

АНОТАЦІЯ

Гутів В. В. Теорія перенормованого спектру багатозонних квазічастинок взаємодіючих з поляризаційними фононами. – Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора філософії за спеціальністю 104 – Фізика та астрономія. – Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича МОН України, Чернівці, 2023.

Дисертаційна робота присвячена побудові теорії функціонування й оптимізації параметрів активного елемента широкосмугового нанофотодетектора далекого інфрачервоного діапазону з новим потенціальним рельєфом. Зосереджено увагу на створенні на основі давидівської моделі системи теорії перенормування спектрів багаторівневої квазічастинки взаємодіючої з одномодовими фононами, й однорівневої квазічастинки взаємодіючої з багаторівневими фононами з урахуванням багатофононних процесів у досліджуваних багатозонних наносистемах.

У вступі обґрунтований вибір теми й актуальність роботи, сформульована мета, основні задачі, об'єкт та предмет дослідження, вказана наукова новизна і практична цінність отриманих результатів, представлено інформацію про особистий внесок здобувача, апробацію роботи, її структуру та обсяг.

У першому розділі здійснений короткий огляд і аналіз наукової літератури стосовно ідей, фізичних принципів та методів покращення параметрів функціонуючих наноприладів – квантовоямних інфрачервоних фотодетекторів та квантових каскадних детекторів фотопровідного й фотовольтаїчного типів. Проаналізовано використані різноманітні експериментальні способи покращення робочих параметрів нанодетекторів у всіх вікнах атмосферної прозорості інфрачервоного діапазону. Які успішно випробовувалися у шарах квантових ям, дротин і кілець.

Відмічено існування нормально функціонуючих квантових каскадних детекторів зі «спотвореними» або й «обірваними», так званими «фононними» драбинками їх екстракторів, що, згідно зі стандартними уявленнями, не могло б відбуватися. Поки що ця парадоксальна ситуація не знайшла однозначного теоретичного обґрунтування й тому було висловлене припущення про те, що відсутні енергетичні рівні в драбинках можуть бути заміщені наявними в системі рівнями зв'язаних станів квазічастинок (електронів) з фононами, тобто електрон-фононними сателітами. Зроблено висновок, оскільки в непертурбуваних підходах (теорія збурень, метод матриці густини, варіаційний метод, і тп.) ефективно врахувати багатофотонні процеси неможливо, то потрібно застосувати модифіковані підходи сучасної квантової теорії поля.

Другий розділ присвячений створенню квантової теорії спектральних параметрів і сил осциляторів квантових переходів електронів при їх фононсупровідному тунелюванні крізь каскади активної області широкосмугового нанофотодетектора далекого ІЧ-діапазону. Щоб забезпечити достатню ширину смуги поглинання фотодетектора й уникнути появи значного темнового струму, запропоновано новий просторовий дизайн його основної області, який створює односторонній рух електронів без прикладання зовнішнього постійного електричного поля.

Отже, активна область нанодетектора містить N однакових каскадів, кожен з яких складається з однієї безструктурної квантової ями і двох груп квантових ям з внутрішньою структурою. Висоти потенціальних бар'єрів (U) і півширини (d) та інверсовані потенціали ($\pm V$) внутрішніх ям і бар'єрів порівняно малі.

У моделі координатнозалежної ефективної маси електрона з потенціальним рельєфом описаних вище каскадів активної області розв'язано стаціонарне рівняння Шредінгера для кожної окремої квантової ями. З урахуванням граничних умов на хвильові функції, та потоків ймовірностей їх густин разом з умовами нормування знаходяться точні розв'язки хвильових

функцій, енергетичний спектр та сили осциляторів квантових переходів з основного на збуджений рівень кожної квантової ями.

На основі розвиненої теорії виконаний розрахунок спектральних параметрів каскадів ШКЯ та здійснено їх оптимізацію залежно від величин потенціалів U і V та геометричних розмірів D і d . Як складові елементи каскаду вивчалися ШКЯ $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ з малими внутрішніми бар'єрами $\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}$ та з малими внутрішніми ямами $\text{Ga}_y\text{In}_{1-y}\text{As}$. Такий вибір сполук зумовлений тим, що в них близькі розміри елементарних комірок, це забезпечує каскад від утворення шкідливих напружень, які збільшують темновий струм детектора, а також добре відомі прості лінійні співвідношення між концентраціями (x , y) складових елементів та енергетичними параметрами (U, V) й ефективними масами електрона (m) в усіх трьох областях ШКЯ.

Наукову новизну висновків, що їх вдалося зробити в другому розділі роботи на базі отриманих результатів, розкривають такі положення:

- уперше запропоновано новий просторовий дизайн каскаду широкосмугового квантовоямного нанофотодетектора далекого інфрачервоного діапазону. Його каскади складаються з ізотропних матеріалів квантових ям і бар'єрів з близькими розмірами елементарних комірок. На відміну від анізотропних матеріалів на межах квантових ям і бар'єрів практично не виникають напруги, які суттєво погіршують роботу наноприладів через збільшення темнового струму;

- активна область нанофотодетектора вперше складається з каскадів глибоких і широких квантових ям з інверсованою структурою внутрішніх малих квантових ям і бар'єрів. Варіації їхніх розмірів і величин потенціалів дозволяє значно збільшити сили осциляторів квантових переходів електронів під дією поля. Це сприяє зростанню відношення ширини до довжини хвилі смуги поглинання електромагнітного поля далекого інфрачервоного діапазону ($\eta \approx 37.54\% \div 44.21\%$ при $\lambda \approx 10\text{мкм} \div 25\text{мкм}$).

Третій розділ присвячений розробці методу послідовного виділення й парціального підсумовування мультиплікативних діаграм масового оператора

в теорії перенормування вироджених і невироджених спектрів багаторівневих квазічастинок взаємодіючих з багатьма одномодовими фононами.

Перенормований електронний спектр системи, до якої входить довільна кількість (τ) багаторівневих квазічастинок, що взаємодіють з одномодовими поляризаційними фононами й описується гамільтоніаном фреліхівського типу, розраховується методом діаграмної техніки Фейнмана в теорії функцій Гріна. При $T=0K$ для фур'є-образа квазічастинкових функцій Гріна $G_{\mu\mu'}^{(\omega)}$ ($\mu, \mu'=1,2,\dots,\tau$) утворюються τ^2 рівнянь, які пов'язують ці функції з повним матричним масовим оператором системи $M_{\mu\mu'}^{(\omega)}$. Систему рівнянь розв'язано точно й отримано узагальнене рівняння Дайсона, яке встановлює аналітичний зв'язок між функцією $G_{\mu}(\omega) \equiv G_{\mu\mu}(\omega)$, всіма елементами $M_{\mu\mu'}^{(\omega)}$.

Для того, щоб одержати перенормований спектр системи в широкому діапазоні енергій, який містить і головні, і сателітні стани, в масовому операторі необхідно враховувати діаграми дуже великих порядків і за степенями функцій зв'язку, і за кількістю фононних енергій. Це можна буде виконати в підході парціального підсумовування мультиплікативних діаграм. Однак через багаторівневість вихідного спектру квазічастинок у всіх вищих порядках складових масового оператора наявні й мультиплікативні, і немультіплікативні діаграми. У зв'язку з цим був запропонований метод поступового й послідовного виділення з усіх немультіплікативних діаграм фіксованого порядку суми всіх мультиплікативних діаграм менших порядків з наступним парціальним підсумовуванням нових безмежних рядів мультиплікативних діаграм.

Застосування розвиненого методу до задачі про взаємодію багаторівневих частинок з виродженими й невиродженими станами з численними одномодовими фононами дозволило отримати перенормовані спектри систем з головним і сателітним станами та встановити їх властивості коректно, уникнувши відомої «проблеми знаку» в масовому операторі.

Наукова новизна висновків, отриманих у цьому розділі, полягає у тому що:

- уперше запропоновано узагальнення діаграмної техніки Феймана для розрахунку масового оператора функції Гріна багаторівневої квазічастинки, взаємодіючої з одномодовими поляризаційними фононами. Розроблено новий метод ефективного врахування багатофононних процесів шляхом виділення мультиплікативних з немультіплікативних діаграм масового оператора з наступним парціальним їх підсумовуванням;

- уперше показано, що напрацьований метод узагальненої діаграмної техніки є доречним для систем і з виродженням, і з невиродженням енергетичними спектрами багаторівневих квазічастинок, взаємодіючих з довільним числом поляризаційних фононів при $T=0K$. Запропонований підхід ефективно враховує багатофононні процеси, долаючи відому «проблему знака» у квантовій теорії поля.

У четвертому розділі на основі гамільтоніана Фроліха в моделі Давидова вузькозонної квазічастинки, взаємодіючої з численними поляризаційними фононами довільної кількості (τ) мод при $T=0K$, вперше розвинена послідовна квантова теорія перенормованого спектра й середніх (ефективних) чисел фононів у всіх станах системи.

За допомогою точного розрахунку фур'є-образа запізнюючої функції Гріна квазічастинки вперше отримані аналітичні вирази для перенормованого спектра та ефективних (середніх) чисел фононів у всіх станах системи з довільним числом (τ) фононних мод. Розраховано й детально проаналізовано перенормовані спектри й ефективні (середні) числа фононів у всіх станах одно-, дво- і три- модових систем.

Наукова новизна висновків, отриманих у цьому розділі, полягає в тому, що:

- вперше показано, що, незалежно від констант взаємодії (α_λ) і від співвідношень між величинами енергій усіх фононних мод, перенормовані спектри квазічастинок стаціонарні (незатухаючі) і дискретні, причому

основний і перший сателітні рівні не вироджені, а решта сателітної частини спектра суттєво залежить від співвідношень між енергіями фононних мод. Якщо енергії всіх мод кратні найменшій, то спектр еквідистантний і вироджений. Якщо хоча б одна з мод не кратна до іншої, а інші кратні між собою, то спектр не еквідистантний і частково вироджений. Якщо відношення мод є ірраціональними числами, то спектр не вироджений і не еквідистантний;

- вперше виконаний точний розрахунок і аналіз середніх чисел фононів у сателітних станах виявив, що, незалежно від τ , α_λ і Ω_λ , всі вони є сильно зв'язаними фононоподібними комплексами. Лише в основному стані при збільшенні α_λ квазічастинка змінює свої властивості від майже квазічастинкових з малою фононною «шубою» через гібридний комплекс аж до сильно зв'язаного фононоподібного комплексу;

- для системи однорівневих квазічастинок взаємодіючих з довільним числом мод поляризаційних фононів у моделі Давидова вперше точно розраховано перенормований спектр і, на відміну від результатів відомої раніше наближеної теорії, де отримано не фізичне затухання спектра при $T=0\text{K}$, тепер чітко показано, що він залишається незатухаючим і дискретним з основним та з виродженими й невиродженими сателітними станами.

На прикладі одно-, дво- і тримодових систем з феноменологічним затуханням при $T=0\text{K}$ вперше отримано і проаналізовано частотну залежність функцій фопми смуги поглинання та її спектральних параметрів у широкому діапазоні енергій, який містить головні й відповідні їм сателітні піки фононних повторень.

Практичне значення отриманих результатів.

Запропонований у роботі новий дизайн активної області нанодетектора може бути застосований для експериментального створення й дослідження оптимізованого широкосмугового нанофотодетектора далекого інфрачервоного діапазону, який може працювати у вікні атмосферної прозорості.

Запропоновані й узагальнені методи діаграмної техніки можуть бути модифіковані для розрахунку масових операторів фур'є-образів функцій Гріна багатозонних квазічастинок взаємодіючих з багатомодовими фононами з урахуванням багатофононних процесів при довільних температурах.

Ключові слова: квазічастинка; фонон; сила осцилятора; енергетичний (електронний) спектр і хвильова функція; резонансно-тунельна структура; рівняння Шредінгера; функція Гріна; координатнозалежна ефективна маса; енергетичні рівні квантової системи; квантовий каскадний детектор (прилад); електричне і магнітне поля; метод функцій густини; наноструктура (система); квантові ями, точки і кільця.