

Uniwersytet Rzeszowski
Wydział Matematyczno-Przyrodniczy
Katedra Fizyki Teoretycznej

**Transport nośników ładunku
w nanostrukturach zawierających
studnie kwantowe o różnych kształtach**

Klaudiusz Majchrowski

Rozprawa doktorska

Promotor: Prof. dr hab. Igor Tralle

Rzeszów 2014

Mojej Żonie i Córeczce Mai

*Składam serdeczne podziękowania
Panu Prof. dr hab. Igorowi Tralle
za życzliwą pomoc, wyrozumiałość,
jak również cenne wskazówki i uwagi,
jakich udzielił mi podczas pisania
niniejszej pracy.*

K. M.

*Składam serdeczne podziękowania
dr. Grzegorzowi Hałdasiowi
za cenne wskazówki, uwagi i pomoc
w obliczeniach dotyczących detektora THz.*

K. M.

Spis treści

Wstęp	1
1 Efekty fotogalwaniczne w asymetrycznych studniach kwantowych	9
1.1 Quasi-klasyczny model ruchu elektronu w polu magnetycznym	9
1.2 Dynamika elektronów w modelu kwantowym: równanie mas efektywnych	11
1.3 Efekty fotogalwaniczne w AQW	16
2 Anizotropia fotoprzewodnictwa w asymetrycznych studniach kwantowych	18
2.1 Trójkątna studnia kwantowa o skończonej głębokości	19
2.2 Pochłanianie światła w strukturach zawierających studnie kwantowe . . .	23
2.3 Anizotropia fotoprzewodnictwa	26
2.4 Półparaboliczna studnia kwantowa o skończonej głębokości	31
3 Metoda ISP i jej zastosowanie do „inteligentnego projektowania” struktur niskowymiarowych	35
3.1 Metoda ISP	35
3.2 Zastosowanie metody ISP	50
3.3 Opis programu	54
4 Zastosowanie metody ISP oraz formalizmu NEGF do zaprojektowania detektora THz	57
4.1 Formalizm Landauera-Büttikera	57
4.2 Niezerowa temperatura i przyłożone napięcie	61
4.3 Funkcja transmisji oraz T-macierz	63
4.4 Charakterystyka I-V rezonansowej diody tunelowej	65
4.5 Metoda funkcji Greena	68
4.5.1 Opóźnione i przedwczesne funkcje Greena	69

4.5.2	Funkcje Greena dla wielomodowego drutu kwantowego	71
4.5.3	Reprezentacja macierzowa operatora Hamiltona	73
4.6	Nierównowagowe funkcje Greena	78
4.7	Detektor THz	84
5	Analiza i podsumowanie wyników	93
	Lista publikacji i udział w konferencjach	97
	Dodatek A - Kod źródłowy solvera służącego do rekonstrukcji potencjału	99
	Dodatek B - Kod źródłowy solvera służącego do rozwiązywania zagadnienia własnego RS	102
	Dodatek C - Równanie Schrödingera jako algebraiczne zagadnienie własne	104
	Dodatek D- Weryfikacja poprawności działania programów	107
	Literatura	117

Tabela używanych skrótów

Tabela 1: Tabela skrótów

Skrót	Znaczenie
2DEG	Dwuwymiarowy gaz elektronowy,
AQW	Asymetryczna studnia kwantowa,
DOS	Gęstość stanów,
DQW	Podwójna studnia kwantowa,
IR	promieniowanie podczerwone,
ISP	Inverse Scattering Problem Method,
L	Lewy kontakt,
LO	Fonony optyczne,
NEGF	Metoda nierównowagowych funkcji Greena
PGE	Efekt fotogalwaniczny,
R	Prawy kontakt,
RS	Równanie Schrödingera,
RTD	Rezonansowa dioda tunelowa,
RTS	Resonant tunneling structure,
TQW	Trójkątna studnia kwantowa,
QW	Studnia kwantowa,

Wstęp

„C’est la dissymétrie qui crée le phénomène”

Pierre Curie

Od czasów E. Noether¹ naukowcy wiedzą jak ważną rolę odgrywa symetria w nauce, zwłaszcza w fizyce (Twierdzenie Noether). Jednak, jak zauważył P. Curie [1], również ważne jest łamanie symetrii, ponieważ właśnie ono tworzy bogactwo obserwowalnych zjawisk fizycznych (doprowadziło to do sformułowania ogólnych zasad symetrii w 1855 roku). W późniejszych latach podobną ideę przedstawił B.G. Wybourne, twierdząc, że każda symetria może być rozpatrywana jako podstawa do tego, że pewien eksperyment jest niemożliwy - jeśli eksperyment jest możliwy, wówczas symetria musi być złamana [2].

Wiele propozycji zaobserwowania nowych efektów związanych z łamaniem symetrii było niedawno prezentowane w literaturze naukowej. W swojej pracy L.I. Magarill [3] zaznacza, że systemy w których łamana jest symetria ze względu na odwrócenie czasu lub współrzędnych przestrzennych, już od dawna przyciągają uwagę fizyków w związku z problemem odwracalności w mechanice statystycznej. Przykładem takiego systemu jest mechanizm zapadkowy, który był rozważany zarówno jako model standardowy klasyczny [4, 5] tak i kwantowy [6], w celu wyjaśnienia takich zjawisk biologicznych, jak ruch mięśni i aktywny transport przez błony komórkowe. Jednym z przykładów zjawiska, które może powstać podczas łamania symetrii przestrzennej, jest efekt fotogalwaniczny (PGE), czyli pojawienie się w stanie stacjonarnym prądu w jednorodnym układzie pod wpływem zmiennego pola elektrycznego fali elektromagnetycznej, przy jednoczesnym braku

¹Amalie Emmy Noether niemiecka matematyczka i fizyczka, znana głównie dzięki osiągnięciom w teorii pierścieni i rozwinięciu nowej gałęzi matematyki - algebry abstrakcyjnej. W 1918 roku udowodniła fundamentalne twierdzenie (tzw. Twierdzenie Noether), które łączy symetrię praw ruchu z zachowaniem pewnych wielkości fizycznych.

dotatkowych sił wymuszających. Podobnie, obecność dwóch spójnych fal elektromagnetycznych o częstotliwościach ω i 2ω łamie symetrię w czasie, co również prowadzi do powstania stałego prądu, i w literaturze nosi nazwę koherentnego efektu fotogalwanicznego (*Coherent Photogalvanic Effect (CPGE)*) [7].

Efekt fotogalwaniczny był przedmiotem intensywnych badań (zarówno teoretycznych, jak i doświadczalnych) w różnych materiałach i w różnych sytuacjach fizycznych. Może on wystąpić we wszystkich ośrodkach pozbawionych środka symetrii, w szczególności w ferroelektrykach, piezoelektrykach, kryształach gyotropowych oraz gazach i cieczach posiadających naturalną czynność optyczną [8]. Pomimo, że pierwsze rozważania dotyczące PGE pojawiały się w latach siedemdziesiątych, aktywność w zakresie wykorzystania tego efektu w różnych wariacjach, obserwowana jest do tej pory (np. [9–16]). Dzięki rozwojowi technologii wytwarzania heterostruktur półprzewodnikowych, stało się możliwe dogłębne badanie PGE, powstałego w wyniku asymetrycznego rozkładu potencjału w różnego rodzaju studniach kwantowych.

W znanej pracy O. Kibisa [17] zasugerowano, że jeśli symetria jest łamana ze względu na odwrócenie czasu i współrzędnych przestrzennych w nanostrukturze, wówczas możemy się spodziewać powstania nowych efektów fotogalwanicznych i magnetoelektrycznych. W powyższej pracy, jako przykład rozpatrzone zostały podwójna studnia asymetryczna oraz trójkątna studnia umieszczone w zewnętrznym polu magnetycznym. W rozważanych modelach asymetria względem współrzędnej przestrzennej jest rezultatem wykorzystania barier potencjału o różnych wysokościach, zaś łamanie symetrii względem odwrócenia czasu zachodzi na skutek umieszczenia takich struktur w zewnętrznym polu magnetycznym. Niewątpliwie, rezultaty uzyskane w cytowanej pracy zasługują na uznanie, jednak również można zaryzykować stwierdzenie, iż rozważane modele nie są zbyt realistyczne, gdyż posługują się δ -barierami oraz nieskończenie głęboką studnią, niejako „zawieszoną w próżni”.

Jednym z celów stawianych w danej pracy doktorskiej było zbadanie bardziej realistycznych modeli struktur, w których jednocześnie zachodzi łamanie symetrii tak względem zmiennych przestrzennych jak i ze względu na odwrócenie czasu.

Bardzo często w naukach empirycznych powstaje sytuacja, w której nie mając bezpośredniego dostępu do danego obiektu wykonuje się w znany sposób pomiary pewnych wielkości związanych z badanym obiektem i na ich podstawie próbuje się zrekonstruować

interesujące badacza cechy obiektu. W tym bardzo ogólnym schemacie mieszczą się również zagadnienia dotyczące nierelatywistycznej mechaniki kwantowej, której wszystkie problemy możemy zaliczyć do jednej z dwóch grup: problemy „wprost” (*direct problems*) ($V \rightarrow S$) gdzie znane potencjały służą do uzyskania danych rozproszeniowych (macierz S) lub danych spektralnych, oraz problemy odwrotne (*inverse problems*) ($S \rightarrow V$), w których potencjały np. siły działające w układzie, określane (odtwarzane, obliczane) są na podstawie danych eksperymentalnych. Badając nowe mikro-obiekty często mamy do czynienia zarówno z nieznanymi interakcjami pomiędzy cząsteczkami elementarnymi (nukleony, kwarki itp.) jak również z nieznanymi efektywnymi potencjałami w utworzonych przez nie kompleksach. W związku z tym potrzeba rozwiązywania problemów odwrotnych $S \rightarrow V$ nie jest mniejsza od potrzeby rozwiązywania problemów „wprost” $V \rightarrow S$.

Obecnie posiadamy znacznie więcej informacji dotyczących sposobów rozwiązywania problemów „wprost”. Przez długi czas mechanika kwantowa rozwijana była bez większego uwzględniania zagadnień dotyczących problemów odwrotnych. Jedne z pierwszych metod służących do rekonstrukcji potencjałów na podstawie danych rozproszeniowych zostały opracowane przez matematyków I.M. Gelfanda i B.M. Levitana (1951), V.A. Marchenko (1955) oraz M.G. Kreina (1951). Od tego czasu metody te rozwijane są przez naukowców na całym świecie, lecz nadal pozostają w tyle względem metod używanych do rozwiązywania problemów „wprost”, pomimo, iż liczba zagadnień, w których mogą być stosowane metody rozwiązań problemów odwrotnych ciągle rośnie. Różnorodne zastosowania, od eksperymentów fizycznych w zderzaczach cząstek, przez badanie wnętrza Ziemi na podstawie pomiarów pola grawitacyjnego na jej powierzchni, inżynierię materiałową, medycynę (tomograficzne techniki obrazowania), astrofizykę, do badań migracji ptaków, dostarczają coraz to nowych inspiracji do formułowania i badania problemów tego typu. O dużej potrzebie zajmowania się zagadnieniami odwrotnymi świadczy również fakt, iż w 2007 roku z inicjatywy Gunthera Uhlmanna zostało powołane Międzynarodowe Stowarzyszenie Problemów Odwrotnych.

W ostatnich latach byliśmy świadkami szybkiego rozwoju nanoelektroniki. Stało się to możliwe m.in. poprzez rozwój nowoczesnych technologii i technik, takich jak *Molecular Beam Epitaxy* (MBE), przez co możliwe jest osadzanie cienkich warstw różnych materiałów jedna na drugą z precyzją niemalże atomową. Technika ta pozwala na wytwarzanie różnego rodzaju struktur niskowymiarowych, poczynwszy od heterozłącz utwo-

rzonych w pojedynczym interfejsie, poprzez studnie kwantowe aż do supersieci. Nie jest przesadą stwierdzenie, że pojawił się nowy paradygmat elektroniki, którego nazwa została określona jako technologie kwantowe (*Quantum Technology*) lub inżynieria kwantowa (*Quantum Engineering*). Wydaje się jednak, że inżynieria kwantowa w jej obecnym etapie, mimo wszystkich swoich sukcesów i dojrzałości, jest nadal pasywna w tym sensie, że korzysta, mówiąc obrazowo, z mniejszej liczby „stopni swobody”, niż to ewentualnie jest możliwe. Oznacza to, że „paleta” kształtów potencjału studni kwantowych jest nadal ograniczona do kilku najbardziej popularnych: prostokątnych, parabolicznych lub półparabolicznych, przez co ograniczone są możliwości wyboru i kontroli widma energetycznego QW produkowanego metodą MBE.

W ostatnich latach pojawiły się również artykuły, w których zostało zaprezentowane nowe podejście do konstruowania struktur kwantowych posiadających z góry określoną charakterystykę. Takie podejście opiera się albo na stosowaniu metody odwrotnego problemu rozpraszania (*Inverse Scattering Problem Method, ISP*) [18–20] albo na stosowaniu równania Schrödingera z masą nośników ładunków, zależną od współrzędnej przestrzennej [21–24]. Prace [18–20] były poświęcone głównie zagadnieniu konstruowania heterostruktur z góry określonym współczynnikiem odbicia (lub przejścia). Jednak w różnego rodzaju zastosowaniach niekiedy powstaje następujące pytanie: jaki kształt studni potencjalnych (i supersieci) zagwarantuje nam wymagane widmo energetyczne? Dla przykładu, w pracy [25] zaprezentowana jest supersieć o określonym widmie energetycznym, która mogłaby służyć jako podstawa konstrukcji ogniw słonecznych o wydajności znacznie przewyższającej obecnie produkowane. W takim przypadku można zadać pytanie: z jakiego kształtu studni kwantowych powinna być zbudowana taka supersieć, aby spełnić kryteria określone w [25]? Podobnego typu pytania pojawiają się także i w innych sytuacjach. W związku z powyższym, kolejnym celem niniejszej pracy doktorskiej jest zastosowanie metody ISP do rozstrzygnięcia takich kwestii. Zostanie udzielona odpowiedź na pytanie: jeśli mamy dane widmo energetyczne i niektóre inne parametry studni kwantowej, czy możemy znaleźć kształt potencjału studni kwantowej oraz innych nanostruktur, np. supersieci?

Sygnały terahercowe były do niedawna niemal niezbadanym obszarem badań, ze względu na trudności w generacji i detekcji pól elektromagnetycznych na tych długościach fal. Zarówno techniki optyczne jak i mikrofalowe nie są stosowane w przedziale dłu-

gości fal terahercowych, ponieważ długości fal optycznych są zbyt krótkie zaś długości fal mikrofalowych są zbyt długie w porównaniu do długości fal terahercowych. Rozwój ultraszybkich technik optycznych, produkcji nowoczesnych materiałów półprzewodnikowych, a także technik mikroobróbki i nanotechnologii, pobudziły trwające już od przeszło trzech dekad badania w zakresie teraherców, jako nowy obszar zainteresowań w elektronice kwantowej z możliwością wielu ważnych aplikacji. Promieniowanie THz z łatwością przechodzi przez m.in. ubrania, papier, drewno, cement, tworzywa sztuczne czy też materiały ceramiczne, nie może jedynie przechodzić przez metal i jest silnie absorbowane przez wodę [26–28]. Potencjalne zastosowania obszaru THz obejmują m.in: wykrywanie nielegalnych substancji chemicznych i biologicznych, broni, obrazowanie medyczne, wykrywanie raka nabłonka (z uwagi na niejonizujący charakter promieniowania terahercowego jest ono bezpieczniejsze dla zdrowia niż X-ray), kontrolowanie procesów produkcyjnych oraz jakości wyprodukowanych materiałów, wytwarzanie i badanie składu chemicznego tzw. inteligentnych leków, wytwarzanie ultra-szerokopasmowych systemów transmisyjnych [29–31]. Zastosowanie technologii THz w przemyśle półprzewodnikowym pozwoli na dokładniejsze badania zanieczyszczeń materiałów, pomiary i obrazowanie poziomu domieszek, koncentracji i ruchliwości nośników. Dzięki właściwościom fal THz otwierają się nowe metody obrazowania. Mikroskopia w zakresie THz jest naturalnym zastosowaniem tej techniki analogicznym do technik optycznych w zakresie IR. W paśmie THz ujawniają się nowe faktury obserwowanego obiektu [32–34]. THz budzą nadzieję w zastosowaniach do mikroskopii i spektroskopii bliskiego pola zanikającego obiektów biologicznych tzw. technika EWS. Konstruowane są i testowane spektroskopy THz w dziedzinie czasu TDS i częstotliwości FDS [35]. Dzięki temu możliwe będą badania materiałów w silnych polach magnetycznych ze względu na to, że częstotliwość Larmora mieści się w paśmie THz [36, 37].

Aby móc wykorzystać promieniowanie THz do opisanych powyżej zastosowań, potrzebne są zarówno generatory jak i detektory fal w tym zakresie. W ostatnim okresie pojawiło się w literaturze naukowej wiele propozycji urządzeń służących do tych celów. Jedną z najbardziej obiecujących technik generacji jest źródło terahercowe zbudowane na podstawie femtosekundowego lasera impulsowego. Generacja THz za pomocą ultraszybkich impulsów może być zakwalifikowana zarówno do optycznych procesów liniowych jak i nieliniowych. Procesy liniowe obejmują wstrzykiwanie foto-nośników za pomocą

impulsu światła laserowego do próbki półprzewodnikowej, podłączonej do anteny. Następnie nośniki ładunku przyspieszane są przez stałe napięcie przyłożone do anteny, która promieniuje sygnał THz z częstotliwością zależną od czasu trwania impulsów lasera. Z drugiej strony, nieliniowe optyczne metody są bardzo atrakcyjne dla urządzeń generujących THz, ponieważ posiadają wiele pożądanych właściwości, wśród których można znaleźć możliwość działania w temperaturach pokojowych. Niemniej jednak, jedną z głównych przeszkód w pracy emiterów terahercowych jest słaba wydajność konwersji energii, która jest rzędu $10^{-6} - 10^{-5}$ [38].

Źródła terahercowe można podzielić w zależności od ich przepustowości, mocy wyjściowej i zasady działania [39]. Wśród nich możemy wyróżnić fotoprzewodzące THz anteny szerokopasmowe (*Photoconductive broadband THz antenna*) [40–42], emitery zbudowane na bazie "prostowników optycznych" (*Optical rectification based emitters*) [43–46], emitery zbudowane w oparciu o kwantowe lasery kaskadowe (*Quantum cascade laser emitters*) [47–49], fotomiksery, w których modulowane promieniowanie podczerwone może powodować wzbudzenie oscylacji plazmowych w diodach i tranzystorach zbudowanych na bazie studni kwantowych z wysoką ruchliwością elektronów [30,50,51].

Wykrywanie promieniowania w zakresie THz jest dość trudnym zadaniem, ponieważ moc emitowanych sygnałów terahercowych jest stosunkowo słaba. Ponadto, z powodu niskich energii fotonów pasma THz (1 – 10 meV), trudno jest odróżnić wykrywany sygnał od szumu cieplnego otoczenia, przez co wymagane jest dodatkowe chłodzenie detektorów. Istnieją również metody detekcji (tzw. detekcja hydrodynamiki (*hydrodynamic detection*)), które pozwalają na zwiększenie stosunku sygnału do szumu, przez co możliwe jest ich wykorzystanie do pracy w temperaturach pokojowych. W celu wykrycia promieniowania THz możemy wyróżnić kilka rodzajów detektorów. Jednym z nich są detektory ultraszybkich impulsów elektrycznych, w których wykorzystywane są dwie metody: w pierwszej do detekcji używa się fotoprzewodzącej anteny (*photoconductive sampling*), zaś druga polega na wykrywaniu zmian polaryzacji wiązki optycznej sondy, wytworzonej przez pole THz, w sytuacji gdy oba pola są przyłożone do elektro-optycznego kryształu (metoda zwana jest *free-space-electro-optic sampling* FS-EOS) [52–54]. Powstało również wiele propozycji zastosowania nowoczesnych materiałów (nanostruktur) do konstrukcji detektora THz. Należą do nich m.in. wykorzystanie nanorurek węglowych [55], nanotranzystorów GaAs [56], czy też fononów optycznych w studniach kwantowych [57]. W

pracy [58] przedstawiona została propozycja detekcji THz za pomocą fotoprzewodzącej anteny pokrytej warstwą tlenku cynku, zaś w pracy [59] za pomocą krzemowej struktury typu MOSFET. Pojawiają się również prace, w których autorzy przedstawiają nowe detektory pojedynczych fotonów, pracujące w zakresie od $10 - 50 \mu\text{m}$, zbudowane na bazie DQW [60]. Istnieje wiele innych prac na temat nowych materiałów i konstrukcji, lecz przytoczenie ich wykracza poza zakres niniejszej pracy.

Szybki rozwój technologii terahercowej, jak również szeroki wachlarz zastosowań urządzeń wykorzystujących promieniowanie w zakresie THz, zmotywowały nas do pracy nad wykorzystaniem metody ISP, o której będzie mowa w rozdziale 3, do konstrukcji przestrajalnego detektora THz. Dlatego kolejnym celem niniejszej pracy jest przedstawienie możliwości połączenia metody ISP z formalizmem funkcji Greena do przeprowadzenia symulacji komputerowych dotyczących detektora THz zbudowanego na bazie studni kwantowej.

W pierwszym rozdziale niniejszej pracy przedstawiony jest quasi-klasyczny model ruchu elektronów w polu magnetycznym oraz kwantowy model dynamiki elektronów w przybliżeniu masy efektywnej. Omówiony jest również zaproponowany przez Kibisa [17] model nieskończonego trójkątnego potencjału, który posłużył do analizy efektów fotogalwanicznych w asymetrycznych studniach kwantowych.

Rozdział drugi zawiera rozważania dotyczące anizotropii fotoprzewodnictwa w AQW. Efekt ten zbadany został na podstawie dwóch modeli: trójkątnej i półparabolicznej studni kwantowej, umieszczonych w zewnętrznym polu magnetycznym. Przedstawione są również wyniki obliczeń numerycznych, na podstawie których można stwierdzić, że efekt ten, pomimo że jest nieduży, może być mierzalny w polach magnetycznych rzędu kilku Tesli.

Rozdział trzeci poświęcony został zastosowaniu metody odwrotnego problemu rozpraszania (ISP) do „inteligentnego” projektowania nanostruktur. Przedstawiona metoda pozwala na dokonanie rekonstrukcji potencjału studni kwantowej na podstawie z góry określonego widma energetycznego. Na bazie tej metody został stworzony program w środowisku MatLab, którego opis oraz przykłady zastosowania przedstawione są w drugiej części rozdziału.

Rozdział czwarty składa się z trzech zasadniczych części. W pierwszej z nich opisany został formalizm Landauera-Büttikera w zastosowaniu do badania transportu balistyczne-

go struktur niskowymiarowych. Posłużył on do wyznaczenia jakościowej charakterystyki I-V przedstawionego detektora promieniowania w zakresie THz. Druga część poświęcona jest metodologii funkcji Greena, rozszerzonej o nierównowagowe funkcje korelacyjne (NEGF), jako zaawansowanej metodzie służącej do modelowania urządzeń zawierających różnego rodzaju struktury mezoskopowe. Połączenie metody ISP z formalizmem NEGF pozwoliło nam zaproponować przestrajalny detektor THz, którego zasada działania oraz wyniki symulacji komputerowych zostały przedstawione w trzeciej części rozdziału.

Ostatni rozdział poświęcony jest podsumowaniu otrzymanych wyników.

ROZDZIAŁ 1

Efekty fotogalwaniczne w asymetrycznych studniach kwantowych

1.1 Quasi-klasyczny model ruchu elektronu w polu magnetycznym

Quasi-klasyczny opis ruchu cząstki naładowanej w polu magnetycznym możliwy jest w ramach „ulepszanego” modelu Drudego, w którym uwzględniona jest do pewnego stopnia struktura pasmowa widma energetycznego nośników ładunku w ciele stałym (równanie (1.1)):

$$\begin{aligned}\hbar\dot{\vec{k}} &= e\vec{E} + e(v(\vec{k}) \times \vec{B}) \\ \dot{\vec{r}} &= v(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon(\vec{k})}{\partial \vec{k}}\end{aligned}\tag{1.1}$$

W prostym paśmie, w jednorodnym i stacjonarnym polu magnetycznym, elektron porusza się wzdłuż helisy cylindrycznej, której oś jest równoległa do pola magnetycznego $\vec{B}$. Okres obracania się wokół osi helisy wynosi $2\pi/\omega_c$, gdzie $\omega_c = |e|B/m^*$ jest częstotliwością cyklotronową, zaś m^* jest masą efektywną elektronu. Całkami ruchu są v_z oraz $v_\perp$ - odpowiednio składowa wektora prędkości równoległa do kierunku pola magnetycznego oraz wartość bezwzględna składowej prędkości prostopadłej do pola magnetycznego. Dla elektronów posiadających energię $\varepsilon = \frac{1}{2}m^*v^2$, promień i skok helisy są ograniczone od góry:

$$\begin{aligned}\frac{v_\perp}{\omega_c} &\leq \frac{v}{\omega_c} \equiv r_{La} \\ \frac{2\pi v_z}{\omega_c} &\leq 2\pi r_{La}\end{aligned}$$

gdzie r_{La} jest to tak zwany promień Larmora.

Pole magnetyczne może w istotny sposób wpływać na efekty kinetyczne tylko pod warunkiem, że $\omega_c \tau \gg 1$ (τ - charakterystyczny czas rozpraszania, np. czas rozpraszania pędu), tj. jeśli między dwoma kolejnymi zderzeniami elektronu zdąży on wykonać chociażby jeden obrót wokół kierunku pola $\vec{B}$. Podany wyżej warunek jest tożsamy z warunkiem $r_{La} \leq l = v\tau$. Innymi słowy, pole magnetyczne wpływa istotnie na ruch elektronów w ciele stałym, jeśli na długości swobodnej l trajektoria klasyczna elektronu jest znacząco zakrzywiona.

Kolejnym ważnym parametrem, który może charakteryzować kinematykę elektronu w ciele stałym (półprzewodniku) jest zasięg działania potencjałów centrów rozpraszania, który oznaczmy jako a . Może to być potencjał domieszek, jak również, w przypadku heterostruktur, różnego rodzaju interfejsy. Jeżeli $a \ll r_{La}$, krzywiznę trajektorii nośnika ładunku (np. elektronu) można zaniedbać i traktować zderzenie z centrum rozproszenia jako wydarzenie lokalne, przy którym zmiana prędkości elektronu zachodzi momentalnie, w ciągu „nieskończenie małego” ułamka jednostki czasu.

Jeżeli chcemy opisać ruch elektronu w zewnętrznym polu magnetycznym, należy wyznaczyć jego funkcje falowe i poziomy energii rozwiązując zagadnienie własne dla odpowiedniego Hamiltonianu. W przypadku quasi-swobodnego elektronu w prostym paśmie parabolicznym, rozwiązanie tego zagadnienia uzyskuje się ze znanego rozwiązania Landaua [61] dla swobodnego elektronu z zamianą masy elektronu w próżni na masę efektywną. Poziomy energetyczne wówczas będą charakteryzowane poprzez dwie liczby kwantowe: pęd podłużny (tj. wzdłuż kierunku pola magnetycznego) oraz liczbami całkowitymi (tak zwanymi liczbami Landaua) $n = 1, 2, 3, \dots$:

$$\varepsilon_n(k_z) = \hbar\omega_c(n + 1/2) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} \quad (1.2)$$

Wielokrotność zdegenerowania poziomu o danych n i k_z wynosi:

$$\zeta = \frac{S_p^2}{2\pi l_H^2}$$

gdzie S_p^2 jest polem przekroju kryształu prostopadłego do $\vec{B}$, $l_H = (\hbar c / |e|H)^{1/2}$ - długość magnetyczna, H - natężenie pola magnetycznego (w układzie jednostek CGS).

Z analizy przytoczonej powyżej wynika, że jeżeli w przypadku struktury zawierającej studnie kwantowe, pole magnetyczne skierowane jest prostopadle do kierunku wzrostu

struktury i leży w płaszczyźnie studni, kwantyzacja Landaua w kierunku wzrostu struktury, w przypadku niezbyt dużych pól magnetycznych może nie powstać, jeśli charakterystyczna szerokość studni jest mniejsza od promienia Larmora, gdyż w tej sytuacji warunek $r_{La} \leq l = v\tau$ nie jest spełniony. Szerokość studni (innymi słowy, charakterystyczny zasięg potencjału rozproszenia) odgrywa teraz rolę średniej długości swobodnej, a zatem elektron nie jest w stanie dokonać nawet jednego pełnego obrotu wokół osi $\vec{B}$.

1.2 Dynamika elektronów w modelu kwantowym: równanie mas efektywnych

W reprezentacji położenia stacjonarne równanie Schrödingera dla cząstki swobodnej ma postać zagadnienia własnego dla operatora energii $\hat{H}$:

$$\hat{H}\Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}) \quad (1.3)$$

Cząstka wewnątrz kryształu poddana jest różnym oddziaływaniom pochodzącym od cząstek budujących kryształ bądź przyłożonego pola elektromagnetycznego. Ponieważ rozkład potencjału w kryształach jest bardzo skomplikowany, dlatego istnieje potrzeba stosowania metod przybliżonych, pozwalających na opisanie dynamiki elektronów w takich przypadkach. Jedną z tych metod jest przybliżenie masy efektywnej (ang. *Effective Mass Approximation*).

Niech $\hat{H}_{per} = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2 + V_{per}$ oznacza hamiltonian kryształu niezaburzonego. Funkcje Blocha $\phi(\mathbf{r}) = u(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ są rozwiązaniami równania Schrödingera:

$$\hat{H}_{per}\phi(\mathbf{r}) = E\phi(\mathbf{r}). \quad (1.4)$$

Założmy, że do idealnego kryształu dodamy pewne zaburzenie. Bardziej ogólnie, zaburzeniem tym może być studnia kwantowa, bariera czy też supersieć. Wówczas do potencjału periodycznego V_{per} dodaje się potencjał zaburzenia V_{imp} i równanie Schrödingera przybiera postać:

$$[\hat{H}_{per} + V_{imp}(\mathbf{r})]\Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}) \quad (1.5)$$

W przypadku idealnego kryształu, rozwiązanie równania Schrödingera jest stosunkowo trudne, dlatego równanie (1.5), które dodatkowo uwzględnia zaburzenia, stanowi duże

wyzwanie. Stosując przybliżenie masy efektywnej (lub efektywnego Hamiltonianu) możemy uzyskać znacznie prostszy, ale zadowalający wynik, potwierdzony szeregiem prac eksperymentalnych. Główna idea tego przybliżenia polega na sprowadzeniu omawianego problemu do rozwiązania równania:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V_{imp} \right) \Phi(\mathbf{r}) = E \Phi(\mathbf{r}). \quad (1.6)$$

W równaniu (1.6) nie występuje już potencjał periodyczny kryształu V_{per} . Wpływ pola krystalicznego przejawia się w zastąpieniu masy elektronu swobodnego m_0 , masą efektywną m^* . Funkcja $\Phi(\mathbf{r})$ spełniająca równanie (1.6) nie jest identyczna z funkcją $\Psi(\mathbf{r})$ lecz przybliża właściwości fizyczne układu i nosi nazwę funkcji obwiedni (ang. *envelope function*). W dalszej części przedstawiony jest bardziej szczegółowo sposób przejścia od równania (1.5) do równania (1.6).

Dla uproszczenia notacji rozważmy zagadnienie jednowymiarowe. Przypuśćmy, że mamy rozwiązane równanie Schrödingera dla idealnego kryształu

$$\hat{H}_{per} \phi_{nk}(x) = \varepsilon_n \phi_{nk}(x). \quad (1.7)$$

Rozwiązania te tworzą zbiór kompletny, to znaczy, że każda funkcja falowa $\Psi(x)$, która spełnia te same warunki brzegowe może być przedstawiona jako suma ważona ϕ_n . Dlatego funkcja falowa $\Psi(x)$ układu z zaburzeniami może być przedstawiona w terminach $\phi_{nk}(x)$ jako

$$\Psi(x) = \sum_n \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \tilde{\chi}_n(k) \phi_{nk}(x) \frac{dk}{2\pi}, \quad (1.8)$$

gdzie $\tilde{\chi}_n$ jest współczynnikiem rozwinięcia. Uwzględnione jest tutaj zarówno sumowanie względem wszystkich n pasm, jak i całkowanie względem wektora falowego k w całej strefie Brillouina, aby uwzględnić wszystkie możliwe stany. Możemy teraz podstawić wyrażenie (1.8) do równania Schrödingera (1.5) i próbować znaleźć dokładną wartość $\tilde{\chi}_n$, co nie jest rzeczą prostą, rozwiązując bezpośrednio pierwotne równanie. Dlatego, aby móc rozwiązać powyższy problem, funkcja falowa musi zostać uproszczona poprzez dokonanie przybliżenia.

W dalszej części założymy, że znaczącą rolę odgrywa funkcja falowa tylko z jednego pasma, dlatego możemy opuścić sumowanie względem n . Dla przykładu, domieszkując donorowo GaAs, spodziewamy się, że stany będą w dużej mierze powstawać od dolnego pasma przewodnictwa (Γ_6). Pasma walencyjne i wyższe pasma przewodnictwa mają jedynie niewielki wkład. Założymy również, że tylko stany z małego obszaru k -przestrzeni

znacząco przyczyniają się do całki w wyrażeniu (1.10). W przypadku donorów, oczekujemy, że wektor falowy k znajduje się w pobliżu 0, które znajduje się w dnie pasma przewodnictwa (w punkcie Γ). Wówczas funkcje Blocha mogą być zapisane jako $\phi_{nk}(x) = u_{nk}(x)\exp(ikx)$, gdzie $u_{nk}(x)$ jest funkcją periodyczną zmiennej x . Załóżmy, że większość zmian funkcji $\phi_{nk}(x)$ z wektorem k pochodzi od fali płaskiej i wówczas $u_{nk}(x)$ może być traktowane jako niezależne od k w małym zakresie k -przestrzeni. Tak więc, możemy zapisać:

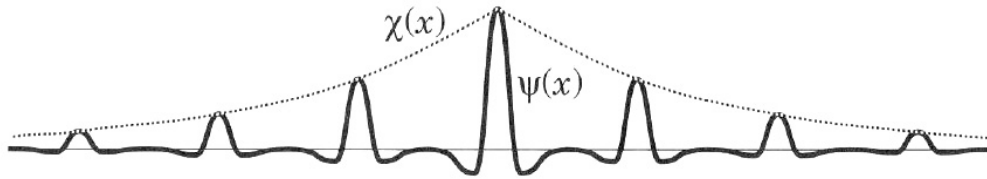
$$\phi_{nk}(x) = u_{nk}(x)e^{ikx} \approx u_{n0}(x)e^{ikx} = \phi_{n0}(x)e^{ikx} \quad (1.9)$$

dla małych wartości wektora falowego k .

Biorąc pod uwagę dwa powyższe uproszczenia, funkcja falowa (1.8) ma postać odwrotnej transformaty Fouriera,

$$\Psi(x) \approx \phi_{n0}(x) \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \tilde{\chi}(k) e^{ikx} \frac{dk}{2\pi} = \phi_{n0}(x) \chi(x). \quad (1.10)$$

Jest to pierwszy główny wynik metody masy efektywnej, pokazany na Rysunku 1.1. Funkcja falowa może być zapisana w przybliżeniu jako iloczyn funkcji Blocha dla lokalnego ekstremum danego pasma energetycznego oraz funkcji obwiedni $\chi(x)$. Założyliśmy, że $\tilde{\chi}(k)$ obejmuje mały zakres liczb falowych, co z kolei oznacza, że $\chi(x)$ musi być wolnozmenną funkcją w przestrzeni rzeczywistej.



Rysunek 1.1: Funkcja falowa wokół zaburzenia w postaci domieszki.

W następnym kroku potrzebujemy równania dla funkcji obwiedni. Podstawmy zatem funkcję falową w postaci (1.8) do równania Schrödingera (1.5). Jeśli dokonamy redukcji do pojedynczego pasma energetycznego, wynik działania operatora $\hat{H}_{per}$ na funkcję $\Psi(x)$ daje:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{per}\Psi(x) &= \hat{H}_{per} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \tilde{\chi}(k) \phi_{nk}(x) \frac{dk}{2\pi} = \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \tilde{\chi}(k) \epsilon_n(k) \phi_{nk}(x) \frac{dk}{2\pi} \\ &\approx \phi_{n0} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \tilde{\chi}(k) \epsilon_n(k) e^{ikx} \frac{dk}{2\pi}. \end{aligned} \quad (1.11)$$

Hamiltonian $\hat{H}_{per}$ działa na x , a zatem wpływa wyłącznie na $\phi_{n0}(x)$. Funkcja ta jest funkcją własną równania Schrödingera dla czystego kryształu, dlatego zgodnie z (1.7) operator może być zastąpiony poprzez jego wartość własną $\varepsilon_n(k)$. Ostatecznie, dokonujemy przybliżenia (1.9) dla funkcji Blocha.

Dokonując rozwinięcia relacji dyspersji w szereg potęgowy względem k : $\varepsilon_n(k) = \sum_m a_m k^m$, otrzymujemy

$$\hat{H}_{per}\Psi(x) = \phi_{n0}(x) \sum_m a_m \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \tilde{\chi}(k) k^m e^{ikx} \frac{dk}{2\pi}. \quad (1.12)$$

Użyjmy teraz wyniku transformaty Furiera dla pochodnej, otrzymanego poprzez całkowanie przez części,

$$\int \frac{df(x)}{dx} e^{-ikx} dx = ik \int f(x) e^{-ikx} dx = ik \tilde{f}(k). \quad (1.13)$$

A zatem, odwrotna transformata Furiera dla $k\tilde{f}(k)$ jest $-idf(x)/dx$, co można uogólnić, aby pokazać, że odwrotna transformata dla $k^m \tilde{f}(k)$ wynosi $(-id/dx)^m f(x)$. Tak więc równanie (1.12) możemy zapisać w postaci:

$$\hat{H}_{per}\Psi(x) \approx \phi_{n0}(x) \sum_m a_m \left(-i \frac{d}{dx}\right)^m \chi(x) \equiv \phi_{n0}(x) \varepsilon_n \left(-i \frac{d}{dx}\right) \chi(x). \quad (1.14)$$

Wyrażenie $\varepsilon_n(-id/dx)$ to nic innego jak skrócenie wyrażenia występującego z lewej strony. Oznacza to, że ε_n należy rozwinąć w szereg potęgowy z wektorem falowym k , oraz zamienić k z $(-id/dx)$ we wszystkich członach.

Podstawiając (1.10) oraz (1.14) do równania (1.5) otrzymujemy:

$$\phi_{n0}(x) \varepsilon_n \left(-i \frac{d}{dx}\right) \chi(x) + V_{imp} \phi_{n0} \chi(x) = E \phi_{n0} \chi(x). \quad (1.15)$$

Ponieważ V_{imp} oraz E w prosty sposób mnożą funkcję falową, dlatego wspólny czynnik $\phi_{n0}(x)$ kasuje się i równanie Schrödingera można zredukować do następującej postaci:

$$\left[\varepsilon_n \left(-i \frac{d}{dx}\right) + V_{imp}(x) \right] \chi(x) = E \chi(x). \quad (1.16)$$

Ostatecznie otrzymaliśmy równanie Schrödingera dla samej funkcji obwiedni, zawierające efektywny Hamiltonian. Funkcje Blocha zanikły podobnie jak i okresowy potencjał, na rzecz skomplikowanego operatora energii kinetycznej, który zawiera strukturę pasmową. W przypadku trójwymiarowym, $\varepsilon_n(-id/dx)$ zastępujemy przez $\varepsilon_n(-i\nabla)$. Jeśli uwzględnimy całą strukturę pasmową dla $\varepsilon_n(\mathbf{k})$, wówczas efektywny Hamiltonian nadal

pozostanie mocno skomplikowany. Jednakże, mamy już założone, że funkcja falowa jest wyznaczana tylko dla małego regionu w $\mathbf{k}$ -przestrzeni, i możemy uprościć $\varepsilon_n(\mathbf{k})$ tak, aby było z tym zgodne.

Dla przykładu, rozważmy energię dna pasma przewodnictwa w GaAs, która może być przybliżona funkcją paraboliczną względem wektora falowego elektronów:

$$\varepsilon_n(\mathbf{k}) \approx E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0 m_e} \nabla^2. \quad (1.17)$$

Stosując podstawienie $\mathbf{k} \rightarrow -i\nabla$ otrzymujemy:

$$\varepsilon_n(-i\nabla) \approx E_c - \frac{\hbar^2}{2m_0 m_e} \nabla^2. \quad (1.18)$$

Podstawiając (1.18) do efektywnego równania Schrödingera (1.15) oraz przenosząc E_c na prawą stronę, otrzymujemy:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0 m_e} \nabla^2 + V_{imp}(\mathbf{r}) \right] \chi(\mathbf{r}) = (E - E_c) \chi(\mathbf{r}). \quad (1.19)$$

Otrzymane równanie przypomina równanie Schrödingera dla swobodnego elektronu, z wyjątkiem masy efektywnej oraz energii mierzonej od dna pasma przewodnictwa [62].

Powyższe przybliżenie masy efektywnej może być również zastosowane do heterostruktur, niemniej jednak należy pamiętać o kilku ważnych warunkach. Po pierwsze, funkcje Blocha w dwóch materiałach po różnych stronach heterozłącza muszą być podobne, aby przybliżenie było możliwe. Oczywistym warunkiem jest również, że muszą one należeć do tego samego punktu w $\varepsilon_n(\mathbf{k})$. Po drugie, zarówno funkcja obwiedni jak i jej pierwsza pochodna muszą być ciągłe na interfejsach. Rozważmy złącze w punkcie $z = 0$ pomiędzy dwoma materiałami A i B . Jednowymiarowe równania Schrödingera dla funkcji obwiedni w dwóch obszarach mają postać:

$$\left(E_C^A - \frac{\hbar^2}{2m_A m_0} \frac{d^2}{dz^2} \right) \chi(z) = E \chi(z), \quad (1.20)$$

$$\left(E_C^B - \frac{\hbar^2}{2m_B m_0} \frac{d^2}{dz^2} \right) \chi(z) = E \chi(z), \quad (1.21)$$

Różnica pomiędzy dnem pasm przewodnictwa dla tych materiałów $\delta E_c = E_B - E_A$, określa skok potencjału. Jeżeli materiały A i B byłyby takie same, dopasowanie wartości i pierwszej pochodnej funkcji falowej w punkcie złącza, powinno spełniać zwykłe warunki:

$$\chi(0_A) = \chi(0_B), \quad \left. \frac{d\chi(z)}{dz} \right|_{z=0_A} = \left. \frac{d\chi(z)}{dz} \right|_{z=0_B}, \quad (1.22)$$

gdzie 0_A oraz 0_B oznaczają odpowiednio strony interfejsu z materiałem A i B . Ponieważ w przypadku heterozłącza materiały charakteryzują się różnymi masami efektywnymi, powyższe warunki nie są słuszne, gdyż w takiej sytuacji prąd prawdopodobieństwa nie jest zachowany. Dlatego należy wprowadzić zmodyfikowane warunki uwzględniające różną masę efektywną w poszczególnych regionach:

$$\chi(0_A) = \chi(0_B), \quad \left. \frac{1}{m_A} \frac{d\chi(z)}{dz} \right|_{z=0_A} = \left. \frac{1}{m_B} \frac{d\chi(z)}{dz} \right|_{z=0_B}, \quad (1.23)$$

Z matematycznego punktu widzenia, jeśli zastosujemy błędne warunki dopasowania funkcji falowej w punkcie złącza dwóch różnych materiałów, otrzymamy równanie Schrödingera w postaci

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0m(z)} \frac{d^2\chi}{dz^2} + V(z)\chi(z) = E\chi(z). \quad (1.24)$$

W tym przypadku, jeżeli masa efektywna $m(z)$ jest zmienna, to wówczas operator energii kinetycznej nie jest Hermitowski, co prowadzi do zaniku wielu ważnych własności funkcji falowej. Na pozór prosta zmiana, która wprowadzona jest w następującym równaniu:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0m(z)} \frac{d}{dz} \left[\frac{1}{m(z)} \frac{d\chi}{dz} \right] + V(z)\chi(z) = E\chi(z), \quad (1.25)$$

przywraca Hermitowską naturę operatora Hamiltona i może być uzasadniona dokładniej [23, 63–65]. Obie powyższe wersje mogą być zredukowane do zwykłego równania Schrödingera, niemniej jednak druga z nich zapewnia, że funkcje falowe są ortogonalne i prąd prawdopodobieństwa na złączu jest zachowany, oraz spełnia pozostałe ważne dla nas warunki, dotyczące ciągłości funkcji falowej oraz jej pochodnej w punkcie złącza.

1.3 Efekty fotogalwaniczne w asymetrycznych studniach kwantowych

W swojej pracy O. Kibis [17] rozważa quasi-dwuwymiarowy system elektronów w układzie współrzędnych $\{x, y, z\}$. Pole magnetyczne, w którym umieszczona jest struktura, skierowane jest wzdłuż osi y , dlatego $\mathbf{H} = (0, H_y, 0)$, zaś potencjał wektorowy, przy wykorzystaniu cechowania Landaua, ma postać $\mathbf{A} = (H_y z, 0, 0)$. W takim układzie Hamiltonian opisujący ruch elektronu oraz funkcja falowa elektronu mają następującą postać:

$$H = \frac{1}{2m^*} \left[\left(\hat{p}_x + \frac{eH_y z}{c} \right)^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2 \right] + U(z), \quad (1.26)$$

$$\Psi_k = C\varphi(k_x, z)\exp(ik_x x + ik_y y)\exp(-i\varepsilon_k t/\hbar), \quad (1.27)$$

gdzie: m^* oraz e to odpowiednio masa efektywna oraz ładunek elektronu, $U(z)$ - potencjał kwantyzujący, C - stała normalizacyjna.

Do analizy omawianego efektu został użyty model nieskończonego trójkątnego potencjału w postaci:

$$U(z) = \begin{cases} \infty, & z < 0 \\ eE_z z, & z \geq 0, \end{cases} \quad (1.28)$$

gdzie E_z to bezwzględna wartość natężenia pola elektrycznego. Rozwiązując równania Schrödingera z Hamiltonianem (1.26), w którym potencjał $U(z)$ nadany jest przez (1.28), autor ostatecznie otrzymał wyrażenie na energię stanu podstawowego w postaci:

$$\varepsilon(k_x) = \left[\frac{\hbar^2}{2m} \right]^{1/3} \left[\frac{9\pi}{8} \left(eE_z + \frac{\hbar e H_y k_x}{mc} \right) \right]^{2/3} + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m}, \quad (1.29)$$

Z powyższego równania (1.29) wynika, że dla $H_y \neq 0$ widmo energetyczne jest anizotropowe [17], t.j.

$$\varepsilon(v_x) \neq \varepsilon(-v_x), \quad (1.30)$$

gdzie $v_x = (1/\hbar)[\partial\varepsilon(k_x)/\partial k_x]$ jest prędkością elektronu wzdłuż osi x .

W dalszej części pracy, opisany powyżej model został zastąpiony bardziej realistycznym [66, 67], poprzez użycie potencjału trójkątnej studni kwantowej o skończonej głębokości. Szczegółowe wyniki naszej analizy zawarte są w Rozdziale 2.1.

ROZDZIAŁ 2

Anizotropia fotoprzewodnictwa w trójkątnych i półparabolicznych studniach kwantowych

Jak już było wspomniane w poprzednim rozdziale, pomimo dokładnych analiz dotyczących anizotropii fotoprzewodnictwa, przedstawionych w cytowanych pracach, omawiane modele (np. model δ -barier, nieskończona trójkątna studnia potencjału) nie są zbyt realistyczne. Ponadto autor [17] ogranicza swoje rozważania tylko do liniowej zależności od pola magnetycznego, zaniedbując czynnik proporcjonalny do H^2 . Umożliwia to autorowi użycie znanej postaci funkcji falowej oraz wartości energii stanu podstawowego w nieskończonej trójkątnej studni potencjału. Pominięcie członu proporcjonalnego do H^2 w tym podejściu możliwe jest pod warunkiem, że spełnione jest kryterium $(d_0/l_B)^4 \ll 1$; gdzie d_0 jest charakterystyczną szerokością warstwy 2-DEG, która w przypadku nieskończonej trójkątnej studni potencjału została zdefiniowana przez O. Kibisa [17] jako $d_0 = (3\hbar^2\pi^2/16meE)^{1/3}$, m, e są odpowiednio masą i ładunkiem elektronu, l_B - długość magnetyczna, E - pole elektryczne, określające trójkątną studnię potencjału.

W bardziej realistycznym modelu trójkątnej skończonej studni potencjału, charakterystyczna długość określona jest jako maksymalna szerokość studni potencjału i w naszym przypadku oznaczona jako d . Jeśli utożsamimy d z d_0 , okazuje się, że warunek $(d/l_B)^4 \ll 1$ jest bardzo często naruszony dla realnych wartości natężenia pola magnetycznego B oraz szerokości studni kwantowej. Dlatego też, należy albo poszukiwać kolejnego „małego parametru” aby można było skorzystać z rachunku zaburzeń, albo po prostu użyć numerycznych metod pozwalających rozwiązać ten problem bezpośrednio. Jak będzie pokazane później, w przypadku skończonej trójkątnej QW kolejny „mały parametr” faktycznie istnieje, i umożliwia uproszczenie analizy numerycznej.

W niniejszym rozdziale rozważone są bardziej realistyczne modele asymetrycznych studni kwantowych (trójkątna i półparaboliczna), które mogą być wytwarzane za pomocą rozmaitych nowoczesnych technik (np. MBE) [68]. Przedstawiona została także analiza efektu anizotropii fotoprzewodnictwa, który może występować w podobnych strukturach kwantowych w zewnętrznym polu magnetycznym.

2.1 Trójkątna studnia kwantowa o skończonej głębokości

Aby omówić dwuwymiarowy gaz elektronów w zewnętrznym polu magnetycznym, zagniemy od omówionego w poprzednim podrozdziale podejścia opartego na równaniu mas efektywnych w postaci:

$$\left[E_c + \frac{(i\hbar\nabla + e\mathbf{A})^2}{2m^*} + U(z) \right] \psi(\mathbf{r}, z) = E\psi(\mathbf{r}, z), \quad (2.1)$$

gdzie E_c oznacza dno pasma przewodnictwa półprzewodnika $\mathbf{A}$ - potencjał wektorowy, e - ładunek elektronu, m^* masa efektywna elektronu, $\mathbf{r} = (x, y)$ jest dwuwymiarowym wektorem na płaszczyźnie (x, y) . Zakładamy, że: $\mathbf{A} = (Bz, 0, 0)$ (cechowanie Landaua) zaś potencjał $U(z)$ ma postać:

$$U(z) = \begin{cases} U_0, & z \leq 0 \\ eEz, & 0 \leq z \leq d, \quad |eEd| = U_0 \end{cases} \quad (2.2)$$

gdzie d oraz U_0 są odpowiednio szerokością i głębokością studni kwantowej. Załóżmy także, że funkcja falowa elektronu ma postać:

$$\phi_k(x) = C\varphi(k_x, z) \exp(ik_x x + ik_y y), \quad (2.3)$$

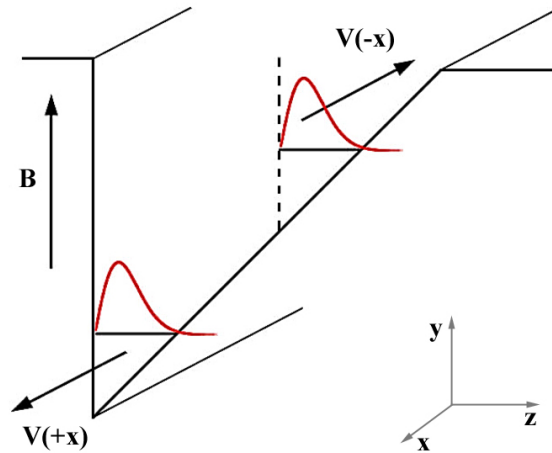
gdzie C jest stałą normalizacyjną, zaś $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ jest wektorem falowym w płaszczyźnie prostopadłej do kierunku wzrostu struktury (kierunek z) zawierającą studnię kwantową. Wówczas, z (2.1)-(2.3) otrzymujemy równanie różniczkowe zwyczajne na funkcję $\varphi(k_x, z)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2 \varphi(k_x, z)}{dz^2} + \left[\frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} + \frac{\hbar e B k_x z}{m^*} + \frac{(eBz)^2}{2m^*} + eEz - \varepsilon \right] \varphi(k_x, z) = 0, \quad (2.4)$$

gdzie $\varepsilon = E_c + \varepsilon(k_x) - \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m^*}$.

Rozważając nieskończoną trójkątną studnię kwantową i używając analitycznych rozwiązań odpowiedniego równania Schrödingera, autor [17] doszedł do wniosku, że widmo energetyczne jest anizotropowe w tym sensie, że zależy od kierunku ruchu elektronu, czyli energia elektronów poruszających się w kierunku $+x$ nie jest równa energii elektronów poruszających się w kierunku $-x$. Wynika to bezpośrednio ze wzoru (1.29) na energię elektronu w nieskończonej studni kwantowej.

Fizyczne wytłumaczenie tego zjawiska jest następujące. Jeśli elektron porusza się z prędkością v_x , siła Lorentza działa na niego w kierunku $< -x >$ i w rezultacie maksimum rzeczywistej części funkcji falowej elektronu przesunięte jest w kierunku $< -z >$. Jeśli prędkość elektronu zmieni się na $-v_x$, siła Lorentza zmienia kierunek działania i wówczas maksimum funkcji falowej elektronu przesuwa się w kierunku $< z >$. Stąd, w asymetrycznym potencjale $U(z) \neq U(-z)$, energia elektronów poruszających się w kierunku $+x$ jest różna od energii elektronów poruszających się w kierunku $-x$ - $\varepsilon(v_x) \neq \varepsilon(-v_x)$. W naszym podejściu przy użyciu realistycznego potencjału skończonej studni kwanto-



Rysunek 2.1: Trójkątna studnia kwantowa o skończonej głębokości umieszczona w zewnętrznym polu magnetycznym. W zależności od kierunku ruchu elektronów, studnia posiada dwie efektywne szerokości i głębokości.

wej, z równania (2.4), nawet bez jego rozwiązania, natychmiast widać, że widmo energetyczne elektronów w studni kwantowej zależy od kierunku ruchu elektronów wzdłuż osi x (drugi człon w nawiasie kwadratowym). Rzeczywiście, w zależności od kierunku ruchu elektronów wzdłuż osi x , działa na nie różnie skierowana względem osi z siła Lorentza, przez co zachowują się one tak, jakby były w studniach kwantowych o różnych

„efektywnych” głębokościach (Rysunek 2.1), a tym samym, nawet bez żadnych obliczeń, możemy wnioskować, że $\epsilon_n(+k_x) \neq \epsilon_n(-k_x)$, gdzie n jest liczbą kwantową numerującą poszczególne kwantowe poziomy energetyczne w studni. Zauważmy, że w przypadku nieskończonej trójkątnej studni kwantowej nie jest to wcale takie oczywiste na tym etapie, bowiem studnia kwantowa jest nieskończona i należy dokonać odpowiednich obliczeń w celu sprawdzenia, czy to stwierdzenie jest prawdziwe.

Jak było wspomniane wcześniej, w przypadku trójkątnej studni potencjału o skończonej głębokości, warunek $(d/l_B)^4 \ll 1$ nie jest spełniony nawet w przypadku niewielkich pól magnetycznych około ~ 3 T oraz szerokości studni kwantowej w granicach 15 nm, co jest pokazane w Tabeli 2.1. Dlatego też w sytuacjach bardziej realistycznych należy stosować numeryczne rozwiązanie równania (2.4).

Tabela 2.1: Wartości liczbowe wyrażenia $(d/l_B)^4$ dla różnych wartości d oraz l_B .

B, T	$l_B \times 10^{-8}, \text{m}$	$(d/l_B)^4$		
		$d = 10 \text{ nm}$	$d = 15 \text{ nm}$	$d = 20 \text{ nm}$
0.1	8.1128	0.0002	0.0012	0.0037
0.5	3.6288	0.0058	0.0292	0.0922
1	2.5655	0.0231	0.1167	0.3694
2	1.8141	0.0923	0.4675	1.4775
3	1.4812	0.2077	1.0578	3.3245

Mając na uwadze, że $\epsilon_n(+k_x) \neq \epsilon_n(-k_x)$, zasadnym jest, aby w dalszej części rozważać dwa równania postaci:

$$\frac{d^2\varphi(\zeta)}{d\zeta^2} = (\zeta - \tilde{\epsilon}_1)\varphi(\zeta), \quad \frac{d^2\varphi(\zeta)}{d\zeta^2} = (\zeta - \tilde{\epsilon}_2)\varphi(\zeta), \quad (2.5)$$

gdzie ζ , $\tilde{\epsilon}_1$ oraz $\tilde{\epsilon}_2$ są wielkościami bezwymiarowymi, które są zdefiniowane jako: $\zeta = z/z_{01}$ dla pierwszego równania (2.5) oraz $\zeta = z/z_{02}$ dla drugiego, gdzie

$$z_{01} = [\hbar^2/2m^*(eE + eB\hbar k_x/m^*)]^{1/3}, \quad (2.6)$$

$$z_{02} = [\hbar^2/2m^*(eE - eB\hbar k_x/m^*)]^{1/3}; \quad (2.7)$$

$$\tilde{\epsilon}_1 = \epsilon / \epsilon_{01}, \quad (2.8)$$

$$\tilde{\epsilon}_2 = \epsilon / \epsilon_{02}, \quad (2.9)$$

$$\epsilon_{01} = [((eE + eB\hbar k_x m^{*-1})\hbar)^2 / 2m^*]^{1/3} \quad (2.10)$$

$$\epsilon_{02} = [((eE - eB\hbar k_x m^{*-1})\hbar)^2 / 2m^*]^{1/3}. \quad (2.11)$$

Wyprowadzając równania (2.5) z równania (2.4) [67] ograniczyliśmy się tylko do członów liniowych względem pola magnetycznego, gdyż łatwo jest sprawdzić bezpośrednio, iż dla rozsądnych wartości d oraz B spełniony jest warunek:

$$(e^2 B^2 d / 2m^*) / ((eB\hbar k_x / m^*) + eE) \ll 1,$$

a zatem człon proporcjonalny do B^2 można zaniedbać. Tak więc, w rzeczywistości dokonujemy zamiany warunku $(d_0/l_B)^4 \ll 1$ z [17] na następujący:

$$(e^2 B^2 d / 2m^*) / ((eB\hbar k_x / m^*) + eE) \ll 1,$$

który jest spełniony dla trójkątnej studni kwantowej o skończonej głębokości w zakresie znacznie większych wartości d oraz B , co jest pokazane w Tabeli 2.2. W Tabeli 2.3 podano rezultaty numerycznych rozwiązań równań (2.5) dla niektórych wartości B i d , przy założeniu naturalnych warunków brzegowych $\psi(0) = 0, \psi(d) = 0$.

W Tabeli 2.3, $\epsilon_n, n = 0, 1, 2, \dots$ są wartościami własnymi operatora energii w trójkątnej studni kwantowej o skończonej głębokości. W kolumnach oznaczonych jako $U_0 \rightarrow \infty$ pokazane są wartości własne energii wyznaczone z wzorów dla nieskończonej trójkątnej studni kwantowej, celem porównania z wynikami numerycznymi. Jak łatwo zauważyć, istnieje istotna różnica w wartościach własnych energii w tych dwóch przypadkach.

Na Rysunku 2.2 pokazana jest zależność energii elektronu stanu podstawowego w trójkątnej studni potencjału od wektora falowego $|k_x|$. Widać wyraźnie, że zaczynając od pewnej wartości $|k_x|$ energia elektronów poruszających się w kierunku $+x$ nie jest równa energii elektronów poruszających się w kierunku $-x$.

Na Rysunku 2.3 przedstawione są krzywe dyspersji $\epsilon_n(\pm k_x)$ dla trzech pierwszych wartości liczby kwantowej n . Łatwo zauważyć, że wraz ze wzrostem wartości n , różnica pomiędzy $\epsilon_n(+k_x)$ oraz $\epsilon_n(-k_x)$ staje się coraz mniejsza.

Tabela 2.2: Wartości liczbowe wyrażenia $(e^2 B^2 d / 2m^*) / ((eB\hbar k_x / m^*) + eE)$ dla różnych natężeń pola magnetycznego B oraz różnych szerokości d QW.

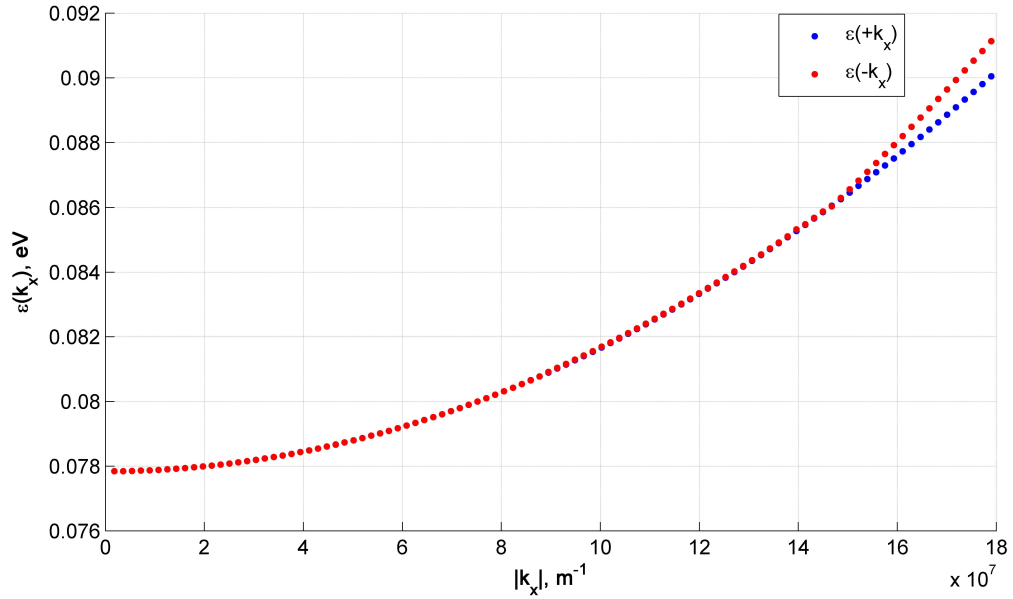
B, T	$(e^2 B^2 d / 2m^*) / ((eB\hbar k_x / m^*) + eE)$		
	$d = 10 \text{ nm}$	$d = 15 \text{ nm}$	$d = 20 \text{ nm}$
	$E = 3.18 \times 10^7 \text{ V/m}$	$E = 2.12 \times 10^7 \text{ V/m}$	$E = 1.59 \times 10^7 \text{ V/m}$
0.1	0.00423	0.00635	0.00846
0.5	0.02115	0.03173	0.04231
1	0.04231	0.06346	0.08462
2	0.08462	0.12693	0.16924
3	0.12693	0.19039	0.25386

Tabela 2.3: Rezultaty numerycznych rozwiązań równań (2.5) dla niektórych wartości B i d .

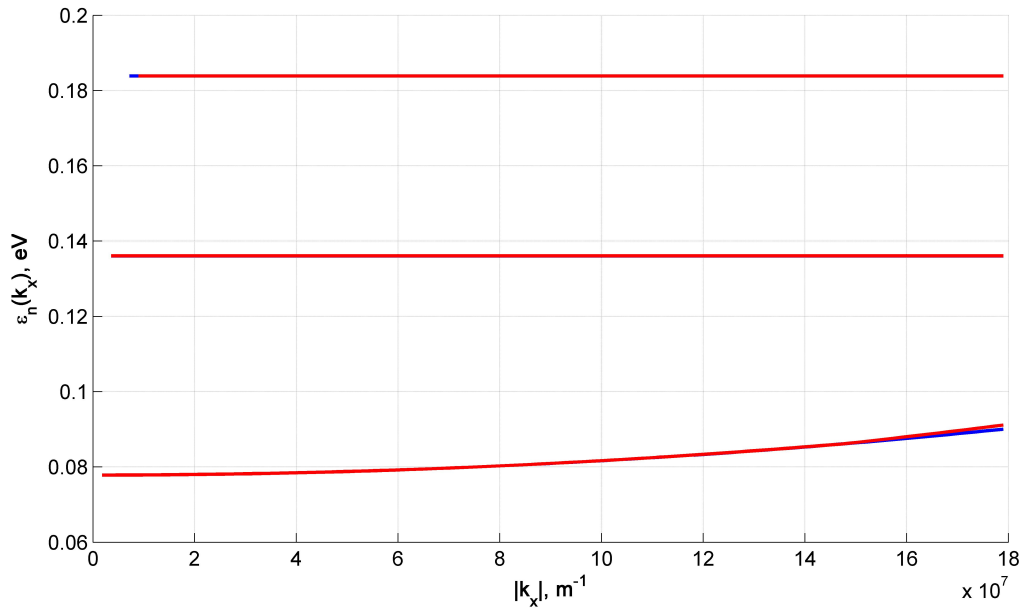
	$U_0 \longrightarrow \infty$	$d = 15 \text{ nm}$	$U_0 \longrightarrow \infty$	$d = 20 \text{ nm}$
	$E = 2.12 \times 10^7 \text{ V/m}$	$U_0 = 0.318 \text{ eV}$	$E = 1.59 \times 10^7 \text{ V/m}$	$U_0 = 0.318 \text{ eV}$
	$\varepsilon_n, \text{ eV}$	$\varepsilon_n, \text{ eV}$	$\varepsilon_n, \text{ eV}$	$\varepsilon_n, \text{ eV}$
B=0.5 T				
$n = 0$	0.14155120	0.09429694	0.11910669	0.07787549
$n = 1$	0.23969517	0.16500947	0.20021054	0.13608414
$n = 2$	0.31966484	0.22293948	0.26629558	0.18390778
B=3 T				
$n = 0$	0.14364455	0.09429699	0.12140644	0.07787529
$n = 1$	0.24337781	0.16500925	0.20425628	0.13608410
$n = 2$	0.32464247	0.22293979	0.27176399	0.18390776

2.2 Pochłanianie światła w strukturach zawierających studnie kwantowe

W nanostrukturach półprzewodnikowych, wskutek kwantowania rozmiarowego obserwuje się szereg nowych zjawisk fizycznych, których nie można zaobserwować w objęto-



Rysunek 2.2: Energia elektronu w stanie podstawowym w trójkątnej QW względem $|k_x|$.



Rysunek 2.3: Krzywe dyspersji $\varepsilon_n(\pm k_x)$ dla trzech pierwszych wartości n .

ściowych (litych) półprzewodnikach. Skutkiem kwantowania jest również powstawanie podpasm energetycznych, dzięki czemu w heterostrukturach mogą, oprócz przejść międzypasmowych, zajść przejścia optyczne między poziomami jednego podpasma energetycznego (przejścia wewnątrzpasmowe). Dzięki wyjątkowym optycznym właściwościom, struktury niskowymiarowe znajdują szerokie zastosowanie w mikro- i nanoelektronice (wzmacniacze optyczne, lasery, detektory itp.).

Oddziaływanie fali elektromagnetycznej z elektronami najczęściej opisywane jest metodą półklasyczną, w której pole elektromagnetyczne traktowane jest klasycznie, nato-

miast elektrony kwantowo, jako cząstki obsadzające stany energetyczne E_j . Zgodnie ze „złotą regułą” Fermiego, współczynnik przejścia elektronu ze stanu i do innego stanu j pod wpływem absorpcji fali elektromagnetycznej o częstotliwości ω określa zależność:

$$W_{ji} = \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{eE_0}{m_0\omega} \right)^2 |\langle j | \mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}} | i \rangle|^2 \delta(E_j - E_i - \hbar\omega), \quad (2.12)$$

gdzie E_i i E_j są odpowiednio energiami stanu początkowego i końcowego elektronu. Wyrażenie znajdujące się wewnątrz elementu macierzowego możemy przedstawić jako

$$\mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \left(e_x \frac{\partial}{\partial x} + e_y \frac{\partial}{\partial y} + e_z \frac{\partial}{\partial z} \right). \quad (2.13)$$

Przykładowo, jeżeli pole elektryczne jest spolaryzowane wyłącznie wzdłuż osi z , wówczas $\mathbf{e} = (0, 0, 1)$ zaś $\mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \partial / \partial z$. Moc absorbowana w wyniku takiego przejścia równa jest iloczynowi współczynnika przejścia oraz energii absorbowanego fotonu $\hbar\omega$. Aby móc określić moc całkowitą, należy dokonać sumowania względem wszystkich możliwych początkowych i końcowych stanów. Należy też uwzględnić funkcję rozkładu Fermiego $f(E_i)$, aby móc zapewnić, że początkowy stan jest zajęty oraz $[1 - f(E_j)]$ aby zapewnić, że stan końcowy jest pusty, a zatem układ absorbuje moc określoną za pomocą wyrażenia

$$P_+ = \frac{2\pi}{\hbar} \hbar\omega \left(\frac{eE_0}{m_0\omega} \right)^2 2 \sum_{i,j} |\langle j | \mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}} | i \rangle|^2 f(E_i) [1 - f(E_j)] \delta(E_j - E_i - \hbar\omega) \quad (2.14)$$

Współczynnik 2 występujący przed znakiem sumowania pojawia się ze względu na spin elektronu, który musi być uwzględniony tylko raz, ponieważ spin nie ulega zmianie pod wpływem przejścia optycznego.

Omawiany układ oprócz pochłaniania również emituje moc w tempie P_- , ze względu na człon $e^{+i\omega t}$ występujący w elemencie macierzowym, opisującym oddziaływanie elektronu z zewnętrznym polem elektromagnetycznym. Wyrażenie określające moc emisji jest niemal identyczne z P_+ z wyjątkiem zmiany znaku przy ω :

$$P_- = -\frac{2\pi}{\hbar} \hbar\omega \left(\frac{eE_0}{m_0\omega} \right)^2 2 \sum_{i,j} |\langle j | \mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}} | i \rangle|^2 f(E_i) [1 - f(E_j)] \delta(E_j - E_i - \hbar\omega) \quad (2.15)$$

Argument δ -funkcji może być przedstawiony w takiej samej postaci jak w wyrażeniu P_+ poprzez zamianę wskaźników i oraz j , które są tylko oznaczeniami indeksów sumowania. W tej sytuacji element macierzowy nie ulega zmianie, lecz funkcje Fermiego zmieniają

się na $f(E_j)[1 - f(E_i)]$. Czynniki te oraz znak przed wyrażeniem P_- stanowią w tym momencie jedyne różnice pomiędzy P_+ a P_- i razem dają:

$$f(E_i)[1 - f(E_j)] - f(E_j)[1 - f(E_i)] = f(E_i) - f(E_j). \quad (2.16)$$

Tak więc ogólny wskaźnik absorpcji energii wynosi

$$P = \frac{2\pi}{\hbar} \hbar \omega \left(\frac{eE_0}{m_0 \omega} \right)^2 2 \sum_{i,j} |\langle j | \mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}} | i \rangle|^2 [f(E_i) - f(E_j)] \delta(E_j - E_i - \hbar \omega) \quad (2.17)$$

Porównując wyrażenia (2.17) z klasycznym wyrażeniem określającym całkowitą moc rozpraszaną w jednostce objętości Ω

$$P = 2\sigma_1 \Omega E_0^2, \quad (2.18)$$

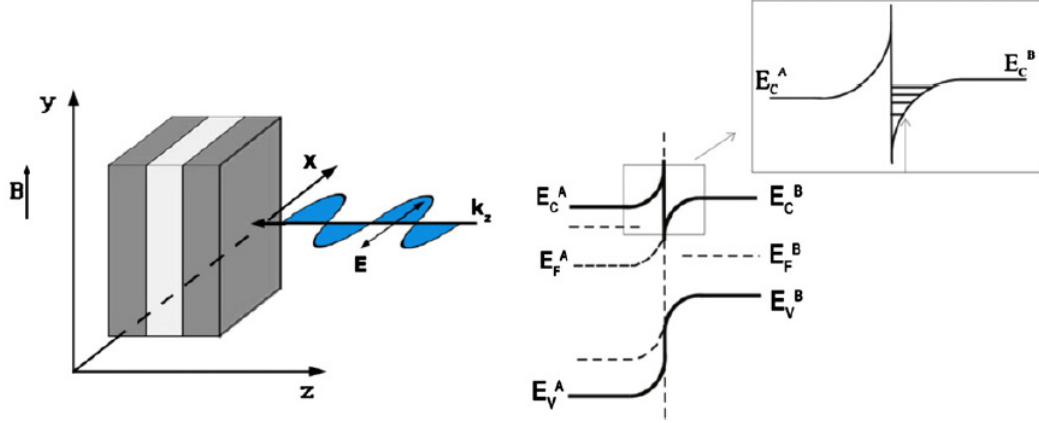
widać, że

$$\sigma_1(\omega) = \frac{\pi e^2}{m_0^2 \omega} \frac{2}{\Omega} \sum_{i,j} |\langle j | \mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}} | i \rangle|^2 [f(E_i) - f(E_j)] \delta(E_j - E_i - \hbar \omega) \quad (2.19)$$

Jest to ogólne wyrażenie na część rzeczywistą przewodnictwa.

2.3 Anizotropia fotoprzewodnictwa

Anizotropia widma energetycznego $\varepsilon_n(+k_x) \neq \varepsilon_n(-k_x)$ sugeruje nam, że pod wpływem absorpcji światła wewnątrz studni kwantowej umieszczonej w zewnętrznym polu magnetycznym, może powstać anizotropia transportu momentu pędu elektronów w kierunkach $+x$ i $-x$. Załóżmy więc, że światło liniowo spolaryzowane wzdłuż osi x z wektorem falowym $\mathbf{k}_{phot} = (0, 0, k_{z,phot})$, pada na strukturę półprzewodnikową, o której mowa powyżej, zawierającą skończoną trójkątną studnię kwantową. Omawiana sytuacja przedstawiona jest na Rysunku 2.4, gdzie prezentowana studnia trójkątna może powstać przykładowo na złączu półprzewodników z różną szerokością pasma zabronionego np. GaAs/AlGaAs. Na granicy takiego złącza powstają skoki (nieciągłości) pasm energetycznych (pasma przewodnictwa i pasma walencyjnego), które odgrywają rolę ścianek studni kwantowej i ograniczają ruch nośników ładunku w warstwie przypowierzchniowej heterozłącza. W półprzewodniku z węższym pasmem zabronionym, powstaje wąska warstwa inwersyjna, która odgrywa rolę bariery potencjalnej dla elektronów i w której powstają kwantowe poziomy energetyczne. Powstała w ten sposób studnia potencjału ma kształt bardzo zbliżony do trójkąta.



Rysunek 2.4: Schematyczne przedstawienie struktury zawierającej trójkątną QW wraz z przejściami optycznymi.

W tym przypadku, przedstawione na Rysunku 2.2 drugie pochodne energii elektronu $\varepsilon_x(\pm k_x)$ względem wektora falowego k_x (linie przerywane), charakteryzują dynamikę elektronów poprzez „zrenormalizowane” masy efektywne, które są różne dla $-x$ oraz $+x$.

Pouczające jest w tym momencie przedstawić „genezę” mas zrenormalizowanych, zaczynając od przypadku studni nieskończonej. Korzystając ze znanych wzorów na energię stanu podstawowego elektronu w trójkątnej studni nieskończonej umieszczonej w zewnętrznym polu magnetycznym, w przybliżeniu liniowym względem pola można wykazać, że

$$\varepsilon(+k_x) = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} + \left(\frac{\hbar^2}{2m^*} \right)^{1/3} \left[\frac{9\pi}{8} \left(eEz + \frac{\hbar e B k_x}{m^* c} \right) \right]^{2/3} \quad (2.20)$$

$$\varepsilon(-k_x) = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} + \left(\frac{\hbar^2}{2m^*} \right)^{1/3} \left[\frac{9\pi}{8} \left(eEz - \frac{\hbar e B k_x}{m^* c} \right) \right]^{2/3} \quad (2.21)$$

Stąd, pierwsze pochodne z energii względem wektora falowego mają postać:

$$\frac{\partial \varepsilon(+k_x)}{\partial k_x} = \frac{\hbar^2}{2m^*} k_x + \frac{2}{3} \left(\frac{\hbar^2}{2m^*} \right)^{1/3} \left[\frac{9\pi}{8} \left(eEz + \frac{\hbar e B k_x}{m^* c} \right) \right]^{-1/3} \left(\frac{\hbar e B}{m^* c} \right) \quad (2.22)$$

$$\frac{\partial \varepsilon(-k_x)}{\partial k_x} = \frac{\hbar^2}{2m^*} k_x + \frac{2}{3} \left(\frac{\hbar^2}{2m^*} \right)^{1/3} \left[\frac{9\pi}{8} \left(eEz - \frac{\hbar e B k_x}{m^* c} \right) \right]^{-1/3} \left(\frac{\hbar e B}{m^* c} \right) \quad (2.23)$$

Wprowadzając nową zmienną $|x| = \left| \frac{\hbar B k_x}{m^* c E} \right|$, która dla wszystkich realistycznych wartości m^* , pola magnetycznego spełnia warunek $x \ll 1$ oraz rozwijając funkcje $f_1(x) = \frac{\partial \varepsilon(k_x)}{\partial k_x}$ i $f_2(x) = \frac{\partial \varepsilon(-k_x)}{\partial k_x}$ w szereg potęgowy, mamy:

$$\frac{\partial f_1}{\partial k_x} = \frac{\partial \varepsilon(+k_x)}{\partial k_x} = \frac{\hbar^2}{m^*} k_x + \alpha(1 - \beta k_x) \quad (2.24)$$

$$\frac{\partial f_2}{\partial k_x} = \frac{\partial \varepsilon(-k_x)}{\partial k_x} = \frac{\hbar^2}{m^*} k_x + \alpha(1 + \beta k_x) \quad (2.25)$$

gdzie:

$$\alpha = \frac{2}{3} (\hbar^2/2m^*)^{1/3} (\hbar e B/m^*) ((9\pi/8) e E)^{-1/3},$$

$$\beta = (\hbar e B/3m^* E),$$

Definiując zrenormalizowane masy efektywne jako:

$$\tilde{m}_n^*(\pm k_x) = \hbar^2 \left(\frac{d^2 \varepsilon_n(\pm k_x)}{dk_x^2} \right)^{-1} \quad (2.26)$$

otrzymujemy następujące wzory na $\tilde{m}_\pm^*$ dla stanu podstawowego w nieskończonej trójkątnej QW (symbol $\pm$ odpowiada $\pm k_x$).

$$(\tilde{m}_\pm^*)^{-1} = (m^*)^{-1} \mp \hbar^{-2} \alpha \beta, \quad (2.27)$$

gdzie m^* oznacza standardową masę efektywną elektronów. Powyższe masy efektywne nazwane są „zrenormalizowanymi”, oraz zostały oznaczone znakiem „tyldy”, ponieważ zależą one zarówno od pola magnetycznego B jak i od pola elektrycznego E . Warto również porównać wartości zrenormalizowanych mas efektywnych obliczonych numerycznie dla trójkątnej studni kwantowej o skończonej głębokości z masami wyznaczonymi za pomocą wzorów dla nieskończonej trójkątnej studni kwantowej. Wyniki tych obliczeń numerycznych przedstawione są w Tabeli 2.4, gdzie wyraźnie widać, że dla studni kwantowej o skończonej głębokości istnieje znaczna różnica mas efektywnych wyznaczanych z uwzględnieniem zwrotu wektora falowego k_x .

Tabela 2.4: Wartości liczbowe zrenormalizowanych mas efektywnych.

	$B = 1 \text{ T}, d = 20 \text{ nm}$	
	infinite QW	finite QW
$\tilde{m}^{*(+)}, \text{ kg}$	9.1099×10^{-32}	9.1094×10^{-32}
$\tilde{m}^{*(-)}, \text{ kg}$	9.1091×10^{-32}	7.8379×10^{-32}

Przejdźmy teraz do analizy anizotropii fotoprzewodnictwa, wywołanej przez spolaryzowane światło padające na strukturę, jak to jest pokazane na Rysunku 2.4. Mamy tutaj

dwa możliwe scenariusze do zrealizowania. Pierwszy odpowiada przejściu optycznemu pomiędzy stanami dwóch trójkątnych studni kwantowych, pierwsza jest dla elektronów w paśmie przewodnictwa, a druga dla dziur w paśmie walencyjnym. Drugi scenariusz odpowiada przejściu optycznemu pomiędzy pasmem walencyjnym a stanami energetycznymi elektronów w trójkątnej QW w paśmie przewodnictwa. Taka sytuacja może przykładowo dotyczyć heterozłącza $n - AlGaAs/GaAs$, w którym trójkątna studnia kwantowa powstaje na interfejsach tylko dla elektronów.

Stosując podejście opisane w podrozdziale 2.2, otrzymujemy ogólne wyrażenie dla części rzeczywistej fotoprzewodnictwa [62], które oznaczmy przez σ :

$$\sigma = \frac{\pi e^2}{m_e^2 \omega} \frac{2}{\Omega} \sum_{i,j} |\langle j | \mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}} | i \rangle|^2 [f(E_i) - f(E_j)] \delta(E_j - E_i - \hbar\omega) \quad (2.28)$$

Ponieważ fala elektromagnetyczna spolaryzowana jest wzdłuż osi z , $\mathbf{e} = (0, 0, 1)$ oraz $\mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \partial / \partial z$. Współczynnik 2 znajdujący się przed znakiem sumy uwzględnia spin elektronu, $f(E_i)$, $f(E_j)$ są funkcjami rozkładu Fermiego, zaś Ω - objętość struktury. Po kilku przekształceniach i zsumowaniu „grzebienia Diraca” (ang. *Dirac comb*), otrzymujemy wyrażenie na część rzeczywistą fotoprzewodnictwa w trójkątnej studni kwantowej:

$$\sigma^\pm = \frac{\pi e^2}{m_e^2 d \omega} \sum_{n,m} |\mathbf{e} \cdot \mathbf{p}_{cn,vm}|^2 |\langle cn | vm \rangle|^2 \left(m_e \tilde{m}_{cn,vm}^{*(\pm)} / \pi \hbar^2 \right) \Theta[\hbar\omega - (E_g + \varepsilon_{cn} - \varepsilon_{vm})] \quad (2.29)$$

W powyższym wyrażeniu (2.29)

$$\mathbf{e} \cdot \mathbf{p}_{cn,vm} \langle cn | vm \rangle \equiv \mathbf{e} \cdot \mathbf{p}_{cn,vm} \int \varphi_{cn}^*(z) \varphi_{vm} dz \approx \langle cn \mathbf{k} | \mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}} | vm \mathbf{k} \rangle,$$

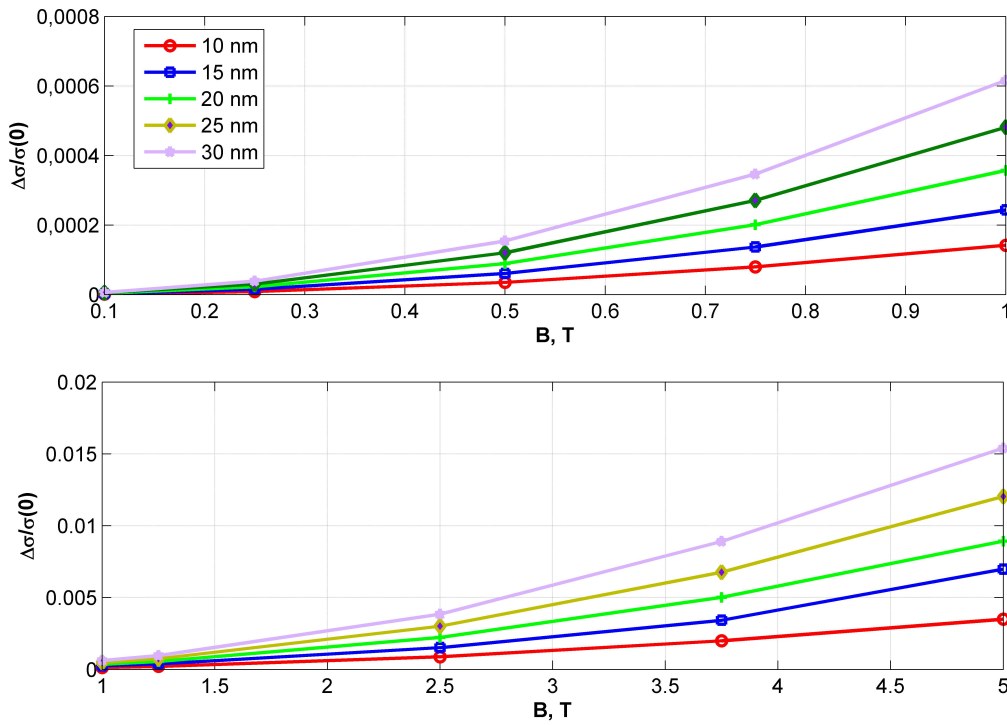
gdzie 'c' i 'v' oznaczają odpowiednio pasmo przewodnictwa i walencyjne, n i m numerują stany związane energii w obrębie studni kwantowych, $\mathbf{k}$ - wektor falowy w płaszczyźnie (poprzecznej), przy czym element macierzowy $\mathbf{e} \cdot \mathbf{p}_{cn,vm}$ zależy od charakteru funkcji Blocha oraz od polaryzacji $\mathbf{e}$; $\mathbf{e} \cdot \mathbf{p}_{cn,vm}$ jest funkcją skokową, zaś występujący indeks górny $\pm$ odpowiada odpowiednio $+k_x$ i $-k_x$. We wzorze (2.29), zamiast zredukowanej masy efektywnej m_{cv}^* pojawia się $\tilde{m}_{cn,vm}^{*\pm}$, zdefiniowana w następujący sposób:

$$\begin{aligned} (\tilde{m}_{cn,vm}^{*+})^{-1} &= (\tilde{m}_{cn}^{*+})^{-1} + (\tilde{m}_{vm}^{*+})^{-1}, \\ (\tilde{m}_{cn,vm}^{*-})^{-1} &= (\tilde{m}_{cn}^{*-})^{-1} + (\tilde{m}_{vm}^{*-})^{-1}, \end{aligned} \quad (2.30)$$

dla pierwszego scenariusza, oraz

$$\begin{aligned}(\tilde{m}_{cn,vm}^{*+})^{-1} &= (\tilde{m}_{cn}^{*+})^{-1} + (m_h^*)^{-1}, \\(\tilde{m}_{cn,vm}^{*-})^{-1} &= (\tilde{m}_{cn}^{*-})^{-1} + (m_h^*)^{-1},\end{aligned}\quad (2.31)$$

dla drugiego. Tutaj $\tilde{m}_{cn}^{\pm}$ i $\tilde{m}_{vm}^{\pm}$ są zrenormalizowanymi masami efektywnymi nośników ładunku w studniach kwantowych, odpowiednio dla pasma przewodnictwa i walencyjnego, zaś m_h^* jest masą efektywną dziur. W ramach niniejszej pracy zostały przeprowadzone obliczenia zgodnie z pierwszym scenariuszem, który odpowiada przejściu optycznemu pomiędzy stanami dwóch trójkątnych studni kwantowych, pierwsza jest dla elektronów w paśmie przewodnictwa, a druga dla dziur w paśmie walencyjnym. Na Rysunku 2.5 przed-



Rysunek 2.5: Zależność $\Delta\sigma/\sigma(0)$ od pola magnetycznego dla różnych szerokości QW.

stawione są wyniki obliczeń numerycznych wartości $\Delta\sigma_1(B)/\sigma_1(0)$ jako wykres względem B dla różnych wartości szerokości studni kwantowych d . Tutaj $\Delta\sigma = \sigma^+ - \sigma^-$ zaś $\sigma(0)$ jest fotoprzewodnictwem w zerowym polu magnetycznym. W analizie numerycznej uwzględnione zostały przejścia optyczne pomiędzy pierwszymi poziomami energetycznymi znajdującymi się odpowiednio w efektywnych studniach kwantowych dla dziur w paśmie walencyjnym oraz dla elektronów w paśmie przewodnictwa. Z danych przedstawionych na Rysunku 2.5 wyraźnie widać, że w przypadku trójkątnej skończonej studni kwantowej umieszczonej w zewnętrznym polu magnetycznym, powstaje efekt anizotro-

pii fotoprzewodnictwa, który wzrasta wraz ze zwiększaniem efektywnej (maksymalnej) szerokości studni kwantowej oraz ze wzrostem natężenia pola magnetycznego B . Efekt ten może być mierzalny dla pól magnetycznych o natężeniu rzędu kilku Tesli.

2.4 Półparaboliczna studnia kwantowa o skończonej głębokości

Opisany powyżej efekt fotogalwaniczny jest uniwersalny w tym znaczeniu, że powstaje nie tylko w trójkątnych, lecz także w innych studniach kwantowych. Ważne jest, aby potencjał studni był asymetryczny ze względu na inwersję współrzędnych przestrzennych. Aby zweryfikować to stwierdzenie, rozpatrzony został przypadek półparabolicznej studni kwantowej o skończonej głębokości, umieszczonej w zewnętrznym polu magnetycznym. Warto w tym momencie wspomnieć, że wytwarzanie takich struktur było opisywane w pracach [68, 69], podczas gdy niektóre z ich, o nieliniowych właściwościach optycznych, zostały zbadane w [70–73].

W przypadku półparabolicznej studni kwantowej, równanie (2.4) przybiera postać:

$$\left(\frac{\hat{p}_z^2}{2m^*} + \frac{(eBz + \hbar k_x)^2}{2m^*} + \alpha z^2 - \varepsilon \right) \varphi(k_x, z) = 0, \quad (2.32)$$

w którym $0 \leq z \leq d$, d jest maksymalną szerokością studni kwantowej, zaś współczynnik α zdefiniowany jest następująco: $\alpha = \frac{1}{2}m^*\omega_0^2 = U_0/d^2$ i $\omega_0^2 = 2U_0/d^2m^*$, gdzie U_0 jest głębokością QW. Wprowadźmy również dwa dodatkowe parametry: $\omega_c = |e|B/m^*$, $\omega_{c0}^2 = \omega_c^2 + \omega_0^2$. Wówczas zamiast równania (2.32) otrzymujemy następujące równanie mas efektywnych:

$$\left(\frac{\hat{p}_z^2}{2m^*} + \frac{1}{2}m^*\omega_{c0}^2 \left(z + \frac{\omega_c^2}{\omega_{c0}^2} z_k \right)^2 - \varepsilon_1 \right) \varphi(k_x, z) = 0 \quad (2.33)$$

gdzie $\varepsilon_1 = \varepsilon - \frac{1}{2}m^*(\omega_0^2\omega_c^2/\omega_{c0}^2)z_k^2$, $z_k = \hbar k_x/|e|B$. Wprowadzając nową zmienną $\zeta = \sqrt{m^*\omega_{c0}/\hbar}z$, otrzymujemy równanie, które możemy rozwiązać numerycznie:

$$\left(\frac{d^2}{d\zeta^2} - \left(\zeta + \frac{\omega_c^2}{\omega_{c0}^2} \zeta_k \right)^2 + \tilde{\varepsilon} \right) \tilde{\varphi}(\zeta, \zeta_k) = 0. \quad (2.34)$$

W powyższym wzorze $\zeta_k = \sqrt{m^*\omega_{c0}/\hbar}z_k$, $\tilde{\varepsilon} = 2\varepsilon_1/\hbar\omega_{c0}$, and $0 \leq \zeta \leq \zeta_0 = \sqrt{m^*\omega_{c0}/\hbar}d$

W Tabeli 2.5 przedstawione są wyniki rozwiązania numerycznego równania (2.34) dla takich samych warunków brzegowych jak w przypadku trójkątnej studni kwantowej

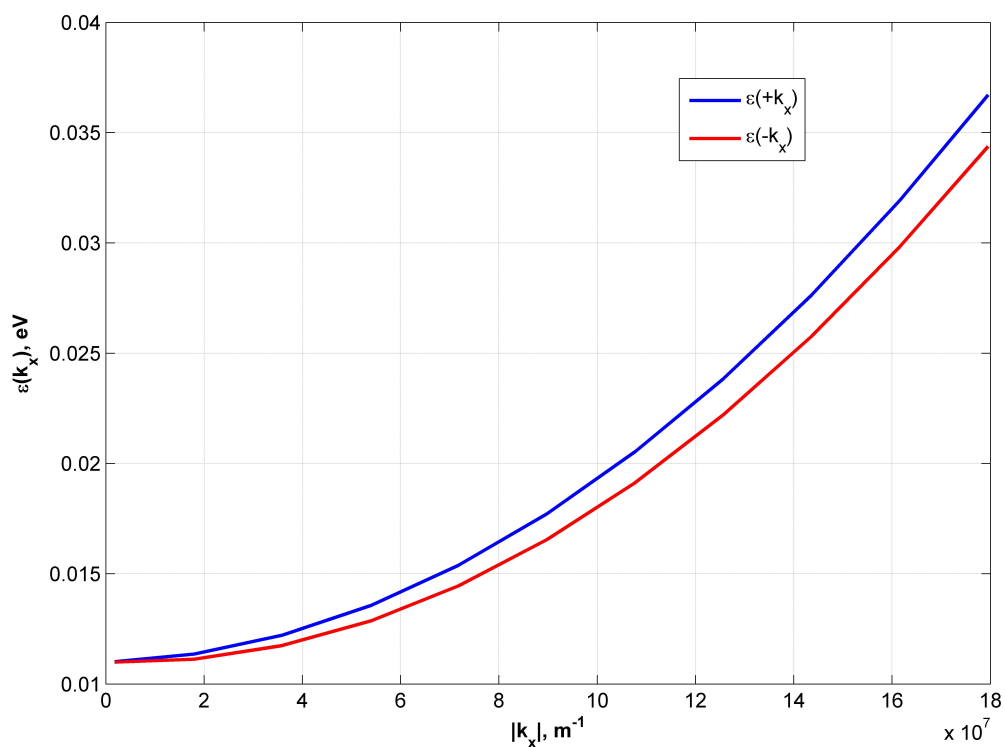
oraz dla trzech wartości natężenia pola magnetycznego B . Obliczone zostało widmo energetyczne studni kwantowej dla elektronów w paśmie przewodnictwa; głębokość QW jest oznaczona jako $U_{0(e)}$.

Tabela 2.5: Wyniki rozwiązania numerycznego równania (2.34)

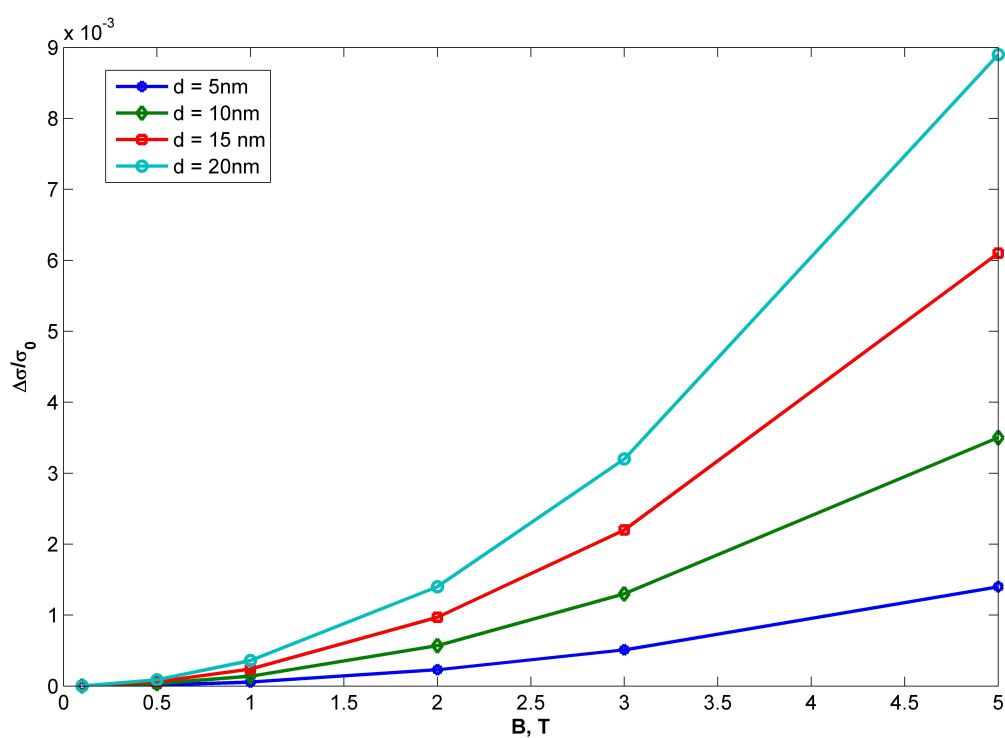
$U_{0(e)} = 0.207 \text{ eV}$			
	$d = 10 \text{ nm}$	$d = 15 \text{ nm}$	$d = 20 \text{ nm}$
B=0.5T			
	$\varepsilon_n, \text{ eV}$	$\varepsilon_n, \text{ eV}$	$\varepsilon_n, \text{ eV}$
$n = 1$	0.0289207	0.0234808	0.0207753
$n = 2$	0.0509498	0.0382208	0.0318787
$n = 3$	0.0729548	0.0529318	0.0429485
$n = 4$	0.0921393	0.0676281	0.0540012
B=1T			
$n = 1$	0.0291133	0.0237163	0.0210469
$n = 2$	0.0512411	0.0385787	0.0322924
$n = 3$	0.0733212	0.0533825	0.0434703
$n = 4$	0.0953775	0.0681572	0.0546144
B=2.5T			
$n = 1$	0.0296978	0.0244304	0.0218671
$n = 2$	0.0521366	0.0396803	0.0335664
$n = 3$	0.0744556	0.0547833	0.0450957
$n = 4$	0.0967151	0.0698132	0.0565407

Warto wspomnieć, że w przeciwieństwie do poprzedniego przypadku trójkątnej QW o skończonej głębokości, tu nie używamy żadnego „małego parametru”. Na Rysunku 2.6 przedstawiona jest krzywa dyspersji dla podpasma $n = 1$, zaś na Rysunku 2.7 wyniki obliczeń anizotropii fotoprzewodnictwa dla półparabolicznej studni kwantowej o skończonej głębokości.

Z Rysunków 2.5 i 2.7 wyraźnie widać, że anizotropia fotoprzewodnictwa powinna wystąpić w takich asymetrycznych studniach kwantowych, umieszczonych w zewnętrznym



Rysunek 2.6: Relacja dyspersji dla elektronów w stanie podstawowym w półparabolicznej studni kwantowej o skończonej głębokości względem $+k_x$ i $-k_x$.



Rysunek 2.7: Zależność $\Delta\sigma/\sigma(0)$ od natężenia pola magnetycznego dla półparabolicznych studni kwantowych o różnych szerokościach.

polu magnetycznym. Efekt ten, pomimo, że nie jest bardzo duży, powinien być mierzalny (podobnie jak i w przypadku trójkątnej QW o skończonej głębokości) przy umiarkowanym polu magnetycznym w granicach ~ 5 T.

ROZDZIAŁ 3

Metoda ISP i jej zastosowanie do „inteligentnego projektowania” struktur niskowymiarowych

3.1 Metoda ISP

We wstępie wspomniano o sytuacjach, w których istnieje potrzeba dokonania rekonstrukcji potencjału studni kwantowej na podstawie z góry zadanego widma energetycznego. Generalnie, możemy na ten problem spojrzeć w następujący sposób: założmy, że mamy zbiór „danych rozproszeniowych” (nie definiujemy ich w tym momencie dokładnie). Czy możemy znaleźć potencjał, który „produkuje” ten zbiór danych? Pozytywna odpowiedź na to pytanie została uzyskana po raz pierwszy przez matematyków I.M. Gel’fanda, B.M. Levitana [74, 75] oraz V.A. Marchenko [76, 77]. Opracowali oni metodę rekonstrukcji potencjału na podstawie danych spektralnych lub rozproszeniowych, która obecnie znana jest pod nazwą *Inverse Scattering Problem Method* (ISP). W dalszej części, metoda ta (podejście) będzie nazywana jako metoda GLM.

W przypadku studni kwantowych, powyższy problem może zostać zredukowany do następującego: założmy, że znamy ilość kwantowych poziomów energetycznych, odległości między nimi oraz głębokość i szerokość QW; czy na podstawie tych danych możemy odtworzyć kształt potencjału? Jak się okazuje, odpowiedź na to pytanie jest twierdząca. Poniżej zostanie przedstawiona idea metody GLM rozwiązania tego problemu.

Rozważmy równanie Schrödingera z potencjałem $V(x)$ w jednym wymiarze:

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right) \phi(x, k) = k^2 \phi(x, k), \quad (3.1)$$

(będziemy wykorzystywali układ jednostek, w którym $\hbar^2/2m = 1$). Metoda GLM może

być przedstawiona jako teoria dyspersji dla funkcji falowej równania Schrödingera w postaci (3.1). Z rozwiązania równania (3.1) z k^2 zespolonym, możemy zdefiniować funkcje Josta $f_1^\pm$ oraz $f_2^\pm$, które są analityczne w górnej połowie płaszczyzny k z następującymi asymptotami:

$$\begin{aligned} f_1^\pm(x, k) &\sim \exp(\pm ikx), \quad \text{dla } x \rightarrow +\infty, \\ f_2^\pm(x, k) &\sim \exp(\mp ikx), \quad \text{dla } x \rightarrow -\infty, \end{aligned}$$

oraz skonstruować funkcje meromorficzne $\Phi(x, k)$ jako

$$\Phi(x, k) = \begin{cases} a^{-1}(k)f_2^+(x, k)\exp(ikx), & \text{Im}\{k\} > 0; \\ f_1^-(x, k^*)\exp(ikx), & \text{Im}\{k\} < 0, \end{cases}$$

gdzie $a^{-1}(k)$ jest współczynnikiem transmisji.

W ten sposób $\Phi(x, k)$ jest całkowicie określona przez strukturę jej osobliwości, która składa się z cięć wzdłuż rzeczywistej części osi k oraz pewnej liczby N biegunów odpowiadających stanom związanym na dodatniej osi urojonej. Waga spektralna cięć jest w istocie funkcją falową stanu rozproszenia pomnożonej przez współczynnik odbicia, uzyskane przy rzeczywistym k . Podobnie, residua w punktach odpowiadających biegunom są w istocie stałymi mnożącymi funkcję falowe stanów związanych. Po dokonaniu transformacji Fouriera, relacja dyspersji dla Φ staje się równaniem całkowym Marchenki [76, 78], które określa funkcje falowe. Odwrotny problem rekonstrukcji potencjału na podstawie danych rozproszeniowych, może być zredukowany do rozwiązania równania całkowego

$$K(x, x') + Q(x, x') + \int_x^\infty K(x, x'')Q(x'', x')dx'' = 0$$

a następnie do prostego różniczkowania jego jądra

$$V(x) = -2 \frac{d}{dx} K(x, x)$$

które określone jest całkowicie w terminach współczynnika odbicia oraz $2N$ parametrów stanów związanych. Tutaj

$$Q(x, x') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} [1 - S(k)] \exp(ik(x + x')) dk + \sum_n^N M_n^2 \exp(-\kappa_n(x + x')),$$

gdzie $S(k)$, E_n oraz M_n^2 są danymi rozproszeniowymi: $S(k)$ - macierz rozproszenia, $E_n = (i\kappa_n)^2$ - stany związane energii, zaś M_n^2 - stałe normalizacyjne.

Jeżeli współczynnik odbicia można przedstawić jako racjonalne funkcje k , równanie Marczenko może być dokładnie rozwiązane przy użyciu technik algebraicznych. Najbardziej prosty przypadek odpowiada współczynnikowi odbicia zanikającemu dla wszystkich rzeczywistych k ($S(k) = 1$). Wówczas wyrażenie dla $Q(x, x')$ zawiera tylko wyrażenie odpowiadające stanom związanym i równanie całkowe redukuje się do systemu N liniowych równań algebraicznych, a potencjał $V(x)$ może być również zrekonstruowany za pomocą $2N$ parametrów. Połowa tych parametrów to N stanów związanych o energiach E_n , $n = 1, 2, 3 \dots N$, zaś druga część to są stałe normalizacyjne M_n^2 , które w fizyce jądrowej uzyskiwane są z danych rozproszeniowych jako $M_n^2 = i \text{Res} S(k)|_{k=i\kappa_n}$. Wybór ten odpowiada transparentnym i symetrycznym potencjałom. Potrzebny zbiór $2N$ parametrów gwarantuje nam istnienie i jednoznaczność rozwiązania odwrotnego problemu rekonstrukcji potencjału. W przypadku studni kwantowych mamy do czynienia z rozpraszaniem elektronów przewodnictwa na potencjałach studni kwantowej wewnątrz mikroskopijnej próbki, przez to w sposób oczywisty druga część danych rozproszeniowych (stałe normalizacyjne) jest niedostępna dla zewnętrznego obserwatora. Niemniej jednak rozwiązanie problemu rekonstrukcji potencjału na podstawie tylko danych o widmie energetycznym istnieje i po raz pierwszy zostało ono przedstawione przez B.M Levitana oraz M.G. Gasymova [74, 79], którzy dowiedli tak zwanego „Twierdzenia o dwu spektrach”. Sens tego twierdzenia jest następujący: po to aby zrekonstruować potencjał **symetryczny** $V(x) = V(-x)$, wystarczy posiadać informację dotyczącą pozycji poziomów energetycznych, bez konieczności posiadania wiedzy o stałych normalizacyjnych. Ten sam fakt został później ponownie odkryty przez H.B. Thackera, C. Quigga oraz J.L. Rosnera [80], którzy modelowali potencjały wiążące ciężkie kwarki i antykwarki w układy mezonów. Zgodnie z powyższymi rozważaniami, nowa strategia poszukiwania rozwiązania problemu rekonstrukcji potencjału studni kwantowej powinna być oparta na specjalnej klasie potencjałów symetrycznych, tzw. bezodbiciowych potencjałów typu Bargmanna[22].

Weźmy symetryczny, ze względu na inwersję zmiennej przestrzennej, potencjał $V(x) = V(-x)$. Załóżmy, że jednowymiarowy potencjał $V(x)$ może być reprezentowany przez funkcję $V_N(x, m^*, E_0)$, która spełnia następujące warunki:

- V_n wspiera dokładnie N stanów związanych układu kwantowego z masą efektywną m^* . Energie stanów związanych pokrywają się z energiami $\epsilon_1, \epsilon_2, \dots, \epsilon_N$ poziomów studni kwantowej.

- $\lim_{x \rightarrow \infty} V_N = E_0$. Ostatnia wartość powinna być rozpatrywana jako głębokość studni kwantowej.

Sortując energie stanów związanych $k^2 = E_0 - \varepsilon_n$ w porządku malejącym $k_1 > k_2 > \dots > k_N$, oraz zakładając, że $\varepsilon_1 = E_0 - k_1^2$ dotyczy stanu podstawowego, do rekonstrukcji potencjału studni kwantowej możemy użyć techniki opracowanej przez Schonefelda [81], przedstawionej poniżej.

Zgodnie z wcześniejszą definicją, $\Phi(x, k)$ jest funkcją meromorficzną z biegunami na dodatniej osi urojonej w punktach $k = i\kappa_n, n = 1, 2, 3, \dots, N$ odpowiadającym stanom związanym $E_n = V(\infty) - \kappa_n^2$. Residua odpowiadające biegunom są proporcjonalne do znormalizowanych funkcji falowych stanów związanych. Stąd, możemy wyrazić funkcję $\Phi(x, k)$ za pomocą struktury jej osobliwości w następujący sposób:

$$\Phi(x, k) = 1 + i \sum_{n=1}^N \frac{c_n e^{i\kappa_n x}}{k - i\kappa_n} \psi_n(x) \quad (3.2)$$

gdzie c_n określa asymptotyczne zachowanie funkcji falowych stanów związanych

$$\psi_n(x)_{x \rightarrow \infty} \sim c_n e^{i\kappa_n x} \equiv \lambda_n(x). \quad (3.3)$$

W dolnej połowie płaszczyzny zespolonej, dla $k = -i\kappa_n$, funkcja $\Phi(x, k)$ jest proporcjonalna do funkcji falowej stanów związanych [80]

$$\Phi(x, -i\kappa_n) = \frac{\psi_m(x)}{\lambda_m(x)}. \quad (3.4)$$

Łącząc ze sobą równania (3.2) i (3.4) otrzymujemy układ N liniowych równań dla N funkcji falowych $\psi_n(x)$, który może być reprezentowany przez

$$\sum_{n=1}^N A_{mn} \psi_n = \lambda_m, \quad (3.5)$$

gdzie macierz A zdefiniowana jest jako

$$A_{mn} = \delta_{mn} + \frac{\lambda_m \lambda_n}{\kappa_m + \kappa_n}. \quad (3.6)$$

Odwracając równanie (3.5) do postaci $\psi = A^{-1} \lambda$, możemy przepisać (3.2) jako

$$\Phi(x, k) = 1 + \sum_{m,n=1}^N \left(\frac{i\lambda_m}{k - i\kappa_m} \right) (A^{-1})_{mn} \lambda_n \quad (3.7)$$

Aby wyprowadzić jawne wyrażenie na $\Phi(x, k)$, dogodnie jest zapisać

$$\Phi(x, k) \equiv \mathcal{N}(x, k) / \det A(x), \quad (3.8)$$

z uwzględnieniem procedury odwrócenia macierzy A . Z definicji macierzy A wynika, że funkcja $\mathcal{N}$ jest wielomianem zmiennej λ_n , w którym dla każdego n mogą występować tylko λ_n^0 i λ_n^2 . Możemy zatem zapisać

$$\mathcal{N} = \sum_S f_S(\{\kappa\}, k) \prod_{p \in S} \lambda_p^2, \quad (3.9)$$

gdzie sumowanie odbywa się po wszystkich podzbiorach S zbioru $\{1, 2, 3, \dots, N\}$, łącznie ze zbiorem pustym i pełnym. W dalszej części przydatnym będzie fakt, że wkład zbioru pustego do (3.9) powinien wynosić

$$f_\emptyset(\{\kappa\}, k) = 1. \quad (3.10)$$

Przyrównując równanie (3.9) z wyrażeniem dla $\mathcal{N}$ otrzymanym z (3.7) i (3.8) możemy pokazać, że

$$f_S(\{\kappa\}, k) = g_S(\{\kappa\}) \prod_{p \in S} \left(\frac{k + i\kappa_p}{k - i\kappa_p} \right), \quad (3.11)$$

gdzie funkcja g_S jest niezależna od k . Powyższe wyrażenie może być postrzegane w następujący sposób. Zgodnie z równaniami (3.7)-(3.9), f_S musi być równe iloczynowi wyrażenia $\prod_{p=1}^N (k - i\kappa_p)^{-1}$ i wielomianu rzędu N o zmiennej k (w celu zapewnienia warunku, że $\Phi(x, k) \rightarrow 1$ jeśli $k \rightarrow \infty$). Zauważmy, że zgodnie z równaniem (3.7), residuum w biegunie $\mathcal{N}$ w punkcie $k = i\kappa_p$ zawiera czynnik λ_p^2 . Dlatego biegun $(k - i\kappa_p)^{-1}$ może występować w funkcji f_S tylko wówczas, jeśli $p \in S$, tak więc f_S musi być dane za pomocą iloczynu wyrażenia $\prod_{p \in S} (k - i\kappa_p)^{-1}$ oraz wielomianu zmiennej k , którego rząd jest równy liczbie elementów w zbiorze S . Zapisując równanie (3.4) w postaci

$$\Phi(x, -i\kappa_p) = \frac{1}{\lambda_p} \sum_{q=1}^N (A^{-1})_{pq} \lambda_q \quad (3.12)$$

widzimy, że $\mathcal{N}(x, -i\kappa_p)$ nie zawiera żadnych wyrażeń, w których występuje współczynnik λ_p^2 . Tak więc funkcja f_S musi zanikać w punktach $k = i\kappa_p$ dla każdego $p \in S$.

W kolejnym kroku należy określić funkcję $g_S(\{\kappa\})$. Z równań (3.7) i (3.12) można zauważyć, że

$$\lim_{k \rightarrow i\kappa_p} (k - i\kappa_p) \mathcal{N}(x, k_p) = i\lambda_p^2 \mathcal{N}(x, -i\kappa_p) \quad (3.13)$$

Uwzględniając (3.9) i (3.11) po obydwu stronach równania (3.13), możemy otrzymać w wyniku

$$g_S(\{\kappa\}) = g_\emptyset \left[\prod_{p \in S} (2\kappa_p)^{-1} \right] \left[\prod_{(n \neq m) \in S} \left| \frac{\kappa_n - \kappa_m}{\kappa_n + \kappa_m} \right| \right]. \quad (3.14)$$

Zgodnie z (3.10) oraz (3.11), $g_0 = 1$, tak więc

$$\mathcal{N}(x, k) = \sum_S \left[\prod_{p \in S} \frac{\lambda_p^2}{2\kappa_p} \left(\frac{k + i\kappa_p}{k - i\kappa_p} \right) \right] \prod_{(n \neq m) \in S} \left| \frac{\kappa_n - \kappa_m}{\kappa_n + \kappa_m} \right|. \quad (3.15)$$

Ponieważ $\Phi(x, k) \rightarrow 1$ jeśli $k \rightarrow \infty$, wyznacznik A musi być granicą wyrażenia (3.15) przy $k \rightarrow \infty$. Ponadto oznacza to, że samo równanie (3.15) może być zapisane jako wyznacznik. Ostatecznie otrzymujemy:

$$\Phi(x, k) = \frac{\det A(x, k)}{\det A(x, \infty)} = \frac{\sum_S \left[\prod_{p \in S} \frac{\lambda_p^2}{2\kappa_p} \left(\frac{k + i\kappa_p}{k - i\kappa_p} \right) \right] \prod_{(n \neq m) \in S} \left| \frac{\kappa_n - \kappa_m}{\kappa_n + \kappa_m} \right|}{\sum_S \left[\prod_{p \in S} \frac{\lambda_p^2}{2\kappa_p} \right] \prod_{(n \neq m) \in S} \left| \frac{\kappa_n - \kappa_m}{\kappa_n + \kappa_m} \right|} \quad (3.16)$$

gdzie macierz $A(x, k)$ zdefiniowana jest jako

$$[A(x, k)]_{pq} = \delta_{pq} + \frac{\lambda_p \left(\frac{k + i\kappa_p}{k - i\kappa_p} \right)^{\frac{1}{2}} \lambda_q \left(\frac{k + i\kappa_q}{k - i\kappa_q} \right)^{\frac{1}{2}}}{\kappa_p + \kappa_q}. \quad (3.17)$$

Funkcje falowe stanów związanych mogą być teraz określone poprzez residua odpowiadające biegunom (3.16), jako

$$\psi_p(x) = \frac{\lambda_p}{D(x)} \sum_{S \not\ni p} \left[\prod_{q \in S} \frac{\lambda_q^2}{2\kappa_q} \left(\frac{\kappa_p - \kappa_q}{\kappa_p + \kappa_q} \right) \right] \prod_{(n \neq m) \in S} \left| \frac{\kappa_n - \kappa_m}{\kappa_n + \kappa_m} \right|, \quad (3.18)$$

gdzie

$$D(x) = \det A(x, \infty) = \sum_S \left[\prod_{p \in S} \frac{\lambda_p^2}{2\kappa_p} \right] \prod_{(n \neq m) \in S} \left| \frac{\kappa_n - \kappa_m}{\kappa_n + \kappa_m} \right| \quad (3.19)$$

Potencjał $V(x)$ może być „odzyskany” z funkcji $\Phi(x, k)$, zauważając, że [82]

$$\lim_{k \rightarrow \infty} k \frac{\partial \Phi}{\partial x}(x, k) = \frac{i}{2} [V(x) - V(\infty)], \quad (3.20)$$

oraz wykorzystując fakt (wynioskowany z licznika (3.16)), że

$$\det A(x, k)_{k \rightarrow \infty} \sim D(x) - \frac{idD/dx}{k} + O(k^2), \quad (3.21)$$

Z powyższych wyrażeń otrzymujemy

$$V(x) = V(\infty) - 2 \frac{d^2}{dx^2} \ln D(x). \quad (3.22)$$

Otrzymany powyżej rezultat (3.22) prawdziwy jest dla dowolnego bezodbiowego jednowymiarowego potencjału. Niemniej jednak, jak już było wspomniane wcześniej, w

naszym przypadku nie posiadamy informacji dotyczących stałych normalizacyjnych c_n wymaganych w wyrażeniu (3.3). Dlatego należy rozważyć przypadek potencjału symetrycznego w jednym wymiarze [82]:

$$V(x) = V(-x).$$

W związku z powyższym, funkcje falowe stanów związanych powinny spełniać warunki parzystości

$$\psi_p(-x) = (-1)^{p+1} \psi_p(x); \quad (3.23)$$

oraz

$$\psi'_p(-x) = (-1)^p \psi'_p(x). \quad (3.24)$$

W pierwszym kroku określmy funkcję $\Psi(0, k)$ dla symetrycznego transparentnego potencjału. Ponieważ funkcje falowe o numerach parzystych (funkcje te są nieparzyste!) znikają w $x = 0$, z równania (3.2) wynika, że $\Psi(0, k)$ posiada bieguny w punktach $k = i\kappa_p$ dla nieparzystych wartości p . Stąd $\Psi(0, k)$ dana jest przez iloczyn $\prod_{p \text{ odd}} (k - i\kappa_p)^{-1}$ i wielomianu k , którego stopień jest równy liczbie parzystych stanów związanych (dla N parzystego, stopień $= N/2$, zaś dla N nieparzystego stopień $= (N + 1)/2$). Rozważmy pierwszy przypadek dla parzystych wartości N . Zgodnie z (3.4), funkcja $\Phi(0, -i\kappa_p) = 0$ dla parzystych wartości p . Wraz z warunkami asymptotycznymi $\Phi \rightarrow 1$ jeśli $k \rightarrow \infty$, wymaganie to pozwala na uzyskanie wyniku w postaci

$$\Phi(0, k) = \prod_{p=1}^N (k + i\tau_p \kappa_p)^{\tau_p} \quad (N \text{ parzyste}), \quad (3.25)$$

gdzie

$$\tau_p \equiv (-1)^p. \quad (3.26)$$

Przypadek dla N nieparzystych może być potraktowany jako przypadek graniczny dla N parzystych z $\kappa_N \rightarrow 0$. Z warunku (3.3) można pokazać, że unormowanie funkcji falowej $\psi_N(x)$ wymaga aby $\psi_N(x) \rightarrow 0$ dla wszystkich x jeśli $\kappa_N \rightarrow 0$. Tak więc, z równania (3.2) funkcja $\Phi(x, k)$ dla parzystych N i $\kappa = 0$ jest identyczna z funkcją $\Phi(x, k)$ dla $N - 1$ stanów związanych. A zatem, w punkcie $x = 0$ mamy

$$\Phi(0, k) = k \prod_{p=1}^N (k + i\tau_p \kappa_p)^{\tau_p} \quad (N \text{ nieparzyste}), \quad (3.27)$$

Wykorzystując (3.25) oraz (3.27) możemy obliczyć $\psi_p(0)$ i c_p dla nieparzystych wartości p . Zgodnie z (3.2) i (3.4) mamy

$$[\psi_p(0)]^2 = -i \lim_{k \rightarrow i\kappa_p} [(k - i\kappa_p)\Phi(0, k)]\Phi(0, -i\kappa_p) \quad (3.28a)$$

$$= \frac{1}{2}(\kappa_p)^{-\tau_N} \prod_{q \neq p} |\kappa_p^2 - \kappa_q^2|^{\tau_q}, \quad p \text{ nieparzyste}, \quad (3.28b)$$

Ponownie używając (3.25) oraz (3.27) otrzymujemy

$$c_p^2 = [\lambda_p(0)]^2 = -i \lim_{k \rightarrow i\kappa_p} [(k - i\kappa_p)\Phi(0, k)]/\Phi(0, -i\kappa_p) \quad (3.29a)$$

$$= 2\kappa_p \prod_{q \neq p} \left| \frac{\kappa_p + \kappa_q}{\kappa_p - \kappa_q} \right|, \quad p \text{ nieparzyste}, \quad (3.29b)$$

Zarówno (3.28b) jak i (3.29b) są prawdziwe dla parzystych i nieparzystych wartości N . Wyrażenie (3.29b) i podobne wyrażenie (3.35b) przedstawione poniżej są dokładnie warunkami dla symetrycznego potencjału, które zostały otrzymane w [80] poprzez odwołanie się do właściwości układu N rozwiązań Kortewega-de Vriesa.

Analogiczne wyniki dla parzystych wartości p mogą być otrzymane poprzez rozważenie pierwszej pochodnej funkcji Φ w punkcie $x = 0$. Dogodnym jest skonstruować funkcję

$$G(x, k) = \frac{\partial \Phi}{\partial x}(x, k) - ik\Phi(x, k) \quad (3.30a)$$

$$= -ik + \sum_{q=1}^N \lambda_q(x) \psi_q(x) + i \sum_{q=1}^N \frac{\lambda_q(x) \psi'_q(x)}{k - i\kappa_q}, \quad (3.30b)$$

gdzie ostatnie wyrażenie wynika z (3.2). Z (3.4) i (3.30a) widzimy, że

$$G(0, -i\kappa_p) = \psi'_p(0)/c_p. \quad (3.31)$$

Funkcja ta zanika dla nieparzystych wartości p w asymetrycznym potencjale. Równanie (3.30b) pokazuje, że $G(0, i\kappa_p)$ posiada proste bieguny dla parzystych p i dąży asymptotycznie do $-ik$ jeżeli $k \rightarrow \infty$. W konsekwencji możemy zapisać

$$G(0, k) = -i \prod_{p=1}^N (k - i\tau_p \kappa_p)^{-\tau_p}, \quad N \text{ nieparzyste}. \quad (3.32)$$

Tak jak poprzednio możemy uzyskać wyrażenie słuszne dla parzystych wartości N podstawiając $\kappa_N \rightarrow 0$ w równaniu (3.32), po czym otrzymujemy

$$G(0, k) = -ik \prod_{p=1}^N (k - i\tau_p \kappa_p)^{-\tau_p}, \quad N \text{ parzyste}. \quad (3.33)$$

Korzystając z (3.32) i (3.33) możemy teraz obliczyć $[\psi'_p(0)]^2$ oraz c_p^2 dla parzystych wartości p . Zgodnie z (3.30b) i (3.31) mamy

$$[\psi'_p(0)]^2 = -i \lim_{k \rightarrow i\kappa_p} [(k - i\kappa_p)G(0, k)]G(0, -i\kappa_p) \quad (3.34a)$$

$$= \frac{1}{2}(\kappa_p)^{\tau_N} \prod_{q \neq p} |\kappa_p^2 - \kappa_q^2|^{-\tau_p}, \quad p \text{ parzyste}, \quad (3.34b)$$

oraz

$$c_p^2 = -i \lim_{k \rightarrow i\kappa_p} [(k - i\kappa_p)G(0, k)]G(0, -i\kappa_p) \quad (3.35a)$$

$$= 2\kappa_p \prod_{q \neq p} \left| \frac{\kappa_p^2 + \kappa_q^2}{\kappa_p^2 - \kappa_q^2} \right|, \quad p \text{ parzyste}, \quad (3.35b)$$

Korzystając następnie z (3.19) otrzymujemy

$$D(x) = \sum_S \exp \left[-2x \sum_{p \in S} \kappa_p \right] \prod(S, \tilde{S}), \quad (3.36)$$

gdzie $\tilde{S}$ oznacza dopełnienie zbioru S , zaś

$$\prod(S, \tilde{S}) \equiv \prod_{m \in S, n \in \tilde{S}} \left| \frac{\kappa_m + \kappa_n}{\kappa_m - \kappa_n} \right|. \quad (3.37)$$

Ostatecznie, otrzymując zrekonstruowany potencjał w postaci [83]:

$$V_N(x, E_0) = E_0 - 2 \frac{d^2}{dx^2} \ln D(x), \quad (3.38)$$

gdzie

$$D(x) = \sum_S \exp(-2x \sum_{p \in S} k_p) \prod(S, \tilde{S})$$

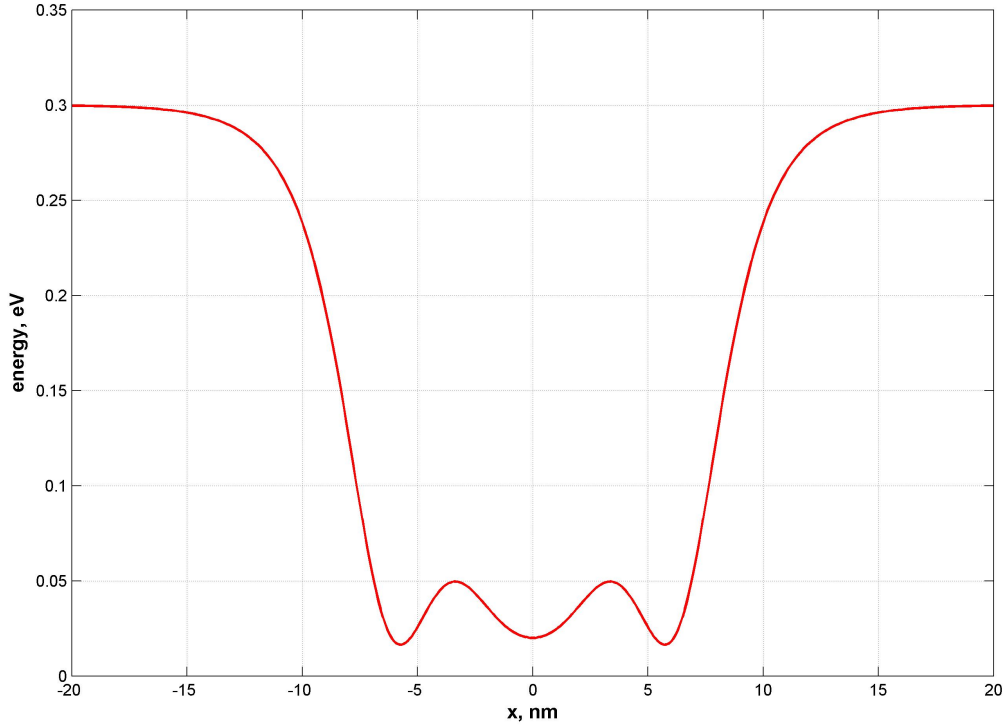
$$\prod(S, \tilde{S}) = \prod_{m \in S, n \in \tilde{S}} \frac{k_m + k_n}{k_m - k_n}$$

Występująca w wyrażeniu (3.38) funkcja $D(x)$ posiada nader skomplikowaną strukturę, ponieważ w tym iloczynie sumowanie odbywa się po wszystkich podzbiorach zbioru S , stanowiącego zbiór danych rozproszeniowych.

Przedstawione powyżej rozważania posłużyły do opracowania przez nas procedury, służącej do rekonstrukcji potencjału na podstawie zbioru n poziomów energetycznych. Na jej podstawie został przygotowany program w środowisku MatLab, służący do rekonstrukcji potencjałów studni kwantowych na podstawie zadanego widma N poziomów energetycznych, długości, szerokości oraz głębokości studni kwantowej. Szczegółowe

omówienie solvera oraz możliwości jego zastosowań znajdują się w kolejnych rozdziałach, zaś w tym miejscu zostanie pokazany tylko przykład zrekonstruowanego potencjału.

Na Rysunkach 3.1 i 3.2 przedstawione są dwa zrekonstruowane potencjały studni kwantowych, odpowiednio dla: $N = 4$ oraz $N = 5$ poziomów energetycznych, głębokości studni $U_0 = 0.30$ eV oraz $U_0 = 0.42$ eV i szerokości studni $d = 40$ nm w obydwu przypadkach.

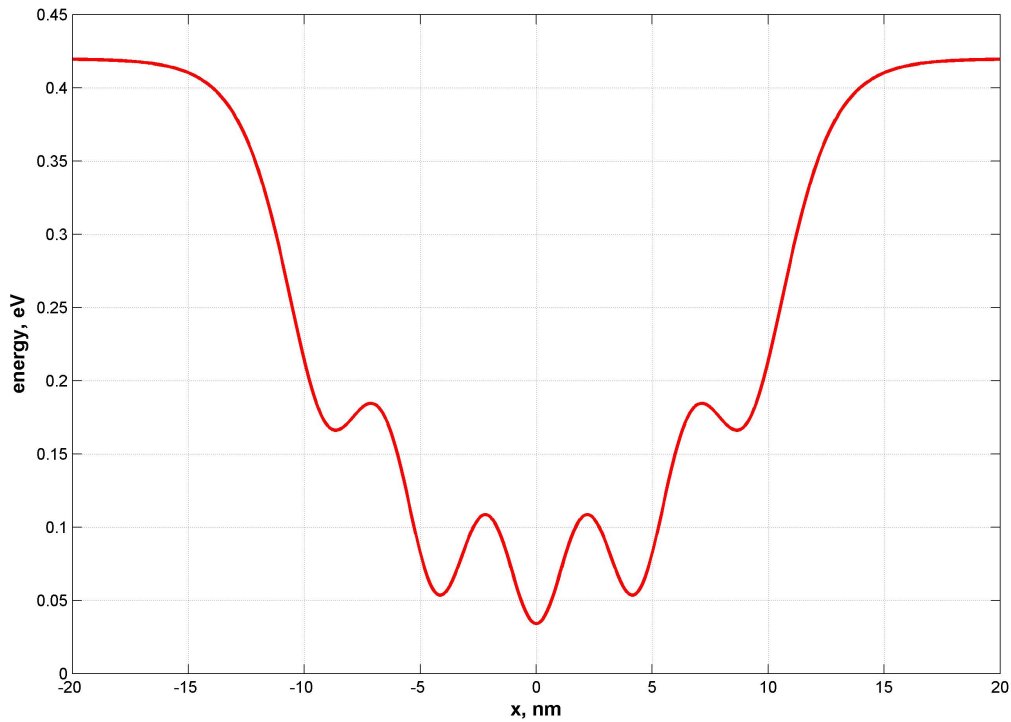


Rysunek 3.1: Przykład rekonstrukcji potencjału studni kwantowej na podstawie zadanego widma energetycznego odpowiadającego następującemu zbiorowi poziomów energetycznych:

$$\varepsilon_1 = 0.05, \varepsilon_2 = 0.10, \varepsilon_3 = 0.17, \varepsilon_4 = 0.26.$$

Jak widać z Rysunków 3.1 oraz 3.2 kształt zrekonstruowanego potencjału nie jest trywialny. Zasadne zatem staje się pytanie, czy możliwe jest wytworzenie za pomocą obecnie stosowanych technik (np. MBE) struktury, która zawierałaby studnię kwantową o tak złożonym kształcie?

Metoda ISP jak większość problemów odwrotnych jest typu „źle postawionego” (ang. *ill-posed*). W literaturze istnieją dwie definicje tego typu problemów, pierwsza należy do J. Hadamarda [84], zaś druga do A. Tikhonova [85]. Ponieważ te dwie definicje w niektórych okolicznościach pokrywają się, a różnica między nimi nie ma znaczenia dla naszej dyskusji, przypomnijmy pierwszą z nich. Niech mamy dwie przestrzenie metryczne (Z, U) , które posiadają odpowiednie metryki ρ_Z i ρ_U . Zgodnie z definicją Hadamarda,



Rysunek 3.2: Kolejny przykład rekonstrukcji potencjału studni kwantowej na podstawie zadanego widma energetycznego odpowiadającego następującemu zbiorowi poziomów energetycznych:

$$\varepsilon_1 = 0.098, \varepsilon_2 = 0.162, \varepsilon_3 = 0.231, \varepsilon_4 = 0.295, \varepsilon_5 = 0.355.$$

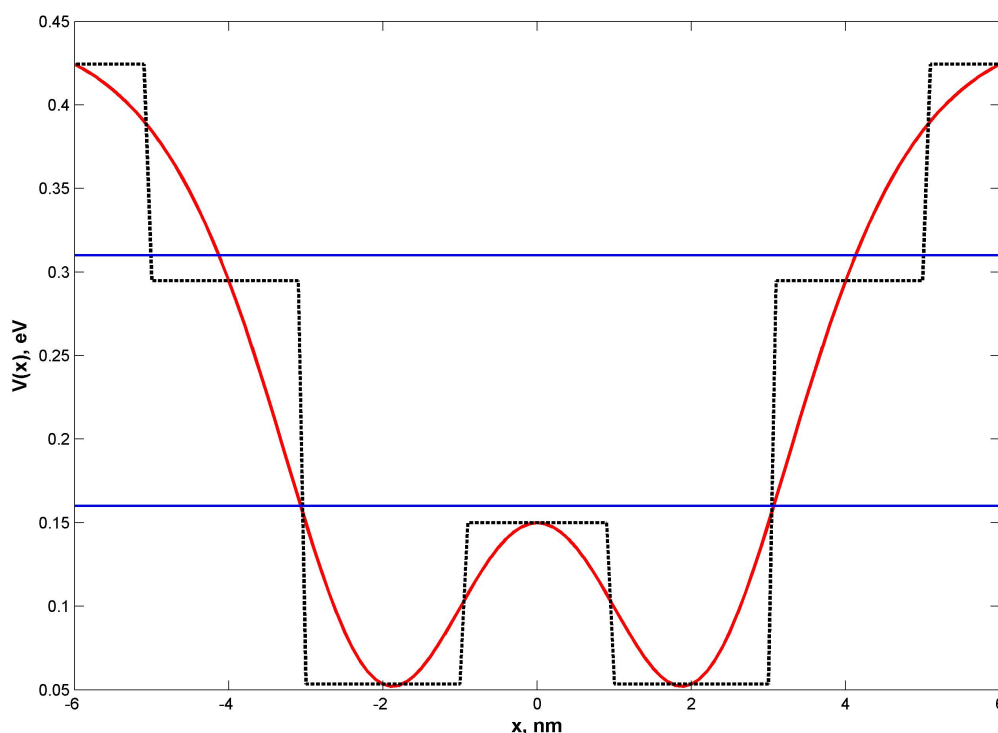
dany problem jest „dobrze postawiony” na parze przestrzeni (Z, U) , gdzie Z jest „przestrzenią rozwiązań” zaś U jest „przestrzenią warunków początkowych”, jeśli:

1. dla każdego $u \in U$ istnieje rozwiązanie $z \in Z$,
2. rozwiązanie jest jednoznaczne,
3. dla każdego $\varepsilon > 0$ istnieje taka $\delta(\varepsilon)$, że dla każdego $u_1, u_2 \in U$ z warunku $\rho(u_1, u_2) \leq \delta(\varepsilon)$ bezpośrednio wynika warunek $\rho(z_1, z_2) \leq \varepsilon$.

Naruszenie któregośkolwiek z tych warunków powoduje, że problem jest „źle postawiony”.

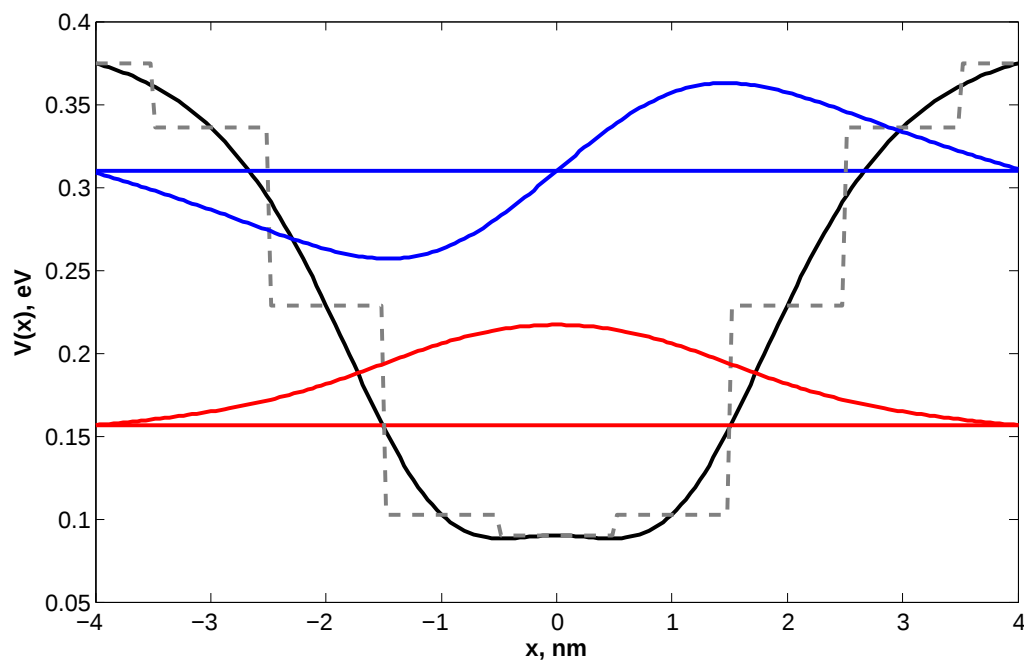
W naszym konkretnym przypadku oznacza to, że nie istnieje liniowa zależność zrekonstruowanego potencjału od warunków początkowych. Innymi słowy, niewielka zmiana widma energetycznego, powoduje nieprzewidywalną zmianę zrekonstruowanego potencjału. Lecz jeśli potencjał studni kwantowej jest aktualnie ustalony, problem znalezienia odpowiedniego potencjału może być sprowadzony do problemu „*well-posed*”, poprzez zastąpienie inicjującego potencjału aproksymacją schodkową (lub inną dowolną

krzywą aproksymacyjną). W następnym kroku rozwiązujemy ponownie zagadnienie własne równania Schrödingera i w ten sposób mamy pewność, że uzyskane nowe widmo energetyczne będzie w istotny sposób różniło się od widma inicjującego.

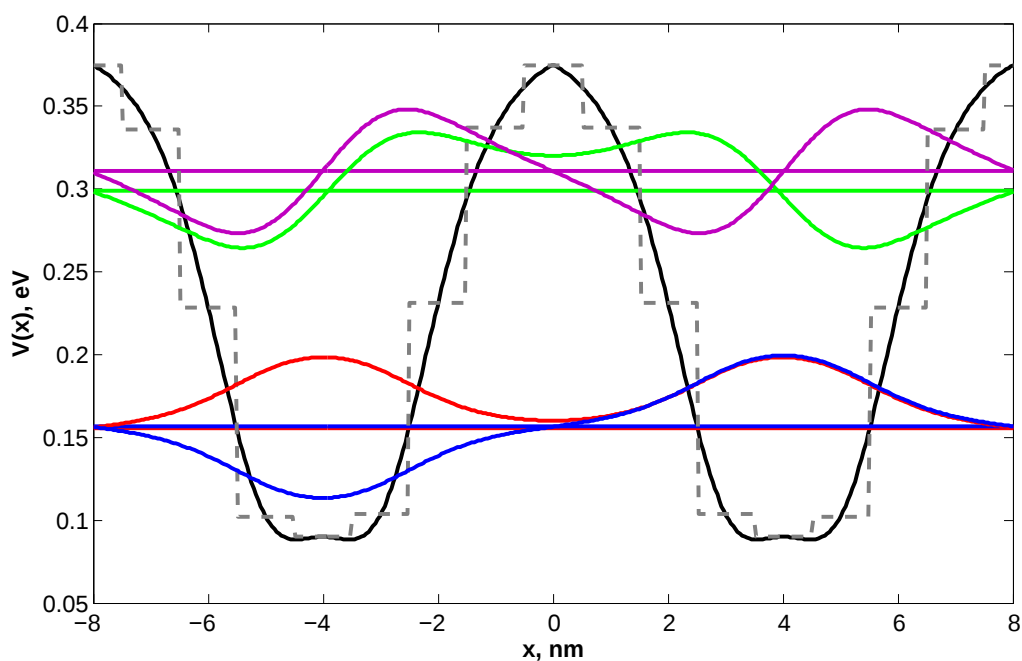


Rysunek 3.3: Przykład zrekonstruowanego potencjału studni kwantowej za pomocą metody ISP. Czarna linia ciągła - zrekonstruowany potencjał; linia przerywana - aproksymacja schodkowa zrekonstruowanego potencjału; linie niebieskie - poziomy energetyczne (poszczególne wartości stanów skwantowanych energii)

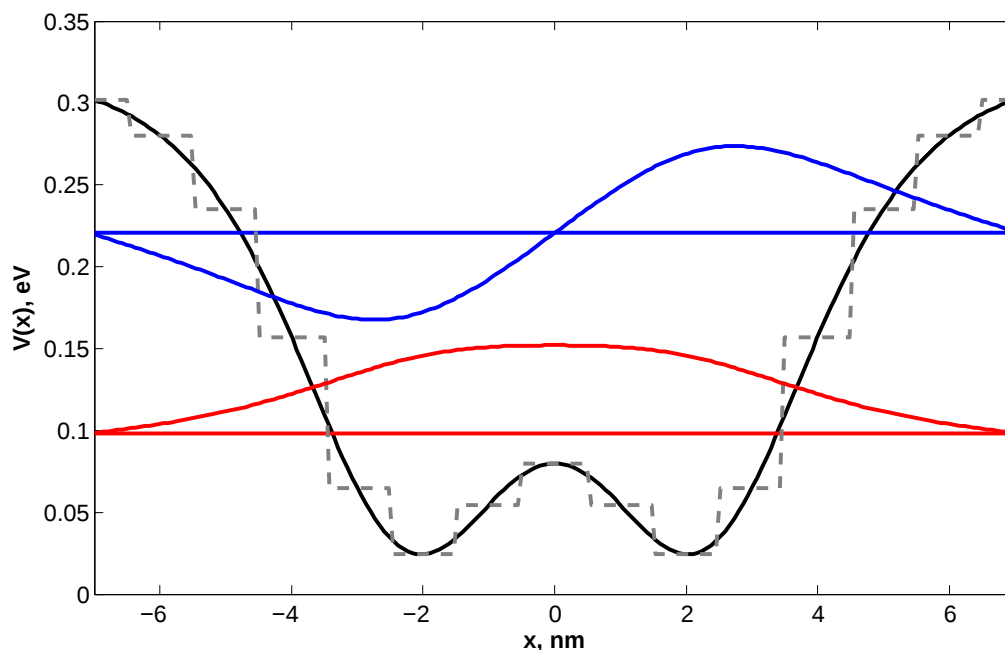
Na Rysunku 3.3 pokazany został przykład zrekonstruowanego potencjału za pomocą ISP oraz jego aproksymacja schodkowa (czarna linia przerywana). Uzyskany w ten sposób kształt potencjału jest znacznie mniej skomplikowany, przez co istnieje możliwość fizycznej realizacji struktury zawierającej studnię kwantową z takim potencjałem, stosując np. metodę MBE. Na Rysunkach 3.4 oraz 3.6 przedstawione są kolejne przykłady potencjałów odtworzonych za pomocą opisywanej metody na podstawie dwupoziomowego widma energetycznego wraz z aproksymacją schodkową, położeniem poziomów energetycznych oraz odpowiadającymi im funkcjami falowymi. Na podstawie przedstawionych potencjałów można też zbudować podwójne studnie kwantowe (Rysunki 3.5 i 3.7), które mogą być uznane jako podstawa supersieci, ponieważ szerokości powstających w nich minipasm energetycznych zdeteminowane są głównie poprzez położenie poziomów energetycznych w dwóch sąsiednich studniach. Na skutek wzajemnego tune-



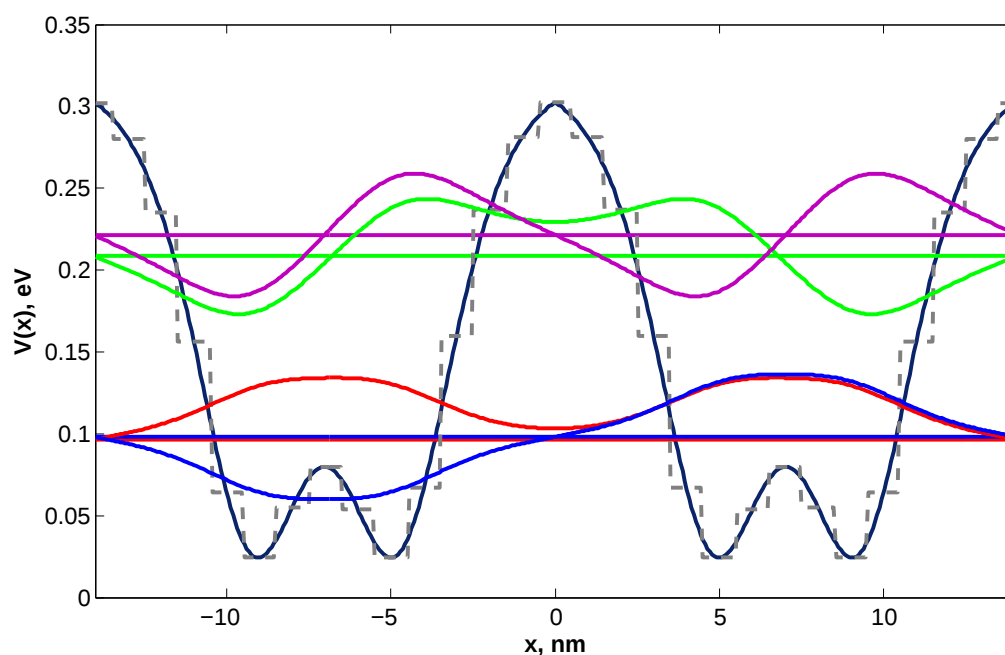
Rysunek 3.4: Zrekonstruowany potencjał studni kwantowej za pomocą metody ISP. Czarna ciągła linia - zrekonstruowany potencjał; linia przerywana - aproksymacja schodkowa zrekonstruowanego potencjału; czerwonym i niebieskim kolorem oznaczone są wartości poziomów energetycznych i odpowiadające im funkcje falowe (numeryczne wartości umieszczone są w Tabeli 3.1).



Rysunek 3.5: Podwójna studnia kwantowa skonstruowana na bazie potencjału przedstawionego na Rysunku 3.4. W przypadku stanu wzbudzonego widoczne jest rozszczepienie poziomów energetycznych na skutek tunelowania, zaś dla stanu podstawowego jest ono znikome (numeryczne wartości pokazane są w Tabeli 3.1).



Rysunek 3.6: Kolejny przykład zrekonstruowanego potencjału za pomocą metody ISP. Oznaczenia podobne jak na Rysunku 3.4.



Rysunek 3.7: Podwójna studnia kwantowa skonstruowana na bazie potencjału przedstawionego na Rysunku 3.6.

lowania funkcji falowych do sąsiednich studni kwantowych, uzyskujemy rozszczepienie poziomów energetycznych, co w przypadku supersieci powoduje powstanie minipasm. Istotnie, jeżeli dwie studnie kwantowe są zbliżone na odległość, przy której zachodzi tunelowanie elektronów z jednej studni do drugiej, ich funkcje falowe zauważalnie zachodzą jedna na drugą. Funkcja falowa takiego układu staje się kombinacją liniową funkcji

Tabela 3.1: Widmo energetyczne QW i DQW przedstawionych na Rysunkach 3.4-3.7 (wszystkie energie w eV).

ε	energie wejściowe	energie wyjściowe	aproksymacja schodkowa
Rysunek 3.4			
ε_1	0.1600	0.1563	0.1588
ε_2	0.3100	0.3099	0.3111
Rysunek 3.5			
ε_1	—	0.1558	0.1585
ε_2	—	0.1565	0.1565
ε_3	—	0.2990	0.3002
ε_4	—	0.3107	0.3123
Rysunek 3.6			
ε_1	0.1000	0.0980	0.0993
ε_2	0.2200	0.2207	0.2229
Rysunek 3.7			
ε_1	—	0.0965	0.0969
ε_2	—	0.0982	0.0985
ε_3	—	0.2087	0.2096
ε_4	—	0.2215	0.2227

poszczególnych studni. Wówczas każdy poziom energetyczny ε_n ulega rozszczepieniu na dwa, przy czym różnica energii $|\varepsilon_n'' - \varepsilon_n'|$ zwiększa się wraz ze zmniejszeniem odległości między studniami kwantowymi, tj. przy zwiększaniu nachodzenia funkcji falowych na siebie. Przy zbliżeniu n studni kwantowych na odległości, przy których zachodzi tunelowanie, widmo układu będzie w sposób istotny zależało od stopnia zachodzenia na siebie funkcji falowych, centrowanych na różnych studniach tworzących supersieć, lecz szerokość minipasm, powstających w taki sposób, głównie będzie określona poprzez zachodzenie na siebie funkcji falowych z sąsiednich studni. W Tabeli 3.1 przedstawione jest porównanie wartości energii poszczególnych poziomów kwantowych, odpowiadającym potencjałom z Rysunków 3.4-3.7. „Energie wejściowe” stanowią zbiory założonych

energii kwantowych poziomów, dla których jest rekonstruowany potencjał. „Energie wyjściowe” uzyskiwane są w wyniku rozwiązania RS ze zrekonstruowanym potencjałem, zaś w ostatniej kolumnie zatytułowanej jako „aproksymacja schodkowa” umieszczone jest spektrum energetyczne otrzymane z rozwiązania RS z aproksymacją schodkową zrekonstruowanego potencjału.

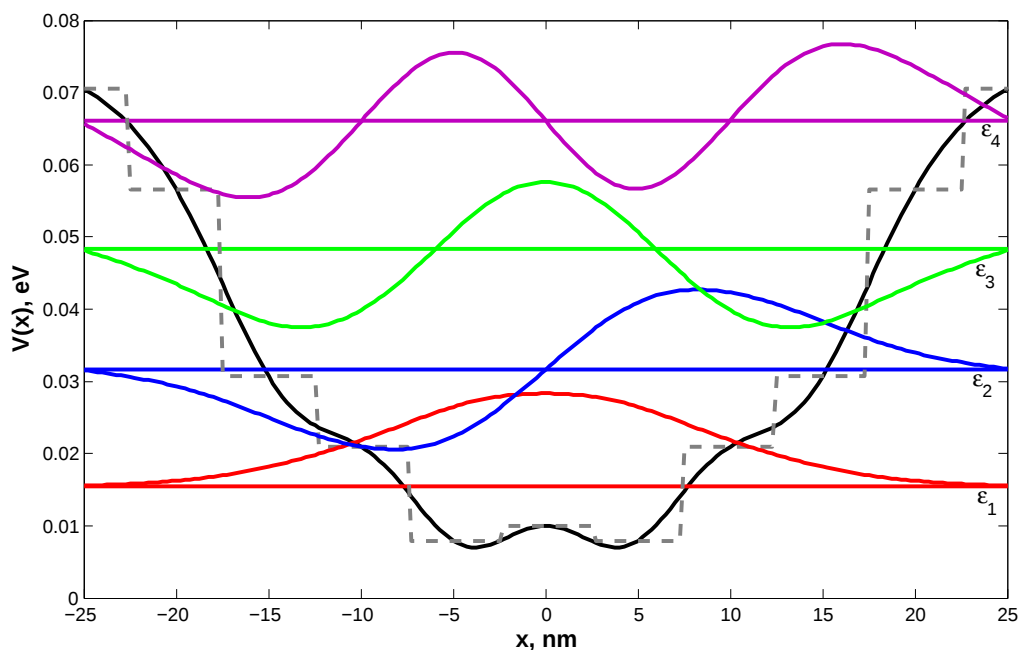
3.2 Zastosowanie metody ISP

Jako przykład możliwego zastosowania omawianej w niniejszej pracy techniki ISP, rozważmy następującą sytuację. Wiadomym jest, że jedną z bardziej atrakcyjnych cech urządzeń opartych na bazie QW (np. rezonansowy tranzystor tunelowy lub bardziej ogólnie struktury wykorzystujące zjawisko tunelowania rezonansowego - RTS), jest dyskretne widmo energetyczne. Niemniej jednak, bardzo często zdarza się, że uzyskanie takiego widma możliwe jest tylko w bardzo niskiej temperaturze, około kilku K. Dzieje się tak ponieważ odległości między poziomami kwantowymi są rzędu $\sim \text{meV}$, podczas gdy szerokość tych poziomów może być również tego samego rzędu w wyższej temperaturze (np. w temperaturze pokojowej). Tak więc po to aby sąsiednie poziomy energetyczne nie pokrywały się, temperatura powinna być obniżona do około kilku K, dzięki czemu możliwe jest uzyskanie wystarczającej rozdzielczości pików prądu tunelowego na charakterystyce I-V struktury RTS. Z drugiej zaś strony, w różnych zastosowaniach pożądane jest, aby urządzenia oparte na RTS mogły działać w wyższych temperaturach (w idealnym przypadku, w temperaturze pokojowej).

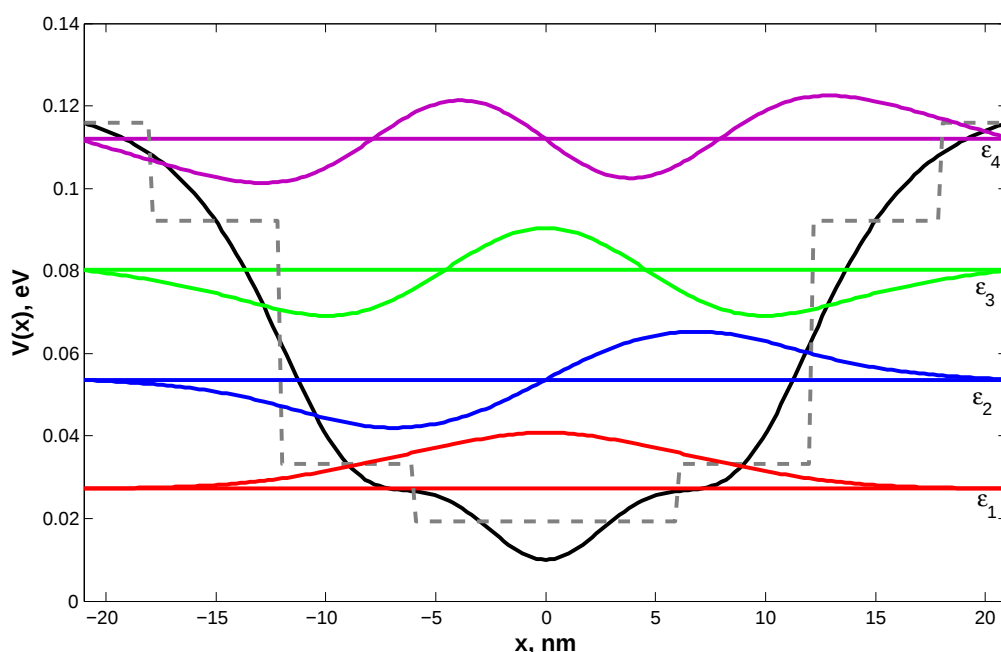
Założmy teraz, że mamy określone spektrum QW, czyli zbiór kwantowych poziomów z ustalonymi odległościami między nimi w taki sposób, że nie pokrywają się one w wyższej temperaturze, to oznacza, że odstęp między poziomami są rzędu $2.5k_B T$. Mając na uwadze rzeczywiste struktury, powinniśmy ograniczyć liczbę poziomów kwantowych do pewnych rozsądnych wartości, powiedzmy najwyżej od 3 do 6, ponieważ głębokość QW może być około 0,2 – 0,4 eV.

W związku z powyższym na Rysunkach 3.8 i 3.9 przedstawione są efektywne potencjały zrekonstruowane za pomocą metody ISP, spełniające omawiane wymagania w temperaturach 77 K i 130 K [83].

Wydaje się, że takie podejście pozwoli inżynierom i technologom wybrać odpowied-



Rysunek 3.8: Przykład potencjału QW zrekonstruowanego na bazie 4 poziomów energetycznych, które nie zachodzą na siebie w temperaturze (szczegóły w tekście) 77 K. Kolorowe linie i krzywe (niebieska, czerwona, purpurowa i zielona) odpowiadają poziomom energetycznym i funkcjom falowym (numeryczne wartości umieszczone są w Tabeli 3.2).



Rysunek 3.9: Przykład potencjału QW zrekonstruowanego na bazie 4 poziomów energetycznych, które nie zachodzą na siebie w temperaturze 130 K (numeryczne wartości umieszczone są w Tabeli 3.2)

nią głębokość i widmo energetyczne, tak aby stworzyć strukturę o wymaganej charakterystyce, przez co może mieć wiele aplikacji. Dla przykładu, autor [86] opisuje wykorzystanie przejść między podpasmowych w sprzężonych studniach kwantowej GaAs do

Tabela 3.2: Widmo energetyczne QW pokazanych na Rysunkach 3.8 i 3.9. Wszystkie oznaczenia są analogiczne do umieszczonych w Tabeli 3.1.

ε	energie wejściowe	energie wyjściowe	aproksymacja schodkowa
Rysunek 3.8			
ε_1	0.016	0.016	0.016
ε_2	0.033	0.032	0.032
ε_3	0.050	0.048	0.049
ε_4	0.066	0.066	0.067
Rysunek 3.9			
ε_1	0.028	0.027	0.028
ε_2	0.056	0.054	0.054
ε_3	0.084	0.080	0.081
ε_4	0.112	0.111	0.110

detekcji promieniowania w zakresie $2 - 5 \text{ THz}$. Nasze rezultaty pokazują, że przejścia między podpasmove w strukturze zawierającej sprzężoną podwójną studnię kwantową (rysunek 3.7) mogą być użyte do detekcji promieniowania w znacznie większym zakresie, tzn. od 19 THz do nawet 230 THz . Łatwo jest pokazać, że niektóre przejścia pomiędzy dwoma rozszczepionymi stanami (podstawowym i wzbudzonym), powstałymi w wyniku tunelowania pomiędzy sprzężonymi symetrycznymi studniami, są zabronione. Niemniej jednak, w zewnętrznym polu elektrycznym przejścia te stają się dozwolone i odpowiadają częstotliwościom w regionie 19 THz . Przejścia pomiędzy stanem podstawowym (którego rozszczepienie jest znikome) a rozszczepionymi stanami wzbudzonymi są dozwolone (z uwzględnieniem parzystości funkcji falowej) nawet w zerowym zewnętrznym polu elektrycznym. Ich częstotliwość jest w zakresie około 230 THz . Zmieniając pole elektryczne przyłożone w poprzek struktury można przestroić detektor dla szerokiego zakresu częstotliwości terahercowych. Ponieważ stworzone oprogramowanie umożliwia nie tylko obliczenie widma energetycznego danej struktury, ale również i funkcji falowych nośników ładunku, możemy wyznaczyć pozostałe ważne cechy urządzenia, na przykład siłę oscylatora dla przejścia.

W następnym rozdziale przedstawione jest zastosowanie opisanej metody rekonstrukcji potencjału studni kwantowej na podstawie zadanego widma energetycznego do celów zaprojektowania detektora promieniowania o częstotliwości w zakresie THz.

3.3 Opis programu

Do celów rekonstrukcji potencjału studni kwantowej na podstawie zadanego widma energetycznego został przygotowany program komputerowy w środowisku MatLab. Nazwa programu MATLAB pochodzi od angielskich słów MATrix LABoratory, gdyż początkowo program służył do wykonywania macierzowych obliczeń numerycznych. W obecnej wersji R2013b program ten potrafi znacznie więcej. Dzięki dużej ilości funkcji oraz dodatkowych bibliotek, możliwości pisania własnych funkcji i programów zorientowanych obiektowo (MATLAB posiada własny język programistyczny) oraz integracji z innymi językami programistycznymi (JAVA, C/C++, Fortran), MATLAB jest potężnym interaktywnym środowiskiem do wykonywania zaawansowanych obliczeń naukowych i inżynierskich oraz do wykonywania symulacji komputerowych. Rozbudowane narzędzia graficzne, umożliwiają tworzenie dwu i trójwymiarowych wykresów funkcji, wizualizowanie otrzymanych wyników zarówno w postaci statycznej jak i animacji.

Omawiany program składa się z dwóch głównych funkcji *isp.m* oraz *qwAzw.m*, których kody źródłowe umieszczone są w Dodatku 1 oraz Dodatku 2 niniejszej pracy. Pierwszy plik zawiera implementację równania (3.38) i pozwala na rekonstrukcję potencjału studni kwantowej na podstawie zadanego widma energetycznego. Zawarta w nim przedstawiona poniżej funkcja *isp*:

```
function [x, V] = isp(E, V0, x_min, x_max, nOfPoint, eff_mass)
```

przyjmuje następujące parametry wejściowe:

- E - zbiór wartości energii stanów związanych w studni kwantowej,
- $V0$ - maksymalna głębokość studni potencjału,
- x_{min} , x_{max} - odpowiednio minimalna oraz maksymalna wartość współrzędnej x ; maksymalna szerokość studni kwantowej zdefiniowana jest jako $d = x_{max} - x_{min}$,
- $nOfPoint$ - liczba punktów zrekonstruowanego potencjału,
- eff_mass - masa efektywna nośników ładunku.

Na podstawie powyższych parametrów funkcja *isp* wylicza i zwraca zrekonstruowany potencjał jako zbiór współrzędnych x oraz odpowiadających im wartości potencjału V . Przykłady zrekonstruowanego w ten sposób potencjału przedstawione zostały na Rysunkach 3.1 - 3.9.

W pliku *qwAzw.m* znajduje się implementacja algorytmu rozwiązania algebraicznego zagadnienia własnego dla jednowymiarowego stacjonarnego równania Schrödingera w postaci:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \Psi(x) = \varepsilon \Psi(x) \quad (3.39)$$

W pierwszym kroku równanie (3.39) sprowadzone zostało do dyskretnej postaci bezwymiarowej, a następnie do algebraicznego zagadnienia własnego dla symetrycznej macierzy trójdzielnej - problemu, który został rozwiązany numerycznie (patrz Dodatek C). Poniższa funkcja

```
function [EVal, EVec] = qwAzw(V, U0, mass, xp, xk)
```

przyjmuje następujące parametry wejściowe:

- V - potencjał studni kwantowej,
- $U0$ - głębokość studni kwantowej,
- $mass$ - masa nośników ładunku,
- xp, xk - wartość początkowa oraz końcowa współrzędnej x .

W wyniku działania funkcji *qwAzw* otrzymujemy dwa zbiory:

- $EVal$ - zbiór energii własnych
- $EVec$ - zbiór funkcji własnych.

Funkcja rozwiązująca równanie Schrödingera została przygotowana w celu sprawdzenia poprawności działania modułu dokonującego rekonstrukcji potencjału. Działanie programu możemy przedstawić w następujący sposób:

1. na wejściu podajemy pożądane widmo energetyczne, masę efektywną nośników ładunku, szerokość oraz głębokość studni kwantowej,

2. na podstawie powyższego zbioru danych, zaimplementowany algorytm (*isp.m*) wyznacza kształt potencjału,
3. w następnym kroku rozwiązujemy równanie Schrödingera z potencjałem $V(x)$, zrekonstruowanym w poprzednim kroku (*qwAzw.m*)
4. obliczamy błąd względny ΔE - różnicę pomiędzy widmem energetycznym zadany w kroku 1, a tym, które otrzymujemy w kroku 3.

W trakcie testowania funkcji *isp.m* okazało się, że parametry definiujące głębokość i szerokość studni kwantowej w znacznym stopniu wpływają na wyznaczony błąd ΔE . Odpowiedni ich dobór, pozwala na zminimalizowanie błędu względnego ΔE do satysfakcjonującej nas wartości, biorąc oczywiście pod uwagę odpowiednie wartości graniczne związane z rozmiarem siatki numerycznej.

Jak było opisane w poprzedniej sekcji, w wielu przypadkach kształt potencjału zrekonstruowanego za pomocą metody ISP nie jest trywialny. Dlatego został przygotowany prosty algorytm, zaimplementowany w pliku pomocniczym *floorApprox.m*, pozwalający na przybliżenie zrekonstruowanego potencjału $V(x)$ aproksymacją schodkową o określonym kroku dx . Krok aproksymacji powinien zostać tak dobrany, aby z jednej strony był jak największy, zaś z drugiej strony widma energetyczne otrzymane w wyniku rozwiązania RS z potencjałami zrekonstruowanym i przybliżonym, były zbliżone do siebie. Główne rezultaty tego rozdziału zostały opublikowane w pracy [83].

ROZDZIAŁ 4

Zastosowanie metody ISP oraz formalizmu NEGF do zaprojektowania detektora THz

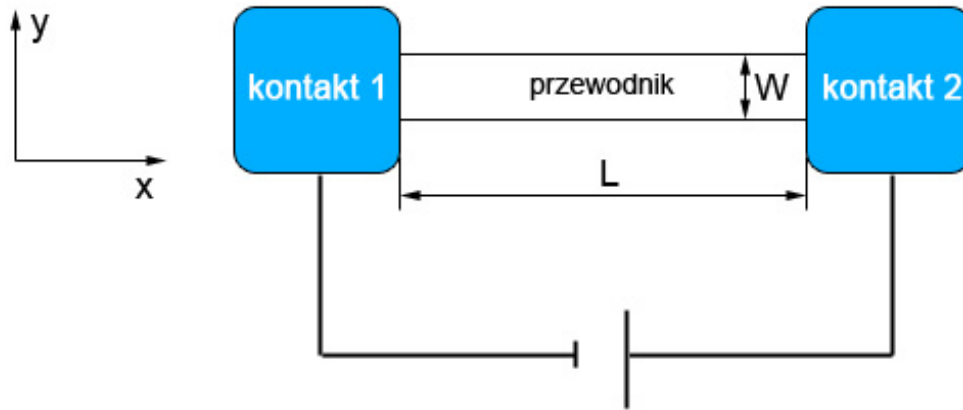
Opisana w poprzednim rozdziale metoda ISP służąca do rekonstrukcji potencjału studni kwantowej na podstawie zadanego widma energetycznego, posłużyła do zaprojektowania detektora częstotliwości w zakresie THz, którego idea konstrukcji oraz hipotetyczna zasada działania opisana jest w niniejszym rozdziale. Poruszone zostaną również kwestie związane z transportem nośników ładunku w strukturach niskowymiarowych, wykorzystane do przeprowadzonych obliczeń oraz symulacji charakterystyk prądowo-napięciowych przyrządów na bazie takich struktur.

4.1 Formalizm Landauera-Büttikera

Do określenia przewodnictwa struktur niskowymiarowych wygodnie jest wprowadzić wielkość fizyczną, tzw. konduktancję G . Konduktancja G prostokątnego dwuwymiarowego przewodnika jest wprost proporcjonalna do jego szerokości W oraz odwrotnie proporcjonalna do jego długości L :

$$G = \frac{\sigma W}{L}$$

gdzie przewodność właściwa σ jest charakterystycznym parametrem dla danego materiału, niezależnym od jego wymiarów. W przypadku struktur mezoskopowych, których wymiary są mniejsze od rozmiarów układów makroskopowych oraz większe od obiektów mikroskopowych (atomu, molekuly), nasuwa się pytanie, czy przy tak małych rozmiarach przewodnika prawo Ohma będzie nadal obowiązywało? Okazuje się, że jeśli zmniejszamy wymiary próbki, to musimy wprowadzić dwie poprawki. Po pierwsze istnieje opór inter-



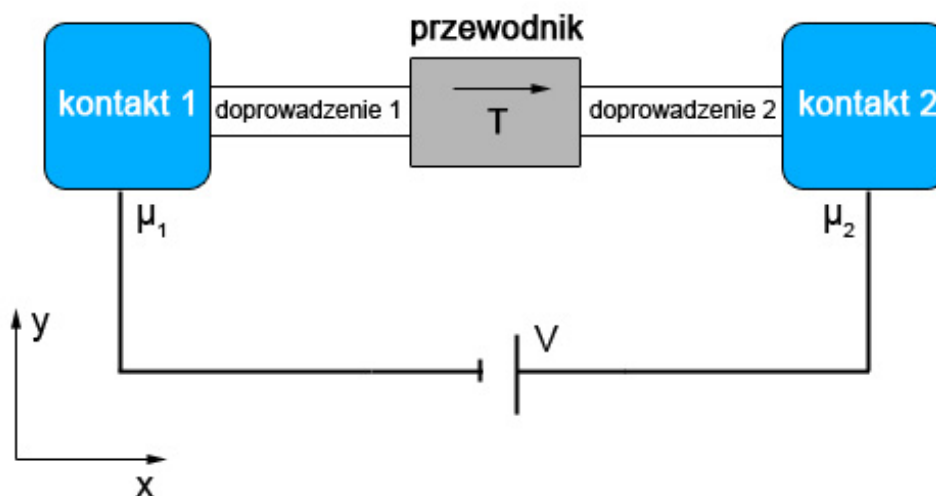
Rysunek 4.1: Przewodnik balistyczny umieszczony między dwoma kontaktami, do których przyłożone jest zewnętrzne pole elektryczne.

fejsów niezależny od długości próbki L , zaś po drugie konduktancja nie zmniejsza się liniowo wraz z szerokością W . Zamiast tego, zależy ona od liczby modów poprzecznych w przewodnikach i zmienia się w sposób dyskretny. Prekursorem badań nad skwantowanym przewodnictwem był R. Landauer [87], który zastosował nowe podejście do opisu transportu ładunku w ciele stałym, wprowadzając pojęcie prawdopodobieństwa przejścia elektronu przez kanał. Formuła Landauera, zawierająca dwie powyższe poprawki, przedstawia się następująco:

$$G = \frac{2e^2}{h} MT(E) \quad (4.1)$$

Współczynnik $T(E)$ reprezentuje średnie prawdopodobieństwo transmisji elektronu z jednego końca przewodnika do drugiego. Jeżeli prawdopodobieństwo transmisji $T(E)$ wynosi jeden, wówczas uzyskujemy poprawne wyrażenie na rezystancję przewodnika balistycznego z uwzględnieniem rezystancji kontaktów.

Rozważmy transport nośników ładunku w strukturze mezoskopowej przedstawionej na Rysunku 4.2. Zakładamy, że doprowadzenia są balistycznymi przewodnikami, zaś każdy z nich posiada M modów poprzecznych. Współczynnik $T(E)$, jak było powiedziane wcześniej, jest średnim prawdopodobieństwem przejścia elektronu z doprowadzenia 1 do doprowadzenia 2. Zakładamy również, że do próbki dołączone są tzw. kontakty „bezo odbiciowe” (z ang. *reflectionless contacts*), co oznacza, że elektrony mogą wydostać się z wąskiego przewodnika do znacznie szerszego kontaktu z nieistotnym prawdopodobieństwem odbicia, zaś w przeciwną stronę prawdopodobieństwo to może być dość duże [88]. Dzieje się tak dlatego, że makroskopowe kontakty posiadają dużą liczbę modów przeno-



Rysunek 4.2: Przewodnik o współczynniku transmisji $T(E)$ podłączony do dwóch dużych kontaktów.

szących elektrony, zaś w mikroskopowej próbce liczba ta jest stosunkowo mała. Dlatego, jeżeli elektron przedostanie się już do przewodnika balistycznego, może swobodnie się z niego wydostać do kontaktu.

W stanie równowagi dostępne dla elektronów stany obsadzone są według rozkładu Fermiego-Diraca:

$$f(E, T) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - \mu_0}{k_B T}\right) + 1} \quad (4.2)$$

gdzie: μ_0 - energia Fermiego (energia najwyższego obsadzonego poziomu), k_B - stała Boltzmanna, T - temperatura bezwzględna. Zakładając szybką termalizację elektronów w kontaktach, do ich charakterystyki, zamiast poziomu Fermiego, można wprowadzić pojęcie potencjału elektrochemicznego μ , które jest pomocne przy uwzględnieniu prądu płynącego przez strukturę i jest praktycznie tożsame z pojęciem poziomu Fermiego.

Jeżeli nie ma przyłożonego napięcia wówczas w całym obszarze panuje jeden potencjał elektrochemiczny μ . W przypadku, gdy omawiany układ jest wytrącony ze stanu równowagi, nie ma prostej reguły do określenia rozkładu elektronów. Wymaga to, w zależności od konkretnego problemu, zastosowania nierównowagowej statystyki, która jest znacznie bardziej skomplikowana niż jej równowagowy odpowiednik. W naszej sytuacji zakładamy, że dwa kontakty są na tyle duże, że nie mogą być wytrącone z równowagi, podczas gdy w próbce mezoskopowej równowaga jest naruszona. Wówczas każdy z kontaktów pozostaje w lokalnym stanie równowagi z własnym potencjałem elektrochemicznym (μ_1 i μ_2 odpowiednio dla pierwszego i drugiego kontaktu), powodując powstanie

dwóch quazi-poziomów Fermiego z następującymi funkcjami rozkładu Fermiego-Diraca:

$$f_1(E, T) = \frac{1}{\exp(\frac{E - \mu_1}{k_B T}) + 1} \quad (4.3)$$

$$f_2(E, T) = \frac{1}{\exp(\frac{E - \mu_2}{k_B T}) + 1} \quad (4.4)$$

Jak można wykazać, dla kontaktów „bezodbiciowych” stany $+k$ w doprowadzeniu 1 obsadzone są tylko przez elektrony pochodzące z lewego kontaktu i stąd stany te muszą mieć potencjał elektrochemiczny μ_1 . Podobnie, stany $-k$ w doprowadzeniu 2 obsadzone są przez elektrony pochodzące z prawego kontaktu i wówczas posiadają potencjał elektrochemiczny μ_2 . Omawiane quazi-poziomy będziemy oznaczać poprzez F^+ dla elektronów poruszających się zgodnie z kierunkiem przyłożonego pola elektrycznego $\mathbf{E}$ oraz F^- dla elektronów poruszających się w kierunku przeciwnym. Wszystkie stany położone poniżej quazi-poziomu F^- są całkowicie obsadzone elektronami i nie dają przyczynku do prądu. Pomiędzy poziomami F^+ oraz F^- stany $-k_x$ są puste, natomiast stany $+k_x$ obsadzone są elektronami, które to dają przyczynę do prądu.

W temperaturze równej 0 K przepływ prądu odbywa się w zakresie energetycznym pomiędzy μ_1 a μ_2 . Napływ elektronów z doprowadzenia 1 dany jest jako:

$$I_1^+ = (2e/h)M[\mu_1 - \mu_2] \quad (4.5)$$

natomiast odpływ elektronów z doprowadzenia 2 jest równy przyptywowi z doprowadzenia 1, I^+ , pomnożonemu przez współczynnik określający prawdopodobieństwo przejścia $T(E)$:

$$I_2^+ = (2e/h)MT(E)[\mu_1 - \mu_2] \quad (4.6)$$

Pozostałe elektrony nie przechodzą przez przewodnik do doprowadzenia 2 gdyż ulegają odbiciu i wracają do doprowadzenia 1:

$$I_1^- = (2e/h)M(1 - T(E))[\mu_1 - \mu_2] \quad (4.7)$$

Ostatecznie, w każdym punkcie układu, łącznie z obwodem zewnętrznym, płynie prąd dany przez:

$$I = I_1^+ - I_1^- = I_2^+ = (2e/h)MT(E)[\mu_1 - \mu_2] \quad (4.8)$$

Konduktancja w tym układzie jest równa:

$$G = \frac{I}{(\mu_1 - \mu_2)/|e|} = \frac{2e^2}{h}MT(E) \quad (4.9)$$

Formalizm Landauera wyjaśnia odstępstwa od prawa Ohma dla struktur mezoskopowych oraz wyjaśnia opór interfejsów, który jest niezależny od długości próbki. Niemniej jednak ma on zastosowanie tylko w przypadku struktur z dwoma kontaktami. Büttiker prowadząc badania z użyciem próbek z większą ilością kontaktów i przewodników, uogólnił formułę Landauera. Zauważył, że nie ma jakościowej różnicy pomiędzy prądem i napięciem dla różnego rodzaju kontaktów (nie ma znaczenia czy to są kontakty doprowadzające napięcie do przewodnika, czy też kontakty służące do pomiarów), więc można je potraktować jednakowo. Rozszerzył formułę dla przypadku dwu-kontaktowego:

$$I = \frac{2e}{h} \bar{T} [\mu_1 - \mu_2] \quad (4.10)$$

do przypadku wielokontaktowego poprzez wprowadzenie sumowania względem wszystkich kontaktów (indeksowanych przez p oraz q) [89]. Wówczas wzór na prąd przyjmuje postać:

$$I_p = \frac{2e}{h} \sum_q [\bar{T}_{q \leftarrow p} \mu_p - \bar{T}_{p \leftarrow q} \mu_q] \quad (4.11)$$

Uwzględniając, że $V = \mu/e$, powyższe wyrażenie możemy przepisać w postaci:

$$I_p = \frac{2e}{h} \sum_q [G_{qp} V_p - G_{pq} V_q] \quad (4.12)$$

gdzie

$$G_{pq} = \frac{2e^2}{h} \bar{T}_{p \leftarrow q} \quad (4.13)$$

W powyższych wyrażeniach (4.12) oraz (4.13) współczynnik G musi spełniać poniższą regułę sumowania, co powoduje, że prąd jest zerowy, gdy wszystkie potencjały są równe:

$$\sum_q G_{qp} = \sum_q G_{pq} \quad (4.14)$$

Dzięki temu równanie (4.12) może być przepisane w następującej postaci:

$$I_p = \frac{2e}{h} \sum_q G_{qp} [V_p - V_q] \quad (4.15)$$

4.2 Niezerowa temperatura i przyłożone napięcie

Dotychczasowe rozważania związane z formalizmem Landauera oparte były na założeniu, że temperatura w której dokonywane są pomiary wynosi 0 K. Wówczas transport

nośników ładunku zachodzi tylko z kontaktu pierwszego do kontaktu drugiego. Zakładaliśmy również, że prąd był przenoszony poprzez pojedynczy kanał w obszarze energii w pobliżu energii Fermiego. Pozwala nam to na zapisanie wyrażenia opisującego przepływ prądu w prostej postaci:

$$I = \frac{2e}{h} \bar{T} [\mu_1 - \mu_2]$$

gdzie $\bar{T}$ oznacza iloczyn liczby modów M oraz prawdopodobieństwa transmisji przez jeden mod $T(E)$. Na ogół jednak, mamy sytuację przedstawioną na Rysunku 4.3, gdzie transport nośników ładunku odbywa się poprzez wiele kanałów energetycznych w zakresie energii

$$\mu_1 + (\textit{kilka } k_B T) > E > \mu_2 - (\textit{kilka } k_B T),$$

zaś każdy kanał ma różną funkcję transmisji ($\bar{T}$). Biorąc pod uwagę powyższe warunki, wyrażenie określające przepływający prąd może być uzyskane tą samą drogą co poprzednio z uwzględnieniem faktu, że teraz musimy rozpatrzyć napływ elektronów z obydwu kontaktów. Przyptyw elektronów z doprowadzenia 1 dany jest przez:

$$i_1^+(E) = (2e/h) M f_1(E) \quad (4.16)$$

zaś przyptyw elektronów z doprowadzenia 2 jest dany przez:

$$i_2^-(E) = (2e/h) M' f_2(E) \quad (4.17)$$

Analogicznie odpływ elektronów z doprowadzenia 2 możemy zapisać jako:

$$i_2^+(E) = T i_1^+(E) + (1 - T') i_2^-(E) \quad (4.18)$$

zaś odpływ elektronów z doprowadzenia 1 jako:

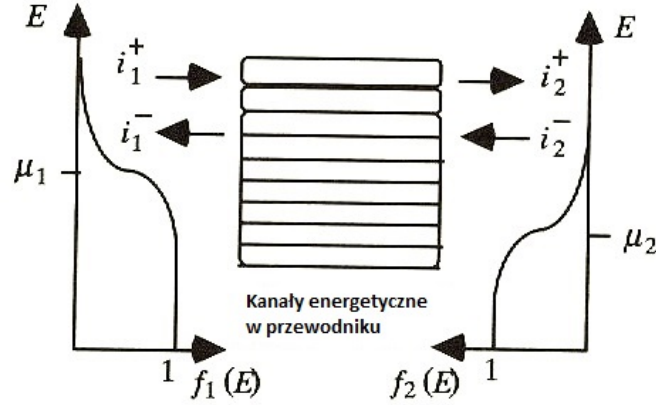
$$i_1^-(E) = (1 - T) i_1^+(E) + T' i_2^-(E) \quad (4.19)$$

Ostatecznie, prąd płynący w każdym punkcie układu $i(E)$ dany jest przez:

$$\begin{aligned} i(E) &= i_1^+ - i_1^- = i_2^+ - i_2^- = T i_1^+ - T' i_2^- \\ &= \frac{2e}{h} [M(E) T(E) f_1(E) - M'(E) T'(E) f_2(E)] \end{aligned} \quad (4.20)$$

Definiując funkcję transmisji jako $\bar{T}(E) = M(E) T(E)$ możemy zapisać:

$$i(E) = \frac{2e}{h} [\bar{T}(E) f_1(E) - \bar{T}'(E) f_2(E)] \quad (4.21)$$



Rysunek 4.3: Rozkład energii w niezerowej temperaturze.

Całkowity prąd płynący w obwodzie wynosi:

$$I = \int i(E) dE \quad (4.22)$$

gdzie

$$i(E) = \frac{2e}{h} \bar{T}(E) [f_1(E) - f_2(E)]$$

4.3 Funkcja transmisji oraz T-macierz

W poprzednim podrozdziale pokazano zostało, że prąd płynący w obwodzie może być wyrażony za pomocą funkcji transmisji $T(E)$. Kolejnym krokiem jest udzielenie odpowiedzi na pytanie: jak można wyznaczyć funkcję transmisji w przewodniku mezoskopowym. Jeżeli rozmiar przewodnika jest dużo mniejszy od długości relaksacji fazy funkcji falowej elektronu, wówczas będziemy mieli do czynienia z transportem koherentnym, zaś funkcję transmisji można wyznaczyć wychodząc z równania Schrödingera.

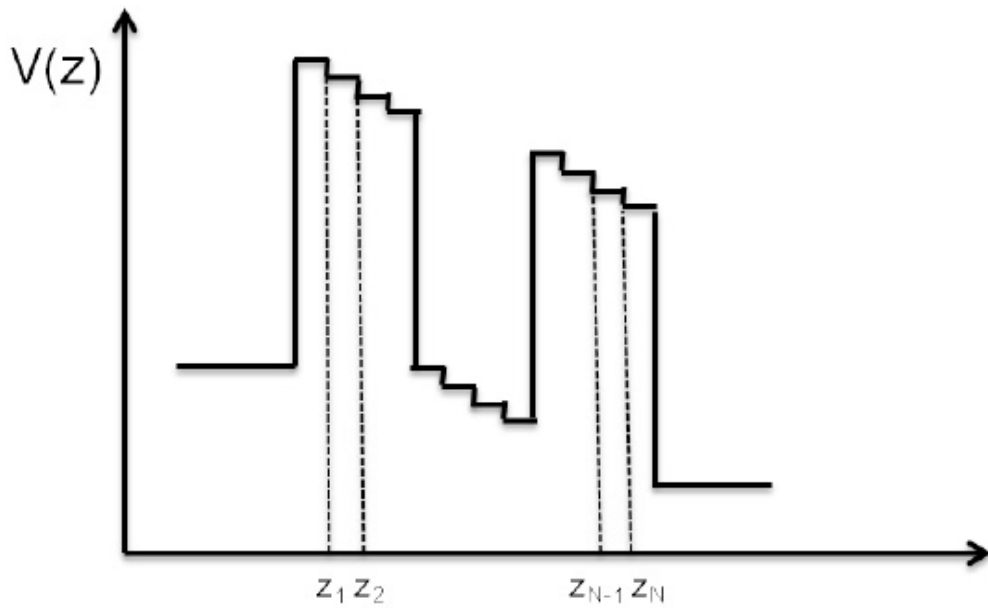
Metoda transfer-macierzy (Transfer Matrix Method) pozwala na numeryczne obliczenie $T(E)$ funkcji prawdopodobieństwa transmisji przez strukturę. Maksima tej funkcji odpowiadają stanom związanym w studni kwantowej. Technika ta dotyczy rozwiązania jednowymiarowego równania Schrödingera z warunkami brzegowymi rozpraszania dla funkcji falowej i pozwala na konstrukcję macierzy przejścia dla heterostrukury [90].

Zacznijmy od jednowymiarowego, niezależnego od czasu równania mas efektywnych (opisanego w rozdziale 1.2), w postaci:

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left(\frac{1}{m^*(z)} \frac{d}{dz} \right) \Psi(z) + V(z) \Psi(z) = E_z \Psi(z), \quad (4.23)$$

gdzie pojawiająca się w powyższym równaniu (4.23) funkcja $m(z)$ określa nam zależność masy efektywnej od współrzędnej przestrzennej. Pamiętamy, że QW o kształtach innych niż prostokątne, wytwarzane są poprzez nakładanie określonej liczby warstw różnych materiałów, charakteryzujących się różnymi masami efektywnymi. Taki stos warstw powinien być rozważany jako szczególny przypadek heterostruktur.

Potencjał $V(z)$ zastąpiony jest poprzez aproksymację schodkową z małym krokiem, jak to jest pokazane na Rysunku 4.4. W każdej takiej sekcji, funkcja falowa wyrażona jest



Rysunek 4.4: Aproksymacja schodkowa potencjału użyta do wyliczenia macierzy transferu.

jako:

$$\Psi_j(z) = A_j e^{ik_j z} + B_j e^{-ik_j z} \quad (4.24)$$

gdzie:

$$k_j = \frac{\sqrt{2m_j^*(E_z - V_j)}}{\hbar} \quad (4.25)$$

Na granicach sąsiednich sekcji spełnione są następujące warunki ciągłości:

$$\Psi_j(z_j) = \Psi_{j+1}(z_{j+1}) \quad (4.26)$$

$$\frac{1}{m_j^*} \frac{d\Psi_j(z)}{dz} \Big|_{z=z_{j+1}} = \frac{1}{m_{j+1}^*} \frac{d\Psi_{j+1}(z)}{dz} \Big|_{z=z_{j+1}} \quad (4.27)$$

Wówczas odpowiednie współczynniki A_j i B_j dla sąsiednich sekcji powiązane są ze sobą następującą relacją:

$$\begin{pmatrix} A_{j+1} \\ B_{j+1} \end{pmatrix} = T_j \begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix} \quad (4.28)$$

gdzie T_j zdefiniowane jest jako:

$$T_j = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \left(1 + \frac{m_{j+1}^*}{m_j^*} \frac{k_j}{k_{j+1}}\right) e^{i(k_j - k_{j+1})z_{j+1}} & \left(1 - \frac{m_{j+1}^*}{m_j^*} \frac{k_j}{k_{j+1}}\right) e^{-i(k_j + k_{j+1})z_{j+1}} \\ \left(1 - \frac{m_{j+1}^*}{m_j^*} \frac{k_j}{k_{j+1}}\right) e^{i(k_j + k_{j+1})z_{j+1}} & \left(1 + \frac{m_{j+1}^*}{m_j^*} \frac{k_j}{k_{j+1}}\right) e^{-i(k_j - k_{j+1})z_{j+1}} \end{pmatrix} \quad (4.29)$$

Mnożąc kolejno odpowiednie macierze przejścia, współczynniki z pierwszej sekcji powiązane są ze współczynnikami z ostatniej sekcji za pomocą wyrażenia:

$$\begin{pmatrix} A_N \\ B_N \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \quad (4.30)$$

gdzie

$$T = T_{N-1} T_{N-2} \dots T_2 T_1 = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \quad (4.31)$$

Uwzględniając warunki brzegowe $A_1 = 1$ oraz $B_N = 0$ z równania (4.30) możemy wyznaczyć amplitudę transmisji A_N oraz prawdopodobieństwo transmisji $T(E_z)$:

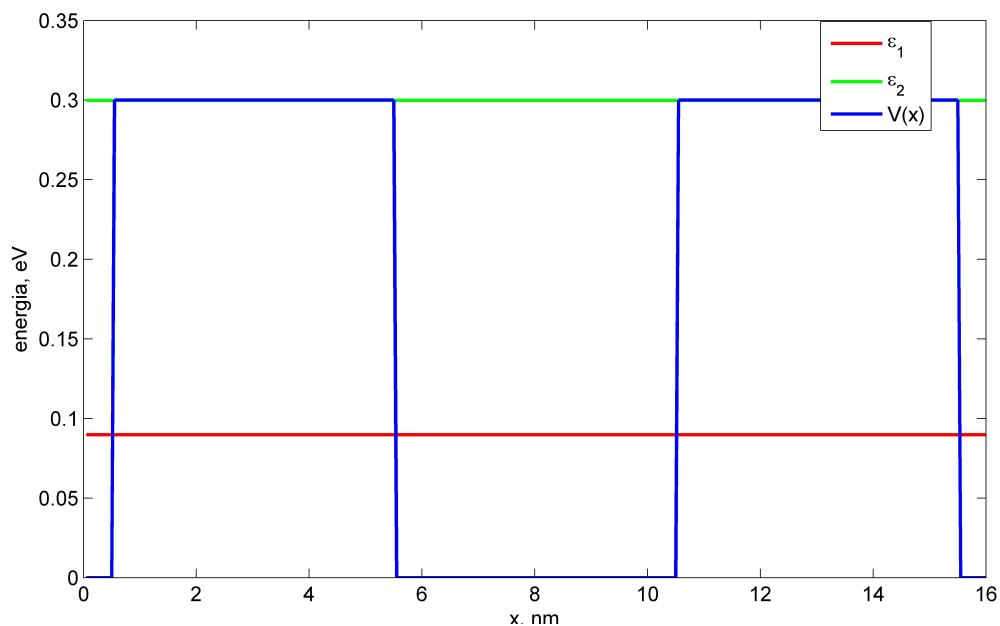
$$A_N = \frac{m_N^*}{m_1^*} \frac{k_1}{k_N} \frac{1}{T} \quad (4.32)$$

$$T(E_z) = \frac{m_1^*}{m_N^*} \frac{k_N}{k_1} |A_N|^2 \quad (4.33)$$

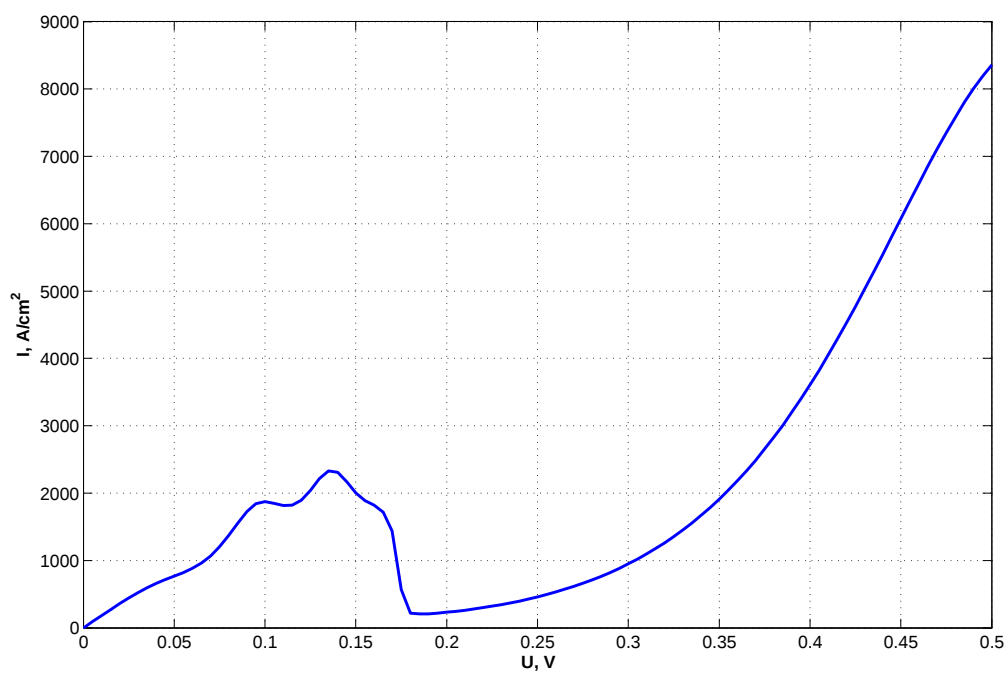
4.4 Charakterystyka I-V rezonansowej diody tunelowej

Na podstawie omawianego powyżej podejścia Landauera-Büttikera został przygotowany skrypt w programie Matlab, pozwalający na wyznaczenie charakterystyki prądowo-napięciowej (I-V) dla określonej struktury. Do celów testowych została wyznaczona charakterystyka I-V tunelowej diody rezonansowej (Rysunek 4.5), która przedstawiona jest na Rysunku 4.6.

Porównując otrzymaną charakterystykę I-V z uzyskaną za pomocą gotowego solve-ra [91] (wykorzystującego nierównowagowe funkcje Greena) charakterystyką (Rysunek

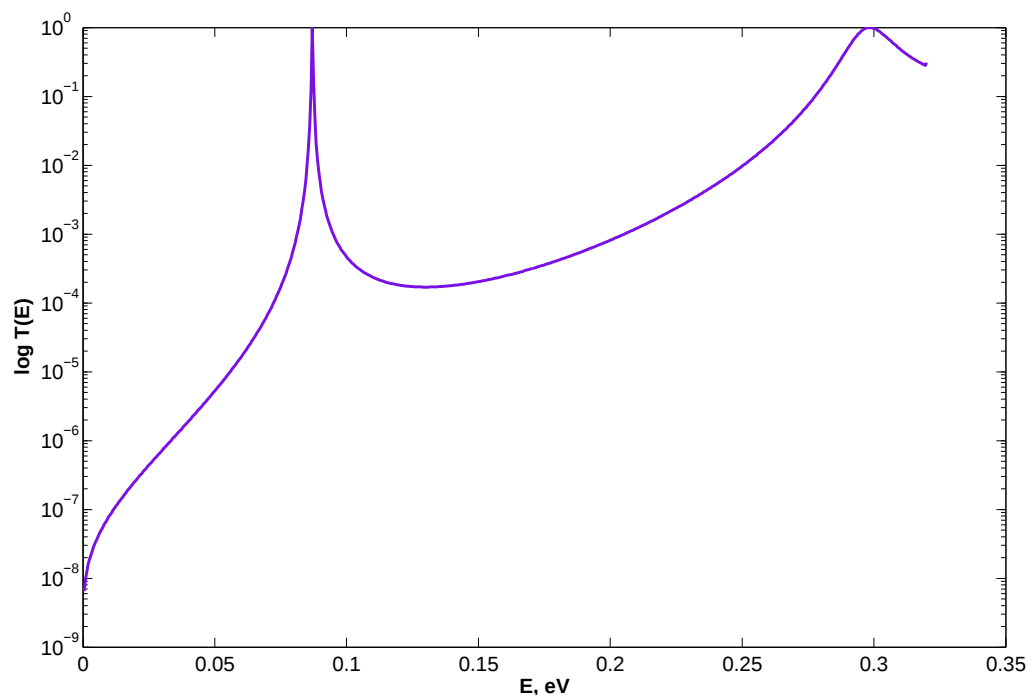


Rysunek 4.5: Rezonansowa dioda tunelowa.



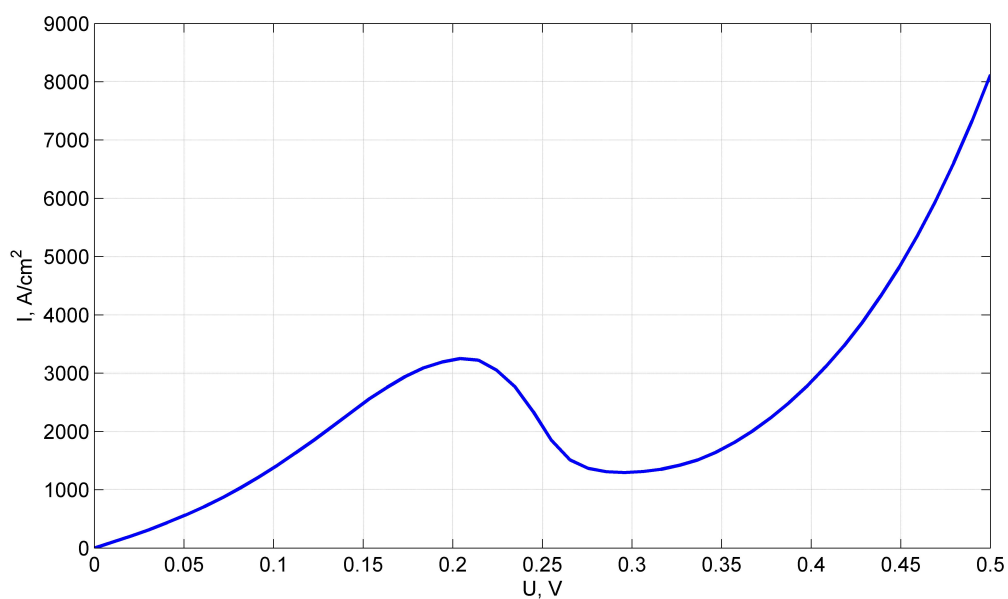
Rysunek 4.6: Charakterystyka prądowo-napięciowa dla RTD.

4.8) możemy stwierdzić, że w naszym przypadku otrzymane wyniki należy potraktować bardziej „jakościowo” niż „ilościowo”. Pomimo iż sam kształt obydwu charakterystyk jest zbliżony, pojawiają się różnice w konkretnych wartościach liczbowych. Aby poprawić jakość otrzymanych wyników, należałoby w dalszym etapie uwzględnić mechanizmy oddziaływania struktury z dołączonymi kontaktami, jak również uwzględnić w opisującym układ Hamiltonianie różne masy efektywne nośników ładunku w poszczególnych



Rysunek 4.7: Funkcja transmisji $T(E)$ dla RTD przedstawionej na Rysunku 4.5 struktury.

warstwach materiałów. Niemniej jednak, przygotowany solver może posłużyć do wstępnego oszacowania i zbadania kształtu odpowiedzi prądowej układu ze względu na przyłożone napięcie. Pozwala również na wyznaczenie funkcji transmisji $T(E)$, której przykład pokazany jest na Rysunku 4.7



Rysunek 4.8: Charakterystyka prądowo-napięciowa dla RTD uzyskana za pomocą metody NEGF.

4.5 Metoda funkcji Greena

Metoda Funkcji Greena w postaci zaproponowanej przez Keldysza [92] oraz Kadanoffa i Bayma [93] okazała się bardzo skuteczną metodą w fizyce teoretycznej. Znaczny wzrost szybkości działania komputerów pozwolił na skuteczne wykorzystanie tej metody także w analizie ilościowej problemów pojawiających się podczas modelowania urządzeń nanoelektronicznych. Formalizm funkcji Greena był skutecznie wykorzystywany do modelowania rezonansowych diód tunelowych [94], nanorurek węglowych [95], fotodetektorów [96], baterii słonecznych zbudowanych na bazie studni kwantowych [97] czy też kwantowego lasera kaskadowego średniej podczerwieni [98]. Metoda funkcji Greena jest potężną koncepcją, która pozwala uzyskać reakcję układu w jego dowolnym punkcie (wewnątrz lub na zewnątrz próbki mezoskopowej), na wzbudzenie w jakimkolwiek innym punkcie. W przypadku transportu bez uwzględnienia oddziaływań typu elektron-elektron czy też elektron-fonon, jedynymi pobudzeniami jakie należy uwzględnić są te, które powstają od strony doprowadzeń. Dla takich pobudzeń, koncepcja funkcji Greena oraz metoda S-macierzy (metoda macierzy rozpraszania) są ze sobą wzajemnie powiązane, zaś wybór odpowiedniej metody jest kwestią indywidualną. Prawdziwą siłę metody funkcji Greena można zobaczyć w przypadku, gdy próbujemy uwzględnić oddziaływania typu elektron-elektron, czy też elektron-fonon. W tym momencie, rozważania ograniczone zostaną do transportu bez oddziaływań, w celu przedstawienia pewnych własności funkcji Greena, w szczególności w odniesieniu do dyskretnych metod opisu stanów elektronowych.

Za każdym razem, gdy odpowiedź układu R powiązana jest ze wzbudzeniem S za pomocą różniczkowego operatora D_{op} w następujący sposób

$$D_{op}R = S,$$

możemy zdefiniować funkcję Greena i wyrazić odpowiedź układu R w postaci:

$$R = D_{op}^{-1}S = GS,$$

gdzie $G \equiv D_{op}^{-1}$. Omawiany problem może być sformułowany jako

$$[E - H_{op}]\Psi = S$$

gdzie Ψ jest funkcją falową, zaś S jest równoważne wzbudzeniu zachodzącemu pod wpływem fali przychodzącej z jednego z doprowadzeń. Odpowiadającą tej sytuacji funkcję

Greena możemy zapisać jako:

$$G = [E - H_{op}]^{-1} \quad (4.34)$$

gdzie H_{op} jest liniowym, niezależnym od czasu hermitowskim operatorem Hamiltona, zdefiniowanym jako:

$$H_{op} = \frac{(i\hbar\nabla + e\mathbf{A})^2}{2m} + U(\mathbf{r}). \quad (4.35)$$

4.5.1 Opóźnione i przedwcześnie funkcje Greena

Odwrotność operatora różnicowego nie jest jednoznacznie określona, dopóki nie zdefiniujemy warunków brzegowych. Powszechnym jest w tej sytuacji definiowanie dwóch różnych funkcji Greena, odpowiadających dwóm różnym warunkom brzegowym. Aby można było łatwo zobaczyć różnicę, rozważmy jednowymiarowy drut kwantowy ze stałą energią potencjalną U_0 oraz zerowym potencjałem wektorowym. Zgodnie z równaniami (4.34) oraz (4.35) możemy zapisać:

$$G = \left[E - U_0 + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right]^{-1} \quad (4.36)$$

oraz

$$\left(E - U_0 + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) G(x, x') = \delta(x - x'). \quad (4.37)$$

Równanie (4.37) wygląda podobnie do równania Schrödingera z wyjątkiem wyrażenia z prawej strony $\delta(x - x')$, które odpowiada jednostkowemu wzbudzeniu. Funkcje Greena $G(x, x')$ można przedstawić jako funkcję falową w punkcie x wynikającą ze wzbudzenia w punkcie x' . Fizycznie oczekujemy, że takie wzbudzenie powoduje powstanie dwóch fal poruszających się na zewnątrz od punktu wzbudzenia z amplitudami A^+ oraz A^- . Wówczas możemy zapisać, że

$$\begin{aligned} G(x, x') &= A^+ \exp[ik(x - x')], & x > x' \\ G(x, x') &= A^- \exp[-ik(x - x')], & x < x' \end{aligned} \quad (4.38)$$

gdzie $k = [2m(E - U_0)]^{1/2}/\hbar$. Bez względu na to, jakie mogą być A^+ i A^- , powyższe rozwiązanie spełnia równanie (4.37) w każdym punkcie różnym od $x = x'$. Aby równanie (4.37) było również spełnione w punkcie $x = x'$, funkcje Greena muszą być ciągłe w tym punkcie, tj.

$$[G(x, x')]_{x=x'^+} = [G(x, x')]_{x=x'^-}, \quad (4.39)$$

zaś pierwsze pochodne muszą spełniać warunek

$$\left[\frac{\partial G(x, x')}{\partial x} \right]_{x=x'^+} - \left[\frac{\partial G(x, x')}{\partial x} \right]_{x=x'^-} = \frac{2m}{\hbar^2}. \quad (4.40)$$

Z warunków (4.39) i (4.40) otrzymujemy, że

$$A^+ = A^- = -\frac{i}{\hbar v}, \quad (4.41)$$

gdzie $v \equiv \hbar k/m$, zaś funkcja Greena przybiera postać

$$G(x, x') = -\frac{i}{\hbar v} \exp[ik|x - x'|]. \quad (4.42)$$

Istnieje również inne rozwiązanie, które spełnia równanie (4.37), dane przez

$$G(x, x') = +\frac{i}{\hbar v} \exp[-ik|x - x'|]. \quad (4.43)$$

Rozwiązanie to składa się z fal nadchodzących, które zanikają w punkcie wzbudzenia, zamiast fal wychodzących, powstałych w punkcie wzbudzenia. Powyższe dwa rozwiązania określa się jako G^A - przedwczesną (ang. *advanced*) oraz G^R - opóźnioną (ang. *retarded*) funkcję Greena:

$$\begin{aligned} G^R(x, x') &= -\frac{i}{\hbar v} \exp[ik|x - x'|], \\ G^A(x, x') &= +\frac{i}{\hbar v} \exp[-ik|x - x'|], \end{aligned} \quad (4.44)$$

gdzie $k = \frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar}$ zaś $v \equiv \frac{\hbar k}{m}$.

Jednym ze sposobów uwzględnienia warunków brzegowych w samym równaniu jest dodanie nieskończenie małej części urojonej do energii. Wówczas, zamiast równania (4.37) możemy zapisać następujące równanie dla opóźnionej funkcji Greena:

$$\left(E - U_0 + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + i\eta \right) G^R(x, x') = \delta(x - x'), \quad \eta > 0 \quad (4.45)$$

Mały urojony element energii wprowadza dodatnią część urojoną do wektora falowego:

$$\begin{aligned} k' &= \frac{\sqrt{2m(E + i\eta - U_0)}}{\hbar} = \frac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar} \sqrt{1 + \frac{i\eta}{E - U_0}} \approx \\ &\approx \frac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar} \left[1 + \frac{i\eta}{2(E - U_0)} \right] \equiv k(1 + i\delta) \end{aligned} \quad (4.46)$$

Część urojona sprawia, że funkcja przedwczesna G^A rośnie do nieskończoności jeśli oddalamy się od punktu wzbudzenia, przez co funkcja opóźniona G^R jest jedynym dopuszczalnym rozwiązaniem, ponieważ właściwe rozwiązanie musi być ograniczone.

Podobnie, funkcja przedwczesna jest jedynym dopuszczalnym rozwiązaniem równania

$$\left(E - U_0 + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - i\eta\right) G^A(x, x') = \delta(x - x'), \quad \eta > 0 \quad (4.47)$$

W ogólności, opóźniona funkcja Greena zdefiniowana jest jako:

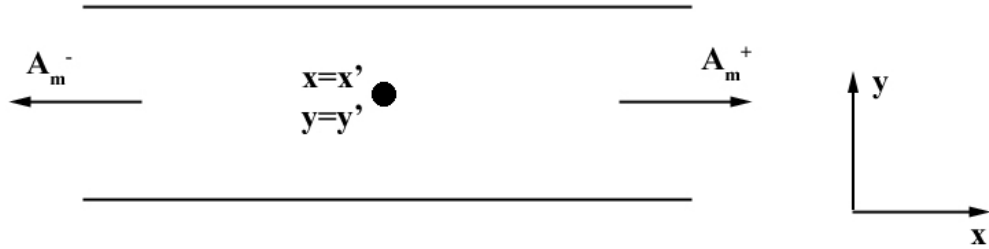
$$G^R = [E - H_{op} + i\eta]^{-1} \quad (\eta \rightarrow 0^+), \quad (4.48)$$

zaś przedwczesna funkcja Greena jako:

$$G^A = [E - H_{op} - i\eta]^{-1} \quad (\eta \rightarrow 0^+). \quad (4.49)$$

4.5.2 Funkcje Greena dla wielomodowego drutu kwantowego

W przypadku nieskończonego wielomodowego drutu kwantowego, opóźniona funkcja Greena $G^R(x, y; x', y')$ reprezentuje funkcję falową w punkcie (x, y) ze względu na wzbudzenie w $x = x', y = y'$. Możemy się spodziewać, że wzbudzenie to będzie powodować rozchodzenie się fal w różnych modach, jak to jest pokazane na Rysunku 4.9. Opóźnioną



Rysunek 4.9: Opóźniona funkcja Greena dla nieskończonego wielomodowego drutu.

funkcję Greena możemy zapisać jako

$$G^R(x, x') = \sum_m A_m^\pm \chi_m(y) \exp[ik_m |x - x'|], \quad (4.50)$$

gdzie A_m^+ i A_m^- są amplitudami fal dla różnych modów, które rozchodzą się od źródła wzbudzenia. Funkcje falowe modów poprzecznych $\chi_m(y)$, które są ortogonalne, spełniają równanie

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + U(y)\right] \chi_m(y) = \epsilon_{m,0} \chi_m(y), \quad (4.51)$$

w którym $U(y)$ jest poprzecznym potencjałem ograniczającym w kierunku y .

Postępując w analogiczny sposób jak w przypadku jednowymiarowym, opisanym w poprzednim podrozdziale, korzystając z warunków ciągłości funkcji Greena w punkcie wzbudzenia, możemy wyznaczyć amplitudy modów A_m^+ oraz A_m^- jako

$$A_m^+ = A_m^- = -\frac{i}{\hbar v_m} \chi_m(y'). \quad (4.52)$$

W tym przypadku, amplituda A_m modu m jest proporcjonalna do poprzecznej funkcji falowej w punkcie wzbudzenia, $\chi_m(y')$. Podstawiając równanie (4.52) do (4.50) otrzymujemy opóźnioną funkcję Greena w postaci:

$$G^R(x, y; x', y') = \sum_m -\frac{i}{\hbar v_m} \chi_m(y) \chi_m(y') \exp[ik_m |x - x'|], \quad (4.53)$$

gdzie $k = \frac{\sqrt{2m(E - \varepsilon_{m,0})}}{\hbar}$ zaś $v \equiv \frac{\hbar k_m}{m}$. W analogiczny sposób otrzymujemy przedwczesną funkcję Greena jako

$$G^A(x, y; x', y') = \sum_m +\frac{i}{\hbar v_m} \chi_m(y) \chi_m(y') \exp[-ik_m |x - x'|]. \quad (4.54)$$

W ogólnym ujęciu metoda funkcji Greena jest metodą rozwiązywania pewnych niejednorodnych równań różniczkowych. W przypadku niezależnego od czasu (jednoelektronowego) równania Schrödingera $H_{op}(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$ definiujemy niezależną od czasu funkcję Greena jako rozwiązanie niejednorodnego równania różniczkowego w postaci [99]

$$[z - H_{op}(\mathbf{r})]G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (4.55)$$

gdzie z jest zmienną zespoloną taką, że $Re\{z\} = E$, $Im\{z\} = \eta$, natomiast G jako funkcja $\mathbf{r}$ i $\mathbf{r}'$ spełnia te same warunki brzegowe co funkcja falowa $\psi(\mathbf{r})$. Jak już było wspomniane wcześniej, występujący w równaniu operator Hamiltona H jest liniowym, niezależnym od czasu hermitowskim operatorem różniczkowym, posiadającym zupełny zbiór ortogonalnych funkcji własnych ψ_α , z których każda spełnia równanie

$$H_{op}\psi_\alpha(\mathbf{r}) = \varepsilon_\alpha \psi_\alpha(\mathbf{r}). \quad (4.56)$$

Ponieważ funkcje własne tworzą zbiór zupełny funkcji ortogonalnych

$$\int \psi_\beta^*(\mathbf{r}) \psi_\alpha(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \delta_{\beta\alpha}, \quad (4.57)$$

opóźnioną funkcję Greena możemy przedstawić za pomocą

$$G^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_\alpha C_\alpha(\mathbf{r}') \psi_\alpha(\mathbf{r}), \quad (4.58)$$

Podstawiając równanie (4.58) do równania dla opóźnionej funkcji Greena w postaci

$$(E - H_{op} + i\eta)G^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

oraz wykorzystując równanie (4.56), otrzymujemy

$$\sum_{\alpha} (E - \varepsilon_{\alpha} + i\eta) C_{\alpha} \psi_{\alpha}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (4.59)$$

Mnożąc powyższe równanie przez $\psi_{\alpha}^*(\mathbf{r})$, całkując względem $\mathbf{r}$ i wykorzystując relację ortogonalności (4.57), możemy wyznaczyć współczynniki C_{α} w postaci:

$$C_{\alpha} = \frac{\psi_{\alpha}^*(\mathbf{r}')}{E - \varepsilon_{\alpha} + i\eta}. \quad (4.60)$$

Podstawiając (4.60) do (4.58) otrzymujemy opóźnioną funkcję Greena wyrażoną poprzez wartości i funkcje własne, zgodnie z poniższym równaniem:

$$G^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{\alpha} \frac{\psi_{\alpha}(\mathbf{r}) \psi_{\alpha}^*(\mathbf{r}')}{E - \varepsilon_{\alpha} + i\eta} \quad (4.61)$$

W podobny sposób możemy pokazać, że

$$G^A(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{\alpha} \frac{\Psi_{\alpha}(\mathbf{r}) \Psi_{\alpha}^*(\mathbf{r}')}{E - \varepsilon_{\alpha} - i\eta} \quad (4.62)$$

Z równań (4.61) i (4.62) bezpośrednio widać, że

$$G^A(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = [G^R(\mathbf{r}', \mathbf{r})]^* \rightarrow G^A = [G^R]^+. \quad (4.63)$$

Oznacza to, że przedwczesna funkcja Greena jest sprzężeniem hermitowskim funkcji opóźnionej.

4.5.3 Reprezentacja macierzowa operatora Hamiltona

Badanie właściwości transportowych urządzenia możliwe jest pod warunkiem, że mamy dołączone do niego elektrody doprowadzające ładunek. Powoduje to jednak wystąpienie dodatkowego „zaburzenia” wpływającego na wielkości opisujące przyrząd i powoduje ich modyfikację. Prawidłowo opisany model musi uwzględniać efekt wpływu kontaktów na urządzenie [100].

W pierwszym kroku, aby móc wyznaczyć funkcje Greena, potrzebujemy znaleźć rozwiązanie równania różniczkowego dla dowolnego $U(\mathbf{r})$ oraz $\mathbf{A}(\mathbf{r})$, w postaci:

$$[E - H_{op}(\mathbf{r}) + i\eta]G^R(\mathbf{r}; \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (4.64)$$

gdzie

$$H_{op}(\mathbf{r}) = \frac{(i\hbar\nabla + e\mathbf{A})^2}{2m} + U(\mathbf{r}). \quad (4.65)$$

Ograniczając rozważania do dwuwymiarowego przewodnika, zastosujemy ogólne podejście do rozwiązywania równań różniczkowych typu (4.64), polegające na dyskretyzacji współrzędnych przestrzennych i sprowadzeniu równania do postaci macierzowej. Zgodnie z tym, opóźniona funkcja Greena może być reprezentowana przez macierz:

$$G^R(\mathbf{r}; \mathbf{r}') \longrightarrow G^R(i, j),$$

gdzie indeksy i, j oznaczają punkty na dyskretnej siatce obliczeniowej. Wówczas, równanie różniczkowe staje się równaniem macierzowym postaci

$$[(E + i\eta)I - H]G^R = [I], \quad (4.66)$$

gdzie $[I]$ jest macierzą jednostkową, zaś $[H]$ macierzową reprezentacją operatora Hamiltona H_{op} . W ten sposób możemy łatwo obliczyć G^R poprzez odwrócenie macierzy $[(E + i\eta)I - H]$. Aby jednak było to możliwe, potrzebna jest reprezentacja macierzowa operatora H . Dla przypadku jednowymiarowego z zerowym potencjałem wektorowym, operator H ma postać

$$H_{op} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x).$$

Rozważmy wyrażenie $H_{op}F(x)$ dla pokazanej na Rysunku 4.10 dyskretnej siatki punktów, które usytuowane są w $x = ja$, gdzie j jest całkowite, zaś $F(x)$ dowolną funkcją zmiennej x . Wówczas możemy zapisać

$$\begin{array}{ccccccccc} j = & -2 & -1 & 0 & 1 & 2 & & & \\ \dots & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \dots & & \\ & & & & \longrightarrow & x & & & \end{array}$$

Rysunek 4.10: Nieskończony zdyskretyzowany łańcuch punktów siatki obliczeniowej.

$$[H_{op}F]_{x=ja} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 F}{dx^2} \right]_{x=ja} + U_j F_j \quad (4.67)$$

gdzie F_j i U_j są odpowiednio wartościami funkcji F i potencjału U w punkcie $x = ja$. Pomijając pośrednie obliczenia, które przedstawione są szczegółowo w dodatku C, otrzymujemy końcową reprezentację macierzową operatora Hamiltona dla jednowymiarowego

liniowego łańcucha punktów jako:

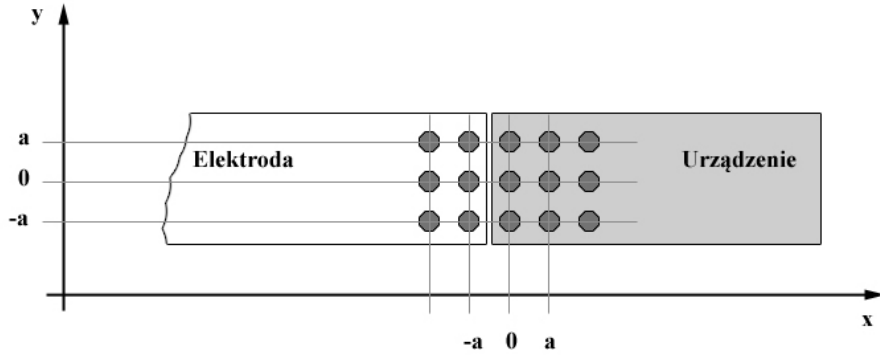
$$H = \begin{bmatrix} \dots & -t & 0 & 0 & 0 \\ -t & U_{-1} + 2t & -t & 0 & 0 \\ 0 & -t & U_0 + 2t & -t & 0 \\ 0 & 0 & -t & U_1 + 2t & -t \\ 0 & 0 & 0 & -t & \dots \end{bmatrix} \quad (4.68)$$

gdzie $t \equiv \hbar^2/2ma^2$.

Mając macierzową reprezentację operatora Hamiltona, wydaje się, że możemy w prosty sposób utworzyć macierz $[(E + i\eta)I - H]$ i odwrócić ją aby otrzymać opóźnioną funkcję Greena G^R w postaci

$$G^R = [(E + i\eta)I - H]^{-1}. \quad (4.69)$$

Niemniej jednak, pojawia się w tym momencie problem, ponieważ macierz ta posiada nieskończony wymiar. Dzieje się tak, ponieważ do urządzenia dołączone są półnieskończone elektrody, jak jest pokazane na Rysunku 4.11. Dołączenie półnieskończonych elek-



Rysunek 4.11: Model dwuwymiarowego urządzenia połączonych z elektrodą.

trod prowadzi do problemów natury obliczeniowej, ponieważ otrzymujemy macierze o nieskończonym wymiarze. Rozwiązanie tego problemu polega na obcięciu macierzy w pewnym punkcie. Rozważmy w tym celu urządzenie o szerokości M węzłów i długości L węzłów, podłączone do półnieskończonej elektrody p o szerokości M , tak jak to jest pokazane na Rysunku 4.12. Urządzenie opisane jest za pomocą macierzy hamiltonianu $[H_C]$, której wymiar jest równy $(C \times C)$, gdzie $C = LM$ jest liczbą wszystkich węzłów urządzenia. Elektroda opisana jest poprzez macierz $[H_p]$, której wymiar jest nieskończony. Wówczas równanie (4.69) możemy podzielić na pod-macierze i przedstawić w następu-

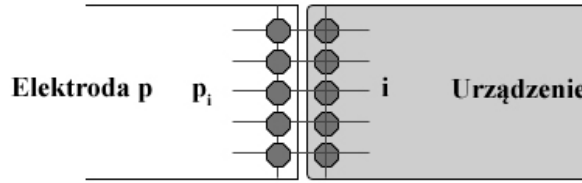
jący sposób:

$$\begin{bmatrix} G_p & G_{pC} \\ G_{Cp} & G_C \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (E + i\eta)I - H_p & \tau_p \\ \tau_p^+ & EI - H_C \end{bmatrix}^{-1} \quad (4.70)$$

gdzie macierz $[(E + i\eta)I - H_p]$ reprezentuje wyizolowane doprowadzenie, macierz $[EI - H_C]$ reprezentuje wyizolowane urządzenie zaś τ_p jest macierzą sprzężenia pomiędzy urządzeniem a doprowadzeniem o wymiarze $\infty \times M$. Macierz sprzężenia jest niezerowa tylko dla sąsiadujących punktów i oraz p_i :

$$\tau_p(p_i, i) = t, \quad (4.71)$$

gdzie t jest współczynnikiem sprzężenia elektrody z urządzeniem i może przybierać wartości w zakresie od 0 do 1. W sytuacji gdy $t = 0$ urządzenie nie jest sprzężone z elektrodą (jest zamknięte), zaś dla $t = 1$ urządzenie jest całkowicie otwarte.



Rysunek 4.12: Przewodnik opisany Hamiltonianem H_C , połączony z elektrodą opisaną Hamiltonianem H_p za pomocą macierzy sprzężenia τ_p .

Z powyższych równań możemy uzyskać wyrażenie reprezentujące G_C , ponieważ w tym momencie jest ono dla nas najbardziej interesujące. Z równań (4.70) i (4.71), mnożąc odpowiednie wiersze i kolumny przez siebie a następnie przekształcając je, otrzymujemy równania:

$$[(E + i\eta)I - H_p]G_{pC} + [\tau_p]G_C = 0, \quad (4.72)$$

oraz

$$[EI - H_C]G_C + [\tau_p^+]G_{pC} = I. \quad (4.73)$$

Z równania (4.72) otrzymujemy

$$G_{pC} = -g_p^R \tau_p G_C, \quad (4.74)$$

gdzie

$$g_p^R = [(E + i\eta)I - H_p]^{-1} \quad (4.75)$$

jest funkcją Greena dla izolowanej półnieskończonej elektrody. Wstawiając równanie (4.74) do (4.73) otrzymujemy:

$$G_C = [EI - H_C - \tau_p^+ g_p^R \tau_p]^{-1} \quad (4.76)$$

Powyższa postać równania pokazuje w jaki sposób elektroda modyfikuje funkcję Greena izolowanego urządzenia. Macierze pojawiające się w wyrażeniu $\tau_p^+ g_p^R \tau_p$ mają nieskończony wymiar, ponieważ brane są pod uwagę półnieskończone doprowadzenia. Może się wydawać w tym momencie, że nie zyskaliśmy zbyt dużo, ponieważ aby uzyskać z równania (4.75) funkcję g_p^R musimy odwrócić nieskończoną macierz. Niemniej jednak nie jest to konieczne, gdyż zakładamy, że do urządzenia dołączone są idealne doprowadzenia. Dlatego funkcja g_p^R , która reprezentuje funkcję Greena dla odizolowanego doprowadzenia, może być obliczona w sposób analityczny. Korzystając z równań (4.76) i (4.71) możemy zapisać

$$[\tau_p^+ g_p^R \tau_p]_{ij} = t^2 g_p^R(p_i, p_j) \quad (4.77)$$

ponieważ macierz sprzężenia τ_p jest równa zero dla wszystkich punktów w doprowadzeniu z wyjątkiem punktów (p_i, p_j) , które są przyległe do (i, j) wewnątrz przewodnika. Zakładając, że różne doprowadzenia dołączone do urządzenia są niezależne tak, że ich wpływ jest addytywny, możemy zapisać

$$G^R = [EI - H_C - \Sigma^R]^{-1}, \quad (4.78)$$

gdzie

$$\begin{aligned} \Sigma^R &= \sum_p \Sigma_p^R \\ \Sigma_p^R(i, j) &= t^2 g_p^R(p_i, p_j). \end{aligned} \quad (4.79)$$

Wyrażenie Σ^R może być przedstawione jako efektywny Hamiltonian wynikający z oddziaływania przewodnika (urządzenia) z doprowadzeniami. Podobne wyrażenie jest też często używane do opisu oddziaływania elektronów z fononami lub innymi elektronami, i ogólnie nazywane jest „energią własną” (ang. *self-energy*). Przez analogię będziemy nazywać Σ^R energiami własnymi związanymi z elektrodami.

Chcąc wykorzystać równania (4.78) i (4.79) potrzebujemy wyznaczyć energie własne Σ^R . Dla półnieskończonej zdyskretyzowanej elektrody funkcja Greena g_p^R pomiędzy dwoma punktami wzdłuż krawędzi dana jest przez

$$g_p^R(p_i, p_j) = -\frac{1}{t} \sum_m \chi_m(p_i) \exp[ik_m a] \chi_m(p_j) \quad (4.80)$$

gdzie rzeczywista funkcja χ_m opisuje poprzeczny profil modu m w doprowadzeniu p . Podstawiając równanie (4.80) do (4.79) otrzymujemy wyrażenie na energię własną elektrody:

$$\Sigma_p^R(i, j) = -t \sum_{m \in p} \chi_m(p_i) \exp[+ik_m a] \chi_m(p_j). \quad (4.81)$$

Mając wyznaczone funkcje Greena, możemy je wykorzystać do wyznaczenia funkcji transmisji w postaci

$$\bar{T}_{pq} = \text{Tr}[\Gamma_p G^R \Gamma_q G^A], \quad (4.82)$$

gdzie „Tr” oznacza ślad macierzy, zaś elementy macierzy Γ_p są dane przez

$$\Gamma_p(i, j) = \sum_m \chi_m(p_i) \frac{\hbar v_m}{a} \chi_m(p_j) \quad (4.83)$$

Wykorzystując wyrażenie na energię własną (4.81) oraz relację pomiędzy prędkością a wektorem $v_m \equiv \hbar k_m / m$ można łatwo pokazać, że

$$\Gamma_p = i[\Sigma_p^R - \Sigma_p^A], \quad (4.84)$$

gdzie przedwczesna energia własna (Σ_p^A) jest sprzężona po hermitowsku z opóźnioną energią własną (Σ_p^R). Funkcja Greena G^R opisuje dynamikę elektronów wewnątrz urządzenia, w którym efekt oddziaływania z elektrodami reprezentowany jest przez Σ^R . Funkcja Γ opisuje sprzężenie pomiędzy kontaktami a urządzeniem.

Ważną wielkością definiowaną za pomocą funkcji Greena jest gęstość spektralna A :

$$A \equiv i[G^R - G^A] = G^R \Gamma G^A = G^A \Gamma G^R, \quad (4.85)$$

która pełni rolę uogólnionej gęstości stanów w przewodniku. Ślad macierzy funkcji spektralnej reprezentuje gęstość stanów:

$$N(E) = \frac{1}{2\pi} \text{Tr}[A(E)], \quad (4.86)$$

zaś jej elementy diagonalne określają lokalną gęstość stanów, wyrażoną jako

$$\rho(\mathbf{r}, E) = \frac{1}{2\pi} A(\mathbf{r}, \mathbf{r}; E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}[G^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}; E)] \quad (4.87)$$

4.6 Nierównowagowe funkcje Greena

Formalizm nierównowagowych funkcji Greena pozwala na badanie kwantowego transportu nośników ładunku z uwzględnieniem oddziaływań, np. elektron-elektron, elektron-fonon. Łączy w sobie dynamikę kwantową ze statystycznym opisem rozpraszania. Wymaga on wprowadzenia kilku nowych koncepcji, m.in. funkcji korelacji.

Rozważmy jednorodny przewodnik, którego stany własne są falami płaskimi, numerowanymi przez ich wektor falowy $\mathbf{k}$:

$$|\mathbf{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}},$$

gdzie V jest objętością. W półklasycznym obrazie elektrony mogą być opisywane poprzez funkcję rozkładu $f(\mathbf{k})$, która określa liczbę elektronów obsadzających stan $\mathbf{k}$. W obrazie mechaniki kwantowej, aby móc do pewnego stopnia opisać oddziaływanie elektronów z otoczeniem musimy wprowadzić macierz gęstości $\rho(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$. Elektron z funkcją falową

$$\sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}} |\mathbf{k}\rangle$$

posiada macierz gęstości $\rho(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \Psi_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}'}^*$.

W dalszej części potrzebujemy uogólnić funkcję rozkładu $f(\mathbf{k})$ na macierz gęstości $\rho(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ w celu uwzględnienia informacji dotyczących korelacji fazy funkcji falowej. W przypadku opisu systemu w dyskretnych poziomach energetycznych, potrzebujemy funkcji korelacji zależnej od dwóch czasów $G^n(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; t, t')$

$$f(\mathbf{k}; t) \rightarrow G^n(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; t, t'),$$

która opisuje korelację pomiędzy amplitudą w stanie $\mathbf{k}$ w czasie t , a amplitudą w stanie $\mathbf{k}'$ i czasie t' . Dla stanów stacjonarnych funkcja korelacji zależy wyłącznie od różnicy pomiędzy tymi dwoma czasami i może być przedstawiona jako transformata Fouriera w postaci:

$$G^n(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; E) = \int \frac{1}{\hbar} G^n(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \tau) e^{-iE\tau/\hbar} d\tau \quad (\tau \equiv t - t') \quad (4.88)$$

Jak było wspomniane wcześniej, niektóre rozważania dotyczące transportu kwantowego oparte są na macierzy gęstości $\rho(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; t)$, która jest podzbiorem funkcji korelacji uzyskanych dla $t' = t$:

$$\rho(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; t) = [G^n(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; t, t')]_{t'=t}$$

Z równania (4.88) można bezpośrednio pokazać, że powyższe wyrażenie jest równoważne z całkowaniem $G^n(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; t, t')$ względem wszystkich energii

$$[G^n(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; t, t')]_{t=t'} = \int \frac{1}{2\pi} G^n(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; E) dE. \quad (4.89)$$

Elementy diagonalne funkcji korelacji dają nam liczbę elektronów obsadzających określony stan. Z równania (4.89) otrzymujemy

$$f(\mathbf{k}) = [G^n(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; t, t')]_{\mathbf{k}=\mathbf{k}', t=t'} = \int \frac{1}{2\pi} G^n(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; E) dE \quad (4.90)$$

Powyższe równanie jest nie tylko prawdziwe dla reprezentacji $\mathbf{k}$, lecz także dla każdej innej reprezentacji. Dla przykładu możemy zapisać gęstość elektronów w przestrzeni rzeczywistej jako

$$n(\mathbf{r}) = 2 \times \int \frac{1}{2\pi} G^n(\mathbf{r}, \mathbf{r}; E) dE \quad (4.91)$$

gdzie czynnik 2 uwzględnia spin elektronu. Wyrażenie to możemy również zapisać w terminach gęstości elektronów na jednostkę energii $n(r; E)$ jako

$$n(\mathbf{r}) = 2 \int n(\mathbf{r}; E) dE \quad (4.92)$$

gdzie $2\pi n(\mathbf{r}; E) = G^n(\mathbf{r}, \mathbf{r}; E)$

Przedstawiona notacja funkcji korelacji dla elektronów G^n zaczerpnięta została z [101], natomiast w literaturze przedmiotu używana jest równoważna notacja $-iG^<$. Używając tych samych argumentów co w przypadku elektronów, możemy zdefiniować funkcję korelacji dla dziur G^p (lub $+iG^>$). Ponieważ trudno jest określić precyzyjnie różnicę pomiędzy G^n a G^p bez użycia formalizmu drugiej kwantyzacji, dlatego funkcje korelacji wyraża się w terminach operatorów kreacji i anihilacji, odpowiednio $a_{\mathbf{k}}^\dagger$ i $a_{\mathbf{k}}$:

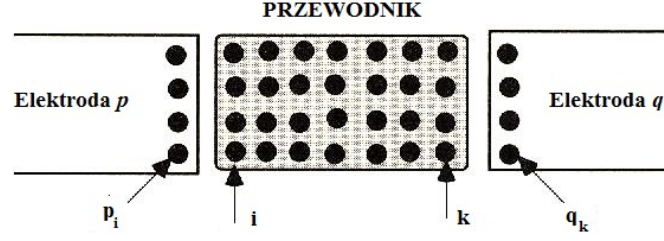
$$G^n(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; t, t') = \langle a_{\mathbf{k}'}^\dagger(t') a_{\mathbf{k}}(t) \rangle,$$

$$G^p(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; t, t') = \langle a_{\mathbf{k}}(t) a_{\mathbf{k}'}^\dagger(t') \rangle,$$

gdzie $\langle \dots \rangle$ oznaczają wartości oczekiwane. W przybliżeniu jednoelektronowym operatory kreacji i anihilacji redukują się do jednocząsteczkowych funkcji falowych i ich odpowiednich sprzężeń zespolonych. Ponieważ funkcje falowe komutują ze sobą, zarówno G^n jak i G^p można zapisać za pomocą tego samego wyrażenia:

$$\Psi_{\mathbf{k}'}^*(t') \Psi_{\mathbf{k}}(t)$$

Sposób uzyskania rozwiązania danego problemu z użyciem metody NEGF możemy przedstawić schematycznie w kilku krokach. Procedurę rozpoczynamy od wyboru dyskretnej siatki obliczeniowej w przestrzeni rzeczywistej obejmującej przewodnik oraz kontakty (Rysunek 4.13). Jeżeli siatka składa się z N punktów, wówczas każda z wielkości, którą mamy obliczyć (G_n , G^R , Σ^n , Σ^R , itp.) jest macierzą o wymiarze $(N \times N)$ dla każdej energii.


 Rysunek 4.13: Przewodnik podłączony z elektrodami p i q .

W pierwszym kroku obliczamy funkcję energii własnych doprowadzeń, wykorzystując otrzymany rezultat dany równaniem (4.81)

$$\begin{aligned}\Sigma_p^R(i, j; E) &= t^2 g_p^R(p_i, p_j) \\ &= -t \sum_{m \in p} \chi_m(p_i) \exp[+ik_m a] \chi_m(p_j).\end{aligned}\quad (4.93)$$

Parametr $t = \hbar^2 / 2ma^2$ jest powiązany z odstępem a pomiędzy dwoma punktami dyskretnej siatki o indeksach i oraz j . Punkt w doprowadzeniu p oznaczony jest przez p_i jeśli jest przyległy do punktu i w przewodniku. Wykorzystując zależność

$$\Gamma = i [\Sigma^R - \Sigma_A] = \Sigma^{in} + \Sigma^{out} \quad (4.94)$$

możemy zapisać, że

$$\Gamma_p(i, j; E) = \sum_{m \in p} \chi_m(p_i) \frac{\hbar v_m}{a} \chi_m(p_j) \quad (4.95)$$

Liczba falowa k_m oraz prędkość v_m dla modu m powiązane są z energią E poprzez poniższą relację dyspersji (dla modelu ciasnego wiązania):

$$E = \epsilon_m + 2t(1 - \cos(k_m a))$$

oraz

$$\hbar v_m = \partial E / \partial k_m = 2at \sin(k_m a)$$

gdzie ϵ_m jest energią „odcięcia” (*cut-off energy*) dla modu m . Następnie potrzebujemy wyznaczyć funkcje Σ^{in} i Σ^{out} , których suma wynosi Γ . Aby uzyskać te funkcje zakładamy, że każdy z kontaktów p jest utrzymywany w lokalnym stanie równowagi z pewną funkcją rozkładu Fermiego $f_p(E)$. Dzięki temu możemy zapisać:

$$\Sigma_p^{in}(i, j; E) = f_p(E) \Gamma_p(i, j; E) \quad (4.96)$$

$$\Sigma_p^{out}(i, j; E) = (1 - f_p(E))\Gamma_p(i, j; E) \quad (4.97)$$

W drugim kroku należy obliczyć funkcje Greena w postaci:

$$G^R = [EI - H_C - \Sigma^R]^{-1}, \quad G^A = [G^R]^+ \quad (4.98)$$

Aby móc obliczyć powyższe funkcje należy zapisać Hamiltonian H_C (4.65) w postaci macierzowej:

$$\begin{aligned} [EI - H_C]_{ij} &= E - U(\mathbf{r}_i) - zt \quad (*), \\ &= \tilde{t}_{ij} \quad (**), \\ &= 0 \quad (***) \end{aligned} \quad (4.99)$$

gdzie: (*) jest dla $i = j$, (**) dla i oraz j będących najbliższymi sąsiadami, (***) dla pozostałych przypadków, z jest liczbą najbliższych sąsiadów (dla łańcucha liniowego $z = 2$, zaś dla siatki prostokątnej $z = 4$), natomiast $\mathbf{r}_i$ jest wektorem pozycji punktu i na siatce. Sprężenie pomiędzy dwoma najbliższymi sąsiadami dane jest wyrażeniem:

$$\tilde{t}_{ij} = t \exp[ie\mathbf{A} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)/\hbar] \quad (4.100)$$

W trzecim kroku należy wyznaczyć funkcje korelacji

$$G^n = G^R \Sigma^{in} G^A, \quad G^p = G^R \Sigma^{out} G^A \quad (4.101)$$

Funkcje rozproszeniowe uzyskiwane są poprzez sumowanie funkcji związanych z oddziaływaniami wewnątrz przewodnika (np. elektron-elektron, elektron-fonon) oraz funkcji związanymi z rozpraszaniem w kontaktach

$$\begin{aligned} \Sigma^{in} &= \left[\Sigma_\phi^{in} + \sum_p \Sigma_p^{in} \right], \\ \Sigma^{out} &= \left[\Sigma_\phi^{out} + \sum_p \Sigma_p^{out} \right], \end{aligned}$$

Komponenty związane z oddziaływaniem są „aktualizowane” z każdym kolejnym krokiem iteracji.

W kroku czwartym należy obliczyć funkcje energii własnych oraz funkcje rozpraszania ze względu na różnego rodzaju oddziaływania. Dla oddziaływania elektronu z fononem mamy

$$\begin{aligned} \Sigma_\phi^{in}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) &= \int D(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \hbar\omega) G^n(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E - \hbar\omega) d(\hbar\omega) \\ \Sigma_\phi^{out}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) &= \int D(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \hbar\omega) G^p(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E + \hbar\omega) d(\hbar\omega) \end{aligned} \quad (4.102)$$

gdzie funkcje D opisuje przestrzenną korelację oraz widmo energetyczne związane z rozpraszaniem powodującym zmianę fazy funkcji falowej ($\hbar\omega > 0$ odpowiada absorpcji, $\hbar\omega < 0$ odpowiada emisji) i dana jest przez:

$$D(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \hbar\omega) = \sum_q |U_q|^2 \left\{ \begin{array}{l} \exp[-iq \cdot (\mathbf{r}, \mathbf{r}')] N_q \delta(\omega - \omega_q) \\ + \exp[+iq \cdot (\mathbf{r}, \mathbf{r}')] (N_q + 1) \delta(\omega + \omega_q) \end{array} \right\} \quad (4.103)$$

W równaniu tym N_q jest liczbą fononów z wektorem falowym q i częstotliwością ω_q , U_q jest potencjałem „odczuwanym” przez elektron, pochodzącym od jednego fononu z wektorem falowym q . Zakładając, że „morze” fononów jest przeważnie w stanie równowagi termicznej (co jest dobrym przybliżeniem dla niskich napięć), N_q dane jest przez funkcję Bose-Einsteina:

$$N_q = \frac{1}{\exp[\hbar\omega_q/k_B T] - 1}$$

Wyrażenie pozwalające wyznaczyć funkcje energii własnych przedstawia się następująco:

$$\Sigma_\varphi^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = -\Gamma_\varphi^H(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) + \frac{i}{2} \Gamma_\varphi(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) \quad (4.104)$$

gdzie

$$\Gamma_\varphi(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \Sigma_\varphi^{in}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) + \Sigma_\varphi^{out}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E),$$

oraz

$$\Gamma_\varphi^H(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = P \int \frac{\Gamma_\varphi(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E')}{E - E'} dE'.$$

Symbol P w ostatnim wyrażeniu oznacza wartość główną całki, zaś funkcja $\Gamma_\varphi^H(E)$ jest transformacją Hilberta funkcji $\Gamma_\varphi(E)$.

Po zakończeniu obliczeń powyższych funkcji należy sprawdzić, czy uległy one zmianie względem poprzedniej iteracji. Jeśli tak, to powtarzamy operacje od drugiego kroku aż do momentu, gdy funkcje te będą zbieżne. Wówczas w kolejnym kroku możemy użyć ich do wyznaczenia interesujących nas wielkości, np. prądu w kontaktach, który dla doprowadzenia p jest równy

$$I_p = 2(\text{dla spinu}) \times \int i_p(E) dE \quad (4.105)$$

gdzie

$$i_p = \frac{e}{h} \text{Tr}[\Sigma_p^{in} G^p - \Sigma_p^{out} G^n] = \frac{e}{h} \text{Tr}[\Sigma_p^{in} A - \Gamma_p G^n] \quad (4.106)$$

4.7 Detektor THz

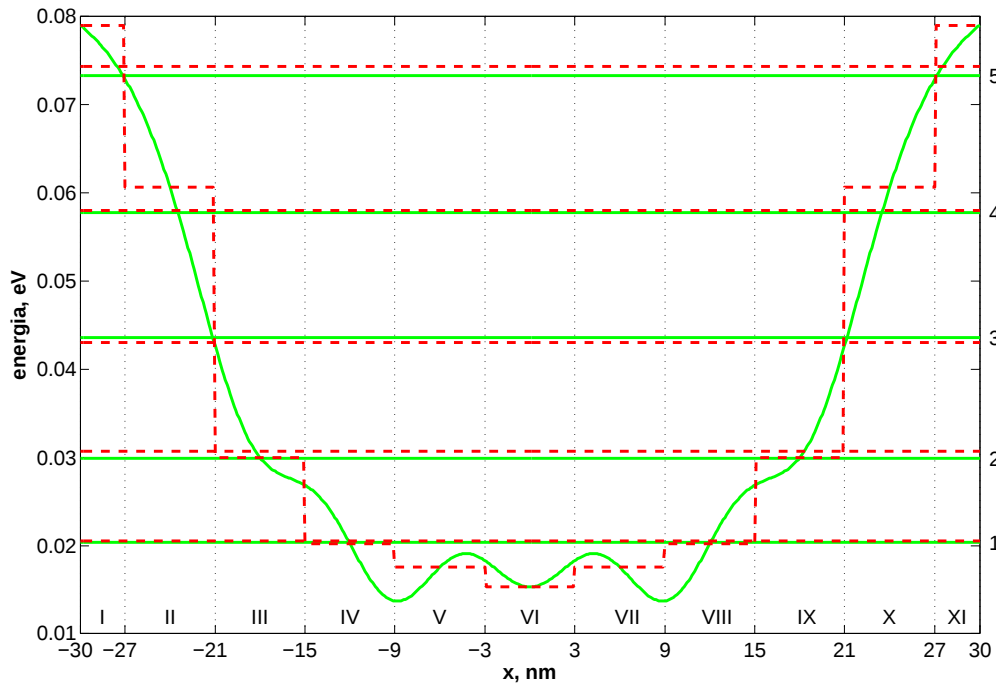
Omówione powyżej metody ISP oraz NEGF zostały użyte do zaprojektowania przestrzajnego detektora częstotliwości w zakresie THz [102]. Jego konstrukcja opiera się na odpowiednim dobraniu odległości między skwantowanymi poziomami energetycznymi w studni potencjału, aby możliwa była absorpcja promieniowania THz. Jest to zadaniem dość trudnym, ponieważ takie sygnały są zasadniczo słabe, zaś ze względu na niską energię fotonów (w zakresie 1 – 10 meV), trudno je wyróżnić spośród termicznego szumu otoczenia. Dlatego często wymagane jest obniżenie temperatury pracy urządzenia do poziomu kilku stopni Kelwina. W przypadku omawianego detektora temperatura ta wynosi $T = 4$ K, zaś odległość między poziomami jest rzędu $2.5K_B T$, dzięki czemu możliwe jest uzyskanie wystarczającej rozdzielczości pików prądu tunelowego na charakterystyce I-V urządzenia. Stosując metodę ISP, został odtworzony kształt potencjału studni kwantowej, na podstawie założonego zbioru pięciu poziomów energetycznych. Odległości między trzema pierwszymi poziomami dobrane są w następujący sposób:

$$\Delta E_{21} = 10.2 \text{ meV}$$

$$\Delta E_{32} = 12.3 \text{ meV}$$

co odpowiada energii promieniowania o częstotliwości odpowiednio 2.46 THz oraz 2.97 THz. Odległości pomiędzy pozostałymi poziomami energetycznymi zostały przyjęte tak, aby kształt zrekonstruowanego potencjału był możliwie prosty, dzięki czemu łatwiejszy do zrealizowania.

Na Rysunku 4.14 przedstawiony jest potencjał (linia zielona ciągła), zrekonstruowany za pomocą metody ISP na podstawie zbioru pięciu poziomów energetycznych, których wartości numeryczne przedstawione są w Tabeli 4.1. Linia czerwona przerywana reprezentuje aproksymację schodkową zrekonstruowanego potencjału. Poziome linie odpowiadają poziomom energetycznym, które zostały wyznaczone w wyniku rozwiązania zagadnienia własnego dla równania Schrödingera ze zrekonstruowanym potencjałem (zielone linie ciągłe) oraz z aproksymacją schodkową (czerwone linie przerywane). Struktura przedstawiona na Rysunku 4.14 może zostać wytworzona na bazie materiałów $Al_zGa_{1-z}As$ poprzez odpowiedni dobór koncentracji materiałów Al , Ga i As . Przed przyłożeniem napięcia, w stanie równowagi poziom Fermiego powinien być usytuowany



Rysunek 4.14: Struktura proponowanego detektora THz, która może być wytworzona na bazie materiałów $Al_xGa_{1-x}As$. Struktura podzielona jest na jedenaście sekcji, dla których x wynosi odpowiednio: I - 0.0718, II - 0.0551, III - 0.0273, IV - 0.0184, V - 0.0159, VI - 0.0139, VII - 0.0159, VIII - 0.0184, IX - 0.0273, X - 0.0551, XI - 0.0718.

Tabela 4.1: Widmo energetyczne QW przedstawionej na Rysunku 4.14. Wszystkie oznaczenia są analogiczne do umieszczonych w Tabeli 3.1 (wszystkie energie w eV).

ε	energie wejściowe	energie wyjściowe	aproxymacja schodkowa
ε_1	0.0207	0.0204	0.0206
ε_2	0.0310	0.0299	0.0307
ε_3	0.0455	0.0436	0.0430
ε_4	0.0600	0.0578	0.0580
ε_5	0.0744	0.0733	0.0744

znacznie poniżej pierwszego poziomu energetycznego, dzięki czemu wszystkie poziomy energetyczne nie będą zapełnione elektronami. Przykładając do struktury napięcie o odpowiedniej wartości, możemy obniżyć pierwszy poziom energetyczny w QW poniżej potencjału elektrochemicznego w lewym kontakcie. Wówczas stan ten będzie zapełniony i możliwe będzie przejście elektronów z pierwszego do drugiego poziomu energetyczne-

go pod wpływem absorpcji padającego na strukturę promieniowania o określonej częstotliwości, co doprowadzi do powstania prądu tunelowego. Zwiększając dalej przyłożone napięcie, możemy wyrównać potencjał elektrochemiczny w lewym kontakcie z drugim poziomem energetycznym doprowadzając do jego zapełnienia. Dzięki temu, analogicznie jak w poprzedniej sytuacji, możliwa będzie absorpcja fali elektromagnetycznej o innej częstotliwości.

Do przeprowadzenia symulacji wykorzystany został formalizm NEGF, którego głównymi równaniami są równania Dysona dla opóźnionych funkcji Greena G^R i równania Keldysha dla korelacyjnych funkcji Greena $G^<$. W przedstawionym w pracy [103] podejściu, które może być wykorzystane dla struktur warstwowych z symetrią translacyjną w płaszczyźnie warstw, autor rozważa $G^{R,<}$ jako funkcje energii E , współrzędnych x, x' oraz modułu wektora pędu w płaszczyźnie $k_{||}$. Wówczas równanie Dysona przybiera postać:

$$(E - H - \Sigma_{scatt}^R - \Sigma_{cont}^R)G^R(E, k_{||}, x, x') = \delta(x - x'), \quad (4.107)$$

gdzie E jest energią, H jest Hamiltonianem opisującym urządzenie, zaś Σ^R są opóźnionymi energiami własnymi dla rozpraszania i kontaktów. Równanie Keldysha ma postać:

$$G^<(E, k_{||}, x, x') = \int \int dx_1 dx_2 G^R(E, k_{||}, x, x_1) \Sigma^<(E, k_{||}, x_1, x_2) G^{R*}(E, k_{||}, x_2, x'), \quad (4.108)$$

gdzie $*$ oznacza sprzężenie zespolone, zaś $\Sigma^< = \Sigma_{scatt}^< + \Sigma_{cont}^<$. Równania (4.107) i (4.108) uzupełnione zostały o równania pozwalające na wyznaczenie energii własnych Σ^R i $\Sigma^<$ z wykorzystaniem funkcji G^R i $G^<$. Szczegółowa forma tych równań zależy od zaangażowanych mechanizmów rozpraszania. Cały zestaw równań rozwiązywany był iteracyjnie. Proces iteracji może być obcięty tuż po pierwszej iteracji, otrzymując tak zwane pierwsze przybliżenie Borna, niemniej jednak rozwiązanie samouzgodnione osiąga się zazwyczaj po wielu iteracji. Gdy znane są już funkcje G^R i $G^<$, tak jak było wspomniane wcześniej, można obliczyć różne wielkości związane z transportem nośników ładunku, np. gęstość stanów elektronów,

$$N(E, k_{||}, x) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}\{G^R(E, k_{||}, x, x)\}, \quad (4.109)$$

$$n(E, k_{||}, x) = \frac{1}{2\pi} \text{Im}\{G^<(E, k_{||}, x, x)\}, \quad (4.110)$$

prąd [103], absorpcję optyczną [104] czy też odpowiedź foto-prądową [96].

Zbiór 1D równań NEGF rozwiązywany był w zakresie $0 < x < L$, który określa rozmiar modelowanej struktury (urządzenia). Niemniej jednak odnoszą się one do „otwartego” urządzenia, ponieważ energie własne kontaktów, $\Sigma_{cont}^{R,<} = \Sigma_{L,R}^{R,<}$, w równaniach (4.107) i (4.108) uwzględniają oddziaływania z doprowadzeniami dołączonymi do struktury w punktach $x = 0$ (lewy (L) kontakt) oraz $x = L$ (prawy (R) kontakt). W najprostszym przypadku, doprowadzenia są półnieskończonymi jednorodnymi przewodnikami, znajdującymi się w równowadze termicznej. Wówczas korelacyjne energie własne kontaktów powiązane są z opóźnionymi relacją [103]:

$$\Sigma_{L,R}^{<}(E, k_{||}) = -2i\text{Im}\{\Sigma_{L,R}^R(E, k_{||})\}f_{L,R}(E),$$

gdzie $f_{L,R}(E)$ są rozkładami Fermiego-Diraca w L i R kontakcie.

Przy dokładnych obliczeniach wymagane jest uwzględnienie wielopasmowej struktury energetycznej półprzewodników i ciał stałych, lecz okazuje się, że metoda NEGF prowadzi do dobrych wyników nawet w przybliżeniu jednopasmowym. Przykłady tego obejmują rezonansowe diody tunelowe [94], tranzystory polowe [105], czy też kwantowe lasery kaskadowe [98, 106–109]. Powyższe urządzenia modelowane były z użyciem we wzorze (4.107) jednowymiarowego Hamiltonianu dla pasma przewodnictwa w przybliżeniu masy efektywnej:

$$H(k_{||}, x) = \frac{-\hbar^2}{2} \frac{d}{dx} \frac{1}{m(x)} \frac{d}{dx} - \frac{\hbar^2 k_{||}^2}{2m(x)} - V(x).$$

Podejście jednopasmowe jest szczególnie uzasadnione w przypadku urządzeń, których działanie jest oparte na wykorzystaniu zjawisk wewnątrzpasmowych. Wpływ pasm położonych wyżej może być uwzględniony za pomocą wprowadzenia zależności masy efektywnej m od energii. Jednak nie jest to konieczne w przypadku niskich temperatur i lekko domieszkowanych urządzeń wykonanych na bazie materiałów z szerokim pasmem zabronionym, tak jak w przypadku rozważanego detektora.

Dla zdyskretyzowanego 1D Hamiltonianu mas efektywnych energie własne sprzęgające kontakty z urządzeniem mają postać [103]:

$$\begin{aligned} \Sigma_L^R(E, k_{||}) &= \Sigma_{11}^R(E, k_{||}) = -t_{L1} \exp(ik_L a), \\ \Sigma_R^R(E, k_{||}) &= \Sigma_{NN}^R(E, k_{||}) = -t_{RN} \exp(ik_R a), \end{aligned}$$

gdzie a oznacza krok dyskretnej siatki obliczeniowej, 1, N są odpowiednio pierwszym i ostatnim punktem siatki, zaś $t_{L1,RN} = \hbar^2 / (2m(x=0, L)a^2)$ są całkami przeskoku obliczonymi dla interfejsu urządzenie-kontakt. $k_{L,R}$ są momentami pędów obliczonymi z relacji

dyspersji $\hbar^2(k_{L,R}^2 + k_{||}^2)/(2m) = E - V_{CL,R}$, gdzie $V_{CL,R}$ są krawędziami pasm przewodnictwa w lewym i prawym kontakcie. Energie własne oddziaływania elektron-foton dla pola elektromagnetycznego spolaryzowanego wzdłuż kierunku x zostały obliczone w liniowym przybliżeniu dipolowym. W notacji dla dyskretnej przestrzeni rzeczywistej mają one postać [96, 97]:

$$\Sigma_{lm}^<(E, k_{||}) = \sum_p \sum_q M_{lp} [N_v G_{pq}^<(E - \hbar v, k_{||}) + (N_v + 1) G_{pq}^<(E + \hbar v, k_{||})] M_{qm}, \quad (4.111)$$

$$\begin{aligned} \Sigma_{lm}^R(E, k_{||}) = \sum_p \sum_q \{ & M_{lp} [N_v G_{pq}^R(E + \hbar v, k_{||}) + (N_v + 1) G_{pq}^R(E - \hbar v, k_{||})] M_{qm} + \\ & + \frac{1}{2} [G_{pq}^<(E - \hbar v, k_{||}) - G_{pq}^<(E + \hbar v, k_{||})] \}. \end{aligned}$$

Indeksy l, m, p, q odnoszą się do punktów siatki, N_v jest liczbą fotonów z energią $\hbar v$ w objętości Ω , w której ma miejsce absorpcja, zaś

$$M_{lp} = \frac{e\hbar}{2ima} \left(\frac{1}{4\pi\Omega v \epsilon_0} \right)^{1/2} P_{lm}, \quad P_{lm} = \begin{cases} 1 & m = l + 1 \\ -1 & m = l - 1 \\ 0 & \text{else} \end{cases}$$

gdzie ϵ_0 jest stałą dielektryczną.

Odpowiedź rozważanego fotodetektora na promieniowanie elektromagnetyczne obliczona była na podstawie wyznaczenia zmiany płynących prądów przez terminale. Prądy te powiązane są z korelacyjną funkcją Greena w następujący sposób:

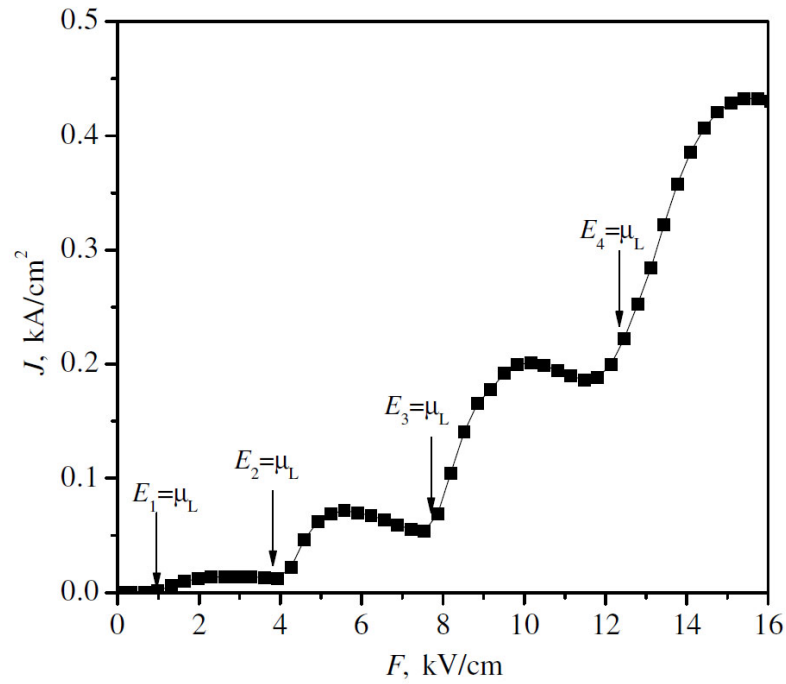
$$\begin{aligned} I_{L,R} &= \frac{A}{4\pi} \int \int dE dk_{||}^2 I_{L,R}(E, k_{||}), \\ I_{L,R} &= \frac{e}{\pi\hbar} 2\text{Im}\{\Sigma_{L,R}^R\} (2f_{L,R} \text{Im}\{G_{11,NN}^R\} - iG_{11,NN}^<), \end{aligned} \quad (4.112)$$

gdzie A jest powierzchnią przekroju poprzecznego urządzenia. W ogólności, fotoprąd δI obliczany jest jako różnica prądu terminalowego, wyznaczonego dla urządzenia, na które pada promieniowanie i prądu ciemnego. Gdy oddziaływanie z polem elektromagnetycznym jest słabe i nie wpływa znacząco na „stany ciemne”, wówczas δI może być obliczone w pierwszym przybliżeniu Borna bezpośrednio z (4.112), wykorzystując jedynie energie własne oddziaływania elektron-foton (4.111) w całce (4.108), tzn. $\Sigma^< = \Sigma_{photon}^<$. Energie własne (4.111), korelacyjna funkcja Greena $G^<$ oraz fotoprąd są wówczas liniowo zależne od strumienia fotonów $I_v = Nc\Omega^{-1}(\mu_r \epsilon_r)^{-1/2}$, gdzie c jest prędkością światła, zaś μ_r i ϵ_r to odpowiednio względna podatność magnetyczna i stała dielektryczna. Odpowiedz foto-prądowa dana jest przez [96]:

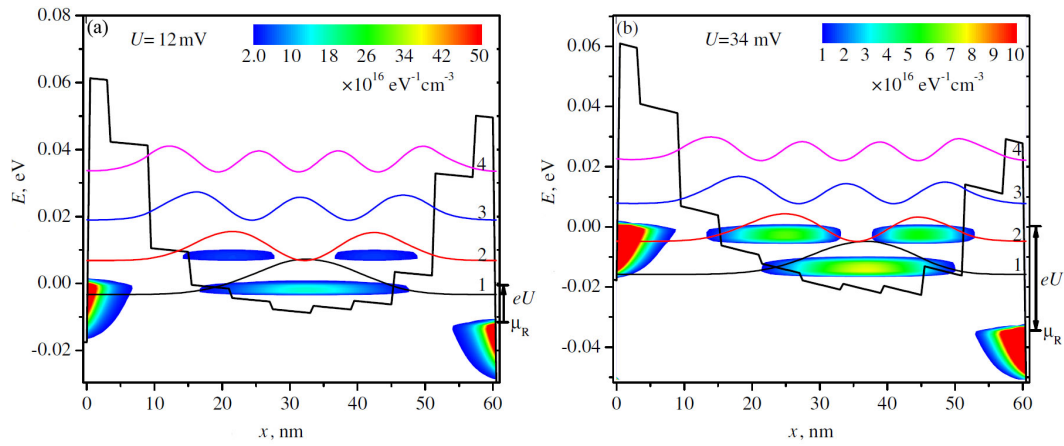
$$R_I \equiv \frac{\delta I}{AeI_v}. \quad (4.113)$$

Przedstawione poniżej wyniki zostały otrzymane z wykorzystaniem przedstawionego powyżej formalizmu NEGF oraz metody ISP [102]. Symulacje przeprowadzone były na siatce numerycznej w przestrzeni rzeczywistej, z krokiem $a = 0.5$ nm, zaś energia i kwadrat momentu pędu w płaszczyźnie wyznaczone były z rozdzielczością $dE = \hbar^2 dk_{\parallel}^2 / 2m = 1$ meV. Obliczenia przeprowadzone były w temperaturze $T = 4$ K. Jak było już wspomniane, do struktury zostały dołączone dwie identyczne półnieskończone jednorodne elektrody, umieszczone po obydwu stronach projektowanego urządzenia. Potencjał elektrochemiczny w lewym kontakcie został usytuowany w punkcie 0, $\mu_L = 0$, natomiast w prawym kontakcie $\mu_R = -eU$, gdzie U jest przyłożonym napięciem.

Na Rysunkach 4.15 - 4.18 przedstawione są rezultaty symulacji detektora THz, przeprowadzonych za pomocą NEGF. Na Rysunku 4.15 przedstawiona jest gęstość prądu ciemnego względem przyłożonego do struktury pola elektrycznego. Gęstość prądu obliczona została na podstawie (4.112) po uzyskaniu samouzgodnionych rozwiązań NEGF. Oddziaływanie elektron-foton nie zostało uwzględnione w wykorzystanym formalizmie w celu uzyskania rozwiązań w warunkach „ciemności”. Uwzględnione zostały natomiast energie własne fononów optycznych (*LO-fonon*). Niemniej jednak oddziaływanie to prawie nie wpływa na prąd ciemny, ponieważ: 1) w założonej temperaturze, która wynosi 4 K, fonony optyczne „zamarzają”, 2) struktura energetyczna QW zapobiega emisji fononów LO z energią dla GaAs wynoszącą 36 meV, która jest znacznie większa od odległości pomiędzy poziomami energetycznymi w QW. Dlatego prąd, który przepływa przez struktury jest głównie prądem tunelowym. Zwiększa się on wraz ze wzrostem przyłożonego napięcia, kiedy to kolejne poziomy energetyczne w studni kwantowej są w rezonansie z zapełnionymi stanami w lewym doprowadzeniu. Strzałki na wykresie wskazują pola elektryczne, dla których poziomy energetyczne w QW detektora pokrywają się z potencjałem chemicznym w lewym kontakcie. „Schodki” prądowe nie są jednolite, ponieważ transmisja przez stany wzbudzone wzrasta wraz z numerem stanu. Kiedy energie stanów związanych zwiększają się, bariery stają się cieńsze i funkcje falowe mogą łatwiej „wyciekać” do kontaktów. Na Rysunku 4.16 przedstawiona jest wyliczona gęstość elektronów na podstawie (4.110) (kolorowe mapy). Linie odpowiadają funkcjom falowym dla kolejnych poziomów energetycznych. W formalizmie NEGF, który adresowany jest dla systemów otwartych, linie te w rzeczywistości przedstawiają gęstość stanów (DOS) obliczoną z (4.109) dla zanikającego w płaszczyźnie pędu ($k_{\parallel} = 0$), zaś wartości energii, dla

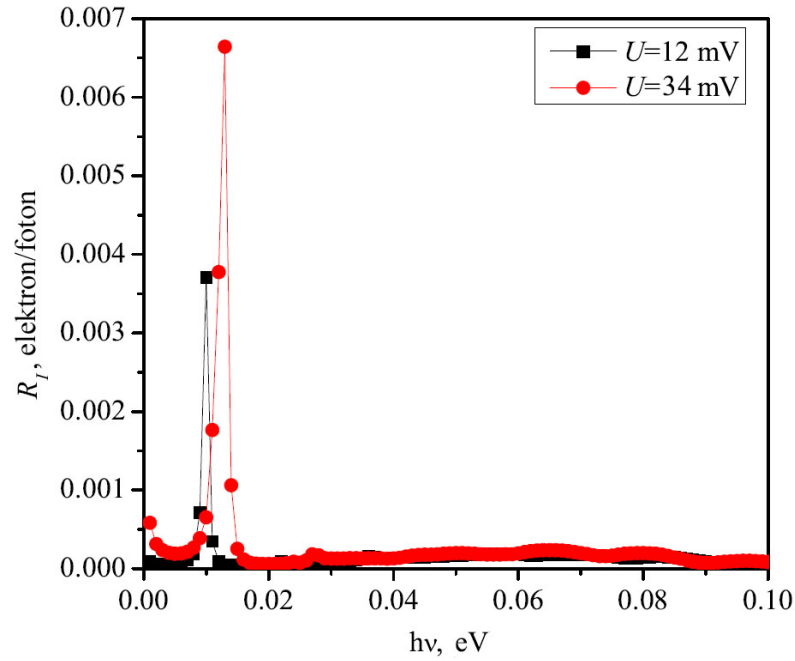


Rysunek 4.15: Gęstość prądu ciemnego w zależności o przyłożonego do struktury napięcia pola elektrycznego.



Rysunek 4.16: Gęstość elektronów wyliczona zgodnie z wzorem (4.110), scałkowana względem wektora falowego w płaszczyźnie $k_{||}$.

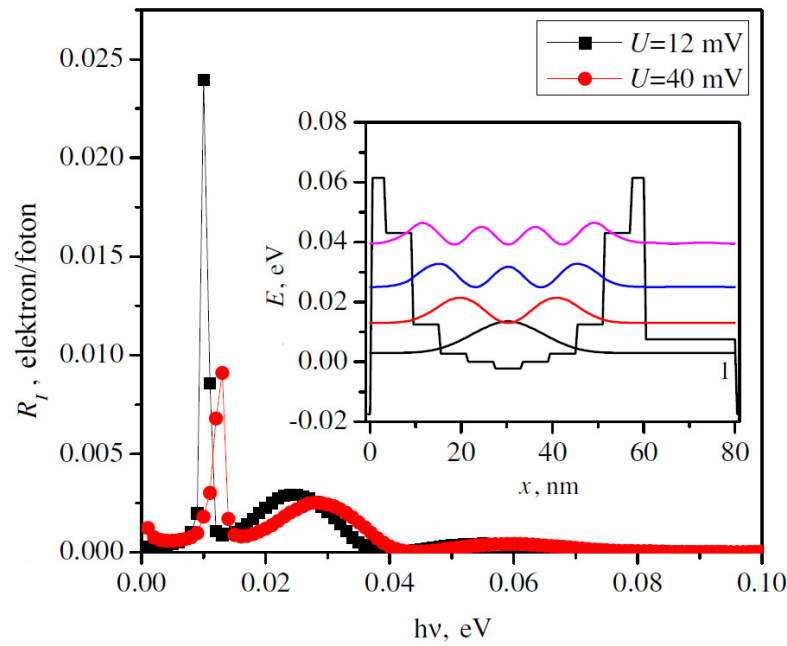
których DOS posiada ostre piki, odpowiadają wartościom własnym energii w układach zamkniętych. Na rysunku tym przedstawione jest również obsadzenie poszczególnych poziomów energetycznych w strukturze dla dwóch przyłożonych napięć: (a) $U = 12$ mV, (b) $U = 34$ mV. W przypadku (a) obsadzony elektronami jest tylko poziom podstawowy, zaś w przypadku (b) obsadzony jest zarówno poziom podstawowy jak i pierwszy poziom wzbudzony ($n = 2$). Obliczenia zostały przeprowadzone dla słabego pola elektro-



Rysunek 4.17: Odpowiedź foto-prądowa struktury z przyłożonym napięciem względem energii fotonu.

magnetycznego padającego na strukturę (strumień 5×10^{22} fotonów/cm²s), które zostało włączone do formalizmu poprzez energie własne oddziaływania elektron-foton. Energie te uwzględnione były w (4.107) i (4.108) do momentu uzyskania samouzgodnionych rozwiązań. Dla niższego napięcia (12 mV) pole elektromagnetyczne wzbudza niektóre elektrony do pierwszego stanu wzbudzonego ($n = 2$). Dla wyższego napięcia (34 mV) elektrony z zapełnionego pierwszego stanu wzbudzonego ($n = 2$) mogą zostać wzbudzone na wyższy poziom energetyczny ($n = 3$) pod wpływem pola elektromagnetycznego lub mogą, ze względu na stymulowaną emisję, przejść na niższy poziom ($n = 1$), jednocześnie zapełniając go (jeśli na strukturę nie pada żadna fala elektromagnetyczna, poziom ten jest niezapełniony).

Na Rysunku 4.17 przedstawiona jest odpowiedź foto-prądowa względem energii fotonów, obliczona w pierwszym przybliżeniu Borna zgodnie z (4.113), dla struktury, do której przyłożone jest odpowiednio napięcie $U = 12$ mV (czarne prostokąty) oraz 34 mV (czerwone kółka). W zależności od wartości napięcia pojawia się foto-odpowiedź układu dla $h\nu = 10$ meV (12 mV) lub 13 meV (34 mV). Wartości te są zgodne z zakładanymi do rekonstrukcji potencjału za pomocą metody ISP odległościami pomiędzy poszczególnymi poziomami $\Delta E_{12} = 10.2$ meV i $\Delta E_{23} = 12.3$ meV. Dla przejścia $2 \rightarrow 3$ ($U = 34$ mV) obserwujemy większą wartość R_I , ponieważ w tym przypadku (ze względu na mniejszą



Rysunek 4.18: Odpowiedź foto-prądowa struktury z dołączoną z prawej strony bariery o szerokości 20 nm względem energii fotonu.

szerokość i wysokość bariery) czas tunelowania do kontaktu z poziomem 3 jest znacznie krótszy niż z poziomu 2 ($U = 12$ mV). Dodając z prawej strony struktury bariery o szerokości 20 nm i wysokości ~ 25 meV (wstawka na Rysunku 4.18) możemy zwiększyć foto-odpowiedź dla $h\nu = 10$ meV. Bariera ta skutecznie blokuje odpływ nośników ładunku ze stanu podstawowego, zwiększając w ten sposób akumulację nośników w tym stanie. Dzięki temu zwiększona zostaje absorpcja dla przejścia $1 \rightarrow 2$, przez co znacznie zwiększa się odpowiedź foto-prądowa przy tej częstotliwości. Wyniki symulacji dla „ulepszonej” struktury detektora pokazane są na Rysunku 4.18. Po dołączeniu do struktury bariery, pojawia się również dodatkowa szerokopasmowa odpowiedź foto-prądowa dla energii fotonu ~ 30 meV, spowodowana absorpcją wolnych nośników ładunku w obszarze bariery.

ROZDZIAŁ 5

Analiza i podsumowanie wyników

W przedstawionej rozprawie doktorskiej zostały przedyskutowane trzy główne zagadnienia. Pierwsze z nich związane jest efektami fotogalwanicznymi mogącymi występować w asymetrycznych studniach kwantowych, umieszczonych w zewnętrznym polu magnetycznym. Zaproponowany przez Kibisa [17] model nieskończonego trójkątnego potencjału studni kwantowej, został przez nas zastąpiony bardziej realistycznymi modelami, których analiza przedstawiona została w rozdziale 2. Opisane w nim zostały badania zachowania nośników ładunku w kwantowych strukturach, w których jednocześnie łamana jest symetria tak względem współrzędnych przestrzennych jak i odwrócenia czasu. Do obliczeń zostały użyte dwa modele, trójkątna i półparaboliczna studnia kwantowa o skończonych głębokościach, umieszczone w zewnętrznym polu magnetycznym. Poprzez analizę numeryczną odpowiedniego równania Schrödingera, pokazaliśmy, że widmo energetyczne nośników ładunku jest anizotropowe względem współrzędnych przestrzennych, czyli $\epsilon_n(+k_x) \neq \epsilon_n(-k_x)$, co jest wyraźnie widoczne na Rysunkach 2.2 i 2.6. Prowadzi to do anizotropii transportu momentu pędu pod wpływem oddziaływania nośników ładunku ze spolaryzowanym światłem padającym na strukturę, która może być łatwo wytłumaczalna poprzez wprowadzenie pojęcia „zrenormalizowanej” masy efektywnej nośników ładunku. Rzeczywiście, pomimo faktu, że zaabsorbowane fotony dostarczają do nośników ładunku (elektronów) z wektorem falowym $+k_x$ oraz $-k_x$ ten sam pęd, ich prędkości odpowiadające $\langle +x \rangle$ i $\langle -x \rangle$ różnią się, ponieważ ich masy zrenormalizowane są różne. W dalszym kroku prowadzi to do anizotropii fotoprzewodnictwa $\sigma(+k_x) \neq \sigma(-k_x)$. Dzięki przeprowadzonej analizie udało się pokazać, że powstały efekt może być mierzalny dla pól magnetycznych rzędu kilku Tesli.

Drugie zagadnienie, przedstawione w niniejszej pracy, dotyczyło możliwości „inteligentnego” projektowania nanostruktur z wykorzystaniem metody odwrotnego problemu rozpraszania (ISP - *Inverse Scattering Problem Method*). W rozdziale 3 przedstawiona została metoda rekonstrukcji potencjału na podstawie danych rozproszeniowych, składających się z $2N$ parametrów. Połowa tych parametrów to N stanów związanych energii, zaś druga część to stałe normalizacyjne, które w przypadku studni kwantowych, są niedostępne. Okazuje się jednak, że w sytuacji gdy rozważamy symetryczne ze względu na inwersję współrzędnej przestrzennej potencjały, możliwe jest dokonanie rekonstrukcji potencjału tylko na podstawie informacji dotyczących położenia poziomów energetycznych. Ze względu na nietrywialny kształt zrekonstruowanego potencjału, dokonujemy jego aproksymacji - w omawianym przypadku jest to aproksymacja schodkowa. Jak zostało pokazane w niniejszej pracy, takie przybliżenie nie powoduje znaczącej zmiany widma energetycznego, powstałego po rozwiązaniu zagadnienia własnego dla RS z potencjałem aproksymacyjnym. Jednocześnie kształt zrekonstruowanego potencjału staje się możliwy do fizycznej realizacji za pomocą dostępnych technik, np. MBE. Podejście to daje możliwość inżynierom i technologom wybrać odpowiednią głębokość i widmo energetyczne studni kwantowej, tak aby stworzyć strukturę o wymaganej charakterystyce.

Na podstawie omawianej metody został stworzony solver w środowisku Matlab, którego zadaniem jest rekonstrukcja potencjału na podstawie zadanego widma energetycznego oraz głębokości i szerokości studni kwantowej. Oprogramowanie wyposażone jest w moduł pozwalający na rozwiązanie RS ze zrekonstruowanym potencjałem w celu sprawdzenia poprawności działania programu. Sposób jego testowania został umieszczony w dodatku D. Przetworzone w rozdziale trzecim przykłady wyraźnie pokazują, że opracowana metoda może być skutecznie stosowana do rekonstrukcji symetrycznych potencjałów, które następnie mogą być podstawą do tworzenia podwójnych studni kwantowych, czy też supersieci. Stworzona aplikacja umożliwia nie tylko obliczenie widma energetycznego danej struktury, ale również i funkcji falowych nośników ładunku. Dlatego możemy wyznaczyć także pozostałe ważne cechy urządzenia, np. siłę oscylatorów przejść kwantowych.

Trzecia część pracy doktorskiej dotyczyła możliwości połączenia metody ISP z zaawansowanymi technikami modelowania komputerowego struktur niskowymiarowych za pomocą nierównowagowych funkcji Greena. Został zaproponowany model detektora pro-

mieniowania elektromagnetycznego w zakresie THz, który może pracować na dwóch częstotliwościach. Konstrukcja sensora opiera się na odpowiednim dobraniu odległości między skwantowanymi poziomami energetycznymi w studni potencjału, umożliwiającymi absorpcję promieniowania THz. W pierwszym kroku, na podstawie założonego zbioru pięciu poziomów energetycznych, został zrekonstruowany potencjał studni kwantowej, przedstawiony na rysunku 4.14. W kolejnym kroku zastąpiliśmy ten potencjał aproksymacją funkcją schodkową, dzięki czemu, w naszej opinii, może zostać on fizycznie zrealizowany na bazie materiałów $Al_zGa_{1-z}As$, poprzez odpowiedni dobór koncentracji materiałów Al , Ga i As . Do tak przygotowanej struktury zostały dołączone dwie półnieskończone jednorodne elektrody (z lewej i prawej strony struktury), a następnie przeprowadzone zostały symulacje z użyciem formalizmu NEGF, których wyniki zostały przedstawione na Rysunkach 4.15 - 4.18. Dokonane obliczenia dotyczyły wyznaczenia gęstości prądu ciemnego w zależności o przyłożonego do struktury natężenia pola elektrycznego, gęstości elektronów oraz odpowiedzi foto-prądowej względem energii fotonu.

Analizując otrzymane rezultaty możemy stwierdzić, że w zależności od przyłożonego do struktury napięcia U , możliwa jest detekcja promieniowania o częstotliwościach 2.42 THz ($U = 12$ mV) dla przejścia $2 \rightarrow 1$ oraz 2.90 THz ($U = 34$ mV) dla przejścia $3 \rightarrow 2$. Odpowiada to energiom fotonu $h\nu = 10$ meV i 13 meV - odpowiednio maksima na Rysunku 4.17. Dodając z prawej strony struktury barierę o szerokości 20 nm i wysokości ~ 25 meV (wstawka na Rysunku 4.18) udało się uzyskać interesujący rezultat w postaci zwiększenia wartości foto-odpowiedzi dla $h\nu = 10$ meV. Wprowadzona bariera skutecznie blokuje odpływ nośników ładunku ze stanu podstawowego, zwiększając w ten sposób ich akumulację w tym stanie. Dzięki temu zwiększona została absorpcja dla przejścia $1 \rightarrow 2$, a co za tym idzie wzrost odpowiedzi foto-prądowej przy tej częstotliwości. Wyniki te pokazane zostały na Rysunku 4.18. Wydaje się, że idea dodatkowej bariery dołączonej do struktury detektora może być bliżej zbadana w celu uzyskania detekcji wieloczęstotliwościowych bez konieczności zmiany napięcia przyłożonego do czujnika. Traktując szerokość bariery jako parametr dostrzalny możemy dobrać go w taki sposób, aby wyrównać stan podstawowy w jednej studni kwantowej z pierwszym stanem wzbudzonym w drugiej studni kwantowej. Ponieważ w tej sytuacji obydwa poziomy energetyczne będą zajęte dla napięcia 12 mV/QW, możliwe będzie wykrycie obydwu częstotliwości THz dla tego napięcia. W podobny sposób mogą być dodawane kolejne „częstotliwości”

THz, tak aby uzyskać możliwość detekcji na różnych częstotliwościach w ramach jednego czujnika.

Lista publikacji i udział w konferencjach

Konferencje:

1. I. Tralle, **K. Majchrowski**, Exact solution of some boundary value problems for the complexified nonlinear Poisson equation, International Conference Linear and Non-linear Theory of Generalized Functions and its Applications, 2-8 September 2007, Będlewo, Poland
2. I. Tralle, **K. Majchrowski**, Solution of some boundary value problems for the complexified nonlinear Poisson equation, IX International School on Theoretical Physics Symmetry and Structural Properties of Condensed Matter (SSPCM 2007), 5-12 September 2007, Myczkowce, Poland
3. **K. Majchrowski**, W. Paśko, Anisotropy of the conductivity in the asymmetric quantum wells, XXXVII International School on the Physics of Semiconducting Compounds, 7.06-13.06.2008r, Ustroń-Jaszowiec, Poland
4. **K. Majchrowski**, W. Paśko, I. Tralle, Anisotropy of the photoconductivity in the asymmetric quantum structures, Halle, Germany, Max Planck Institute of Microstructure Physics, 3.06-4.06.2008r.
5. **K. Majchrowski**, W. Paśko, I. Tralle, Photo-galvanic effect in asymmetric quantum wells, 2 - 9 September 2009, Myczkowce, Poland
6. W. Paśko, **K. Majchrowski**, Electromagnetic field structure in single-mode waveguides of quantum cascade lasers, XXXIX "Jaszowiec" International School and Conference on the Physics of Semiconductors, 19-24.05.2010, Krynica Zdrój, Poland
7. I. Tralle, **K. Majchrowski**, Odtwarzanie kształtu potencjałów studni kwantowych

i supersieci metodą ISP, XVII Ogólnopolska Konferencja Kryształy Molekularne, 10-14 września 2012, Gdańsk - Sobieszewo

Publikacje:

1. **K.Majchrowski**, W.Paśko, Anisotropy of the conductivity in the asymmetric quantum wells, *Acta Physica Polonica A*, vol. 114, p. 1241-1246. (2008)
2. **K.Majchrowski**, W.Paśko, I.Tralle, On the photo-galvanic effect in asymmetric quantum wells of different shapes, *Physics Letters A* 373, p. 2959 - 2964, (2009)
3. **K.Majchrowski**, W.Paśko, I.Tralle, Photo-galvanic effect in asymmetric quantum wells of different shapes, *Acta Physica Polonica A*, vol. 116, p.854 - 856, (2009)
4. **K.Majchrowski**, W.Paśko, I.Tralle, Photo-galvanic effect in asymmetric quantum wells, *Journal of Physics Conference Series*, vol. 213, (2010)
5. I.Tralle, **K. Majchrowski**, 'Smart design' of quantum wells and double-quantum wells structures, *World Journal of Condensed Matter Physics*, vol. 4, no.1, p.24-32 (2014)
6. I.Tralle, G. Hałdaś, **K. Majchrowski**, A. Kolek, Tunable THz detector based on the quantum double-barrier structures, *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, Wysłane do recenzji (2014)

Dodatek A - Kod źródłowy solvera służącego do rekonstrukcji potencjału

Poniżej przedstawiona jest funkcja *isp.m*, stanowiąca jedną z głównych części programu służącego do rekonstrukcji potencjału za pomocą metody ISP.

```
function [ x, V ] = isp( E, V0, x_min, x_max, nOfPoint, eff_mass)
%% Funkcja rekonstruuje symetryczny potencjał na podstawie
%% zadanego widma energetycznego
%
% Parametry wejściowe:
%   E - zbiór zadanych wartości energii stanów związanych
%   U0 - głębokość studni kwantowej
%   x_min - minimalna wartosc x
%   x_max - maksymalna wartosc x
%   nOfPoint - liczba punktów siatki numerycznej
%   eff_mass - masa efektywna, podana w jednostkach m0
% (masy spoczynkowej elektronu)
%
% Parametry wyjściowe
%   x - wektor współrzędnych x
%   V - zrekonstruowany potencjał

%% Podstawowe parametry i ustawienia
m0=9.109382149999999e-31;
eff_mass=eff_mass*m0;
en=27.211383882371148*(eff_mass/m0);
scale=(m0/eff_mass)*5.291772083164631e-2;
```

```
V0=V0/en;
K=sqrt(V0-E/en);

l=length(K);
c=(2^l);
xmin=(4/3)*x_min/scale;
xmax=(4/3)*x_max/scale;
x=linspace(xmin,xmax,nOfPoint); x=x';

%% Wyznaczenie wszystkich mozliwych kombinacji podzbiorow S zbioru E
s=zeros(c,l);
licznik=0;
wstaw=0;
for i=1:l
    for j=1:c
        if licznik<=(c/(2^i))
            s(j,i)=wstaw;
            licznik=licznik+1;
        end
        if licznik>(c/2^i)
            wstaw=~wstaw;
            s(j,i)=wstaw;
            licznik=1;
        end
    end
end

%% Obliczenie iloczynow i sum poszczegolnych pozdbiorow S i S~
tablica_iloczynow=zeros(c,1);
tablica_sum=zeros(c,1);
for i=1:length(s)
```

```
    iloczyn=1;
    S=K(s(i,:)==0);
    cS=K(s(i,:)==0);
    for m=1:length(S)
        for n=1:length(cS)
            iloczyn=iloczyn*abs(((S(m)+cS(n))/(S(m)-cS(n))));
        end
    end
    tablica_iloczynow(i)=iloczyn;
    tablica_sum(i)=sum(S);
end

%% Wyznaczenie funkcji D(x) oraz drugiej pochodnej jej logarytmu
D=zeros(length(x),1);
for i=1:length(x)
    for j=1:length(tablica_iloczynow)
        D(i)=D(i)+exp(-2*x(i)*tablica_sum(j))*tablica_iloczynow(j);
    end
end
D=log(D);
div_y=diff(D)./diff(x);
div_y2=diff(div_y)./diff(x(2:end));

%% Obliczenie zrekonstruowanego potencjału
V=V0-2*div_y2;
x=x*scale*3/4;
V=V*en;
interp_V=interp1(x(2:end-1),V,[x(1) x(end)], 'spline');
V=vertcat(interp_V(1), V, interp_V(2));

end
```

Dodatek B - Kod źródłowy solvera służącego do rozwiązania zagadnienia własnego RS

Poniżej przedstawiona jest funkcja *qwAzw.m*, stanowiąca jedną z głównych części programu służącego do rozwiązywania zagadnienia własnego równania Schrödingera.

```
function [ EVal, EVec ] = qwAzw( V, U0, me, xp, xk )
% Funkcja pozwala na rozwiązanie Równania Schroodingera

%% Wczytanie potrzebnych stałych fizycznych
phc = fundamentalPhysicalConstantsFromNIST();
h_bar=phc.Planck_constant_over2pi.value; %% Dirac Constant
eV=1/phc.electron_volt.value;           %% 1J in eV

%% Parametry siatki numerycznej
k=length(V)-1;
m=k+1;                                  % Liczba punktów siatki

x0=xp; %Początek przedziału obliczeniowego
xm=xk; %Koniec przedziału obliczeniowego
dx=(xm-x0)/k;

%% Sprowadzenie potencjału do postaci bezwymiarowej
Vc=U0;
Lc=xm-x0;
alfa=(2*me*Vc*Lc^2)/(h_bar^2);
```

$V_b = V_c / V_c ;$

%% Wyznaczenie wartości własnych oraz funkcji własnych

$dx_b = dx / L_c ;$

$D = \text{sparse}(1:m, 1:m, 2 + ((dx_b^2) * \alpha * V_b), m, m);$ %elementy diagonalne

$E = \text{sparse}(2:m, 1:m-1, -1 * \text{ones}(1, m-1), m, m);$

$M = \text{full}(D) + E + E';$

clear D E;

$[E_{vec}, E_{val}] = \text{eig}(M);$

$E_{val} = (E_{val} * V_c) ./ (dx_b^2 * \alpha * eV);$

$E_{val} = E_{val}((E_{val} \sim 0) \& (E_{val} < U_0 * eV));$

$E_{vec} = E_{vec}(:, 1 : \text{length}(E_{val}));$

end

Dodatek C - Równanie Schrödingera jako algebraiczne zagadnienie własne

W niniejszym dodatku sformułowane jest stacjonarne jednowymiarowe równanie Schrödingera jako algebraiczne zagadnienie własne. Przedstawiana procedura pozwala na dokonanie dyskretyzacji RS oraz sprowadzania do postaci algebraicznego zagadnienia własnego z symetryczną macierzą trójdziagonalną, przybliżając operator drugiej pochodnej na dyskretnej siatce punktów za pomocą formuły trójpunktowej. Dzięki temu RS będziemy mogli rozwiązać numerycznie [110].

Rozwiązując RS mamy na celu znalezienie stanów związanych cząstki kwantowej, poruszającej się w obszarze $[A, B]$, w którym zadany jest potencjał w jawnej postaci $V(x)$. Interesujące są dla nas wartości własne operatora Hamiltona $\varepsilon(j)$, które należą do dyskretnego widma energetycznego oraz przynależne do nich funkcje własne tego operatora $\Psi^{(j)}$. Jak wiadomo funkcje te powinny spełniać warunek unormowania oraz warunki brzegowe, przedstawione poniżej:

$$\int_A^B \Psi^*(x) \Psi(x) dx = 1 \quad (1)$$

$$\Psi(A) = \Psi(B) = 0 \quad (2)$$

Warunkiem koniecznym na to, aby równanie

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \Psi(x) = \varepsilon \Psi(x), \quad (3)$$

posiadało przynajmniej jedno rozwiązanie odpowiadające stanowi związanemu, jest to, by potencjał był wiążący, czyli funkcja $V(x)$ posiadała lokalne minimum (minima).

Rozwiązując numerycznie RS metodą algebraiczną, zawsze przyjmujemy skończony przedział $[A, B]$, zaś przyjęte warunki brzegowe (2) fizycznie odpowiadają nieskończonym barierom potencjału, które są umieszczone w punktach $x = A$ oraz $x = B$. O ile

przedział całkowania zostanie wybrany poprawnie, warunki brzegowe tego typu nie stoją w sprzeczności z rzeczywistym zachowaniem funkcji falowej przy $x \rightarrow A$ oraz $x \rightarrow B$.

Dla uproszczenia obliczeń, RS sprowadzamy do postaci bezwymiarowej. Aby tego dokonać, potencjał $V(x)$ przedstawiamy w postaci

$$V(x) = V_c v(x/L_c) = V_c v(\tilde{x}),$$

gdzie $\tilde{x} = x/L_c$ jest bezwymiarową współrzędną, L_c - charakterystyczny parametr o wymiarze długości, zaś V_c jest charakterystyczną energią. Parametry te można w rzeczywistości wybrać dowolnie, niemniej jednak ich właściwy dobór pozwala na zmniejszenie prawdopodobieństwa wystąpienia błędów nadmiaru podczas obliczeń, poprzez operowanie liczbami rzędu jedności. Obliczenia wykonujemy na dyskretnym zbiorze punktów (siatce), których współrzędne określają zależności:

$$x_i = A + i \frac{B-A}{n+1} = A + iS, \quad i = 0, 1, \dots, n+1, \quad (4)$$

zaś w układzie bezwymiarowym:

$$\tilde{x}_i = a + is, \quad i = 0, 1, \dots, n+1, \quad (5)$$

gdzie bezwymiarowe współrzędne a i b , określające końce przedziału oraz bezwymiarowy krok siatki s określone są w następujący sposób:

$$a = \frac{A}{L_c}, \quad b = \frac{B}{L_c}, \quad s = \frac{S}{L_c} = \frac{b-a}{n+1}.$$

Uwzględniając powyższe założenia, wejściowe RS (3) można przekształcić do postaci

$$\left[-\frac{1}{L_c^2} \frac{d^2}{d\tilde{x}^2} + \frac{2mV_c}{\hbar^2} \frac{V(L_c\tilde{x})}{V_c} \right] \Psi(L_c\tilde{x}) = \frac{2mV_c}{\hbar^2} \frac{\varepsilon}{V_c} \Psi(L_c\tilde{x}). \quad (6)$$

Wprowadzając bezwymiarowy współczynnik skali

$$\alpha = \frac{2mV_c L_c^2}{\hbar^2}, \quad (7)$$

bezwymiarową funkcję falową

$$\psi(\tilde{x}) = \sqrt{L_c} \Psi(L_c\tilde{x}), \quad (8)$$

oraz bezwymiarową energię własną

$$\tilde{\varepsilon} = \frac{\varepsilon}{V_c}, \quad (9)$$

otrzymujemy bezwymiarowe równanie Schrödingera w postaci

$$\left[-\frac{d^2}{d\tilde{x}^2} + \alpha v(\tilde{x}) \right] \psi(\tilde{x}) = \alpha \tilde{E} \psi(\tilde{x}). \quad (10)$$

W kolejnym kroku dyskretyzacji równania (10) jest zastosowanie przybliżenia drugiej pochodnej funkcji $\psi(\tilde{x})$ w punktach siatki $\tilde{x}_1, \dots, \tilde{x}_n$ za pomocą trójpunktowej formuły

$$\begin{aligned} \left. \frac{d^2 \psi}{d\tilde{x}^2} \right|_{\tilde{x}=\tilde{x}_i} &= \frac{\psi(\tilde{x}_i + s) - 2\psi(\tilde{x}_i) + \psi(\tilde{x}_i - s)}{s^2} + O(s^2) \\ &= \frac{\psi_{i+1} - 2\psi_i + \psi_{i-1}}{s^2} + O(s^2), \end{aligned} \quad (11)$$

gdzie $O(s^2)$ oznacza, że aproksymacja drugiej pochodnej w punktach siatki odbywa się z dokładnością do wyrazów, których wartości są rzędu s^2 . W ten sposób otrzymujemy układ n równań

$$-\psi_{i-1} + (2 + s^2 \alpha v_i) \psi_i - \psi_{i+1} = s^2 \alpha \tilde{E} \psi_i, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad (12)$$

gdzie $v_i = v(\tilde{x}_i)$. Wprowadzając nowe oznaczenia

$$\tilde{E} = s^2 \alpha \tilde{e}, \quad \tilde{v}_i = s^2 \alpha v_i, \quad (13)$$

oraz korzystając z warunków brzegowych (2), które obecnie mają postać $\psi_0 = \psi(a) = 0$, $\psi_{n+1} = \psi(b) = 0$, otrzymujemy jednorodny układ równań, w którym niewiadomymi są przeskalowana energia $\tilde{E}$ oraz wartości funkcji falowej na siatce ψ_i . Układ ten można przedstawić w postaci macierzowej

$$\begin{pmatrix} 2 + \tilde{v}_1 & -1 & & & \\ -1 & 2 + \tilde{v}_2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2 + \tilde{v}_{n-1} & -1 \\ & & & -1 & 2 + \tilde{v}_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_{n-1} \\ \psi_n \end{pmatrix} = \tilde{E} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_{n-1} \\ \psi_n \end{pmatrix}. \quad (14)$$

Wówczas otrzymamy algebraiczne zagadnienia własne dla dyskretnego operatora energii $\tilde{\mathbf{H}}$:

$$\tilde{\mathbf{H}}\psi = \tilde{E}\psi, \quad (15)$$

którego rozwiązaniem są pary $(\tilde{E}, \psi)$. Macierz $\tilde{\mathbf{H}}$ jest symetryczną trójdagonalną macierzą rzeczywistą, której wyrazy diagonalne określa potencjał $\tilde{v}(\tilde{x})$.

Dodatek D- Weryfikacja poprawności działania programów

W trakcie implementacji nowych metod obliczeniowych, bardzo często powstają błędy w zastosowanych algorytmach. Dlatego za każdym razem należy wykonywać testy oprogramowania, pozwalające na stwierdzenie poprawności otrzymywanych wyników.

Poprawność działania programu służącego do rekonstrukcji potencjału za pomocą metody ISP, została zweryfikowana poprzez rozwiązanie RS ze zrekonstruowanym potencjałem. Poniżej przedstawione są wybrane dane, które posłużyły do weryfikacji poprawności otrzymanych wyników.

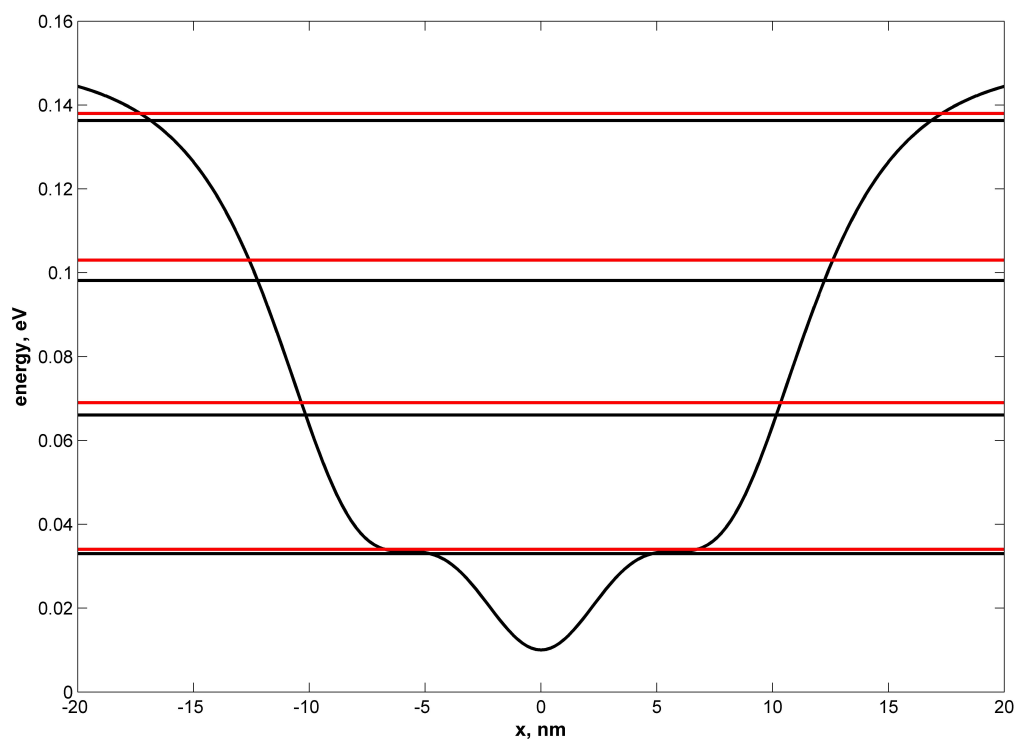
W Tabeli 1 zestawione są otrzymane wyniki dla czterech testowych zbiorów stanów związanych energii, gdzie ϵ_{init} oznacza zbiór poziomów energetycznych, dla których jest rekonstruowany potencjał QW, ϵ_{out} - zbiór poziomów energetycznych otrzymany po rozwiązaniu równania Schrödingera ze zrekonstruowanym potencjałem, $\delta\epsilon$ - błąd względny, określający procentową różnicę pomiędzy ϵ_{init} a ϵ_{out} . Poszczególne dane odpowiadają poziomom energetycznym, przedstawionym na Rysunkach 1-4 za pomocą poziomych linii ciągłych. Linie czerwone odpowiadają zbiorom ϵ_{init} , zaś linie czarne odpowiadają ϵ_{out} .

Dokonując analizy uzyskanych wyników, a w szczególności błędów $\delta\epsilon$, można stwierdzić, że zrekonstruowany za pomocą metody ISP potencjał w dobrym stopniu odpowiada zakładanym danym inicjującym. W większości badanych przypadków $\delta\epsilon$ wynosił 2 – 3%. Powstałe błędy spowodowane są głównie wprowadzeniem ograniczenia do modelu rekonstrukcji potencjału poprzez zawężenie zakresu zmienności współrzędnej x . W idealnym przypadku należałoby rozważać $x \rightarrow \pm\infty$, lecz z oczywistych względów obszar ten zawężony jest do zadanej szerokości QW. Na powstałą różnicę pomiędzy ϵ_{init} a ϵ_{out} wpływają również różnego rodzaju błędy numeryczne, pojawiające się podczas obliczeń. Niemniej jednak, biorąc pod uwagę powyższe, uzyskane rezultaty są zadowalające i pozwalają na wykorzystanie przygotowanego oprogramowania do rekonstrukcji potencjału

Tabela 1: Porównanie wartości energii kwantowych poziomów dla zrekonstruowanych potencjałów.

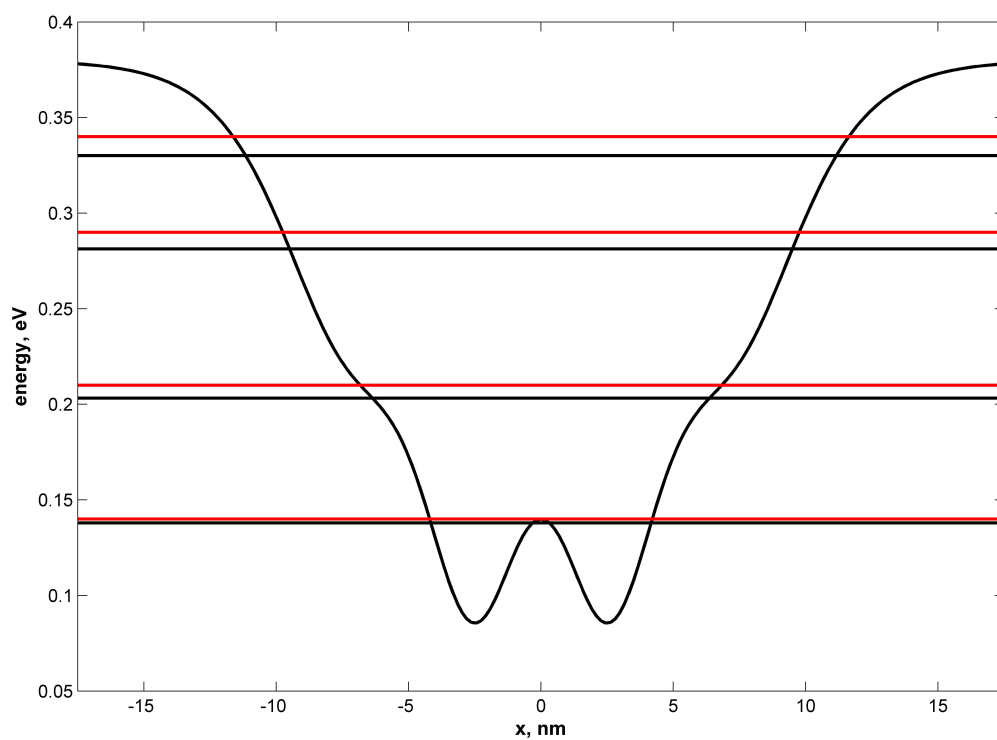
n	$\varepsilon_{init}, \text{eV}$	$\varepsilon_{out}, \text{eV}$	$ \varepsilon_{init} - \varepsilon_{out} , \text{eV}$	$\delta\varepsilon, \%$
Rysunek 1				
1	0.0340	0.0330	0.0010	2.9630
2	0.0690	0.0661	0.0029	4.2464
3	0.1030	0.0981	0.0049	4.7171
4	0.1380	0.1363	0.0017	1.2293
Rysunek 2				
1	0.1400	0.1379	0.0021	1.4978
2	0.2100	0.2032	0.0068	3.2414
3	0.2900	0.2812	0.0088	3.0220
4	0.3400	0.3300	0.0100	2.9298
Rysunek 3				
1	0.2400	0.2354	0.0046	1.9064
2	0.3800	0.3753	0.0047	1.2241
Rysunek 4				
1	0.0900	0.0880	0.0020	2.2215
2	0.1500	0.1428	0.0072	4.7734
3	0.2400	0.2348	0.0052	2.1575

studni kwantowej na podstawie zadanego widma energetycznego.



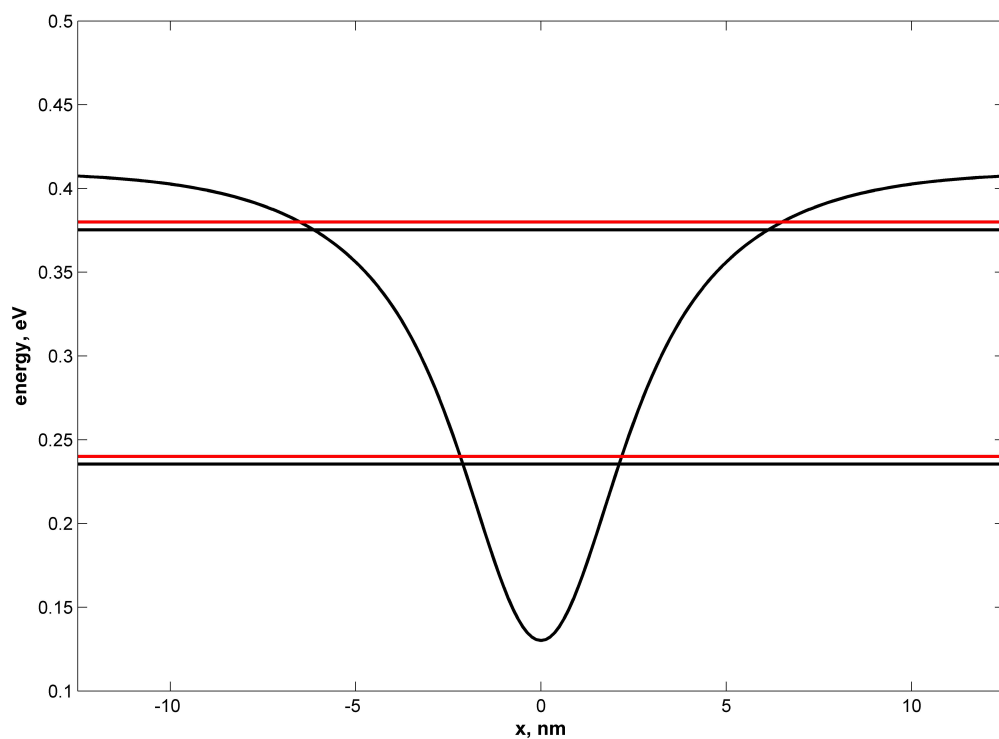
Rysunek 1: Zrekonstruowany potencjał dla zbioru 4 poziomów energetycznych

$$\varepsilon_{init} = [0.0340, 0.0690, 0.1030, 0.1380] \text{ eV}, U_0 = 0.15 \text{ eV}, d = 40 \text{ nm}$$



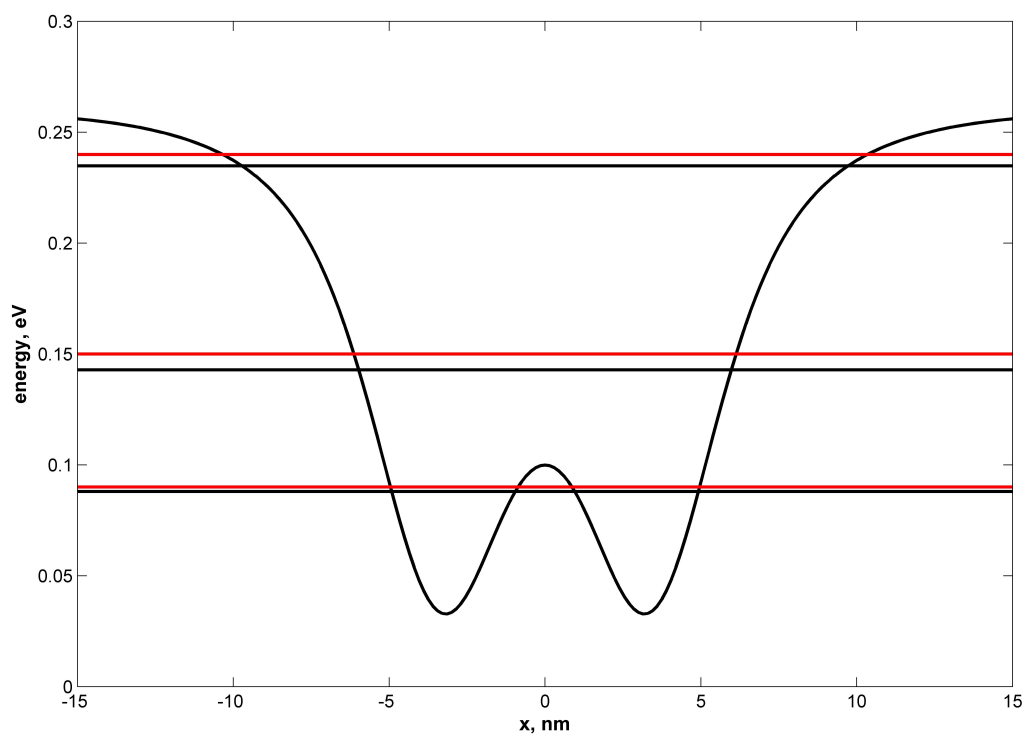
Rysunek 2: Zrekonstruowany potencjał dla zbioru 4 poziomów energetycznych

$$\varepsilon_{init} = [0.1400, 0.2100, 0.2900, 0.3400] \text{ eV}, U_0 = 0.38 \text{ eV}, d = 35 \text{ nm}$$



Rysunek 3: Zrekonstruowany potencjał dla zbioru 2 poziomów energetycznych

$$\varepsilon_{init} = [0.2400, 0.3800] \text{ eV}, U_0 = 0.41 \text{ eV}, d = 25 \text{ nm}$$



Rysunek 4: Zrekonstruowany potencjał dla zbioru 3 poziomów energetycznych

$$\varepsilon_{init} = [0.0900, 0.1500, 0.2400] \text{ eV}, U_0 = 0.26 \text{ eV}, d = 30 \text{ nm}$$

Weryfikacja poprawności działania programu służącego do rozwiązywania RS

Poniżej przedstawione są wyniki obliczeń poziomów kwantowych dla wybranych potencjałów. Są to potencjały wiążące, które posiadają rozwiązania analityczne, dzięki czemu możliwa jest weryfikacja poprawności otrzymanych wyników numerycznych. Do celów badania dokładności procesów numerycznych, zostały wykorzystane następujące potencjały: Morse'a, kulombowski, Konwenta oraz oscylatora harmonicznego.

Oscylator harmoniczny. Równanie Schrödingera określone jest wzorem

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right] \Psi(x) = \varepsilon \Psi(x). \quad (16)$$

Energie kolejnych stanów własnych dane są prze:

$$\varepsilon_j = \hbar\omega \left(j - \frac{1}{2} \right). \quad (17)$$

Potencjał Morse'a. Potencjał ten wykorzystywany jest w chemii fizycznej do opisu widm cząsteczkowych. Odpowiednie równanie Schrödingera ma postać

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_c (\exp(-2Cx) - 2\exp(-Cx)) \right] \Psi(x) = \varepsilon \Psi(x). \quad (18)$$

gdzie V_C jest stałą o wymiarze energii, zaś $1/C$ — stałą o wymiarze długości. Rozwiązanie analityczne dla najniższych energii w tym przypadku dane jest wzorem

$$\varepsilon_j = -V_C \left[1 - \frac{j - \frac{1}{2}}{\sqrt{\alpha}} \right]^2, \quad j = 1, \dots, j_{max}, \quad (19)$$

gdzie $\alpha = 2mV_C/(\hbar C)^2$, $j_{max} = [\sqrt{\alpha} - \frac{1}{2}]$.

Potencjał Konwenta. Równanie Schrödingera z tym potencjałem ma postać:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{\hbar^2 D^2}{8m} (2k+1)^2 \left(\frac{b}{2k+1} \cosh(Dx) - 1 \right)^2 \right] \Psi(x) = \varepsilon \Psi(x). \quad (20)$$

Dla $k = 1$ znane są rozwiązania analityczne

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 &= \frac{\hbar^2 D^2}{8m} \left[b^2 + 7 - 4\sqrt{\frac{1}{4} + b^2} \right], \\ \varepsilon_2 &= \frac{\hbar^2 D^2}{8m} [b^2 + 5], \\ \varepsilon_3 &= \frac{\hbar^2 D^2}{8m} \left[b^2 + 7 + 4\sqrt{\frac{1}{4} + b^2} \right], \end{aligned}$$

Poniżej przedstawione zostały niektóre wyniki obliczeń numerycznych dla przedstawionych powyżej trzech potencjałów. Obliczenia zostały wykonane za pomocą stworzonego w środowisku Matlab solvera, którego kod źródłowy przedstawiony został w dodatku B. Każda poniższa tabela zawiera obliczone energie trzech najniższych stanów własnych ($\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3$) dla różnej liczby punktów siatki n , a także wartości dokładne, wyliczone na podstawie formuł analitycznych.

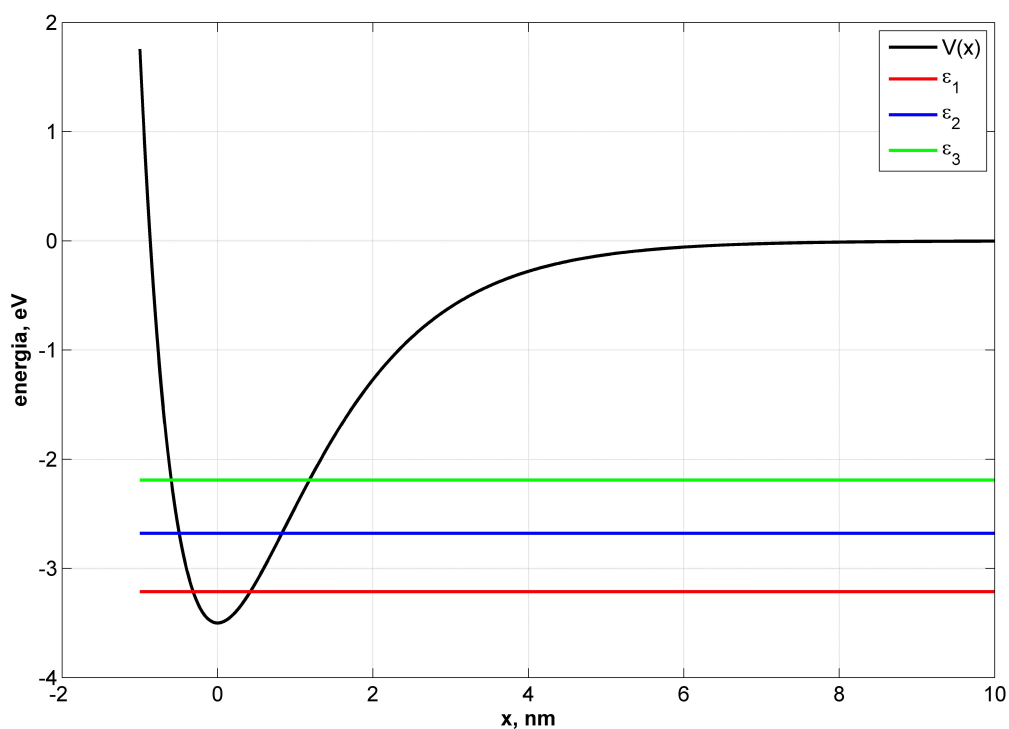
Wyniki obliczeń numerycznych dla potencjału Morse'a.

Do obliczeń zostały przyjęte następujące wartości:

1. przedział obliczeń $[xp, xk] = [-1, 10] \times 10^{-9}$ m
2. $V_c = 5.6076 \times 10^{-19}$ J
3. $1/C = 1.2500 \times 10^{-9}$ m
4. $m = m_0 = 9.1094 \times 10^{-31}$ kg

Tabela 2: Wyniki obliczeń dla potencjału Morse'a.

n	Energie		
	$-\epsilon_1$	$-\epsilon_2$	$-\epsilon_3$
111	3.215286746744890	2.684155170633410	2.204320970292232
221	3.214283733012709	2.679823578473910	2.194662753084520
551	3.213998865330982	2.678585403025021	2.191871583980602
1101	3.213955688528558	2.678392358413280	2.191418723661993
Wartości uzyskane na podstawie rozwiązań analitycznych			
-	3.213959716497298	2.678454974237337	2.191717998304632



Rysunek 5: Potencjał Morse’a wraz z trzema pierwszymi poziomami energetycznymi.

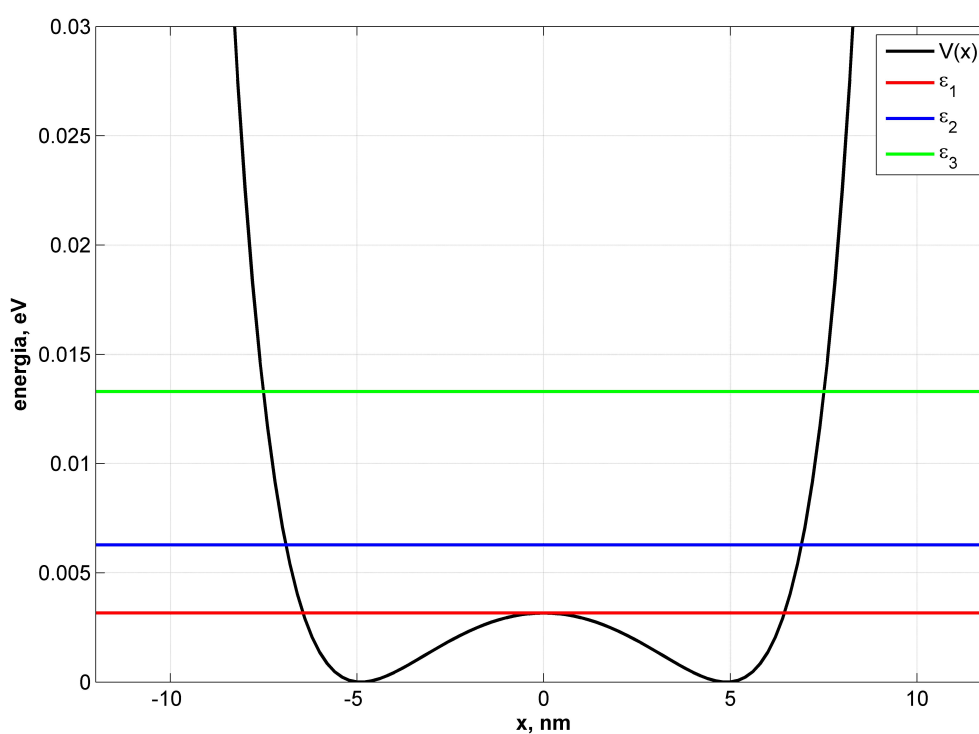
Wyniki obliczeń numerycznych dla potencjału Konwenta.

Do obliczeń zostały przyjęte następujące wartości:

1. przedział obliczeń $[xp, xk] = [-12, 12] \times 10^{-9}$ m
2. $D = 3.2 \times 10^8$
3. $k = 1$
4. $b = 1.2$
5. $m = m_0 = 9.1094 \times 10^{-31}$ kg

Tabela 3: Wyniki obliczeń dla potencjału Konwenta.

n	Energie		
	ε_1	ε_2	ε_3
121	0.003159547932304	0.006278158660624	0.013292268409644
241	0.003160000491716	0.006280505975271	0.013300952048102
481	0.003160113586256	0.006281092783602	0.013303123193768
1201	0.003160145252641	0.006281257099929	0.013303731169894
Wartości uzyskane na podstawie rozwiązań analitycznych			
-	0.003160151258006	0.006281288302951	0.013303846654076

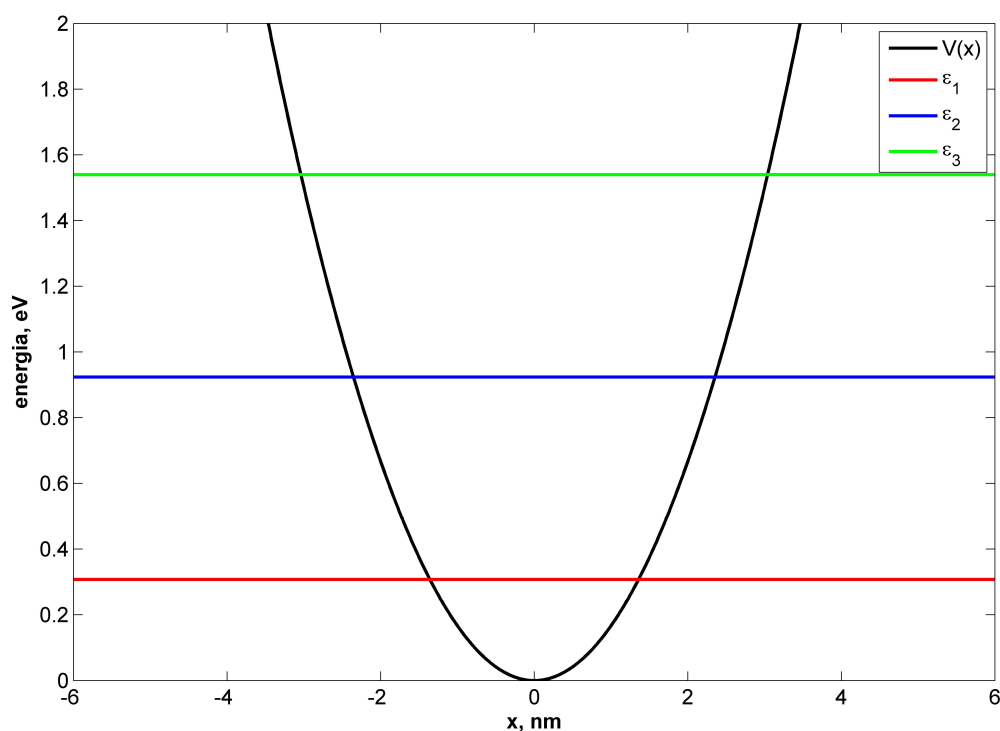
**Rysunek 6:** Potencjał Konwenta wraz z trzema pierwszymi poziomami energetycznymi.**Wyniki numeryczne dla oscylatora harmonicznego.**

Do obliczeń zostały przyjęte następujące wartości:

1. przedział obliczeń $[xp, xk] = [-6, 6] \times 10^{-9}$ m
2. $\omega_0 = 9.3543 \times 10^{14}$ s⁻¹
3. $m = m_0 = 9.1094 \times 10^{-31}$ kg

Tabela 4: Wyniki obliczeń dla oscylatora harmonicznego.

n	Energie		
	ε_1	ε_2	ε_3
121	0.307752369763829	0.923048758804423	1.537931188387460
241	0.307830529744028	0.923439751088130	1.538949157906112
481	0.307850064295847	0.923537469989792	1.539203871043293
1201	0.307855534031015	0.923564845034302	1.539275464054123
Wartości uzyskane na podstawie rozwiązań analitycznych			
-	0.307856566084787	0.923569698254361	1.539282830423935

**Rysunek 7:** Potencjał oscylatora harmonicznego wraz z trzema pierwszymi poziomami energetycznymi.

Wyznaczone numerycznie energie własne i wartości funkcji falowej w punktach siatki są tylko przybliżeniami wartości dokładnych. Źródłami błędów w obliczeniach numerycznych są:

- skończona dokładność reprezentacji liczb rzeczywistych w komputerze oraz wykonywanych operacji zmiennoprzecinkowych,
- aproksymacja pochodnych za pomocą różnic skończonych,

- skończona długość przedziału obliczeń,
- skalowanie wartości własnych macierzy operatora Hamiltona H wraz z kwadratem kroku siatki s .

Na podstawie danych umieszczonych w Tabelach 2-4 można stwierdzić, że przygotowany solver, służący do rozwiązywania RS z dowolnym potencjałem, działa poprawnie. Nawet dla małych wartości liczby węzłów n siatki numerycznej, uzyskane rozwiązania numeryczne, nie różnią się w dużym stopniu od uzyskanych na podstawie znanych rozwiązań analitycznych dla badanych potencjałów. Wraz ze zwiększaniem parametru n dokładność obliczeń rośnie, przy czym po przekroczeniu pewnej wartości granicznej możemy się spodziewać, że dalszy wzrost n nie będzie powodował poprawy, lecz może nawet wpłynąć na pogorszenie dokładności otrzymanych wyników [110].

Literatura

- [1] P. Curie. *Oeuvres de Pierre Curie*. Gauthier-Villars, Paris, 1908.
- [2] B. G. Wybourne. *Physics as a Journey*. Nicolas Copernicus University Press, Toruń, 1996.
- [3] Lev I. Magarill. Photogalvanic effect in asymmetric lateral superlattice. *Physica E*, 9:652–658, 2001.
- [4] R. Bartussek, P. Hänggi, and J. G. Kissner. Periodically rocked thermal ratchets. *Europhys. Lett.*, 27(7):459–464, 1994.
- [5] S. Flach, O. Yevtushenko, and Y. Zolotaryuk. Directed current due to broken time-space symmetry. *Phys. Rev. Lett.*, 84:2358–2361, 2000.
- [6] P. Reimann, M. Grifoni, and P. Hänggi. Quantum ratchets. *Phys. Rev. Lett.*, 79:10–13, 1997.
- [7] M. V. Entin. *Sov. Phys. Semicond.*, 23:1066, 1989.
- [8] V. I. Belinicher and B. I. Sturman. The photogalvanic effect in media lacking a center of symmetry. *Sov. Phys. Usp.*, 23:199, 1980.
- [9] A. D. Chepelianskii and D. L. Shepelyansky. Directing transport by polarized radiation in the presence of chaos and dissipation. *Phys. Rev. B*, 71:052508, Feb 2005.
- [10] G. Cristadoro and D. L. Shepelyansky. Nonequilibrium stationary states with ratchet effect. *Phys. Rev. E*, 71:036111, Mar 2005.
- [11] M. V. Entin and L. I. Magarill. Photocurrent in nanostructures with asymmetric antidots: Exactly solvable model. *Phys. Rev. B*, 73:205206, May 2006.

- [12] A. D. Chepelianskii, M. V. Entin, L. I. Magarill, and D. L. Shepelyansky. Ratchet transport of interacting particles. *Phys. Rev. E*, 78:041127, Oct 2008.
- [13] S. Sassine, Yu. Krupko, J.-C. Portal, Z. D. Kvon, R. Murali, K. P. Martin, G. Hill, and A. D. Wieck. Experimental investigation of the ratchet effect in a two-dimensional electron system with broken spatial inversion symmetry. *Phys. Rev. B*, 78:045431, Jul 2008.
- [14] P. Olbrich, S. A. Tarasenko, C. Reitmaier, J. Karch, D. Plohmann, Z. D. Kvon, and S. D. Ganichev. Observation of the orbital circular photogalvanic effect. *Phys. Rev. B*, 79:121302, Mar 2009.
- [15] L. E. Golub, S. A. Tarasenko, M. V. Entin, and L. I. Magarill. Valley separation in graphene by polarized light. *Phys. Rev. B*, 84:195408, Nov 2011.
- [16] M. V. Entin and L. I. Magarill. Photogalvanic current in a parabolic well. *JETP Letters*, 97:639–643, Aug 2013.
- [17] O. V. Kibis. Novel effects of electron-phonon interaction in quasi-two-dimensional structures located in a magnetic field. *JETP*, 88:527–532, 1999.
- [18] I. Tralle and G. Petrov. On the semiconductor well engineering. *Mol. Phys. Rep.*, 23:199–202, 1999.
- [19] D. Bessis and G. A. Mezincescu. Design of semiconductor heterostructures with preset electron reflectance by inverse scattering techniques. *Microelectr. Journ.*, 30:953–974, 1999.
- [20] S. A. Sofianos, G. J. Rampho, H. Azemtsa Donfack, I. E. Lagaris, and H. Leeb. Design of quantum filters with pre-determined reflection and transmission properties. *Microelectr. Journ.*, 38:235–244, 2007.
- [21] J-M Levy-Leblond. Elementary quantum models with position-dependent mass. *Eur. J. Phys.*, 13:215, 1992.
- [22] A. A. Suzko and I. Tralle. Reconstruction of quantum well potentials via the intertwining operator technique. *Acta Phys. Pol B*, 39:545–567, 2008.

- [23] L. Dekar, L. Chetouani, and T. F. Hammann. An exactly soluble Schrödinger equation with smooth position-dependent mass. *J. Math. Phys.*, 39:2551, 1998.
- [24] A. A. Suzko, I. Tralle, and E. P. Velicheva. Reconstruction of quantum well potentials. *Physics of Particles and Nuclei Letters*, 6:538, 2009.
- [25] A. S. Brown and R. P. Green, M. A. nad Corkish. Limiting efficiency for a multi-band solar cell containing three and four bands. *Physica E*, 14:121–125, 2002.
- [26] J. E. Bjarnason, T. L. J. Chan, A. W. M. Lee, M. A. Celis, and E. R. Brown. Millimeter-wave, terahertz, and mid-infrared transmission through common clothing. *Applied Physics Letters*, 85:519, 2004.
- [27] E. R. Mueller. Terahertz radiation sources for imaging and sensing applications. *PHOTONICS SPECTRA*, 40:60–69, 2006.
- [28] Y. Zhang, X.-H. Peng, Y. Chen, J. Chen, A. Curioni, W. Andreoni, S.K. Nayak, and X.-C. Zhang. A first principle study of terahertz (thz) spectra of acephate. *Chemical Physics Letters*, 452:59–66, 2008.
- [29] W. Knap, M. Dyakonov, D. Coquillat, F. Teppe, N. Dyakonova, J. Łusakowski, K. Karpierz, M. Sakowicz, G. Valusis, D. Seliuta, I. Kasalynas, A. El Fatimy, Y. M. Meziani, and T. Otsuji. Field effect transistors for terahertz detection: Physics and first imaging applications. *Journal of Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves*, 30:1319–1337, 2009.
- [30] S. Preu, G. H. Döhler, S. Malzer, L. J. Wang, and A. C. Gossard. Tunable, continuous-wave terahertz photomixer sources and applications. *Journal of Applied Physics*, 109:061301, 2011.
- [31] Jun-ichi Nishizawa, Tetsuo Sasaki, and Takenori Tanno. Coherent terahertz-wave generation from semiconductors and its applications in biological sciences. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 69:693–701, 2008.
- [32] I. S. Gregory, W. R. Tribe, C. Baker, B. E. Cole, M. J. Evans, L. Spencer, M. Pepper, and M. Missous. Continuous-wave terahertz system with a 60 db dynamic range. *Applied Physics Letters*, 86:204104, 2005.

- [33] K. Kawase, Y. Ogawa, H. Minamide, and H. Ito. Terahertz parametric sources and imaging applications. *Semicond. Sci. Technol.*, 20:S258–S265, 2005.
- [34] M. Tonouchi. Cutting-edge terahertz technology. *Nature Photon*, 1:97–105, 2007.
- [35] L.L. Zhang, N. Karpowicz, C. Zhang, Y. Zhao, and X. Zhang. Real-time nondestructive imaging with thz waves. *Optics Communications*, 281:1473–1475, 2008.
- [36] D. Dragoman and M. Dragoman. Terahertz fields and applications. *Progress in Quantum Electronics*, 28:1–66, 2004.
- [37] J.B. Jackson, M. Mourou, J.F. Whitaker, I.N. Duling III, S.L. Williamson, M. Menu, and G.A. Mourou. Terahertz imaging for non-destructive evaluation of mural paintings. *Optics Communications*, 281:527–532, 2008.
- [38] M. Ghanashyam Krishna, Sachin D. Kshirsagar, and Surya P. Tewari. *Terahertz Emitters, Detectors and Sensors: Current Status and Future Prospects, Photodetectors*. InTech, 2012.
- [39] K. Saki and M. Tani. Introduction to terahertz pulses. *Topics in Applied Physics*, 97:1–30, 2005.
- [40] T. Liu, G. Lin, Y. Lee, S. Wang, M. Tani, H. Wu, and C. Pan. Dark current and trailing-edge suppression in ultrafast photoconductive switches and terahertz spiral antennas fabricated on multienergy arsenic-ion-implanted gaas. *J. Appl. Phys.*, 98:013711 1–4, 2005.
- [41] J. Lloyd-Hughes, E. Castro-Camus, and M.B. Johnston. Simulation and optimisation of terahertz emission from ingaas and inp photoconductive switches. *Solid State Commun.*, 136:595–600, 2005.
- [42] F. Sizov and A. Rogalski. Thz detectors. *Progress in Quantum Electronics*, 34:227–347, 2010.
- [43] M. C. Hoffmann, K. Yeh, H. Y. Hwang, T. S. Sosnowski, B. S. Prall, J. Hebling, and K. A. Nelson. Fiber laser pumped high average power single-cycle terahertz pulse source. *Appl. Phys. Lett.*, 93:141107–1–3, 2008.

- [44] S. Vidal, J. Degert, M. Tondusson, J. Oberlé, and E. Freysz. Impact of dispersion, free carriers, and two-photon absorption on the generation of intense terahertz pulses in znTe crystals. *Appl. Phys. Lett.*, 98:191103–1–3, 2011.
- [45] Tsaor G. and J. Wang. Relativistic optical rectification driven by a high-intensity pulsed gaussian beam. *Phys. Rev. A*, 80:023802–1–11, 2009.
- [46] A. N. Bugay and S. V. Sazonov. The generation of terahertz radiation via optical rectification in the self-induced transparency regime. *Phys. Lett. A*, 374:1093–1096, 2010.
- [47] H. Yasuda, T. Kubis, P. Vogl, N. Sekine, I. Hosako, and K. Hirakawa. Nonequilibrium Green’s function calculation for four-level scheme terahertz quantum cascade lasers. *App. Phys. Lett.*, 94:151109 1–3, 2009.
- [48] J. R. Freeman, A. Brewer, H. E. Beere, and D. A. Ritchie. Photo-luminescence study of heterogeneous terahertz quantum cascade lasers. *J. Appl. Phys.*, 110:013103 1–6, 2011.
- [49] A. Valavanis, T. V. Dinh, L. J. M. Lever, Z. Ikonić, and R. W. Kelsall. Material configurations for n-type silicon-based terahertz quantum cascade lasers. *Phys. Rev. B*, 83:195321–195329, 2011.
- [50] T. Shibuya, K. Suizu, and K. Kawase. Widely tunable monochromatic cherenkov phase-matched terahertz wave generation from bulk lithium niobate. *App. Phys. Express*, 3:082201–082204, 2010.
- [51] N.E. Yu, K.S. Lee, D.-K. C. I. Ko, Kang., S. I. Takekawa, and K. Kitamura. Temperature dependent narrow-band terahertz pulse generation in periodically poled crystals via difference frequency generation. *Optics Commun.*, 284:1395–1400, 2011.
- [52] C. Winnewisser, P. Uhd Jepsen, M. Schall, Schyja V., and H. Helm. Electro-optic detection of thz radiation in $LiTaO_3$, $LiNbO_3$ and $ZnTe$. *Applied Physics Letters*, 70:3069, 1997.

- [53] Sang-Gyu Park, M. R. Melloch, and A. M. Weiner. Comparison of terahertz waveforms measured by electro-optic and photoconductive sampling. *Applied Physics Letters*, 73:3184, 1998.
- [54] Y. Cai, I. Brener, J. Lopata, J. Wynn, L. Pfeiffer, J. B. Stark, Q. Wu, X. C. Zhang, and J. F. Federici. Coherent terahertz radiation detection: Direct comparison between free-space electro-optic sampling and antenna detection. *Applied Physics Letters*, 74:444, 1998.
- [55] M. Rosenau da Costa, O. V. Kibis, and M. E. Portnoi. Carbon nanotubes as a basis for terahertz emitters and detectors. *Microelectronics Journal*, 40(4-5):776–778, 2009.
- [56] J. Łusakowski. Nanometer transistors for emission and detection of thz radiation. *Thin Solid Films*, 515(10):4327–4332, 2007.
- [57] H. C. Liu, C. Y. Song, Z. R. Wasilewski, and M. Buchanan. Nanometer transistors for emission and detection of thz radiation. *Proceedings of SPIE - The International Society for Optical Engineering*, 7945:art.no.79450X, 2011.
- [58] K. Iwami, T. Ono, and M. Esashi. Sputter deposited zinc oxide photoconductive antenna for terahertz time-domain spectroscopy. *Proceedings of SPIE - The International Society for Optical Engineering*, 7133:art.no.713315, 2009.
- [59] H. Videlier, S. Nadar, N. Dyakonova, M. Sakowicz, T. Trinh Van Dam, F. Teppe, D. Coquillat, and J. Lyonnet. Silicon mosfets as room temperature terahertz detectors. *Journal of Physics: Conference Series*, 193:art.no.012095, 2009.
- [60] T. Ueda and S. Komiyama. Novel Ultra-Sensitive Detectors in the 10-50 μm wavelength range. *Sensors*, 10:8411–8423, 2010.
- [61] L. D. Landau and E.M. Lifszyc. *Mechanika kwantowa*. PWN, Warszawa, 1979.
- [62] J. H. Davies. *The Physics of Low-Dimensional Semiconductors*. Cambridge Univ.Press, 2005.
- [63] Richard A. Morrow and Kenneth R. Brownstein. Model effective-mass hamiltonians for abrupt heterojunctions and the associated wave-function-matching conditions. *Phys. Rev. B*, 30:678–680, 1984.

- [64] G. T. Einevoll, P. C. Hemmer, and J. Thomsen. Operator ordering in effective-mass theory for heterostructures. i. comparison with exact results for superlattices, quantum wells, and localized potentials. *Phys. Rev. B*, 42:3485–3496, 1990.
- [65] G. Levai and O. Özer. An exactly solvable Schrödinger equation with finite positive position-dependent effective mass. *Journal of Mathematical Physics*, 51(9):092103, 2010.
- [66] K. Majchrowski and W. Paško. Anisotropy of the conductivity in the asymmetric quantum wells. *Acta Physica Polonica A*, 114:1241–1246, 2008.
- [67] K. Majchrowski, W. Paško, and I. Tralle. On the photo-galvanic effect in asymmetric quantum wells of different shapes. *Physics Letters A*, 373:2959–2964, 2009.
- [68] T. Wojtowicz, G. Karczewski, and J. Kossut. Excitons in novel diluted magnetic semiconductor quantum structures. *Thin Solid Films*, 306:271, 1997.
- [69] K. Kowalik, A. Kudelski, J. A. Gaj, T. Wojtowicz, O. Krebs, and P. Voisin. In-plane optical anisotropy of parabolic and half-parabolic CdMnTe quantum wells. *Solid. State Commun.*, 126:467, 2003.
- [70] S. Baskoutas, E. Paspalakis, and A. Terzis. Effects of excitons in nonlinear optical rectification in semiparabolic quantum dots. *Phys. Rev. B*, 74:153306, 2006.
- [71] S. Baskoutas and A. Terzis. Binding energy of hydrogenic impurity states in an inverse parabolic quantum well under electric field. *Physica E*, 40:1367, 2008.
- [72] L. Zhang and H. J. Xie. Electric field effect on the second-order nonlinear optical properties of parabolic and semiparabolic quantum wells. *Phys. Rev. B*, 68:235315, 2003.
- [73] L. Zhang and H. J. Xie. Electro-optic effect in a semi-parabolic quantum well with an applied electric field. *Mod. Phys. Lett. B*, 17:347, 2003.
- [74] B. M. Levitan. *Inverse Sturm-Liouville Problems*. Nauka, Moscow in Russia, 1984.
- [75] I. M. Gel’fand and B. M. Levitan. On the determination of a differential equation from its spectrum. *Am. Math. Soc. Trans.*, 1:253–304, 1951.

- [76] V.A. Marchenko. *Spectral Theory of Sturm-Liouville Operators*. Nauk. Dumka, Kiev, 1972.
- [77] Z. S. Agranovich and V. A. Marchenko. *Sturm-Liouville Operators and Their Applications*. Nauk. Dumka, Kiev, 1977.
- [78] B. N. Zakhariev and A. A. Suzko. *Direct and Inverse Problems. Potentials in Quantum Scattering*. Springer-Verlag, Berlin, N.Y., 1990.
- [79] B. M. Levitan and M. G. Gasymov. Determination of differential equation by two of its spectra. *Sov. Usp. Math Nauk*, 19:3–63, 1964.
- [80] H. B. Thacker, C. Quigg, and J. L. Rosner. Inverse scattering problem for quarkonium systems. I. One-dimensional formalism and methodology. *Phys.Rev.D*, 18:274–286, 1978.
- [81] J. F. Schonfeld, W. Kwong, J. L. Rosner, C. Quigg, and H. B. Thacker. On the convergence of reflectionless approximations to confining potentials. *Annals of Physics*, 128:1–28, 1980.
- [82] H. B. Thacker, C. Quigg, and J. L. Rosner. Inverse scattering problem for quarkonium systems. II. *Phys.Rev.D*, 18:287–295, 1978.
- [83] I. Tralle and K. Majchrowski. 'Smart design' of quantum wells and double-quantum wells structures. *World Journal of Condensed Matter Physics*, 4:24–32, 2014.
- [84] J. Hadamard. *Le probleme de Cauchy et les équations aux derives partiels linéaires hyperboliques*. Hermann, Paris, 1932.
- [85] A. N. Tikhonov and V. Ya. Arsenin. *Mehtods of soution of ill-posed problems*. Nauka, Moscow, 1979.
- [86] A. M. Tomlinson, C. C. Chang, R. J. Stone, R. J. Nicholas, A. M. Fox, M. A. Pate, and C. T. Foxon. Intersubband transitions in GaAs coupled-quantum-wells for use as a tunable detector at THz frequencies. *Appl. Phys. Lett.*, 76:1579–1581, 2000.
- [87] R. Landauer. *IBM J. Res. Dev.*, 32:306, 1988.

- [88] A. Szafer and A. D. Stone. Theory of Quantum Conduction through a Constriction. *Phys. Rev. Lett.*, 62:300, 1989.
- [89] M. Büttiker. *IBM J. Res. Dev.*, 32:317, 1988.
- [90] Y. Ando and T. Itoh. Calculation of transmission tunneling current across arbitrary potential barriers. *J. Appl. Phys.*, 61:1497, 1988.
- [91] Network for Computational Nanotechnology. Online simulation and more for nanotechnology - <https://nanohub.org/>.
- [92] L. V. Keldysh. Diagram technique for non-equilibrium processes. *Sov. Phys. JETP*, 20:1018–1026, 1965.
- [93] L. P. Kadanoff and G. Baym. *Quantum Statistical Mechanics: Green's Function Methods in Equilibrium and Non-Equilibrium Problems*. CA: Benjamin Cummings, Redwood City, 1995.
- [94] R. C. Bowen, G. Klimeck, R. K. Lake, W. R. Frensley, and T. Moise. Quantitative simulation of a resonant tunneling diode. *J. Appl. Phys.*, 81:3207–3213, 1997.
- [95] M. Pourfath and H. Kosina. Computational study of carbon-based electronics. *J. Comput. Electron.*, 8:427–440, 2009.
- [96] L. E. Henrickson. Nonequilibrium photocurrent modeling in resonant tunneling photodetectors. *J. Appl. Phys.*, 91:6273–6281, 2002.
- [97] U. Aeberhard and R. H. Morf. Microscopic nonequilibrium theory of quantum well solar cells. *Phys. Rev. B*, 77:125343, 2008.
- [98] G. Hałdaś, A. Kolek, and I. Tralle. Modeling of mid-infrared Quantum Cascade Laser by means of nonequilibrium Green's functions. *Journal of Quantum Electronics*, 47(6):878–885, 2011.
- [99] E. N. Economu. *Green's Functions in Quantum Physics*. Springer-Verlag, New York, 1983.
- [100] A. Kolek and G. Hałdaś. Modelling of quantum mechanical devices by Green's function technique. *Acta Physica Polonica*, 32:551–556, 2001.

- [101] S. Datta. *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*. Cambridge Univ. Press, 1995.
- [102] I. Tralle, G. Hałdaś, K. Majchrowski, and A. Kolek. Tunable THz detector based on the quantum double-barrier structures. *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics* - wystane do recenzji, 2014.
- [103] R. Lake, G. Klimeck, R. C. Bowen, and D. Jovanovic. Single and multiband modeling of quantum electron transport through layered semiconductor devices. *J. Appl. Phys.*, 81:7845–7869, 1997.
- [104] A. Wacker. Gain in quantum cascade lasers and superlattices: A quantum transport theory. *Phys. Rev. B*, 66:085326, 2002.
- [105] J. Wang, E. Polizzi, and M. Lundstrom. A three-dimensional quantum simulation of silicon nanowire transistors with the effective-mass approximation. *J. Appl. Phys.*, 96:2192–2203, 2004.
- [106] S. C Lee and A. Wacker. Nonequilibrium Green’s function theory for transport and gain properties of quantum cascade structures. *Phys. Rev. B*, 66:245314, 2002.
- [107] T. Kubis, C. Yeh, and P. Vogl. Theory of nonequilibrium quantum transport and energy dissipation in terahertz quantum cascade lasers. *Phys. Rev. B*, 79:195323, 2009.
- [108] A. Kolek, G. Hałdaś, and M. Bugajski. Nonthermal carrier distributions in the subbands of 2-phonon resonance mid-infrared quantum cascade laser. *Appl. Phys. Lett.*, 101:061110, 2012.
- [109] A. Wacker, M. Lindskog, and D. O. Winge. Nonequilibrium Green’s Function Model for Simulation of Quantum Cascade Laser Devices Under Operating Conditions. *IEEE J. of Sel. Topics in Quantum Electronics*, 19:1200611, 2013.
- [110] W. Salejda, M. H. Tyc, and M. Just. *Algebraiczne metody rozwiązywania równania Schrödingera*. Instytut Fizyki Politechniki Wrocławskiej, Wrocław, 2002.