

**Затверджено вченою радою
фізичного факультету
Київського національного університету
імені Тараса Шевченка
23 ГРУДНЯ 2024 р., протокол №8
_____ВАСИЛЬ ІВЧЕНКО**

**ПИТАННЯ,
ЯКІ ВІНОСЯТЬСЯ НА КОМПЛЕКСНИЙ ІСПИТ З ФІЗИКИ
НАНОСИСТЕМ
ЗА ОСВІТНЬО-НАУКОВОЮ ПРОГРАМОЮ:
«ФІЗИКА НАНОСИСТЕМ»**

Перелік питань з фізики наносистем

1. Розмірне квантування та умови його спостереження. Вплив концентрації носіїв заряду на спостереження розмірного квантування.
2. Рівноважна концентрація електронів та положення рівня Фермі у напівпровідникових квантових ямах та дротах.
3. Механізми молекулярної провідності.
4. Принцип роботи одноелектронного транзистора. Поняття «кулонівські алмази».
5. Скейлінг: принцип, переваги, труднощі.
6. Методи створення контактів до окремих молекул.
7. Резонансно-тунельний діод. Резонансно-тунельний транзистор.

8. Поляризаційна залежність міжзонного поглинання світла в квантових ямах.

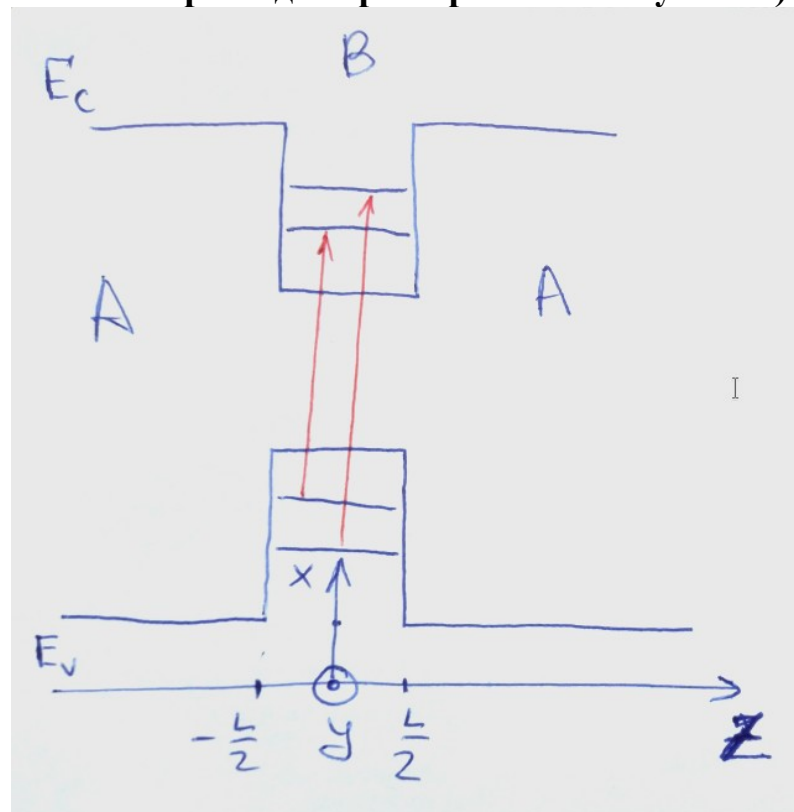
Загальний вираз для коефіцієнту поглинання світла у напівпровідниках

$$\alpha(\omega) = C_0(\omega) \frac{2}{v} \sum_{\vec{k}_i, \vec{k}_f} \left| \langle \vec{k}_f | \vec{e} e^{i\vec{k}z} \hat{p} | \vec{k}_i \rangle \right|^2 \times \{ f(\vec{k}_i) - f(\vec{k}_f) \} \delta(E_{ef} - E_{ei} - \hbar\omega) \quad (1)$$

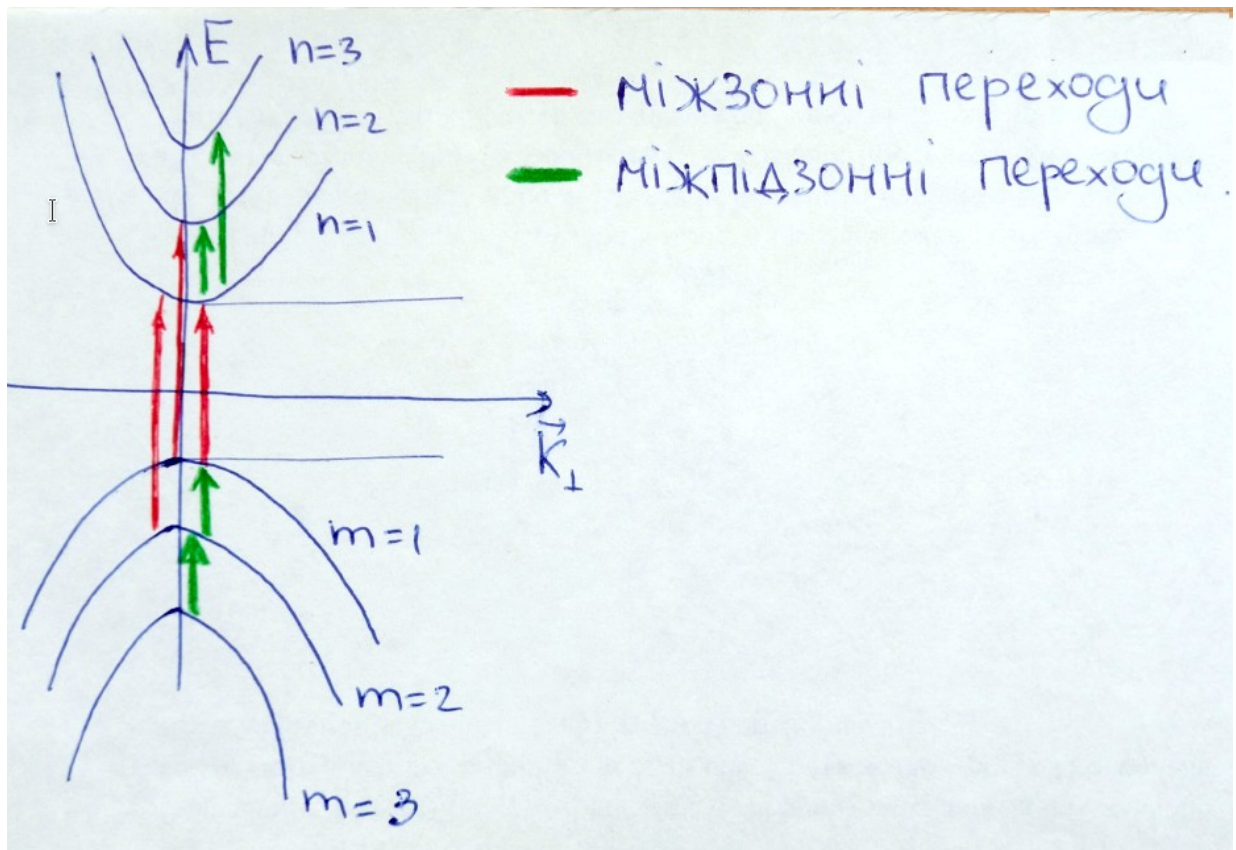
$$C_0(\omega) = \frac{\pi e^2}{m_e^2 \omega n \epsilon \epsilon_0}$$

Розглядаємо квантову яму, утворену прямозонними напівпровідниками, у яких краї зон припадають на $k=0$.

В найпростішому наближенні (нехтуємо виродженням валентної зони, тобто тим, що є важкі і легкі дірки) і намалюємо схему оптичних переходів міжзонного поглинання світла в квантових ямах (горизонтальні лінії- краї підзон розмірного квантування)



В енергетичному представленні буде так



Матричний елемент для міжзонних переходів в квантовій ямі

$$\langle \vec{k}_f | \vec{e} \hat{p} | \vec{k}_i \rangle = \langle u_{co} | \vec{e} \hat{p} | u_{vo} \rangle \int_V F_{cn}^*(\vec{z}) F_{vm}(\vec{z}) d^3z \quad (2)$$

Тут матричний елемент, який визначає поляризаційну залежність поглинання світла

$$\frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} u_{fo}^*(\vec{z}') \vec{e} \hat{p} u_{io}(\vec{z}') d^3z' \equiv \langle u_{fo} | \vec{e} \hat{p} | u_{io} \rangle$$

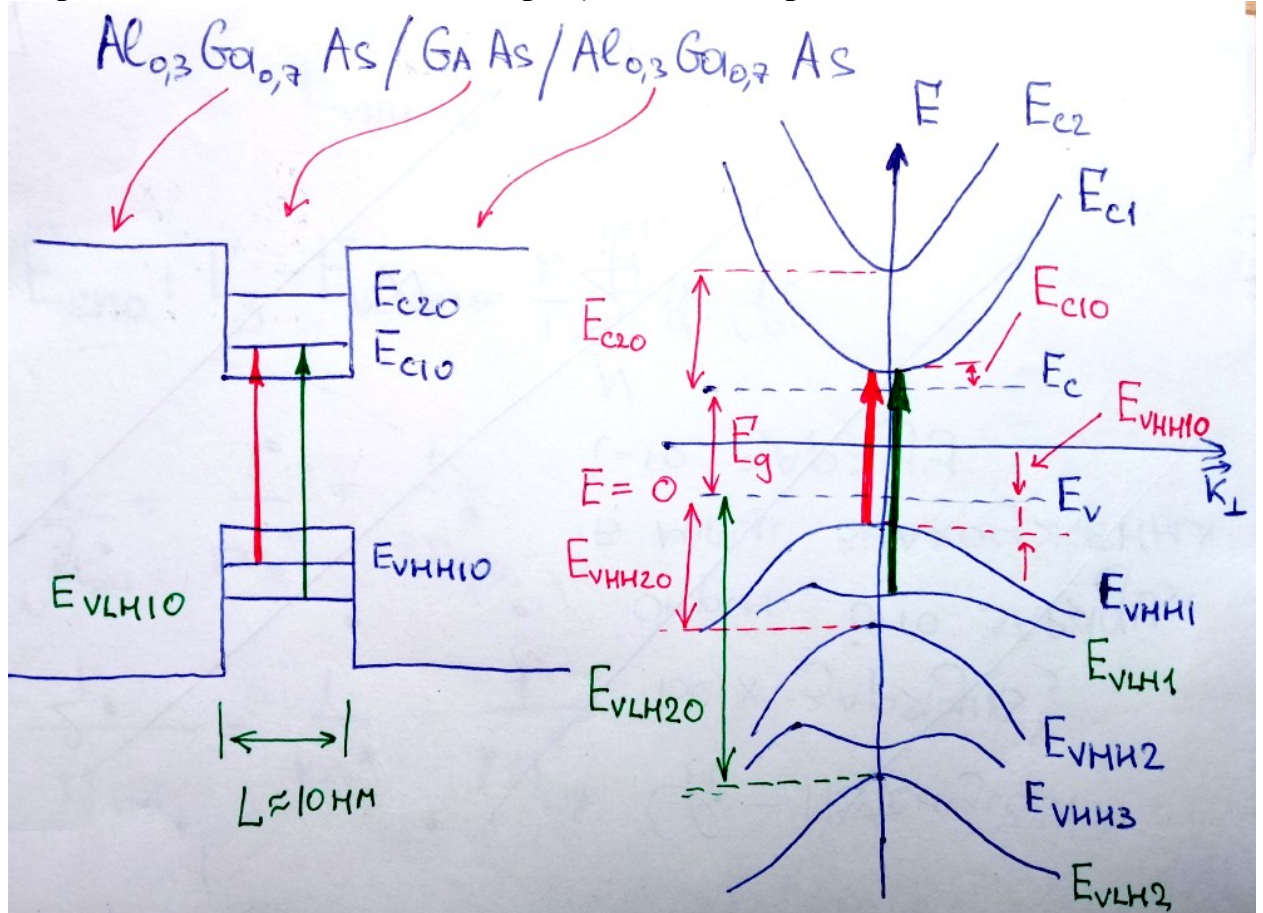
де треба покласти $f=c$ та $i=v$
 \vec{e} - вектор поляризації світла

Ω - об'єм елементарної комірки

Коефіцієнт поглинання для міжзонних переходів в простому наближенні після підстановки матричного елемента в загальний вираз для коефіцієнту поглинання

$$\alpha(\omega) = \frac{C_0(\omega)}{L} \left| \langle u_{v0} | \hat{e} \cdot \vec{p} | u_{v0} \rangle \right|^2 \left(\frac{\mu}{\pi \hbar^2} \right) \times \sum_{n,m} |T_{nm}|^2 M(\hbar\omega - E_{vm}^{en})$$

В реальних напівпровідниках ситуація ускладнена тим, що валентна зона об'ємного напівпровідника вироджена, і при утворенні квантової ями отримаємо підзони важких і легких дірок. Потрібно розглядати міжзонні переходи між цими підзонами (**HH** позначено підзони важких дірок а **LH**- підзони легких дірок) Типовий приклад нижче



Детальний розрахунок дає для *матричного елемента, який визначає поляризаційну залежність для світла, поляризованого паралельно площині квантової ями* m_0 - маса електрона.

$$|\langle u_{\infty} | \vec{e} \hat{p} | u_{v0} \rangle|^2 = \begin{cases} \frac{3}{2} \frac{m_0}{6} E_p & HH \rightarrow C \\ \frac{1}{2} \frac{m_0}{6} E_p & LH \rightarrow C \end{cases}$$

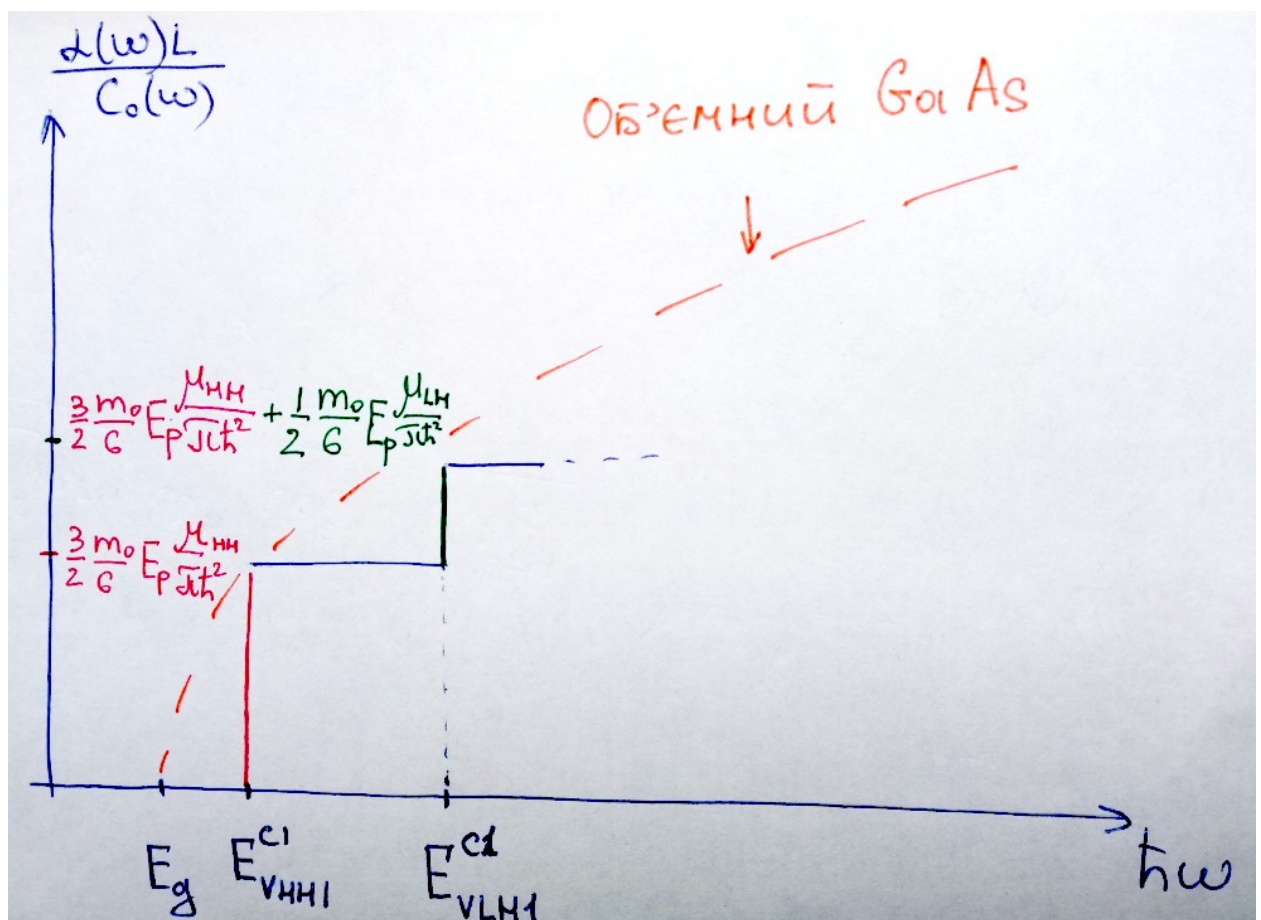
Детальний розрахунок дає для *матричного елемента, який визначає поляризаційну залежність для світла, поляризованого перпендикулярно площині квантової ями* m_0 - маса електрона. Для такого світла переходи з підзони важких дірок відбуватись не будуть!

$$|\langle u_{\infty} | \vec{e} \hat{p} | u_{v0} \rangle|^2 = \begin{cases} 0 & HH \rightarrow C \\ 2 \frac{m_0}{6} E_p & LH \rightarrow C \end{cases}$$

Енергетичний параметр E_p розрахований для типових напівпровідників слабо відрізняється

Н/П	$E_p, \text{eВ}$
GaAs	25,7
InP	20,9
InAs	22,2
CdTe	20,7

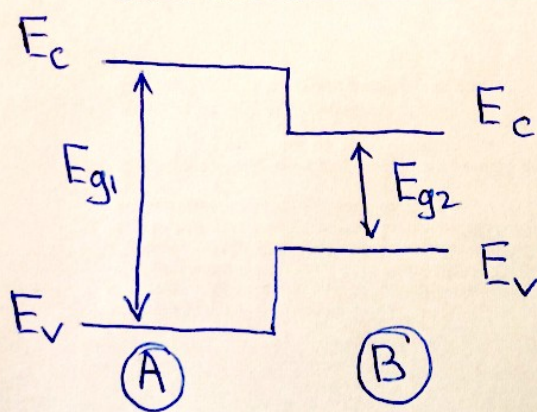
З урахуванням **поляризаційної залежності** коефіцієнт поглинання світла за рахунок **міжзонних переходів** в квантових ямах можна схематично зобразити як нижче



9. Типи гетеропереходів, структури із квантовими ямами та бар'єрні структури. Область просторового заряду. Побудова зонної діаграми поблизу гетеропереходу.

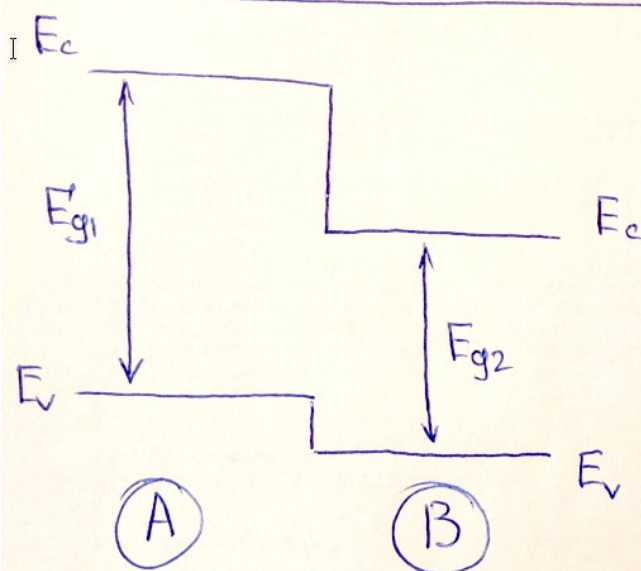
Гетероперехід - контакт двох хімічно різних напівпровідникових кристалів.

Гетероперехід типу I

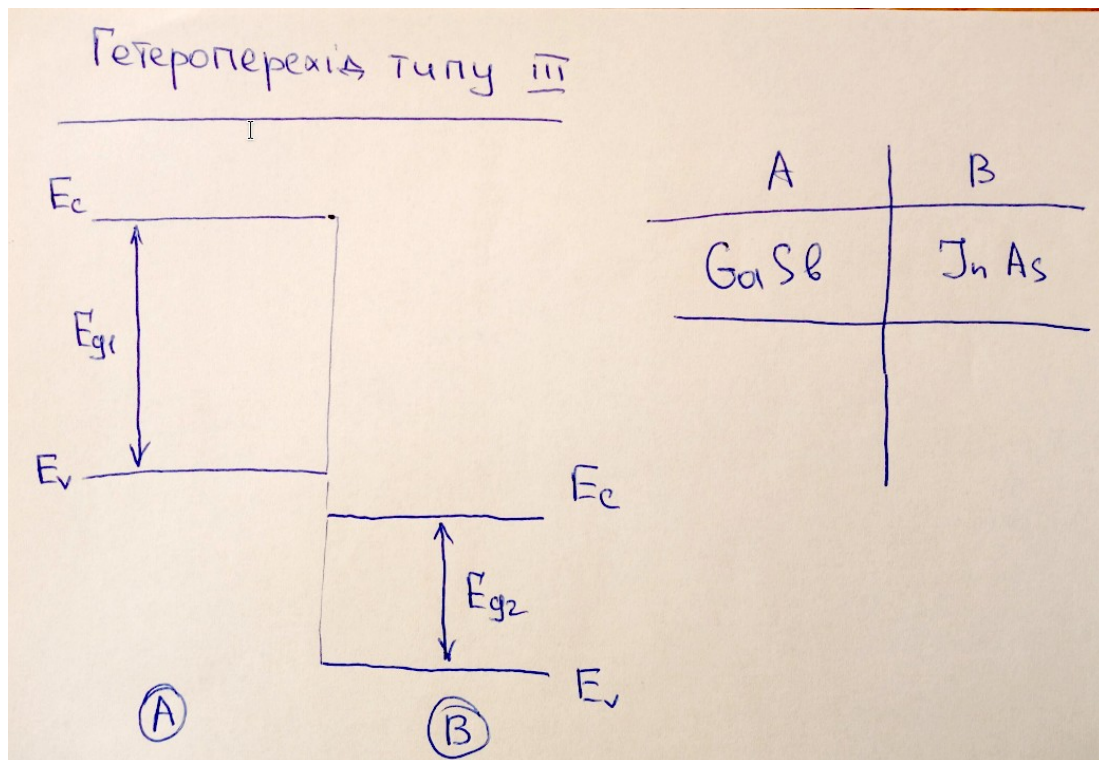


A	B
$\text{Ga}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$	GaAs
InP	$\text{Ga}_{0,47}\text{In}_{0,53}\text{As}$
$\text{Al}_{0,48}\text{In}_{0,52}\text{As}$	$\text{Ga}_{0,47}\text{In}_{0,53}\text{As}$

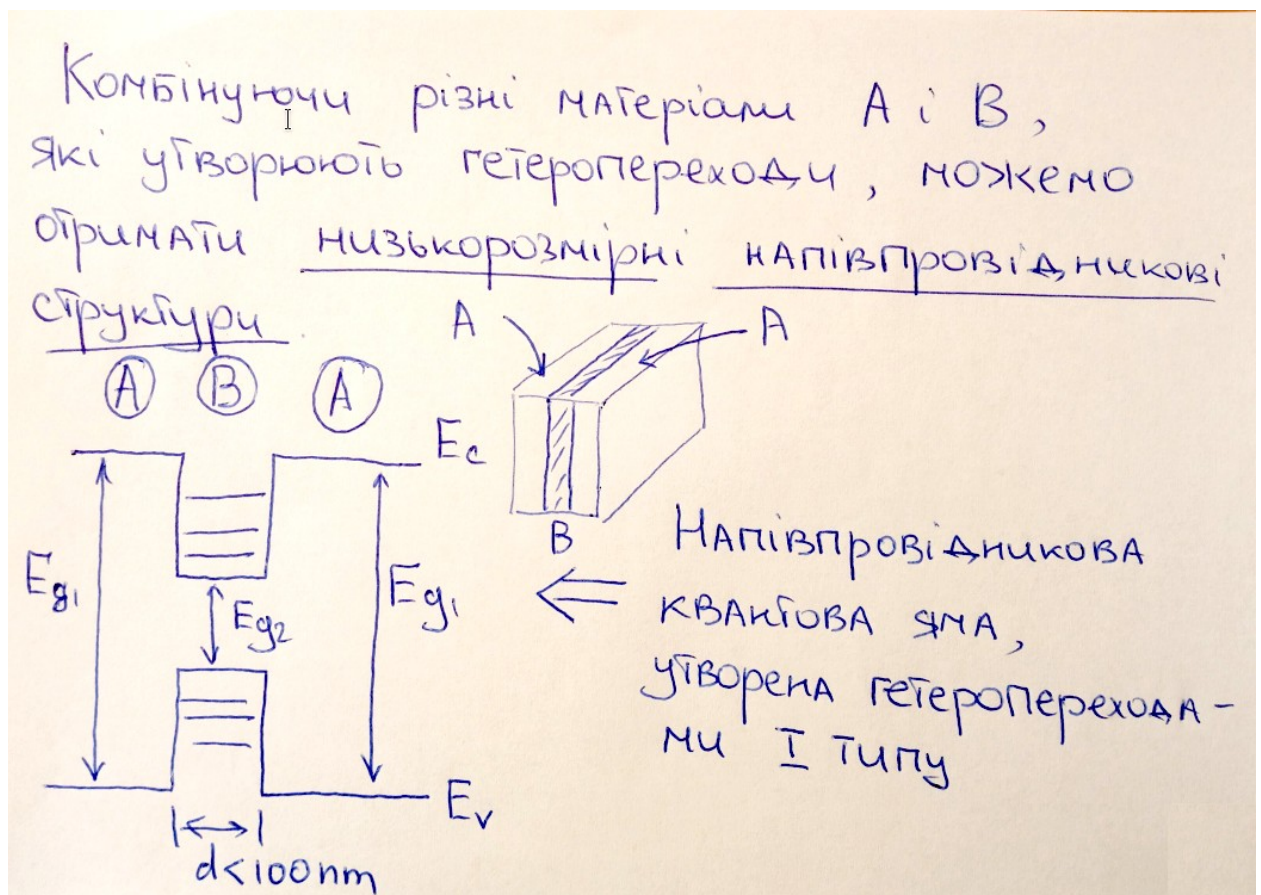
Гетероперехід типу II

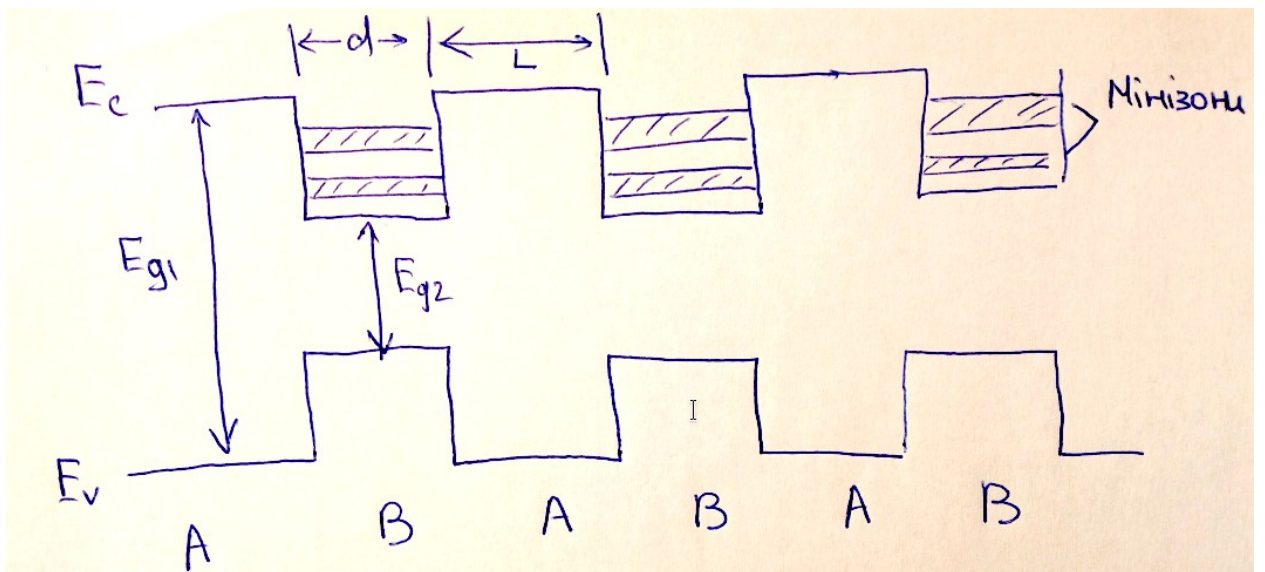
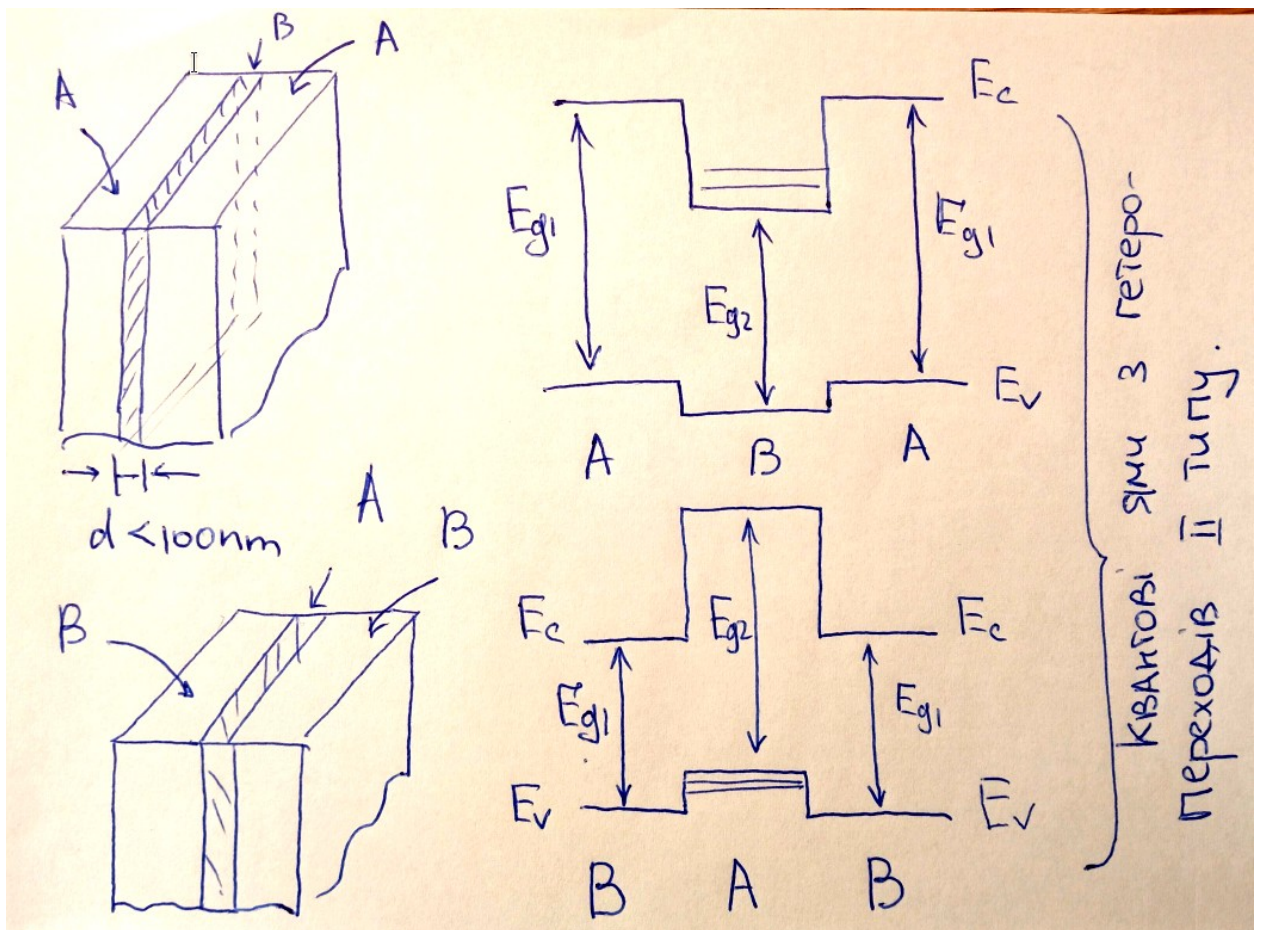


(A)	(B)
$\text{Ga}_x\text{Al}_{1-x}\text{Sb}$	InAs



Приклади структур із квантовими ямами та бар'єрних структур

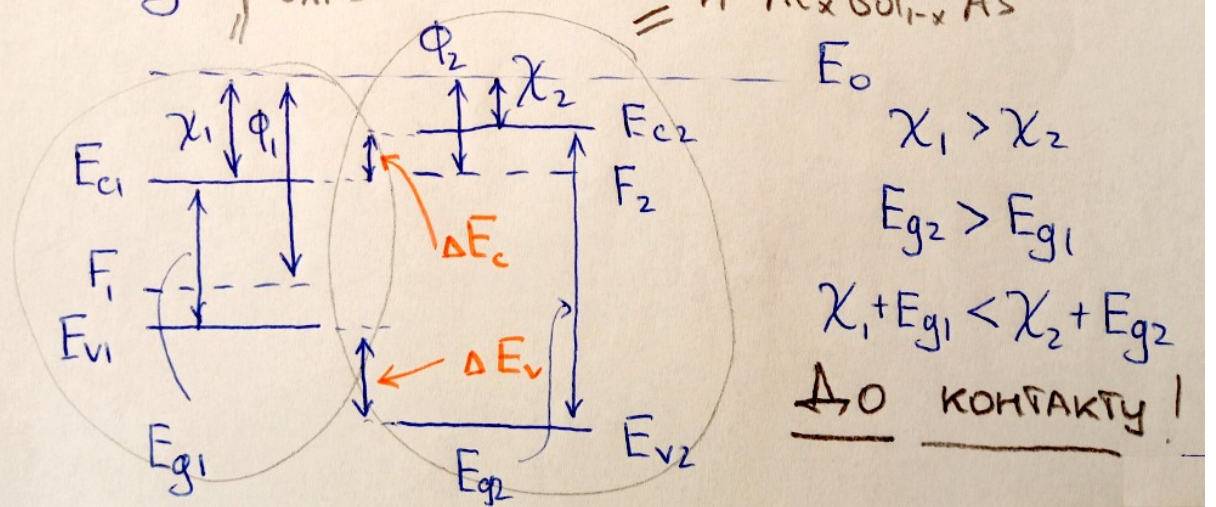




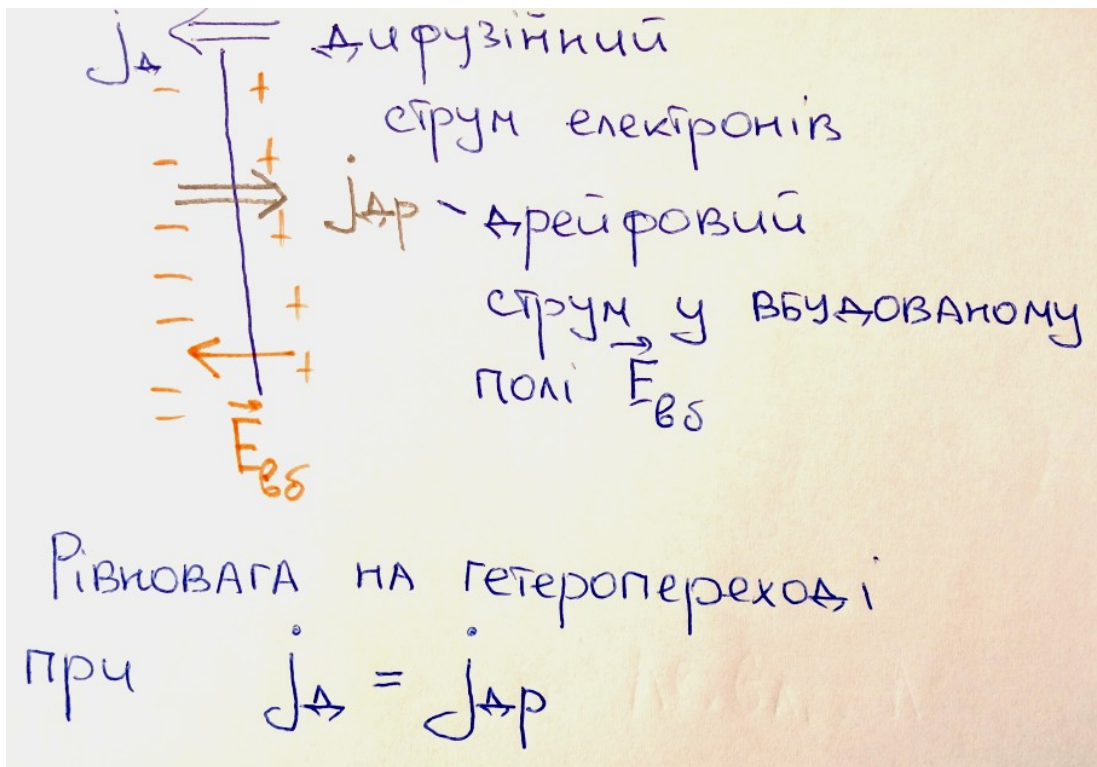
Коли $d \approx L < 100 \text{ nm}$ — набір взаємодіючих квантових ям, які утворюють надрітку Рівні Електронів виражаються у мінізони

Побудова зонної діаграми поблизу гетеропереходу

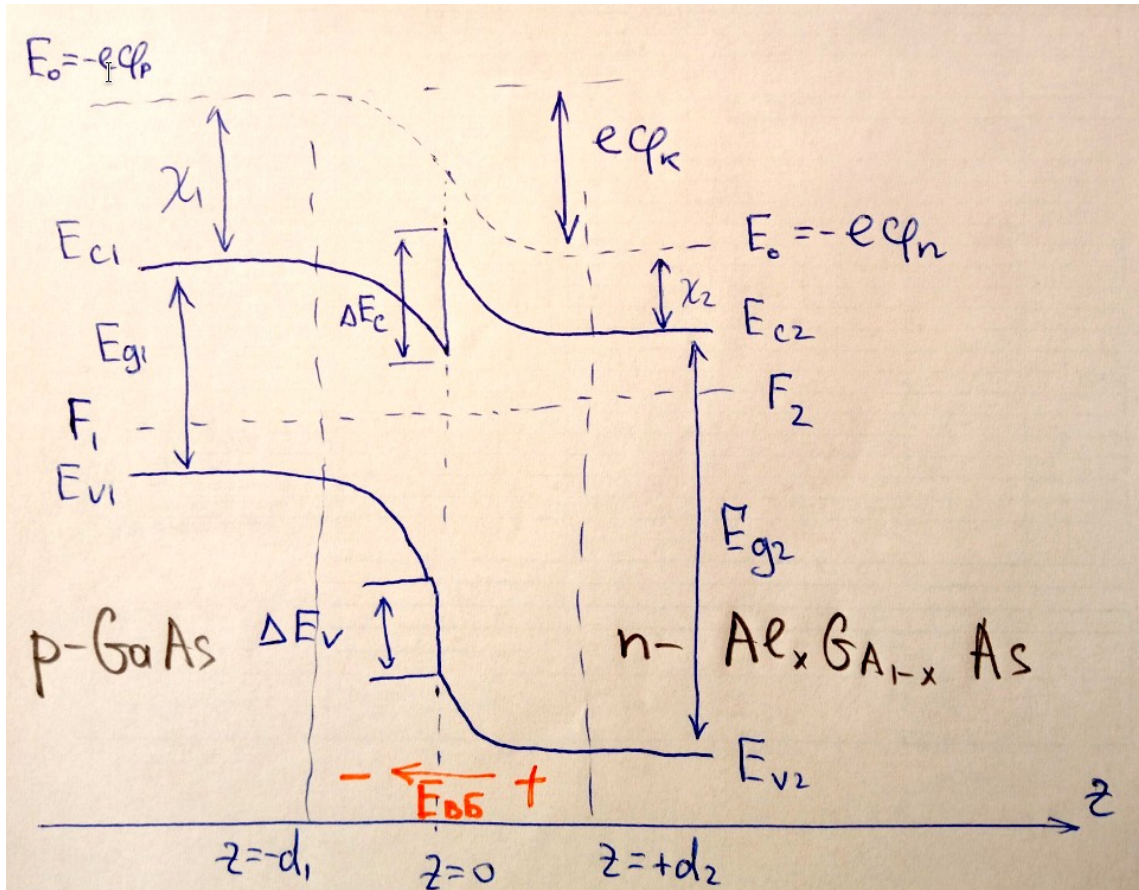
Розрахуємо контакт двох напівпровідників $p\text{-GaAs}$ і $n\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, які утворюють плоский гетероперехід I типу. Вісь Oz перпендикулярна до гетеропереходу.



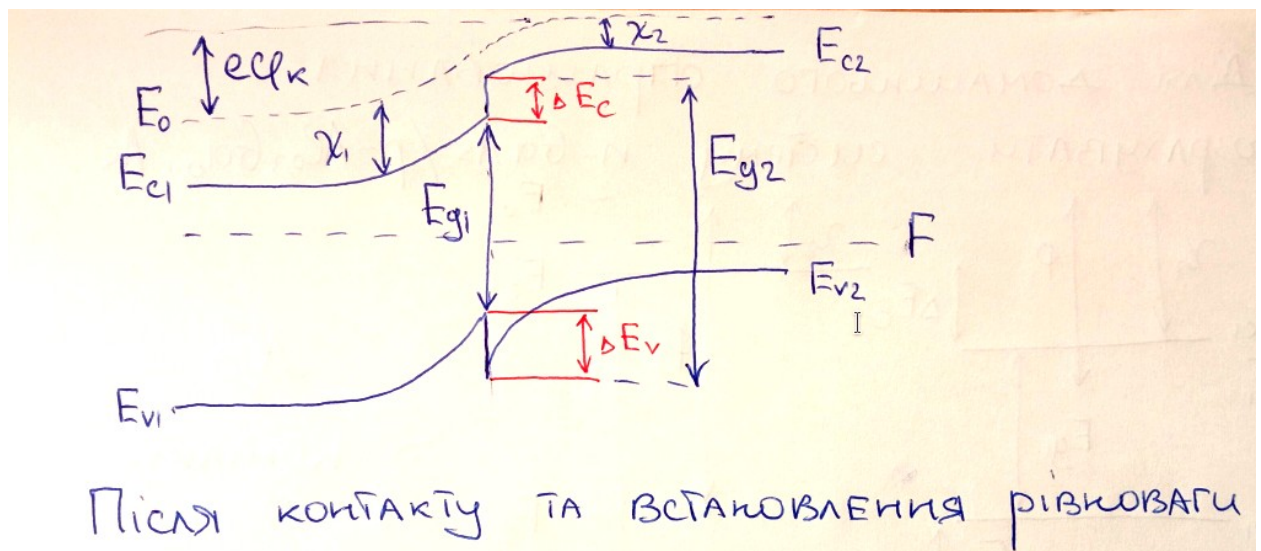
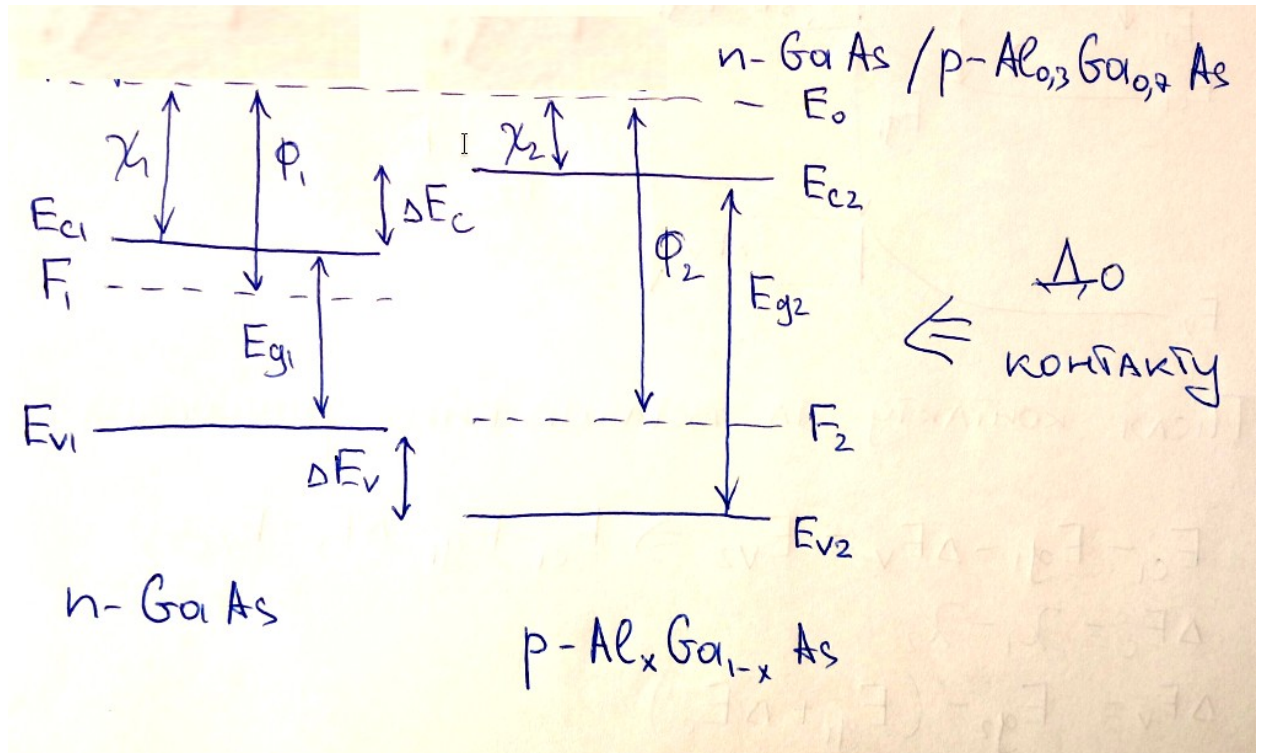
Після контакту електронам енергетично вигідніше перейти з $n\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ у $p\text{-GaAs}$. В тонкому шарі $n\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ виникає надлишок додатного заряду іонізованих донорів, а в тонкому шарі $p\text{-GaAs}$ виникає надлишок від'ємного заряду іонізованих акцепторів. Виникає вбудоване поле, яке перешикодує дифузійному струму електронів.



Після встановлення рівноваги зонна діаграма поблизу гетеропереходу набуває вигляду (Область просторового заряду виникає в шарі між $z=-d_1$ та $z=+d_2$)

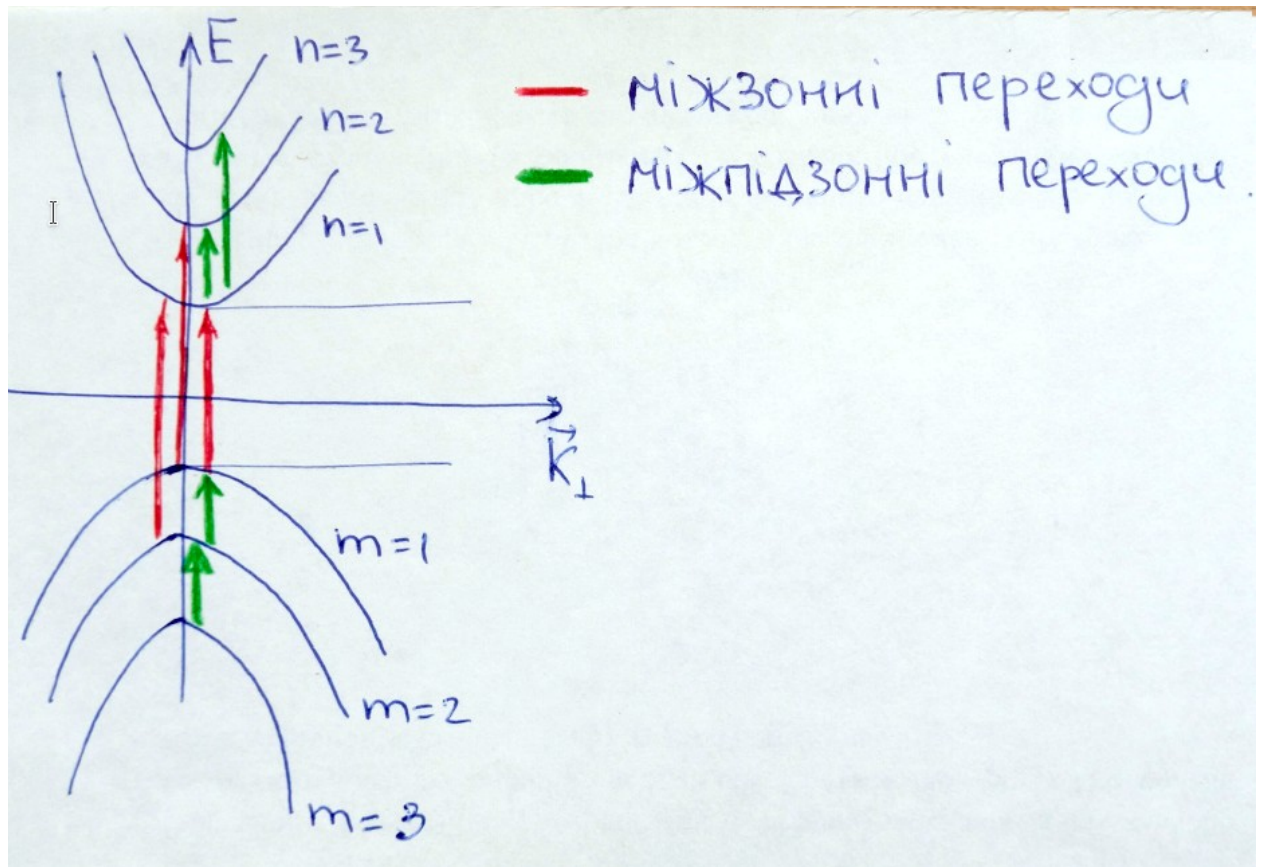


Аналогічні міркування можна застосувати для побудови **зонної діаграми поблизу гетеропереходу** якщо у вищенаведеному випадку змінити тип провідності контактуючих напівпровідників



10. Правила відбору для оптичних переходів в квантових ямах. Коефіцієнт поглинання для міжзонних переходів у квантових ямах.

Оптичні переходи в квантових ямах поділяємо на **міжзонні** та **міжпідзонні**



Для **міжзонних** оптичних переходів в квантових ямах коефіцієнт поглинання можна отримати підстановкою **матричного елемента** для **міжзонних переходів**

$$\langle \vec{k}_f | \vec{e} \hat{p} | \vec{k}_i \rangle = \langle u_{c0} | \vec{e} \hat{p} | u_{v0} \rangle \int_V F_{cn}^*(\vec{z}) F_{vm}(\vec{z}) d^3z \quad (2)$$

де **матричний елемент**, що визначає поляризаційну залежність поглинання отримаємо з виразу

$$\frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} u_{f0}^*(\vec{z}') \vec{e} \hat{p} u_{i0}(\vec{z}') d^3z' \equiv \langle u_{f0} | \vec{e} \hat{p} | u_{i0} \rangle$$

де покладаємо $f=c$ та $i=v$, Ω - об'єм елементарної комірки, \vec{e} - вектор поляризації світла

у загальний вираз для коефіцієнту поглинання

$$\alpha(\omega) = C_0(\omega) \frac{2}{V} \sum_{\vec{k}_i, \vec{k}_f} \left| \langle \vec{k}_f | \vec{e} e^{i\vec{k}z} \hat{p} | \vec{k}_i \rangle \right|^2 \times \\ \times \left\{ f(\vec{k}_i) - f(\vec{k}_f) \right\} \delta(E_{ef} - E_{ei} - \hbar\omega) \quad (1)$$

$$C_0(\omega) = \frac{\pi e^2}{m_e^2 \omega n \epsilon \epsilon_0}$$

Шляхом розрахунку для **найпростішого випадку без урахування виродження валентної зони (розщеплення на підзони важких і легких дірок)** для коефіцієнту поглинання отримаємо

$$\alpha(\omega) = \frac{C_0(\omega)}{L} \left| \langle u_{co} | \vec{e} \hat{p} | u_{vo} \rangle \right|^2 \left(\frac{\mu}{\pi \hbar^2} \right) \times \\ \times \sum_{n,m} |I_{nm}|^2 H(\hbar\omega - E_{vm}^{en})$$

де матричний елемент, що визначає поляризаційну залежність обговорено у **питанні 8**, μ - зведена ефективна маса, L - товщина ями

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_h^*}$$

$$E_{c n 0} + E_g - E_{v m 0} \equiv E_{v m}^{c n}$$

$E_{c n 0}$ - край n-ї підзони зони провідності.

$E_{v m 0}$ - край m-ї підзони валентної зони.

$H(\dots)$ - функція Хевісайда

$$\int_0^{\infty} \delta(E_{v m}^{c n} - \hbar\omega + x) dx = H(\hbar\omega - E_{v m}^{c n})$$

$$H(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ 1, & x > 0 \end{cases}$$

Позначивши **огиначаючі функції** електрона в підзонах через

$$F_{v m} = \frac{1}{\sqrt{s}} e^{i \vec{k}_{1 m} \vec{z}_{\perp}} g_m(z)$$

$$F_{cn}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{S}} e^{i\vec{k}_\perp \vec{r}_\perp} \chi_n(z)$$

де введено позначення

$$\vec{k}_\perp = \vec{i} k_x + \vec{j} k_y ; \quad \vec{r}_\perp = \vec{i} x + \vec{j} y$$

Отримаємо

$$J_{nm} = \int_{-\infty}^{+\infty} \chi_n^*(z) g_m(z) dz$$

Правила відбору (без урахування поляризаційної залежності коефіцієнту поглинання, яка обговорена у **питанні 8!**) визначаються значенням інтегралу J_{nm}

У випадку нескінченно глибокої квантової ями

$$g_m(z) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cdot \sin\left(\frac{\pi m z}{L}\right)$$

$$\chi_n(z) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cdot \sin\left(\frac{\pi n z}{L}\right)$$

$$J_{nm} = \int_{-\infty}^{+\infty} \chi_n^*(z) \cdot g_m(z) dz = \delta_{mn}$$

Це означає що у нескінченно глибокій квантовій ямі дозволені лише оптичні переходи між підзонами з однаковими номерами $m=n$!

В симетричних квантових ямах скінченної глибини правила відбору $n-m=\text{парне ціле число} \neq 0$

11. Методи отримання нанорозмірних вуглецевих структур (фулеренів, вуглецевих нанотрубок, графенів та графеноподібних структур).
12. Зонна структура одностінних вуглецевих нанотрубок різної хіральності.
13. Структура одностінних вуглецевих нанотрубок. Хіральні та ахіральні вуглецеві нанотрубки, індекси хіральності.
14. Концентраційні та температурні залежності електропровідності полімерних композитів на основі нановуглецевих структур. Перколяційна модель.
15. Система рівнянь для опису процесу гомогенного зародкоутворення в однокомпонентних та бінарних системах. Радіус та робота утворення критичного зародка, частота зародкоутворення, лінійна швидкість росту кристалів, об'ємна частка кристалічної фази.
16. Структура поверхонь. Поверхнева кристалографія. Поверхні з адсорбатами. Дефекти на поверхнях.
17. Дифузія на поверхнях. Стохастичний рух. Континуальна теорія дифузії. Бар'єр Ерліха-Швобеля.
18. Тонкі плівки. Стадії росту тонких плівок. Механізми росту тонких плівок.
19. Фізичні принципи мікроскопії ближнього оптичного поля та її застосування для дослідження морфології наносистем.
20. Фізичні принципи електро- та магнітносилової зондової мікроскопії. Застосування методу для визначення локальних електричних та магнітних характеристик нанооб'єктів.
21. Метод малокутового розсіювання рентгенівських променів. Кореляційна функція та функція розподілу. Застосування методу для дослідження морфології наносистем.
22. Метод сканувальної тунельної мікроскопії: фізичні принципи та можливості визначення фізичних характеристик наносистем.
23. Фізичні принципи атомно-силової мікроскопії поверхні. Визначення рельєфу поверхні, локальних діелектричних характеристик та електронної будови наноматеріалів.
24. Методи формування кремнієвих нанониток та приклади їх застосування.
25. Механізми люмінесценції наноструктурованого кремнію.
26. Методи синтезу та механізми формування поруватого кремнію.
27. Оптичні властивості середовищ на основі наноструктурованого кремнію. Застосування фотонно-кристалічних структур.
28. Молекулярно-променева епітаксія. Режими гетероепітаксійного росту.
29. Процеси самоорганізації при створенні наноматеріалів.
30. Основи лінійної нерівноважної термодинаміки. Термодинамічні потоки та сили. Співвідношення Онзагера.
31. Теорія функціоналу густини: основні положення та переваги. Алгоритм розрахунку.

32. Класичний метод молекулярної динаміки. Рівняння руху. Схеми інтегрування.
33. Класичний метод молекулярної динаміки. Парні та багаточасткові потенціали, потенціал зануреного атома: переваги та недоліки.
34. Класифікація нанокомпозитних матеріалів. Області застосування нанокомпозитних матеріалів.
35. Механічні властивості нанокомпозитних матеріалів. Правило Холла-Петча та його особливості для наноматеріалів.
36. Вплив нанорозмірності на особливості формування діаграм стану та температури фазових переходів.
37. Магнітні властивості наноматеріалів. Коерцитивне поле. Суперпарамагнетизм.
38. Фазова діаграма кремнезему SiO_2 . Поліморфні модифікації, енантіотропні переходи між ними. Некристалічні форми кремнезему.
39. Мартенситні перетворення. Матеріали з ефектом пам'яті форми.
40. Smart-матеріали: приклади, фізичні властивості, області застосувань.
41. Вплив квантового обмеження та поверхневих ефектів на фізичні властивості наноструктур.
42. Оптичні властивості напівпровідникових та металевих наночастинок. Поверхневий плазмонний резонанс.
43. Особливості теплових властивостей наноструктур. Механізми розсіювання фононів.
44. Метод Монте-Карло для моделювання наноструктур. Алгоритм Метрополіса.

Перелік питань з фізики

1. Методи аналітичного опису механічних систем. Порівняльний аналіз механіки Ньютона, Лагранжа, Гамільтона.
2. Закони збереження та їх зв'язок з фундаментальними властивостями простору і часу.
3. Динаміка поступального і обертального руху твердого тіла.
4. Явища переносу (дифузія, в'язкість, теплопровідність).
5. Основні положення фізики фазових переходів.
6. Функції розподілу Максвелла-Больцмана, Фермі-Дірака, Бозе-Ейнштейна.
7. Основні закони термодинаміки. Умови термодинамічної рівноваги.
8. Нерівноважні процеси в системі багатьох частинок. Одночастинкова функція розподілу. Кінетичне рівняння Больцмана.
9. Електромагнітна взаємодія. Мікроскопічні та макроскопічні рівняння електродинаміки.
10. Електромагнітні хвилі. Хвильове рівняння. Плоскі та сферичні хвилі. Поляризація електромагнітних хвиль. Стоячі хвилі.
11. Взаємодія світла з речовиною: поглинання, пружне та непружне розсіяння, люмінесценція.

12. Дифракція світла і рентгенівського проміння: прояви і застосування.
13. Будова атомних оболонок. Механічні та магнітні моменти. Періодична таблиця елементів.
14. Нульові коливання вакууму. Зсув Лемба.
15. Основні рівняння квантової механіки: рівняння Шредінгера, Дірака, Паулі.
16. Методи квантового опису систем багатьох частинок: адіабатичне наближення, метод Хартрі-Фока.
17. Квазічастинки в фізиці: фонони, поляритони, екситони, плазмони, магнони.
18. Фізичні принципи роботи лазерів. Характеристики лазерного випромінювання.
19. Фізична модель Всесвіту. Великий вибух та еволюція Всесвіту. Утворення елементарних частинок та хімічних елементів.
20. Елементарні частинки. Частинки та античастинки. Сильна взаємодія та структура адронів.
21. Кварки та глюони, їх основні характеристики. Кваркова структура баріонів та мезонів.
22. Інерціальні та неінерціальні системи відліку. Сили інерції. Динаміка системи матеріальних точок.

Затверджено на засіданні науково-методичної комісії фізичного факультету, протокол №5 від 20 грудня 2024 р.