

ივანე ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტი

ბექა გურამის ძე ბოჭორიშვილი

*კვანტური წერტილების ელექტრონული მდგომარეობებისა და
ზონათა შორისი გადასვლების შესაბამისი ოსცილატორული ძალების
კვლევა სასრულ ელემენტთა მეთოდით*

ზუსტ და საბუნებისმეტყველო მეცნიერებათა ფაკულტეტი
ფიზიკის მიმართულება

ს ა დ ო ქ ტ ო რ ო დ ი ს ე რ ტ ა ც ი ა

პროგრამის ხელმძღვანელი:
ფიზ.-მათ. მეცნ. დოქტორი,
თსუ სრული პროფესორი

ალექსანდრე შენგელაია

სამეცნიერო ხელმძღვანელი,
ფიზიკის მეცნიერებათა დოქტორი,
თესალონიკის არისტოტელეს უნივერსიტეტის
ასოცირებული პროფესორი

ხარიტონ პოლატოგლუ

თბილისი 2010

ს ა რ ჩ ე ვ ი

შესავალი - - - - - 3

თავი პირველი

§1.1 ნახევარგამტარული კვანტური წერტილები მიმოხილვა და მოტივაცია- - - - -	-7
§1.2 სასრულ ელემენტთა მეთოდი შრედინგერის განტოლებისათვის - - - - -	-17
§1.3 ზოგიერთი მარტივი კვანტური სისტემის ენერგეტიკული სპექტრი - - - - -	-21

თავი მეორე

§2.1 სფერული, ცილინდრული და კონუსური კვანტური წერტილები - - - - -	-23
§2.2 სფერული კვანტური წერტილების ტალღური ფუნქციები - - - - -	27
§2.3 ცილინდრული კვანტური წერტილების ტალღური ფუნქციები - - - - -	29
§2.4 კონუსური კვანტური წერტილების ტალღური ფუნქციები - - - - -	32
§2.5 ფუძისა და სიმაღლის ცვლილების გავლენა კონუსური კვანტური წერტილების ელექტრონულ მდგომარეობებზე - - - - -	35
§2.6 ურთიერთქმედი <i>InAs/GaAs</i> ცილინდრული კვანტური წერტილები - ხელოვნური მოლეკულა - - - - -	42
§2.7 კვანტური წერტილების ზონათაშორისი გადასვლების შესაბამისი ოსცილატორული ძალები - - - - -	50

თავი მესამე

§3.1 კვანტური წერტილი კვანტური ორმო (QDQW) - - - - -	57
§3.2 QDQW სისტემის ტალღური ფუნქციები - - - - -	61
§3.3 QDQW-ის ელექტრონ-ხვრელის კულონური ურთიერთქმედება - - - - -	65
§3.4 QDQW-ის ზონათაშორისი გადასვლების ოსცილატორული ძალები - - - - -	67
მიღებული შედეგები და დასკვნები - - - - -	69
დანართი - - - - -	-72
ლიტერატურა - - - - -	-75

შესავალი

ნანო მეცნიერებები ეს ის მეცნიერებებია, რომლებიც დაკავშირებული არიან ნანომეტრული ზომით განსაზღვრულ ნივთიერების კვლევასთან და მანიპულაციასთან. სიტყვა ნანო აქ მეტრის ერთ მემილიარდედ ანუ 10^{-9} ნაწილს აღნიშნავს. უკანასკნელი ორი ათწლეულის განმავლობაში ნანო მეცნიერებები განსაკუთრებულად სწრაფად ვითარდებიან. მათი განვითარების ტემპის კარგი მაჩვენებლებია იმ სტატიათა და მათი ციტირებების რიცხვი, რომელთა საკვანძო სიტყვაც “ნანო”-ს შეიცავს. მსოფლიოს მრავალ უნივერსიტეტსა და კვლევით ინსტიტუტში უამრავი ადამიანი მუშაობს სხვადასხვა ნანო მეცნიერებაში. როგორც ჩვეულებრივ ხდება ხოლმე ამა თუ იმ მეცნიერების განვითარებას დიდწილად საზოგადოებრივ ინდუსტრიული მოთხოვნა განაპირობებს, ნანომეცნიერებების შემთხვევაშიც სწორედ ასეა. მეცნიერულ-ტექნიკური პროგრესის პირობებში მზარდი მოთხოვნების დაკმაყოფილების ერთ-ერთი მნიშვნელოვანი ფაქტორი მაღალ ტექნოლოგიებზე მოდის. ამ უკანასკნელის მნიშვნელოვანი შემადგენელი ნაწილი კი სწორედ ნანოტექნოლოგიებია.

“ნანო” ტერმინი საოცრად მულტი-დისციპლინარულია და იგი ისეთ სხვადასხვა მეცნიერებებს აერთიანებს, როგორებიცაა მაგალითად, ფიზიკა, ქიმია, ინჟინერია, ბიოლოგია, მედიცინა, კომპიუტერული მეცნიერება და ა. შ.

ნანოტექნოლოგიაში ნანომეცნიერებების და ინჟინერიის საშუალებით შექმნილი ახალი სტრუქტურები, მასალები და მოწყობილობები მოიაზრება. მიჩნეულია, რომ ისტორიულად ნანოტექნოლოგიის პირველად წინასწარმეტყველება ცნობილ ამერიკელ მეცნიერს რიჩარდ ფეინმანს ეკუთვნის, როცა მან გააუღერა თავისი ცნობილი ფრაზა [1]: “There is a plenty of room at the bottom” რომელიც ქართულად დაახლოებით შემდეგნაირად შეიძლება ითარგმნოს: “*იქ კვებით დიდი ადგილია*”. ნანოტექნოლოგიის გამოყენების პირველი მაგალითები ნახევარგამტარული ჰეტეროსტრუქტურები და ნანოსტრუქტურები იყო, რომელთაც მეორენაირად მცირე განზომილებიან სტრუქტურებსაც უწოდებენ. ეს სისტემები წარმოდგენილი არიან 2, 1 ან 0 სივრცულ განზომილებაში, ასეთ სისტემებს მყარი სხეულების ფიზიკაში კვანტურ კედლებს (quantum well), კვანტურ ზონრებს (quantum wire) და კვანტურ წერტილებს (quantum dot) უწოდებენ შესაბამისად [2-9]. აღნიშნული მცირე ზომის სისტემების გავრცელების არეალი მხოლოდ მყარი სხეულების ფიზიკით არ შემოიფარგლება, არამედ იგი ასევე გვხვდება ისეთ დარგებში როგორიცაა მაგალითად: ქიმია [10-13], მეტალურგია [14-15], კატალიზი [16-17] და სხვ.

ნანო ზომის ნიმუშებს გააჩნიათ ზოგიერთი ისეთი თვისება, რომელიც შესაბამისი ნივთიერების მაკროსკოპულ ნიმუშს არ ახასიათებს. სწორედ ამ თვისებებისა და მცირე ზომების გამო რაც თავის მხრივ ხელსაწყოს ან აქტიური ელემენტის ზომის, ნივთიერებისა და ენერჯიის დაზოგვის კარგ შესაძლებლობას იძლევა, ნანოფიზიკა უაღრესად აქტუალურია თანამედროვე მაღალი ტექნოლოგიების შექმნის საქმეში. მცირე ზომის სისტემების უპირატესობა ელექტრონიკაში რესურსების დაზოგვის გარდა მათი მოქმედების მაღალი სიჩქარეცაა რაც ძალიან პრინციპულია.

ნახევარგამტარული კვანტური წერტილები (semiconductor quantum dots) ერთ-ერთი ჯგუფია ზემოთ აღნიშნული ნანოსისტემებისა, ისინი წარმოადგენენ შედარებით ვიწრო ზონიან ნახევარგამტარებს (თვით კვანტური წერტილი) რომლებიც “ჩადგმული” არიან უფრო ფართო ზონიან ნახევარგამტარში.

კვანტურ წერტილების კვლევა აქტუალურია მათი სხვადასხვა სფეროში გამოყენების მიზნით მაგალითად შუქ დიოდებში [18-19], ბიოლოგიურ სისტემებში [20], ლაზერებისათვის [21], კვანტურ კომპიუტერებში [22], განახლებადი ენერჯების მიმართულებით [23] და სხვ.

ისევე როგორც ფიზიკის ყველა მიმართულებით, თეორიული კვლევები ნანო ფიზიკაშიც დიდ როლს ასრულებენ. თეორიულ გათვლებს განსაკუთრებული მნიშვნელობა ენიჭება ვინაიდან მათი გამოყენების შედეგად შესაძლებელია წინასწარ, ფიზიკური სისტემის ექსპერიმენტალურად შექმნის გარეშე ნაწინასწარმეტყველები იქნას სისტემის ესა თუ ის თვისება და მითითებული იქნას ის პარამეტრები, რომელიც უნდა ქონდეს სისტემას ამა თუ იმ თვისების მისაღებად. ხშირია შემთხვევა, როდესაც თეორიულად ნაწინასწარმეტყველებია სრულიად ახალი თვისება ან მოვლენა, რომელიც ადრე ექსპერიმენტალურად დამზერილი არ ყოფილა.

კომპიუტერული რესურსების სწრაფმა განვითარებამ დიდად შეუწყო ხელი კვლევებს ნანო ფიზიკის დარგშიც. დღესდღეობით შესაძლებელია ნანოსისტემების სხვადასხვა თვისებების კვლევა სრულიად თეორიულად - ყოველგვარი ექსპერიმენტალური პარამეტრის გამოყენების გარეშე [24-25]. თუმცა ასეთი გამოთვლები დიდ კომპიუტერულ რესურსებს მოითხოვენ და ამიტომ ხშირად ნანოსისტემების კვლევისას მიმართავენ სხვადასხვა მიახლოებებს და მოდულებს როგორებიცაა მაგალითად ეფექტური მასის მიახლოება [26-28], სიმკვრივის პოტენციალის თეორია (density functional theory, DFT) [29], ემპირიული ფსევდოპოტენციალის მეთოდი [30], ძლიერი ბმის მეთოდი [31-32] და სხვ. ზემოთ ჩამოთვლილი მეთოდებიდან ნაშრომში გამოკვლეული საკითხების შესასწავლად ეფექტური მასის მიახლოება ყველაზე მარტივი, გამოსაყენებლად მოსახერხებელი და ამავე დროს ეფექტური მიახლოებაა, რადგან მისი გამოყენებისათვის საკმარისია სისტემის რამდენიმე პარამეტრის ცოდნა როგორებიცაა ნაწილაკთა ეფექტური მასები, აკრძალული ზონის სიგანე და პოტენციალები, ასევე ეს მიახლოება საშუალებას გვაძლევს მარტივად გამოვიყენოთ სასრულ ელემენტთა მეთოდი სხვადასხვა გეომეტრიული ფორმის მქონე სისტემებისათვის; ასევე გამოთვლებისათვის კომპიუტერული რესურსებიც შედარებით მცირე მოითხოვება, ვიდრე სხვა მიახლოებების შემთხვევაში. ყოველივე ამის შესახებ დაწვრილებითაა ნათქვამი 1.2§-ში. რაც შეეხება ისეთ მძლავრ მეთოდებს როგორიცაა სიმკვრივის პოტენციალის თეორია (სპთ) და ემპირიული ფსევდოპოტენციალის მეთოდი (ეფმ) მათი ძირითადი სისუსტე ნაშრომში შესწავლილი საკითხების შემთხვევაში არის ის, რომ სპთ არ გვაძლევს საშუალებას ვიპოვოთ სისტემის ტალღური ფუნქციები, ხოლო ეფმ-ს გამოსაყენებლად გარდა კონკრეტული ემპირიული მონაცემების ცოდნისა ასევე საჭიროა ამ მეთოდის გამოყენება დახრილი პოტენციალის შემთხვევაში (კვანტური წერტილი კვანტური ორმოს შესასწავლად - ნაშრომის მე-3 თავი) რაც საკმაოდ რთული გასაკეთებელია. უნდა ითქვას რომ სპთ და ეფმ დიდი სიზუსტით გამოირჩევიან და ზოგადად ეფექტური მასის მიახლოებაზე ზუსტად მუშაობენ, თუმცა როგორც ქვევით შევნიშნავთ ეფექტური მასის მიახლოება ნაშრომში გამოკვლეული სისტემებისათვის საკმაოდ ზუსტ შედეგებს იძლევა.

წინამდებარე ნაშრომში თეორიულად შესწავლილია სხვადასხვა შედგენილობისა და გეომეტრიული ფორმის კვანტური სისტემების (კვანტური წერტილი - quantum dot, კვანტურ წერტილური მოლეკულა - quantum dot molecule, კვანტური წერტილი კვანტური ორმო - quantum dot quantum well) ენერგეტიკული სპექტრი, ტალღური ფუნქციები და ზონათშორისი გადასვლების შესაბამისი ოსცილატორული სიმძლავრეები, ასევე ექსიტონთა კულონური ურთიერთქმედება. გამოთვლები შესრულებულია კორდინატზე დამოკიდებულ ეფექტური მასის

მიახლოებაში მომვლები ტალღური ფუნქციის გამოყენებით, შესწავლილია სისტემების სხვადასხვა საინტერესო თვისებები და გამოკვლეულია სისტემების ყოფაქცევა მათი გეომეტრიული პარამეტრების ცვლილებისას.

მიუხედავად იმისა, რომ კვანტური წერტილების თვისებების მათ ზომებზე დამოკიდებულება საკმაოდ კარგად არის შესწავლილი, კვლევების სიმცირეა კვანტური წერტილების ფორმაზე დამოკიდებულების შესწავლის მხრივ. ვინაიდან კვანტური წერტილები მცირე ზომის ობიექტებია, ამიტომ მათი ზედაპირის ფართობსა და ფორმას დიდი ზეგავლენის მოხდენა შეუძლია მათ თვისებებზე. ამ მიზნით ნაშრომში შესწავლილია იდენტური მოცულობისა და სხვადასხვა გეომეტრიული ფორმის (სფერული, ცილინდრული და კონუსური) მქონე კვანტური წერტილები და გამოკვლეულია მათი თვისებების დამოკიდებულება გეომეტრიულ ფორმებზე.

შესწავლილი კვანტური სისტემების მდგომარეობის საკუთარი მნიშვნელობების (ენერგიების) და საკუთარი ფუნქციების (ტალღური ფუნქციების) გამოსათვლელად წინამდებარე ნაშრომში გამოყენებულია სასრულ ელემენტთა მეთოდი, რომლის საშუალებითაც ამოხსნილია შრედინგერის სტაციონალური განტოლება სფერულ და ცილინდრულ კოორდინატებში კონკრეტული სისტემის სიმეტრიის შესაბამისად. სიმეტრიის შედეგად შრედინგერის განტოლების განზომილება ერთი (ცილინდრული სიმეტრიის შემთხვევა) ან ორი (სფერული სიმეტრიის შემთხვევა) განზომილებით მცირდება და 3 განზომილებიანი ამოცანა ორ (ცილინდრული სიმეტრიის შემთხვევა) და ერთ (სფერული სიმეტრიის შემთხვევა) განზომილებიან ამოცანაზე დაიყვანება, რაც მნიშვნელოვანად ამარტივებს ამოცანის ამოხსნას კომპიუტერული რესურსების თვალსაზრისით.

სასრულ ელემენტთა მეთოდის უპირატესობა ასევე მდგომარეოს მის მოხერხებულობაში აღწეროს სხვადასხვა გეომეტრიული ფორმების კვანტური სისტემები და საშუალებას გვაძლევს პირდაპირ გავითვალისწინოთ, პოტენციალისა და ნაწილაკთა ეფექტური მასების კოორდინატზე დამოკიდებულება.

ნაშრომში შესწავლილია დახრილი პოტენციალის მქონე კვანტური წერტილი კვანტური ორმო, რომელიც ახალი ტიპის სისტემას წარმოადგენს. გამოკვლეულია თუ როგორ არის დამოკიდებული სისტემის ენერგეტიკული სპექტრი და ზონათაშორისი გადასვლების შესაბამისი ოსცილატორული ძალები პოტენციალის დახრის სიგანეზე. ასევე შეფასებულია სისტემისათვის ელექტრონ-ხვრელის კულონური ურთიერთქმედება. მიღებული შედეგები საინტერესოა სისტემის სხვადასხვა თვისებების მართვის თვალსაზრისით.

თ ა ვ ი პ ი რ ვ ე ლ ი

§1.1 ნახევარგამტარული კვანტური წერტილები მიმოხილვა და მოტივაცია

ნანოსტრუქტურებში შეიძლება არსებობდეს შეზღუდვა მუხტის თავისუფალი მატარებლების მოძრაობისა ერთი ან მეტი მიმართულებით. მუხტის მატარებლების მოძრაობა მოცულობით კრისტალში ხდება თავისუფლად ყველა მიმართულებით, ეგრედ წოდებულ კვანტურ ორმოებში (კვანტურ კედლებში) მოძრაობა შეზღუდულია - 1, კვანტურ ზონებში - 2, კვანტურ წერტილებში კი სამივე მიმართულებით. თუ როგორ არის მუხტის მატარებელთა მდგომარეობათა სიმკვრივე დამოკიდებული მათი მოძრაობის შეზღუდვაზე თვისობრივად დამოკიდებულია, იმაზე თუ მოძრაობის რა შეზღუდვებია შესასწავლ ნანოსტრუქტურაში [33].

განვიხილოთ მოცულობითი (3D) კრისტალი, ამ შემთხვევაში ელექტრონები (თუ ელექტრონებზე ვისაუბრებთ) წარმოადგენენ თავისუფალ ნაწილაკებს და ისინი ეფექტური მასის მიახლოებაში შრედინგერის განტოლების მიხედვით აღიწერებიან შემდეგი ტალღური ფუნქციით:

$$\Psi(x, y, z) = \frac{1}{\sqrt{L_x L_y L_z}} e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)} \quad (1)$$

სოლო ენერჯია

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \quad (2)$$

სადაც \mathbf{k} ტალღური ვექტორია, m^* -ელექტრონის ეფექტური მასა, \hbar პლანკის დაყვანილი მუდმივა, L_x, L_y, L_z - კრისტალის შესაბამისად x, y, z - ღებების გასწვრივ ზომებია. (1) პარაბოლური დისპერსიის დამოკიდებულების შემთხვევაში იზოენერგეტიკული ზედაპირი წარმოადგენს k რადიუსიან სფეროს. თუ გამოვიყენებთ ბორნ-კარმანის სასაზღვრო პირობებს მაშინ \mathbf{k} ტალღური ვექტორის კომპონენტებისათვის მიიღება:

$$k_x = \frac{2\pi}{L_x} n_1 \quad k_y = \frac{2\pi}{L_y} n_2 \quad k_z = \frac{2\pi}{L_z} n_3 \quad n_1, n_2, n_3 = 1, 2, 3, \dots$$

ვინაიდან dk სისქის სფერული შრის მოცულობა $dV = 4\pi k^2 dk$ ტოლია, ამ მოცულობაზე მოსული dN მდგომარეობათა რიცხვი სპინის გათვალისწინებით (სპინის გამო 2 ზე ვამრავლებთ) არის:

$$dN = 2 \cdot \frac{4\pi k^2 dk}{(2\pi)^3} = \frac{k^2 dk}{\pi^2}$$

(2)-ს გათვალისწინებით მდგომარეობათა სიმკვრივისათვის ვღებულობთ:

$$g(E)_{3D} = \frac{dN}{dE} = \frac{(2m^*)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} E^{1/2} \quad (3)$$

როგორც ვხედავთ მდგომარეობათა სიმკვრივე მოცულობითი კრისტალის შემთხვევაში $E^{1/2}$ კანონის მიხედვით იზრდება (ნახ. 1.1).

განვიხილოთ 2D შემთხვევა როცა ელექტრონები გარდა z ღერძის გასწვრივ მიმართულებისა მოძრაობენ კრისტალური მესრის პერიოდულ ველში, სოლო z ღერძის გასწვრივ მათი მოძრაობა შეზღუდულია $U(z)$ პოტენციალით:

$$U(z) = 0 \quad \text{თუ } 0 < z < w$$

$$U(z) = \infty \quad \text{თუ } 0 > z > w$$

ამ შემთხვევაში ელექტრონთა ენერჯია შედგება თავისუფლად მოძრავი ელექტრონის ენერჯიისა და z ღერძის გასწვრივ დატყვევებული ელექტრონის ენერჯიათა ჯამისაგან:

$$E(n, k_x, k_y) = \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_y^2) + \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\pi}{w}\right)^2 n^2 \quad (4)$$

სადაც $n = 1, 2, 3, \dots$

(4) გამოსახულების მიხედვით $2D$ შემთხვევაში ელექტრონთა ენერგია განისაზღვრება (n, k_x, k_y) რიცხვებით.

dk სიფართის რგოლის ფართობი $S = 2\pi k_{2D} dk_{2D}$ ვინაიდან ერთ მდგომარეობას (k_x, k_y) სიბრტყეში შეესაბამება ფართობი: $dS = \frac{(2\pi)^2}{L_x L_y}$, ამიტომ ელექტრონულ მდგომარეობათა რიცხვი რგოლში, მოსული კრისტალის მოცულობის ერთეულზე (სპინის გათვალისწინებით) იქნება:

$$dN = \frac{2S}{v dS} = \frac{k_{2D} dk_{2D}}{\pi w} = \frac{dk_{2D}^2}{2\pi w} \quad (5)$$

(4)-ის შესაბამისად გვაქვს:

$$k_{2D}^2 = \frac{2m^*}{\hbar^2} (E - E_n) \quad (6)$$

აქ $E_n = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\pi}{w}\right)^2 n^2$ - n -ური ქვეზონის შესაბამისი ენერგია. (5) და (6)-ის გათვალისწინებით $2D$ მდგომარეობის სიმკვრივისათვის ვღებულობთ:

$$g(E)_{2D} = \frac{\sum dN}{dE} = \frac{m^*}{\pi w \hbar^2} \sum_n \Theta(E - E_n) \quad (7)$$

$\Theta(p)$ ჰევისაიდის საფეხუროვანი ფუნქციაა, $\Theta(p) = 1$ თუ $p \geq 0$ და $\Theta(p) = 0$ თუ $p < 0$. (7) აჯამვა წარმოებს ქვეზონების მიხედვით.

ზოგჯერ (7)-ს შემდეგი სახით წარმოადგენენ:

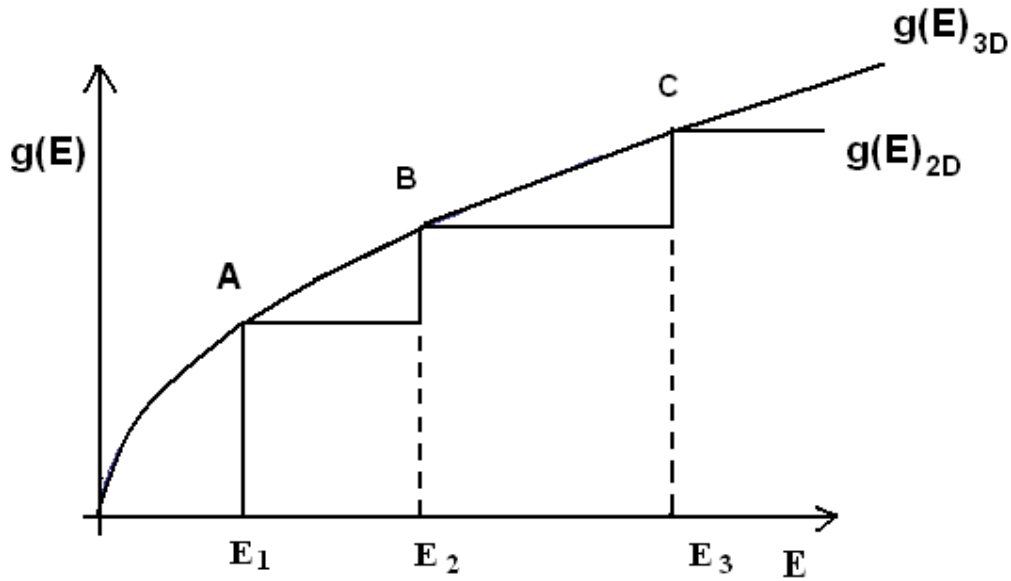
$$g(E)_{2D} = \frac{m^*}{\pi w \hbar^2} \left[\sqrt{\frac{E}{E_1}} \right] \quad (8)$$

სადაც $\left[\sqrt{\frac{E}{E_1}} \right]$ არის მთელი ნაწილი $\sqrt{\frac{E}{E_1}}$ -სა და უდრის ქვეზონების რიცხვს. (7) და (8) დან ჩანს, რომ $2D$ შემთხვევაში ნებისმიერ ქვეზონაში მდგომარეობათა სიმკვრივე მუდმივია და არაა დამოკიდებული ენერგიაზე. როცა სიდიდე $\left[\sqrt{\frac{E}{E_1}} \right]$ იცვლება ერთი ერთეულით, ანუ იცვლება ქვეზონა, მაშინ ენერგია იცვლება ნახტომისებურად და ამიტომ $g(E)_{2D}$ დამოკიდებულებას აქვს საფეხურიანი სახე (ნახ. 1.1).

თუ $g(E)_{2D}$ დამოკიდებულებას გამოვსახავთ მოცულობითი კრისტალის - $g(E)_{3D}$ მდგომარეობათა სიმკვრივით (3) გამოსახულების შესაბამიად, მივიღებთ:

$$g(E)_{2D} = g(E)_{3D} \frac{\left[\sqrt{\frac{E}{E_1}} \right]}{\sqrt{\frac{E}{E_1}}} \quad (9)$$

უკანასკნელი გამოსახულებიდან ჩანს, რომ როცა $E = E_n$, მაშინ $2D$ სისტემის კვანტურ მდგომარეობათა სიმკვრივე მოცულობითი კრისტალის კვანტურ მდგომარეობათა სიმკვრივის ტოლია (ეს წერტილები აღნიშნულია A, B, C ნახ.1.1-ზე).



ნახ. 1.1 მოცულობითი კრისტალისა ($g(E)_{3D}$) და კვანტური ორმოს ($g(E)_{2D}$) ელექტრონულ მდგომარეობათ სიმკვრივის დამიკიდებულება ენერგიაზე

გამოვითვალთ მდგომარეობათა სიმკვრივე 1D შემთხვევისათვის (კვანტური ზონარი) ანუ როცა ელექტრონთა მოძრაობა შეზღუდულია ორი მიმართულებით და მათ თავისუფალი მოძრაობა შეუძლიათ მხოლოდ ერთი ღერძის გასწვრივ, ამ ღერძად ჩვენ ზოგადობის შეუზღუდავად x ღერძს ავირჩევთ. ზემოთ განხილული შემთხვევის მსგავსად ელექტრონთა ენერგიისათვის გვაქვს:

$$E(n, m, k_x) = \frac{\hbar^2}{2m^*} k_x^2 + \frac{\hbar^2}{2m^*} \left[\left(\frac{\pi}{d} \right)^2 m^2 + \left(\frac{\pi}{w} \right)^2 n^2 \right] \quad (10)$$

d და w შესაბამისად y და z ღერძის გასწვრივ პოტენციალური ორმოების სიგანეებია. $m, n = 1, 2, 3, \dots$ რომლებიც ახასიათებენ ქვეზონებს.

მდგომარეობათა რიცხვი dk_x ინტერვალზე, მოსული მოცულობის ერთეულზე არის:

$$dN = \frac{dk_x}{V(2\pi/L_x)} = \frac{dk_x}{2\pi wd}$$

(10)-ის მიხედვით გვაქვს:

$$k_x = \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2} (E - E_{n,m})} \quad \text{სადაც,} \quad E_{n,m} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left[\left(\frac{\pi}{d} \right)^2 m^2 + \left(\frac{\pi}{w} \right)^2 n^2 \right] \quad \text{ქვეზონის ენერგია}$$

მოცემული n და m -ით.

ამგვარად გვაქვს

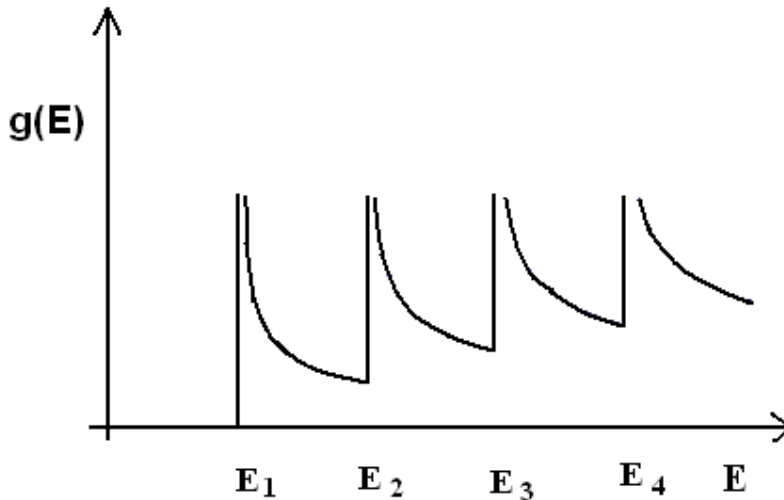
$$dk_x = \frac{\sqrt{2m^*} dE}{2\hbar \sqrt{E - E_{n,m}}} \quad (11)$$

(11)-ის გათვალისწინებით მდგომარეობათა სიმკვრივის (მოსული მოცულობის ერთეულზე) ენერგიაზე დამოკიდებულება 1D შემთხვევაში შემდეგნაირად მოიცემა:

$$g(E)_{1D} = \frac{\sqrt{2m^*}}{\pi\hbar wd} \sum_m \sum_n \frac{\Theta(E-E_{n,m})}{\sqrt{E-E_{n,m}}} \quad (12)$$

(12)-ის მიღებისას გათვალისწინებულია სპინი და ის, რომ dE ერთ ინტერვალს შეესაბამება თითოეული ქვეზონის ორი ინტერვალის: $\pm k_x$ რომელთათვისაც $(E - E_{n,m}) > 0$.

(12)-ის მიხედვით ჩანს, რომ ცალკეულ ქვეზონაში ენერგიის ზრდით მდგომარეობათა სიმკვრივე $(E - E_{n,m})^{-\frac{1}{2}}$ სახით მცირდება (ნახ.1.1) როცა $E = E_{n,m}$ მაშინ მდგომარეობათა სიმკვრივე $g(E)_{1D}$ უსასრულოა ხდება. თუმცა, უნდა აღინიშნოს, რომ ნებისმიერი ენერგიის ინტერვალის სასრული მნიშვნელობისათვის დასაშვებ მდგომარეობათა რიცხვი სასრულია.



ნახ. 1.2 კვანტური ზონარის მდგომარეობათა სიმკვრივის დამოკიდებულება ენერგიაზე

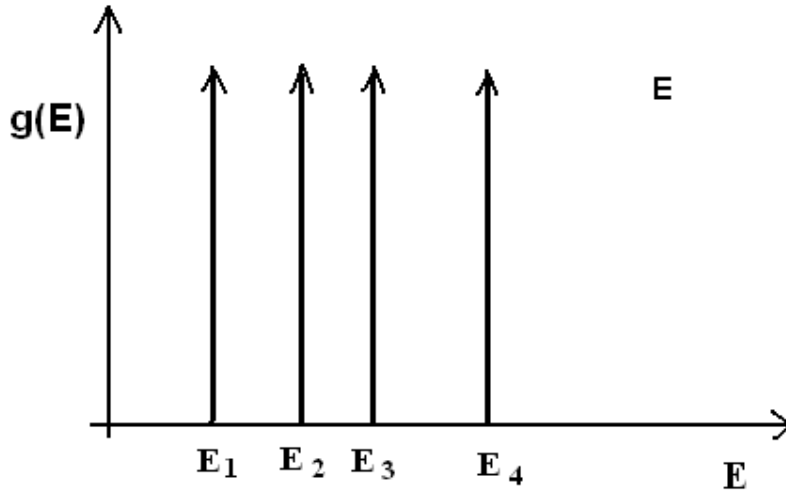
დაბოლოს, განვიხილოთ 0D სისტემა, სადაც ელექტრონთა მოძრაობა შეზღუდულია სამივე მიმართულებით, ასეთ სისტემებს კვანტური წერტილები ეწოდებათ. ზემოთ განხილულის მსგავსად რადგან მუხტის მატარებლები დატყვევებული არიან სამივე მიმართულებით, ენერგია ყველა მიმართულებით დაკვანტულია:

$$E(n, m, l) = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left[\left(\frac{\pi}{d}\right)^2 m^2 + \left(\frac{\pi}{w}\right)^2 n^2 + \left(\frac{\pi}{h}\right)^2 l^2 \right] \quad (13)$$

სადაც d, w, h კვანტური წერტილის ზომებია, $n, m, l = 1, 2, 3, \dots$ ქვეზონის ნომრებია. (13) აჩვენებს რომ კვანტურ წერტილში ელექტრონები დებულობენ ენერგიის მხოლოდ და მხოლოდ დისკრეტულ მნიშვნელობებს, ანუ გაგვაჩნია

მდგომარეობათა სიმკვრივის მკვეთრი პიკები, რომლებიც n, m, l ფიქსირებული მნიშვნელობებისათვის შეგვიძლია აღვწეროთ დირაკის დელტა ფუნქციით:

$$g(E)_{OD} = \frac{2}{hdw} \sum_n \sum_m \sum_l \delta(E - E_{n,m,l}) \quad (14)$$



ნახ. 13 კვანტური წერტილის მდგომარეობათა სიმკვრივის დამოკიდებულება ენერგიაზე

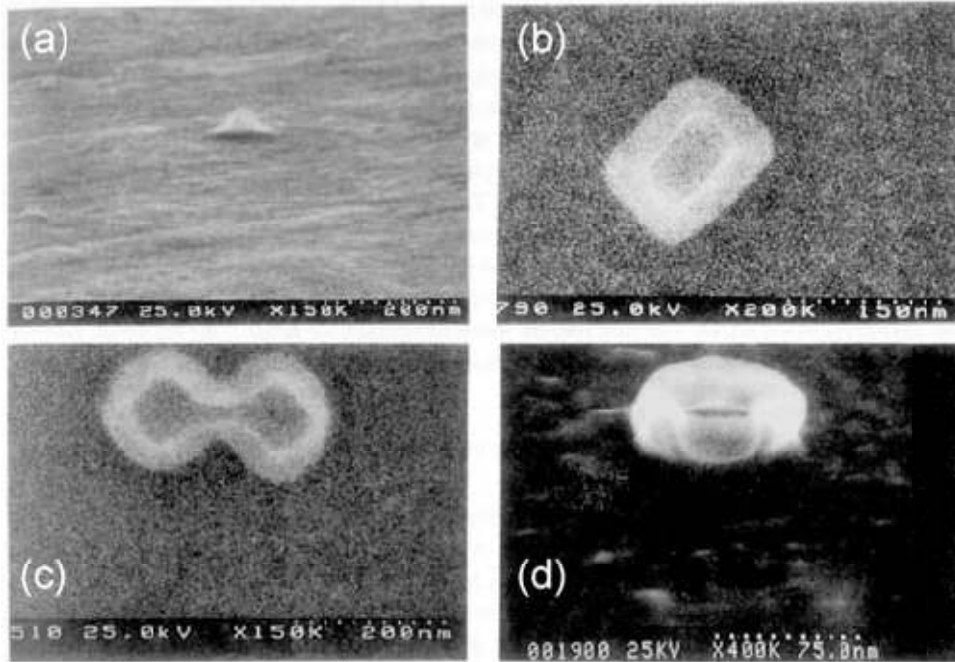
ნახევარგამტარული კვანტური წერტილები, რომლებსაც ხშირად ხელოვნურ ატომებსაც უწოდებენ წარმოადგენენ 0 განზომილებიან ნახევარგამტარულ ნანოსისტემებს, სადაც ერთი ტიპის ნახევარგამტარი, რომლის აკრძალული ზონა მცირეა, “ჩადგმულია” უფრო ფართო აკრძალული ზონის მქონე ნახევარგამტარში ან ნაწილობრივ იმყოფება ვაკუუმში. სხვადასხვა ნახევარგამტართა სავალენტო და გამტარებლობის ზონათა სხვაობის გამო კვანტური წერტილები წარმოადგენენ კვანტურ ორმოებს მათში მყოფი ელექტრონებისა და ხვრელებისათვის და სწორედ ამ პოტენციალური ორმოს არსებობის შედეგია კვანტური წერტილების დისკრეტული ენერგეტიკული სპექტრი და მდგომარეობათა სიმკვრივის ხაზოვანი სახე (ნახ. 1.1)

კვანტური დატყვევების ეფექტი კვანტურ წერტილებში კვანტური მექანიკის გამოვლენის ერთ-ერთი თვალსაჩინო მაგალითია, ამიტომაც თეორიული თვალსაზრისით კვანტური წერტილების კვლევა კვანტური მექანიკის ფუნდამენტალური საკითხების შესწავლის უნიკალურ შესაძლებლობებს ქმნის.

კვანტური წერტილების ზომა შეიძლება რამდენიმე ნანომეტრიდან რამდენიმე ასეულ ნანომეტრამდე იცვლებოდეს, ხოლო ელექტრონების რაოდენობა კვანტურ წერტილებში - ერთიდან რამდენიმე ათასამდე. თავიანთი ზომებისა და თვისებების გამო შეიძლება ითქვას, რომ კვანტური წერტილები წარმოადგენენ შუალედურ სისტემებს ატომებსა და მაკროსკოპულ ნიმუშებს შორის.

არსებობენ როგორც სხვადასხვა ნივთიერებისაგან შედგენილი, ასევე სხვადასხვა გეომეტრიული ზომის და ფორმის კვანტური წერტილები [34-37].

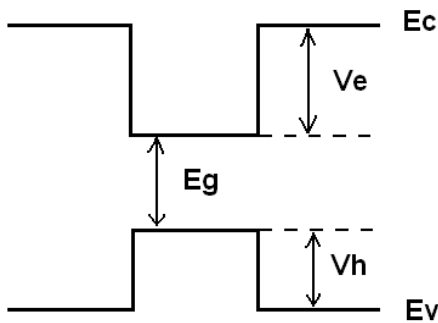
ნახ. 14-ზე წარმოდგენილია რამდენიმე სხვადასხვა ფორმის კვანტური წერტილის გამოსახულება



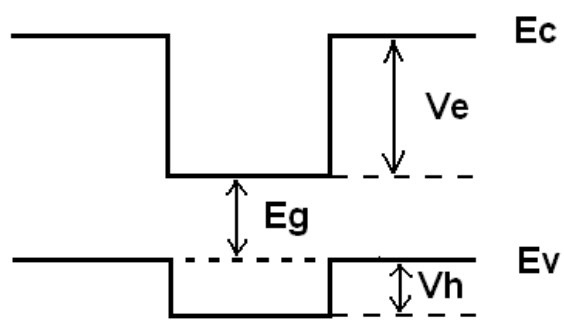
ნახ. 14 სხვადასხვა ფორმის კვანტური წერტილები [38].

არსებობს კვანტურ წერტილთა ზონების ორი ტიპის განლაგება - I და II ტიპი [39] ის. ნახ. 15. I ტიპის ზონათა განლაგებისას შემთხვევაში ელექტრონები და ხვრელები სივრცის ერთსა და იმავე უბანში იმყოფებიან. II ტიპის ზონათა განლაგებისას - ელექტრონები და ხვრელები სივრცულად განცალკევებულ უბნებში არიან ლოკალიზებული.

წინამდებარე ნაშრომში ყველა განხილული კვანტური სისტემა I ტიპისაა ზონათა განლაგების მიხედვით.



ნახ. 15 ა)



ნახ. 15 ბ)

ნახ. 1.5 ა) – I ტიპის ბ) – II ტიპის ზონათა განლაგება კვანტურ წერტილებში. E_g – აკრძალული ზონა, E_c – გამტარებლობის ზონა, E_v – სავალენტო ზონა, V_e – გამტარებლობის ზონათა შორის სხვაობა, V_h – სავალენტო ზონათა შორის სხვაობა

იმისათვის, რომ თეორიულად შესწავლილი იქნას კვანტური წერტილები მიმართავენ სხვადასხვა მიახლოებით მეთოდებს რადგან კვანტური წერტილები წარმოადგენენ მრავალი ნაწილაკისაგან შედგენილ რთულ სისტემებს, ამას ემატება კვანტური წერტილების გეომეტრიული ფორმის და სასაზღვრო პირობების გამო გამოწვეული სირთულეები.

ზოგადად, კვანტური წერტილების მოდელირებას ახდენენ შემდეგი ეტაპების მიხედვით:

ა) სტრუქტურის მოდელირება ზომის, ფორმისა და შემადგენლობის მიხედვით

ბ) ელექტრონებისა და ხვრელების ერთნაწილაკოვანი თვისებების პოვნა ხორციელდება შრედინგერის განტოლების ამოხსნით – ეფექტური მასის, k, p , ძლიერი ბმის ან ფსევდოპოტენციალის გამოყენებით.

გ) ხდება ერთნაწილაკოვან მოდელზე ნაწილაკთა შორის კულონური ურთიერთქმედების დამატება შემფოთების თეორიის, თვითშეთანხმებული ველის ან ეგრედწოდებული ურთიერთქმედების სრული ამოხსნის მიხედვით.

სრული ამოხსნა ხორციელდება კვანტური მონტეკარლოს გზით ან კონფიგურაციული ურთიერთქმედების გამოყენებით [40].

თუმცა k, p , ძლიერი ბმის და ფსევდოპოტენციალის მიახლოებები უფრო ზუსტად აღწერენ ფიზიკურ რეალობას ისინი მოითხოვენ გაცილებით მეტ კომპიუტერულ რესურსებს.

რაც შეეხება წინამდებარე ნაშრომს აქ კვანტური წერტილების თეორიული კვლევისას გამოიყენება ერთნაწილაკობრივი შრედინგერის განტოლება სასრული პოტენციალისა და კოორდინატზე დამოკიდებული ეფექტური მასით [26-28,41]. შრედინგერის განტოლების ამოხსნა ხორციელდება სასრულ ელემენტთა მეთოდით, რომელიც შესასწავლი სისტემის სიმეტრიის შესაბამისად წარმოადგენილია ერთ და ორ განზომილებაში. განტოლების განზომილების შემცირების შედეგად მკვეთრად მცირდება მისი ამოხსნისათვის საჭირო კომპიუტერული რესურსები.

ცნობილია, რომ კვანტური წერტილებისათვის აკრძალული ზონის სიგანე დამოკიდებულია კვანტური წერტილების ზომაზე ეს უკანასკნელი იზრდება კვანტური წერტილის ზომის შემცირებით. თუმცა თეორიული კვლევის შედეგები, რომლებიც მიიღება ეფექტური მასის მიახლოებისა და სასრული სიმაღლის მქონე პოტენციალური ბარიერის გამოყენებით წინამდებარე ნაშრომში განხილული ზომის კვანტური წერტილებისათვის კარგ თანხვედრაშია შესაბამის ექსპერიმენტალურ მონაცემებთან [42-44].

აღსანიშნავია, რომ ეფექტური მასის მიახლოება ვერ იძლევა ზუსტ შედეგებს ძალიან მცირე კვანტური წერტილებისათვის, თუმცა ნაშრომში გამოკვლეული ზომის კვანტური წერტილებისათვის აღნიშნული მიახლოება კარგი სიზუსტით გამოირჩევა.

ასე რომ ნაშრომში გამოკვლეული სისტემებისათვის, ისეთი მარტივი მეთოდის გამოყენება, როგორცაა ეფექტური მასის მიახლოება წარმოადგენს, საკმაოდ ზუსტი შედეგების მიღების საშუალებას გვაძლევს, რაც ზოგადად უფრო კომპლექსური მიახლოებების გამოყენებით მიიღწევა.

ლიტერატურაში ვხვდებით კვანტური წერტილების თეორიული კვლევების სხვა მოდელს, როცა დამატყვევებელი პოტენციალი წარმოადგენს სხვადასხვა პოტენციალების ჯამს. მაგალითად, ცილინდრული სიმეტრიის მქონე 3 განზომილებიანი ელექტრონთა სისტემის - კვანტური წერტილის პოტენციალი

შეიძლება მოდელირებული იქნას როგორც ორი: გასწვრივი და განივი პოტენციალის ჯამი: $U(\vec{r}) = U_{\perp}(x, y) + U_{\parallel}(z)$. შედეგად ელექტრონის ტალღური ფუნქცია იქნება ორი: განივი და გრძივი ტალღური ფუნქციის ნამრავლი

$$\Psi(\vec{r}) = \Psi_{\perp}(x, y) \cdot \Psi_{\parallel}(z)$$

$U_{\perp}(x, y)$ და $U_{\parallel}(z)$ პოტენციალებს გარკვეული კონკრეტული სახე გააჩნიათ [45].

როგორც უკვე აღვნიშნეთ ნანოსტრუქტურების მცირე ზომების გამო მათი უშუალო შესწავლა ხდება კვანტური მექანიკის გამოყენებით. მართალია ნანოსისტემები მცირე ზომისანი არიან, მაგრამ მათი სიმცირე ფარდობითია. თუ რამდენად მცირედ შეგვიძლია განვიხილოთ ესა თუ ის ნანოსისტემა დამოკიდებულია განსახლიველ კონტექსტზე. ნანოსტრუქტურების შესწავლისას მნიშვნელოვან როლს თამაშობს მაკროსკოპული სისტემის ექსიტონის ბორის რადიუსი. თუ კვანტური სისტემის ზომა ნაკლებია ექსიტონის ბორის რადიუსზე, მაშინ სისტემაში დატყვევებული ნაწილაკების ელექტრონულ მდგომარეობებს მნიშვნელოვნად განაპირობებს დამატყვევებელი პოტენციალი, ხოლო ნაწილაკთა კულონური ურთიერთქმედება ნაკლებ მნიშვნელოვან როლს თამაშობს. წინამდებარე ნაშრომში შესწავლილი კვანტური წერტილებისათვის კვანტური ეფექტი არსებითად განაპირობებს სისტემის ელექტრონულ მდგომარეობებს ხოლო ნაწილაკთა კულონური ურთიერთქმედება თავისი სიმცირის გამო უგულვებელყოფილია. ნაშრომის ბოლო თავში ახალი ტიპის სისტემისათვის როგორსაც დახრილი კვანტური წერტილი კვანტური ორმო (QDQW) წარმოადგენს შეფასებულია ნაწილაკთა კულონური ურთიერთქმედება, რომლის ეფექტიც ერთი რიგით მცირე აღმოჩნდა დამატყვევებელი პოტენციალთან შედარებით.

წინამდებარე ნაშრომში თეორიულად გამოკვლეულია შემდეგი სახის ნახევარგამტარული კვანტური წერტილები: CdSe/ZnSe, InAs/GaAs და HgS/CdS რომელთა მიღების ექსპერიმენტალური ხერხები დღეისათვის კარგადაა დამუშავებული [36, 46-54]. დღეისათვის კარგადაა შესწავლილი აღნიშნული ნახევარგამტარული კვანტური წერტილების სხვადასხვა სტრუქტურული, ელექტრონული, ოპტიკური და სხვა თვისებები.

ვინაიდან კვანტურ წერტილებში კვანტურ ეფექტებთან გვაქვს საქმე, ცხადია კვანტური წერტილების თვისებები ძლიერად არის დამოკიდებული მათ ზომებზე. აქამდე შესწავლილ სხვადასხვა შემადგენლობის, ზომის და ფორმის კვანტური წერტილების შორის ერთ-ერთი ყველაზე კარგად გამოკვლეულ სისტემას შეადგენენ სფერული კვანტური წერტილები უსასრულო პოტენციალის შემთხვევაში [55]. ნაჩვენებია, რომ ასეთი სისტემის ამონახსნები ანუ ნაწილაკთა ენერგეტიკული დონეები ბესელის სფერული ფუნქციების ნულების [56] პროპორციული არიან, ანუ დონის ნომრის ზრდასთან ერთად კვადრატულად იზრდებიან. იგივე ენერგიები სისტემის რადიუსის კვადრატის უკუპროპორციულად მცირდებიან. ასევე კარგადაა შესწავლილი სფერული კვანტური წერტილები სასრული პოტენციალის და კოორდინატზე დამოკიდებული ეფექტური მასის გათვალისწინებით [57]. გარდა უმარტივესი სფერული სიმეტრიის მქონე კვანტური წერტილებისა ასევე შესწავლილია დისკის, ლინზის, კონუსის და პირამიდის ფორმის კვანტური წერტილები [58-61].

კვანტური წერტილებში დატყვევებულ ნაწილაკთა ენერგიის დამოკიდებულება მათ ზომებზე ზოგადი ფიზიკური მოსახრებითაც გასაგებია, ვინაიდან რაც მცირეა ნაწილაკთა ლოკალიზაციის არე მით მეტია მათი ენერგია და პირიქით, ეს უშუალოდ გამომდინარეობს ჰაიზენბერგის განუსაზღვრელობის პრინციპიდან იმპულსა და კოორდინატს შორის.

გარდა გეომეტრიული ზომებისა კვანტური წერტილების თვისებები ასევე დამოკიდებულია მათ გეომეტრიულ ფორმებზეც. [62-63]-ში შესწავლილია სხვადასხვა ფორმის შესაბამისად: ცილინდრული, ელიფსური და კონუსური ერთის მხრივ და ცილინდრული, ელიფსური, ელიფსური ლინზის, წაკვეთილი სფერული და კონუსური ფორმის კვანტური წერტილები – მეორეს მხრივ. მიღებულია და შედარებულია ენერგეტიკული სპექტრის: ძირითადი $l=0$ და ალგუნებული $l=1$ (სადაც l - ორბიტალური კვანტური რიცხვია) დონის დამოკიდებულება კვანტური წერტილების მოცულობაზე სამივე განხილული გეომეტრიული ფორმის შემთხვევაში. კვლევები ჩატარებულია ისეთნაირად, რომ თითოეული კვანტური წერტილის ფუძის რადიუსები ერთმანეთის ტოლია ისევე როგორც მათი სიმაღლეები. აღნიშნული კონფიგურაციისთვის (ცილინდრული, ელიფსური, ელიფსური ლინზის, წაკვეთილი სფერული და კონუსური ფორმის კვანტური წერტილები) კვანტური წერტილის ყოველი ფიქსირებული მოცულობისათვის ენერგეტიკული ზრდის მიხედვით (მცირედან დიდისკენ) კვანტური წერტილების ფორმების მიხედვით შემდგენიარად არიან განლაგებული: კონუსური, წაკვეთილი სფერული, ელიფსური ლინზის და დისკის ფორმის.

[64]-ს ავტორთა მიერ გამოკვლეულია ცილინდრული, კონუსური და ლინზის ფორმის კვანტური წერტილების მდგომარეობების საკუთარი მნიშვნელობები და ფუნქციები. თუმცა გამოკვლეულ სხვადასხვა ზომის კვანტურ წერტილებს განსხვავებული მოცულობები გააჩნიათ ამიტომ ვერ ვისაუბრებთ კვანტური წერტილების გეომეტრიული ფორმის გავლენაზე, რადგანაც როგორც ზევით უკვე აღვნიშნეთ კვანტური წერტილების თვისებები ძლიერად არის დამოკიდებული მათ ზომაზე.

ინტერესს იმსახურებს [65], რადგანაც აქ ნახვენებია გზა, რომლის მიხედვითაც შესაძლებელია ენერგეტიკული სპექტრის ანალიტიკური გზით მიღება, ნახვენებია რომ ნაწილაკთა ენერგიას ცილინდრის პარამეტრებზე ფესვური ხასიათის დამოკიდებულება გააჩნია თუმცა უნდა აღვნიშნოთ, რომ ამ ნაშრომში გამოყენებულია უსასრულო პოტენციალი რაც არაფიზიკურია შედეგად ასეთი მიახლოება ნაკლებად ზუსტი შედეგების მომცემია განსაკუთრებით ეს ითქმის მცირე ზომის კვანტური წერტილებზე.

საინტერესოა შრომაა შესრულებული [59]-ში, სადაც შესწავლილია ცილინდრული და კონუსური კვანტური წერტილების ელექტრონული მდგომარეობები და ასევე შესწავლილია დამასველებელი ფენის (wetting layer) გავლენა ამ მდგომარეობებზე. ნახვენებია რომ დამასველებელი ფენა ძლიერად მოქმედებს კვანტური წერტილების ელექტრონულ მდგომარეობებზე. აქ შესწავლილ ცილინდრულ და კონუსურ და ასევე წაკვეთილი კონუსურ და პირამიდულ კვანტური წერტილებს სხვადასხვა მოცულობები გააჩნიათ ამიტომ ელექტრონულ მდგომარეობათა განსხვავება გამოწვეულია კვანტურ წერტილთა არა მხოლოდ სხვადასხვა გეომეტრიული ფორმის არამედ სხვადასხვა მოცულობების ქონითაც. [66]-ში შესწავლილია CdSe ცილინდრული კვანტური წერტილის ენერგეტიკული დონეების დამოკიდებულება სხვადასხვა ფუძე სიმაღლის ფარდობისას. 5 ნმ ის რადიუსის კვანტური წერტილისათვის ავტორები ცვლიან სიმაღლეს 4 დან 14 ნმ-მდე. წარმოდგენილი უმცირესი ენერგეტიკული დონეების შესაბამისი ენერგია იზრდება სიმაღლის ზრდის მიხედვით, ეს ზრდა თავიდან სწრაფად ხდება ხოლო შემდეგ ნელდება.

გარდა რამოდენიმე უმარტივესი კვანტურ-მექანიკური სისტემისა რომელთა ნაწილი §1.3 ში არის წარმოდგენილი ანალიტიკურად ასევე იხსნება ცილინდრული კვანტური ორმოს შემთხვევაც სასრული პოტენციალის პირობებში ეფექტური მასის კოორდინატზე დამოკიდებულებისას. ამ შემთხვევაში რადიალური

ტალღური ფუნქციები ბესელის პირველი და მეორე რიგის ფუნქციებს წარმოადგენენ, რაც შეეხება ენერგიებს ისინი მიიღებიან სასაზღვრო პირობების შესაბამისი განტოლებების რიცხვითი ამოხსნით [67], თუმცა ზემოთ თქმული შეეხება მხოლოდ ძირითად მდგომარეობას. ხოლო ზოგად შემთხვევაში ამოცანა ანალიტიკურად საერთოდ (არც ტალღური ფუნქციებისათვის) არ იხსნება. რაც შეეხება კონუსური კვანტური ორმოს შემთხვევას (კონუსური კვანტური წერტილი, რომელიც ასევე შესწავლილია წინამდებარე ნაშრომში) მისთვის არც ტალღური ფუნქციები და არც ენერგეტიკული დონეები ანალიზური გზით არ იხსნება.

როგორც ვიცით, სხეულის ხაზოვანი ზომის შემცირებასთან ერთად იზრდება ფარდობა ამ სხეულის ზედაპირის ფართობსა და მოცულობას შორის. ეს კი ნიშნავს, რომ რაც უფრო მცირდება სხეულის ზომა, სხეულის ზედაპირს მით მეტი გავლენა აქვს ამ სხეულის თვისებებზე. ნანონაწილაკებისათვის თავიანთი მცირე ზომიდან გამომდინარე ზედაპირს დიდი მნიშვნელობა ენიჭება, ვინაიდან ნანონაწილაკების შემადგენელი ნაწილაკების დიდი რაოდენობაა მოთავსებული არიან ზედაპირთან უშუალო სიახლოვეში.

საინტერესოა გამოვიკვლიოთ თუ როგორ არის დამოკიდებული კვანტური წერტილების სხვადასხვა თვისებები იდენტური მოცულობისა და განსხვავებული ზედაპირის მქონე კვანტური წერტილებისათვის. ამ მიზნით ნაშრომში შესწავლილია იდენტური მოცულობისა და სხვადასხვა ზედაპირის ფართობის მქონე კვანტური წერტილები კერძოდ კი: სფერული ცილინდრული და კონუსური ფორმისა. ზედაპირის ფართობის მიხედვით ყველაზე მცირე ფართობი სფერულ კვანტურ წერტილს გააჩნია ხოლო უდიდესი – კონუსურ კვანტურ წერტილს.

როგორც ზემოთ იყო არნიშნული კვანტური წერტილების თვისებების ზომაზე დამოკიდებულება საკმაოდ კარგადაა შესწავლილი. საინტერესოა შევისწავლოთ თუ როგორ არის დამოკიდებული კვანტური წერტილების გეომეტრიულ ფორმაზე ენერგეტიკული სპექტრი. კერძოდ ფიქსირებული $l=0$ და $l=1$ ორბიტალური რიცხვებისათვის (ორბიტალური რიცხვის შესახებ ცილინდრული სიმეტრიის შესახებ იხილეთ §1.2-ში) თუ როგორ იცვლება ნაწილაკთა ენერგია მთავარი კვანტური რიცხვის მიხედვით. რადგანაც კვანტური წერტილებში ნაწილაკთა ენერგიები მათ ზომებზე ძლიერ არის დამოკიდებული, ფორმის გავლენის გასარკვევად ვაფიქსირებთ მათ (სხვადასხვა ფორმის კვანტური წერტილების) მოცულობებს.

წინამდებარე ნაშრომში შესწავლილია იდენტური მოცულობის მქონე სფერული, ცილინდრული და კონუსური ფორმის კვანტური წერტილები და შედარებულია მათი ენერგეტიკული სპექტრი.

ასევე საინტერესოა ფიქსირებული მოცულობის მქონე კონუსური კვანტური წერტილის ენერგეტიკული სპექტრის შესწავლა კვანტური წერტილის სხვადასხვა ფუძე-სიმაღლის შეფარდების შემთხვევაში. წინამდებარე ნაშრომში შესწავლილია აღნიშნული შემთხვევა და წარმოდგენილია არამარტო ენერგეტიკული სპექტრი, არამედ შესაბამისი მდგომარეობების ტალღური ფუნქციებიც.

წინამდებარე ნაშრომში აგრეთვე გამოკვლეულია კვანტური წერტილების ზონათაშორისი გადასვლების ოსცილატორული ძალები. დღემდე შესწავლილია ოსცილატორული ძალები სხვადასხვაგვარი კვანტური წერტილებისათვის მაგ. [68-70]. აღსანიშნავია, რომ ზონათაშორისი გადასვლების შესაბამისი ოსცილატორული ძალები კვანტური წერტილებისათვის მათ ენერგეტიკულ სპექტრთან შედარებით ნაკლებად არის შესწავლილი.

§1.2 სასრულ ელემენტთა მეთოდი შრედინგერის განტოლებისთვის

კომპიუტერული რესურსების მკვეთრი ზრდის წყალობით კონდენსირებული გარემოს ფიზიკის პრობლემების კომპიუტერულმა სიმულაციამ ახალი ფუნდამენტური შესაძლებლობები გამოაჩინა აღნიშნული დარგის თეორიული კვლევის თვალსაზრისით. სიმულაცია იძლევა მიღებული ექსპერიმენტალური შედეგების დეტალურ ინტერპრეტაციას და შეუძლია იწინასწარმეტყველოს გარკვეული თვისებები და პროცესები, რომლებიც ამა თუ იმ ექსპერიმენტის ჩატარებისას წარმოიხინდება.

დღესდღეობით შესაძლებელია სხვადასხვა სისტემების ელექტრონული და სტრუქტურული თვისებების გამოკვლევა მხოლოდ თეორიული მიდგომით – შრედინგერის განტოლების ამოხსნით ისე, რომ არ იქნას გამოყენებული არცერთი ემპირიული პარამეტრი [24-25]. ვინაიდან კომპიუტერული რესურსებიც შემოსაზღვრულია, ხოლო ნანოსისტემების კომპიუტერული კვლევა დიდ კომპიუტერულ რესურსებს მოითხოვს მათი შესწავლის სირთულის გამო, რაც დაკავშირებულია იმასთან, რომ ასეთი სისტემები შედგებიან დიდი რაოდენობით ნაწილაკებისაგან და მათი გეომეტრიული ფორმებიც რთულია, ამიტომ ხშირად მიმართავენ სხვადასხვა მიახლოებებს და მეთოდებს.

იმისათვის, რომ კრისტალში მყოფი კვანძოვანი ნაწილაკები – ელექტრონები და ხვრელები განვიხილოთ როგორც “კვანტურად დატყვევებული”, რომელთათვისაც გამოვიყენებთ შრედინგერის ერთნაწილაკობრივ განტოლებას და უგულვებელყოფთ კულონურ ურთიერთქმედებას ნაწილაკებს შორის, სისტემის ზომა მცირე უნდა იყოს ექსიტონის ბორის რადიუსზე ან რაც იგივეა ელექტრონ-ხვრელის დებროილის ტალღის სიგრძეზე ეს ორი ფორმულირება ექვივალენტურია [71]. წინამდებარე ნაშრომში განხილული სისტემები მათი ზომების მიხედვით აკმაყოფილებენ კვანტური დატყვევების პირობებს, ვინაიდან მათი ზომები მცირეა ბორის ექსიტონის რადიუსზე. მაგალითისთვის *InAs* -თვის ექსიტონის ბორის რადიუსი 35 ნმ ის ტოლია [72].

წინამდებარე ნაშრომში გამოყენებულია კოორდინატზე დამოკიდებული ეფექტური მასის მიახლოება [41] და ამოხსნილია შრედინგერის სტაციონალური განტოლება კვანტური წერტილებისათვის მომვლები ტალღური ფუნქციის გამოყენებით.

ნაშრომში განხილულია კვანტური წერტილები, რომლებსაც გააჩნიათ სფერული ან ცილინდრული სიმეტრია, ამიტომ მათი შესწავლისათვის მოსახერხებელია გამოვიყენოთ შრედინგერის განტოლება ჩაწერილი სისტემის სიმეტრიის შესაბამისად სფერულ ან ცილინდრულ კოორდინატებში.

კვანტური მექანიკიდან ცნობილია, რომ ნებისმიერი კვანტური სისტემა შესაძლებელია სრულად აღიწეროს შრედინგერის განტოლებით. ეს უკანასკნელი დროზე დამოუკიდებელ (სტაციონალურ) შემთხვევაში ზოგადი სახით შემდეგნაირად ჩაიწერება:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}) \right] \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r}) \quad (1.1)$$

სადაც \hbar - პლანკის მუდმივაა m - ნაწილაკის მასა, $U(\vec{r})$ - პოტენციალური ფუნქცია, E - ენერგია და $\Psi(\vec{r})$ - ტალღური ფუნქცია. ლაპლასის ოპერატორის სფერულ და ცილინდრულ კოორდინატებში წარმოდგენის შემდეგ [73] (1.1) განტოლება სფერულ კოორდინატებში კუთხური ნაწილის განცალკევების შემდეგ ასე მოიცემა:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} \right) + \left[U(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \right] R = ER \quad (1.2)$$

ხოლო იგივე (1.1) განტოლებას ცილინდრულ კოორდინატებში კუთხური ნაწილის გარეშე შემდეგი სახე აქვს:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right) - \frac{l^2}{r^2} \Phi + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} \right] + U(r, z) \Phi = E \Phi \quad (1.3)$$

(1.2) და (1.3) განტოლებების შესაბამისი სრული ტალღური ფუნქციის მისაღებად საჭიროა (1.2) და (1.3) განტოლების ამონახსნები: R , და Φ გამრავლებული იქნან თავთავიანთ კუთხურ ნაწილებზე: $Y_l^m(\theta, \phi)$ (სფერული ჰარმონიკები) და $e^{il\phi}$ -ზე შესაბამისად, სადაც l ორბიტალური კვანტური რიცხვია. აქვე შევნიშნავთ, რომ l კვანტურ რიცხვს ცილინდრული სიმეტრიის შემთხვევაშიც სფერული შემთხვევის ანალოგიურად ორბიტალურ კვანტურ რიცხვს ვუწოდებთ [74].

(1.2) და (1.3) განტოლების ამოხსნისათვის გამოვიყენებთ სასრულ ელემენტთა მეთოდს (The Finite Element Method). ითვლება, რომ პირველი პუბლიკაცია სასრულ ელემენტთა მეთოდის შესახებ გამოქვეყნებული იყო 1956 წელს [75] ამ მეთოდის განვითარებაში დიდი როლი ითამაშა ბერძენმა მეცნიერმა არგირისმა. დასაწყისში სასრულ ელემენტთა მეთოდი სტრუქტურულ მექანიკაში გამოიყენებოდა. დღეს სასრულ ელემენტთა მეთოდს ძირითადად ინჟინრები მიმართავენ, თუმცა აღნიშნული მეთოდი კვანტური მექანიკის ამოცანების გადაწყვეტისათვისაც გამოიყენება [76-77].

სასრულ ელემენტთა მეთოდის არსის წამოჩინებისათვის განვიხილოთ შრედინგერის განტოლება ჩაწერილი ზოგადი ოპერატორული სახით ჰამილტონის ოპერატორის დაკონკრეტების გარეშე:

$$H\Psi = E\Psi \quad (1.4)$$

(1.4) განტოლების ამოხსნის მიზნით მისი ამონახსენი წარმოვადგინოთ შემდეგი სახით:

$$\Psi = \sum C_j \varphi_j \quad (1.5)$$

სადაც C_j ჯერ უცნობი კოეფიციენტებია ხოლო φ_j - ვგრედ წოდებული ბაზისური ფუნქციებია. φ_j ფუნქციებს ქვევით დავაკონკრეტებთ. (1.5) ამონახსნის (1.4) განტოლებაში ჩასმის შემდეგ ვღებულობთ:

$$H \sum C_j \varphi_j = E \sum C_j \varphi_j \quad (1.6)$$

უკანასკნელ გამოსახულებას φ_i - ზე ვამრავლებთ და ვაინტეგრებთ ამოცანის განსაზღვრის არეზე. აჯამვის და ინტეგრების გადასმის შემდეგ ვღებულობთ:

$$\int \varphi_i H \sum C_j \varphi_j d\Omega = \int \varphi_i E \sum C_j \varphi_j d\Omega \quad (1.7)$$

თუ შემოვიღებთ შემდეგ აღნიშვნებს:

$$\int \varphi_i H \varphi_j d\Omega \equiv H_{ij} \quad (1.8)$$

$$\int \varphi_i \varphi_j d\Omega \equiv S_{ij} \quad (1.9)$$

(1.7) განტოლება შეიძლება ჩაწეროთ მატრიცული განტოლების სახით:

$$H_{ij} C_j = E S_{ij} C_j \quad (1.10)$$

(1.10) განტოლების ამოხსნა ექვივალენტურია (1.4) განტოლების ამოხსნისა. (1.10) განტოლების ამოხსნით ვპოულობთ სისტემის ენერგეტიკულ სპექტრსა და C_j კოეფიციენტების გამოყენებით (1.5) ის მიხედვით ვაგებთ სისტემის მდგომარეობის ფუნქციებს.

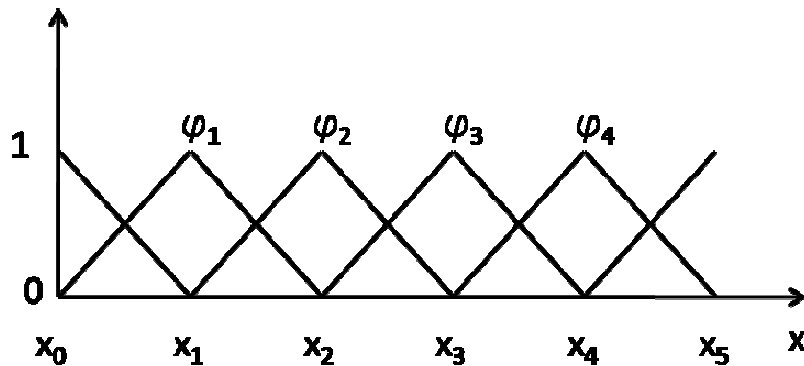
ვინაიდან ჩვენ ვხსნით შრედინგერის განტოლებას არა ანალიზურად, არამედ რიცხვითი მეთოდების გამოყენებით კომპიუტერის მეშვეობით, ამიტომ სისტემის საკუთარ მდგომარეობებს შესაბამისს მთავარ კვანტური რიცხვის შემდეგნაირად ვუსაბამებთ: შრედინგერის განტოლების ამოხსნისას ფიქსირებული l კვანტური

რიცხვისათვის (1.10) განტოლების ამოხსნის შედეგად მიღებულ ენერგიებს (ანუ სისტემის საკუთარ მნიშვნელობებს) ვალაგებთ ზრდის მიხედვით - უმცირესიდან უდიდესისკენ. შედეგად მიღებულ ენერგიათა მიმდევრობის მიხედვით ვალაგებთ ამ ენერგიების მქონე მდგომარეობებს. ანუ უმცირესი ენერგიეს შესაბამისი იქნება ძირითადი მდგომარეობა - მთავარი კვანტური რიცხვით $n=0$ და ასე შემდეგ. ამგვარად ხდება ნებისმიერი მდგომარეობის დანომვრა მთავარი და ორბიტალური კვანტური რიცხვებით.

ჩაწერის სიმარტივისთვის განვიხილავთ ერთ განზომილებიან შრედინგერის განტოლებას და შემდგომ გავაკეთებთ განზოგადებას ორ ან მეტ განზომილებიანი შემთხვევებისათვის. (1.8)-(1.9) მატრიცების გამოსათვლელად საჭიროა ავირჩიოთ φ_i ბაზისური ფუნქციები. გონივრულია, რომ ბაზისური ფუნქციებად ისეთი ფუნქციები შევარჩიოთ, რომლებიც ლოკალიზებული და შემოსაზღვრული იქნებიან. ამით ადვილად ვუზრუნველყოფთ (1.5) ამონახსნის კრებადობას. ერთ-ერთი ასეთი ტიპის ფუნქციაა ეგრედ წოდებული ქუდი ფუნქცია (hat function), რომელიც მათემატიკურად შემდეგნაირად მოიცემა:

$$\left. \begin{aligned} \varphi_j(x) &= \frac{x-x_{j-1}}{x_j-x_{j-1}}, \text{ თუ } x_{j-1} \leq x \leq x_j \\ \varphi_j(x) &= \frac{x_{j+1}-x}{x_{j+1}-x_j}, \text{ თუ } x_j \leq x \leq x_{j+1} \\ \varphi_j(x) &= 0, \text{ თუ } x < x_{j-1} \text{ ან } x > x_{j+1} \end{aligned} \right\} (1.11)$$

(1.11) განსაზღვრავს ერთ განზომილებიან ქუდი ფუნქციებს რომელთა გრაფიკი წარმოდგენილია ნახ. 14



ნახ. 14 ქუდი ფუნქციების გრაფიკი

$x_0, x_1, x_2, x_3 \dots$ კვანძები, ხოლო $(x_0, x_1), (x_2, x_3) \dots$ ელემენტები ეწოდებათ. თითოეული ფუნქცია ნულისაგან განსხვავებულია მხოლოდ ორი ელემენტის ფარგლებში. ქუდი ფუნქციების მაქსიმალური მნიშვნელობა, რომლებსაც ისინი კვანძებში აღწევენ 1-ის ტოლია. მაგალითად ნომერ მესამე ქუდი ფუნქცია ნულისაგან განსხვავებულია (x_2, x_3) და (x_3, x_4) ელემენტზე და მაქსიმალურ მნიშვნელობას - 1 აღწევს x_3 კვანძზე.

(1.8) მატრიცის მატრიცული ელემენტების კინეტიკური წევრს აქვს სახე:

$$\int \varphi_i(x) \frac{d^2 \varphi_j(x)}{dx^2} dx$$

რომელიც ნაწილობრივი ინტეგრების გამოყენების შედეგად შემდეგნაირად წარმოდგება:

$$\int \varphi_i(x) \frac{d^2 \varphi_j(x)}{dx^2} dx = \varphi_i(x) \frac{d\varphi_j(x)}{dx} - \int \frac{d\varphi_j(x)}{dx} \frac{d\varphi_i(x)}{dx} dx \quad (1.12)$$

(1.12) გამოსახულების პირველი წევრი ინტეგრების საზღვრებზე ნულს გვაძლევს, ფიზიკური მოსაზრებიდან გამომდინარე, ვინაიდან კვანტური წერტილებში დატყვევებული ელექტრონების და ხვრელების ტალღური ფუნქცია კვანტური წერტილიდან შორს ნულის ტოლია, ამიტომ (1.12)-ში მარჯვენა მხარის პირველი წევრი საზღვრებზე ჩასმისას ნულს გვაძლევს და ვღებულობთ:

$$\int \varphi_i(x) \frac{d^2 \varphi_j(x)}{dx^2} dx = - \int \frac{d\varphi_j(x)}{dx} \frac{d\varphi_i(x)}{dx} dx \quad (1.13)$$

(1.13) გარდაქმნა საშუალებას გვაძლევს შევამციროთ მეორე რიგის წარმოებული პირველი რიგის წარმოებულამდე და გამოვიყენოთ ქუდი ფუნქციები, რომლებიც წრფივი ფუნქციებია.

ვინაიდან (1.3) შრეინგერის განტოლება 2 განზომილებიანია, ამიტომ მისთვის **H** და **S** მატრიცების გამოსათვლელად საჭიროა ორგანზომილებიანი ქუდი ფუნქციების გამოყენება. ორ და სამ განზომილებიანი ქუდი ფუნქციები მიიღება ერთგანზომილებიანი ქუდი ფუნქციების პირდაპირი გადამრავლებით, მაგალითად თუ $P_i(x)$ და $Q_j(y)$ ერთგანზომილებიანი ქუდი ფუნქციებია მაშინ ორ განზომილებიანი ქუდი ფუნქცია იქნება: $R_{ij}(x, y) \equiv P_i(x) \cdot Q_j(y)$ ანალოგიურად მოვიქცევით სამგანზომილებიან შემთხვევაშიც.

ზემოთ აღნიშნული მეთოდი ერთზე მეტ განზომილებიანი ამოცანის შემთხვევაში მსგავსი იქნება ერთგანზომილებიანისა იმ განსხვავებით, რომ (1.8) და (1.9) ინტეგრალები ორ და მეტ ჯერადი ინტეგრებით შეიცვლება შესაბამისად.

ზემოთ აღწერილი მეთოდი ძალიან მოსახერხებელია სხვადასხვა გეომეტრიული ფორმების მქონე კვანტური წერტილების შესწავლისათვის და ზოგადად შრეინგერის განტოლების ამოსახსნელად ნებისმიერი პოტენციალის, სისტემის ნებისმიერი გეომეტრიისა და ნაწილაკის მასის კოორდინატზე დამოკიდებულების პირობებში. სასრულ ელემენტთა მეთოდის გამოყენება შრეინგერის განტოლებისათვის ერთგანზომილებიანი მართკუთხა პოტენციალური ორმოს შემთხვევა ვრცელი სახით მოცემულია დანართში. დანართში ასევე წარმოდგენილია ცილინდრული და კონუსური კვანტური წერტილების ამოხსნა.

§1.3 ზოგიერთი მარტივი კვანტური სისტემის ენერგეტიკული სპექტრი

კვანტური მექანიკიდან ცნობილია, რომ ნებისმიერი კვანტური სისტემა სრულიად ხასიათდება მდგომარეობის ფუნქციით, რომელიც მიიღება შრედინგერის განტოლების ამოხსნით. კვანტური მექანიკაში ცოტაა ისეთი ამოცანები, რომელთათვისაც შესაძლებელია შრედინგერის განტოლების ამოხსნა ანალიტიკურად. მხოლოდ მარტივი კვანტური ამოცანებისათვისაა შესაძლებელი ანალიტიკური ამონახსნის მიღება. ასეთი სისტემის მაგალითია m მასის ნაწილაკის მოძრაობა უსასრულო სიღრმის მართკუთხა პოტენციალურ ორმოში. ერთგანზომილებიან შემთხვევაში ნაწილაკის ტალღური ფუნქციები და საკუთარი ენერგიები შემდეგნაირად მოიცემა:

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi n x}{a} \quad (1.14)$$

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad (1.15)$$

სადაც a პოტენციური ორმოს სიგანეა, $n = 1, 2, 3, \dots$

მეორე მაგალითი ანალიტიკურად ამოხსნადი შემთხვევისა არის ნაწილაკის მოძრაობა სფერული სიმეტრიის უსასრულო სიღრმის კვანტურ ორმოში. ამ შემთხვევაში სისტემის ტალღური ფუნქციები და ენერგეტიკული სპექტრია [55]:

$$\Psi_{n,l,m}(r) = \sqrt{\frac{2}{a^3}} \frac{j_l(x_n^{(l)} r/a)}{j_{l+1}(x_n^{(l)})} Y_{l,m}(\theta, \phi) \quad (1.16)$$

$$E_{n,l} = \frac{\hbar^2}{2ma^2} (x_n^{(l)})^2 \quad (1.17)$$

სადაც $x_n^{(l)}$ ბესელის სფერული ფუნქციის $j_l(x_n^{(l)}) = 0$ -ის l რიგის ნულებია, a - სფერული ორმოს რადიუსი.

მორიგი მაგალითია უსასრულო ცილინდრული ორმო [78]:

$$\Phi(\rho, z, \varphi) = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{k,n=1}^{\infty} J_m \left(\frac{x_{mn}}{a} \rho \right) \sin \left(\frac{k\pi}{L} z \right) (A_{kmn} \cos m\varphi + B_{kmn} \sin m\varphi) \quad (1.18)$$

$$E_{kmn} = \frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{k\pi}{L} \right)^2 + \frac{x_{mn}^2}{a^2} \right] \quad (1.19)$$

სადაც x_{mn} ცილინდრული ბესელის ფუნქციის ნულებია, L - ცილინდრული ორმოს სიმაღლე, a კი მისი რადიუსი.

არსებობს კიდევ სხვა ამოცანებიც, როდესაც შრედინგერის განტოლება ანალიზურად იხნება, თუმცა მათ აქ არ წარმოვადგენთ.

იმისათვის, რომ დაგვედგინა ჩვენს მიერ გამოყენებული მეთოდის სამართლიანობა და სიზუსტე, იგი შევამოწმეთ ამ პარაგრაფში განხილული სისტემებისათვის. ანუ შევადარეთ მეთოდის გამოყენებით მიღებული შედეგები ანალიზურად მიღებულ შედეგებს. (ვინაიდან აქ წარმოდგენილი კვანტურ მექანიკური ამოცანების ამოხსნები შეესაბამება სისტემაში უსასრულო პოტენციალის არსებობას, მეთოდის გამოყენებისას ჩავსვით ფიზიკურად დიდი პოტენციალი) მეთოდით და ანალიტიკურად მიღებულ შედეგებს შორის განსხვავება (ნაშრომში წარმოდგენილი სიზუსტის შემთხვევაში) ენერგეტიკული სპექტრისათვის 1%-ს არ აღემატება.

თ ა ვ ი მ გ ე მ რ ე

§2.1 სფერული, ცილინდრული და კონუსური კვანტური წერტილები

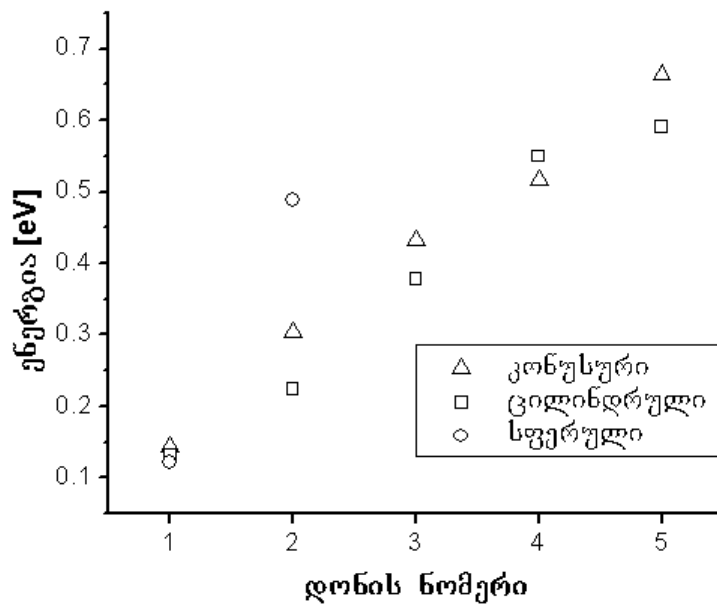
წინამდებარე პარაგრაფში წარმოდგენილია $CdSe/ZnSe$ სფერული, ცილინდრული და კონუსური ფორმის კვანტური წერტილების ენერგეტიკული დონეები. $CdSe/ZnSe$ შექმნის ექსპერიმენტალური მეთოდები კარგადაა განვითარებული [77-80]. შესასწავლი კვანტური წერტილების ზომები შერჩეულია ისეთნაირად, რომ სამივე სხვადასხვა გეომეტრიული ფორმის კვანტურ წერტილს განვითარებული მოცულობა, ამასთან ცილინდრული და კონუსური ფორმის კვანტურ წერტილებს აქვთ ერთი და იგივე სიმაღლე რაც სფერული კვანტური წერტილის დიამეტრის ტოლია და 8 ნმ შეადგენს.

ჩვენ შევისწავლეთ ელექტრონების და ხვრელების ენერგეტიკული სპექტრი ზემოთაღნიშნული კვანტური წერტილებისათვის, ნაშრომში ასევე მოცემულია შესაბამისი კვანტური მდგომარეობების ტალღური ფუნქციები.

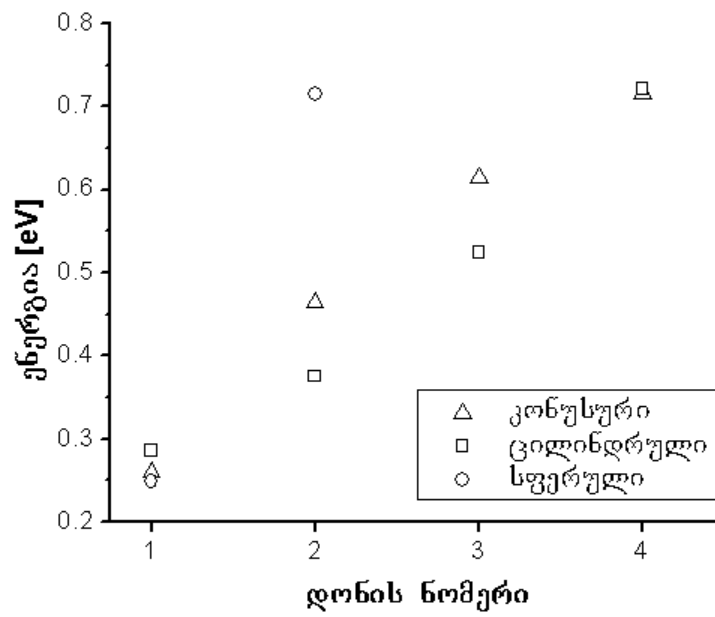
თეორიული გამოთვლებისათვის გამოყენებულია შემდეგი პარამეტრები: $CdSe$ -ისათვის [81] ელექტრონის ეფექტური მასა $m_e^* = 0.13m_e$ ხვრელის ეფექტური მასა $m_h^* = 0.44m_e$, ხოლო $ZnSe$ -ისათვის [82] $m_e^* = 0.21m_e$, $m_h^* = 0.6m_e$, სადაც m_e თავისუფალი ელექტრონის მასაა ($m_e = 9.109 \cdot 10^{-31}kg$). გამტარებლობის ზონათა შორის სხვაობა: $V_e = 0.74eV$, სავალენტო ზონათა შორის სხვაობა $V_h = 0.23eV$.

ნაშრომში ყველგან წარმოდგენილი ხვრელების ენერგიები ათვლილი არიან სავალენტო ზონიდან და დადებით სიდიდეებად არიან მოცემული.

სფერულ კვანტურ წერტილში გამტარებლობის ზონაში გვაქვს ელექტრონთა ორ-ორი ენერგეტიკული დონე როგორც $l=0$ ასევე $l=1$ ორბიტალური კვანტური რიცხვის მიხედვით. რაც შეეხება კონუსურ და ცილინდრულ კვანტურ წერტილებს, მათთვის რამდენიმე ბმული მდგომარეობა არსებობს. როგორც ნახაზებიდან ჩანს ფიქსირებული დონის ნომრის შემთხვევაში მცირე გამონაკლისის გარდა სფერული კვანტური წერტილის შესაბამისი ენერგიები აღემატება კონუსური კვანტური წერტილის ენერგიებს და ეს უკანასკნელი – ცილინდრული კვანტური წერტილის შესაბამის ენერგიებს. ნახ. 2.1-2.2 იდან ჩანს საინტერესო თავისებურება კონუსური და ცილინდრული კვანტური წერტილებისა, რაც იმაში მდგომარეობს, რომ აღნიშნული სისტემების ენერგეტიკული სპექტრი თითქმის წრფივი დამოკიდებულებით იზრდება ენერგეტიკული დონის (მთავარი კვანტური რიცხვის) ზრდის მიხედვით.

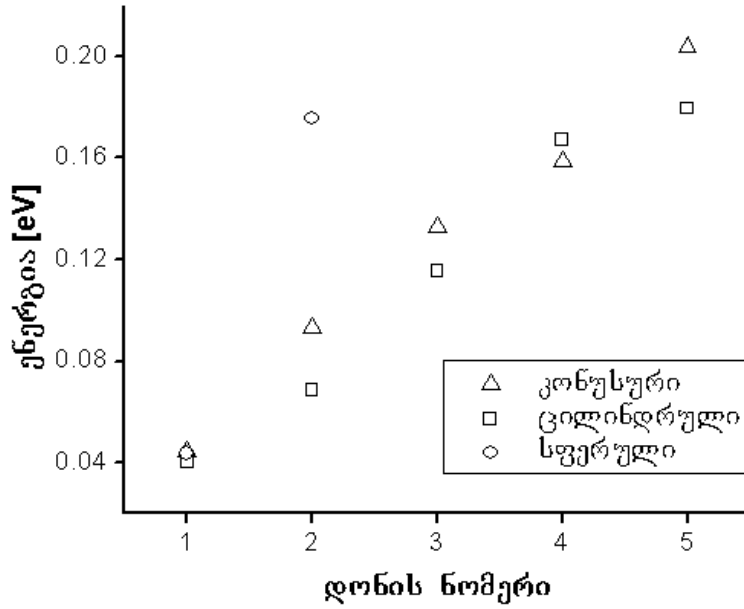


ნახ. 2.1 ა)

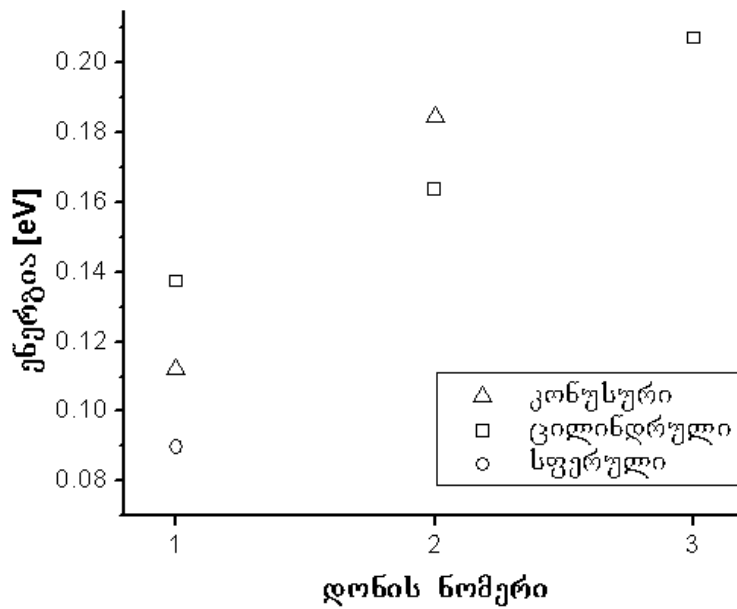


ნახ. 2.1 ბ)

ნახ. 2.1 სფერული ცილინდრული და კონუსური კვანტური წერტილების ელექტრონთა ენერგეტიკული სპექტრი ორბიტალური კვანტური რიცხვით ა) $l=0$ ბ) $l=1$



ნახ. 22 ა)



ნახ. 22 ბ)

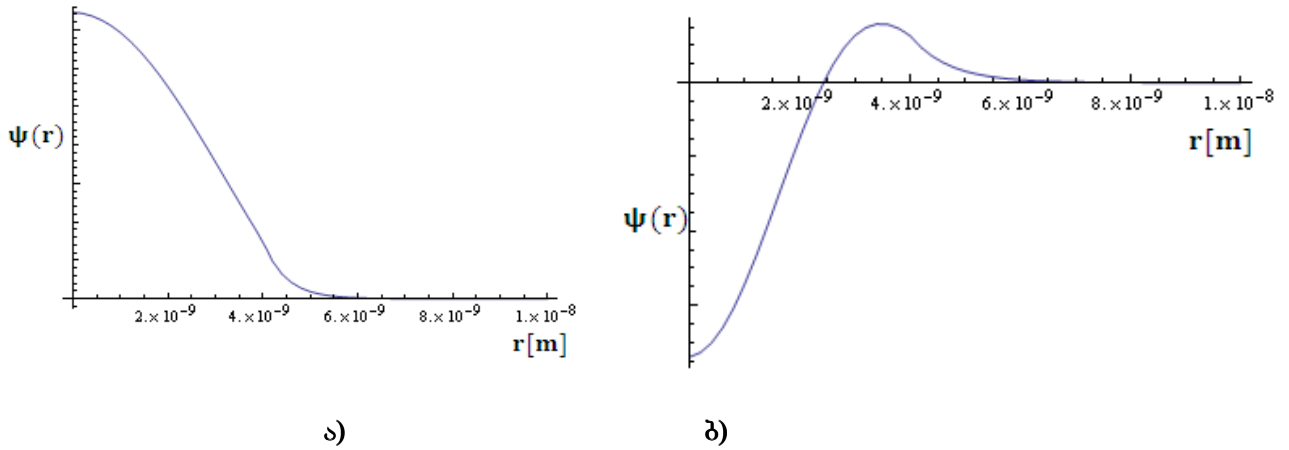
ნახ. 22 სფერული ცილინდრული და კონუსური კვანტური წერტილების ხერხეთა ენერგეტიკული სპექტრი ორბიტალური კვანტური რიცხვით ა) $l = 0$ ბ) $l = 1$

იგივე ითქმის ხერხეთა ენერგეტიკულ დონეებთან დაკავშირებითაც. აღსანიშნავია, რომ კვანტური წერტილების სხვადასხვა გეომეტრიული ფორმის მიუხედავად, სამივე ტიპის კვანტურ წერტილში უმცირესი დონის შესაბამისი

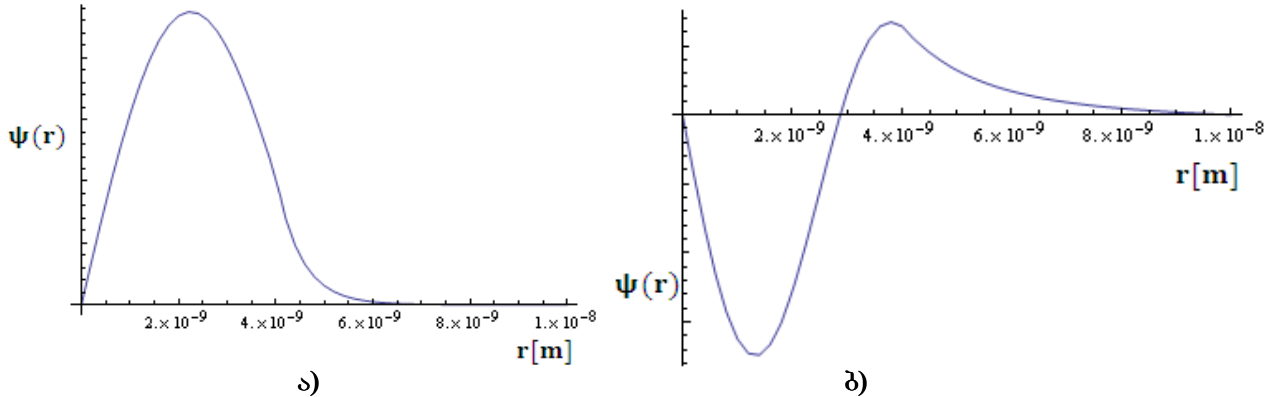
ენერგია თითქმის იგივეა. რაც გვაძლევს საფუძველს დავასკვნათ, რომ კვანტური წერტილის უმდაბლესი ენერგეტიკული დონეები მცირედად არიან დამოკიდებული კვანტური წერტილის ფორმაზე. მაგრამ ცხადია რომ დამოკიდებული არიან კვანტური წერტილის მოცულობაზე.

§2.2 სფერული კვანტური წერტილების ტალღური ფუნქციები

ნახ. 2.3-2.4 წარმოდგენილია სფერული კვანტური წერტილების კვანტური მდგომარეობების რადიალური ტალღური ფუნქციები შესაბამისად $l=0$ და $l=1$ ორბიტალური კვანტური რიცხვებისათვის (წარმოდგენილ ნახაზებზე მოცემულია დაუნორმირებული ტალღური ფუნქციები).



ნახ. 2.3 სფერული კვანტური წერტილის ელექტრონის ტალღური ფუნქციები ორბიტალური კვანტური რიცხვისთვის $l=0$
 ა) მთავარი კვანტური რიცხვით $n=1$, ბ) $n=2$

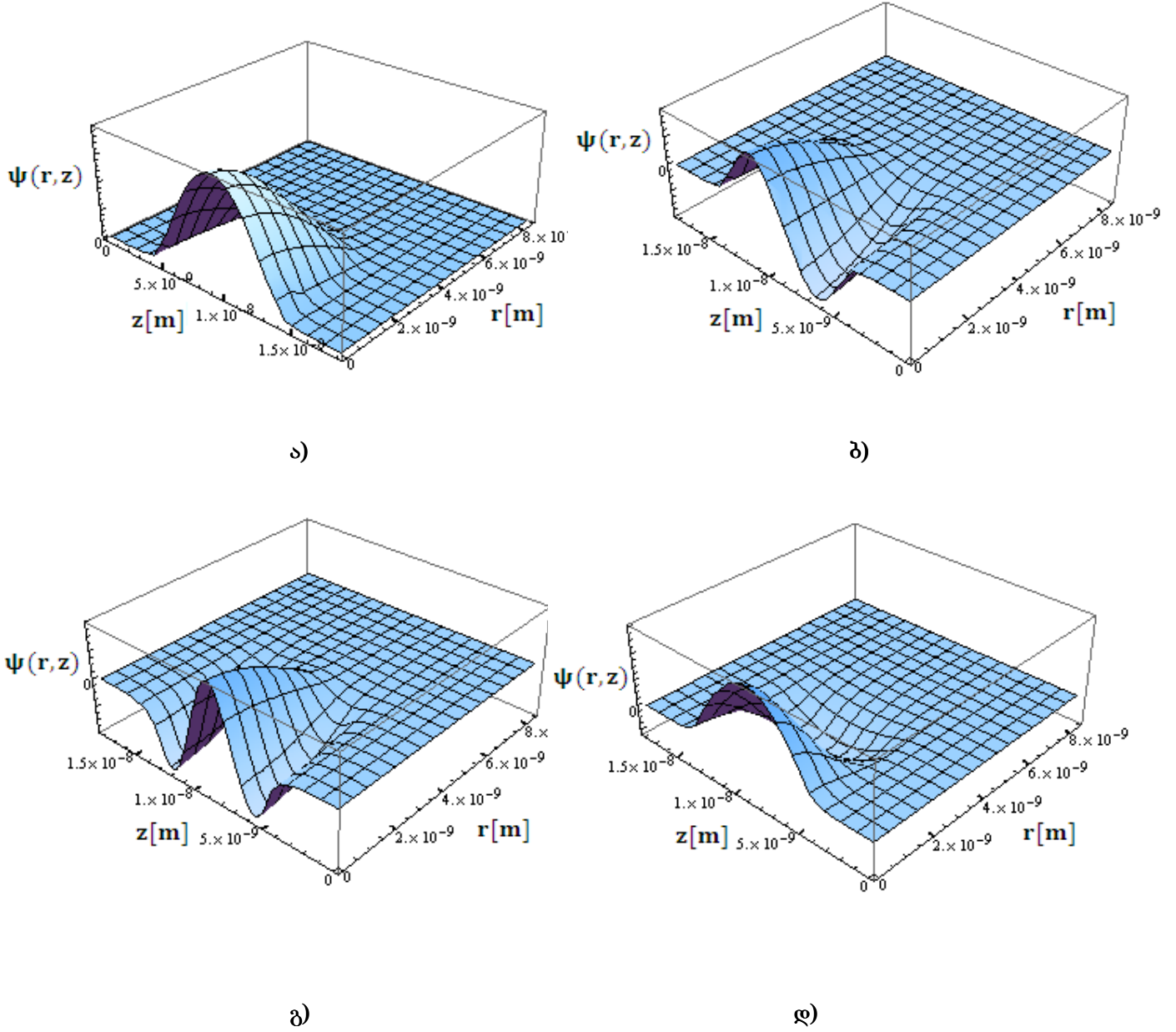


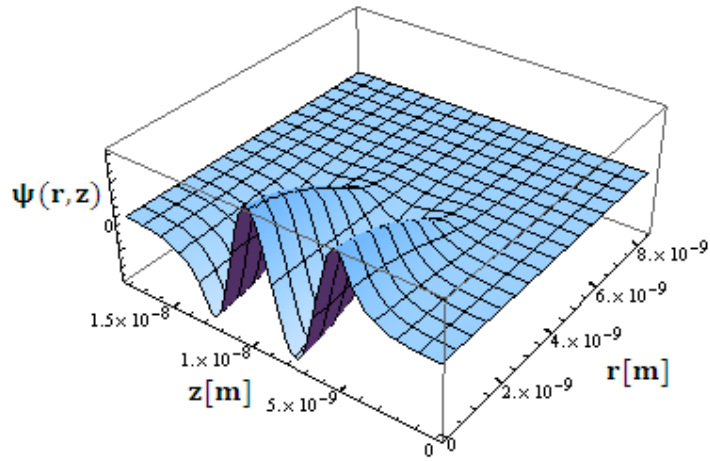
ნახ. 2.4 სფერული კვანტური წერტილის ელექტრონის ტალღური ფუნქციები ორბიტალური კვანტური რიცხვისთვის $l=1$
 ა) მთავარი კვანტური რიცხვით $n=1$, ბ) $n=2$

როგორც ზემოთ წარმოდგენილი ნახაზებიდან ჩანს ელექტრონების განაწილების ალბათობა სფერულ კვანტურ წერტილში ორბიტალური რიცხვით $l=0$ მაქსიმალურია კვანტური წერტილის გეომეტრიულ ცენტრში, ხოლო $l=1$ თვის ელექტრონის აღმოჩენის ალბათობა კვანტური წერტილის ცენტრში ნულის ტოლია და იგი თავის მაქსიმალურ მნიშვნელობას ცენტრიდან დაახლოებით 2 ნმ ის მანძილზე აღწევს. ნახაზებიდან ასევე შეგვიძლია დავასკვნათ, რომ დაბალი

§2.3 ცილინდრული კვანტური წერტილების ტალღური ფუნქციები

ნახ. 2.6 ზე წარმოდგენილია $l=0$ ორბიტალური კვანტური რიცხვის შესაბამისი ცილინდრული კვანტური წერტილების ტალღური ფუნქციები.

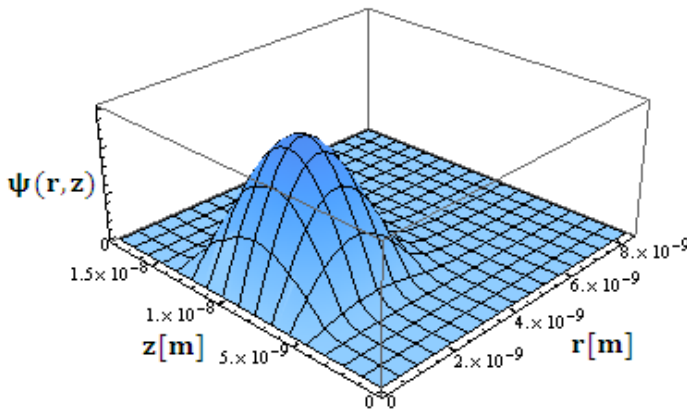




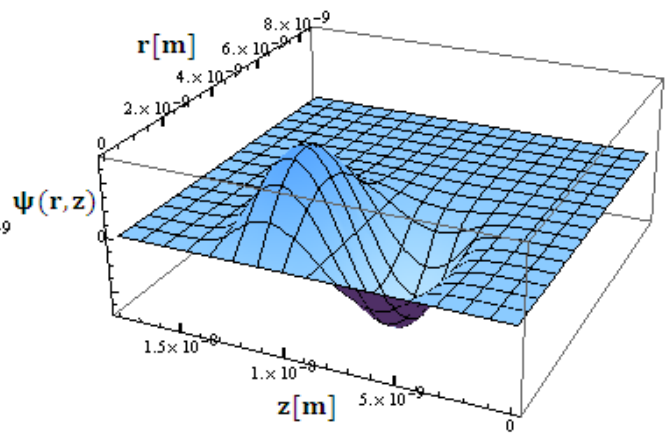
ე)

ნახ. 2.6 ცილინდრიული კვანტური წერტილის ელექტრონის ტალღური ფუნქციები $l = 0$ ორბიტალური კვანტური რიცხვით და n მთავარი კვანტური რიცხვებით: ა) $n = 1$ ბ) $n = 2$ გ) $n = 3$ დ) $n = 4$ ე) $n = 5$

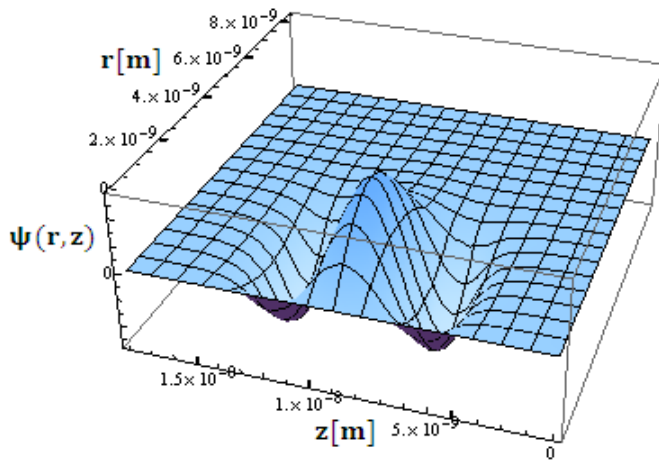
ნახ. 2.7 ზე წარმოდგენილია ორბიტალური კვანტური რიცხვის $l = 1$ -ის შესაბამისი ცილინდრული კვანტური წერტილების ტალღური ფუნქციები.



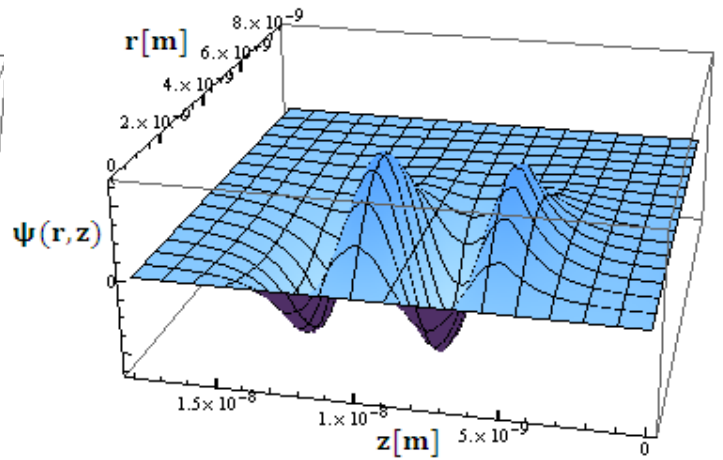
ა)



ბ)



ა) $n = 1$



ბ) $n = 2$

ნახ. 2.7 ცილინდრიული კვანტური წერტილის ელექტრონის ტალღური ფუნქციები $l = 1$ ორბიტალური კვანტური რიცხვით და n მთავარი კვანტური რიცხვებით: ა) $n = 1$ ბ) $n = 2$ გ) $n = 3$ დ) $n = 4$

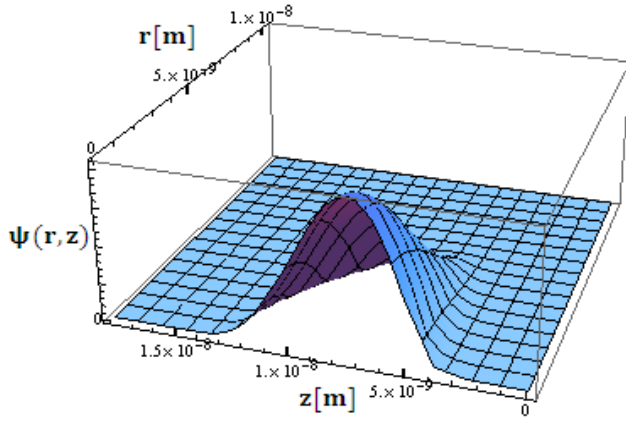
როგორც ნახ. 2.6-ზე ვხედავთ, პირველი სამი ენერგეტიკული დონის ტალღურ ფუნქციებს, $l = 0$ ორბიტალური კვანტური რიცხვისათვის გააჩნიათ ერთი პიკი r ღერძის გასწვრივ ხოლო z ღერძის (კვანტური წერტილის ღერძი) გასწვრივ პიკების რაოდენობა მთავარი კვანტური რიცხვის ტოლია. $l = 0$ ის შესაბამის რიგით მეოთხე ტალღური ფუნქციას კი r ღერძის გასწვრივ 2 პიკი აქვს და z ღერძის გასწვრივ 1 პიკი. ვინაიდან ერთი ღერძის გასწვრივ ტალღურ ფუნქციათა ფიქსირებული პიკების რაოდენობის შემთხვევაში მეორე ღერძის გასწვრივ პიკების მეტ რაოდენობას მეტი ენერგია შეესაბამება, ამიტომ შეგვიძლია დავასკვნათ, რომ დაბალი ენერგიების შემთხვევაში ელექტრონის ტალღურ ფუნქციას ურჩევნია მეტად დაიკვანტოს z ღერძის გასწვრივ ვიდრე რადიალური მიმართულებით. $l = 1$ ორბიტალური რიცხვის შემთხვევაში არსებული კვანტური მდგომარეობების ტალღურ ფუნქციებს გააჩნიათ თითო პიკი რადიალური მიმართულებით, ხოლო კვანტური წერტილის ღერძის გასწვრივ პიკთა რაოდენობა მთავარი კვანტური რიცხვის ტოლია.

ნაშრომის ნახაზებით გადატვირთვის თავიდან აცილების მიზნით ხვრელების შესაბამის ტალღურ ფუნქციებს აღარ წარმოვადგენთ, ვინაიდან მათი ტალღური ფუნქციებიც ნახ. 2.6-2.7 წარმოდგენილი ელექტრონთა ტალღური ფუნქციების ანალოგიური კანონზომიერებებით ხასიათდებიან (პიკების განლაგება მთავარი და ორბიტალური რიცხვების მიხედვით).

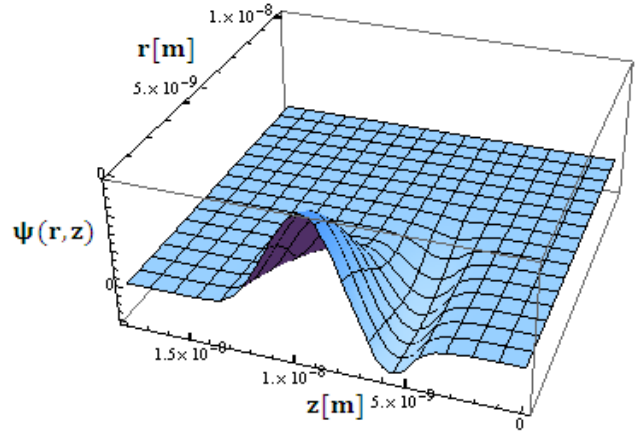
ზემოთ წარმოდგენილ ნახაზებიდან კარგათ ჩანს, რომ ნაწილაკების ტალღური ფუნქციები სიმეტრიულია ცილინდრის გეომეტრიული ცენტრის მიმართ ცილინდრის ღერძის გასწვრივ, ეს ფაქტი ცილინდრის სიმეტრიულობიდან გამომდინარე ფიზიკური შედეგია.

§2.4 კონუსური კვანტური წერტილების ტალღური ფუნქციები

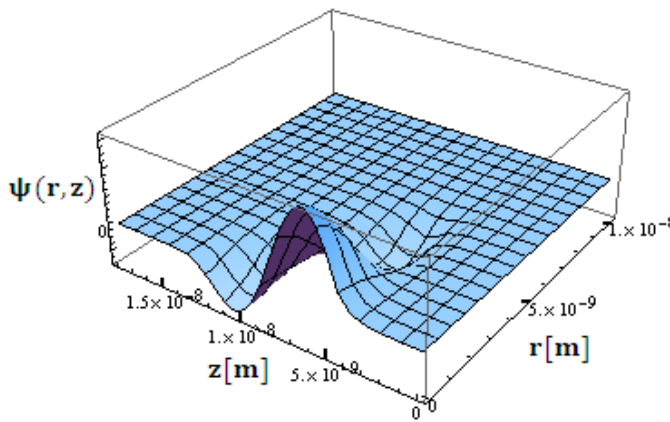
ნახ. 2.8-ზე წარმოდგენილია კონუსური კვანტური წერტილების ტალღური ფუნქციები $l = 0$ ორბიტალური კვანტური რიცხვისათვის



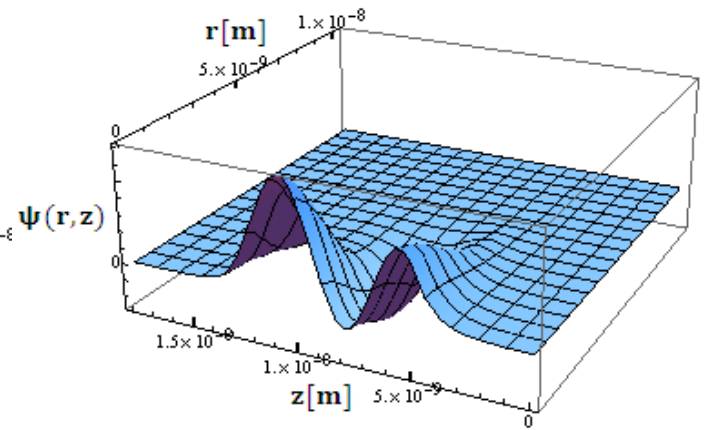
ა)



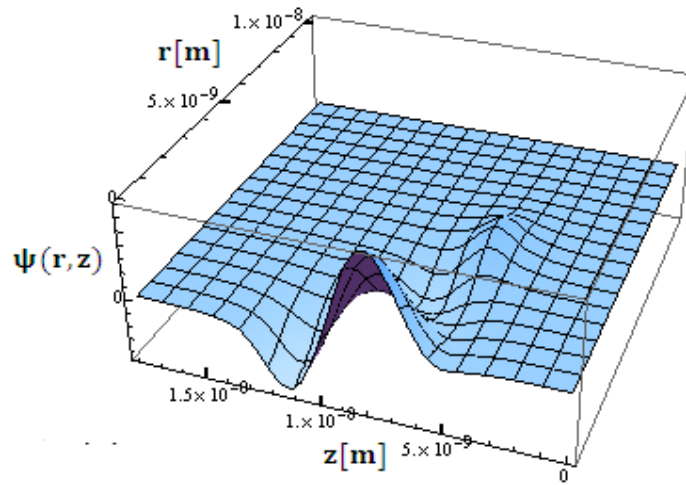
ბ)



გ)



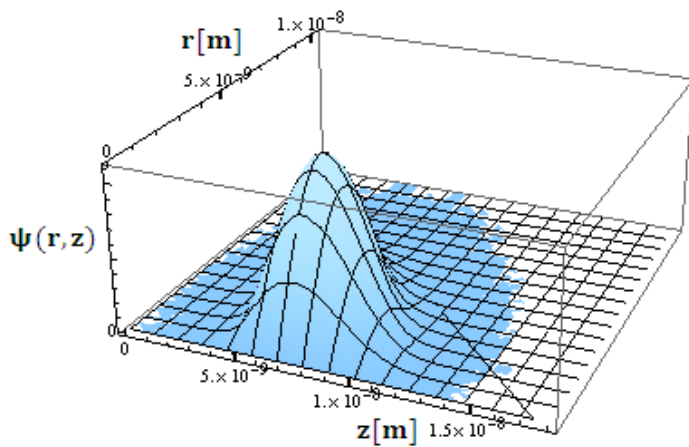
დ)



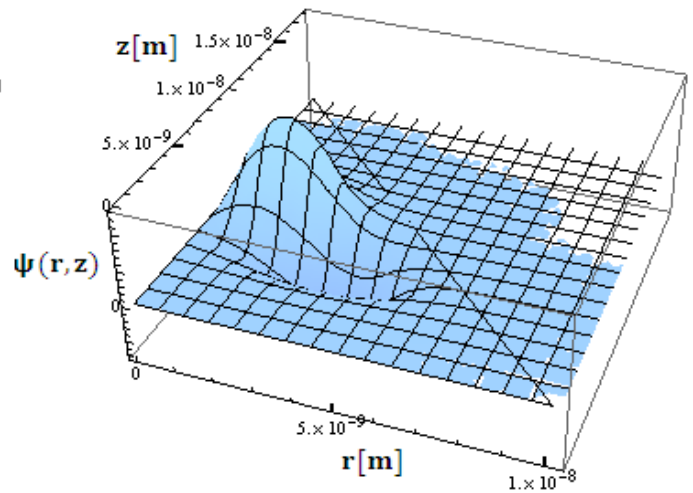
ე)

ნახ. 2.8 კონუსური კვანტური წერტილის ელექტრონის ტალღური ფუნქციები $l = 0$ ორბიტალური კვანტური რიცხვით და n მთავარი კვანტური რიცხვებით: ა) $n = 1$, ბ) $n = 1$ გ) $n = 3$ დ) $n = 4$ ე) $n = 5$

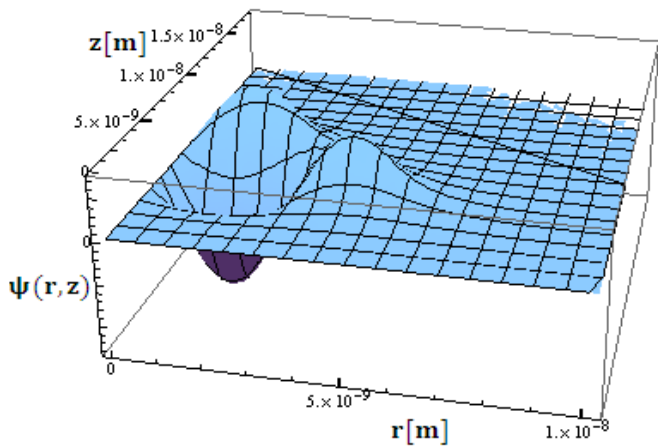
ნახ. 2.9 ზე მოცემულია ორბიტალური კვანტური რიცხვის $l = 1$ -ის შესაბამისი კონუსური კვანტური წერტილების ტალღური ფუნქციები ელექტრონებისათვის.



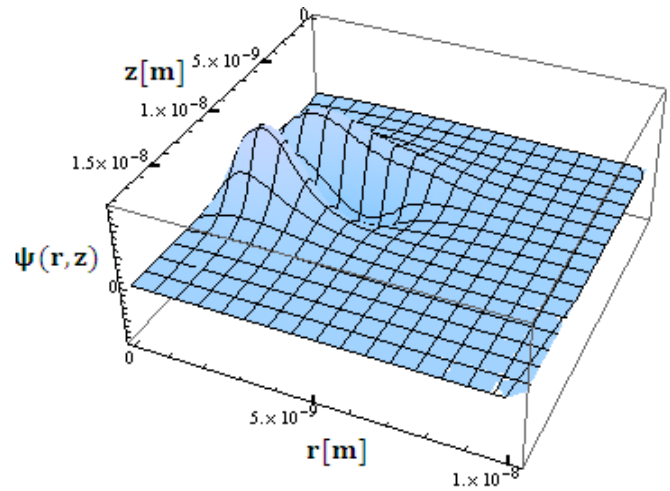
ა)



ბ)



ბ)



დ)

ნახ. 2.9 კონუსური კვანტური წერტილის ელექტრონის ტალღური ფუნქციები $l = 1$ ორბიტალური კვანტური რიცხვით და n მთავარი კვანტური რიცხვებით: ა) $n = 1$, ბ) $n = 2$ გ) $n = 3$ დ) $n = 4$

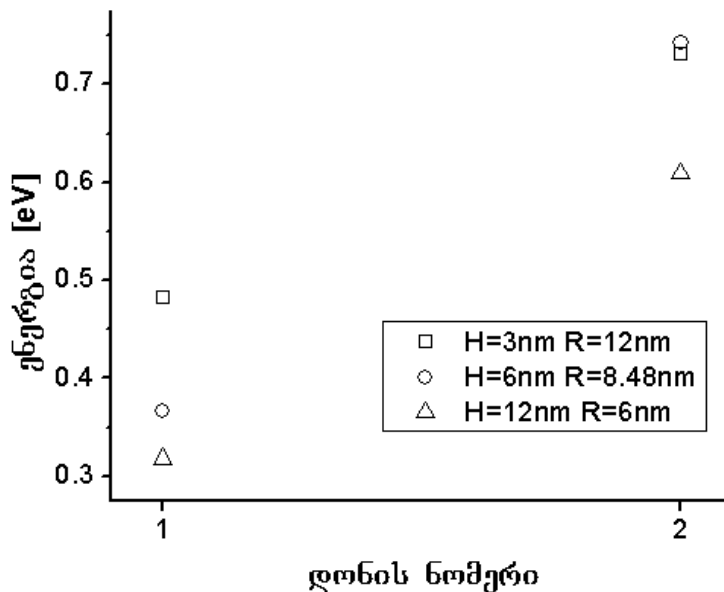
კონუსური კვანტური წერტილების ტალღური ფუნქციები ცილინდრული კვანტური წერტილებისგან განსხვავებით არ ხასიათდებიან რაიმე სიმეტრიით. ელექტრონის განაწილების ალბათობის მაქსიმუმი $l = 0$ ორბიტალური კვანტური რიცხვისათვის კონუსის სიმეტრიის დერძზე მდებარეობს, ხოლო $l = 1$ ორბიტალური კვანტური რიცხვის შემთხვევაში წანაცვლებულია დერძის მიმართ განივად. ხვრელების შესაბამისი ტალღური ფუნქციები ელექტრონის ტალღური ფუნქციების მსგავსია გარდა იმ განსხვავებისა, რომ ისინი კვანტური წერტილის არის მიღმა უფრო სწრაფი ტემპით მიისწრაფიან ნულისაკენ, ეს ფაქტი როგორც ზემოთ უკვე იყო აღნიშნული ფიზიკურად გამოწვეულია ხვრელების შედარებით დიდი ეფექტური მასით.

§2.5 ფუძისა და სიმაღლის ცვლილების გავლენა კონუსური კვანტური წერტილების ელექტრონულ მდგომარეობებზე

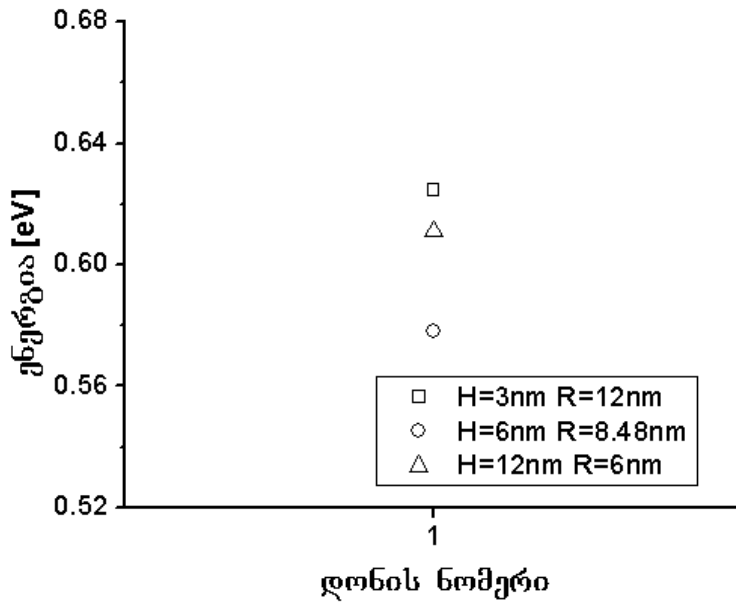
წინამდებარე პარაგრაფში განხილულია *InAs/GaAs* კონუსური კვანტური წერტილები და წარმოდგენილია შედეგები, რომლებიც უჩვენებს თუ როგორ არის დამოკიდებული აღნიშნული სისტემის ელექტრონული მდგომარეობები კონუსური კვანტური წერტილის ფუძისა და სიმაღლის ცვლილებაზე. კონუსური კვანტური წერტილის ფუძე და სიმაღლე იმდაგვარად იცვლება, რომ მუდმივი რჩება კვანტური წერტილის მოცულობა, რაც დაახლოებით 450 ნმ³ შეადგენს. ვინაიდან კვანტური წერტილების თვისებები ზოგადად დამოკიდებულია მათ მოცულობაზე ამიტომ იმისათვის, რომ გავარკვიოთ ფუძისა და სიმაღლის ცვლილების მიხედვით კონუსური კვანტური წერტილების თვისებები, კვლევები ჩატარებულია მუდმივი მოცულობის შენარჩუნებით. განხილულია სამი სხვადასხვა ფუძე-სიმაღლის მქონე კონუსური კვანტური წერტილი: 1) H=36მ R=126მ, 2) H=66მ R=8.486მ და 3) H=126მ R=66მ. სადაც H და R კონუსური კვანტური წერტილის სიმაღლე და ფუძის რადიუსია შესაბამისად.

გამოთვლებისას გამოყენებულია *InAs/GaAs* კვანტური წერტილის ქვემოთ მოცემული პარამეტრები. InAs: $m_e^* = 0.023m_e$, $m_h^* = 0.41m_e$, GaAs: $m_e^* = 0.067m_e$, $m_h^* = 0.45m_e$, InAs და GaAs გამტარებლობის ზონათა შორის სხვაობა $V_e = 0.77eV$ და სავალენტო ზონათა შორის სხვაობა $V_h = 0.33eV$ [83].

ქვემოთ ნახაზებზე მოცემულია *InAs/GaAs* კონუსური კვანტური წერტილების ენერგეტიკული დონეები ელექტრონებისა და ხვრელებისათვის.

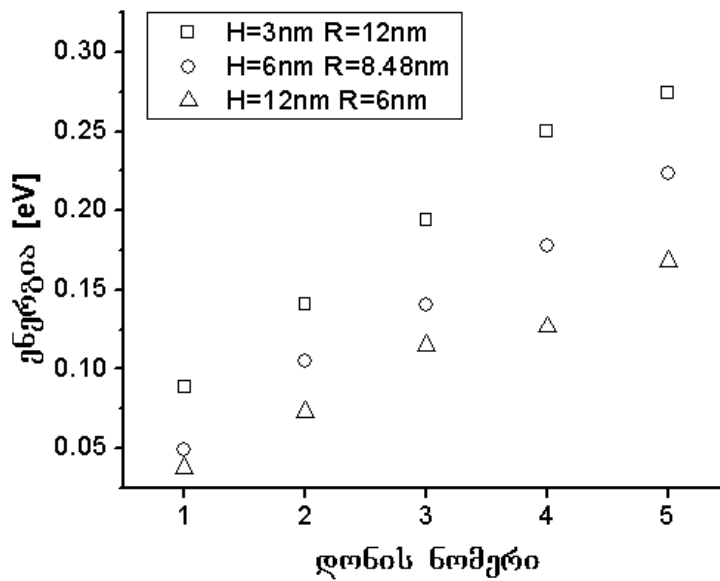


ნახ. 2.10 ა)

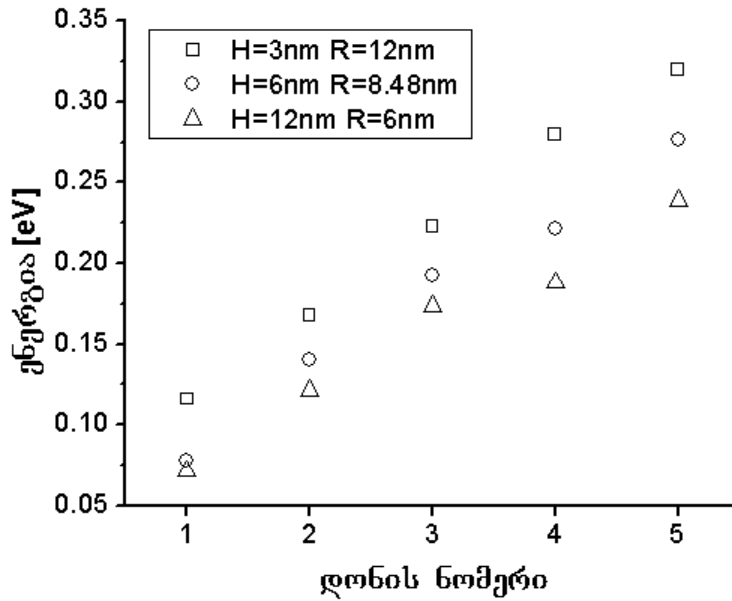


ნახ. 2.10 ბ)

ნახ. 2.10 კონუსური კვანტური წერტილის გამტარებლობის ელექტრონების ენერგეტიკული სპექტრი ა) $l = 0$ და ბ) $l = 1$ ორბიტალური კვანტური რიცხვებით



ნახ. 2.11 ა)



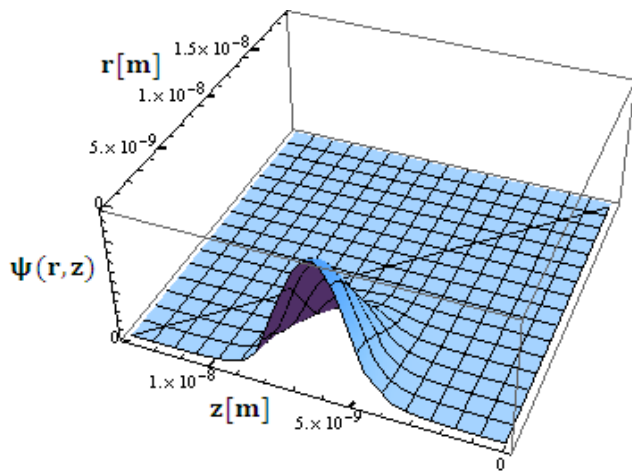
ნახ. 2.11 ბ)

ნახ. 2.11 კონუსური კვანტური წერტილის ხერხელების ენერგეტიკული სპექტრი
 ა) $l = 0$ და ბ) $l = 1$ ორბიტალური კვანტური რიცხვებით

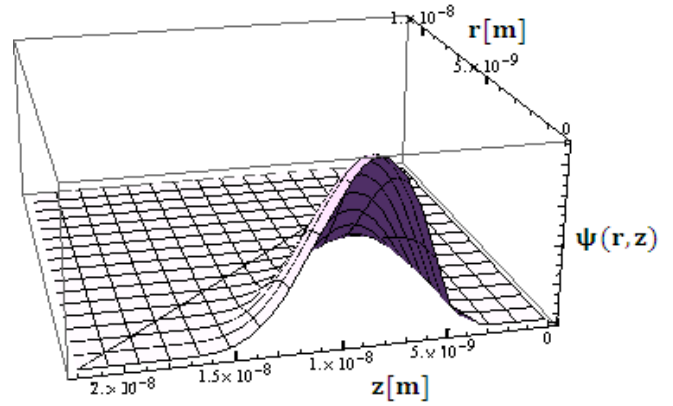
შესწავლილ კონუსურ კვანტურ წერტილებში გამტარებლობის ზონაში $l = 0$ ორბიტალური კვანტური რიცხვით ორი, ხოლო $l = 1$ შემთხვევაში ერთი ბმული მდგომარეობაა. ხერხელების შემთხვევაში კი რამდენიმე როგორც $l = 0$ ასევე $l = 1$ სათვის. 2.1 პარაგრაფში როგორც ვნახეთ კონუსური კვანტური წერტილების ენერგეტიკული მდგომარეობები ფიქსირებული ორბიტალური რიცხვის შემთხვევაში მთავარი კვანტური რიცხვის ზრდასთან ერთად დაახლოებით წრფივად იზრდება. ანალოგიურ სურთს ვხედავთ ახლაც - სხვადასხვა ფუძე-სიმაღლის შეფარდების მქონე კვანტური წერტილებისთვისაც.

კონუსური კვანტური წერტილების სიმაღლის გაზრდით (ფუძის რადიუსის შემცირებით) კვაზინაწილაკების - ელექტრონების და ხერხელების ენერგიები მცირდება. რადგანაც ხერხელების შემთხვევაში რამდენიმე ბმული მდგომარეობა გვაქვს, ამიტომ კარგად ჩანს, რომ შესწავლილი სამი სხვადასხვა გეომეტრიული კონფიგურაციის მქონე კონუსური კვანტური წერტილის ხერხელების ენერგიებს შორის სხვაობა მთავარი კვანტური რიცხვის ზრდასთან ერთად იზრდება.

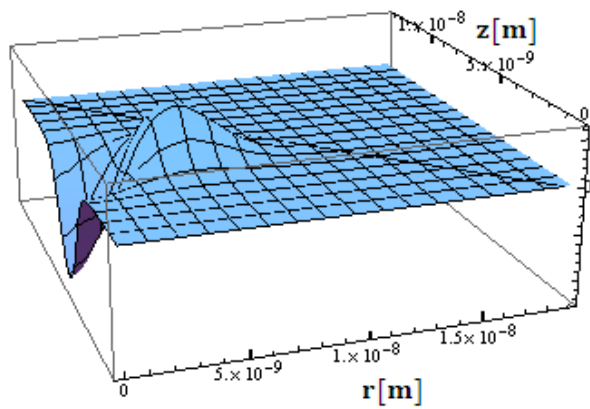
ქვემოთ ნახაზებზე წარმოდგენილია კონუსური კვანტური წერტილების ტალღური ფუნქციები ხერხელებისათვის. ვინაიდან ელექტრონების შემთხვევაში ჯამში $l = 0$ და $l = 1$ ორბიტალური კვანტური რიცხვებისათვის მხოლოდ 3 ბმული მდგომარეობა გვაქვს სამივე კონფიგურაციის კვანტური წერტილისათვის, ხერხელებისათვის კი რამდენიმე, ამიტომ ხერხელების შემთხვევაში კარგად ჩანს ტალღური ფუნქციების ცვლილების დინამიკა მთავარი კვანტური რიცხვის მიხედვით. ნახაზებზე შედარების მიზნით გვერდიგვერდ წარმოდგენილია $H=3\text{nm}$ $R=12\text{nm}$ და $H=12\text{nm}$ $R=6\text{nm}$ ზომების მქონე კონუსურ კვანტურ წერტილთა ხერხელების ტალღური ფუნქციები.



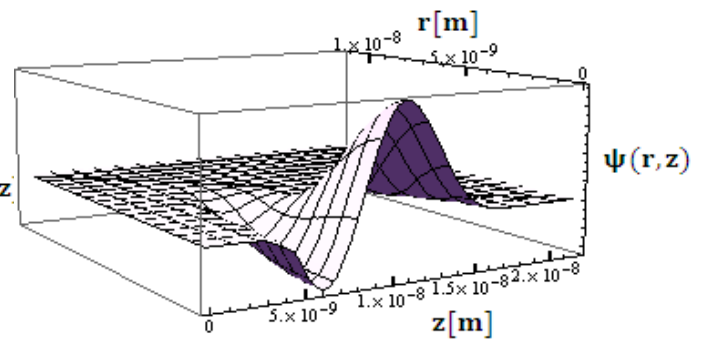
δ^*)



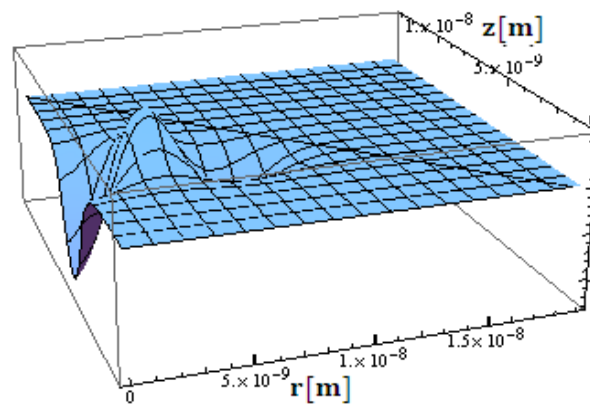
δ^{**})



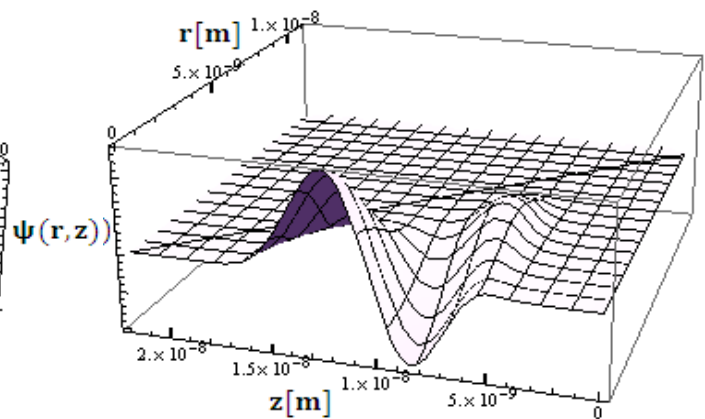
δ^*)



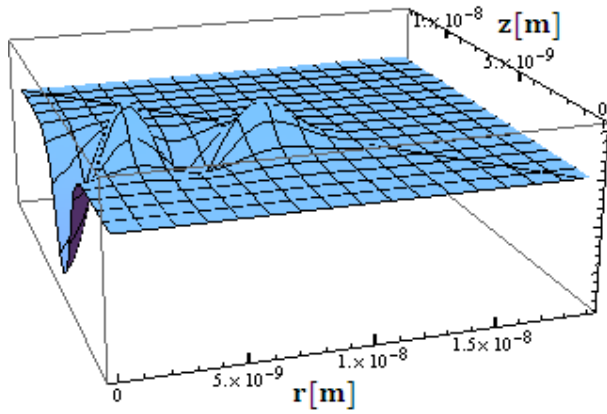
δ^{**})



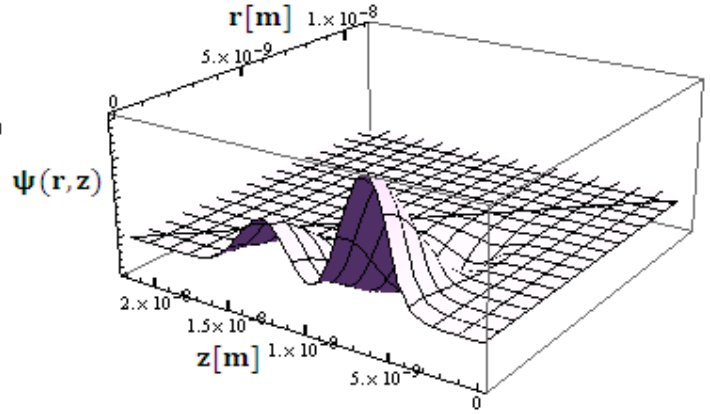
δ^*)



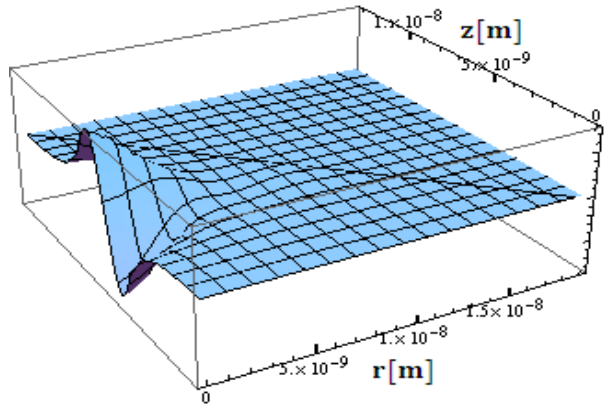
δ^{**})



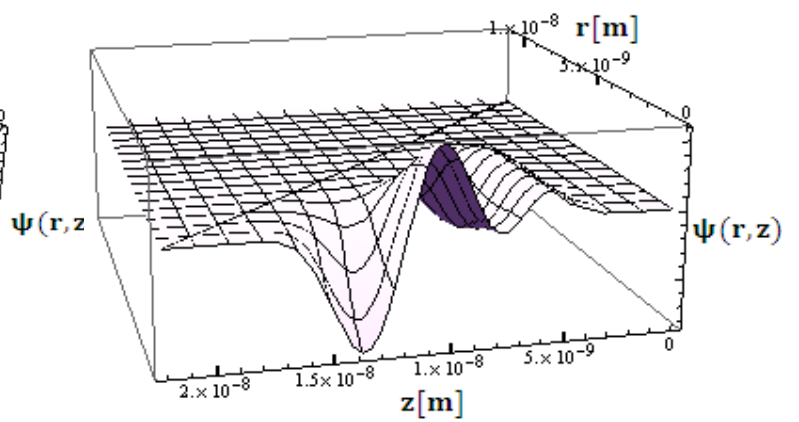
დ*)



დ**)

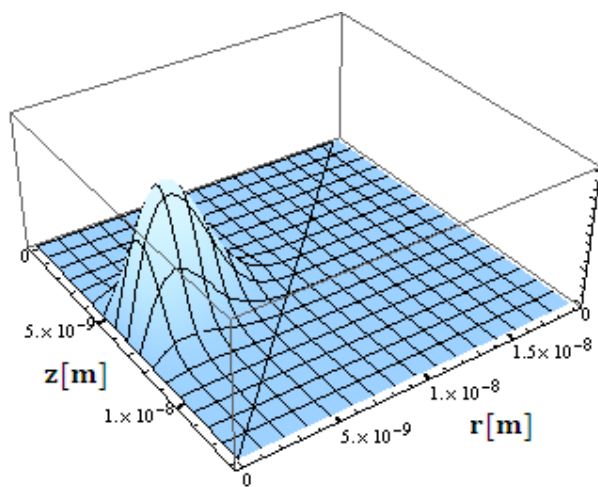


ე*)

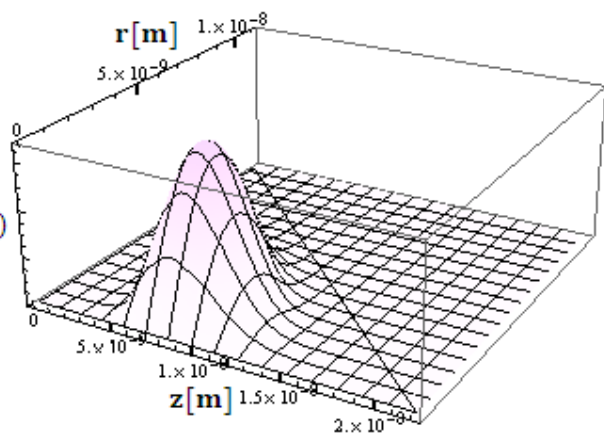


ე**)

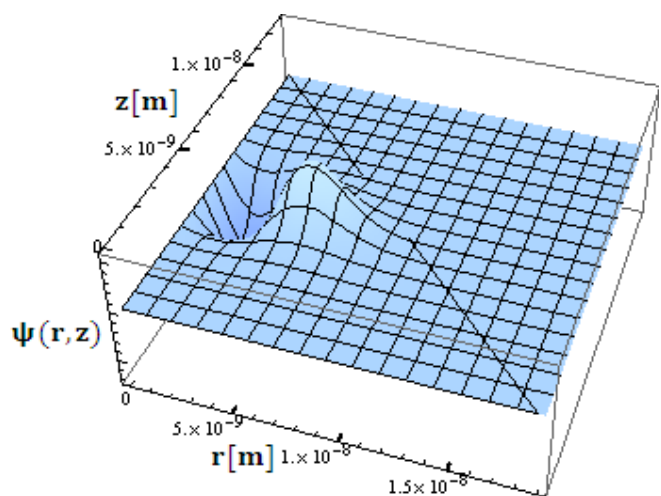
ნახ. 2.12 სერელების ტალღური ფუნქციები $l = 0$ ორბიტალური რიცხვისათვის, მთავარი კვანტური რიცხვით: ა) $n = 1$, ბ) $n = 2$ გ) $n = 3$ დ) $n = 4$ ე) $n = 5$, * - კონუსური კვანტური წერტილები ზომებით: $H=3\text{nm}$ $R=12\text{nm}$, ** - კონუსური კვანტური წერტილები ზომებით: $H=12\text{nm}$ $R=6\text{nm}$.



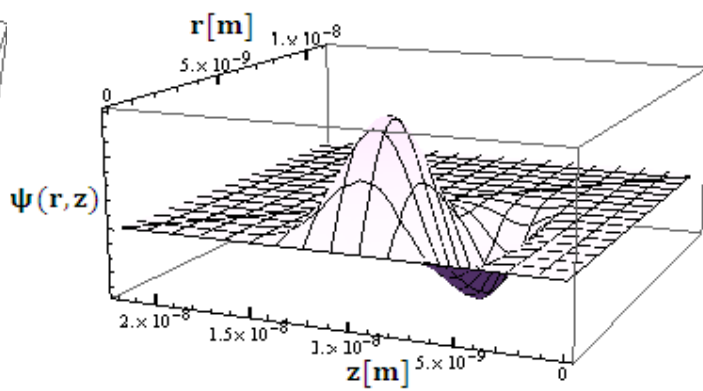
δ^*



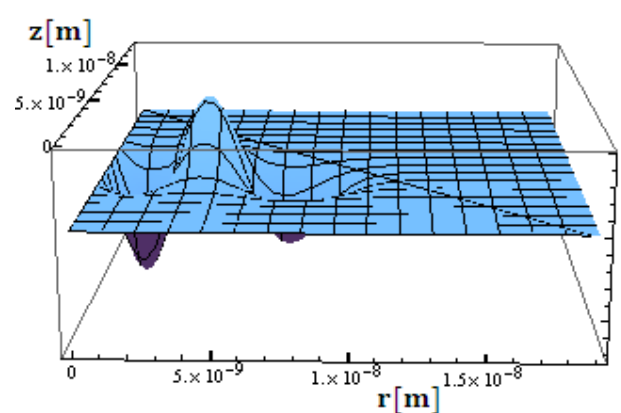
δ^{**}



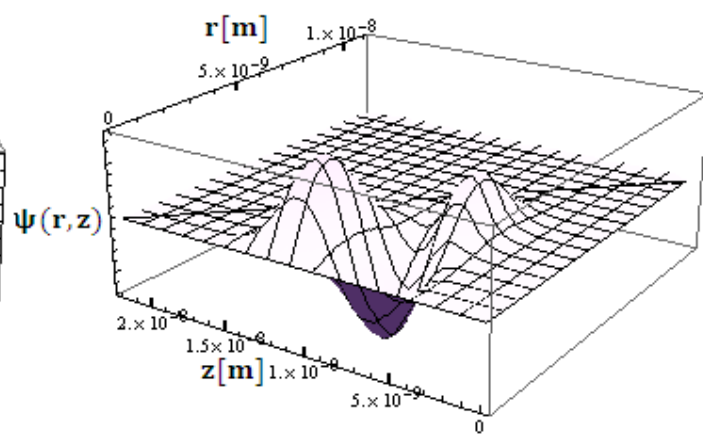
δ^*



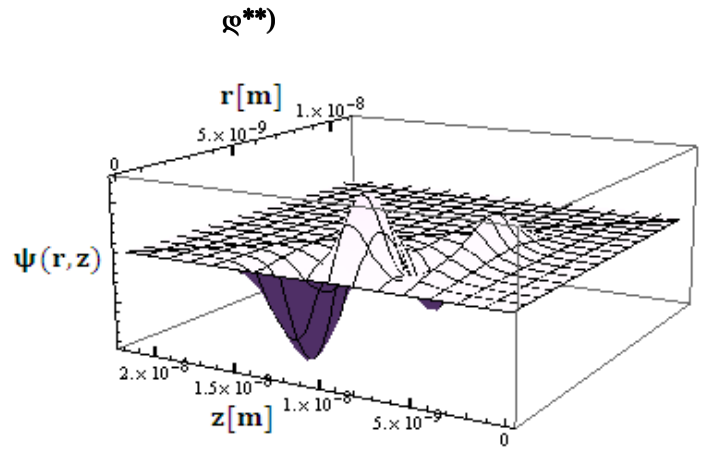
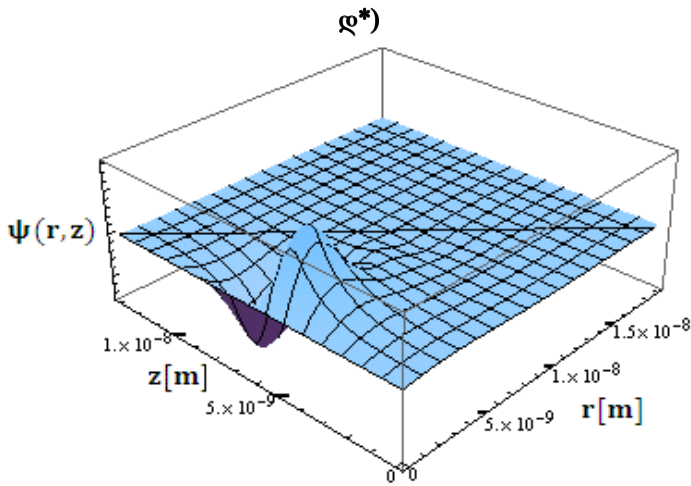
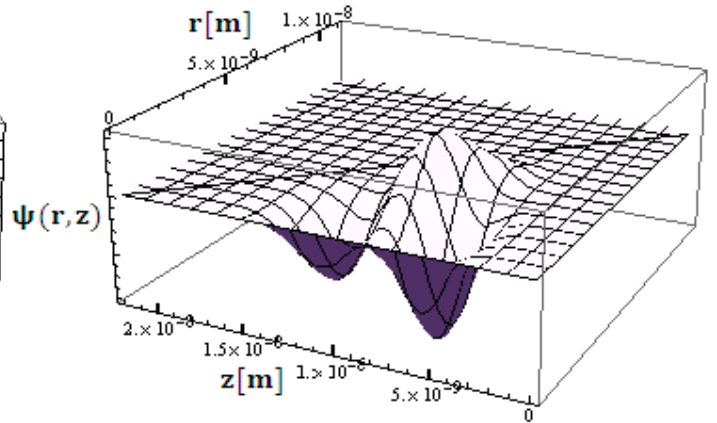
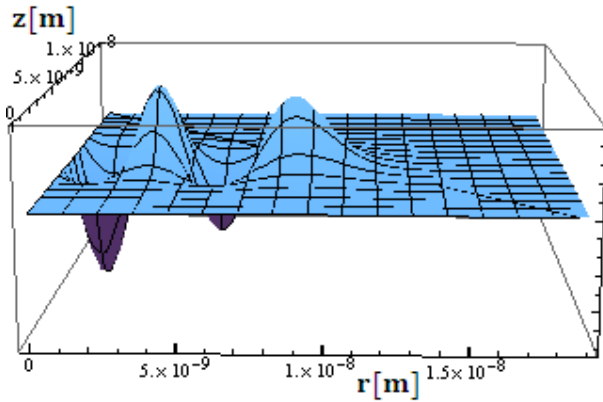
δ^{**}



δ^*



δ^{**}



ე*)

ე***)

ნახ. 2.13 ხვრელების ტალღური ფუნქციები $l = 1$ ორბიტალური რიცხვისათვის, მთავარი კვანტური რიცხვით: ა) $n = 1$, ბ) $n = 2$ გ) $n = 3$ დ) $n = 4$ ე) $n = 5$, * - კონუსური კვანტური წერტილები ზომებით: $H=3\text{nm}$ $R=12\text{nm}$, ** - კონუსური კვანტური წერტილები ზომებით: $H=12\text{nm}$ $R=6\text{nm}$.

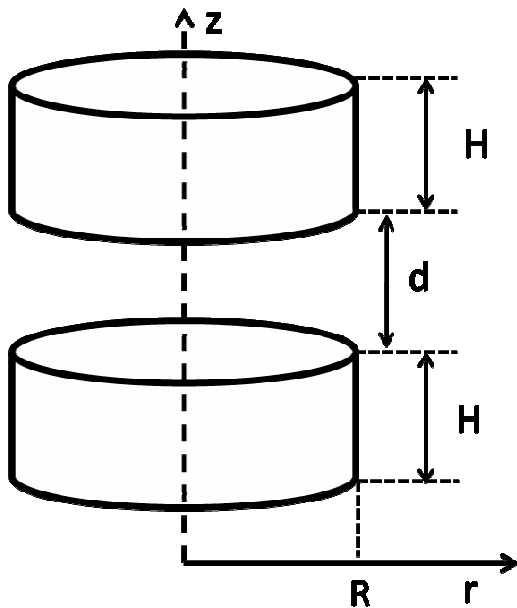
ზოგადი განსხვავება რაც შეინიშნება ნახ. 2.12-2.13 წარმოდგენილი სხვადასხვა ფუძე-სიმაღლის შეფარდების მქონე კვანტური წერტილებისათვის არის ის, რომ ნაწილაკების ტალღური ფუნქციების დაკვანტვა ხდება უპირატესად იმ მიმართულებით რომლის ხაზოვანი ზომაც მეტია. შედეგად, უმდაბლესი დონეების გარდა ტალღური ფუნქციები არანაირ მსგავს ფორმას არ აკლენენ.

§2.6 ურთიერთქმედი *InAs/GaAs* ცილინდრული კვანტური

წერტილები - ხელოვნური მოლეკულა

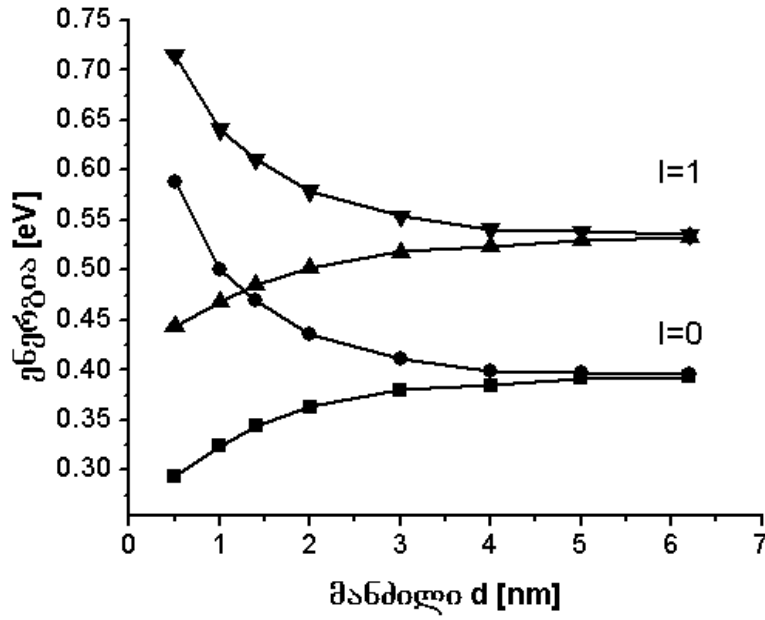
ორი ან მეტი ურთიერთქმედი კვანტური წერტილის ერთობლიობას კვანტურ წერტილურ მოლეკულას [84] ან ხელოვნურ მოლეკულას უწოდებენ. კვანტური წერტილური მოლეკულები (quantum dot molecule) საკმაოდ საინტერესო სისტემებია ვინაიდან მათი თვისებები დამოკიდებულია არამარტო მათ შემადგენლობაში შემავალ თითოეულ კვანტურ წერტილზე, არამედ ამ კვანტური წერტილების ურთიერთქმედებაზეც. აქედან გამომდინარე, კვანტური წერტილური მოლეკულის თვისებების მანიპულირება შესაძლებელია კვანტურ წერტილთა შორის მანძილის (ზოგადად ორიენტაციის) ცვლილებითაც. როგორც ცნობილია, კვანტური წერტილების თვისებები ძლიერად არის დამოკიდებული მათ გეომეტრიაზე, რისი მაგალითები ზევითაც ვნახეთ. ასევე კვანტური წერტილური მოლეკულების თვისებებიც ძლიერად არის დამოკიდებული მასში შემავალ კვანტურ წერტილთა შორის მანძილზე და ეს უკანასკნელი შეიძლება გამოვიყენოთ როგორც დამატებითი პარამეტრი საჭირო თვისებების მისაღებად.

წინამდებარე პარაგრაფში წარმოდგენილია ორი ცილინდრული ფორმის კვანტური წერტილის ურთიერთქმედება. კვანტური წერტილები მოთავსებული არიან ერთი მეორის თავზე ისე, რომ მათი გეომეტრიული სიმეტრიის ღერძები ემთხვევა. ორივე კვანტური წერტილის გეომეტრიული ზომები იდენტურია. ნახ.1.14. წარმოდგენილია ნაშრომში განხილული ურთიერთქმედი კვანტური წერტილების სქემატური გამოსახულება. გამოთვლები ჩატარებულია *InAs/GaAs* კვანტურ წერტილთა შორის d სხვადასხვა მანძილის შემთხვევაში. *InAs/GaAs* სისტემისათვის გამოყენებულია პარაგრაფ 2-ში მცემული პარამეტრები.

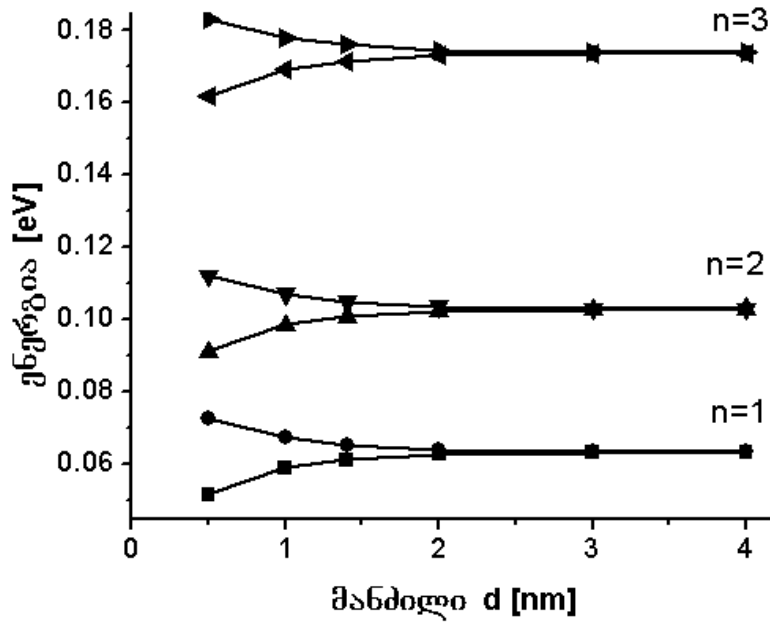


ნახ. 2.14 კვანტური წერტილების სქემატური გამოსახულება. $H=3\text{nm}$, $R=7\text{nm}$

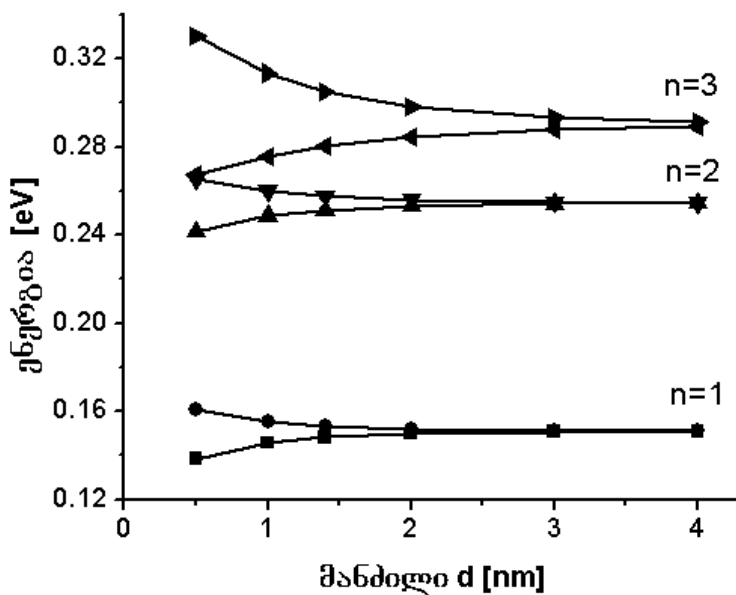
ქვევით წარმოდგენილია კვანტური სისტემის ენერგეტიკული სპექტრის დამოკიდებულება კვანტურ წერტილთა შორის d მანძილზე.



ნახ. 2.15 ელექტრონის ენერგიების დამოკიდებულება კვანტურ წერტილთა შორის d მანძილზე l=0 და l=1 ორბიტალური რიცხვებით.



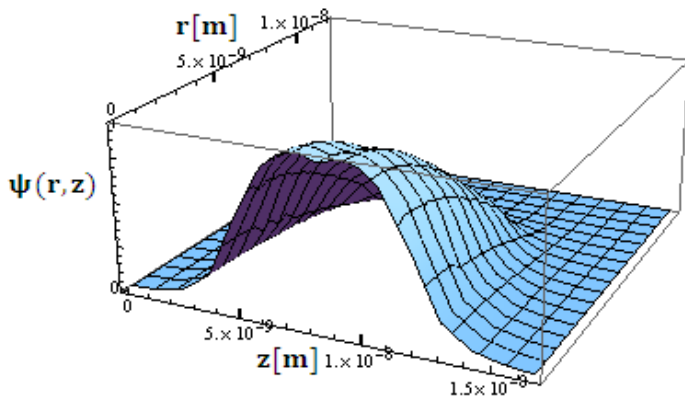
ნახ. 2.16 ხვრელების ენერგიების დამოკიდებულება კვანტურ წერტილთა შორის d მანძილზე ორბიტალური რიცხვით l=0



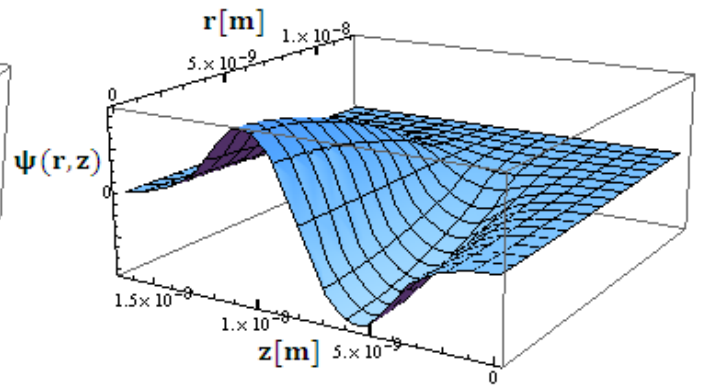
ნახ. 2.17 ხერელების ენერგიების დამოკიდებულება კვანტურ წერტილთა შორის d მანძილზე ორბიტალური რიცხვით $l=1$

მიმდინარე პარაგრაფში განხილული *InAs/GaAs* კვანტური წერტილები, რომლებიც კვანტურ წერტილურ მოლეკულას (ხელოვნურ მოლეკულას) შეადგენენ ერთმანეთისგან ფიზიკურად უსასრულოდ შორ მანძილზე ისე იქცევიან, როგორც ორი იზოლირებული კვანტური წერტილი. როგორც ზემოთ წარმოდგენილი ნახაზებიდან ჩანს ფიზიკურად უსასრულოდ შორი მანძილი ელექტრონებისათვის დაახლოებით 6 ნმ ია ხოლო ხერელებისათვის - დაახლოებით 2-4 ნმ. ერთმანეთისაგან ფიზიკურად შორ მანძილზე მყოფი კვანტური წერტილებისაგან შემდგარი სისტემის ენერგეტიკული დონეები გადაგვარებულია. კვანტური წერტილების მიახლოებით ირთვება ურთიერთქმედება კვანტურ მდგომარეობებს შორის, რომლის წყალობითაც ხდება გადაგვარების მოხსნა, რაც ფიზიკურად დონეების შესაბამისი ენერგიების გახლეჩაში გამოიხატება. რადგან *InAs/GaAs* – ში ელექტრონების ეფექტური მასა ხერელის ეფექტურ მასაზე ერთი რიგით მეტია, ამიტომ ახლო მანძილებზე ელექტრონები გაცილებით მეტად ურთიერთქმედებენ ვიდრე ხერელები. როგორც ნახ. 2.15 დან ჩანს ელექტრონების ურთიერთქმედება იმდენად დიდია, რომ $d = 1.3$ ნმ მანძილზე ახლოს მიტანისას $l = 0$ და $l = 1$ ის შესაბამისი ენერგეტიკული დონეები ისე იხლიჩებიან, რომ $l = 0$ ის შესაბამისი ენერგია $l = 1$ დონის ენერგიაზე დიდი ხდება. ხერელების შემთხვევაში როგორც ნახ. 2.17 უჩვენებს $l = 1$ ორბიტალური კვანტური რიცხვების შესაბამისი ენერგეტიკული დონეები მთავარი კვანტური რიცხვებით: $n = 2$ და $n = 3$ ერთმანეთს კვეთენ $d = 0.5$ ნმ მანძილზე.

ქვემოთ ნახაზებზე წარმოდგენილია ხელოვნური მოლეკულის ელექტრონთა ტალღური ფუნქციები.

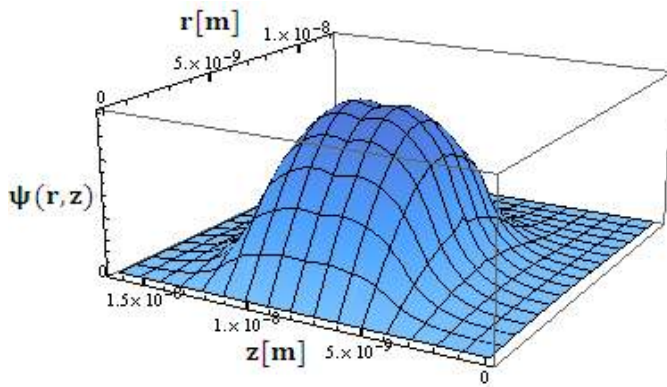


ა)

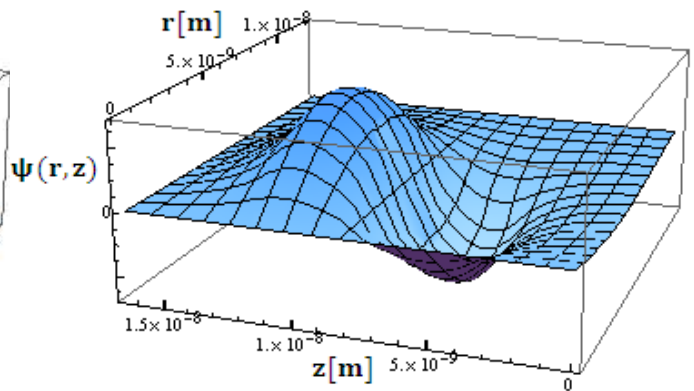


ბ)

ნახ. 2.18 ხელოვნური მოლეკულის ელექტრონთა ტალღური ფუნქციები $d = 0.5$ ფმ, $l = 0$ ა) $n = 1$, ბ) $n = 2$

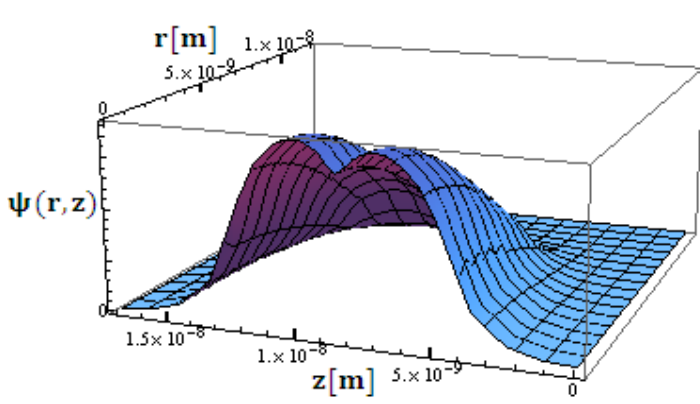


ა)

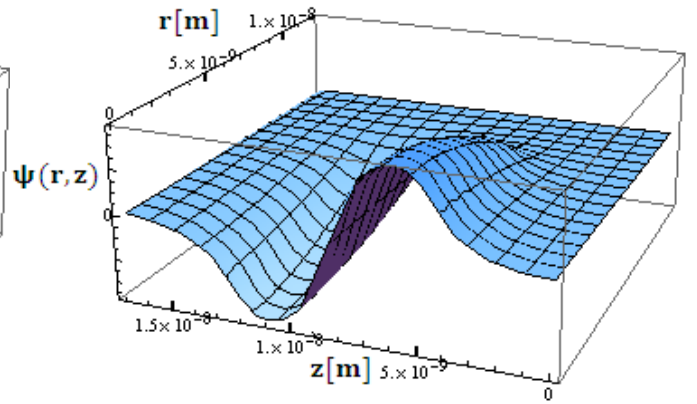


ბ)

ნახ. 2.19 ხელოვნური მოლეკულის ელექტრონთა ტალღური ფუნქციები $d = 0.5$ ფმ, $l = 1$ ა) $n = 1$, ბ) $n = 2$

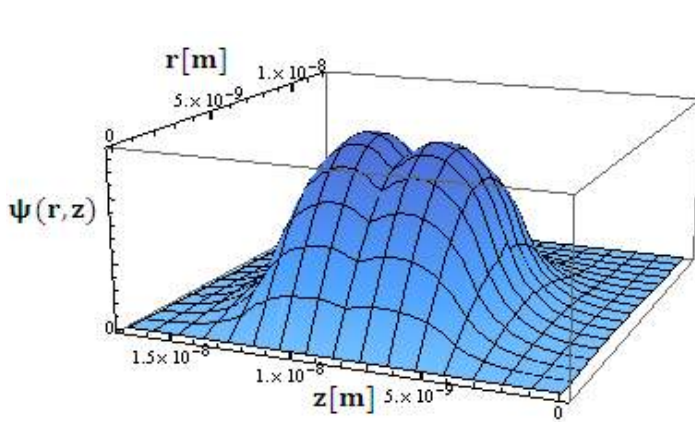


ა)

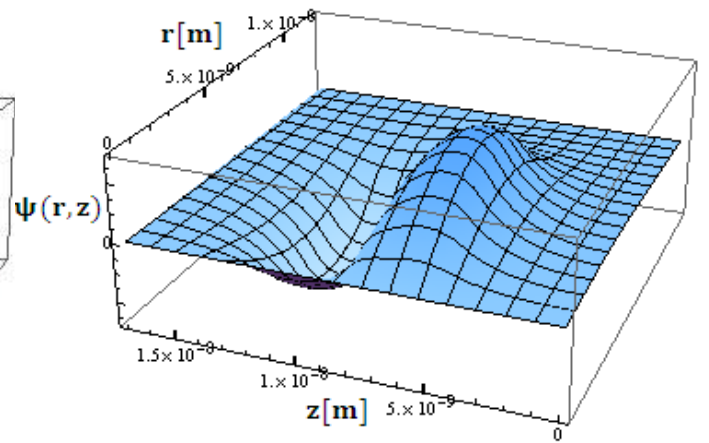


ბ)

ნახ. 2.20 ხელოვნური მოლეკულის ელექტრონთა ტალღური ფუნქციები $d = 1$ ნმ, $l = 0$ ა) $n = 1$, ბ) $n = 2$

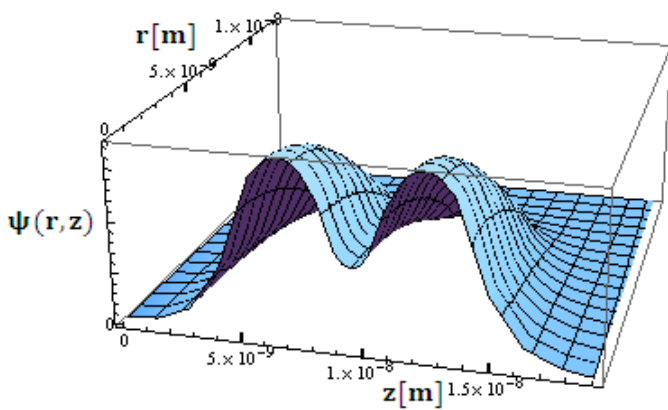


ა)

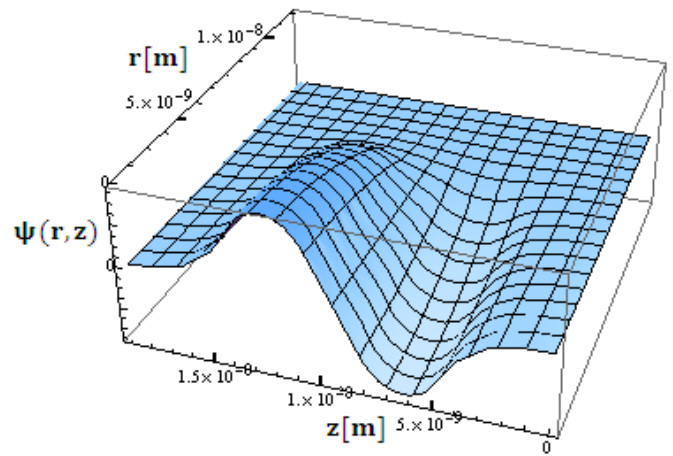


ბ)

ნახ. 2.21 ხელოვნური მოლეკულის ელექტრონთა ტალღური ფუნქციები $d = 1$ ნმ, $l = 1$ ა) $n = 1$, ბ) $n = 2$



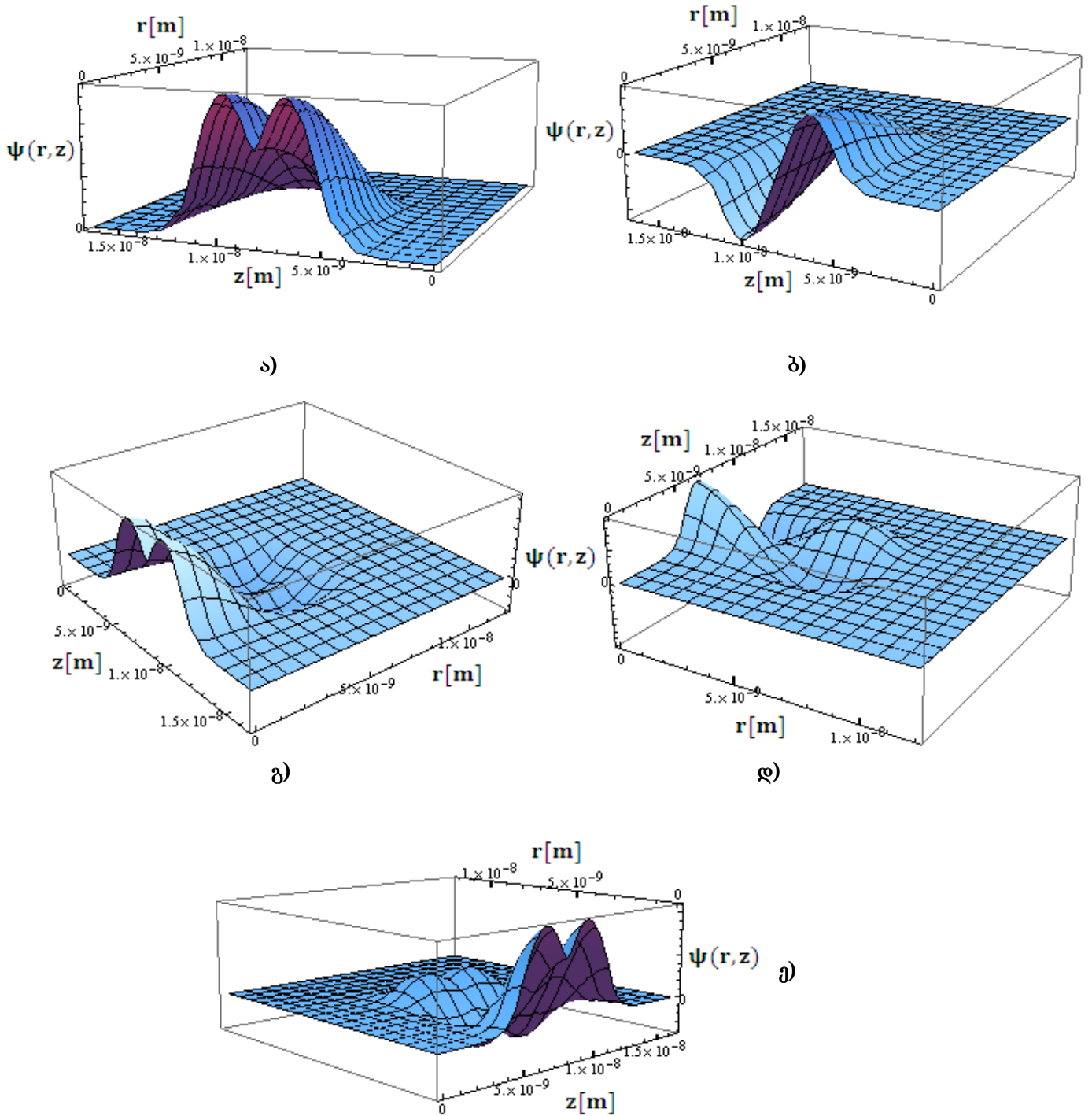
ა)



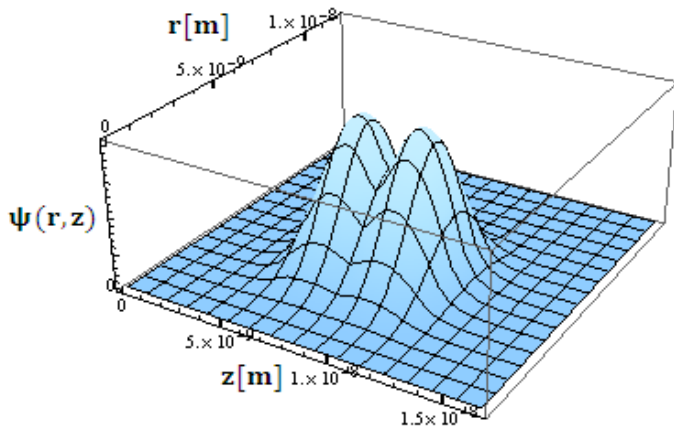
ბ)

ნახ. 2.22 ხელოვნური მოლეკულის ელექტრონთა ტალღური ფუნქციები $d = 3$ ნმ, $l = 0$ ა) $n = 1$, ბ) $n = 2$

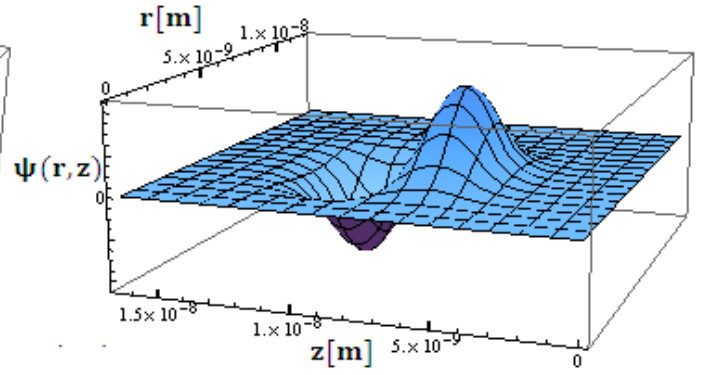
ქვემოთ ნახაზებზე წარმოდგენილია ხელოვნური მოლეკულის ხერელების ტალღური ფუნქციები $d = 0.5$ ნმ შემთხვევისთვის.



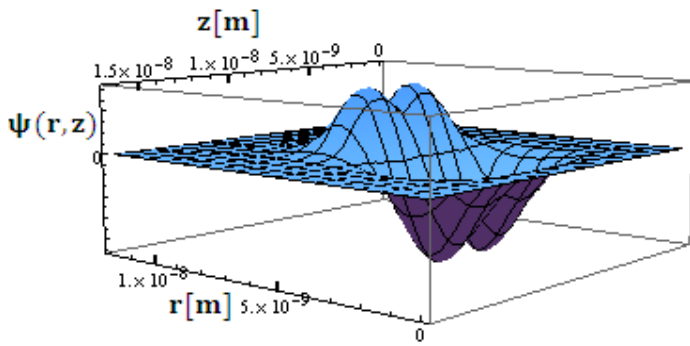
ნახ. 2.23 ხელოვნური მოლეკულის ხერელთა ტალღური ფუნქციები $d = 0.5$ ნმ, $l = 0$ ა) $n = 1$; ბ) $n = 2$; გ) $n = 3$; დ) $n = 4$; ე) $n = 5$



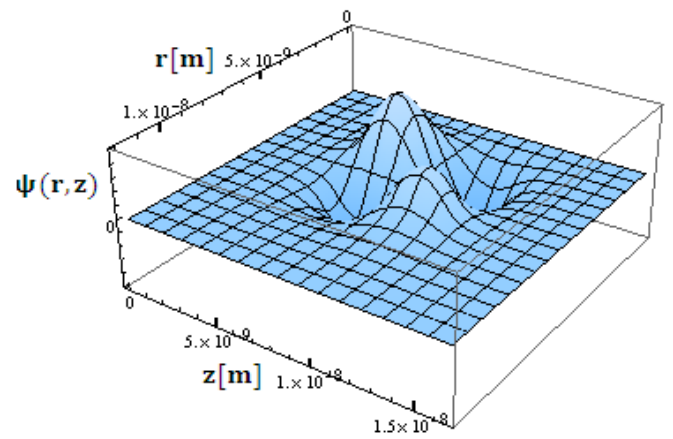
ა)



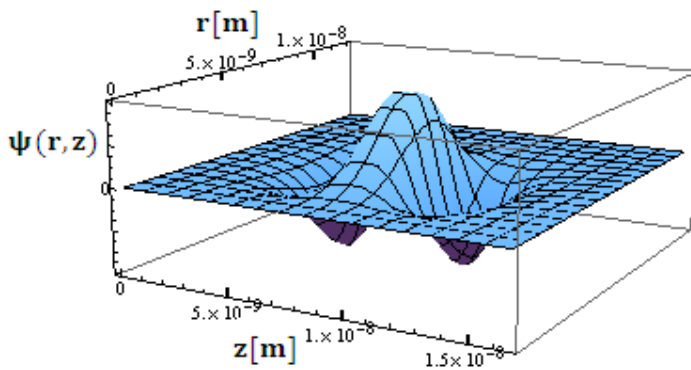
ბ)



ნახ. 224 გ)



ნახ. 224 დ)



ნახ. 224 ე)

ნახ. 224 ხელოვნური მოლეკულის ხერვლთა ტალღური ფუნქციები $d = 0.5$ ნმ, $l = 1$ ა) $n = 1$; ბ) $n = 2$; გ) $n = 3$; დ) $n = 4$; ე) $n = 5$

ხელოვნური მოლეკულის ტალღური ფუნქციები გამოირჩევიან სიმეტრიით კვანტურ წერტილთა გეომეტრიული ცენტრების შემაერთებელი წრფის გასწვრივ რაც აღნიშნული სისტემის გეომეტრიული სიმეტრიით არის გამოწვეული.

§2.7 კვანტური წერტილების ზონათაშორისი გადასვლების შესაბამისი ოსცილატორული ძალები

კვანტურ მექანიკაში ოსცილატორული ძალა წარმოადგენს კვანტური დონეებს შორის ელექტრონული გადასვლის საზომს. ოსცილატორული ძალების ცოდნა მნიშვნელოვანია როგორც ატომური ფიზიკისათვის, ასევე კონდენსირებული გარემოს ფიზიკისთვის, რადგანაც ოსცილატორული ძალები აღწერენ ელექტრომაგნიტური ტალღების ურთიერთქმედებას ნივთიერებასთან, ეს უკანასკნელი კი ფრიად მნიშვნელოვანია, როგორც თეორიული ასევე ექსპერიმენტალური თვალსაზრისითაც. კვანტური წერტილის ოსცილატორული ძალები დამოკიდებულია კვანტური წერტილების ზომებზე და ფორმებზე. ოსცილატორულ ძალების მართვა ასევე შესაძლებელია ელექტრული ველით [85].

თუ i და f კვანტური სისტემის საწყისი და საბოლოო მდგომარეობებია შესაბამისად $|\Psi_i\rangle$ და $\langle\Psi_f|$ ტალღური ფუნქციებით მაშინ უგანზომილებო ოსცილატორული ძალა, რომელიც $i \rightarrow f$ გადასვლას შეესაბამება შემდგომად გამოითვლება [86]

$$f_{i,f} = \frac{2}{m(E_f - E_i)} |\langle\Psi_f|\vec{P} \cdot \vec{e}|\Psi_i\rangle|^2 \quad (2.1)$$

სადაც m თავისუფალი ელექტრონის მასაა, $(E_f - E_i)$ - საბოლოო და საწყისს კვანტურ მდგომარეობათა შორის ენერჯიათა სხვაობა, \vec{P} - იმპულსის ოპერატორი ხოლო \vec{e} - ერთეულოვანი ვექტორი.

უმარტივესი კვანტური სისტემების - ერთგანზომილებიანი ორმოსა და ჰარმონიული ოსცილატორის შემთხვევაში, უგანზომილებო ოსცილატორული ძალების გამოთვლა გააკეთებულია ჰენის მიერ [87].

კვანტური წერტილების ზონათა შორისი გადასვლების შესაბამისი უგანზომილებო ოსცილატორული ძალების გამოსათვლელად გამოვიყენებთ (2.1) ფორმულას, სადაც კვანტური წერტილების ელექტრონებისა და ხვრელების ტალღური ფუნქციებია ჩასმული, ხოლო ენერჯიათა სხვაობის ნაცვლად ელექტრონის და ხვრელის შესაბამისი ენერჯიათა სხვაობა.

რადგანაც გამოთვლებს ვაწარმოებთ სფერული და ცილინდრული კოორდინატების გამოყენებით, ამიტომ საჭიროა (2.1) ფორმულის წარმოდგენა აღნიშნულ კოორდინატულ სისტემებში რაც ქვემოთ მოცემულია გაშლილი სახით.

$$\vec{P} \cdot \vec{e} = P_x + P_y + P_z \quad (2.2)$$

კოორდინატულ წარმოდგენაში გვაქვს:

$$P_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad P_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \quad P_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$$

დეკარტული წარმომავლები სფერულ კოორდინატებში:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} &= \sin\theta \cos\varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos\theta \cos\varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{1}{r \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial}{\partial y} &= \sin\theta \sin\varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos\theta \sin\varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial}{\partial z} &= \cos\theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r} \sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \end{aligned}$$

მოცულობის ელემენტი სფერულ კოორდინატებში:

$$d\Omega = r^2 \sin\theta d\theta d\varphi dr$$

დეკარტული წარმოებულები ცილინდრულ კოორდინატებში:

$$\frac{\partial}{\partial x} = \cos\varphi \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r} \sin\varphi \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \sin\varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos\varphi \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

$$\frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z}$$

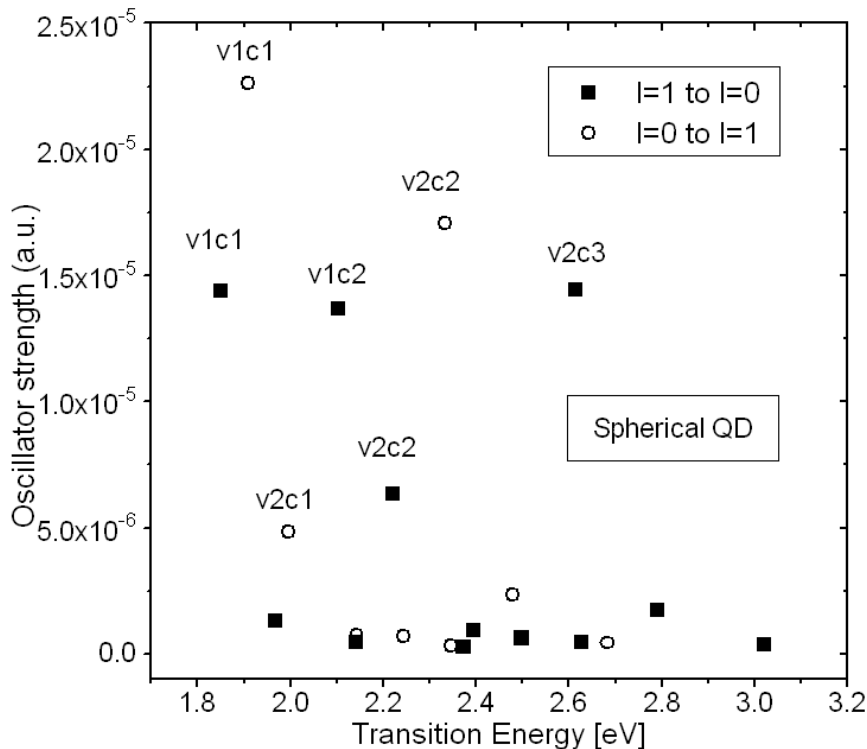
მოცულობის ელემენტი ცილინდრულ კოორდინატებში:

$$d\Omega = r dr d\varphi dz$$

(2.2) ფორმულის სფერულ (ცილინდრულ) კოორდინატებში წარმოდგენის შემდეგ შეგვიძლია გამოვითვალოთ უგანზომილებო ოსცილატორული ძალები (2.1) გამოსახულების გამოყენებით, სადაც ტალღური ფუნქციები მოცემულია სფერულ (ცილინდრულ) კოორდინატებში. ვინაიდან შრედინგერის განტოლება, რომლის ამოხსნასაც ვაწარმოებთ მოცემულია სფერულ (ცილინდრულ) კოორდინატებში, ამიტომ მისი ამონახსნები პირდაპირ შეიძლება ჩასმული იქნას (2.1) გამოსახულებაში.

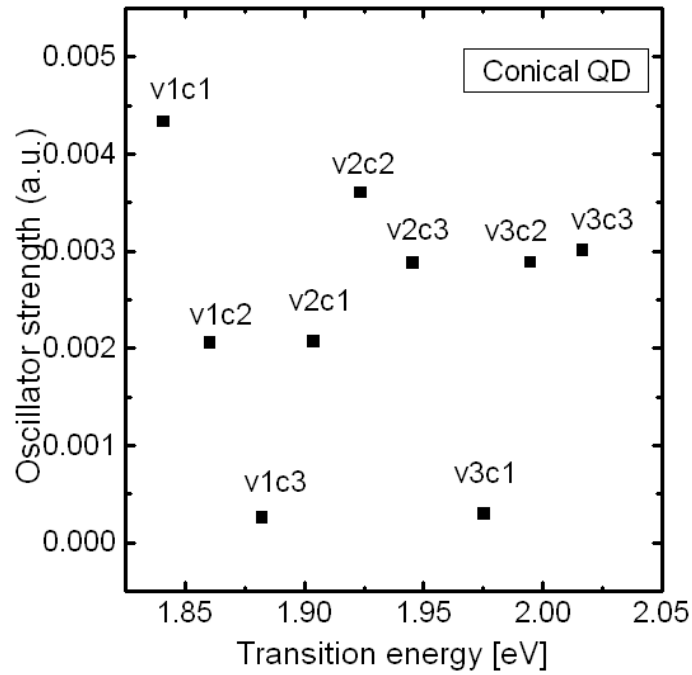
სფერული ცილინდრული და კონუსური კვანტური წერტილები

ჩვენ გამოვიკვლიეთ ზონათაშორისი გადასვლების შესაბამისი უგანზომილებო ოსცილატორული ძალები $CdSe/ZnSe$ სფერული, ცილინდრული და კონუსური კვანტური წერტილებისათვის [88]. სამივე გეომეტრიული ფორმის კვანტურ წერტილი იმდაგვარად შევარჩიეთ, რომ მათი მოცულობა იდენტური ყოფილიყო. კერძოდ სფერული კვანტური წერტილის რადიუსი 5 ნმ-ია, ასევე 5-5 ნმ-ია ცილინდრული და კონუსური ფორმის კვანტური წერტილების ფუძეების რადიუსები. სასრულ ელემენტთა საშუალებით და ამ პარაგრაფში ზემოთ წარმოდგენილი ფორმულით (2.1) გამოსახულების შესაბამისად ჩვენ გამოვთვალეთ კვანტური წერტილების ოსცილატორული ძალები. მიღებული შედეგები წარმოდგენილია ქვემოთ მოცემულ ნახაზებზე.

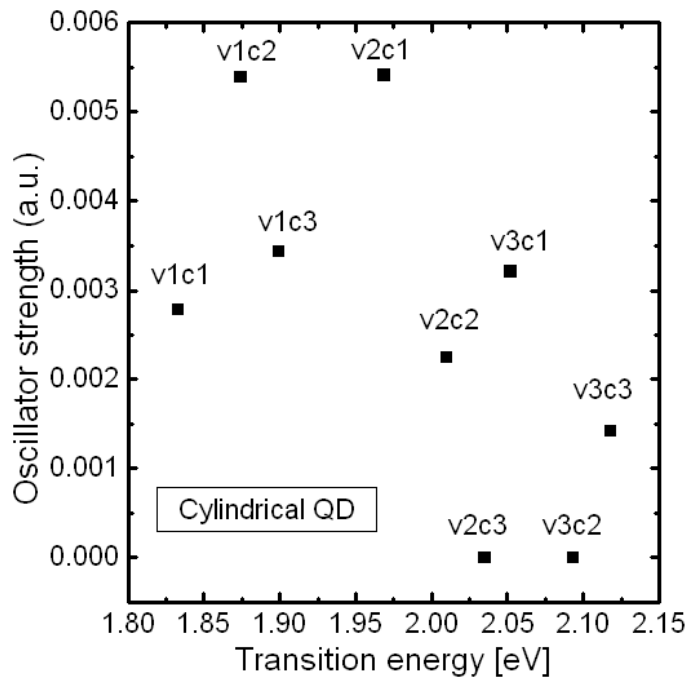


ნახ. 2.25

სფერული კვანტური წერტილის ზონათაშორისი გადასვლების შესაბამისი უგანზომილებო ოსცილატორული ძალები



ნახ. 2.26 ა)



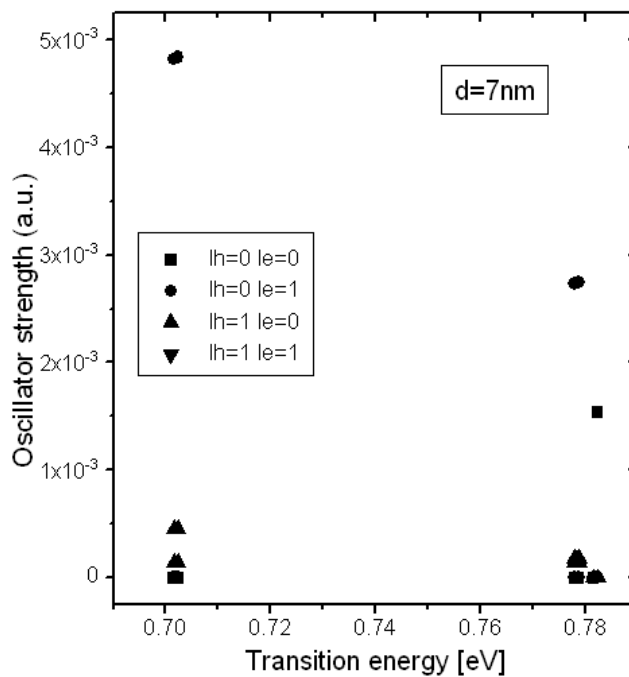
ნახ. 2.26 ბ)

ნახ. 2.26 ა) კონუსური ბ) ცილინდრული კვანტური წერტილის ზონათაშორისი გადასვლების შესაბამისი უგანზომილებო ოსცილატორული ძალები

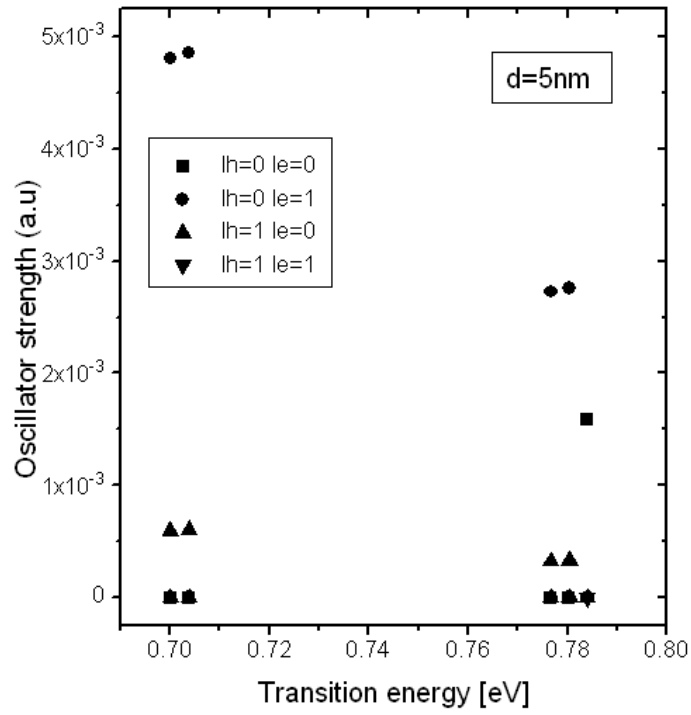
სფერული კვანტური წერტილებისათვის გადასვლები, რომლებიც შეესაბამება ელექტრონისა და ხვრელის მდგომარეობებს ერთი და იგივე ორბიტალური რიცხვით აკრძალულია. რაც შეეხება გადასვლებს ოსცილატორულ ძალებს კონუსური და ცილინდრული კვანტური წერტილებისათვის ისინი მაქსიმალურია თუ გადასვლის შესაბამის ხვრელის და ელექტრონის მდგომარეობას ერთმანეთისაგან ერთით განსხვავებული ორბიტალური მომენტი აქვთ. კონუსური და ცილინდრული კვანტური წერტილების შესაბამისი ოსცილატორული ძალები სფერული კვანტური წერტილის ოსცილატორულ ძალებზე დაახლოებით 2 რიგით დიდია.

ურთიერთქმედი კვანტური წერტილები

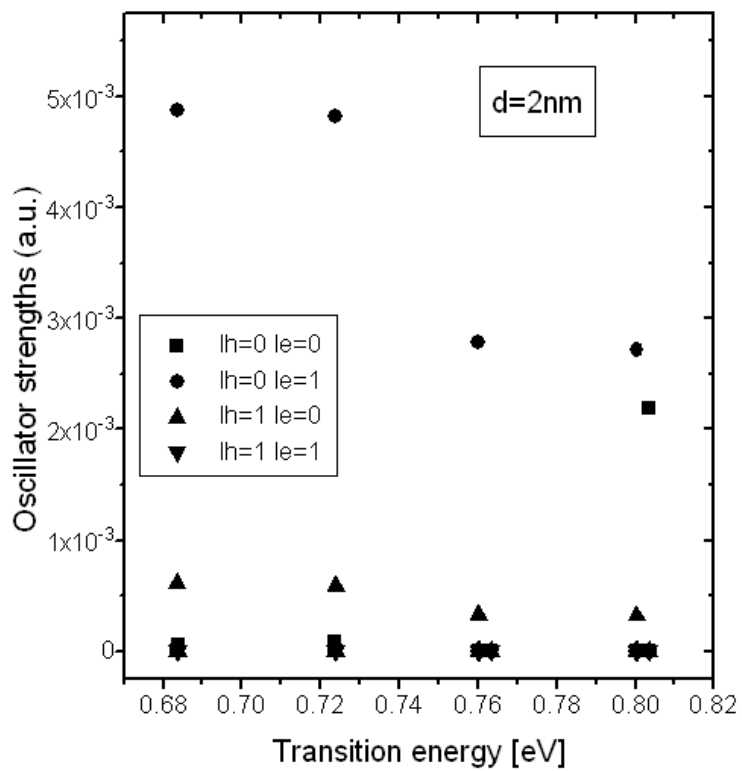
ჩვენ ასევე შევისწავლეთ ორი ურთიერთქმედი *InAs/GaAs* ცილინდრული ფორმის კვანტური წერტილის ოსცილატორული ძალები კვანტურ წერტილთა შორის სხვადასხვა მანძილის შემთხვევაში [89]. ცილინდრული კვანტური წერტილის რადიუსი და სიმაღლე ერთმანეთის ტოლია და 5ნმ-ს უდრის. ქვემოთ ნახაზებზე მოცემულია კვლევის შედეგები:



ნახ. 2.27 ა)



б.б. 2.27 б)



ნახ. 2.27 გ)

ნახ. 2.27 ურთიერთქმედი ცილინდრული კვანტური წერტილების ზონათაშორისი გადასვლების შესაბამისი უგანზომილებო ოსცილატორული ძალები ა) $d = 76$ ბ) $d = 5$ გ) $d = 2$

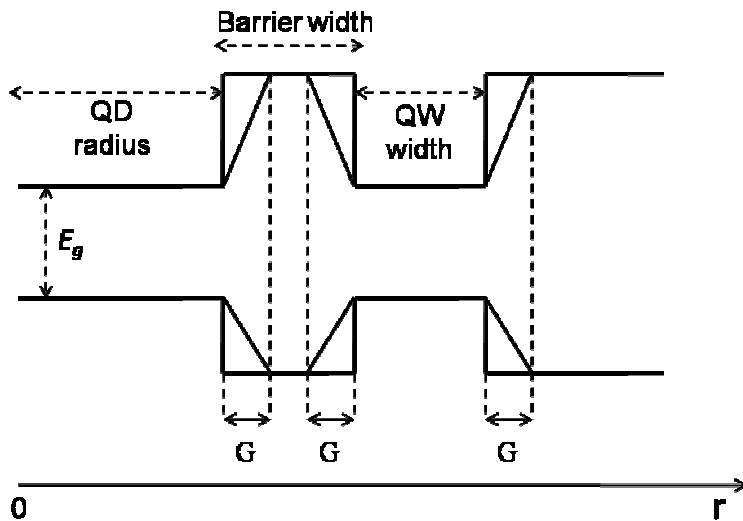
ნახ. 2.27-ზე ვხედავთ, რომ სისტემის ოსცილატორული ძალები განხილული მანძილებისთვის არ არიან დამოკიდებული კვანტურ წერტილთა შორის მანძილზე, თუმცა გადასვლის ენერგიები კვანტურ წერტილთა ურთიერთქმედების გამო წანაცვლებული არიან მცირე და დიდი ენერგიებისაკენ არაურთიერთქმედ კვანტურ წერტილებთან შედარებით. ჩვენ ვნახეთ, რომ ოსცილატორული ძალები z ღერძის პერპენდიკულარულად თითქმის არ არიან დამოკიდებული კვანტურ წერტილთა შორის მანძილზე, მეორეს მხრივ ოსცილატორული ძალები z -ის გასწვრივ $d = 2$ -სათვის 3 რიგით დიდია ვიდრე $d = 7$ შემთხვევაში.

თ ა ვ ი მ ე ს ა მ ე

§3.1 კვანტური წერტილი კვანტური ორმო (QDQW)

ტექნოლოგიების გნვითარებამ შესაძლებელი გახადა ექსპერიმენტალურად დამზადებულიყო კვანტური წერტილი, რომლის გარშემო კვანტური ორმო იქნებოდა. აღნიშნული სტრუქტურა პირველად ეიხმიულერმა, მიუსმა და ველერმა შექმნეს [90]. მათ გააკეთეს CdS გული, რომელიც დაფარეს HgS -ის ფენით, რომელიც თავის მხრივ დაფარეს ისევ CdS -ით. ასეთ სისტემებში კვანტური წერტილის გარდა, რომელსაც შუაში მყოფი გული წარმოადგენს შესაძლებელია გვექნოდეს ერთი ან რამდენიმე (მულტი) [91] სფერული კვანტური ორმო. ამ ტიპის სტრუქტურებს კვანტური წერტილი კვანტური ორმო ეწოდებათ (quantum dot quantum well).

წინამდებარე ნაშრომში ჩვენ თეორიულად გამოვიკვლიეთ HgS / CdS / HgS / CdS კვანტური წერტილი კვანტური ორმო [92]. სტრუქტურას აქვს HgS-ის გული, CdS-ის შრე, HgS -ს შრე და საბოლოოდ სტრუქტურა იმყოფება CdS -ში. ანუ სისტემა შედგება ერთი კვანტური წერტილისა და მის ირგვლივ მდებარე კვანტური ორმოსაგან. ნაშრომში შესწავლილია მართკუთხა და სხვადასხვა წრფივად დახრილი პოტენციალური ბარიერის მქონე სტრუქტურა. აღნიშნული სტრუქტურის სქემატური გამოსახულება მოცემულია ნახ. 3.1. სისტემის წრფივად დახრილი სტრუქტურის ფორმულა შემდეგნაირად შეგვიძლია წარმოვადგინოთ: $Hg_{1-x}Cd_xS$, სადაც x იცვლება კვანტური წერტილი კვანტური ორმოს ცენტრიდან მანძილის მიხედვით ისე, რომ მიიღება სხვადასხვა დახრის პოტენციალის მქონე კვანტური წერტილი კვანტური ორმო. დახრილი პოტენციალის მქონე სტრუქტურები ექსპერიმენტალურად ხორციელდება მოლეკულურ-სხივიური ეპიტაქსიისა და ორთქლის ქიმიური დეპოზიციის გზით [93-94].

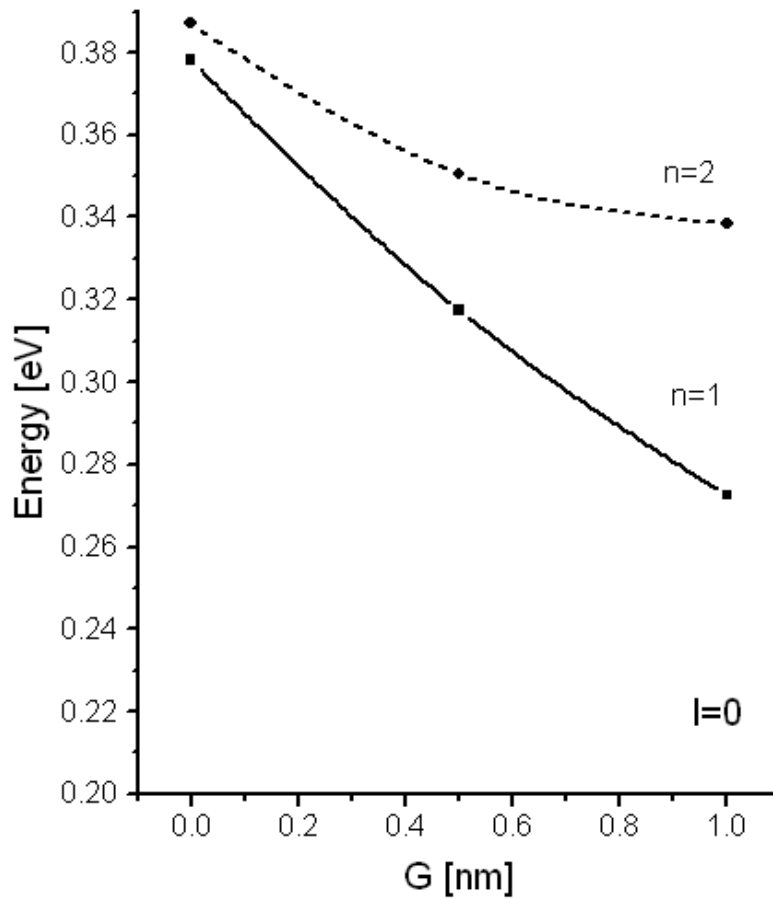


ნახ. 3.1 კვანტური წერტილი კვანტური ორმოს სქემატური გამოსახულება. G ბარიერის დახრის სიგანეა

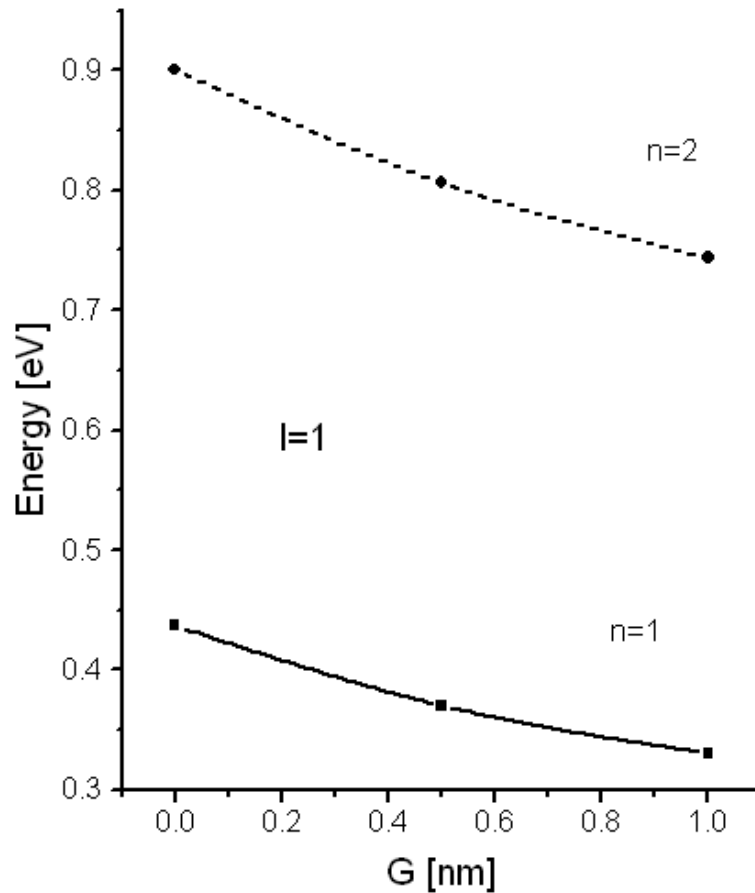
სისტემის პარამეტრები აღებულია შემდეგნაირად [95] HgS - $m_e^* = 0.036m_e$, $m_h^* = 0.044m_e$, $E_g = 0.5eV$ CdS - $m_e^* = 0.2m_e$, $m_h^* = 0.7m_e$, $E_g = 2.5eV$. გამტარებლობის ზონათა შორის სხვაობაა $V_e = 1.35eV$ სავალენტო ზონათა შორის სხვაობა $V_h = 0.65eV$ [96]. კვანტური წერტილის რადიუსი 3 ნმ-ია, კვანტური ბარიერის და კვანტური ორმოს სიგანე - 2-2 ნმ.

ნაშრომში გამოკვლეულია სისტემის ენერგეტიკული დონეები, ექსიტონთა კულონური ურთიერთქმედება და ზონათაშორისი გადასვლების შესაბამისი უგანზომილებო ოსცილატორული ძალები ბარიერის დახრის სხვადასხვა მნიშვნელობებისთვის: $G = 0.5$ ნმ, 1.0 ნმ. 0 ნმ. შესწავლილია აღნიშნული სისტემის თვისებების ცვლილება G ბარიერის დახრის სიგანესთან მიმართებაში.

თითოეული ორბიტალური რიცხვისთვის $l = 0$ და $l = 1$ სათვის შესწავლილ QDQW სტრუქტურას აქვს ელექტრონებისა და ხვრელებისათვის ორ-ორი ბმული მდგომარეობა. QDQW სისტემის ენერგიების დამოკიდებულება ბარიერის დახრის სიგანეზე მოცემულია ნახ. 3.2-3.3



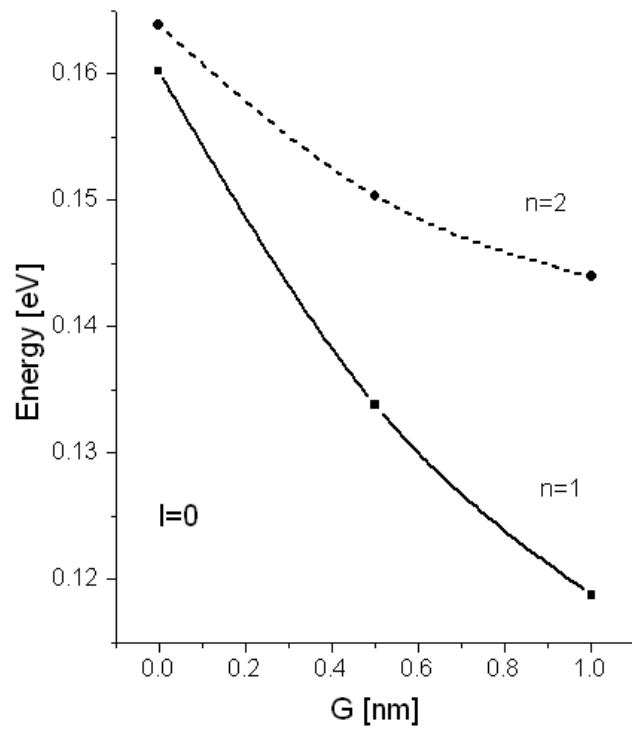
ნახ. 3.2 ა)



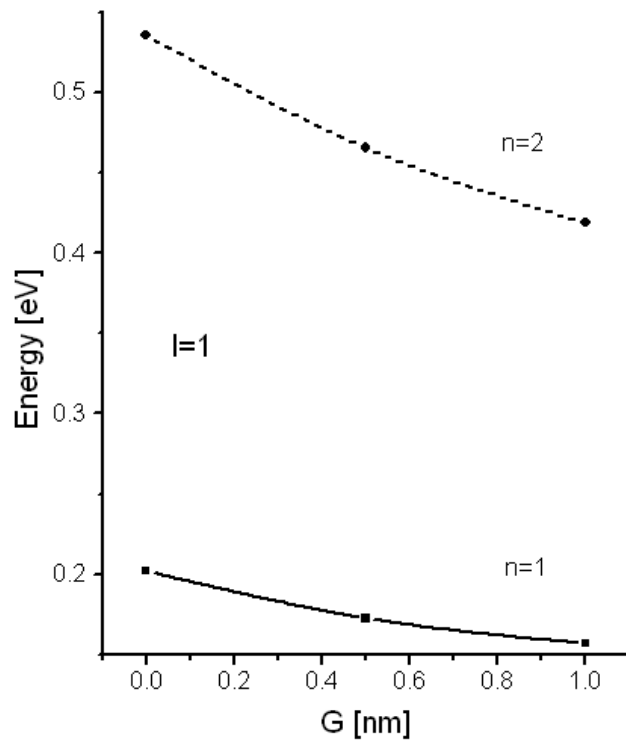
ნახ. 3.2 ბ)

ნახ. 3.2 QDQW სისტემაში ელექტრონის ენერგიების დამოკიდებულება G - ბარიერის დახრის სიგანეზე ა) - ორბიტალური კვანტური რიცხვით $l = 0$
 ბ) - ორბიტალური კვანტური რიცხვით $l = 1$

როგორც ნახ. 3.2-ზე ვხედავთ QDQW სისტემის ელექტრონთა ენერგიები მაქსიმალურია მართკუთხა ბარიერის შემთხვევაში და ბარიერის დახრის უბნის ზრდასთან ერთად მცირდება. აღსანიშნავია, რომ ელექტრონთა დონეები $l = 0$ შემთხვევაში მთავარი კვანტური რიცხვებით $n = 1$, $n = 2$ ენერგიის მიხედვით ერთმანეთთან ახლოს იმყოფებიან და პოტენციალის დახრის უბნის ზრდით ერთმანეთს შორდებიან. ხოლო $l = 1$ მდგომარეობის შესაბამისი ელექტრონთა ენერგიები თანაბარი ტემპით მცირდებიან ანუ მათ შორის სხვაობა თითქმის არ არის დამოკიდებული პოტენციალის დახრის უბნის სიგანეზე. ნახ. 3.3-ზე მოცემულია ნახ. 3.2-ის ანალოგიური მონაცემები ხვრელთათვის.



б.б. 3.3 а)



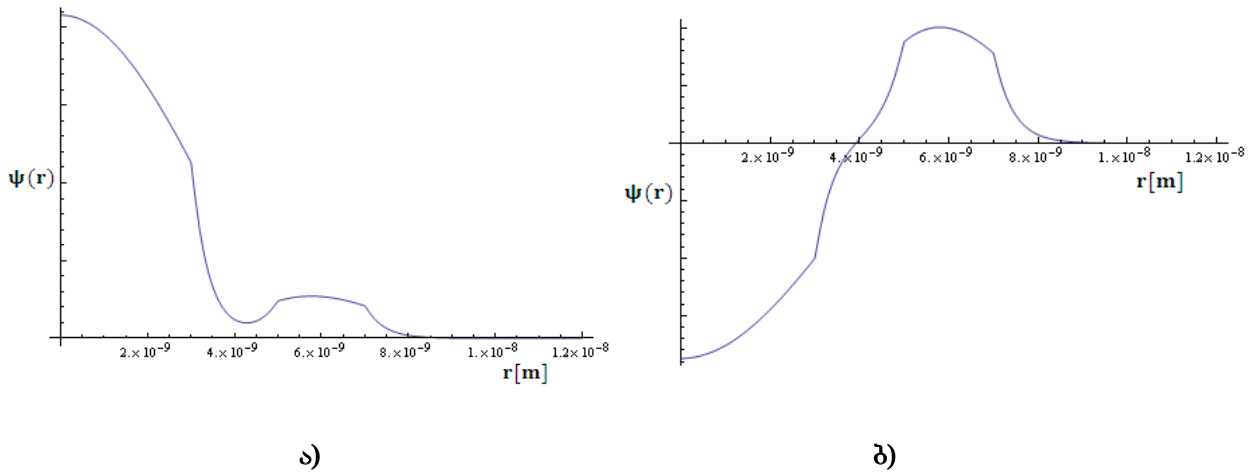
б.б. 3.3 б)

ნახ. 3.3 QDQW სისტემაში ხვრელთა ენერგიების დამოკიდებულება G - ბარიერის დახრის სიგანეზე ა) - ორბიტალური კვანტური რიცხვით $l = 0$ ბ) - ორბიტალური კვანტური რიცხვით $l = 1$

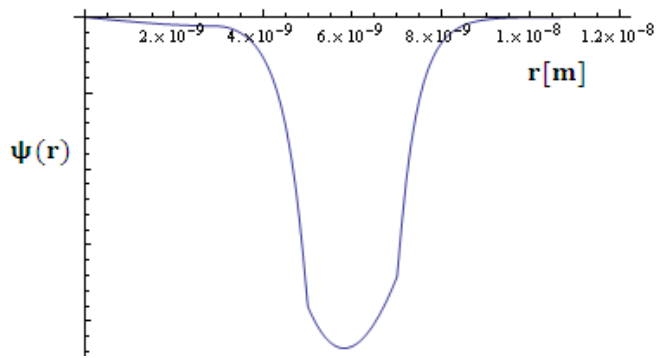
ხვრელების შემთხვევაშიც ვხედავთ ენერგიების ანალოგიური ხასიათის დამოკიდებულებას პოტენციალის დახრის სიგანესთან მიმართებაში, რაც ზემოთ ელექტრონებისთვის აღენიშნეთ. ახსნა იმისა თუ რატომ იზრდება სხვაობა $n = 1$ და $n = 2$ ენერგეტიკულ მდგომარეობებს შორის წარმოდგენილია მომდევნო პარაგრაფში QDQW -ის ტალღური ფუნქციების განხილვისას.

§3.2 QDQW სისტემის ტალღური ფუნქციები

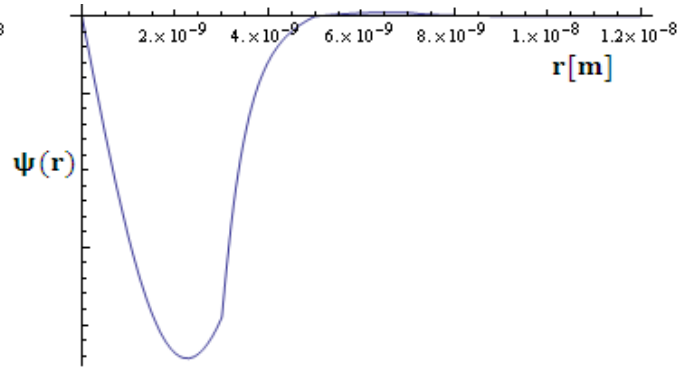
ქვემოთ წარმოდგენილია QDQW სისტემის ელექტრონთა ტალღური ფუნქციები.



ნახ. 3.4 QDQW-ს ელექტრონთა ტალღური ფუნქციები $G = 0$ ნმ, კვანტური რიცხვებით $l = 0$ ა) $n = 1$ ბ) $n = 2$

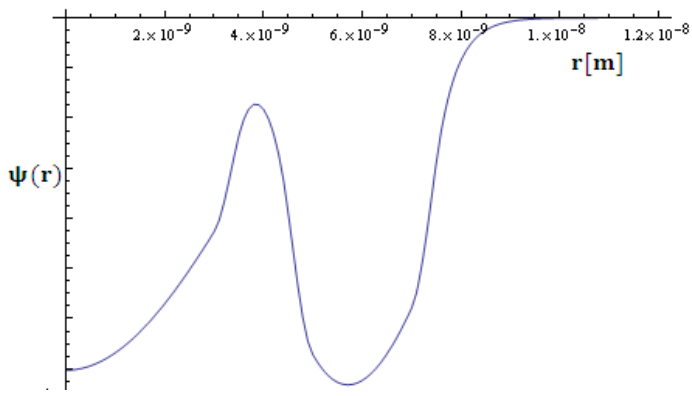


ა)

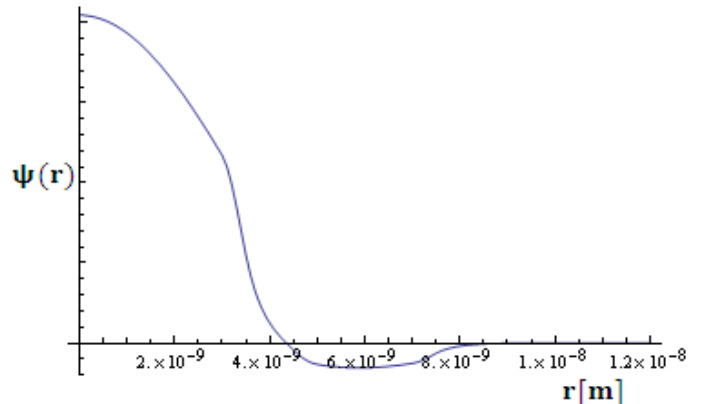


ბ)

ნახ. 3.5 QDQW-ს ელექტრონთა ტალღური ფუნქციები $G = 0$ ნმ, კვანტური რიცხვებით $l = 1$ ა) $n = 1$ ბ) $n = 2$

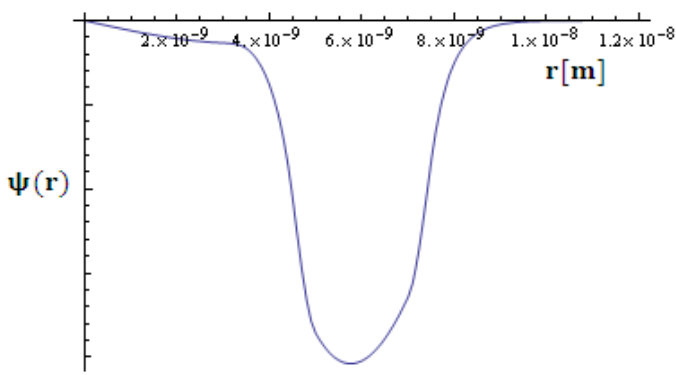


ა)

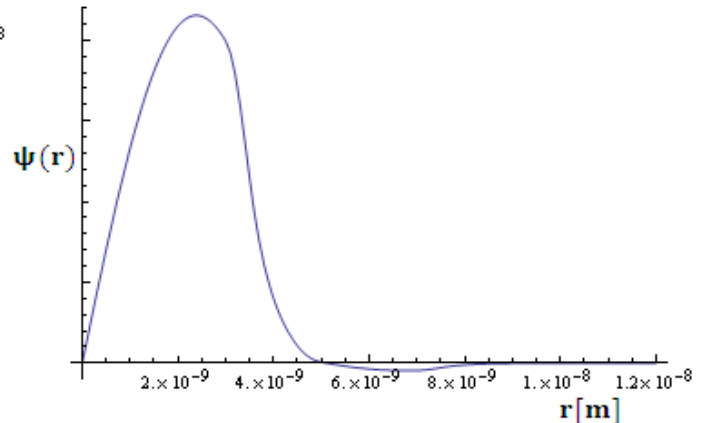


ბ)

ნახ. 3.6 QDQW-ს ელექტრონთა ტალღური ფუნქციები $G = 0.5$ ნმ, კვანტური რიცხვებით $l = 0$ ა) $n = 1$ ბ) $n = 2$

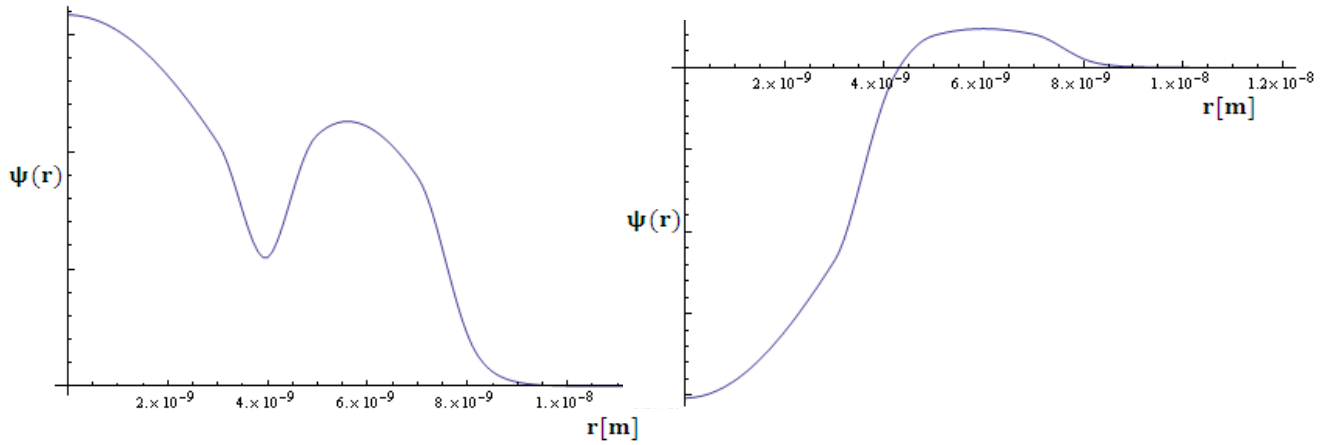


ა)



ბ)

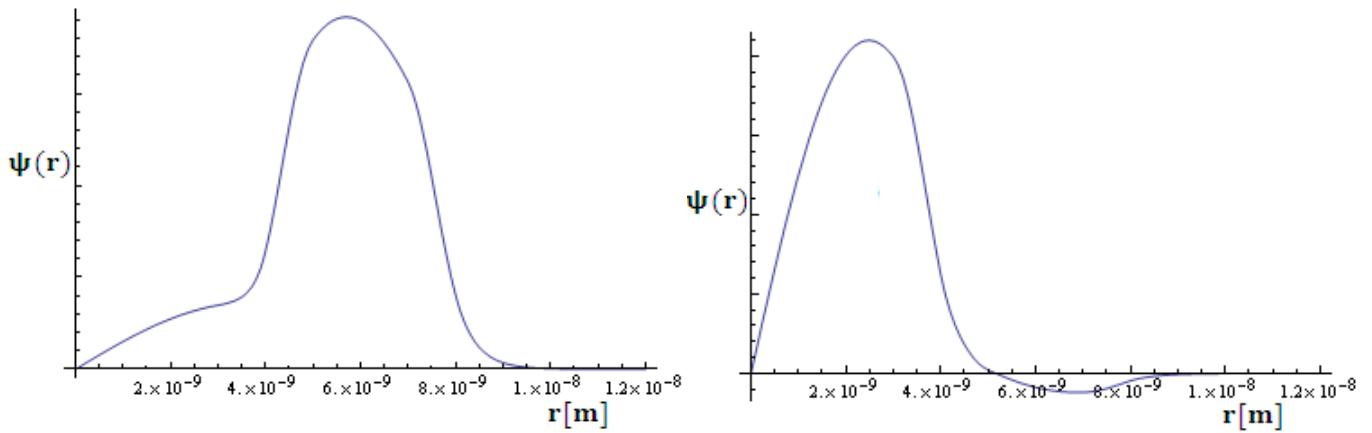
ნახ. 3.7 QDQW-ს ელექტრონთა ტალღური ფუნქციები $G = 0.5$ ნმ, კვანტური რიცხვებით $l = 1$ ა) $n = 1$ ბ) $n = 2$



ა)

ბ)

ნახ. 3.8 QDQW-ს ელექტრონთა ტალღური ფუნქციები $G = 1$ ნმ, კვანტური რიცხვებით $l = 0$ ა) $n = 1$ ბ) $n = 2$



ა)

ბ)

ნახ. 3.9 QDQW-ს ელექტრონთა ტალღური ფუნქციები $G = 1$ ნმ, კვანტური რიცხვებით $l = 1$ ა) $n = 1$ ბ) $n = 2$

დაეუბრუნდეთ წინა პარაგრაფში შენიშნულ ფაქტს, რომ $n = 1$ და $n = 2$ მთავარი კვანტური რიცხვების შესაბამის ენერგიებს შორის სხვაობა $l = 0$ ისათვის ბარიერის დახრის უბნის ზრდასთან ერთად იზრდება, ხოლო $l = 1$ -ის პირობებში თითქმის უცვლელი რჩება. შევეცადოთ ფიზიკურად ავხსნათ ეს შედეგი. როგორც კვანტური მექანიკიდან არის ცნობილი კვანტური სისტემის მდგომარეობის ენერგიაზე ზოგად წარმოდგენას გვაძლევს ამ მდგომარეობის ტალღური ფუნქცია. რაც უფრო სწრაფად იცვლება ტალღური ფუნქცია ფიზიკური სივრცის ფიქსირებულ არეში მით მეტია შესაბამისი კვანტური დონის ენერგია, ვინაიდან ჰამილტონიანის ოპერატორის კინეტიკურ წევრი, რომელიც წარმოებულს შეიცავს სწრაფად ცვალებადი ტალღური ფუნქციაზე მოქმედებით მეტ ენერგიებს იძლევა.

თუ დავაკვირდებით $G = 0$ ნმ-ის შესაბამის ტალღურ ფუნქციებს მთავარი კვანტური რიცხვებით - $n = 1$ და $n = 2$ და ორბიტალური კვანტური რიცხვით - $l = 0$ დავინახავთ, რომ ამ ორი კვანტური მდგომარეობის ტალღური ფუნქციები დაახლოებით ერთნაირი სიჩქარით იცვლებიან ამიტომ დონეთა ენერგიებიც ერთმანეთისგან მცირედ განსხვავდებიან. ხოლო რაც შეეხება $G = 0.5$ ნმ და $G = 1$ ნმ-ის შესაბამის ტალღურ ფუნქციებს, მათ შემთხვევაში თვალი ადვილად შენიშნავს, რომ ისინი განსხვავებული სისწრაფით იცვლებიან შესაბამისად მათ უფრო მეტად განსხვავებული ენერგიები უნდა შეესაბამებოდეთ.

ანალოგიური მსჯელობით აიხსნება ის დაახლოებით თანაბარი სხვაობა $n = 1$ და $n = 2$ დონეებს შორის $l = 1$ შემთხვევაში. მიმდინარე პარაგრაფში წარმოდგენილი ნახაზებიდან კარგად ჩანს, რომ $l = 1$ ის შესაბამისი ტალღურ ფუნქციები QDQW არეზე დაახლოებით ერთნაირი სიჩქარით იცვლებიან.

QDQW -ის ტალღურ ფუნქციებზე დაკვირვებით ვადგენთ, რომ ნაწილაკების ლოკალიზაცია გულში და ორმოში შესამჩნევად განსხვავდება სხვადასხვა კვანტური მდგომარეობებისათვის. კვანტური მექანიკიდან როგორც ცნობილია, რაც უფრო მეტია ნაწილაკის ენერგია მით მეტია მისი უნარი კვანტურ ბარიერში გასვლისა და შესაბამისად - მისი ლოკალიზაციის არე ფართე, თუმცა როგორც ნახაზებიდან ვხედავთ $l = 1$ ის შესაბამისი მდგომარეობები უფრო ლოკალიზებულია გულში ან ორმოში ვიდრე მდგომარეობები $l = 0$ -ით. თუ დავაკვირდებით ტალღური ფუნქციების ყოფაქცევას ზემოთ წარმოდგენილ ნახაზებზე შევამჩნევთ, რომ იგი გარკვეულ უბნებზე სწრაფად იცვლება. ტალღური ფუნქციების ეს თავისებურება, რომელიც განსაკუთრებით თვალსაჩინოა $G = 0$ ნმ-ის შესაბამის ნახაზებზე გამოწვეული ნაწილაკების ეფექტური მასის ცვლილებით კვანტური წერტილისა და კვანტური ორმოს საზღვრებზე.

§3.3 QDQW-ის ელექტრონ-ხვრელის კულონური ურთიერთქმედება

აქამდე ზევით ყველგან ჩვენ არ ვითვალისწინებდით კულონურ ურთიერთქმედებას ელექტრონსა და ხვრელს შორის, ვინაიდან ჩვენს მიერ განხილული სისტემები ექსიტონთა ბორის რადიუსზე მცირე ზომისანი იყვნენ. ამ შემთხვევაში კი დამატვევებელი პოტენციალია არსებითი, კულონური ურთიერთქმედება კი მასთან შედარებით მცირე. რადგან ელექტრონები და ხვრელები ელექტრულად დამუხტული ნაწილაკებია მათ შორის არსებობს ელექტრული ანუ კულონური ურთიერთქმედება. ურთიერთქმედი ელექტრონ-ხვრელის კულონური ენერგია ნივთიერებაში შემდეგნაირად გამოითვლება [97]:

$$E_{Coul} = \frac{e^2}{\epsilon} \int \frac{|\Psi_h(\vec{r}_h)|^2 |\Psi_e(\vec{r}_e)|^2}{|\vec{r}_h - \vec{r}_e|} d^3r_h d^3r_e \quad (3.1)$$

სადაც $\Psi_h(\vec{r})$ და $\Psi_e(\vec{r})$ ხვრელისა და ელექტრონის ტალღური ფუნქციებია შესაბამისად. ϵ - დიელექტრიკული კონსტანტაა.

QDQW ამოცანას ვხსნით სფერულ კოორდინატებში სასრულ ელემენტთა მეთოდის გამოყენებით, როგორც ეს პირველ თავში არის წარმოდგენილი. სფერულ კოორდინატებში უნდა გამოისახოს ასევე $\frac{1}{|\vec{r}_h - \vec{r}_e|}$ და $d^3r_h d^3r_e$. პირდაპირი ჩასმით შეიძლება ნახვენები იქნას, რომ სფერულ კოორდინატებში $(r_1, \theta_1, \varphi_1)$ და $(r_2, \theta_2, \varphi_2)$ წერტილებს შორის L მანძილი შემდეგნაირად გამოისახება:

$$L = \{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2[\sin\theta_1\sin\theta_2\cos(\varphi_1 - \varphi_2) + \cos\theta_1\cos\theta_2]\}^{1/2}$$

ანუ გვაქვს:

$$\frac{1}{|\vec{r}_h - \vec{r}_e|} = \{r_h^2 + r_e^2 - 2r_hr_e[\sin\theta_h\sin\theta_e\cos(\varphi_h - \varphi_e) + \cos\theta_h\cos\theta_e]\}^{-1/2} \quad (3.2)$$

მოცულობის ელემენტისათვის გვაქვს:

$$d^3r_h d^3r_e = r_h^2 r_e^2 \sin\theta_h \sin\theta_e d\theta_h d\theta_e d\varphi_h d\varphi_e dr_h dr_e \quad (3.3)$$

ჩვენ გამოვივალეთ ელექტრონ-ხვრელის არაეკრანირებული კულონური ურთიერთქმედების ენერგია $HgS / CdS / HgS / CdS$ კვანტური წერტილი კვანტური ორმოსათვის პოტენციალის დახრის სხვადასხვა სიგანის შემთხვევაში (3.1) ფორმულის გამოყენებით მასში (3.2) და (3.3) გამოსახულებების გათვალისწინებით. ნაწილაკთა კულონური ურთიერთქმედების მნიშვნელობები მოცემულია 1-2 ცხრილებში:

ელექტრონის დონის ნომერი	ხვრელის დონის ნომერი	არაეკრანირებული კულონური ენერგია ($G = 0$ მმ)	არაეკრანირებული კულონური ენერგია ($G = 0.5$ მმ)	არაეკრანირებული კულონური ენერგია ($G = 1$ მმ)
1	1	0.3402	0.3386	0.3957
1	2	0.5908	0.4314	0.4559
2	1	0.3255	0.3074	0.3484
2	2	0.5068	0.5832	0.5561

ცხრილი. 1 QDQW -ის ელექტრონ-ხვრელის $l = 0$ -ის შესაბამისი არაეკრანირებული კულონური ურთიერთქმედების ენერგია (eV)

ელექტრონის დონის ნომერი	ხვრელის დონის ნომერი	არაეკრანირებული კულონური ენერგია ($G = 0$ მმ)	არაეკრანირებული კულონური ენერგია ($G = 0.5$ მმ)	არაეკრანირებული კულონური ენერგია ($G = 1$ მმ)
1	1	0.3851	0.3588	0.3669
1	2	0.3035	0.3057	0.3140
2	1	0.3025	0.3084	0.3159
2	2	0.5229	0.5554	0.5193

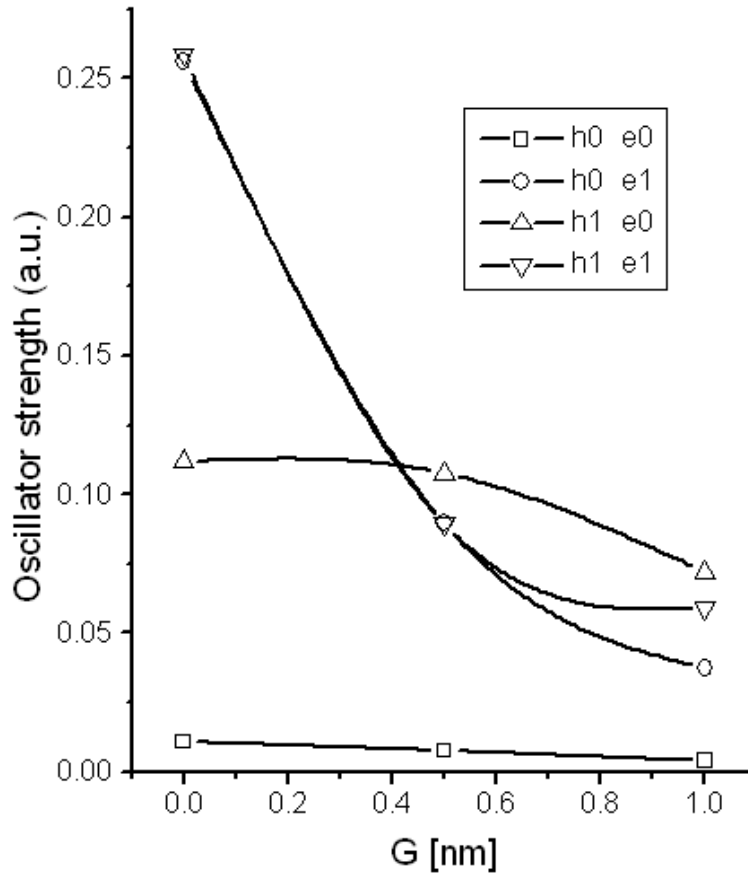
ცხრილი. 2 QDQW -ის ელექტრონ-ხვრელის $l = 1$ -ის შესაბამისი არაეკრანირებული კულონური ურთიერთქმედების ენერგია (eV)

რადგან კულონური ურთიერთქმედება მიზიდულობის ხასიათისაა იგი ექსიტონის ენერგიას ამცირებს. ცხრილებში წარმოდგენილია არაეკრანირებული კულონური ურთიერთქმედების ენერგია. თუ გავითვალისწინებთ, რომ $\epsilon_{Hgs} = 11.4$, $\epsilon_{Cds} = 5.5$ [95] მივიღებთ, რომ კულონური ურთიერთქმედების შესაბამისი ენერგია კვანტური დატყვევების შესაბამის ენერგიაზე ერთი რიგით მცირეა.

ნაშრომში მოცემული მეთოდით, ჩვენს მიერ გამოთვლილი კულონური ურთიერთქმედების სისწორის შესამოწმებლად გამოვთვალეთ ფერეირას და პროეტოს მიერ ანალიზური გამოთვლებით ნაპოვნი კულონური ურთიერთქმედების ენერგიები [57] და დავრწმუნდით, რომ ჩვენს მიერ გამოთვლილი შედეგები კარგ თანხვედრაშია აღნიშნულ სტატიაში მიღებულ შედეგებთან, რაც ჩვენი გამოთვლების სიზუსტეს ადასტურებს.

§3.4 QDQW-ის ზონათაშორისი გადასვლების ოსცილატორული ძალები

ამ პარაგრაფში განვიხილავთ ჩვენს მიერ შესწავლილ $HgS / CdS / HgS / CdS$ კვანტური წერტილი კვანტური ორმოს ზონათაშორისი გადასვლების შესაბამის უგანზომილებო ოსცილატორულ ძალებს. ქვემოთ წარმოდგენილ ნახაზზე მოცემულია შესწავლილი სისტემის ოსცილატორული ძალების დამოკიდებულება სისტემის პოტენციალის დახრის სიგანეზე.



ნახ. 3.10

QDQW-ის ოსცილატორული ძალების დამოკიდებულება პოტენციალის G დახრის სიგანეზე

ნახ. 3.10 - ზე h აღნიშნავს ხერელს და e - ელექტრონს. მაგალითისათვის $h0 e1$ აღნიშნავს ზონათაშორის გადასვლას, რომელიც შეესაბამება $l = 0$ ორბიტალური რიცხვის მქონე ხერელსა და $l = 1$ ორბიტალური რიცხვის მქონე ელექტრონის მდგომარეობებს შორის გადასვლას. როგორც ნახ. 3.10 გვიჩვენებს QDQW სტრუქტურის გადასვლებს შორის ყველაზე მცირე ოსცილატორული ძალა გააჩნია $h0 e0$ გადასვლას, ამასთან მისი სიდიდე თითქმის დამოუკიდებელია პოტენციალის დახრაზე. $h0 e1$ და $h1 e1$ გადასვლები მართკუთხა პოტენციალის

შემთხვევაში აღწევენ მაქსიმალურ მნიშვნელობას, ხოლო პოტენციალის დახრის ზრდასთან ერთად მცირდებიან. $h1 e0$ გადასვლა პოტენციალის დახრასთან ერთად მცირდება მაგრამ შედარებით ნელა ვიდრე $h0 e1$ და $h1 e1$.

ოპტიკურად აქტიური QDQW სტრუქტურის მისაღებად უფრო ეფექტურია მართკუთხა პოტენციალის გამოყენება, თუმცა ვინაიდან პოტენციალზე დამოკიდებულია ასევე სისტემის ენერგიები, ამიტომ საჭირო ენერგიების მისაღებად კონკრეტული მიზნების მისაღწევად შეიძლება გამოყენებული იქნას დახრილი პოტენციალი.

მიღებული შედეგები და დასკვნები

1. ნაშრომში თეორიულად შესწავლილა კვანტური წერტილების და ახალი - დახრილი კვანტური წერტილი კვანტური ორმოს (QDQW) ელექტრონული მდგომარეობები და ზონათაშორისი გადასვლების ოსცილატორული ძალები ასევე ექსიტონის კულონური ურთიერთქმედება. სისტემებისათვის ამოხსნილია შრედინგერის სტაციონალური განტოლება სასრულ ელემენტთა მეთოდის გამოყენებით კოორდინატზე დამოკიდებული ეფექტური მასის მიახლოებაში პოტენციალის სასრულობის გათვალისწინებით. ეფექტური მასის მიახლოება, რომელიც გამოყენებულია ნაშრომში, გამოკვლეული ზომის კვანტური წერტილების შემთხვევაში საკმაოდ კარგ შედეგებს იძლევა და ექსპერიმენტალურ შედეგებთან კარგ თანხმობაშია, ამან საფუძველი მოგვცა გვერდში ეფექტური მასის მოდელით და საკმაოდ სიზუსტით მიგვეღო შედეგები, რომლებიც ზოგადად უფრო რთული მოდელების გამოყენებას მოითხოვენ. შემდეგ საფეხურზე ანუ შრედინგერის განტოლების ამოხსნისას მივმართეთ სასრულ ელემენტთა მეთოდს, რომელიც გამოვიყენეთ სფერულ და ცილინდრულ კოორდინატებში საკვლევი სისტემის სიმეტრიის შესაბამისად. სიმეტრიის არსებობის შედეგად მნიშვნელოვნად შემცირდა კომპიუტერულ რესურსები. აღსანიშნავია სასრულ ელემენტთა მეთოდის სიმარტივე, რაც კოორდინატზე დამოკიდებული ეფექტური მასის და პოტენციალის მოხერხებულ მანიპულაციის საშუალებას გვაძლევს, ასევე ადვილად ვითვალისწინებთ საკვლევი სისტემის გეომეტრიულ ფორმებსაც.
2. კვანტური წერტილების თვისებების მათ გეომეტრიულ ფორმაზე დამოკიდებულების შესწავლის მიზნით გამოკვლეულია იდენტური მოცულობის მქონე სფერული, კონუსური და ცილინდრული კვანტური წერტილები, ისე რომ ცილინდრულ და კონუსურ კვანტურ წერტილებს აქვთ იდენტური სიმაღლე რაც სფერული კვანტური წერტილის დიამეტრის ტოლია. ნაპოვნია, რომ აღნიშნული კვანტური წერტილებისათვის მცირედი გამონაკლისის გარდა ფიქსირებული ორბიტალური და მთავარი კვანტური რიცხვის შემთხვევაში სფერულ კვანტურ წერტილებში ელექტრონთა და ხვრელთა ენერგიები მაქსიმალურია ხოლო ცილინდრულ კვანტურ წერტილში მინიმალური. როგორც კვლევაში აჩვენა კონუსური და ცილინდრული კვანტური წერტილების ენერგიები ფიქსირებული ორბიტალური რიცხვით დაახლოებით წრფივად იზრდება მთავარი კვანტური რიცხვის ზრდასთან ერთად. ასევე აღმოჩნდა, რომ უმდაბლესი ენერგეტიკული დონეები ელექტრონთა და ხვრელთათვის ნაკლებად არის დამოკიდებული კვანტური წერტილის ფორმაზე. ცილინდრული კვანტური წერტილების ტალღური ფუნქციები ხასიათდებიან სიმეტრიით კვანტური წერტილის გეომეტრიული ცენტრის მიმართ. სფერული კვანტური წერტილისათვისათვის თუ ნაწილაკის ორბიტალური კვანტური რიცხვი $l = 0$, მაშინ ნაწილაკის აღმოჩენის ალბათობა თავის მაქსიმალურ მნიშვნელობას კვანტური წერტილის გეომეტრიულ ცენტრში აღწევს, ხოლო თუ $l = 1$ მაშინ იგი ცენტრიდან წანაცვლებულია. ცილინდრული და კონუსური კვანტური წერტილებისათვის კი ნაწილაკების განაწილების

აღბათობის მაქსიმუმი $l = 0$ შემთხვევაში კვანტური წერტილის სიმეტრიის ღერძზე მდებარეობს.

3. თუ კონუსურ კვანტურ წერტილებს, ერთი და იგივე მოცულობა და ფუქე-სიმაღლის სხვადასხვა ფარდობა გააჩნიათ, მაშინ სიმაღლის შემცირებით (რადიუსის გაზრდით) ნაწილაკთა ენერგიები იზრდება და ეს ცვლილება დაბალი დონეებისათვის უფრო მცირეა ვიდრე შედარებით მაღალი დონეებისათვის.
4. ნაშრომში შესწავლილი ორი ურთიერთქმედი ცილინდრული ფორმის იდენტური *InAs/GaAs* კვანტური წერტილები თუ უსასრულოდ არიან დაშორებული მაშინ მათი ენერგეტიკული დონეები გადაგვარებულია. კვანტური წერტილების დაახლოებით ხდება გადაგვარების მოხსნა და ენერგეტიკული დონეები იხლიჩება. როგორც კვლევაში აჩვენა ელექტრონებისთვის ურთიერთქმედება დაახლოებით 6 ნმ მანძილზე ხდება არსებითი ხოლო ხვრელებისთვის დაახლოებით 2-4 ნმ-ზე იმის მიხედვით თუ რა ორბიტალური კვანტური რიცხვის მქონე დონეზეა საუბარი. ხვრელების ურთიერთქმედების მანძილი მცირეა ელექტრონთა ურთიერთქმედების მანძილზე იმიტომ, რომ ხვრელებისთვის გვირავული ეფექტი უფრო სუსტია, რაც ხვრელების დიდი ეფექტური მასით აიხსნება. კვანტური წერტილების დაახლოებისას ენერგიის გახლეჩა იმდენად დიდი შეიძლება გახდეს, რომ $l = 0$ დონის ენერგია $l = 1$ დონის შესაბამის ენერგიაზე დიდი აღმოჩნდეს.
5. ოსცილატორული ძალები სფერული კვანტური წერტილისთვის ზონათაშორისი გადასვლებისათვის ერთი და იგივე ორბიტალური რიცხვის მქონე დონეებს შორის აკრძალულია. კონუსური და ცილინდრული კვანტური წერტილების ოსცილატორული ძალები სფერული კვანტური წერტილის შესაბამის ოსცილატორულ ძალებზე 2 რიგით დიდია.
6. ურთიერთქმედი კვანტური წერტილების შესაბამისი ოსცილატორული ძალები ნაშრომში განხილული მანძილებისთვის არ არიან დამოკიდებული კვანტურ წერტილთა შორის მანძილზე, თუმცა გადასვლის ენერგიები კვანტურ წერტილთა ურთიერთქმედების გამო წანაცვლებული არიან მცირე და დიდი ენერგიებისაკენ არაურთიერთქმედ კვანტურ წერტილებთან შედარებით.
7. QDQW სისტემის ენერგიები ბარიერის დახრის სიგანის გაზრდით მცირდება. მართკუთხა პოტენციალის შემთხვევაში როცა $l = 0$ ელექტრონთა დონეები ისევე როგორც ხვრელთა დონეები ენერგეტიკულად ახლოს არიან და ბარიერის დახრის სიგანის ზრდასთან ერთად ერთმანეთს შორდებიან. ანუ QDQW სისტემის უმცირესი ენერგეტიკული დონეები ძლიერად არიან დამოკიდებული პოტენციალის ცვლილებაზე, განსხვავებით იმისა რაც კვანტურ წერტილებში ვნახეთ, სადაც უმცირესი ენერგიები ნაკლებად იყვნენ დამოკიდებული კვანტური წერტილის გეომეტრიულ ფორმებზე. QDQW სისტემის მაღალი ენერგეტიკული დონეები ($l = 1$) უფრო ლოკალიზებულებია ვიდრე დაბალი დონეები ($l = 0$).

8. შესწავლილ QDQW სისტემაში ელექტრონ-ხვრელის ურთიერთქმედების კულონური ენერგია ერთი რიგით მცირეა მათ კვანტურ დატყვევების შესაბამის ენერგიასთან შედარებით.

9. QDQW სისტემას გააჩნია დიდი ზონათაშორისი გადასვლების შესაბამისი ოსცილატორული ძალები და ზოგიერთი მათგანი პოტენციალის დახრის სიგანის შემცირებით მკვეთრად იზრდებიან, მაშინ როცა ზოგიერთი გადასვლის შესაბამისი ოსცილატორული ძალა თითქმის არ არის დამოკიდებული პოტენციალის დახრის სიგანეზე.

დ ა ნ ა რ თ ი

ერთგანზომილებიანი მართკუთხა კვანტური ორმოს ამოსხნა სასრულ ელემენტთა მეთოდით

ამოსახსნელია შემდეგი განტოლება:

$$H_{ij}C_j = ES_{ij}C_j \quad (1)$$

სადაც

$$H_{ij} \equiv \int \varphi_i H \varphi_j dx \quad (2)$$

$$S_{ij} \equiv \int \varphi_i \varphi_j dx \quad (3)$$

φ_i ფუნქციას განვსაზღვრავთ როგორც ნაწილ-ნაწილ მოცემული ფუნქციის (Piecewise Function):

$$\varphi_j(x) = \frac{x-x_{j-1}}{x_j-x_{j-1}}, \text{ თუ } x_{j-1} \leq x \leq x_j$$

$$\varphi_j(x) = \frac{x_{j+1}-x}{x_{j+1}-x_j}, \text{ თუ } x_j \leq x \leq x_{j+1}$$

$$\varphi_j(x) = 0, \text{ თუ } x < x_{j-1} \text{ ან } x > x_{j+1}$$

φ_i ფუნქციის განსაზღვრის არე მოიცავს კვანტურ წერტილის და კვანტური წერტილიდან ფიზიკურად უსასრულოდ დაშორებული მიდამოს, რომლის ბოლოებზეც სისტემის ტალღური ფუნქციები ნულის ტოლია.

(2) ინტეგრალში შემავალ ჰამილტონის ფუნქციას აქვს სახე:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(x)$$

სადაც $U(x)$ პოტენციალური ფუნქციაა და იგი შეიძლება მოცემული იქნას როგორც ნაწილ-ნაწილ მოცემული ფუნქცია:

$U(x) = 0$ კვანტური ორმოს გარეთ

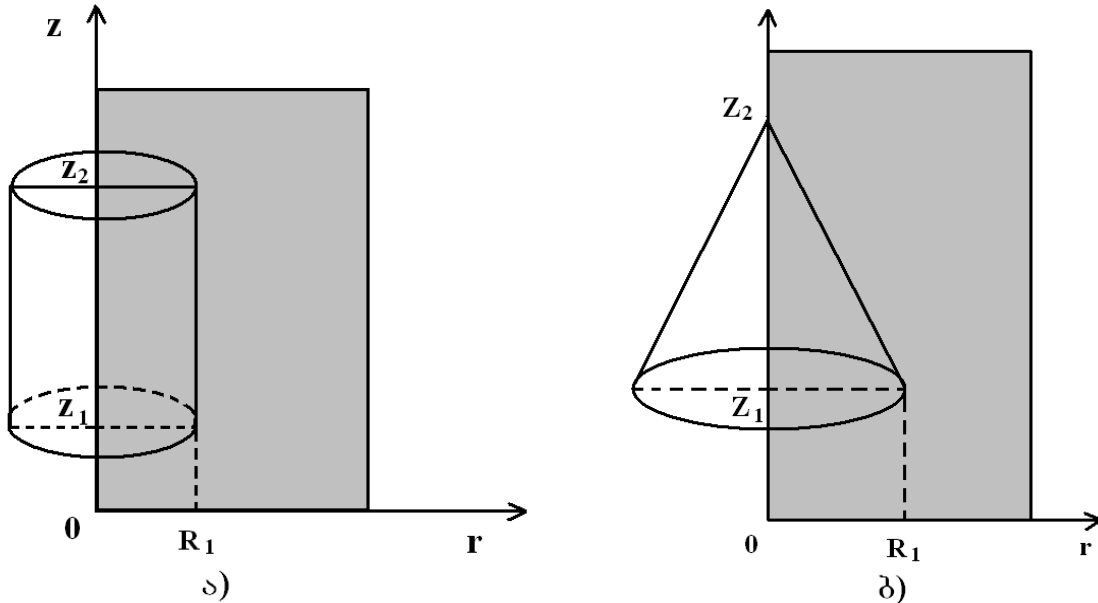
$U(x) = -U_0$ კვანტური ორმოს შიგნით

პოტენციალის ანალოგიურად შეიძლება ჩაიწეროს ნაწილაკის მასა - m როგორც კოორდინატზე დამოკიდებული.

(2) და (3) გამოსახულებების ინტეგრებით ვღებულობთ H_{ij} და S_{ij} მატრიცულ ელემენტებს, რომელთაგანაც ვადგენთ H S მატრიცებს. (1) განტოლების ამოსხნა წარმოადგენს საკუთარი მნიშვნელობებისა და საკუთარი ფუნქციების განზოგადოებულ ამოცანას. ამ ამოცანის ამონახსნები - საკუთარი მნიშვნელობები წარმოადგენენ სისტემის ენერგიებს, ხოლო C_j საკუთარი ფუნქციები φ_i ფუნქციებზე გადამრავლების და აჯამების შემდეგ სისტემის ტალღურ ფუნქციებს გვაძლევენ.

ცილინდრული და კონუსური კვანტური წერტილების ამოხსნა

ვინაიდან ცილინდრული კოორდინატების შემთხვევაში სისტემები აღიწერება ორი (r, z) კოორდინატით და მათ გააჩნია აქსიალური სიმეტრია z ღერძის მიმართ, ამიტომ საკმარისია რეალური (ცილინდრული, კონუსური) კვანტური წერტილის ამოხსნა შესაბამისი ფიზიკური არის ნახევარზე. ქვემოთ მოცემულ ნახაზზე ეს არე მუქად არის შეფერილი.



ა) ცილინდრული და ბ) კონუსური კვანტური წერტილების სქემატური გამოსახულება. გამუქებული ზონა წარმოადგენს არეს რომელზედაც იხსნება შრედინგერის განტოლება

ცილინდრისა და კონუსის შიგნით მუდმივი პოტენციალი აღვნიშნოთ V_1 -ით, ხოლო გარეთ - V_2 ით. ცილინდრულ კვანტური წერტილის შემთხვევაში პოტენციალური ფუნქცია შეგვიძლია განვსაზღვროთ როგორც შემდეგი სახის ნაწილ-ნაწილ მოცემული ფუნქცია:

$$V(r, z) = V_1 \quad \text{თუ} \quad r < R_1 \quad \text{და} \quad Z_1 \leq z \leq Z_2$$

$$V(r, z) = V_2 \quad \text{თუ} \quad r > R_1 \quad \text{ან} \quad z < Z_1 \quad \text{ან} \quad z > Z_2$$

ხოლო კონუსური კვანტური წერტილისათვის პოტენციალური ფუნქცია შეგვიძლია წარმოვადგინოთ როგორც შემდეგი სახის ნაწილ-ნაწილ მოცემული ფუნქცია:

$$V(r, z) = V_1 \quad \text{თუ} \quad 0 < r \leq \frac{R_1(Z_2 - z)}{(Z_2 - Z_1)} \quad \text{და} \quad Z_1 \leq z \leq Z_2$$

$$V(r, z) = V_2 \quad \text{თუ} \quad r > \frac{R_1(Z_2 - z)}{(Z_2 - Z_1)} \quad \text{ან} \quad z < Z_1 \quad \text{ან} \quad z > Z_2$$

ანალოგიურად განისაზღვრება კოორდინატზე დამოკიდებული ეფექტური მასაც $m(r, z)$ (m_1 კვანტური წერტილის შიგნით და m_2 კვანტური წერტილის გარეთ).

ლიტერატურა

1. Engineering and Science magazine, vol. XXIII, no. 5, February 1960
2. L.L. Chang, L. Esaki and R. Tsu, *Appl. Phys. Lett.*, **24** (1974) 593-595 *Resonant tunneling in semiconductor double barriers*
3. H.Sakaki, L.L.Chang, R.Ludeke, C.-A. Chang, G.A. Sai-Halasz, L Esaki. *Appl. Phys. Lett.*, **31** (1977) 211-213 *In_{1-x}Ga_xAs-GaSb_{1-y}As_y heterojunctions by molecular beam epitaxy*
4. L.L. Chang and L. Esaki, *Surf. Sci.*, **98** (1980) 70-89 *Electronic properties of InA-GaSb superlattices*
5. L. Esaki, *IEEE J. Quantum Electron.*, **22** (1986) 1611-1624 *A Bird's-Eye View on the Evolution of Semiconductor Superlattices and Quantum Wells*
6. R. Notzel and K.H. Ploog, *Adv. Mater.*, **5** (1993) 22-29 *Direct Synthesis of Semiconductor Quantum-Wire and Quantum-Dot Structures*
7. J. Faist, F. Capasso, D.L. Sivco, C. Sirtori, A. L. Hutchinson, A. Y. Cho *Science*, **264** (1994) 553-556 *Quantum Cascade Laser*
8. P. Bhattacharya, III-V Quantum Wells and Superlattices, INSPEC: London, 1996
9. G. Scamarcio, F. Capasso, C. Sirtori, J. Faist, A. L. Hutchinson, D. L. Sivco, A.Y. Cho., *Science*, **276** (1997) 773-776 *High-Power Infrared (8-Micrometer Wavelength) Superlattice Lasers*
10. J.-P. Sauvage, J.-P. Collin, J.-C. Chambron, S. Guillerez, C. Coudret, V. Balzani, F. Barigelletti, L. Flamigni, *Chem. Rev.*, **94** (1994) 993-1019 *Ruthenium(II) and osmium(II) bis(terpyridine) complexes in covalently-linked multicomponent systems: Synthesis, electrochemical behavior, absorption spectra, and photochemical and photophysical properties*
11. E. Borello, C. Lamberti, S. Bordiga, A. Zecchina, C.O. Areán, *Appl. Phys. Lett.*, **71** (1997) 2319-2321 *Quantum-size effects in the titanosilicate molecular sieve*
12. J. Hafizovic, M. Bjørgen, U. Olsbye, P.D.C. Dietzel, S. Bordiga, C. Prestipino, C. Lamberti, K.P. Lillerud, *J. Am. Chem. Soc.*, **129** (2007) 3612-3620 *The inconsistency in adsorption properties and powder XRD data of MOF-5 is rationalized by framework interpenetration and the presence of organic and inorganic species in the nanocavities*
13. C. Prestipino, L. Regli, J.G. Vitillo, F. Bonino, A. Damin, C. Lamberti, A. Zecchina, S. Bordiga, *Chem. Mater.*, **18** (2006) 1337-1346 *Local structure of framework Cu(II) in HKUST-1 metallorganic framework: Spectroscopic characterization upon activation and interaction with adsorbates*
14. D.V. Louzguine-Lugin and A. Inoue, *J. Nanosci. Nanotechnol.*, **5** (2005) 999-1014 *Nanodevitrification of glassy alloys*

15. A. Pundt, *Adv. Eng. Mater.*, **6** (2004) 11-21 *Hydrogen in nano-sized metals*
16. A. Zampieri, P. Colombo, G.T.P. Mabande et al., *Adv. Mater.*, **16** (2004) 819-823 *Zeolite coatings on microcellular ceramic foams: A novel route to microreactor and microseparator devices*
17. K.C. Szeto, K.P. Lillerud, M. Tilset, M. Bjørgen, C. Prestipino, A. Zecchina, C. Lamberti, S. Bordiga, *J. Phys. Chem. B*, **110** (2006) 21509-21520 *A thermally stable Pt/Y-based metal-organic framework: Exploring the accessibility of the metal centers with spectroscopic methods using H₂O, CH₃OH, and CH₃CN as probes*
18. N. Tessler, V. Medvedev, M. Kazes, S. Kan, U. Banin, *Science* **295** (2002) 1506-1508 *Efficient near-infrared polymer nanocrystal light-emitting diodes*
19. Z. Yuan, B. E. Kardynal, R. M. Stevenson, A. J. Shields, C. J. Lobo, K. Cooper, N. S. Beattie, D. A. Ritchie, M. Pepper, *Science* **295** (2002) 102-105 *Electrically driven single-photon source*
20. X. Michalet, F. F. Pinaud, L. A. Bentolila, J. M. Tsay, S. Doose, J. J. Li, G. Sundaresan, A. M. Wu, S. S. Gambhir, S. Weiss, *Science* **307** (2005) 538-544 *Quantum dots for live cells, in vivo imaging, and diagnostics*
21. V. I. Klimov, A. A. Mikhailovsky, S. Xu, A. Malko, J. A. Hollingsworth, C. A. Leatherdale, H.-J. Eisler, M. G. Bawendi, *Science* **290** (2000) 314-317 *Optical gain and stimulated emission in nanocrystal quantum dots*
22. D. Loss and D. P. DiVincenzo, *Phys. Rev. A* **57** (1998) 120 – 126 *Quantum computation with quantum dots*
23. M. Grätzel, *Inorganic Chemistry* **44** (2005) 6841-6851 *Solar energy conversion by dye-sensitized photovoltaic cells*
24. R.M. Martin, *Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods*, Cambridge University Press, Cambridge, 2004
25. J. Kohanoff, *Electronic Structure Calculations for Solids and Molecules: Theory and Computational Methods*, Cambridge University Press, Cambridge, 2006
26. J. A. López-Villanueva, I. Melchor, P. Cartujo, and J. E. Carceller, *Phys. Rev. B* **48**, (1993) 1626-1631 *Modified Schrodinger equation including nonparabolicity for the study of a two-dimensional electron gas*
27. S. Rodríguez-Bolívar, F. M. Gómez-Campos, F. Gámiz, and J. E. Carceller 2005 *Journal of Applied Physics* **97**, 013702-1-013702-10 *Implications of nonparabolicity, warping, and inelastic phonon scattering on hole transport in pure Si and Ge within the effective mass framework*

28. Shudong Wu, Zhi Huang, Yuan Liu, Qiufeng Huang, Wang Guo, Yongge Cao. *Superlattices and Microstructures* **46** (2009) 618-626 *The effects of indium segregation on exciton binding energy and oscillator strength in GaInAs/GaAs quantum wells*
29. R.O. Jones and O. Gunnarsson *Rev. Mod. Phys.* **61** (1989) 689-746 *The density functional formalism, its applications and prospects*
30. L. Wang Wang, A. Zunger, *Phys. Rev. B* **54** (1996) 11417 - 11435 *Pseudopotential-based multiband k - p method for ~ 250 000-atom nanostructure systems*
31. S. Sapra, N. Shanthi and D. D. Sarma, *Phys. Rev. B*, **66**, (2002) 2052021-2052028 *Realistic tight-binding model for the electronic structure of II-VI semiconductors*
32. Sougata Pal, Biplab Goswami, and Pranab Sarkar *J. Phys. Chem* **123**, (2005) 209-217 *Size-dependent properties of Znm Sn clusters: A density-functional tight-binding study*
33. [В. П. Драгунов, И. Г. Неизвестный, В. А. Гридчин Основы наноэлектроники Новосибирск, НГТУ 2004].
34. X.Z. Liao, J. Zou, X.F. Duan, D.J.H. Cockayne, R. Leon, C. Lobo, *Phys. Rev. B* **58** (1998) R4235-R4237 *Transmission-electron microscopy study of the shape of buried In_xGa_{1-x}As/GaAs quantum dots*
35. I. Mukhametzhanov, Z. Wei, R. Heitz, and A. Madhukar, *Appl. Phys. Lett.* **75** (1999) 85-87 *Punctuated island growth: An approach to examination and control of quantum dot density, size, and shape evolution*
- 36 P.W. Fry, M.S. Skolnick;, D.J. Mowbray, I.E. Itskevich, J.J. Finley, L.R. Wilson, K.L. Schumacher, J.A. Barker, E.P. O'Reilly, M. Al-Khafaji, A.G. Cullis, M. Hopkinson, J.C. Clark, G. Hill. *Physica E* **9** (2001) 106-113 *Electronic properties of InAs-GaAs self-assembled quantum dots studied by photocurrent spectroscopy*
37. J. P. McCaffreya, M. D. Robertson, S. Fafard, Z. R. Wasilewski, E. M. Griswold, L.D. Madsen, *J. Appl. Phys.* **88** (2000) 2272-2277 *Determination of the size, shape, and composition of indium-flushed self-assembled quantum dots by transmission electron microscopy*
38. Marius Grundmann, *The Physics of Semiconductors An Introduction Including Devices and Nanophysics*, Springer-Verlag Berlin 2006
39. Wei-Ting Hsu, Yu-AnLiao, Shu-KaiLu, Shun-JenCheng, Pei-ChinChiu, Jen-InnChyi, Wen-Hao Chang, *Physica E*, article in press *Tailoring of the Wave Function Overlaps and the Carrier Lifetimes in InAs/GaAs_{1-x}Sb_x Type-II Quantum Dots*
40. J. Shumway, A. Franceschetti, and Alex Zunger *Phys. Rev. B* **63**, 155316 (2001) *Correlation versus mean-field contributions to excitons, multiexcitons, and charging energies in semiconductor quantum dots*

41. S.K. Moayedi, Abraham F. Jalbout, M. Solimannejad, *Journal of Molecular Structure (Theochem)* **663** (2003) 15–18. *The position-dependent effective mass Schrodinger equation: a quasi-exact solution.*
42. Giovanni Pellegrini, Giovanni Mattei, and Paolo Mazzoldi *J. Appl. Phys.* **97**, 073706 (2005) *Finite depth square well model: Applicability and limitations*
43. J. M. Ferreyra and C.R. Proetto, *Phys.Rev. B.* **60** (1998) 10672-10675 *Quantum size effects on excitonic Coulomb and exchange energies in finite-barrier semiconductor quantum dots*
44. Lin-Wang Wang and Alex Zunger *Phys. Rev. B* **53** (1995) *Pseudopotential calculations of nanoscale CdSe quantum dots*
45. S. Bednarek, T. Chwiej, J. Adamowski, and B. Szafran *Phys. Rev. B* **67**, (2003) 205316 *Artificial molecules in coupled and single quantum dots*
46. Kirmse H, Schneider R, Scheerschmidt K, Conrad D, Neumann W. *Journal of Microscopy*, **194**, (1999) 183–191. *TEM characterization of self-organized CdSe/ZnSe quantum dots*
47. Strassburg, Th. Deniozou, A. Hoffmann, R. Heitz, U. W. Pohl, and D. Bimberg, D. Litvinov, A. Rosenauer, and D. Gerthsen, S. Schwedhelm, K. Lischka, and D. Schikora *Appl. Phys. Lett.*, **76**, (2000) 685 *Coexistence of planar and three-dimensional quantum dots in CdSe/ZnSe structures*
48. Assaf Aharoni, Taleb Mokari, Inna Popov, and Uri Banin *J Am Chem Soc* **128**(1):257-64 (2006) *Synthesis of InAs/CdSe/ZnSe core/shell1/shell2 structures with bright and stable near-infrared fluorescence*
49. V I Kozlovsky, VG Litvinov and Yu G Sadofyev *J. Phys.: Condens. Matter* **16** (2004) S133–S140 *E-beam irradiation effect on CdSe/ZnSe QD formation by MBE: deep level transient spectroscopy and cathodoluminescence studies*
50. H. Kirmse, R. Schneider, M. Rabe, W. Neumann, and F. Henneberger *Appl. Phys. Lett.*, **72**, (1998) *Transmission electron microscopy investigation of structural properties of self-assembled CdSe/ZnSe quantum dots*
51. P. W. Fry, M. S. Skolnick, D. J. Mowbray, I. E. Itskevich, J. J. Finley, L. R. Wilson, K. L. Schumacher, J. A. Barker, E. P. O'Reilly, M. Al-Khafaji, A. G. Cullis, M. Hopkinson, J. C. Clark and G. Hill *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* **9**, (2001) 106-113 *Electronic properties of InAs/GaAs self-assembled quantum dots studied by photocurrent spectroscopy*
52. M. Grundmann, N. N. Ledentsov, O. Stier, D. Bimberg, V. M. Ustinov, P. S. Kop'ev, and Zh. I. Alferov *Appl. Phys. Lett.* **68**, (1996) 979 *Excited states in self-organized InAs/GaAs quantum dots: Theory and experiment*

53. Valey F. Kamalov, Reginald Little, Stephan L. Logunov, and Mostafa A. El-Sayed J. Phys. Chem. 100 (1996) 6381-6384 *Picosecond Electronic Relaxation in CdS/HgS/CdS Quantum Dot Quantum Well Semiconductor Nanoparticles*
54. Dirk Dorfs and Alexander Eychmüller Nano Letters **1** (2001) 663-665 *A Series of Double Well Semiconductor Quantum Dots*
55. M. P. Chamberlain, C. Trallero-Giner and M. Cardona, *Phys rev B* **51** (1995) 1680-1693 *Theory of one-phonon raman scattering in semiconductor microcrystallites*
56. Handbook of mathematical functions with formulas graphs and mathematical tables, M. Abramowitz and I.A. Stegun, Washington, DC (1964).
57. J. M. Ferreyra and C.R. Proetto, *Phys.Rev. B.* **60** (1998) 10672-10675 *Quantum size effects on excitonic Coulomb and exchange energies in finite-barrier semiconductor quantum dots*
58. Luis F. Garcia, Jairo H. Martin, and Ilia D. Mikhailov, *Brazilian Journal of Physics*, **36** (2006), *Negatively Charged Donors in Flat Quantum Dots*
59. R. V. N. Melnik, and K. N. Zotsenko, *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* **12** (2004) 465–477 *Finite element analysis of coupled electronic states in quantum dot nanostructures*
60. Glas F. *Appl. Surf. Sci.* **188** (2002) 9–18 *Elastic relaxation of isolated and interacting truncated pyramidal quantum dots and quantum wires in a half space*
61. F. Guffarth, R. Heitz, A. Schliwa, O. Stier, N. N. Ledentsov, A. R. Kovsh, V. M. Ustinov, and D. Bimberg, *Phys. Rev. B* **64**, (2001) 085305 *Strain engineering of self-organized InAs quantum dots*
62. Yiming Li, O. Voskoboynikov, C.P. Lee, S.M. Sze *Computer Physics Communications* **141** (2001) 66–72 *Computer simulation of electron energy levels for different shape InAs/GaAs semiconductor quantum dots*
63. Yiming Li, O. Voskoboynikov, C. P. Lee and S. M. Sze, O. Tretyak *J. Appl. Phys.***90**, (2001) *Electron energy state dependence on the shape and size of semiconductor quantum dots*
64. Johnson Lee, Wu-Ching Chou, Chu-Shou Yang, and G. J. Jan *Chinese Journal of Physics* **42** (2004) *Eigen-Energies and Eigen-Functions of Symmetroidal Quantum Dots*
- [65] [Karen G. Dvovyan, David B. Hayrapetyan, Eduard M. Kazaryan and Ani A. Tshantshapanyan , *Nanoscale Research Letters* **4** (2009) 130–137 *Electronic States and Light Absorption in a Cylindrical Quantum Dot Having Thin Falciform Cross Section*]
- [66] [L. C. Lew Yan Voon, C. Galeriu, B. Lassen, M. Willatzen, and R. Melnik *Applied Physics Letters.* **87**, (2005) 041906 *Electronic structure of wurtzite quantum dots with cylindrical symmetry*]

- [67] [Pellegrini, Giovanni Mattei, Giovanni Mazzoldi, Paolo *Journal of Applied Physics* **97** (2005) 073706 Finite depth square well model: Applicability and limitations]
68. W. S. Ferreira, J. S. de Sousa, J. A. K. Freire, G. A. Farias, and V. N. Freire *Brazilian Journal of Physics*, **36** (2006) *Optical Properties of Ellipsoidal CdSe Quantum Dots*
69. Tokuei Sako, Paul-Antoine Hervieux, Geerd H. F. Diercksen *Phys.Rev. B* **74** (2006) 045329 *Distribution of oscillator strength in Gaussian quantum dots: An energy flow from center-of-mass mode to internal modes*
70. M. D. M. D. Leistikow, J. Johansen, A. J. Kettelarij, P. Lodahl, and W. L. Vos *Phys. Rev. B* **79** (2009) 045301 *Size-dependent oscillator strength and quantum efficiency of CdSe quantum dots controlled via the local density of states*
- [71] [M. Kuno, Introduction to Nanoscience and Nanotechnology, University of Notre Dame, 2005].
- [72] [Z Zanolli, M-E Pistol, L E Fröberg and L Samuelson, *Journal of Physics: Condensed Matter* **19** (2007) 295219 *Quantum-confinement effects in InAs-InP core-shell nanowires*].
73. *The Cambridge handbook of physics formulas*, Cambridge University Press 2000
- [74] [Yiming Li, O. Voskoboynikov, C. P. Lee and S. M. Sze, *Solid State Communications* **120** (2001) 79-83 Energy and coordinate dependent effective mass and confined electron states in quantum dots],
75. M. J. Turner, R.W. Clough, H. C. Martin, L. J. Topp, *J Aero Sci.* **23**, (1956) 805-023 *Stiffness and Deflection Analysis of Complex Structures*
76. Fanyao Qu, A. M. Alcalde, C. G. Almeida, and Noelio Oliveira Dantas, *Journal of Applied Physics* **94** (2003) 3462-3469 *Finite element method for electronic properties of semiconductor nanocrystals*
77. H.T. Johnson, L.B. Freund, C.D. Akyüz, A. Zaslavsky, *Journal of Applied Physics* **84** (1998) 3714-3725 *Finite element analysis of strain effects on electronic and transport properties in quantum dots and wires*
78. Sadri Hassani, *Mathematical Physics A Modern Introduction to Its Foundations*. Springer 2002.
79. M. Danek, K. F. Jensen, C. B. Murray and M. G. Bawendi, *Chem. Mater.* **8** (1996), 173-180 *Synthesis of luminescent thin-film CdSe/ZnSe quantum dot composites using CdSe quantum dots passivated with an overlayer of ZnSe*
80. D.V. Talapin, I. Mekis, S. Götzinger, A. Kornowski, O. Benson, H. Weller, *J. Phys. Chem. B* **108** (2004) 18826-18831 *CdSe/CdS/ZnS and CdSe/ZnSe/ZnS core-shell-shell nanocrystals*

81. Qing Shen, Kenji Katayama, Tsuguo Sawada, Taro Toyoda, *Thin Solid Films* **516**(2008) 5927–5930 *Characterization of electron transfer from CdSe quantum dots to nanostructured TiO₂ electrode using a near-field heterodyne transient grating technique*
82. S. X. Zhou, Y. G. Wang, W. Han, and N. Wang. *J. Phys. Chem. C* **112** (2008) 18644–18650 *I-V characteristics of metal-oxide-ZnSe nanowire structure*
83. S.-S.Li, J.-B. Xia, Z.L. Yuan, Z.Y. Xu, W. Ge, X.R. Wang, Y. Wang, L.L. Chang, Chang, L.L.. *Phys. Rev. B* **54** (1996) 11575 - 11581 *Effective-mass theory for InAs/GaAs strained coupled quantum dots*
84. W. Jaskolski, M. Zielinski, Garnett W. Bryant, *Physica E* **17** (2003) 40-41 *Electronic properties of quantum-dot molecules*
85. A.F. Jarjour, R.A. Oliver, A. Tahraoui, M.J. Kappers, C.J. Humphreys, R.A. Taylor, *Phys. Rev. Lett.* **99**, (2007) 197403 *Control of the oscillator strength of the exciton in a single InGaN-GaN quantum dot*
86. R. Santoprete, P. Kratzer, M. Scheffler, R.B. Capaz, B. Koiller, *Journal of Applied Physics* **102** (2007) 023711 *Effect of post-growth annealing on the optical properties of InAs / GaAs quantum dots: A tight-binding study*
87. Z. Hens *Chemical Physics Letters* **463** (2008) 391–395 *Can the oscillator strength of the quantum dot bandgap transition exceed unity?*
88. B. Bochorishvili, H. M. Polatoglou. *IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering* **6** (2009) 012026 *Energy spectrum and oscillator strengths for spherical, conical and cylindrical CdSe quantum dots*
89. B. Bochorishvili, H. Polatoglou *Journal of Nano Research* **10** (2010) pp 87-92 *Interacting Double InAs/GaAs Quantum Dots of Cylindrical Symmetry*
90. A. Eychmuller, A. Mews and H. Weller, *Chem. Phys. Lett.* **208** (1993) 59-62 *A quantum dot quantum well: CdS/HgS/CdS*
91. Y. Fu, T.-T. Han, and H. Ågren, *Appl. Phys. Lett.* **90** (2007) 173102 *Design of semiconductor CdSe core ZnSCdS multishell quantum dots for multiphoton applications*
92. **Beka** Bochorishvili, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* **43** (2011) 874-876 *Electronic states and oscillator strengths for interband transitions of a graded quantum dot quantum well structure*
93. Z. Mia and Y.-L. Chang *Journal of Nanophotonics*, **3**, (2009) 031602 *III-V compound semiconductor nanostructures on silicon: Epitaxial growth, properties, and applications in light emitting diodes and lasers*

94. C. Dion, P. Desjardins, N. Shtinkov, M. D. Robertson, F. Schiettekatte, P. J. Poole, S. Raymond, *Phys. Rev. B* **77**, (2008) 075338 *Intermixing during growth of InAs self-assembled quantum dots in InP: A photoluminescence and tight-binding investigation*
95. N. V. Tkach, V. A. Golovatskii, O. M. Voitsekhivskaya, M. Ya. Mikhal'ova, and R.B. Fartushinski, *Physics of the Solid State* **43** (2001) 1370-1376 *Renormalization of the electron spectrum by confined and interface phonons in a spherical nanoheterosystem (β -HgS/CdS)*
96. R. Kostic and D. Stojanovic, *Acta Phys. Polonica A* **115** (2009) 768-770 *Electron and hole states in closed spherical quantum dot with linearly graded composition*
97. A. Franceschetti and A. Zunger, *Phys. Rev. Lett.* **78** (1997) 915-918 *Direct pseudopotential calculation of exciton Coulomb and exchange energies in semiconductor quantum dots*