x, y+\frac{a}{2}, z) + V_0^A(x, y-\frac{a}{2}, z) | \varphi_A(x-a, y-a, z) \rangle.
\end{aligned}$$

Аналогічним чином обчислюється S_{BB} і H_{BB} :

$$\begin{aligned}
S_{BB}(k_x, k_y) = & 1 + 2 \cos(k_x a) \langle \varphi_B(x-\frac{a}{2}, y, z) | \varphi_B(x+\frac{a}{2}, y, z) \rangle + \\
& + 2 \cos \frac{k_y a}{2} \langle \varphi_B(x-\frac{a}{2}, y, z) | \varphi_B(x-\frac{a}{2}, y-\frac{a}{2}, z) \rangle + \\
& + 2 \cos(k_y a) \langle \varphi_B(x-\frac{a}{2}, y, z) | \varphi_B(x-\frac{a}{2}, y-a, z) \rangle + \\
& + 4 \cos(k_x a + k_y \frac{a}{2}) \langle \varphi_B(x-\frac{a}{2}, y, z) | \varphi_B(x+\frac{a}{2}, y-\frac{a}{2}, z) \rangle + \\
& + 4 \cos(k_x a + k_y a) \langle \varphi_B(x-\frac{a}{2}, y, z) | \varphi_B(x+\frac{a}{2}, y-a, z) \rangle,
\end{aligned} \tag{5.36}$$

$$\begin{aligned}
H_{BB}(k_x, k_y) = & E_{KT}^B + B_1 + 2 \cos(k_x a) B_2 + 2 \cos \frac{k_y a}{2} B_3 + \\
& + 2 \cos(k_y a) B_4 + 4 \cos(k_x a + k_y \frac{a}{2}) B_5 + 4 \cos(k_x a + k_y a) B_6,
\end{aligned} \tag{5.37}$$

де

$$\begin{aligned}
B_1 = & \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x - \frac{3a}{2}, y, z) + V_0^B(x - \frac{3a}{2}, y - \frac{a}{2}, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x - \frac{3a}{2}, y + \frac{a}{2}, z) + V_0^B(x - \frac{3a}{2}, y - a, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x - \frac{3a}{2}, y + a, z) + V_0^B(x + \frac{a}{2}, y, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x + \frac{a}{2}, y - \frac{a}{2}, z) + V_0^B(x + \frac{a}{2}, y + \frac{a}{2}, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x + \frac{a}{2}, y - a, z) + V_0^B(x + \frac{a}{2}, y + a, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x - \frac{a}{2}, y - \frac{a}{2}, z) + V_0^B(x - \frac{a}{2}, y + \frac{a}{2}, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x - \frac{a}{2}, y - a, z) + V_0^B(x - \frac{a}{2}, y + a, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) \rangle,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
B_2 = & E_{KT}^B \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | \varphi_B(x + \frac{a}{2}, y, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x - \frac{3a}{2}, y, z) + V_0^B(x - \frac{3a}{2}, y - \frac{a}{2}, z) | \varphi_B(x + \frac{a}{2}, y, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x - \frac{3a}{2}, y + \frac{a}{2}, z) + V_0^B(x - \frac{3a}{2}, y - a, z) | \varphi_B(x + \frac{a}{2}, y, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x - \frac{3a}{2}, y + a, z) + V_0^B(x + \frac{a}{2}, y - \frac{a}{2}, z) | \varphi_B(x + \frac{a}{2}, y, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x + \frac{a}{2}, y + \frac{a}{2}, z) + V_0^B(x + \frac{a}{2}, y - a, z) | \varphi_B(x + \frac{a}{2}, y, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x + \frac{a}{2}, y + a, z) + V_0^B(x - \frac{a}{2}, y - \frac{a}{2}, z) | \varphi_B(x + \frac{a}{2}, y, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x - \frac{a}{2}, y + \frac{a}{2}, z) + V_0^B(x - \frac{a}{2}, y - a, z) | \varphi_B(x + \frac{a}{2}, y, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x - \frac{a}{2}, y + a, z) | \varphi_B(x + \frac{a}{2}, y, z) \rangle,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
B_3 = & E_{KT}^B \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y - \frac{a}{2}, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x - \frac{3a}{2}, y, z) + V_0^B(x - \frac{3a}{2}, y - \frac{a}{2}, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y - \frac{a}{2}, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x - \frac{3a}{2}, y + \frac{a}{2}, z) + V_0^B(x - \frac{3a}{2}, y - a, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y - \frac{a}{2}, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x - \frac{3a}{2}, y + a, z) + V_0^B(x + \frac{a}{2}, y, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y - \frac{a}{2}, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x + \frac{a}{2}, y - \frac{a}{2}, z) + V_0^B(x + \frac{a}{2}, y + \frac{a}{2}, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y - \frac{a}{2}, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x + \frac{a}{2}, y - a, z) + V_0^B(x + \frac{a}{2}, y + a, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y - \frac{a}{2}, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x - \frac{a}{2}, y + \frac{a}{2}, z) + V_0^B(x - \frac{a}{2}, y - a, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y - \frac{a}{2}, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x - \frac{a}{2}, y + a, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y - \frac{a}{2}, z) \rangle
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
B_4 = & E_{KT}^B \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y - a, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x - \frac{3a}{2}, y, z) + V_0^B(x - \frac{3a}{2}, y - \frac{a}{2}, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y - a, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x - \frac{3a}{2}, y + \frac{a}{2}, z) + V_0^B(x - \frac{3a}{2}, y - a, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y - a, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x - \frac{3a}{2}, y + a, z) + V_0^B(x + \frac{a}{2}, y, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y - a, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x + \frac{a}{2}, y - \frac{a}{2}, z) + V_0^B(x + \frac{a}{2}, y + \frac{a}{2}, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y - a, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x + \frac{a}{2}, y - a, z) + V_0^B(x + \frac{a}{2}, y + a, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y - a, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x - \frac{a}{2}, y - \frac{a}{2}, z) + V_0^B(x - \frac{a}{2}, y + \frac{a}{2}, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y - a, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x - \frac{a}{2}, y + a, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y - a, z) \rangle,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
B_5 = & E_{KT}^B \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | \varphi_B(x + \frac{a}{2}, y - \frac{a}{2}, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x - \frac{3a}{2}, y, z) + V_0^B(x - \frac{3a}{2}, y - \frac{a}{2}, z) | \varphi_B(x + \frac{a}{2}, y - \frac{a}{2}, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x - \frac{3a}{2}, y + \frac{a}{2}, z) + V_0^B(x - \frac{3a}{2}, y - a, z) | \varphi_B(x + \frac{a}{2}, y - \frac{a}{2}, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x - \frac{3a}{2}, y + a, z) + V_0^B(x + \frac{a}{2}, y, z) | \varphi_B(x + \frac{a}{2}, y - \frac{a}{2}, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x + \frac{a}{2}, y + \frac{a}{2}, z) + V_0^B(x + \frac{a}{2}, y - a, z) | \varphi_B(x + \frac{a}{2}, y - \frac{a}{2}, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x + \frac{a}{2}, y + a, z) + V_0^B(x - \frac{a}{2}, y - \frac{a}{2}, z) | \varphi_B(x + \frac{a}{2}, y - \frac{a}{2}, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x - \frac{a}{2}, y + \frac{a}{2}, z) + V_0^B(x - \frac{a}{2}, y - a, z) | \varphi_B(x + \frac{a}{2}, y - \frac{a}{2}, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x - \frac{a}{2}, y + a, z) | \varphi_B(x + \frac{a}{2}, y - \frac{a}{2}, z) \rangle,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
B_6 = & E_{KT}^B \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | \varphi_B(x + \frac{a}{2}, y - a, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x - \frac{3a}{2}, y, z) + V_0^B(x - \frac{3a}{2}, y - \frac{a}{2}, z) | \varphi_B(x + \frac{a}{2}, y - a, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x - \frac{3a}{2}, y + \frac{a}{2}, z) + V_0^B(x - \frac{3a}{2}, y - a, z) | \varphi_B(x + \frac{a}{2}, y - a, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x - \frac{3a}{2}, y + a, z) + V_0^B(x + \frac{a}{2}, y, z) | \varphi_B(x + \frac{a}{2}, y - a, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x + \frac{a}{2}, y - \frac{a}{2}, z) + V_0^B(x + \frac{a}{2}, y + \frac{a}{2}, z) | \varphi_B(x + \frac{a}{2}, y - a, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x + \frac{a}{2}, y + a, z) + V_0^B(x - \frac{a}{2}, y - \frac{a}{2}, z) | \varphi_B(x + \frac{a}{2}, y - a, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x - \frac{a}{2}, y + \frac{a}{2}, z) + V_0^B(x - \frac{a}{2}, y - a, z) | \varphi_B(x + \frac{a}{2}, y - a, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x - \frac{a}{2}, y + a, z) | \varphi_B(x + \frac{a}{2}, y - a, z) \rangle.
\end{aligned}$$

Матричні елементи S_{AB} , S_{BA} мають вигляд:

$$\begin{aligned}
S_{AB}(k_x, k_y) = & 2 \cos(k_x \frac{a}{2}) \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) \rangle + \\
& + 4 \cos(k_x \frac{a}{2} + k_y \frac{a}{2}) \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y - \frac{a}{2}, z) \rangle + \\
& + 4 \cos(k_x \frac{a}{2} + k_y a) \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y - a, z) \rangle,
\end{aligned} \tag{5.38}$$

$$\begin{aligned}
S_{BA}(k_x, k_y) = & 2 \cos(k_x \frac{a}{2}) \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | \varphi_A(x, y, z) \rangle + \\
& + 4 \cos(k_x \frac{a}{2} + k_y \frac{a}{2}) \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | \varphi_A(x, y - \frac{a}{2}, z) \rangle + \\
& + 4 \cos(k_x \frac{a}{2} + k_y a) \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | \varphi_A(x, y - a, z) \rangle.
\end{aligned} \tag{5.39}$$

Як видно, $S_{AB}(k_x, k_y) = S_{BA}^*(k_x, k_y)$.

Матричні елементи $H_{AB} = H_{BA}^*$ визначаються так:

$$\begin{aligned}
H_{AB}(k_x, k_y) = & 2 \cos(k_x \frac{a}{2}) \langle \varphi_A(x, y, z) | \hat{H}_{KT}^A + \hat{H}_{KT}^B + \Delta V | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) \rangle + \\
& + 4 \cos(k_x \frac{a}{2} + k_y \frac{a}{2}) \langle \varphi_A(x, y, z) | \hat{H}_{KT}^A + \hat{H}_{KT}^B + \Delta V | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y - \frac{a}{2}, z) \rangle + \\
& + 4 \cos(k_x \frac{a}{2} + k_y a) \langle \varphi_A(x, y, z) | \hat{H}_{KT}^A + \hat{H}_{KT}^B + \Delta V | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y - a, z) \rangle, \\
H_{AB}(k_x, k_y) = & 2 \cos(k_x \frac{a}{2}) C_1 + 4 \cos(k_x \frac{a}{2} + k_y \frac{a}{2}) C_2 + 4 \cos(k_x \frac{a}{2} + k_y a) C_3,
\end{aligned} \tag{5.40}$$

де

$$\begin{aligned}
C_1 = & (E_{KT}^A + E_{KT}^B) \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^B(x + \frac{a}{2}, y, z) + V_0^B(x + \frac{a}{2}, y - \frac{a}{2}, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^B(x + \frac{a}{2}, y + \frac{a}{2}, z) + V_0^B(x + \frac{a}{2}, y - a, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^B(x + \frac{a}{2}, y + a, z) + V_0^B(x - \frac{a}{2}, y - \frac{a}{2}, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^B(x - \frac{a}{2}, y + \frac{a}{2}, z) + V_0^B(x - \frac{a}{2}, y - a, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^B(x - \frac{a}{2}, y + a, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) \rangle.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
C_2 = & (E_{KT}^A + E_{KT}^B) \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y - \frac{a}{2}, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^B(x - \frac{a}{2}, y, z) + V_0^B(x + \frac{a}{2}, y, z) + V_0^B(x + \frac{a}{2}, y - \frac{a}{2}, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y - \frac{a}{2}, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^B(x + \frac{a}{2}, y + \frac{a}{2}, z) + V_0^B(x + \frac{a}{2}, y - a, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y - \frac{a}{2}, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^B(x + \frac{a}{2}, y + a, z) + V_0^B(x - \frac{a}{2}, y + \frac{a}{2}, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y - \frac{a}{2}, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^B(x - \frac{a}{2}, y - a, z) + V_0^B(x - \frac{a}{2}, y + a, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y - \frac{a}{2}, z) \rangle,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
C_3 = & (E_{KT}^A + E_{KT}^B) \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y - a, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^B(x - \frac{a}{2}, y, z) + V_0^B(x + \frac{a}{2}, y, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y - a, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^B(x + \frac{a}{2}, y - \frac{a}{2}, z) + V_0^B(x + \frac{a}{2}, y + \frac{a}{2}, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y - a, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^B(x + \frac{a}{2}, y - a, z) + V_0^B(x + \frac{a}{2}, y + a, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y - a, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^B(x - \frac{a}{2}, y - \frac{a}{2}, z) + V_0^B(x - \frac{a}{2}, y + \frac{a}{2}, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y - a, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^B(x - \frac{a}{2}, y + a, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y - a, z) \rangle.
\end{aligned}$$

Отже, на основі визначених матричних елементів можна обчислити залежність енергії електрона від двовимірного хвильового вектора.

Крім випадку а) (рисунок 5.2), де КТ вздовж осі Оу розташовані паралельними ланцюжками однакових КТ, розглянуто випадок б), коли КТ розташовані у шаховому порядку (рисунок 5.3). У цьому випадку також розглядається наближення найближчих сусідів. Відповідні матричні елементи визначаються формулами:

$$\begin{aligned}
S_{AA}(k_x, k_y) = & 1 + 2 \cos(k_x a) \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x - a, y, z) \rangle + \\
& + 2 \cos(k_y a) \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x, y - a, z) \rangle + \\
& + 4 \cos(k_x \frac{a}{2} + k_y \frac{a}{2}) \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x - \frac{a}{2}, y - \frac{a}{2}, z) \rangle + \\
& + 4 \cos(k_x a + k_y a) \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x - a, y - a, z) \rangle,
\end{aligned} \tag{5.41}$$

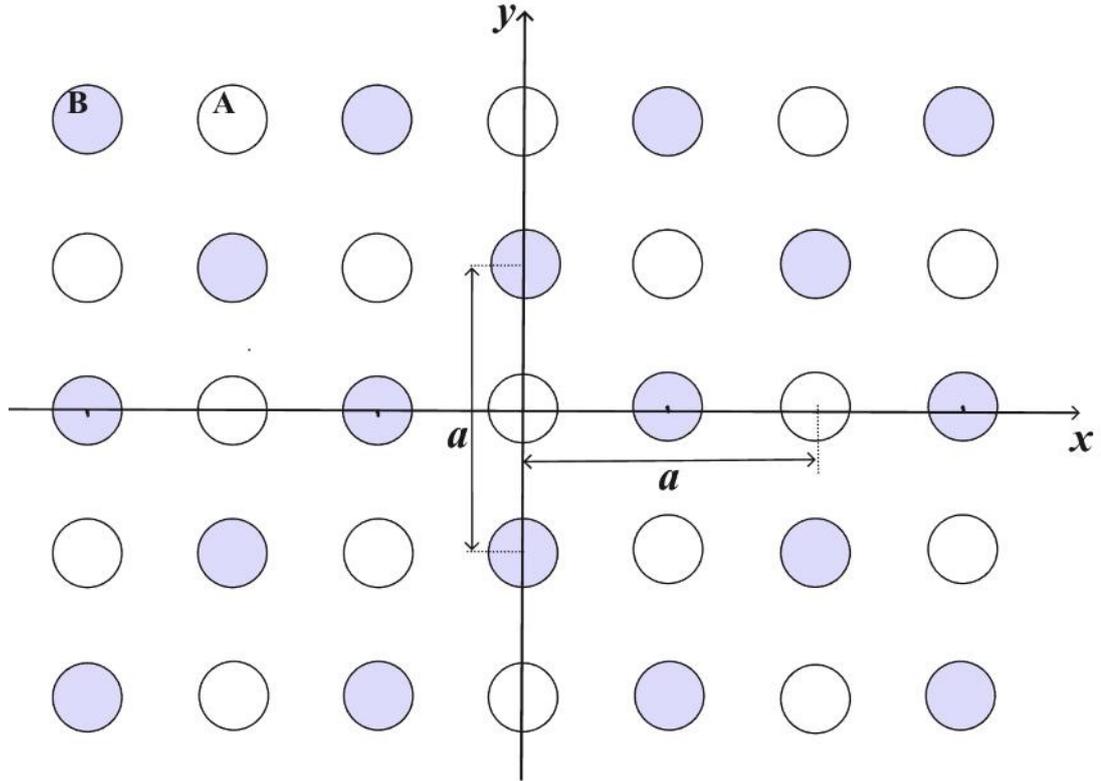


Рисунок 5.3. Двовимірна НКТ. КТ сортів А і В розташовані у шаховому порядку.

$$\begin{aligned}
 S_{BB}(k_x, k_y) = & 1 + 2 \cos(k_x a) \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | \varphi_B(x + \frac{a}{2}, y, z) \rangle + \\
 & + 2 \cos(k_y a) \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y - a, z) \rangle + \\
 & + 4 \cos(k_x \frac{a}{2} + k_y \frac{a}{2}) \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | \varphi_B(x, y - \frac{a}{2}, z) \rangle + \\
 & + 4 \cos(k_x a + k_y a) \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | \varphi_B(x + \frac{a}{2}, y - a, z) \rangle,
 \end{aligned} \tag{5.42}$$

$$\begin{aligned}
 H_{AA}(k_x, k_y) = & E_{KT}^A + D_1 + 2 \cos(k_x a) D_2 + 2 \cos(k_y a) D_3 + \\
 & + 4 \cos(k_x \frac{a}{2} + k_y \frac{a}{2}) D_4 + 4 \cos(k_x a + k_y a) D_5,
 \end{aligned} \tag{5.43}$$

де

$$\begin{aligned}
D_1 = & \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x-a, y, z) + V_0^A(x+a, y, z) | \varphi_A(x, y, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x, y-a, z) + V_0^A(x, y+a, z) | \varphi_A(x, y, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x-\frac{a}{2}, y-\frac{a}{2}, z) + V_0^A(x-\frac{a}{2}, y+\frac{a}{2}, z) | \varphi_A(x, y, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x+\frac{a}{2}, y-\frac{a}{2}, z) + V_0^A(x+\frac{a}{2}, y+\frac{a}{2}, z) | \varphi_A(x, y, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x-a, y-a, z) + V_0^A(x-a, y+a, z) | \varphi_A(x, y, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x+a, y-a, z) + V_0^A(x+a, y+a, z) | \varphi_A(x, y, z) \rangle,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
D_2 = & E_{KT}^A \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x-a, y, z) \rangle + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x+a, y, z) | \varphi_A(x-a, y, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x, y-a, z) + V_0^A(x, y+a, z) | \varphi_A(x-a, y, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x-\frac{a}{2}, y-\frac{a}{2}, z) + V_0^A(x-\frac{a}{2}, y+\frac{a}{2}, z) | \varphi_A(x-a, y, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x+\frac{a}{2}, y-\frac{a}{2}, z) + V_0^A(x+\frac{a}{2}, y+\frac{a}{2}, z) | \varphi_A(x-a, y, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x-a, y-a, z) + V_0^A(x-a, y+a, z) | \varphi_A(x-a, y, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x+a, y-a, z) + V_0^A(x+a, y+a, z) | \varphi_A(x-a, y, z) \rangle
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
D_3 = & E_{KT}^A \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x, y-a, z) \rangle + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x-a, y, z) | \varphi_A(x, y-a, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x+a, y, z) + V_0^A(x, y+a, z) | \varphi_A(x, y-a, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x-\frac{a}{2}, y-\frac{a}{2}, z) + V_0^A(x-\frac{a}{2}, y+\frac{a}{2}, z) | \varphi_A(x, y-a, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x+\frac{a}{2}, y-\frac{a}{2}, z) + V_0^A(x+\frac{a}{2}, y+\frac{a}{2}, z) | \varphi_A(x, y-a, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x-a, y-a, z) + V_0^A(x-a, y+a, z) | \varphi_A(x, y-a, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x+a, y-a, z) + V_0^A(x+a, y+a, z) | \varphi_A(x, y-a, z) \rangle,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
D_4 = & E_{KT}^A \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x-\frac{a}{2}, y-\frac{a}{2}, z) \rangle + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x-a, y, z) | \varphi_A(x-\frac{a}{2}, y-\frac{a}{2}, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x+a, y, z) + V_0^A(x, y-a, z) | \varphi_A(x-\frac{a}{2}, y-\frac{a}{2}, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x, y+a, z) + V_0^A(x-\frac{a}{2}, y+\frac{a}{2}, z) | \varphi_A(x-\frac{a}{2}, y-\frac{a}{2}, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x+\frac{a}{2}, y-\frac{a}{2}, z) + V_0^A(x+\frac{a}{2}, y+\frac{a}{2}, z) | \varphi_A(x-\frac{a}{2}, y-\frac{a}{2}, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x-a, y-a, z) + V_0^A(x-a, y+a, z) | \varphi_A(x-\frac{a}{2}, y-\frac{a}{2}, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x+a, y-a, z) + V_0^A(x+a, y+a, z) | \varphi_A(x-\frac{a}{2}, y-\frac{a}{2}, z) \rangle
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
D_5 = & E_{KT}^A \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x-a, y-a, z) \rangle + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x-a, y, z) | \varphi_A(x-a, y-a, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x+a, y, z) + V_0^A(x, y-a, z) | \varphi_A(x-a, y-a, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x, y+a, z) + V_0^A(x-\frac{a}{2}, y-\frac{a}{2}, z) | \varphi_A(x-a, y-a, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x-\frac{a}{2}, y+\frac{a}{2}, z) + V_0^A(x+\frac{a}{2}, y-\frac{a}{2}, z) | \varphi_A(x-a, y-a, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x+\frac{a}{2}, y+\frac{a}{2}, z) + V_0^A(x-a, y+a, z) | \varphi_A(x-a, y-a, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^A(x+a, y-a, z) + V_0^A(x+a, y+a, z) | \varphi_A(x-a, y-a, z) \rangle.
\end{aligned}$$

Матричний елемент H_{BB} визначається так:

$$\begin{aligned}
H_{BB}(k_x, k_y) = & E_{KT}^B + F_1 + 2 \cos(k_x a) F_2 + 2 \cos(k_y a) F_3 + \\
& + 4 \cos(k_x \frac{a}{2} + k_y \frac{a}{2}) F_4 + 4 \cos(k_x a + k_y a) F_5,
\end{aligned} \tag{5.44}$$

де

$$\begin{aligned}
F_1 = & \langle \varphi_B(x-\frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x+\frac{a}{2}, y, z) + V_0^B(x-\frac{3a}{2}, y, z) | \varphi_B(x-\frac{a}{2}, y, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x-\frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x-\frac{a}{2}, y-a, z) + V_0^B(x-\frac{a}{2}, y+a, z) | \varphi_B(x-\frac{a}{2}, y, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x-\frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x, y-\frac{a}{2}, z) + V_0^B(x, y+\frac{a}{2}, z) | \varphi_B(x-\frac{a}{2}, y, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x-\frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x-a, y+\frac{a}{2}, z) + V_0^B(x-a, y-\frac{a}{2}, z) | \varphi_B(x-\frac{a}{2}, y, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x-\frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x+\frac{a}{2}, y+a, z) + V_0^B(x+\frac{a}{2}, y-a, z) | \varphi_B(x-\frac{a}{2}, y, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x-\frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x-\frac{3a}{2}, y+a, z) + V_0^B(x-\frac{3a}{2}, y-a, z) | \varphi_B(x-\frac{a}{2}, y, z) \rangle,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
F_2 = & E_{KT}^B \langle \varphi_B(x-\frac{a}{2}, y, z) | \varphi_B(x+\frac{a}{2}, y, z) \rangle + \langle \varphi_B(x-\frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x-\frac{3a}{2}, y, z) | \varphi_B(x+\frac{a}{2}, y, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x-\frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x-\frac{a}{2}, y-a, z) + V_0^B(x-\frac{a}{2}, y+a, z) | \varphi_B(x+\frac{a}{2}, y, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x-\frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x, y-\frac{a}{2}, z) + V_0^B(x, y+\frac{a}{2}, z) | \varphi_B(x+\frac{a}{2}, y, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x-\frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x-a, y+\frac{a}{2}, z) + V_0^B(x-a, y-\frac{a}{2}, z) | \varphi_B(x+\frac{a}{2}, y, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x-\frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x+\frac{a}{2}, y+a, z) + V_0^B(x+\frac{a}{2}, y-a, z) | \varphi_B(x+\frac{a}{2}, y, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x-\frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x-\frac{3a}{2}, y+a, z) + V_0^B(x-\frac{3a}{2}, y-a, z) | \varphi_B(x+\frac{a}{2}, y, z) \rangle,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
F_3 = & E_{KT}^B \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y - a, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x + \frac{a}{2}, y, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y - a, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x - \frac{3a}{2}, y, z) + V_0^B(x - \frac{a}{2}, y + a, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y - a, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x, y - \frac{a}{2}, z) + V_0^B(x, y + \frac{a}{2}, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y - a, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x - a, y + \frac{a}{2}, z) + V_0^B(x - a, y - \frac{a}{2}, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y - a, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x + \frac{a}{2}, y + a, z) + V_0^B(x + \frac{a}{2}, y - a, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y - a, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x - \frac{3a}{2}, y + a, z) + V_0^B(x - \frac{3a}{2}, y - a, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y - a, z) \rangle,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
F_4 = & E_{KT}^B \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | \varphi_B(x, y - \frac{a}{2}, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x + \frac{a}{2}, y, z) + V_0^B(x - \frac{3a}{2}, y, z) | \varphi_B(x, y - \frac{a}{2}, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x - \frac{a}{2}, y - a, z) + V_0^B(x - \frac{a}{2}, y + a, z) | \varphi_B(x, y - \frac{a}{2}, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x, y + \frac{a}{2}, z) + V_0^B(x - a, y + \frac{a}{2}, z) | \varphi_B(x, y - \frac{a}{2}, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x - a, y - \frac{a}{2}, z) + V_0^B(x + \frac{a}{2}, y + a, z) | \varphi_B(x, y - \frac{a}{2}, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x + \frac{a}{2}, y - a, z) + V_0^B(x - \frac{3a}{2}, y + a, z) | \varphi_B(x, y - \frac{a}{2}, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x - \frac{3a}{2}, y - a, z) | \varphi_B(x, y - \frac{a}{2}, z) \rangle,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
F_5 = & E_{KT}^B \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | \varphi_B(x + \frac{a}{2}, y - a, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x + \frac{a}{2}, y, z) + V_0^B(x - \frac{3a}{2}, y, z) | \varphi_B(x + \frac{a}{2}, y - a, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x - \frac{a}{2}, y - a, z) + V_0^B(x - \frac{a}{2}, y + a, z) | \varphi_B(x + \frac{a}{2}, y - a, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x, y - \frac{a}{2}, z) + V_0^B(x, y + \frac{a}{2}, z) | \varphi_B(x + \frac{a}{2}, y - a, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x - a, y + \frac{a}{2}, z) + V_0^B(x - a, y - \frac{a}{2}, z) | \varphi_B(x + \frac{a}{2}, y - a, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x + \frac{a}{2}, y + a, z) + V_0^B(x - \frac{3a}{2}, y + a, z) | \varphi_B(x + \frac{a}{2}, y - a, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_0^B(x - \frac{3a}{2}, y - a, z) | \varphi_B(x + \frac{a}{2}, y - a, z) \rangle.
\end{aligned}$$

А «змішані» матричні елементи визначено за формулами:

$$\begin{aligned}
S_{AB}(k_x, k_y) = & 4 \cos(k_x \frac{a}{2}) \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) \rangle + \\
& + 4 \cos(k_x \frac{a}{2} + k_y a) \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y - a, z) \rangle + \\
& + 4 \cos(k_x a + k_y \frac{a}{2}) \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_B(x - a, y - \frac{a}{2}, z) \rangle, \\
S_{BA}(k_x, k_y) = & S_{AB}^*(k_x, k_y),
\end{aligned} \tag{5.45}$$

$$H_{AB}(k_x, k_y) = 4 \cos(k_x \frac{a}{2}) G_1 + 4 \cos(k_x \frac{a}{2} + k_y a) G_2 + 4 \cos(k_x a + k_y \frac{a}{2}) G_3, \tag{5.46}$$

де

$$\begin{aligned}
G_1 = & (E_{KT}^A + E_{KT}^B) \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) \rangle + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^B(x + \frac{a}{2}, y, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^B(x, y - \frac{a}{2}, z) + V_0^B(x, y + \frac{a}{2}, z) + V_0^B(x - a, y - \frac{a}{2}, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^B(x - a, y + \frac{a}{2}, z) + V_0^B(x + a, y - \frac{a}{2}, z) + V_0^B(x + a, y + \frac{a}{2}, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^B(x + \frac{a}{2}, y - a, z) + V_0^B(x + \frac{a}{2}, y + a, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^B(x - \frac{a}{2}, y - a, z) + V_0^B(x - \frac{a}{2}, y + a, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) \rangle,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
G_2 = & (E_{KT}^A + E_{KT}^B) \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y - a, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^B(x - \frac{a}{2}, y, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y - a, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^B(x + \frac{a}{2}, y, z) + V_0^B(x, y - \frac{a}{2}, z) + V_0^B(x, y + \frac{a}{2}, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y - a, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^B(x - a, y - \frac{a}{2}, z) + V_0^B(x - a, y + \frac{a}{2}, z) + V_0^B(x + a, y - \frac{a}{2}, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y - a, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^B(x + a, y + \frac{a}{2}, z) + V_0^B(x + \frac{a}{2}, y - a, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y - a, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^B(x + \frac{a}{2}, y + a, z) + V_0^B(x - \frac{a}{2}, y + a, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y - a, z) \rangle,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
G_3 = & (E_{KT}^A + E_{KT}^B) \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_B(x - a, y - \frac{a}{2}, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^B(x - \frac{a}{2}, y, z) + V_0^B(x + \frac{a}{2}, y, z) | \varphi_B(x - a, y - \frac{a}{2}, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^B(x, y - \frac{a}{2}, z) + V_0^B(x, y + \frac{a}{2}, z) | \varphi_B(x - a, y - \frac{a}{2}, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^B(x - a, y + \frac{a}{2}, z) + V_0^B(x + a, y - \frac{a}{2}, z) | \varphi_B(x - a, y - \frac{a}{2}, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^B(x + a, y + \frac{a}{2}, z) + V_0^B(x + \frac{a}{2}, y - a, z) | \varphi_B(x - a, y - \frac{a}{2}, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_0^B(x + \frac{a}{2}, y + a, z) + V_0^B(x - \frac{a}{2}, y - a, z) + V_0^B(x - \frac{a}{2}, y + a, z) | \varphi_B(x - a, y - \frac{a}{2}, z) \rangle.
\end{aligned}$$

$H_{BA}(k_x, k_y) = H_{AB}^*(k_x, k_y)$, як і у випадку а).

Таким чином, на основі формул можна обчислити залежність енергії електрона у двовимірній НКТ як у випадку розташування КТ смугами (рисунок 5.2), так і шаховому порядку (рисунок 5.3).

5.1.3. Тривимірна надгратка квантових точок

Для тривимірної НКТ розглянуто розташування КТ так, як показано на рисунку 5.4, тобто КТ типу А оточена з шести сторін (зверху-знизу, зліва-справа, спереду-ззаду) КТ типу В.

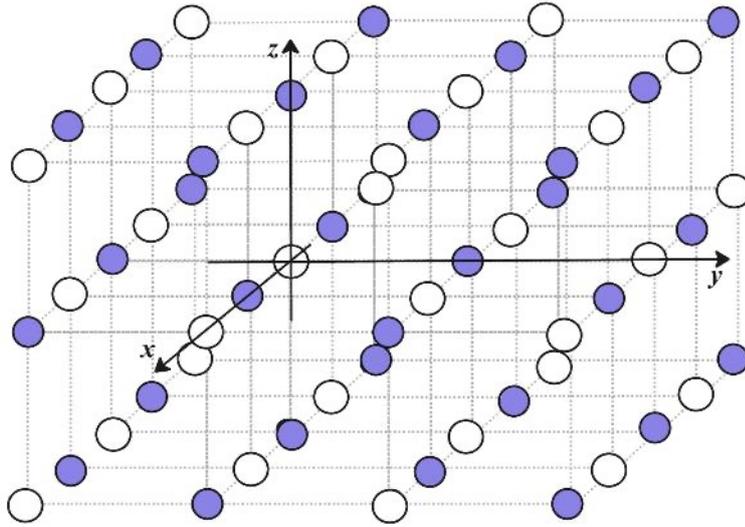


Рисунок 5.4. Тривимірна НКТ. Примітивна комірка НКТ — куб.

У цьому випадку проведено аналогічно розрахунок матричних елементів як і у двовимірному й одновимірному випадку. Так само використано наближення найближчих сусідів.

Отже, матричні елементи S мають вигляд:

$$\begin{aligned}
 S_{AA}(k_x, k_y, k_z) = & 1 + 2 \cos(k_x a) \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x - a, y, z) \rangle + \\
 & + 2 \cos(k_y a) \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x, y - a, z) \rangle + 2 \cos(k_z a) \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x, y, z - a) \rangle + \\
 & + 4 \cos\left(\frac{k_x a}{2} + \frac{k_y a}{2}\right) \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A\left(x - \frac{a}{2}, y - \frac{a}{2}, z\right) \rangle + \\
 & + 4 \cos(k_x a + k_y a) \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x - a, y - a, z) \rangle + \\
 & + 4 \cos\left(\frac{k_x a}{2} + \frac{k_z a}{2}\right) \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A\left(x - \frac{a}{2}, y, z - \frac{a}{2}\right) \rangle + \\
 & + 4 \cos(k_x a + k_z a) \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x - a, y, z - a) \rangle + \\
 & + 4 \cos\left(\frac{k_y a}{2} + \frac{k_z a}{2}\right) \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A\left(x, y - \frac{a}{2}, z - \frac{a}{2}\right) \rangle + \\
 & + 4 \cos(k_y a + k_z a) \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x, y - a, z - a) \rangle + \\
 & + 8 \cos(k_x a + k_y a + k_z a) \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x - a, y - a, z - a) \rangle + \\
 & + 8 \cos\left(\frac{k_x a}{2} + \frac{k_y a}{2} + k_z a\right) \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A\left(x - \frac{a}{2}, y - \frac{a}{2}, z - a\right) \rangle + \\
 & + 8 \cos\left(\frac{k_x a}{2} + k_y a + \frac{k_z a}{2}\right) \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A\left(x - \frac{a}{2}, y - a, z - \frac{a}{2}\right) \rangle + \\
 & + 8 \cos\left(k_x a + \frac{k_y a}{2} + \frac{k_z a}{2}\right) \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A\left(x - a, y - \frac{a}{2}, z - \frac{a}{2}\right) \rangle,
 \end{aligned} \tag{5.47}$$

$$\begin{aligned}
S_{BB}(k_x, k_y, k_z) = & 1 + 2 \cos(k_x a) \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | \varphi_B(x + \frac{a}{2}, y, z) \rangle + \\
& + 2 \cos(k_y a) \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y - a, z) \rangle + \\
& + 2 \cos(k_z a) \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z - a) \rangle + \\
& + 4 \cos(\frac{k_x a}{2} + \frac{k_y a}{2}) \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | \varphi_B(x - a, y - \frac{a}{2}, z) \rangle + \\
& + 4 \cos(k_x a + k_y a) \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | \varphi_B(x + \frac{a}{2}, y - a, z) \rangle + \\
& + 4 \cos(\frac{k_x a}{2} + \frac{k_z a}{2}) \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | \varphi_B(x - a, y, z - \frac{a}{2}) \rangle + \\
& + 4 \cos(k_x a + k_z a) \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | \varphi_B(x + \frac{a}{2}, y, z - a) \rangle + \\
& + 4 \cos(\frac{k_y a}{2} + \frac{k_z a}{2}) \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y - \frac{a}{2}, z - \frac{a}{2}) \rangle + \\
& + 4 \cos(k_y a + k_z a) \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y - a, z - a) \rangle + \\
& + 8 \cos(k_x a + k_y a + k_z a) \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | \varphi_B(x + \frac{a}{2}, y - a, z - a) \rangle + \\
& + 8 \cos(\frac{k_x a}{2} + \frac{k_y a}{2} + k_z a) \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | \varphi_B(x - a, y - \frac{a}{2}, z - a) \rangle + \\
& + 8 \cos(\frac{k_x a}{2} + k_y a + \frac{k_z a}{2}) \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | \varphi_B(x - a, y - a, z - \frac{a}{2}) \rangle + \\
& + 8 \cos(k_x a + \frac{k_y a}{2} + \frac{k_z a}{2}) \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | \varphi_B(x + \frac{a}{2}, y - \frac{a}{2}, z - \frac{a}{2}) \rangle,
\end{aligned} \tag{5.48}$$

$$\begin{aligned}
S_{AB}(k_x, k_y, k_z) = & 2 \cos(\frac{k_x a}{2}) \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) \rangle + \\
& + 2 \cos(\frac{k_y a}{2}) \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_B(x, y - \frac{a}{2}, z) \rangle + \\
& + 2 \cos(\frac{k_z a}{2}) \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_B(x, y, z - \frac{a}{2}) \rangle + \\
& + 8 \cos(\frac{k_x a}{2} + \frac{k_y a}{2} + \frac{k_z a}{2}) \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y - \frac{a}{2}, z - \frac{a}{2}) \rangle.
\end{aligned} \tag{5.49}$$

Як і в двовимірному чи одновимірному випадку НКТ тут

$S_{AB}(k_x, k_y, k_z) = S_{BA}^*(k_x, k_y, k_z)$. А матричні елементи H визначаються так:

$$\begin{aligned}
H_{AA}(k_x, k_y, k_z) = & E_{KT}^A + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_A | \varphi_A(x, y, z) \rangle + \\
& + 2 \cos(k_x a) [E_{KT}^A \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x-a, y, z) \rangle + \\
& \quad + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_A - V_0^A(x-a, y, z) | \varphi_A(x-a, y, z) \rangle] + \\
& + 2 \cos(k_y a) [E_{KT}^A \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x, y-a, z) \rangle + \\
& \quad + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_A - V_0^A(x, y-a, z) | \varphi_A(x, y-a, z) \rangle] + \\
& + 2 \cos(k_z a) [E_{KT}^A \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x, y, z-a) \rangle + \\
& \quad + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_A - V_0^A(x, y, z-a) | \varphi_A(x, y, z-a) \rangle] + \\
& + 4 \cos\left(\frac{k_x a}{2} + \frac{k_y a}{2}\right) [E_{KT}^A \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x-\frac{a}{2}, y-\frac{a}{2}, z) \rangle + \\
& \quad + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_A - V_0^A(x-\frac{a}{2}, y-\frac{a}{2}, z) | \varphi_A(x-\frac{a}{2}, y-\frac{a}{2}, z) \rangle] + \\
& + 4 \cos(k_x a + k_y a) [E_{KT}^A \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x-a, y-a, z) \rangle + \\
& \quad + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_A - V_0^A(x-a, y-a, z) | \varphi_A(x-a, y-a, z) \rangle] + \\
& + 4 \cos\left(\frac{k_x a}{2} + \frac{k_z a}{2}\right) [E_{KT}^A \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x-\frac{a}{2}, y, z-\frac{a}{2}) \rangle + \\
& \quad + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_A - V_0^A(x-\frac{a}{2}, y, z-\frac{a}{2}) | \varphi_A(x-\frac{a}{2}, y, z-\frac{a}{2}) \rangle] + \\
& + 4 \cos(k_x a + k_z a) [E_{KT}^A \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x-a, y, z-a) \rangle + \\
& \quad + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_A - V_0^A(x-a, y, z-a) | \varphi_A(x-a, y, z-a) \rangle] + \\
& + 4 \cos\left(\frac{k_y a}{2} + \frac{k_z a}{2}\right) [E_{KT}^A \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x, y-\frac{a}{2}, z-\frac{a}{2}) \rangle + \\
& \quad + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_A - V_0^A(x, y-\frac{a}{2}, z-\frac{a}{2}) | \varphi_A(x, y-\frac{a}{2}, z-\frac{a}{2}) \rangle] + \\
& + 4 \cos(k_y a + k_z a) [E_{KT}^A \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x, y-a, z-a) \rangle + \\
& \quad + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_A - V_0^A(x, y-a, z-a) | \varphi_A(x, y-a, z-a) \rangle] + \\
& + 8 \cos(k_x a + k_y a + k_z a) [E_{KT}^A \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x-a, y-a, z-a) \rangle + \\
& \quad + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_A - V_0^A(x-a, y-a, z-a) | \varphi_A(x-a, y-a, z-a) \rangle] + \\
& + 8 \cos\left(\frac{k_x a}{2} + \frac{k_y a}{2} + k_z a\right) [E_{KT}^A \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x-\frac{a}{2}, y-\frac{a}{2}, z-a) \rangle + \\
& \quad + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_A - V_0^A(x-\frac{a}{2}, y-\frac{a}{2}, z-a) | \varphi_A(x-\frac{a}{2}, y-\frac{a}{2}, z-a) \rangle] + \\
& + 8 \cos\left(\frac{k_x a}{2} + k_y a + \frac{k_z a}{2}\right) [E_{KT}^A \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x-\frac{a}{2}, y-a, z-\frac{a}{2}) \rangle + \\
& \quad + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_A - V_0^A(x-\frac{a}{2}, y-a, z-\frac{a}{2}) | \varphi_A(x-\frac{a}{2}, y-a, z-\frac{a}{2}) \rangle] + \\
& + 8 \cos\left(k_x a + \frac{k_y a}{2} + \frac{k_z a}{2}\right) [E_{KT}^A \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_A(x-a, y-\frac{a}{2}, z-\frac{a}{2}) \rangle + \\
& \quad + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_A - V_0^A(x-a, y-\frac{a}{2}, z-\frac{a}{2}) | \varphi_A(x-a, y-\frac{a}{2}, z-\frac{a}{2}) \rangle],
\end{aligned} \tag{5.50}$$

де

$$\begin{aligned}
V_A = & V_0^A(x-a, y, z) + V_0^A(x+a, y, z) + V_0^A(x, y+a, z) + \\
& + V_0^A(x, y+a, z) + V_0^A(x, y, z-a) + V_0^A(x, y, z+a) + \\
& + V_0^A(x-\frac{a}{2}, y-\frac{a}{2}, z) + V_0^A(x-\frac{a}{2}, y+\frac{a}{2}, z) + V_0^A(x+\frac{a}{2}, y+\frac{a}{2}, z) + V_0^A(x+\frac{a}{2}, y+\frac{a}{2}, z) + \\
& + V_0^A(x-a, y-a, z) + V_0^A(x-a, y+a, z) + V_0^A(x+a, y+a, z) + V_0^A(x+a, y+a, z) + \\
& + V_0^A(x-\frac{a}{2}, y, z-\frac{a}{2}) + V_0^A(x-\frac{a}{2}, y, z+\frac{a}{2}) + V_0^A(x+\frac{a}{2}, y, z+\frac{a}{2}) + V_0^A(x+\frac{a}{2}, y, z+\frac{a}{2}) + \\
& + V_0^A(x-a, y, z-a) + V_0^A(x-a, y, z+a) + V_0^A(x+a, y, z+a) + V_0^A(x+a, y, z+a) + \\
& + V_0^A(x, y-\frac{a}{2}, z-\frac{a}{2}) + V_0^A(x, y-\frac{a}{2}, z+\frac{a}{2}) + V_0^A(x, y+\frac{a}{2}, z+\frac{a}{2}) + V_0^A(x, y+\frac{a}{2}, z+\frac{a}{2}) + \\
& + V_0^A(x, y-a, z-a) + V_0^A(x, y-a, z+a) + V_0^A(x, y+a, z+a) + V_0^A(x, y+a, z+a) + \\
& + V_0^A(x-a, y-a, z-a) + V_0^A(x+a, y-a, z-a) + \\
& + V_0^A(x-a, y+a, z-a) + V_0^A(x-a, y-a, z+a) + \\
& + V_0^A(x+a, y+a, z-a) + V_0^A(x+a, y-a, z+a) + \\
& + V_0^A(x-a, y+a, z+a) + V_0^A(x+a, y+a, z+a) + \\
& + V_0^A(x-\frac{a}{2}, y-\frac{a}{2}, z-a) + V_0^A(x+\frac{a}{2}, y-\frac{a}{2}, z-a) + \\
& + V_0^A(x-\frac{a}{2}, y+\frac{a}{2}, z-a) + V_0^A(x-\frac{a}{2}, y-\frac{a}{2}, z+a) + \\
& + V_0^A(x+\frac{a}{2}, y+\frac{a}{2}, z-a) + V_0^A(x+\frac{a}{2}, y-\frac{a}{2}, z+a) + \\
& + V_0^A(x-\frac{a}{2}, y+\frac{a}{2}, z+a) + V_0^A(x+\frac{a}{2}, y+\frac{a}{2}, z+a) + \\
& + V_0^A(x-\frac{a}{2}, y-a, z-\frac{a}{2}) + V_0^A(x+\frac{a}{2}, y-a, z-\frac{a}{2}) + \\
& + V_0^A(x-\frac{a}{2}, y+a, z-\frac{a}{2}) + V_0^A(x-\frac{a}{2}, y-a, z+\frac{a}{2}) + \\
& + V_0^A(x+\frac{a}{2}, y+a, z-\frac{a}{2}) + V_0^A(x+\frac{a}{2}, y-a, z+\frac{a}{2}) + \\
& + V_0^A(x-\frac{a}{2}, y+a, z+\frac{a}{2}) + V_0^A(x+\frac{a}{2}, y+a, z+\frac{a}{2}) + \\
& + V_0^A(x-a, y-\frac{a}{2}, z-\frac{a}{2}) + V_0^A(x+a, y-\frac{a}{2}, z-\frac{a}{2}) + \\
& + V_0^A(x-a, y+\frac{a}{2}, z-\frac{a}{2}) + V_0^A(x-a, y-\frac{a}{2}, z+\frac{a}{2}) + \\
& + V_0^A(x+a, y+\frac{a}{2}, z-\frac{a}{2}) + V_0^A(x+a, y-\frac{a}{2}, z+\frac{a}{2}) + \\
& + V_0^A(x-a, y+\frac{a}{2}, z+\frac{a}{2}) + V_0^A(x+a, y+\frac{a}{2}, z+\frac{a}{2}).
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H_{BB}(k_x, k_y, k_z) = & E_{KT}^B + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_B | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) \rangle + 2 \cos(k_x a) \cdot \\
& \cdot [E_{KT}^B \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | \varphi_B(x + \frac{a}{2}, y, z) \rangle + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_B - V_0^B(x + \frac{a}{2}, y, z) | \varphi_B(x + \frac{a}{2}, y, z) \rangle] + 2 \cos(k_y a) \cdot \\
& \cdot [E_{KT}^B \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y - a, z) \rangle + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_B - V_0^B(x - \frac{a}{2}, y - a, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y - a, z) \rangle] + \\
& + 2 \cos(k_z a) [E_{KT}^B \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z - a) \rangle + \\
& \quad + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_B - V_0^B(x - \frac{a}{2}, y, z - a) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z - a) \rangle] + \\
& + 4 \cos(\frac{k_x a}{2} + \frac{k_y a}{2}) [E_{KT}^B \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | \varphi_B(x - a, y - \frac{a}{2}, z) \rangle + \\
& \quad + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_B - V_0^B(x - a, y - \frac{a}{2}, z) | \varphi_B(x - a, y - \frac{a}{2}, z) \rangle] + \\
& + 4 \cos(k_x a + k_y a) [E_{KT}^B \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | \varphi_B(x + \frac{a}{2}, y - a, z) \rangle + \\
& \quad + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_B - V_0^B(x + \frac{a}{2}, y - a, z) | \varphi_B(x + \frac{a}{2}, y - a, z) \rangle] + \\
& + 4 \cos(\frac{k_x a}{2} + \frac{k_z a}{2}) [E_{KT}^B \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | \varphi_B(x - a, y, z - \frac{a}{2}) \rangle + \\
& \quad + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_B - V_0^B(x - a, y, z - \frac{a}{2}) | \varphi_B(x - a, y, z - \frac{a}{2}) \rangle] + \\
& + 4 \cos(k_x a + k_z a) [E_{KT}^B \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | \varphi_B(x + \frac{a}{2}, y, z - a) \rangle + \\
& \quad + \langle \varphi_B(x - a/2, y, z) | V_B - V_0^B(x + a/2, y, z - a) | \varphi_B(x + a/2, y, z - a) \rangle] + \\
& + 4 \cos(k_y a/2 + k_z a/2) [E_{KT}^B \langle \varphi_B(x - a/2, y, z) | \varphi_B(x - a/2, y - a/2, z - a/2) \rangle + \\
& \quad + \langle \varphi_B(x - a/2, y, z) | V_B - V_0^B(x - a/2, y - a/2, z - a/2) | \varphi_B(x - a/2, y - a/2, z - a/2) \rangle] + \\
& + 4 \cos(k_y a + k_z a) [E_{KT}^B \langle \varphi_B(x - a/2, y, z) | \varphi_B(x - a/2, y - a, z - a) \rangle + \\
& \quad + \langle \varphi_B(x - a/2, y, z) | V_B - V_0^B(x - a/2, y - a, z - a) | \varphi_B(x - a/2, y - a, z - a) \rangle] + \\
& + 8 \cos(k_x a + k_y a + k_z a) [E_{KT}^B \langle \varphi_B(x - a/2, y, z) | \varphi_B(x + a/2, y - a, z - a) \rangle + \\
& \quad + \langle \varphi_B(x - a/2, y, z) | V_B - V_0^B(x + a/2, y - a, z - a) | \varphi_B(x + a/2, y - a, z - a) \rangle] + \\
& + 8 \cos(k_x a/2 + k_y a/2 + k_z a) [E_{KT}^B \langle \varphi_B(x - a/2, y, z) | \varphi_B(x - a, y - a/2, z - a) \rangle + \\
& \quad + \langle \varphi_B(x - a/2, y, z) | V_B - V_0^B(x - a, y - a/2, z - a) | \varphi_B(x - a, y - a/2, z - a) \rangle] + \\
& + 8 \cos(k_x a/2 + k_y a + k_z a/2) [E_{KT}^B \langle \varphi_B(x - a/2, y, z) | \varphi_B(x - a, y - a, z - a/2) \rangle + \\
& \quad + \langle \varphi_B(x - a/2, y, z) | V_B - V_0^B(x - a, y - a, z - a/2) | \varphi_B(x - a, y - a, z - a/2) \rangle] + \\
& + 8 \cos(k_x a + k_y a/2 + k_z a/2) [E_{KT}^B \langle \varphi_B(x - a/2, y, z) | \varphi_B(x + a/2, y - a/2, z - a/2) \rangle + \\
& \quad + \langle \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) | V_B - V_0^B(x + a/2, y - a/2, z - a/2) | \varphi_B(x + a/2, y - a/2, z - a/2) \rangle],
\end{aligned}$$

(5.51)

де

$$\begin{aligned}
V_B = & V_0^B(x - \frac{3a}{2}, y, z) + V_0^B(x + \frac{a}{2}, y, z) + V_0^B(x - \frac{a}{2}, y + a, z) + \\
& + V_0^B(x - \frac{a}{2}, y + a, z) + V_0^B(x - \frac{a}{2}, y, z - a) + \\
& + V_0^B(x - \frac{a}{2}, y, z + a) + V_0^B(x - a, y - \frac{a}{2}, z) + \\
& + V_0^B(x - a, y + \frac{a}{2}, z) + V_0^B(x, y + \frac{a}{2}, z) + V_0^B(x, y + \frac{a}{2}, z) + \\
& + V_0^B(x - \frac{3a}{2}, y - a, z) + V_0^B(x - \frac{3a}{2}, y + a, z) + V_0^B(x + \frac{a}{2}, y + a, z) + V_0^B(x + \frac{a}{2}, y + a, z) + \\
& + V_0^B(x - a, y, z - \frac{a}{2}) + V_0^B(x - a, y, z + \frac{a}{2}) + V_0^B(x, y, z + \frac{a}{2}) + V_0^B(x, y, z + \frac{a}{2}) + \\
& + V_0^B(x - 3a/2, y, z - a) + V_0^B(x - 3a/2, y, z + a) + \\
& + V_0^B(x + a/2, y, z + a) + V_0^B(x + a/2, y, z + a) + \\
& + V_0^B(x - a/2, y - a/2, z - a/2) + V_0^B(x - a/2, y - a/2, z + a/2) + \\
& + V_0^B(x - a/2, y + a/2, z + a/2) + V_0^B(x - a/2, y + a/2, z + a/2) + \\
& + V_0^B(x - a/2, y - a, z - a) + V_0^B(x - a/2, y - a, z + a) + \\
& + V_0^B(x - \frac{a}{2}, y + a, z + a) + V_0^B(x, y + a, z + a) + \\
& + V_0^B(x - 3a/2, y - a, z - a) + V_0^B(x + a/2, y - a, z - a) + \\
& + V_0^B(x - 3a/2, y + a, z - a) + V_0^B(x - 3a/2, y - a, z + a) + \\
& + V_0^B(x + a/2, y + a, z - a) + V_0^B(x + a/2, y - a, z + a) + \\
& + V_0^B(x - 3a/2, y + a, z + a) + V_0^B(x + a/2, y + a, z + a) + \\
& + V_0^B(x - a, y - a/2, z - a) + V_0^B(x, y - a/2, z - a) + \\
& + V_0^B(x - a, y + a/2, z - a) + V_0^B(x - a, y - a/2, z + a) + \\
& + V_0^B(x, y + a/2, z - a) + V_0^B(x, y - a/2, z + a) + \\
& + V_0^B(x - a, y + a/2, z + a) + V_0^B(x, y + a/2, z + a) + \\
& + V_0^B(x - a, y - a, z - a/2) + V_0^B(x, y - a, z - a/2) + \\
& + V_0^B(x - a, y + a, z - a/2) + V_0^B(x - a, y - a, z + a/2) + \\
& + V_0^B(x, y + a, z - a/2) + V_0^B(x, y - a, z + a/2) + \\
& + V_0^B(x - a, y + a, z + a/2) + V_0^B(x, y + a, z + a/2) + \\
& + V_0^B(x - 3a/2, y - a/2, z - a/2) + V_0^B(x + a/2, y - a/2, z - a/2) + \\
& + V_0^B(x - 3a/2, y + a/2, z - a/2) + V_0^B(x - 3a/2, y - a/2, z + a/2) + \\
& + V_0^B(x + a/2, y + a/2, z - a/2) + V_0^B(x + a/2, y - a/2, z + a/2) + \\
& + V_0^B(x - 3a/2, y + a/2, z + a/2) + V_0^B(x + a/2, y + a/2, z + a/2).
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H_{AB}(k_x, k_y, k_z) = & 2 \cos\left(\frac{k_x a}{2}\right) [(E_{KT}^A + E_{KT}^B) \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_{AB} - V_0^B(x - \frac{a}{2}, y, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y, z) \rangle] + \\
& + 2 \cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) [(E_{KT}^A + E_{KT}^B) \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_B(x, y - \frac{a}{2}, z) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_{AB} - V_0^B(x, y - \frac{a}{2}, z) | \varphi_B(x, y - \frac{a}{2}, z) \rangle] + \\
& + 2 \cos\left(\frac{k_z a}{2}\right) [(E_{KT}^A + E_{KT}^B) \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_B(x, y, z - \frac{a}{2}) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_{AB} - V_0^B(x, y, z - \frac{a}{2}) | \varphi_B(x, y, z - \frac{a}{2}) \rangle] + \\
& + 8 \cos\left(\frac{k_x a}{2} + \frac{k_y a}{2} + \frac{k_z a}{2}\right) [(E_{KT}^A + E_{KT}^B) \langle \varphi_A(x, y, z) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y - \frac{a}{2}, z - \frac{a}{2}) \rangle + \\
& + \langle \varphi_A(x, y, z) | V_{AB} - V_0^B(x - \frac{a}{2}, y - \frac{a}{2}, z - \frac{a}{2}) | \varphi_B(x - \frac{a}{2}, y - \frac{a}{2}, z - \frac{a}{2}) \rangle],
\end{aligned} \tag{5.52}$$

де

$$\begin{aligned}
V_{AB} = & V_0^B(x - \frac{a}{2}, y, z) + V_0^B(x + \frac{a}{2}, y, z) + V_0^B(x, y - \frac{a}{2}, z) + \\
& + V_0^B(x, y + \frac{a}{2}, z) + V_0^B(x, y, z - \frac{a}{2}) + \\
& + V_0^B(x, y, z + \frac{a}{2}) + V_0^B(x - \frac{a}{2}, y - \frac{a}{2}, z - \frac{a}{2}) + \\
& + V_0^B(x + \frac{a}{2}, y + \frac{a}{2}, z + \frac{a}{2}) + V_0^B(x + \frac{a}{2}, y - \frac{a}{2}, z - \frac{a}{2}) + \\
& + V_0^B(x - \frac{a}{2}, y + \frac{a}{2}, z - \frac{a}{2}) + V_0^B(x - \frac{a}{2}, y - \frac{a}{2}, z + \frac{a}{2}) + \\
& + V_0^B(x + \frac{a}{2}, y + \frac{a}{2}, z - \frac{a}{2}) + V_0^B(x - \frac{a}{2}, y + \frac{a}{2}, z + \frac{a}{2}) + \\
& + V_0^B(x + \frac{a}{2}, y - \frac{a}{2}, z + \frac{a}{2}).
\end{aligned}$$

Врахуємо, що $H_{AB}(k_x, k_y, k_z) = H_{BA}^*(k_x, k_y, k_z)$.

Отже, визначено усі матричні елементи, за якими можна обчислити залежність енергії електрона від хвильового вектора для тривимірної НКТ.

5.2. Енергетичні мінізони електрона та їхні ширини у надґратках квантових точок різної вимірності та сорту

Обчислення проведено для НКТ гетероструктури GaAs/Al_xGa_{1-x}As. Теорія була застосована до випадків одновимірного, двовимірного та тривимірного масиву впорядкованих КТ.

5.2.1. Одновимірна надґратка квантових точок

Нехай R_A позначає радіус першої КТ, R_B — радіус другої КТ, а d — відстань між поверхнями КТ (рисунок 5.1). Радіуси КТ вибрано так, щоб у кожній окремій КТ існували лише s -стани. Центри КТ сортів А та В розташовані симетрично відносно одна одної. Період надґратки, утвореної ланцюжком КТ, позначається через a , а відстань між центрами КТ сортів А та В становить $a/2$. КТ розміщено в матриці AlAs. Розглянуто два випадки:

1. Матеріали КТ сортів А (Al_{0.1}Ga_{0.9}As) та В (Al_{0.2}Ga_{0.8}As) є різними, однак їхні розміри однакові ($R_A = R_B$). Параметри матеріалів мають такі значення [73]:

$$m_A = 0.0713 m_0; \quad m_B = 0.0796 m_0; \quad m_{\text{matr}} = 0.124 m_0;$$

$$U_0^A = 0.46 \text{ eV}; \quad U_0^B = 0.35 \text{ eV};$$

m_0 — маса вільного електрона.

2. Матеріали квантових точок сортів А (GaAs) та В (GaAs) є однаковими, проте їхні розміри відрізняються ($R_A \neq R_B$). Параметри матеріалів мають такі значення [73]:

$$m_A = m_B = 0.0665 m_0; \quad m_{\text{matr}} = 0.124 m_0;$$

$$U_0^A = U_0^B = 0.968 \text{ eV}.$$

Спочатку розглянуто перший випадок детальніше. На рисунку 5.5 показано залежність енергії електрона від хвильового вектора в періодичному ланцюжку КТ однакового розміру ($R_A = R_B$), але з різних матеріалів (випадок 1).

Червоні криві (1 і 3) відповідають КТ з параметрами $R_A = R_B = 30 \text{ \AA}$ та відстанню між їхніми поверхнями $d = 6 \text{ \AA}$. Сині криві (2 і 4) відповідають випадку $R_A = R_B = 24 \text{ \AA}$, $d = 18 \text{ \AA}$. Усі ці залежності побудовано за умови, що ширина зони Брілюена є однаковою. Для цього період ланцюжка КТ має бути сталим, тобто $2(R_A + R_B + d) = a = 132 \text{ \AA}$. Відстань між центрами КТ сортів А та В становить $a/2 = 66 \text{ \AA}$. З графіків видно, що коли в ланцюжку присутні два типи КТ, зона, утворена s-рівнями, розщеплюється на дві — нижню та верхню. Проте, якщо матеріали КТ однакові й їхні розміри збігаються, отримані результати узгоджуються з висновками робіт [25, 91]. Аналіз також показує, що для більших КТ (криві 1 і 3) ширина розщеплення є більшою, проте розташування зон на енергетичній шкалі — нижче, порівняно з іншими випадками:

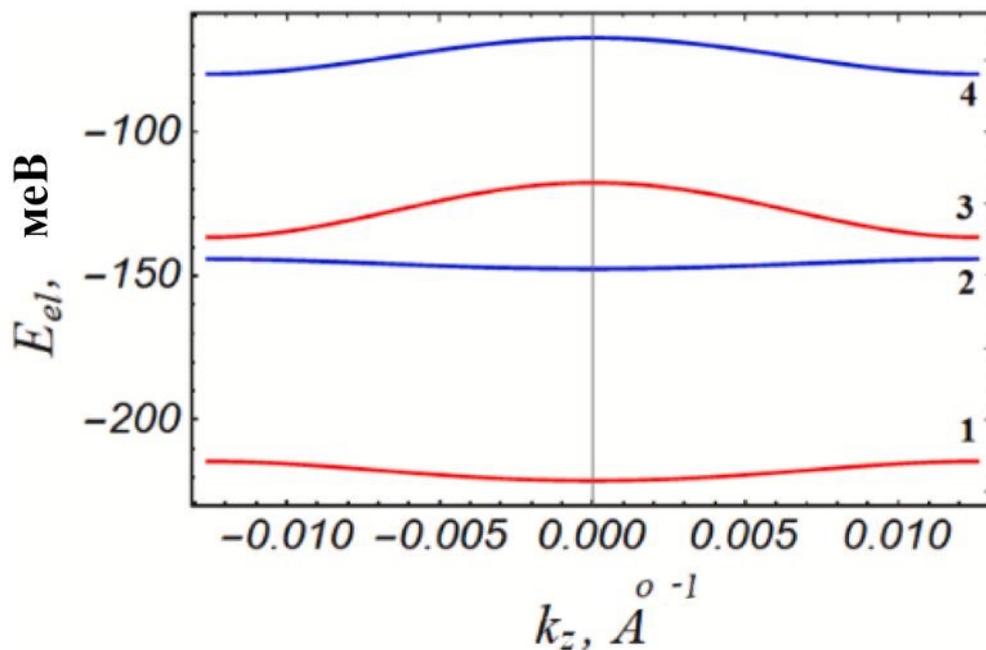


Рисунок 5.5. Енергетичний спектр електрона в періодичному ланцюжку КТ, однакових за розміром, як функція хвильового вектора. КТ А — $\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{As}$, КТ В — $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$, матриця — AlAs . Червоні криві (1, 3) відповідають параметрам $R_A=R_B=30 \text{ \AA}$, $d=6 \text{ \AA}$; сині криві (2, 4) — $R_A=R_B=24 \text{ \AA}$, $d=18 \text{ \AA}$. Нижні зони відповідають кривим 1, 2, а верхні зони — 3, 4.

$$E_{\text{нижня}}|_{R_A=R_B=30 \text{ \AA}; d=6 \text{ \AA}} < E_{\text{нижня}}|_{R_A=R_B=24 \text{ \AA}; d=18 \text{ \AA}}$$

$$E_{\text{верхня}}|_{R_A=R_B=30 \text{ \AA}; d=6 \text{ \AA}} < E_{\text{верхня}}|_{R_A=R_B=24 \text{ \AA}; d=18 \text{ \AA}}$$

Така залежність виникає через те, що для ізольованих КТ більшого розміру енергетичні рівні розташовані нижче, ніж для менших КТ. На ширину утворених зон впливають два чинники: 1) розмір окремої КТ і-го типу; 2) відстань між поверхнями сусідніх КТ. З одного боку, збільшення розміру КТ сприяє звуженню зони внаслідок сильнішої локалізації електрона в окремій КТ. З іншого боку, зменшення відстані між поверхнями призводить до зниження локалізації електрона через посилення тунелювання в сусідні КТ.

З графіків також видно, що ширини верхніх зон більші, ніж ширини нижніх зон. Це пояснюється тим, що стани з більшою енергією (верхні зони) є менш локалізованими, ніж стани з нижчою енергією, що полегшує тунелювання електронів у сусідні КТ.

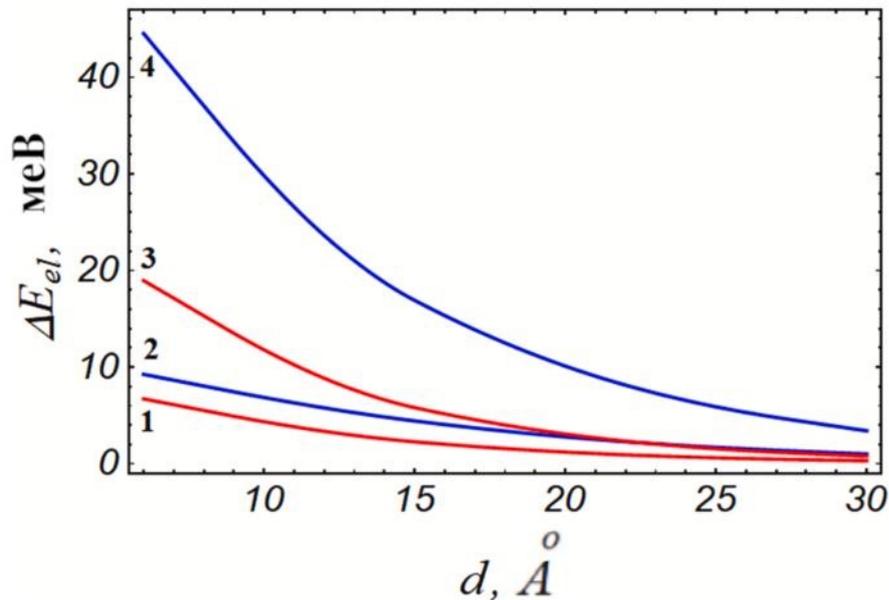


Рисунок 5.6. Залежність ширин зон від відстані між поверхнями КТ сорту А ($\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{As}$) та В ($\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$). Червоні криві (1, 3) відповідають параметрам $R_A = R_B = 30 \text{ \AA}$; сині криві (2, 4) — $R_A = R_B = 24 \text{ \AA}$.

Для підтвердження наведених вище тверджень на рисунку 5.6 побудовано залежності ширин дозволених зон від відстані між поверхнями КТ різних радіусів: сині криві відповідають $R_A = R_B = 24 \text{ \AA}$, а червоні криві — радіусам $R_A = R_B = 30 \text{ \AA}$. Із рисунку 5.6 видно, що збільшення відстані між КТ (при сталих їхніх розмірах) призводить до зменшення ширини як верхніх, так і нижніх зон. У граничному випадку, коли d стає великим ($d > 500 \text{ \AA}$), ширини зон прямують до нуля, а енергії зон наближаються до значень енергетичних рівнів ізольованих КТ.

Однак за фіксованої відстані між КТ ширини верхніх зон, утворених ланцюжком періодичних КТ із параметрами $R_A = R_B = 30 \text{ \AA}$, є меншими, ніж ширини верхніх зон, утворених ланцюжком КТ з параметрами $R_A = R_B = 24 \text{ \AA}$. Аналогічна ситуація спостерігається і для нижніх зон. Розрахунки також показують, що ширина забороненої зони (відстань між нижньою та верхньою зонами) не залежить від відстані між поверхнями КТ, якщо їхні розміри залишаються сталими. Водночас ширина забороненої зони визначається саме розмірами КТ.

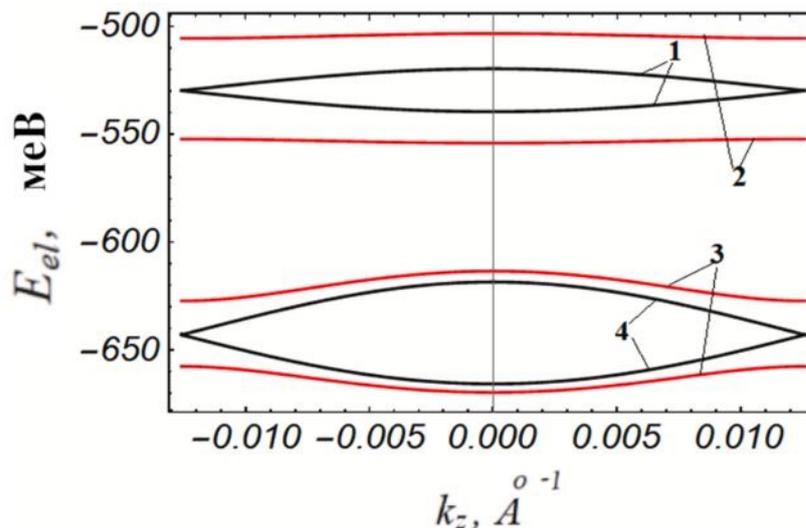


Рисунок 5.7. Енергетичний спектр електрона в одновимірній НКТ з однаковим матеріалом (GaAs), як функція хвильового вектора, в матриці AlAs. Чорні криві відповідають випадкам: 1) $R_A = R_B = 24 \text{ \AA}$; $d = 18 \text{ \AA}$; 4) $R_A = R_B = 30 \text{ \AA}$, $d = 6 \text{ \AA}$. Червоні криві - 2) $R_A = 25 \text{ \AA}$, $R_B = 23 \text{ \AA}$, $d = 18 \text{ \AA}$; 3) $R_A = 31 \text{ \AA}$; $R_B = 29 \text{ \AA}$, $d = 6 \text{ \AA}$.

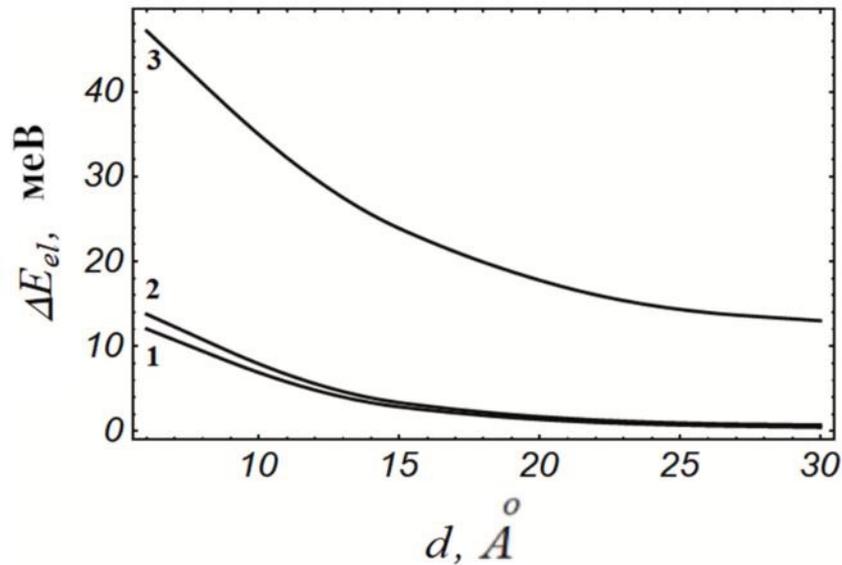


Рисунок 5.8. Ширини зон: 1 — нижня зона, 2 — верхня зона, 3 — дозволена зона для НКТ, утвореної з КТ однакових матеріалів. Структура GaAs/AlAs.

Далі розглянуто випадок, коли матеріали КТ сортів А (GaAs) та В (GaAs) є однаковими, проте їхні розміри відрізняються ($R_A \neq R_B$). На рисунку 5.7 показано залежність енергії електрона від хвильового вектора в періодичному ланцюжку КТ, виготовлених з одного матеріалу. Червоні криві відповідають випадку КТ різних розмірів, а чорні криві — однакових КТ. Із рисунка 5.7 видно, що за однакових розмірів КТ А і В заборонена зона відсутня (між нижньою та верхньою зонами). Ці результати узгоджується з результатами, наведеними в роботах [25, 91]. Якщо ж збільшити радіус однієї КТ на 1 \AA і, відповідно, зменшити радіус іншої КТ на 1 \AA , то з'являється заборонена зона. Проте зони, що позначені на рисунку 5.7, кривими 3 і 4 розташовані нижче, оскільки відповідні радіуси КТ більші, ніж для зон, що позначені кривими 1 і 2. Через різницю розмірів (при однаковому матеріалі) виникає характерна особливість — навіть незначна періодична зміна розмірів призводить до появи нижньої та верхньої зон.

Щодо ширин зон, розрахунки показують, що зі збільшенням різниці між радіусами КТ у ланцюжку ширина забороненої зони зростає. Ширини

дозволенних зон є подібними до тих, що спостерігаються у випадку 1 (різні матеріали КТ і однакові розміри). Це детальніше видно на рисунку 5.8: криві 1 і 2 відповідають ширинам нижньої та верхньої зон енергетичних спектрів у періодичному ланцюжку КТ GaAs однакового матеріалу, але різних радіусів у матриці AlAs. Крива 3 відображає ширину зони для ідентичних КТ GaAs у матриці AlAs.

Таким чином, розрахунки показали, що у випадку 1 — коли КТ мають однакові розміри, але різні матеріали, — відбувається розщеплення основної мінізони на верхню та нижню зони. Ширини цих зон залежать від розмірів КТ та відстані між ними, причому верхні зони завжди ширші за нижні. У випадку 2, коли матеріал КТ однаковий (GaAs), але їхні розміри різні, також спостерігається поява забороненої зони між верхньою та нижньою мінізонами. Навіть невелика різниця у радіусах КТ призводить до такого ефекту. Натомість для ідентичних за розміром і матеріалом КТ заборонена зона відсутня.

5.2.2. Двовимірні надгратки квантових точок

Використовуючи формули для обчислення енергії двовимірної НКТ, які розташовані смугами, отримано залежності енергетичного спектру у таких системах. Для цього радіуси КТ підбрано таким чином, щоб у кожній окремій КТ був лише основний s-стан. Елементарна комірка такої надгратки містить дві КТ різного сорту. Період надгратки позначається через a , при цьому відстань між центрами КТ дорівнює $a/2$. Усі КТ вбудовані в матрицю AlAs.

Розглядається випадок, коли КТ типів А ($\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{As}$) і В ($\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$) виготовлені з різних матеріалів, проте мають однакові розміри, тобто $R_A = R_B$. Параметри матеріалів прийнято такими як і одновимірному випадку.

У розглянутій двовимірній НКТ сортів А та В, розташованих вертикальними смугами (див. рисунок 5.2), метод сильного зв'язку у

наближенні найближчих сусідів демонструє утворення двох мінізон. Періодична модуляція потенціалу та наявність двох сортів КТ призводить до зняття виродження квантових рівнів і розщеплення початкової енергетичної зони на дві. Як видно з наведеного графіка на рисунку 5.9 лінії Σ ($\Gamma \rightarrow M$), Z ($M \rightarrow X$), Δ ($X \rightarrow \Gamma$) утворюють верхню зону (позначена 1) і нижню зону (2), розділені енергетичним інтервалом (заборонена мінізона). Верхня зона (1) демонструє ширше значення дисперсії (більшу ширину), оскільки стани відповідних КТ мають більшу енергію і сильніший тунельний зв'язок між собою, тоді як нижня зона (2) є вузкою внаслідок більшої локалізації електронів. Енергетична різниця між ними в точках Γ , M та X відображає відмінність у величині потенціалів матеріалів А і В.

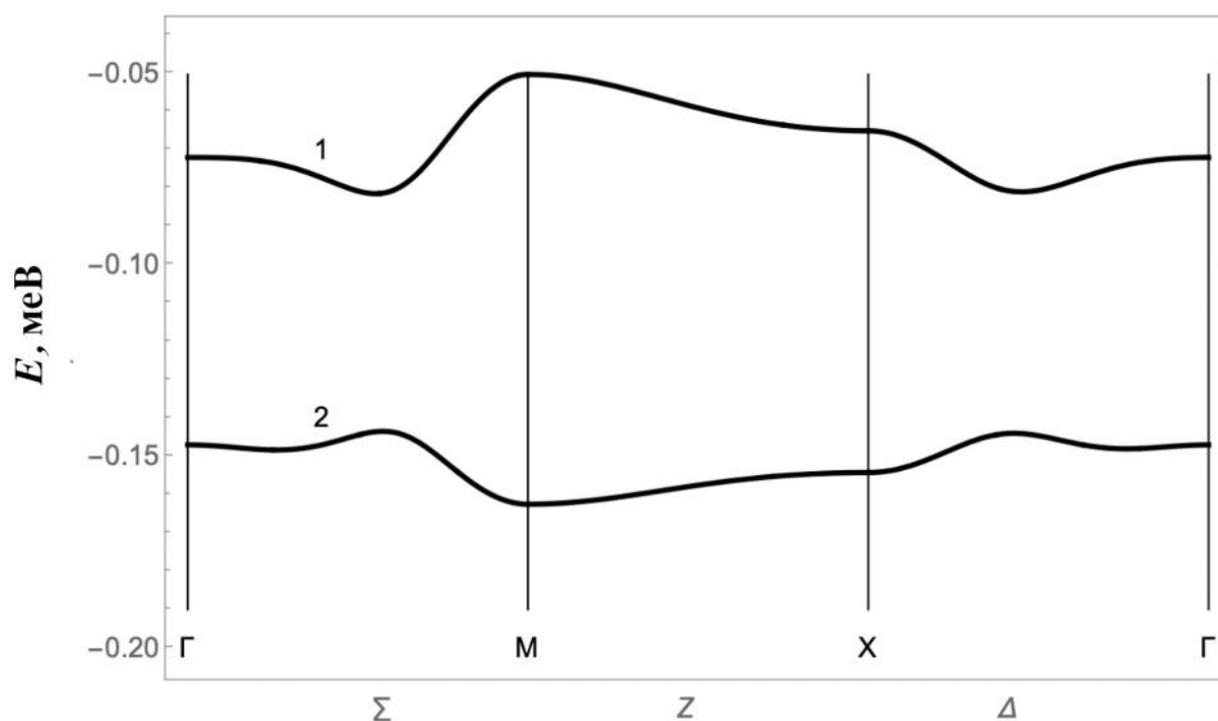


Рисунок 5.9. Дві найнижчі енергетичні зони, утворені з s-рівнів КТ сортів А і В у двовимірній НКТ зі смугастим розташуванням КТ однакових розмірів. $R_A=R_B=24 \text{ \AA}$, $d=18 \text{ \AA}$, матеріали точок А і В різні. Крива 1 – верхня мінізона, крива 2 – нижня.

Симетрія прямокутної двокомпонентної надгратки КТ та її періодичність визначають характерні особливості зонної структури.

Напрямок Σ ($\Gamma \rightarrow M$) характеризується тим, що $k_x = k_y$, тому одночасно працюють обидва тунельні зв'язки різної інтенсивності між КТ різного сорту, але в однаковому фазовому режимі (коли фазові множники Блоха, які відповідають переходам між сусідніми КТ надгратки в різних просторових напрямках, збігаються між собою). Анізотропія дисперсійних залежностей у двовимірному масиві КТ зумовлена різною величиною тунельних зв'язків уздовж взаємно перпендикулярних напрямків. Уздовж напрямку Σ ($\Gamma \rightarrow M$) дисперсія формується сумарним внеском обох типів зв'язків, тоді як уздовж напрямків Z ($M \rightarrow X$) та Δ ($X \rightarrow \Gamma$) вона визначається відповідно зв'язками вздовж однієї з осей.

Періодична структура накладає закономірності на вигини зон: формуються екстремуми та «плато» у зоні Брілюена. Таким чином, комбінована дія просторової періодичності обумовлює спостережуване розщеплення та різну ширину двох мінізон, що ілюструється наведеним графіком на рисунку 5.9. Верхня мінізона має більшу ширину, що свідчить про вищу ймовірність тунелювання електронів між КТ. Нижня мінізона більш плоска, що відповідає сильнішій просторовій локалізації електрона в межах окремих КТ.

У зображеному спектрі мінімум енергії для нижньої мінізони не знаходиться у точці Γ , а зміщений у точку M . Це є прямим наслідком чергування КТ із різних матеріалів при однакових міжцентрових відстанях. У точці Γ (0, 0) хвильовий вектор дорівнює нулю, і хвильова функція має однакову фазу на всіх КТ надгратки. У такому випадку мало би бути максимальне перекриття хвильових функцій між сусідніми КТ. Проте, оскільки матеріали КТ відрізняються, локальні потенціали також різні. У результаті в точці Γ електронний стан не є оптимально локалізованим у точці з нижчим потенціалом — хвильова функція розпливається більше, що підвищує енергію.

У точці M (π/a , π/a) фазовий зсув між сусідніми вузлами становить π . Це означає, що хвильова функція надгратки набуває протилежних знаків на сусідніх КТ. Така антифазна конфігурація понижує тунельне перекривання і тим самим підсилює локалізацію в КТ із глибшою потенціальною ямою (наприклад, у КТ типу А). Внаслідок цього енергія електронного стану у точці зони Брілюена M стає нижчою, ніж у Γ .

Інший випадок, який розглянуто, це двовимірна НКТ сортів А і В, які чергуються у шаховому порядку. На графіку (рисунок 5.10) для двовимірної НКТ ($R_A = R_B = 24 \text{ \AA}$, $d = 18 \text{ \AA}$) також видно утворення двох мінізон: верхньої (1) і нижньої (2). Важлива особливість — мінімум нижньої мінізони в точці Γ та в точці M . Така ж ситуація відрізняється від попереднього випадку. Це означає, що для електрона у цій надгратці енергія його стану на краю зони така ж, як і у центрі зони, бо геометрія НКТ є регулярною і відстані між усіма КТ однакові. Така картина є типовою для НКТ з двома різними КТ: локальні потенціали А і В різні, отже утворюється розщеплення на підзони, і положення екстремумів визначається фазою недіагонального елемента визначника (5.11).

При смугастому упорядкуванні (рядки однакових КТ) система має певну анізотропію геометрії зв'язків: уздовж смуги кількість та характер сусідів відрізняються від перпендикулярного напрямку, тому дисперсія може бути більш виражена в одному напрямі. Проте якщо всі відстані між центрами однакові, то модуль недіагональних елементів визначника (5.11) вздовж головних симетричних точок дає аналогічні значення розщеплення, і мінімум теж може зміщуватись у M . У шаховому порядку (двокомпонентна квадратна комірка) симетрія інша: кожна КТ А оточена КТ В у всіх напрямках, тому інтерференційні ефекти між усіма трьома (в 2D — двома) осями спричиняють більш симетричну залежність недіагональних елементів від хвильового вектора і це призводить до мінімуму і в точці Γ , і в точці M . Отже, в обидвох випадках мінімум нижньої зони у ϵ т. M (а для шахового порядку і в Γ), який

визначається різницею енергій в ізольованих КТ і фазовою залежністю недіагонального елемента (5.11).

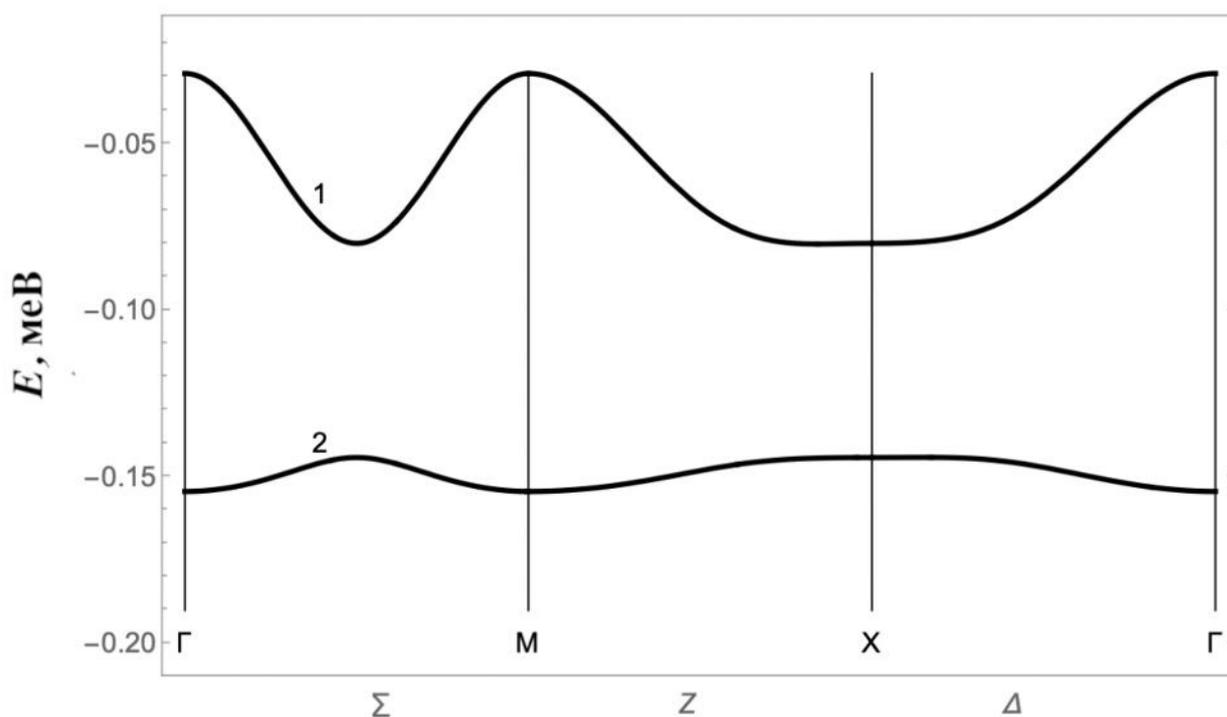


Рисунок 5.10. Дві найнижчі енергетичні зони, утворені з s -рівнів КТ типів А і В у двовимірній НКТ з шаховим розташуванням точок. $R_A = R_B = 24 \text{ \AA}$, $d = 18 \text{ \AA}$, матеріали точок А і В різні. Крива 1 – верхня мінізона, крива 2 – нижня.

А форма упорядкування (смуги і шахи) лише модулює деталі дисперсій, але не змінює базовий механізм їх утворення.

5.2.3. Тривимірна надґратка квантових точок

Розглядається тривимірна НКТ двох сортів КТ, параметри яких вибрано таким чином, щоб у кожній окремій КТ реалізовувався лише основний s -стан. КТ типів А та В з однаковими радіусами симетрично розташовані в матриці

AlAs, формуючи періодичну структуру з періодом a та міжцентровою відстанню $a/2$, при цьому КТ відрізняються параметрами матеріалів.

У наближенні методу сильного зв'язку зонна структура кубічної НКТ формується внаслідок перекриття s -орбіталей сусідніх КТ. Оскільки в основі кубічної надґратки є дві підґратки (А і В), для кожного квазіімпульсу $\hbar k$ отримуємо два розв'язки рівняння Шредінґера – тобто дві енергетичні зони верхню і нижню. Відмінність s -рівнів у КТ А і В спричинює початкову розбіжність цих зон, а тунелювання між КТ сорту А і В зміщує їхні стани і розширює смуги – у підсумку утворюються «зв'язувальні» та «антизв'язувальні» комбінації. У високосиметричних точках зони Брілюена фази Блоха дорівнюють 0 (точка Γ) або π (точки X, R тощо): коли $k=0$, то хвилі на всіх вузлах співфазні, утворюється «зв'язувальний» стан з нижчою енергією, а коли k на межі зони, то сусідні вузли протифазні, – «антизв'язувальний» з вищою енергією.

Типова залежність такої зонної структури, зображена на графіку (рисунок 5.11). Вона пояснюється фазовими співвідношеннями хвильових функцій у вузлах НКТ та характером тунелювання між КТ. У точці Γ усі хвильові функції сусідніх КТ мають однакову фазу, тобто вони співфазні. У такому випадку перекриття хвильових функцій максимальне, тому частинки утворюють зв'язувальний стан із найнижчою енергією. І нижча зона (крива 2) має мінімум енергії в точці Γ .

На межах зони Брілюена (точки X, R, M) фази хвильових функцій сусідніх КТ протилежні. Перекриття хвильових функцій частково компенсується, що зменшує ефективне тунелювання і підвищує енергію зв'язувального стану. Водночас для антизв'язувальної комбінації (верхня зона крива 1) ситуація протилежна: у точці Γ через протилежний знак хвильових функцій енергія є найвищою, тоді як на межі зони, де фази сусідніх точок протилежні, хвильові функції підсилюють одна одну, утворюючи мінімум енергії.

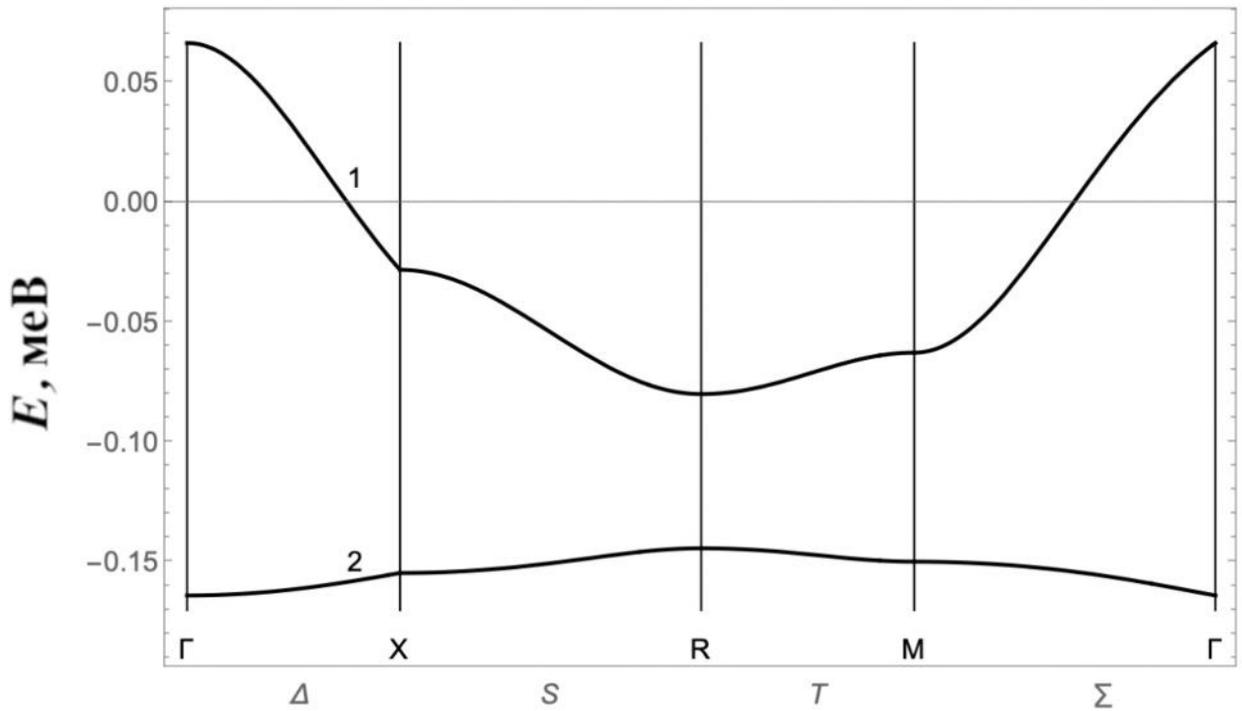


Рисунок 5.11. Дві найнижчі енергетичні зони, утворені з s -рівнів КТ сортів А і В у тривимірній НКТ з шаховим розташуванням КТ. $R_A = R_B = 24 \text{ \AA}$, $d = 18 \text{ \AA}$, матеріали точок А і В різні. Крива 1 – верхня мінізона, крива 2 – нижня.

Отже, уздовж напрямків Γ - X - R - M - Γ нижня зона (крива 2) демонструє мінімум у центрі зони Брілюена та збільшення енергії на її межах. Верхня зона (крива 1) має протилежний хід — максимум у центрі зони Брілюена, а мінімум — у точці R . Такий характер дисперсійної залежності є прямим наслідком тунельного зв'язку між КТ та зміни відносних фаз їхніх хвильових функцій у різних симетричних напрямках.

Якщо порівняти «шахові» випадки для двовимірної і тривимірної НКТ, то слід зауважити, що у двовимірній надгратці з шаховим розташуванням квантових точок сортів А і В (рисунок 5.10) мінімум нижньої мінізони розташований не тільки в центрі зони Брілюена (точці Γ), а і в точці M . Це пов'язано з тим, що у двовимірному випадку відносний вплив різниці власних енергій КТ А і В на недіагональні елементи матриці (5.11) є більш помітним,

ніж у тривимірному. У площинній надгратці кожна КТ має менше сусідів, тому умови фазового узгодження між хвильовими функціями КТ А і В визначаються переважно знаками недіагональних елементів. Для антифазної комбінації (точка М) хвильова функція ефективно локалізується в глибшому потенціалі (наприклад, КТ А), що забезпечує зниження енергії — отже, мінімум спостерігається ще і в М.

У тривимірній кубічній НКТ (рисунок 5.11) ситуація інша: кожна КТ має більше сусідів у всіх трьох напрямках, тому внесок від перекриття хвильових функцій стає основним. У центрі зони Брілюена (точка Г) усі хвильові функції співфазні, перекриття максимальне, і утворюється найбільш зв'язувальний стан з найнижчою енергією. На межах зони (X, R, M) через протифазу перекриття зменшується, і енергія цього стану зростає. Тому для тривимірного випадку мінімум нижньої зони розташований у Г, а максимум — на крайніх точках зони Брілюена.

Таким чином, зміщення мінімуму в точку М характерне для двовимірної надгратки, де фазові ефекти й різниця потенціалів А та В мають більший вплив, тоді як у тривимірній надгратці КТ мінімум залишається в центрі зони Брілюена.

Висновки до розділу 5

1. Розроблено узагальнену теоретичну модель НКТ з двома різними КТ у базисі в межах МСЗ в наближенні найближчих сусідів. Такий підхід дозволив врахувати як локалізовані стани в окремих КТ, так і тунельне перекриття хвильових функцій між ними, що забезпечило можливість побудови повної енергетичної зонної структури для одно-, дво- та тривимірних НКТ.

2. Показано, що наявність двох типів КТ у базисі призводить до розщеплення основної мінізони на верхню та нижню зони. У випадку КТ з однаковими розмірами, але різними матеріалами, розщеплення зумовлене різницею потенціалів і ефективних мас носіїв. Для КТ одного матеріалу, але різних розмірів, навіть незначна різниця радіусів спричиняє появу забороненої зони. Встановлено, що ширина мінізон зменшується зі збільшенням розмірів КТ та відстані між ними внаслідок послаблення тунельної взаємодії.

3. Досліджено вплив просторової періодичності та симетрії надґратки на характер енергетичних спектрів. У двовимірних НКТ зі смугастим або шаховим впорядкуванням КТ встановлено формування двох мінізон різної ширини. Енергетичні екстремуми мінізон зміщуються у межах зони Брілюена залежно від типу чергування КТ, що відображає анізотропію тунельних зв'язків та відмінність локальних потенціалів. Для тривимірних НКТ отримано аналогічні закономірності, які демонструють збільшення величини розщеплення зон завдяки збільшенню кількості напрямків тунелювання.

ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ ТА ВИСНОВКИ

У дисертаційній роботі з використанням багатозонної теорії ефективної маси, МСЗ і МПХ та моделі прямокутних потенціальних ям і бар'єрів досліджено електронні, діркові стани та вплив електричного поля на енергетичні спектри ізолюваної КТ з акцепторною домішкою, розроблено аналітичну теорію мінізонної структури НКТ з одною і двома КТ у базисі. На основі цього вперше:

1. У рамках багатозонної теорії ефективної маси досліджено дірковий енергетичний спектр ізолюваної сферичної КТ з урахуванням деформаційних та поляризаційних ефектів на межі КТ–матриця. Встановлено, що для гетеросистеми InAs/GaAs ці ефекти мають протилежний вплив, який частково компенсується, тоді як для систем із меншою невідповідністю ґраткових параметрів (наприклад, GaAs/AlAs) їхнім впливом можна знехтувати. Показано, що вибір моделі валентної зони (4×4 , 6×6 чи однозонна) суттєво впливає на значення енергії дірки в малих КТ (радіус менший 40 \AA) гетеросистеми InAs/GaAs, тоді як для більших розмірів різниця дещо меншою. Однак для КТ гетеросистеми GaAs/AlAs модель 4×4 та 6×6 дають практично однакові результати для (радіусів КТ більших 40 \AA). Зокрема для радіуса КТ 40 \AA різниця енергії між моделями становить 4 меВ . Таким чином, встановлено межі застосовності різних зонних моделей для опису діркових станів у напівпровідникових КТ.
2. Досліджено вплив зовнішнього електричного поля довільної орієнтації на енергетичний спектр дірок у сферичній КТ з акцепторною домішкою, зміщеною від центра. Показано, що наявність домішки порушує сферичну симетрію та зумовлює розщеплення енергетичних рівнів дірок. Орієнтація електричного поля відносно зміщення домішки істотно впливає на величину цього розщеплення: при паралельній орієнтації воно

зростає, при протилежній — зменшується. Виявлено існування критичного електричного поля, при якому частково відновлюється сферична симетрія розподілу діркової густини у випадку напрямлення електричного поля вздовж зміщення домішки. Для перпендикулярної орієнтації поля по відношенню до зміщення акцептора встановлено відсутність циліндричної симетрії. Таким чином, визначено закономірності впливу зовнішнього електричного поля на спектр діркових станів у системі з акцепторною домішкою.

3. Отримано залежності спектрального коефіцієнта поглинання від величини прикладеного електричного поля та розташування акцепторної домішки у КТ. Встановлено, що електричне поле змінює положення та інтенсивність піків у спектрі поглинання, зумовлюючи формування двох основних смуг, пов'язаних із розщепленням енергетичних рівнів дірок. Основний внесок у спектр роблять переходи з $|M| = 3/2$, тоді як переходи з $|M| = 1/2$ формують піки меншої висоти. Показано, що дисперсія розмірів КТ впливає на ширину спектральних смуг: при малих відхиленнях розміру ($\sigma \approx 5\%$) структура спектру зберігається, а при більших ($\sigma \approx 20\%$) смуги перекриваються. Також показано, що величина напруженості електричного поля більше впливає на смуги поглинання, ніж його орієнтація.
4. Для надґраток однакових КТ кубічної та сферичної форми за допомогою МПХ і МСЗ розраховано електронні мінізони з урахуванням геометричних параметрів, розмірів КТ і потенціальних бар'єрів між ними. Встановлено, що ширина мінізон залежить від розмірності НКТ: у тривимірних структурах вона найбільша, у двовимірних — проміжна, а в одновимірних — найменша. Показано, що для кубічних НКТ ширина мінізон перевищує відповідну для сферичних, що зумовлено більшою ефективною площею поверхні взаємодії між сусідніми КТ. Результати, отримані обома методами, якісно збігаються, що підтверджує

достовірність розрахованих енергетичних спектрів та мінізонної структури.

5. Розвинено теорію електронного спектра надґраток з двома різними КТ у базисі, побудовану в межах моделі сильного зв'язку у наближенні найближчих сусідів. Показано, що наявність двох типів КТ — різних за матеріалом або розміром — призводить до розщеплення основної мінізони на верхню та нижню зони, що формує додаткові заборонені області в енергетичному спектрі. Встановлено, що збільшення розміру КТ або відстані між ними зменшує ширину мінізон через ослаблення тунельного перекриття хвильових функцій. Отримані результати узгоджуються з відомими теоретичними моделями для надґраток з однаковими КТ у базисі та розширюють їх для випадку неоднорідних структур.
6. Проведено порівняльний аналіз електронних мінізон у лінійно розташованих, двовимірних та тривимірних масивах КТ. Встановлено, що збільшення просторової вимірності надґратки призводить до зростання ширини мінізон і підвищення енергетичної дисперсії завдяки збільшенню кількості напрямків тунельної взаємодії між КТ. Таким чином, розмірність надґратки є одним з чинників формування мінізонної структури, а її контроль дозволяє цілеспрямовано керувати зонною структурою наносистем.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Yu P., Wang Z. M. *Quantum dot optoelectronic devices*. Switzerland: Springer Nature, 2020. 329 p.
2. Prabhakaran P., Kim W. J., Lee K.-S., Prasad P. N. Quantum dots (QDs) for photonic applications. *Optical Materials Express*. 2012. Vol. 2, No 5. P. 578-593.
3. Sreejith S., Ajayan J., Radhika J. M. et al. Recent progress in silicon quantum dots sensors: A review. *Silicon*. 2024. Vol 16, P. 6313-6335.
4. Zhao A. Review of Quantum Dots-Based Biosensor Systems: Construction and Applications. *Theoretical and Natural Science*. 2025. Vol. 98. P. 16-23.
5. Imamoglu A. Are quantum dots useful for quantum computation? *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*. 2003. Vol. 16, No. 1. P. 47-50.
6. Schütz M. J. A. *Quantum dots for quantum information processing: controlling and exploiting the quantum dot environment*. Springer International Publishing AG, 2017. 199 p.
7. Heindel T., Kim J.-H., Gregersen N., Rastelli A, Reitzenstein S. Quantum dots for photonic quantum information technology. *Advances in Optics and Photonics*. 2023. Vol. 15. P. 613-738.
8. Tomić S., Jones T. S., Harrison N. M. Absorption characteristics of a quantum dot array induced intermediate band: Implications for solar cell design. *Applied Physics Letters*. 2008. Vol. 93, No 26. P.263105:1-5.
9. Tomić S., Harrison N. M., Jones T. S. Electronic structure of QD arrays: application to intermediate-band solar cells. *Optical and Quantum Electronics*. 2008. Vol 40, No. 5-6. P. 313–318.
10. Nozik A.J. Quantum dot solar cells. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*. 2002. Vol. 14, No 1-2. P. 115-120.

11. Basit M. A., Ali M. A., Masroor Z., Tariq Z., Bang J. H. Quantum dot-sensitized solar cells: A review on interfacial engineering strategies for boosting efficiency. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*. 2023. Vol. 120. P. 1-26.
12. Lan H., Ding Y. Ordering, positioning and uniformity of quantum dot arrays. *Nano Today*. 2012. Vol. 7, No 2. P. 94-123.
13. Murray C. B., Norris D. J., Bawendi M. G. Synthesis and characterization of nearly monodisperse CdE (E = sulfur, selenium, tellurium) semiconductor nanocrystallites. *Journal of the American Chemical Society*. 1993. Vol. 115, No 19. P. 8706-8715.
14. Pan J., El-Ballouli A. O., Rollny L. Automated synthesis of photovoltaic-quality colloidal quantum dots using separate nucleation and growth stages. *ACS Nano*. 2013. Vol. 7, No 11. P. 10158-10166.
15. Murray C. B., Kagan C. R., Bawendi M. G. Synthesis and characterization of monodisperse nanocrystals and close-packed nanocrystal assemblies. *Annual Review of Materials Science*. 2000. Vol. 30. P. 545-610.
16. Kumar P., Kukkar D., Deep A. Synthesis of mercaptopropionic acid stabilized CdS quantum dots for bioimaging in breast cancer. *Advanced Material Letters*. 2012. Vol. 3, No 6. P. 471-475.
17. Zhao N., Osedach T. P., Chang L.-Y. Colloidal PbS quantum dot solar cells with high fill factor. *ACS Nano*. 2010. Vol. 4, No 7. P. 3743-3752.
18. Bimberg D, Grundmann M, Ledentsov M. *Quantum Dot Heterostructures*. Wiley, 1998. 344 p.
19. Shchukin V., Bimberg D. Spontaneous ordering of nanostructures on crystal surfaces. *Reviews of Modern Physics*. 1999. Vol. 71, No. 4. P. 1125-1171.
20. Xie Q, Brown J. L., Jones R. L., Van Nostrand J. E., Leedy K. D. Growth of vertically self-organized InGaAs quantum dots with narrow

- inhomogeneous broadening. *Applied Physical Letters*. 2000. Vol. 76. P.3082–3084.
21. Tersoff J., Teichert C. and Lagally M. G. Self-organization in growth of quantum dot superlattices. *Physical Review Letters*. 1996. Vol. 76, No 10. P. 1675-1678.
 22. Mazur Yu. I., Ma W. Q., Wang X., Wang Z. M., Salamo G. J., Xiao M., Mishima T. D., Johnson M. B. InGaAs/GaAs three-dimensionally-ordered array of quantum dots. *Applied Physical Letters*. 2003. Vol. 83. P. 987–989.
 23. Schmidt O. *Lateral Alignment of Epitaxial Quantum Dots*. Springer, Berlin, 2008, 707 p.
 24. Sritirawisarn N. *Ordered InAs/InP Quantum Dot Arrays at Telecom Wavelength*. Technische Universiteit Eindhoven, Eindhoven, 2010, 453 p.
 25. Li S.-S., Xia J.-B., Yuan Z. L., and Xu Z. Y. Effective-mass theory for InAs/GaAs strained coupled quantum dots. *Physical Review B*. 1996. Vol. 54, No 16. 11575-11581.
 26. Boichuk V. I., Bilynsky I. V., Pazyuk R. I. Light absorption coefficient caused by sub-band transitions of electrons in spherical quantum dot superlattices. *Journal of Physical Studies*. 2015. Vol. 19, No ½. P. 1601:1-8.
 27. Boichuk V. I., Bilynsky I. V., Pazyuk R. I. Light absorption coefficient of an ordered array of spherical quantum dot chains. *Condensed Matter Physics*. 2017. Vol. 20, No. 2. P. 23704:1-9.
 28. Boichuk V. I., Bilynsky I. V., Pazyuk R. I. Miniband electrical conductivity in superlattices of spherical InAs/GaAs quantum dots. *Ukrainian Journal of Physics*. 2017. Vol. 62. No 4. P. 335-342.
 29. Tkach M. V., Makhanets O. M., and Zegrya G. G. Energy spectrum of electron in quasilattice superlattice of cylindrical quantum dots. *Semiconductor Science and Technology*. 2000. Vol 15, No 4. P.395-398.

30. Tsai Y.-C., Lee M.-Y, Li Y., and Samukawa S. Miniband formulation in Ge/Si quantum dot array. *Japanese Journal of Applied Physics*. 2016. Vol. 55, P. 04EJ14:1-5.
31. Jong Chang Yi. Miniband properties of superlattice quantum dot arrays fabricated by the edge-defined nanowires. *Microelectronics Journal*. 2008. Vol. 39. P. 369-374.
32. Hofmann P. *Solid State Physics: An Introduction*. Wiley VCH. 2015. 267 p.
33. Boichuk V. I., Bilynskyi I. V., Sokolnyk O. A., Shakleina I. O. Effect of quantum dot shape of the GaAs/AlAs heterostructure on interlevel hole light absorption. *Condensed Matter Physics*. 2013, Vol. 16, No 3. P. 33702:1-10.
34. Schliwa A., Winkelkemper M, Bimberg D. Impact of size, shape, and composition on piezoelectric effects and electronic properties of In(Ga)As/GaAs quantum dots. *Physical Review B*. 2007. Vol. 76. P. 205324:1-17.
35. Liang L., Xie W. Influence of the shape of quantum dots on their optical absorptions. *Physica B: Condensed Matter*. 2015. Vol. 462. P. 15-17.
36. Boichuk V. I., Holskyi V. B., Kubay R. Yu., Lukin R. I. The electron energy spectrum in an ellipsoidal quantum dot with regard for finite band gap at the interface. *Ukrainian Journal of Physics*. 2008. Vol. 53, No 6. P. 574-578.
37. Tablero C. Quantum dot energy levels and spectrum for different geometries. *Journal of Applied Physics*. 2009. Vol. 106. P. 074306:1-5.
38. Luttinger J. M., Kohn W. Motion of electrons and holes in perturbed periodic fields. *Physical Review*. 1955. Vol. 97. P. 869-883.
39. Luttinger J. M. Quantum theory of cyclotron resonance in semiconductors: General Theory. *Physical Review*. 1956. Vol. 102. P. 1030-1041.

40. Callaway J. *Quantum theory of the solid state*. New York San Francisco London: Academic Press, 1990. 43 p.
41. Gerald Bastard. *Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures*. Halsted Press. 1990. 357 p.
42. Bir G. L, Pikus G. E. Symmetry and strain-induced effects in semiconductors. Wiley, 1975. 484 p.
43. Burt M. G. An exact formulation of the envelope function-method for the determination of electronic states in semiconductor microstructures. *Semiconductor Science and Technology*. 1987. Vol. 2, No. 7. P. 460-462.
44. Maarten L. Van de Put, William G. Vandenberghe, Wim Magnus, Bart Sorée. An envelope function formalism for lattice-matched heterostructures. *Physica B: Condensed Matter*. 2015. Vol. 470-471. P. 69-75.
45. Burt M. G. The justification for applying the effective-mass approximation to microstructures. *Journal of Physics: Condensed Matter*. 1992. Vol. 4, No. 32. P. 6651-6690.
46. Efros A. L., Rosen M. Quantum size level structure of narrow-gap semiconductor nanocrystals: Effect of band coupling. *Physical Review B*. 1998. Vol. 58. P. 7120-7135.
47. Baldereschi A., Lipari N. O. Spherical model of shallow acceptor states in semiconductors. *Physical Review B*. 1973. Vol. 8, No 6. P. 2697-2709.
48. Baldereschi A., Lipari N. O. Direct exciton spectrum in diamond and zinc-blende semiconductors. *Physical Review B*. 1970. Vol. 25, No 6. P. 373-376.
49. Lipari N. O., Baldereschi A. Angular momentum theory and localized states in solids. investigation of shallow acceptor states in semiconductors. *Physical Review B*. 1970. Vol. 25, No 24. P. 1660-1664.

50. Pokatilov E. P., Fonoberov V. A., Fomin V. M., Devreese J. T. Development of an eight-band theory for quantum dot heterostructures. *Physical Review B*. 2001. Vol. 64. P. 245328:1-16.
51. Bilynskyi I. V., Leshko R. Ya., Metsan H. O., Shevchuk I. S. Hole states in spherical quantum nanoheterosystem with intermediate spin-orbital interaction. *Physics and Chemistry of Solid State*. 2019. Vol. 20, No 3 P. 227-233.
52. Boichuk V. I., Bilynskyi I. V., Leshko R. Ya., Turyanska L. M. The effect of the polarization charges on the optical properties of a spherical quantum dot with an off-central hydrogenic impurity. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*. 2011. Vol. 44, No 2. P. 476-482.
53. Boichuk V. I., Bilynskyi I. V., Leshko R. Ya. The effect of polarization charges on energy of univalent and bivalent donors in a spherical quantum dot. *Condensed Matter Physics*. 2008. Vol. 11, № 4. P. 653-661.
54. Boichuk V. I., Kubai R. Yu. Effect of an intermediate layer with space-dependent permittivity on the ground state energy of an electron in a spherical complex nanoheterosystem. *Semiconductors and Dielectrics*. 2001. Vol. 43. P. 235-241.
55. Dankiv O. O., Peleshchak R. M. Strain-renormalized energy spectra of electrons and holes in InAs quantum dots in the InAs/GaAs heterosystem. *Technical Physics Letters*. 2005. Vol. 31. P. 691–694.
56. Dankiv O. O., Peleshchak R. M. Influence of impurity on electronic transition in coherent-strained quantum dot. *Functional Materials*. 2006. Vol. 13. P. 14-20.
57. Kuzyk O, Dankiv O., Peleshchak R., Stolyarchuk I. Baric properties of CdSe-core / ZnS/CdS/ZnS-multilayer shell quantum dots. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*. 2022. Vol. 143. P. 115381:1-7.
58. Бойчук В. І., Лешко Р. Я., Гольський В. Б., Карпин Д. С. Вплив сусіднього домішкового йона на міжрівневе акцепторне поглинання

- світла нанокристаллами CdSe. *Журнал Фізичних Досліджень*. 2016. Т. 20, № 3, С. 3701:1-7.
59. Бойчук В. І., Білинський І. В., Лешко Р. Я. Спектри дірок та акцепторів у закритій двошаровій сферичній квантовій точці. *Фізика і Хімія Твердого Тіла*. 2010. Т. 11, № 4. С. 935-943.
60. Boichuk V. I., Bilynskyi I. V., Leshko R. Ya., Shakleina I. O. Study of an acceptor impurity located at the center of a spherical nanoheterostructure. *Ukrainian Journal of Physics*. 2010. Vol. 55, No 3. P. 326-334.
61. Leshko R. Ya., Bilynskyi I. V. The hole energy spectrum of an open spherical quantum dot within the multiband model. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*. 2019. Vol.110. P 10-14.
62. Menéndez-Proupin E., Trallero-Giner C. Electric-field and exciton structure in CdSe nanocrystals. *Physical Review B*. 2003. Vol. 69. P. 125336-125345.
63. Boichuk V. I., Leshko R. Ya., Bilynskyi I. V., Turyanska L. M. Off-central acceptor impurity in a spherical quantum dot. *Condensed Matter Physics*. 2012. Vol. 15, No 3. P. 33702:1-10.
64. Boichuk V. I., Kubay R. Yu., Hodovanets H. M., Shevchuk I. S. A study of the effect of polarization on electron, hole and exciton energy spectra of Si/SiO₂ and β-HgS/CdS spherical semiconductor nanoheterosystems. *Journal of Physical Studies*. 2006. Vol. 10, No 3. P. 220-226.
65. Dan'kiv O. O., Peleshchak R. M. Strain-renormalized energy spectra of electrons and holes in InAs quantum dots in the InAs/GaAs heterosystem. *Technical Physics Letters*. 2005. Vol. 31, № 8. P. 691–694.
66. Dan'kiv O. O., Peleshchak R. M. Influence of impurity on electronic transition in coherent-strained quantum dot. *Functional Materials*. 2006. Vol. 13, № 1. P. 14-20.

67. Kuzyk O, Dan'kiv O., Peleshchak R., Stolyarchuk I. Baric properties of CdSe-core / ZnS/CdS/ZnS-multilayer shell quantum dots. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*. 2022. Vol. 143. P. 115381:1-7.
68. Hols'kyi V. B., Leshko R. Ya. The influence of deformations on single electron states in a molecule formed from three quantum dots of the heterosystem InAs/GaAs. *Physics and Chemistry of Solid State*. 2022. Vol. 23, No. 4. P. 686-692.
69. Efros Al. L., Rosen M. Band-edge exciton in quantum dots of semiconductors with a degenerate valence band: Dark and bright exciton states. *Physical Review B*. 1996. Vol. 54, No 7. P. 4843-4856.
70. Semina M. A., Golovatenko A. A., Rodina A. V. Influence of the spin-orbit split-off valence band on the hole g factor in semiconductor nanocrystals. *Physical Review B*. 2021. Vol 104. P. 205423:1-10.
71. Boichuk V. I., Bilynskyi I. V., Leshko R. Ya. The effect of the polarization charges on the optical properties of a spherical quantum dot with an off-central hydrogenic impurity. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*. 2011. Vol. 44. P 476-482.
72. Leshko R. Ya., Bilynskyi, I.V. Combined effect of both polarization charges and deformation on energy spectrum of InAs/GaAs quantum dot. *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*. 2020. Vol. 115. P. 113703:1-5.
73. Otfried Madelung. *Semiconductors: Data Handbook*. Springer Science & Business Media, 2004. 691 p.
74. Bilynskyi I. V., Leshko R. Ya., Metsan H. O., Slusarenko M. A. Effect of electric field and acceptor position on the energy spectrum of GaAs/AlAs quantum dot. *Physica B: Physics of Condensed Matter*. 2022. Vol. 642 P. 414106:1-5.
75. Devanathan V. *Angular Momentum Techniques in Quantum Mechanics*. Springer Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 2002. 257 p.

76. Biedenharn L. C., Louck J. D. *Angular Momentum in Quantum Physics*. Cambridge: Cambridge University Press, 1984. 716 p.
77. Sebilliau D. On the computation of the integrated products of three spherical harmonics. *Journal of Physics A: Mathematical and General*. 1998. Vol. 31. P. 7157-7168.
78. Gaunt J. A. The triplets of helium. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical*. 1929. V. 122, No 790. P. 513-532.
79. Holovatsky V. A., Chubrei M. V., Duque C. A. Core-shell type-II spherical quantum dot under externally applied electric field. *Thin Solid Films*. 2022. Vol. 747. P. 139142:1-8.
80. Holovatsky V. A., Voitsekhivska O. M., Yakhnevych M. Ya. Optical properties of GaAs/Al_xGa_{1-x}As/GaAs quantum dot with off-central impurity driven by electric field. *Condensed Matter Physics*. 2018. Vol. 21, No. 1. P. 13703:1-9.
81. Holovatsky V. A., Frankiv I. B. Oscillator strength of quantum transition in multi-shell quantum dots with impurity. *Journal of Optoelectronics and Advanced Materials*. 2013. Vol. 15. P.88-93.
82. Boyd R. W. *Nonlinear Optics. Third Edition*. Elsevier, Academic Press. 2008. 613 p.
83. Vahdani M. R. K., Rezaei G. Linear and nonlinear optical properties of a hydrogenic donor in lens-shaped quantum dots. *Physical Letters A*. 2009. Vol. 373. P. 3079-3084.
84. Shu-Shen Li, Jian-Bai Xia, Yuan Z. L., Xu Z. Y. Effective-mass theory for InAs/GaAs strained coupled quantum dots // *Physical Review B*. 1996. Vol. 54. No 15. P. 11575-11581.
85. Shu-Shen Li and Jian-Bai Xia. Binding energy of a hydrogenic donor impurity in a rectangular parallelepiped-shaped quantum dot: *Quantum*

- confinement and Stark effects // *Journal of Applied Physics*. 2007. Vol. 101. P. 093716:1-6.
86. Djillali Nasri, Nadir Sekkal. General properties of confined hydrogenic impurities in spherical quantum dots // *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*. 2010. Vol 42. P. 2257-2263.
87. Li Shu-Shen, Xia Jian-Bai. Application of Plane Wave Method to the Calculation of Electronic States of Nano-Structures // *Chinese Physics Letters*. 2006. Vol 23. P. 1896-1899.
88. Ashcroft N. W., Mermin N. D. *Solid State Physics*. Saunders Collage Publishing, 1976. 848 p.
89. Kittel Ch. *Introduction to Solid State Physics. Eighth edition*. John Wiley & Sons, Inc, 2005. 700 p.
90. Joginder Singh Galsin. *Solid State Physics. An Introduction to Theory*. Elsevier, 2019. 640 p.
91. Boichuk V. I., Bilinskyi I. B., Pazyuk R. I., Shakleina I. O. Energy spectrum of charges in periodic systems of spherical quantum dots. *Physics and Chemistry of Solid State*. 2009. Vol. 10, No 4. P. 752-756.

Додаток

Наукові статті, опубліковані у виданнях, що входять до списку наукових фахових видань України та проіндексованих у наукометричних базах даних *Web of Science Core Collection* та/або *Scopus*

1*.Bilynskiy I., Leshko R., Bandura H. Influence of quantum dot shape on energy spectra of three-dimensional quantum dots superlattices. *Physics and Chemistry of Solid State*. 2020. Vol. 21, No 4. P. 584-590.

(Особистий внесок автора: розраховано енергії мінізон, визначено їхні ширини).

2*.Bilynskiy I., Leshko R., Bandura H. Electron and hole spectrum taking into account deformation and polarization in the quantum dot heterostructure InAs/GaAs. *Physics and Chemistry of Solid State*. 2023. Vol. 24, No 1. P. 146-152.

(Особистий внесок автора: розраховано енергію електрона та дірки в рамках однозонної та багато зонних моделей ефективної маси, проведено порівняння результатів моделей).

Наукові статті, опубліковані у періодичних наукових виданнях, проіндексованих у наукометричних базах даних *Web of Science Core Collection* та/або *Scopus*

3*. Leshko R. Ya., Bandura H. Ya., Bilynskiy I. V., Karpyn A.V., Kvyk M.V., Melnyk Ya.Yu., Ocheretyanyi A.O., Popov M.Yu. Effect of arbitrarily directed electric field on hole spectra and absorption in a quantum dot with off-center impurity. *Physics Letters A*. 2025. Vol. 559. P. 130898:1-8.

(Особистий внесок автора: виконано аналітичні та числові розрахунки енергетичних спектрів і коефіцієнтів поглинання).

4*. Leshko R., Bandura H., Bilynskiy I., Slusarenko M. The band structure of a chain of periodically ordered different quantum dots. *Physica B: Condensed Matter*. 2024. Vol. 690. P. 416272:1-5.

(Особистий внесок автора: виконано аналітичні та числові розрахунки зонної структури, побудовано графічно усі залежності).

Наукові статті, опубліковані у виданнях, що входять до списку наукових фахових видань України категорії Б

5*.Leshko R. Ya., Bandura H. Ya., Bilynskyi I. V., Melnyk Ya. Yu., Kvyk M. V.

The intersubband optical absorption coefficient of the QD with acceptor impurity under applied electric field. *Sensor Electronics and Microsystem Technologies*. 2024. Vol. 21, No 4. P. 14-24.

(Особистий внесок автора: виконано аналітичні та числові розрахунки коефіцієнта поглинання у КТ з акцепторною домішкою за наявності незмінного зовнішнього електричного поля).

Наукові праці, які засвідчують апробацію матеріалів дисертації

6*.Bilynskyi I.V., Leshko R.Ya., Bandura H.Ya. The dependence of energy on the QD deformation and polarization charges. *XVII International Freik Conference on Physics and Technology of Thin Films and Nanosystems*. Ivano-Frankivsk, October 11-16, 2021. P. 11.

(Особистий внесок автора: обчислено енергію електрона та дірки у квантовій точці з урахуванням деформації та поляризації на межі квантова точка-матриця).

7*. Bilynskyi I.V., Leshko R.Ya., Bandura H.Ya. Miniband energy spectrum of quantum dot chains containing two different quantum dot in basis *IX Ukrainian Scientific Conference on Physics of Semiconductors*. Uzhhorod, Ukraine, May 22-26, 2023. P. 217

(Особистий внесок автора: обчислено залежність енергії мінізон надґратки з квантових точок від хвильового вектора та розмірів квантових точок).

8*.Bilynskyi I.V., Leshko R.Ya., Bandura H.Ya. Theory of Superlattices with Two Atoms in the Basis. *XIX international Freik Conference on Physics and*

Technology of Thin Films and Nanosystems. Ivano-Frankivsk, October 9-14, 2023. P. 84.

(*Особистий внесок автора: отримано енергетичні мінізони надґратки квантових точок з двома квантовими точками у примітивній комірни надґратки*).

9*. Bandura H., Bilynskiy I. Dependence of the intersubband optical absorption coefficient on the direction of the electric field in the GaAs/AlAs quantum dot heterostructure in the presence of an impurity. *VIII Всеукраїнська науково-практична конференція MEICS-2024*. Дніпро, 27-29 листопада 2024 р. С. 274-275.

(*Особистий внесок автора: обчислено оптичний коефіцієнт поглинання, зумовлений міжрівневими переходами дірки у квантовій точці в електричному полі за наявності домішки*).

10*. Bandura H.Ya., Bilynskiy I.V. The influence of the electric field and the position of the acceptor on the energy spectrum and the intersubband optical absorption coefficient in the GaAs/AlAs quantum dot heterostructure. *Materials and Abstracts of Reports Presented at the International Conference (for the 100th anniversary of the birth of Professor Yu.M. Lomsadze)*. Uzhhorod, December 17-19, 2024. P. 221-222.

(*Особистий внесок автора: обчислено залежність коефіцієнта поглинання, зумовленого міжрівневими переходами дірки у квантовій точці в електричному полі за наявності домішки, від величини електричного поля і розмірів квантової точки*)

11*. Bilynskiy I.V., Leshko R.Ya., Bandura H.Ya. An ordered array with two different quantum dots in a unit cell. *XI-th International Conference Topical Problems of Semiconductor Physics*. Drohobych, May 27-31, 2024. P. 58.

(*Особистий внесок автора: обчислено ширини мінізон надґратки з квантових точок*).

12*. Bandura H. Ya., Bilynskyi I.V. Dependence of the energy spectrum of a quantum dot with an acceptor impurity on the angle of inclination of the electric field. «Lashkaryov's readings». *Young Scientists Conference on Semiconductor Physics*. Kyiv, April 3-4, 2025. P. 35-36.

(Особистий внесок автора: обчислено залежність енергетичного спектру дірки акцепторної домішки у квантовій точці від напрямку прикладання електричного поля).

13*. Bandura H. Ya., Leshko R. Ya., Bilynskyi I.V. The energy spectra and band characteristics of two- and threedimensional superlattices of inhomogeneous quantum dots // *XX International Freik Conference on Physics and Technology of Thin Films and Nanosystems*. Ivano-Frankivsk, October 06-10, 2025. P. 74.

(Особистий внесок автора: теоретично виведено і розраховано енергетичні спектри електрона у дво- і тривимірній надґратці з квантових точок).