

СЕКЦІЯ 6. НОВІТНІ ФІЗИКО-ТЕХНІЧНІ ТА ОСВІТНІ ТЕХНОЛОГІЇ

PACS: 07.05.Tr

В. Бойчук, І. Білинський, О. Сокольник

(Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка)

МАТЕМАТИЧНІ МОДЕЛІ ДОСЛІДЖЕННЯ КВАНТОВИХ ТОЧОК ІЗ ВРАХУВАННЯМ РЕАЛЬНОЇ ЗОННОЇ СТРУКТУРИ КРИСТАЛУ

Одним із актуальних напрямків сучасної фізичної науки є дослідження різноманітних властивостей квазінульмірних напівпровідникових наногетероструктур – квантових точок. Властивості квантових точок, зокрема поведінка носіїв заряду у них значним чином відрізняються від явищ, що відбуваються у об'єкті макророзміру – масивному кристалі.

Експеримент як метод емпіричних досліджень квантових точок є найбільш точним і достовірним способом отримати наукові дані про електричні, оптичні, магнітні та інші властивості цих нанооб'єктів, проте потребує непростой підготовки, відповідного обладнання, тривалого періоду часу для отримання необхідних зразків для досліджень.

На допомогу сучасним дослідникам, що займаються фізикою напівпровідників та діелектриків, приходить комп'ютерне математичне моделювання. Створюючи відповідні математичні моделі, що наближаються до фізичних об'єктів, повсякчас використовуються різноманітні припущення та наближення, без яких би було неможливим дістати реальні результати таких теоретичних досліджень, зважаючи на складність обчислень та тривалий час їх виконання. Слід відмітити, що надмірне використання припущень і наближень надто примітивізує модель, а отримані за допомогою такої моделі результати не можна вважати достовірними.

Для прикладу, вивчаючи поведінку носіїв заряду у валентній зоні напівпровідника (дірки), ми класифікуємо дірки як легку та важку, поділяючи їх за ефективною масою носія заряду. Такий підхід хоча і значно спрощує математичний апарат, потрібний для опису моделі, але спричиняє відхилення результатів від тих, що можуть бути отримані під час експериментальних досліджень зразка напівпровідникової наногетероструктури – адже у реальних квантових точках, які можна дослідити на практиці, немає градації за масою дірки. Тому необхідно обов'язково під час вивчення тих чи інших процесів у квазінульмірних структурах, зокрема квантових точках, враховувати реальну зонну структуру кристалу – складний (або неперервний) зонний спектр.

У роботі проведено порівняння моделей, що використовувалися для вивчення діркового спектру у 3-зонному (Si/SiO), 4-зонному ($GaSb/AlSb$, $CdSe/ZnSe$) та 6-зонному ($GaAs/AlAs$, $CdS/n\text{-}Si$) наближеннях. Отримані результати неоднозначно вказують на переваги моделі із врахуванням складного зонного спектру. Зазначимо, що при використанні такої моделі дещо збільшується час обчислень, які проводилися на електронно-обчислювальних машинах (ЕОМ) за допомогою систем комп'ютерної математики (СКМ).

Про необхідність врахування реальної зонної структури кристалу писали у своїх працях Балдареші і Ліпарі ще у 70-х роках минулого століття, проте зараз, через 50 років після опублікування цих робіт, питання розширення деяких примітивних математичних моделей залишається актуальним і надалі.