

УНИВЕРЗИТЕТ У БЕОГРАДУ
ЕЛЕКТРОТЕХНИЧКИ ФАКУЛТЕТ

Дејан К. Вељковић

**МОДЕЛОВАЊЕ МЕХАНИЧКОГ
НАПРЕЗАЊА У ПОЛУПРОВОДНИЧКИМ
НАНОСТРУКТУРАМА**

докторска дисертација

Београд, 2016

UNIVERSITY OF BELGRADE
FACULTY OF ELECTRICAL ENGINEERING

Dejan K. Veljković

**MECAHNICAL STRESS MODELLING IN
SEMICONDUCTOR NANOSTRUCTURES**

Doctoral Dissertation

Belgrade, 2016

МЕНТОР:

др Дејан Раковић, редовни професор,
Универзитет у Београду – Електротехнички факултет

ЧЛАНОВИ КОМИСИЈЕ:

др Дејан Раковић, редовни професор,
Универзитет у Београду – Електротехнички факултет

др Милан Тадић, редовни професор,
Универзитет у Београду – Електротехнички факултет

др Небојша Ромчевић, научни саветник,
Универзитет у Београду – Институт за физику

др Јелена Поповић Божовић, доцент,
Универзитет у Београду – Електротехнички факултет

др Жељко Ђуришић, доцент,
Универзитет у Београду – Електротехнички факултет

Датум одбране: _____

Хвала Богу, без чије помоћи не бих урадио ништа.

*Хвала мом ментору др Дејану Раковићу, редовном професору на
несебичној помоћи и подршци.*

*Хвала мојим пријатељима, колегама и свим људима добре воље који су
доста помогли да се овај рад приведе крају.*

*Овај рад посвећујем свима
који су студирали, студирају и студираће ЕТФ.*

МОДЕЛОВАЊЕ МЕХАНИЧКОГ НАПРЕЗАЊА У ПОЛУПРОВОДНИЧКИМ НАНОСТРУКТУРАМА

Резиме

Током последњих двадесет година много пута је показано да је технолошки могуће добити наноструктуре у облику вертикално и периодично поређаних квантних тачака - КТ стекова. Овакве наноструктуре могу наћи потенцијалну примену у полупроводничкој ласерској технологији, или за израду соларних ћелија.

До данас није објављен ниједан научни рад у коме су изведени аналитички изрази за израчунавање механичких деформација унутар КТ стекова. Известан број радова бавио се израчунавањем механичких деформација применом нумеричких метода, и то за КТ стекове састављене од мањег броја квантних тачака.

У овој докторској дисертацији анализирани су вертикални стекови полупроводничких квантних тачака без дислокација, уграђених у супстрат полупроводника друге врсте, за епитаксијални раст у кристалном правцу (001). Изведени су аналитички изрази за деформацију унутар оба полупроводника у случају када су дебљине квантних тачака и супстратских одстојника довољно мале у односу на попречне димензије стека. У конкретним случајевима, када се стек састоји од $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ квантних тачака унутар GaAs супстрата, где x узима вредности 0,25; 0,5; 0,75 и 1,0, израчунати резултати приказани су графички. Ови резултати показали су да контролом односа броја монослојева у квантној тачки и броја монослојева у периоду стека (односа ξ) деформација унутар квантне тачке може бити прецизно контролисана. На тај начин могуће је прецизно контролисати и електронска и оптичка својства квантних тачака које зависе од деформације, што је и показано у случају свих испитаних наноструктура.

Од електронских својстава наноструктуре израчунате су и графички представљене промене растојања дна проводне зоне од врха зона лаких и тешких шупљина у случају свих испитаних наноструктура. Мања од тих двеју промена одређује и промену ефективног енергетског процепа. Промена растојања дна проводне зоне од врха зоне тешких шупљина се благо мења са односом ξ , док се растојање од врха зоне лаких шупљина мења са много већим нагибом, и ова чињеница отвара могућности за контролу енергетског процепа мењањем односа ξ . Промену енергетског процепа са променом односа ξ диктира растојања дна проводне зоне од врха зона лаких шупљина, почевши од вредности односа $\xi = 0,592$, тј у интервалу $0,592 \leq \xi \leq 1$, и ово је управо интервал од интереса, у поменутом смислу, и то за све испитане наноструктуре.

Кључне речи: Деформација, Механички напон, Наноструктуре, Аналитичко извођење, Квантне тачке, Стекови, Монослојеви, Полупроводници, Електронска својства, Енергетски процеп.

Научна област: Техничке науке - електротехника

Ужа научна област: Електротехнички материјали и технологије

UDK: 621.3

MECAHNICAL STRESS MODELLING IN SEMICONDUCTOR NANOSTRUCTURES

Abstract

It was proven many times during the past twenty years that the vertical alignment of the semiconductor quantum dots into the vertical stacks - QD stacks, is technologically possible. This kind of nanostructures could be appropriate for the applications in the semiconductor laser technology, and for the solar cells fabrication.

Until now, there is no published scientific paper about the analytical strain evaluation inside QD stacks. Some of the published papers have discussed results obtained by the numerical methods for the stacks which have consisted of several quantum dots.

In this Doctoral Dissertation the vertical stacks of semiconductor quantum dots without dislocations, incorporated in the other semiconductor substrate, for the epitaxial growth in the crystal direction (001) were considered. Analytical expressions for the strain in the both semiconductors were derived for the case when the thicknesses of quantum dots and the substrate spacers are small enough in comparison with the stack lateral dimensions. In the particular cases when the stack consists of $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ quantum dots in the GaAs substrate, where x takes values 0.25; 0.5; 0.75 and 1.0, the obtained results were calculated and shown graphically. These results have shown that by controlling ratio between the number of monolayers in InAs quantum dots and number of monolayers in the stack period (ratio ξ), quantum dots strain could be precisely controlled. In this way, the electronic and optical properties of quantum dots, which depend on the strain, could be controlled precisely, and that was shown for all of the tested nanostructures.

Among the nanostructure electronic properties, the changes in distances between the bottom of the conduction zone, and the tops of the heavy hole and light hole zones, for all of the tested nanostructures, were calculated and graphically presented. From these two changes, smaller one determines the change in the effective energy gap.

Distance change from the bottom of conduction zone to the top of heavy hole zone slightly varies with the ratio ξ , while the distance change from the bottom of conduction zone to the top of light hole zone varies with a pretty greater slope, and this fact opens the new possibilities for the energy gap control by changing ratio ξ . Changing of energy gap with changing ratio ξ is dictated by the distance from the bottom of conduction zone to the top of light hole zone, starting with the ratio $\xi = 0.592$, i.e. in the interval $0.592 \leq \xi \leq 1$, and this is the interval of interest, as interpreted above, for all of the tested nanostructures.

Keywords: Strain, Mechanical stress, Nanostructures, Analytical evaluation, Quantum dots, Stacks, Monolayers, Semiconductors, Electronic properties, Energy gap.

Scientific area: Technical Sciences - Electrical Engineering

Specific scientific area: Electrical Materials and Technologies

UDK: 621.3

САДРЖАЈ:

Увод	1
Глава 1. КВАНТНЕ ТАЧКЕ	5
1.1 Основни појмови и особине	
квантних тачака	5
1.2 Разлика у односу на класичне	
полупроводнике	6
1.3 Инжињеринг оптичких параметара	
квантних тачака	7
1.4 Перспективе примене квантних тачака	8
Глава 2. МЕХАНИЧКО НАПРЕЗАЊЕ У АНИЗОТРОПНИМ	
КРИСТАЛНИМ МАТЕРИЈАЛИМА	20
2.1 Тензор механичког напона	20
2.2 Тензор деформације	24
2.3 Еластичност материјала. Тензор еластичности	27
2.4 Енергија кристала у напрегнутом стању	30
2.5 Симетрије кристала и матрица еластичности	31
Глава 3. УТИЦАЈ МЕХАНИЧКИХ ДЕФОРМАЦИЈА НА	
ЕЛЕКТРОНСКУ СТРУКТУРУ ПОЛУПРОВОДНИКА	34
3.1 Bloch-ове функције	34
3.2 кр Петурбациона теорија	37
Глава 4. МЕХАНИЧКА ДЕФОРМАЦИЈА УНУТАР	
ВЕРТИКАЛНОГ СТЕКА КВАНТНИХ ТАЧАКА	52
4.1 Аналитичко извођење израза за деформацију	
унутар КТ стека	53
4.2 Практични резултати	58
ЗАКЉУЧАК	76
Литература	80
Биографија	92
Прилози (изјаве)	93

УВОД

Наноструктуре су реалне геометријске структуре, димензија нанометарских редова величине, састављене од различитих врста материјала. Код наноструктура постоји и могућност да оне са координатама могу континуално мењати свој састав (легуре променљивог састава).

Наноструктуре представљају саставни део многих модерних полупроводничких направа. Користе се како у микроелектроници тако и у оптоелектроници, сензорима различитих врста, нанороботици, а налазе примену и у медицини, трговини (маркирање индустријских производа), и у осталим гранама науке, технике, технологије, као и делатностима општег карактера. Њихова посебност се нарочито испољава кроз дискретизацију енергетских нивоа носилаца наелектрисања, што потиче од тога што им је бар једна димензија нанометарског реда величине, а на тим димензијама до изражаја долазе квантни ефекти. Услед раздвајања енергетских нивоа, долази до промене електронских и оптичких особина наноструктура, као и до испољавања посебних ефеката на квантном нивоу.

Квантне тачке или нанокристали представљају специјалну врсту материјала, веома малих димензија реда величине неколико нанометара. Кључну

улогу у инжињерингу полупроводничких материјала нових особина, и задатих параметара, игра управо њихова мала величина односно ограниченост у све три димензије на нанометарски ред величине. Услед тога долази до потпуне дискретизације енергетских нивоа по све три димензије.

Све бржи научно-технолошки развој у области нанотехнологија, интензивно намеће нове захтеве у погледу физичких особина коришћених материјала. Полупроводничке наноструктуре су широку примену нашле управо због своје флексибилности, и могућности прецизног контролисања и инжењеринга физичких својстава, и то помоћу прецизне контроле димензија, избора материјала, контролом састава легура различитих материјала, избором погодног геометријског облика, итд... Један од начина контроле њихових електронских и оптичких особина могао би да буде и путем контролисања уграђеног механичког напона.

Механички напон у наноструктурама се јавља као последица уграђеног механичког напрезања, у самом процесу израде наноструктура. Наиме, услед разлике у параметрима кристалне решетке, долази до напрезања у раздвојној равни слојева различитих материјала, што резултује механичким напрезањем у читавој наноструктури. Уграђени механички напон, остварен на овакав начин, може да буде далеко већи, него што је то уопште могуће постићи дејством спољашњих сила.

Познато је да се електронска структура, као и оптичке особине полупроводника мењају са механичким напрезањем материјала. Деформација кристалне решетке доводи до промене параметара кристалне решетке, а самим тим и положаја атома у њој, што доводи до промене њиховог електричног поља у међупростору. Услед померања атома долази и до промена у преклапању њихових електронских омотача. Због свега овога дешава се померање енергетских нивоа носилаца наелектрисања.

Што се утицаја на електронску структуру енергетских нивоа тиче, он се највише огледа у померању зона лаких и тешких шупљина унутар валентне зоне, којом приликом се у случају механичког истезања, зона лаких шупљина издиже изнад зоне тешких шупљина, док се у случају механичке компресије спушта

испод ње. Ове појаве посебно резултују и у мењању једног од кључних параметара полупроводничких наноструктура – ефективног енергетског процепа.

Докторска дисертација је подељена на 7 целина.

У уводу је укратко описана област којој припада докторска дисертација, са посебним освртом на проблематику којом се она бави. Затим је укратко описана свака целина, и на крају објашњен основни мотив за израду дисертације.

У глави 1 описани су основни појмови везани за квантне тачке и њихове особине. Објашњено је у чему се састоји њихова разлика у односу на класичне полупроводнике, описани су основни принципи инжињеринга оптичких особина квантних тачака, и представљене су основне перспективе њихове примене у областима физичке електронике, електронике и природних наука, а посебно медицине.

У глави 2 приказане су полазне основе у области механичког напрезања у анизотропним срединама, потребне за даљу анализу.

У глави 3 укратко је описана кр пертурбациона теорија за израчунавање електронске структуре енергетских нивоа код полупроводника, као и њена примена у случају дејства механичких деформација, у погледу утицаја деформација на електронску структуру полупроводника, од којих се састоје вишеслојне III-V полупроводничке структуре које су предмет докторске дисертације.

У глави 4 налази се допринос докторске дисертације. Предмет анализе докторске дисертацији су тзв. КТ стекови - наноструктуре у облику вертикално поравнатих полупроводничких квантних тачака без дислокација, уграђене у супстрат полупроводника друге врсте, за епитаксијални раст у кристалном правцу (001). Изведени су аналитички изрази за деформацију унутар оба полупроводника у случају када су дебљине квантних тачака и супстратских одстојника довољно мале у односу на попречне димензије стека. У конкретним случајевима, када се стек састоји од $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ квантних тачака унутар GaAs супстрата, где x узима вредности 0,25; 0,5; 0,75 и 1,0, израчунати резултати приказани су графички. Од електронских својстава наноструктуре израчунате су и графички представљене промене растојања дна проводне зоне од врха зона лаких и тешких шупљина у случају свих испитаних наноструктура. У овој глави је дата и дискусија свих

добијених резултата.

У закључку су описани добијени резултати, као и главни доприноси докторске дисертације.

У целини која садржи коришћену литературу дат је списак референци по редоследу појављивања у тексту дисертације.

Основни мотив за израду ове докторске дисертације је био у томе што до данас није објављен ниједан научни рад у коме су изведени аналитички изрази за израчунавање механичких деформација унутар КТ стекова. Известан број постојећих радова из ове области бавио се израчунавањем механичких деформација применом нумеричких метода, и то за КТ стекове састављене од мањег броја квантних тачака. У овој докторској дисертацији су изведени аналитички изрази за деформацију унутар оба полупроводника, у случају када су дебљине квантних тачака и супстратских одстојника довољно мале у односу на попречне димензије стека. У конкретним случајевима, када се стек састоји од $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ квантних тачака унутар GaAs супстрата, где x узима вредности 0,25; 0,5; 0,75 и 1,0 ($x = 1,0$ заправо одговара квантним тачкама од InAs), израчунати резултати приказани су графички. Ови резултати су показали да деформација унутар квантних тачака може бити прецизно контролисана контролом односа броја монослојева у квантној тачки и броја монослојева у периоду стека (односа ξ). На тај начин могуће је прецизно контролисати и електронска и оптичка својства квантних тачака, која зависе од деформације. Користећи добијене аналитичке изразе, а на основу израза из главе 3, израчунато је и графички представљено померања границе зона лаких и тешких шупљина у свим случајевима, тј. за све вредности моларног удела x .

1. КВАНТНЕ ТАЧКЕ

1.1 ОСНОВНИ ПОЈМОВИ И ОСОБИНЕ КВАНТНИХ ТАЧАКА

Квантне тачке или нанокристали представљају специјалну врсту материјала, веома малих димензија реда величине неколико нанометара (отприлике неколико десетина дијаметара атома по једној физичкој димензији). Квантне тачке су наноструктуре нултог реда, што значи да су електрони, шупљине и екситони просторно локализовани у димензијама реда величине њихове de Broglie-ве таласне дужине, док се енергетски посматрано налазе распоређени на дискретним енергетским нивоима [1,2].

Квантне тачке могу бити различитог облика. Комбинација различитих материјала и облика даје теоретски непрегледно мноштво могућности за креирање квантних тачака различитих оптичких и електронских особина. Практично, ипак та слобода у изради квантних тачака је ограничена постојећим опробаним технолошким процесима. Без обзира на то, током последњих година, забележен је изузетан напредак у освајању нових идеја у постојећим технологијама, тако да истраживачи великом брзином изналазе све оптималније процесе за израду квантних тачака, различитих облика састављених од различитих комбинација

полупроводника.

Са појавом производње квантних тачака, практично се бришу многа ограничења у добијању полупроводничких материјала са новим особинама. Разлог је једноставан – огромна слобода у креирању квантних тачака различитих величина, облика и од различитих комбинација материјала.

1.2 РАЗЛИКА У ОДНОСУ НА КЛАСИЧНЕ ПОЛУПРОВОДНИКЕ

По чему се квантне тачке разликују од класичних полупроводника?

Код класичних полупроводника валентна и проводна зона практично су готово континуалне у погледу енергија које могу имати носиоци наелектрисања, у областима валентне и проводне зоне [1]. Код квантних тачака услед малих димензија по сва три правца координатног система, ови енергетски нивои су приметно раздвојени. Услед тога квантна тачка се не понаша као класичан полупроводник. Шта се заправо дешава, и одакле потиче та разлика у односу на већи комад полупроводника истог састава?

Такозвани ексцитони [3] представљају пар електрон-шупљина који настаје када неки од електрона из валентне зоне додавањем енергије пређе у валентну зону, а на упражњеном месту остави шупљину. Ако је средње растојање електрона и њему припадајуће шупљине у ексцитону, познато као *Боров радијус* ексцитона, много мање од димензија кристала полупроводника, тада се може показати да је густина енергетских нивоа унутар валентне односно проводне зоне веома велика, па се апроксимативно може сматрати континуалном. Међутим, код малих кристала, односно квантних тачака то није случај. Димензија квантне тачке је реда величине Боровог радијуса ексцитона, а у том случају се може показати да растојање енергетских нивоа није занемарљиво мало у односу на величину енергетског процепа, те се стога њихова дискретизација ни у ком случају не сме занемаривати [4].

Друга последица дискретизације енергетских нивоа је, да услед апсорпције

извесног броја носилаца наелектрисања од стране квантне тачке, долази до мењања енергетског процепа квантне тачке - његовог повећавања [2], а тиме и до промене њених оптичких особина. Даље, енергетски процеп квантне тачке услед дискретизације нивоа у све три димензије увек је већи од енергетског процепа полупроводника од кога је квантна тачка начињена, а разлика се може веома прецизно контролисати променом димензија квантне тачке, што се и користи као једна од метода у инжињерингу енергетског процепа квантних тачака.

1.3 ИНЖИЊЕРИНГ ОПТИЧКИХ ПАРАМЕТАРА КВАНТНИХ ТАЧАКА

Квантне тачке испољавају особине фреквентно-селективног апсорбера светлости, па се из тог разлога могу користити за кохерентну апсорпцију електромагнетног зрачења. Наиме, за разлику од већих комада кристалног полупроводника, који светлост апсорбују у континуалном интервалу, квантне тачке тј. нанокристали апсорбују електромагнетно зрачење у веома уским интервалима таласних дужина. Спектар апсорпције је интерференција резонантних пикова у различитим карактеристичним тачкама, које одговарају карактеристичним таласним дужинама ексцитона. Амплитуда пикова опада са таласном дужином. Први пик одговара првом ексцитону, други другом итд... Таласна дужина првог пика је свакако функција величине квантне тачке као и материјала од којих је квантна тачка сачињена.

Само по себи је јасно да ће квантне тачке и као извори зрачења, из истог разлога као и код апсорпције, имати уско селективну емисиону спектралну карактеристику, па се могу користити и као извори кохерентног електромагнетног зрачења [5]. Емисиони пикови су звонастог облика, и то у форми Гаусове криве. Таласна дужина максимума који одговара првом ексцитону је мало већа него у случају апсорпције, услед феномена названог *Stokes-ов померај* [6]. Таласна дужина која одговара максимуму је независна од таласне дужине побудне светлости, под условом да је она мања од таласне дужине која одговара

максимуму апсорпције. Ширина криве емисионог спектра, одређена тачкама које одговарају половини максимума, зависи од температуре, сопствене ширине одговарајуће криве за једну просторно фиксирану квантну тачку, као и од параметара расподеле величине и облика квантних тачака у материјалу.

У неким комерцијалним применама праве се и колоидни раствори квантних тачака у различитим типовима растварача [7,8,9]. За површину квантних тачака могуће је хемијски везати радикалске групе молекула различитих врста. Тако припремљене квантне тачке могу се растварати у готово било којој врсти растварача, и самим тим бити уграђене и у различите типове неорганских и органских филмова. Оптичке особине квантних тачака одређене су типом припреме квантних тачака, односно врстом једињења које се везује за њихову површину. На тај начин омогућено је контролисање оптичких особина квантних тачака у колоидном раствору. У зависности од једињења које се везује за површину квантних тачака мењаће се и тзв. *квантна ефикасност* која представља проценат апсорбованих фотона који резултују емисијом фотона од стране квантне тачке¹.

Квантне тачке се могу користити и за израду уникатних мастила и пигмената што би рецимо могло наћи примену у заштити докумената, војним применама са комбинацијом ноћног осматрања за препознавање својих трупа итд.

1.4 ПЕРСПЕКТИВЕ ПРИМЕНЕ КВАНТНИХ ТАЧАКА

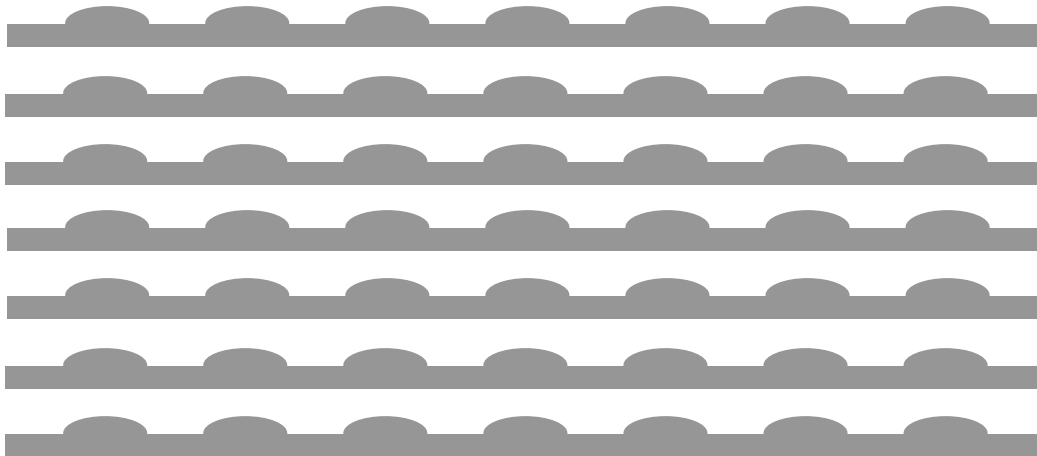
Квантне тачке се могу примењивати у различитим областима:

ФИЗИЧКА ЕЛЕКТРОНИКА. У овој области квантне тачке се могу употребити у изради широко коришћених компоненти од којих су најзначајније ласери и фотодетектори.

¹ Наиме емисијом фотона се осим емисионе реакције материјала на који се електромагнетно зрачење примењује, могу одиграти и нерадијативни прелази између енергетских нивоа електрона односно шупљина. Овакви прелази дешавају се углавном на површини квантних тачака, па отуда кључну улогу у том процесу има хемијско једињење везано за површину квантне тачке.

Ласери. Ласери на бази квантних тачака [10,11] садрже средњи, активни слој начињен од квантних тачака уграђених у неки изолатор или полупроводник. Јапански научници Arakawa и Sakaki су још 1982. године [12] предвидели да ће ласери базирани на квантним тачкама имати много мању температурску зависност параметара, и да подизањем температуре неће долазити до битније деградације перформанси ласера. Даље, предности ласера на бази активног слоја са квантним тачкама су мања струја прага, као и већа вредност диференцијалног појачања.

Перспективе ласера са активним слојем у коме се инкорпориране квантне тачке у слојевима уређеним у стекове, су велике у области огромних брзина преноса података, а малих снага потрошње. Наиме, Fujitsu лабораторије [13] при Токијском универзитету [14] развиле су први ласер са активним слојем састављеним од квантних тачака који ради на брзини 25 Gbit/s (слика 1.1).



Слика 1.1 Активни слој ласера састављен од InGaAs квантних тачака, уграђених у супстрат од GaAs. Квантне тачке су поређане по слојевима, који су вертикално уравни у облику стека.

Резултати истраживања били су презентовани на конференцији "Conference on Lasers, Electro-Optics, Quantum Electronics and Laser Science" (CLEO/QELS), одржаној у San Jose-у (USA), 2010 године [15]. Сматра се да ће теле-

комуникациони ласери следеће генерације бити базирани баш на овој технологији. Превиђа се и да ће ова технологија бити комерцијално исплатива и достићи брзине преноса од 100 Gbit/s. а на даљој комерцијализацији ове технологије ради јапанска фирма QDLaser [16].

Фотодетектори. Као и код ласера, и код фотодетектора имамо активни слој са квантним тачкама у којем се врши апсорпција фотона и генерација пара електрон-шупљина [17,18,19]. Услед већег средњег времена живота носилаца наелектрисања, фотодетектори на бази квантних тачака имају велику осетљивост, мању струју мрака, као и могућност рада на вишим температурама. Могућност израде фотодетектора за различите опсеге таласних дужина технолошки је изводљива, и то уз веома прецизну контролу.

ЕЛЕКТРОНИКА. Овде се квантне тачке користе у изради различитих електронских компоненти:

ЛЕД диоде. Осим за производњу класичних ЛЕД диода, од посебног значаја у комерцијалном смислу била би употреба квантних тачака у производњи ЛЕД диода беле светлости [20,21] које се користе за осветљење. На осветљење данас, чак и индустријски развијеним земљама одлази и до једна петина укупне произведене електричне енергије. ЛЕД извори светлости штеде електричну енергију у знатној мери, те отуда потиче велико интересовање за њихов развој. Да би се променила боја коју дају ЛЕД диоде, користе се различите врсте фосфорецентних материјала. Наиме површина ЛЕД диода се облаже а понекад и допира фосфорецентном материјом. Оваква технологија има неколико недостатака. Врста светлости односно спектар који се емитује је потпуно одређен врстом фосфорецентне материје, а до данас није позната материја која има довољно квалитетан емисиони спектар пријатан људском оку. Друго, процес производње је скуп и намеће ограничења у смислу облика извора светлости. Треће, апсорциони спектар је недовољно широк. Наиме, да би зрачили молекули фосфорецентног материјала морају апсорбовати електромагнетно зрачење. Међутим, ако је апсорциони спектар узак, онда долази до недовољно високог степена ефикасности извора зрачења. Квантне тачке превазилазе све наведене недостатке. Наиме, контролисањем величине квантних тачака, може се

контролисати боја. Белу боју добијамо мешањем - контролисањем односа броја “плавих”, “црвених” и “зелених” квантних тачака. Даље, могуће је остварити шири апсорциони спектар, и тиме већу емисиону ефикасност, јер је код већег броја квантних тачака већа и вероватноћа апсорпције уколико је испуњен услов да је енергија долазног фотона већа од енергетског процепа квантне тачке. Облик извора је такође могуће лако мењати јер је лако обликовање материјала са већ уграђеним квантним тачкама. Квантне тачке имају и предност дугог века трајања за разлику од традиционалних органских фосфоресцентних, односно флуоресцентних материја. Цена производње би била значајно мања у односу на цену садашњих ЛЕД извора беле светлости због једноставнијег процеса производње.

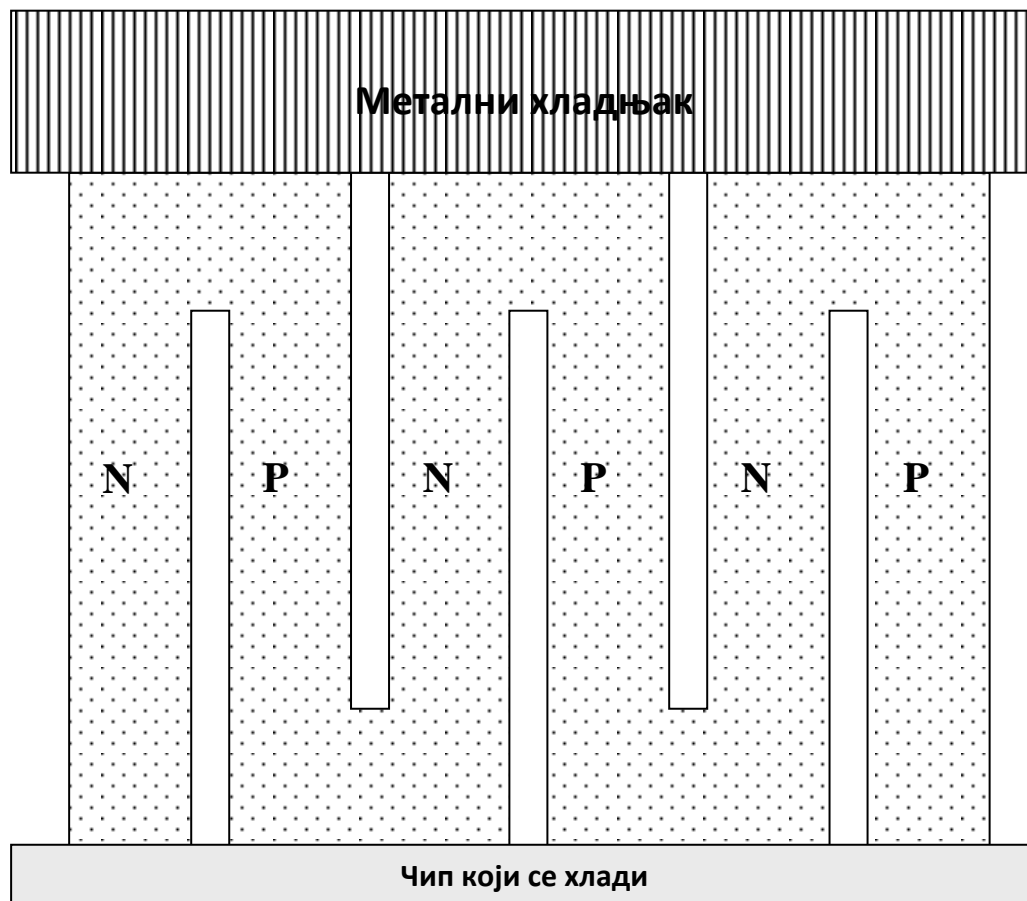
Квантне тачке се могу користити и у изради тзв. *активних ЛЕД диода* [22]. Класичне ЛЕД диоде имају ограничење по питању боје светлости које емитују, која је потпуно одређена величином енергетског процепа полупроводника погодних за њихову израду. Друго ограничење је чисто технолошке природе. Наиме, ЛЕД диоде се праве од великих комада полупроводника, који се секу на мање комадиће, чији је облик унапред дефинисан, тако да не постоји исплатива флексибилност по питању облика, јер свака промена облика у каснијим фазама израде подиже цену крајњег производа. Резултат ова два ограничења је немогућност комерцијално-исплативе израде одређених врста производа у које би се уграђивале ЛЕД диоде, иако на тржишту постоји огромна потреба за таквим производима. Оба поменута ограничења елиминишу се коришћењем ЛЕД диода на бази квантних тачака. Овакве ЛЕД диоде раде готово исто као и обичне ЛЕД диоде, са тим што се одговарајућа побуда носиоца наелектрисања, и накнадна емисија фотона, одвијају на површини квантних тачака (за разлику од *pn*-споја код класичних ЛЕД диода). Величина квантних тачака се може веома прецизно контролисати, а тиме и одговарајући положај енергетских нивоа носилаца наелектрисања. На тај начин више не постоји ограничење у погледу боје емитоване светлости. Даље, због веома мале величине, могуће је квантне тачке уграђивати у материјал чији се облик лако мења, и који може имати било које димензије. Такође, могуће је континуалан спектар боја добијати контролисањем односа броја плавих, црвених и зелених квантних тачака.

Соларне ћелије. Соларна енергија је веома чист облик енергије. Главни проблем који се јавља у комерцијалним применама соларне енергије је цена конверзије енергије која је веома висока. Проблем који се код соларних ћелија јавља је мали степен конверзије, кратак век трајања, као и цена подлоге на коју се постављају силицијумски панели, или филмови из друге генерације соларних ћелија. Соларне ћелије на бази филма још увек нису комерцијално заживеле у пуној мери, пре свега због малог степена конверзије. У том смислу соларне ћелије треће генерације, израђене на бази тродимензионалних уређених структура квантних тачака [23], обећавају пуно. Наиме, квантне тачке могу се уградити у било коју врсту материјала у форми тродимензионалне (3D) структуре, и то по невероватно ниским ценама, далеко нижим од цена силицијумских панела или танких филмова. Веома је битно нагласити да је због ефикаснијег упијања светлости од стране 3D структуре квантних тачака, могуће остварити и до два пута већи степен конверзије у односу на силицијумске. Даље, познато је да соларне ћелије направљене од материјала већег енергетског процепа поседују већи напон, док ћелије направљене од материјала са мањим енергетским процепом, имају већу излазну струју. У зависности од примене је потребан већи напон или струја, у мањој или већој мери, тако да увек постоји она оптимална вредност ширине енергетског процепа, коју би идеалан материјал требало да има. Ту флексибилност у промени енергетског процепа имају соларне ћелије са квантним тачкама.

У раду [24] представљене су најефикасније соларне ћелије до сада. Њихова измерена ефикасност износи 10,7%, а базирају се на тзв. самоасемблираним монослојевима (SAM-ови) [25].

Што се века трајања соларних ћелија тиче, могуће је квантне тачке технолошки заштитити слојем материјала, и на тај начин у великој мери придужити радни век ћелије. Процес производње соларних ћелија на бази квантних тачака био би далеко јефтинији него у случају познатих ћелија прве и друге генерације, како због мање цене материјала, тако и због мањег броја технолошких операција и мање сложености технолошког поступка чије би се операције одвијале на нижим температурама, смањујући тако потрошњу енергије у процесу производње.

Термоелектрични елементи. Термоелектричне појаве повезане су са феноменом претварања температурске разлике у електричну струју и обрнуто. Термоелектрична кола имају више предности, као на пример дуг век трајања, јефтино одржавање и еколошки преставаљају чист извор енергије. Даље, немају покретних делова, па су једноставније за израду, а самим тим имају мању цену од класичних генератора. Ипак, услед недостатака погодних материјала за израду, до појаве нанотехнологија, комерцијална израда термоелектричних кола није била оправдана, осим у ретким случајевима. Истраживања у правцу комерцијалне примене квантних тачака за израду термоелектричних елемената, данас су интензивна. Постоје два ефекта присутна код термоелектричних појава: Seebeck-ов ефекат претварања температурске разлике у разлику електричних потенцијала, и њему супротан Peltier-ов ефекат претварања електричне струје у температурску разлику.



Слика 1.2 Пелтијев елемент са квантним тачкама

У полупроводничкој технологији би се могао користити Peltier-ов ефекат и то за активно хлађење полупроводничких чипова. На тај начин допринело би се делимичном решавању проблема одвођења топлоте са чипова, што представља главну препреку даље минијатуризације чипова. Peltier-ов елемент би се овде састојао од комада полупроводника у коме су “затопљене” квантне тачке (слика 1.2). Применом квантних тачака, побољшале би се карактеристике Peltier-овог елемента [26].

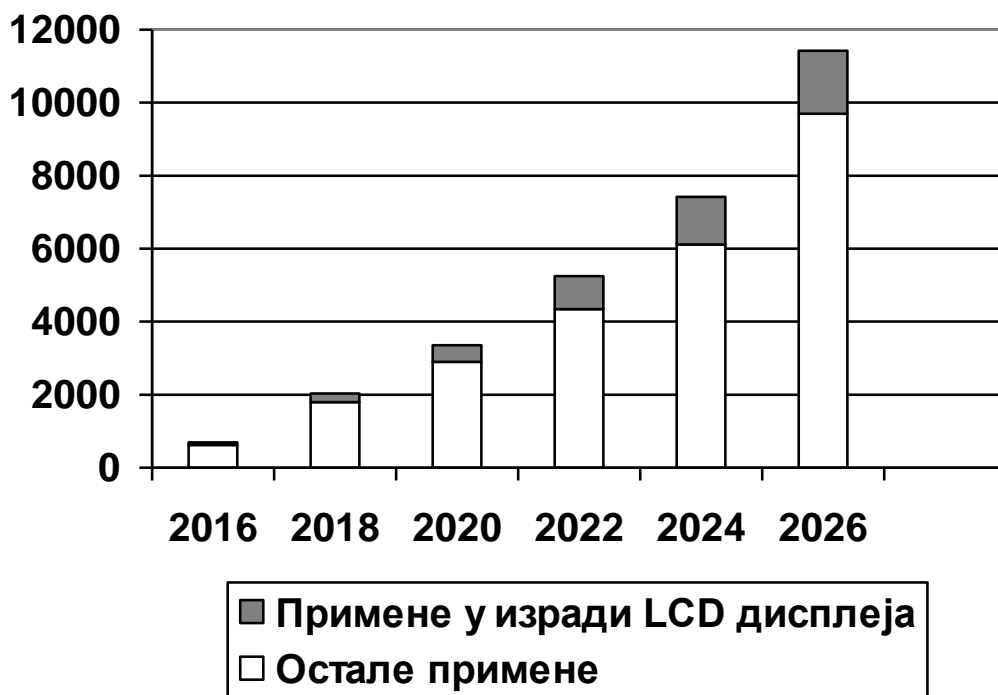
LCD дисплеји. Велики удео у комерцијалној употреби квантних тачака данас има индустрија LCD дисплеја, са LED позадинским осветљењем. Истраживањем фирме за комерцијална истраживања тржишта IDTechEx [27], направљена је пројекција кретања у блиској будућности у вези са производњом електронских уређаја који користе нанотехнологије базиране на квантним тачкама (Слика 1.3). Инжињерингом квантних тачака могуће је уз минималне измене технологије код LCD дисплеја остварити далеко ширу гаму боја. Данашњи LED дисплеји користе беле LED диоде као изворе светлости, а оне имају веома јаку компоненту плаве светлости, која има вишеструко штетна дејства. Плава светлост белих LED диода доводи до оштећења мрежњаче, а снажно подстиче и супресију лучења мелатонина, хормона веома важног за функционисање централног нервног система. Једна од видљивих последица таквог дејства је и поремећај сна.

Употребом квантних тачака, могуће је прецизним инжињерингом путем њихових димензија, подешавати спектар светлости у позадинском осветљењу. Идеално решење у том смислу било би директно уграђивање квантних тачака у изворе светлости, за шта данас још не постоје технолошка знања која би онемогућила штетан утицај радне температуре, чије дејство би веома брзо довело до деградације параметара квантних тачака. Данас постоје два технолошки могућа, и комерцијално исплатива решења.

Прво решење је [28] постављање посебно енкапсулираног међуслоја материјала са квантним тачкама између LED осветљења и LCD дисплеја (слика 1.4). Ово решење је технолошки изводљиво када су у питању дисплеји већих димензија - TV уређаји и компјутерски монитори. За мање дисплеје, који се уграђују у нове таблете и мобилне телефоне, мора се применити другачија технологија.

Друго решење, погодније за мање дисплеје је директна уградња квантних тачака у специјално израђене филмове [29]. Коришћењем ове технологије, осим шире гаме боја, значајно се повећава и динамика у погледу осветљености дисплеја. У перспективи је израда уређаја ултрависоке резолуције, по веома ниској цени, уз постизање квалитета у рангу данашњих OLED дисплеја, веома заступљених на вишем сегменту тржишта преносивих уређаја.

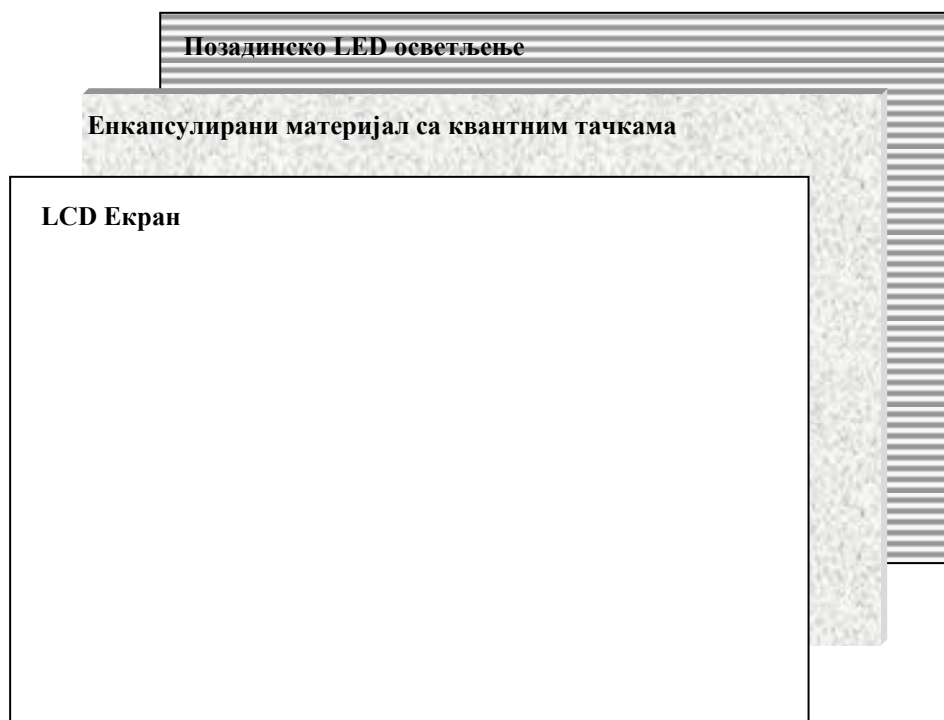
Због свега наведеног, очекује се да ће у технологији израде дисплеја било великих било малих дијагонала, наноматеријали на бази квантних тачака бити скоро обавезно заступљени, а највећи разлог за то је смањење штетне плаве светлости код данашњих уређаја.



Слика 1.3 Пројекција производње електронских уређаја базираних на нанотехнологијама са квантним тачкама. Предвиђа се и све већа употреба ових технологија у изради LCD дисплеја.

Упркос убрзаном развоју, и огромним потенцијалима нове и јефтине технологије дисплеја са квантним тачкама, постоје ограничавајући фактори

субјективног или објективног карактера, зависно од угла посматрања. Наиме, најквалитетније квантне тачке данас се израђују од кадмијума Cd. Иако је дискутабилна токсичност Cd у форми једињења која се користе за израду квантних тачака, за сада у Европској унији постоје велике препреке административног карактера за пролаз на тржиште уређаја који садрже Cd у готово било ком његовом облику. Наиме, услед његове токсичности, његова употреба је стриктно прописана сходно RoHS (Restriction of Hazardous Substances Directive) [30] директиви Европске уније, а против скидања забране лобирају и прозвођачи мање токсичних индијумских квантних тачака који имају не мали удео на тржишту [31].



Слика 1.4 Примена квантних тачака у изради LCD дисплеја већих дијагонала. Енкапсулирани слој материјала са квантним тачкама поставља се између позадинског LED осветљења и LCD екрана.

ПРИРОДНЕ НАУКЕ. Могућности примене су велике и у природним наукама – у различитим истраживањима, а поготову у медицини где се могу користити у дијагностици, затим у индустрији лекова за фармакокинетичка испитивања и посматрања апсорпције лекова у ткивима итд.

Биолошка истраживања. Квантне тачке су нашле огромну примену у биолошким наукама и истраживањима [32]. Од кључног је интереса у истраживањима маркирање живих ћелија организма, микроорганизама и осталих врста микро-биоструктура да би се пратило њихово кретање кроз организам. За ту сврху се користе различите врсте флуоресцентних материјала - боја које се узимају орално или убризгавају у крв. Боје се везују за карактеристичне делове биоструктура, па стога имају и различиту конфигурацију и састав молекула. Флуоресцентни материјали, озрачени светлошћу одређене таласне дужине, емитују светлост карактеристичног спектра, која има пикове на одређеним таласним дужинама, које зависе од врсте примењеног једињења. Мане постојећих једињења која се данас користе су непроменљивост апсорпционог и емисионог спектра, а јављају се и апсорпциони и емисиони пикови на крајње непожељним местима. Даље, рок употребе оваквих једињења је ограничен. Све наведене мане превазилазе се коришћењем квантних тачака, које се могу убацили у микро-структуре или се везују за њихову површину. Предност квантних тачака је и у томе што им је време флуоресцентности независно од таласне дужине, и поврх свега за неколико редова величине превазилази време аутофлуоресцентности типичних органски средстава за бојење ткива. Даље, квантне тачке имају већу емисиону ефикасност, тј. светлије су у односу на класична средства. Код неких квантних тачака се могу апсорбовати два фотона, а емитовати један – што омогућава коришћење инфрацрвених ласера у осветљавању ткива, чиме се постиже боља видљивост маркираних структура, јер светлост одбијена од околине постаје невидљива, тако да се виде само маркирана места. Квантне тачке су неорганског порекла тако да се за посматрање означених микроструктура може користити електронски микроскоп.

Медицина. У модерној медицини установљена је посебна грана која се назива *наномедицина*. Под наномедицином се данас подразумева читав спектар употребе нанотехнологија у медицини [33]. А примене су веома разноврсне и

подразумевају читав низ различитих апликација од директне примене наноматеријала, различитих врста наносензора, па до најсложенијих нано-уређаја, и биолошких нано-машина.

Што се наноматеријала у облику кватних тачака тиче, постоји неколико примена у наномедицини.

Током претходне две декаде су истраживања и развој у области мулти-функционалних *наночестица за испоруку лекова* имала огромну експанзију. У преносу лекова до одредишта у организму користе се наночестице у форми липида [34,35], наноемулзија, магнетних наночестица, дендримера, комплекси антитела и лека, наночестице удружене са липозомима [36] итд. Ове честице се базирају на удруживању и спајању синтетичких, биолошких и природних компоненти у циљу остваривања тражене функционалности у смислу наведене употребе. Од свих набројаних, наночестице у форми липида имају најмању токсичност, јер се добијају из природних услова, а приликом њихове синтезе не користе се комплексне хемијске реакције. Генерално се не метаболишу, већ се апсорбују у организму. У неколико облика се се показале и веома употребљивим у конкретним клиничким условима. Такође имају GRAS (Generally Recognised As Safe) статус добијен од стране FDA [37]. Наночестице у форми полимера такође имају широку употребу. Токсичност им још увек није довољно истражена. Главна и најважнија предност им је стабилност како у хемијском, тако и у физичком смислу.

Магнетне наночестице могу се користити у *пречишћавању крви*, и научно су испитане и доказане у одвајању хелија и протеина од нежељених хемијско-физичких комплекса. На експериментима са животињама је у скорије време показано да се магнетне наночестице могу користити за одвајање штетних компоненти као што су токсини, патогени различитих врста и протеини из крви путем процедуре сличне дијализи, али која функционише на другачијем принципу [38]. Наиме, посебним инжињерингом, помоћу наночестица се може циљано издвојити специфична нежељена компонента, тако да се помоћу њих може постићи и оно што је у дијализи немогуће. Процес пречишћавања базиран је на наночестицама на бази оксида гвожђа или угљеником пресвученим наночестицама од металног суперпарамагнетног или феромагнетног материјала [39]. У

оваквим применама се наночестице повезују са везујућим агенсима као што су разне врсте протеина, антитела, антибиотици или нека друга врста молекула, повезана ковалентно са атомима на површини наночестице [40,41]. Везујући агенси интерагују са циљаном штетном компонентом формирајући агломерат. Применом спољашњег магнетног поља агломерат бива издвојен из флуида, који се на тај начин пречишћава. Овакав приступ има перспективу у примени против опасних инфекција као што је сепса, јер омогућава директно уклањање патогених организама [42]. Такође, магнетне наночестице могуће је у перспективи користити и за пречишћавање крви од цитокина и ендотоксина, што није могуће стандардним методама дијализе [40], и то се сада налази у клиничкој фази испитивања.

У *медицинској дијагностици* очекује се огромна експанзија примене квантних тачака [43]. Направљене су квантне тачке стабилне у воденој средини, са којима су вршени експерименти на мишевима. Наиме, квантне тачке су им убризгане у крв и коришћене су за бојење ћелија крвног и лимфног система, као и малигних ћелија у болесним организмима. Квантне тачке се лако разлажу у организму. Ипак, за дијагностику се преферирају квантне тачке у чијем хемијском саставу нема токсичних тешких метала попут Cd. Могуће је квантне тачке везивати и за протеине. Најчешће се користи везивање квантних тачака за антитела. На тај начин могуће је утврдити присуство патогених микроорганизама у телу, и извршити вишеструке имунопробе коришћењем квантних тачака које се везују за различита антитела, а које уз то имају и различиту карактеристичну таласну дужину зрачења.

Не задржавајући се појединачно на објашњавању специфичности сваке примене у медицини, поменимо да се квантне тачке могу још користити у генетским испитивањима, проточној цитометрији, за посматрање читавог крвотока у организму, као и за детектовање протеина тзв Western-Blot-овом [44] методом.

2. МЕХАНИЧКО НАПРЕЗАЊЕ У АНИЗОТРОПНИМ КРИСТАЛНИМ МАТЕРИЈАЛИМА

Механички напон, или само напон, код чврстих тела представља однос интензитета одговарајуће компоненте силе и површине на коју сила делује. Уведен је као појам од стране француског математичара Cauchy-ја 1822 године. Напон се преноси на читав волумен посматраног тела и тензорска је величина локалног карактера. Постоје две врсте компоненти механичког напона – нормалне компоненте (компоненте истезања, или компресије), и тангенцијалне компоненте (компоненте смицања).

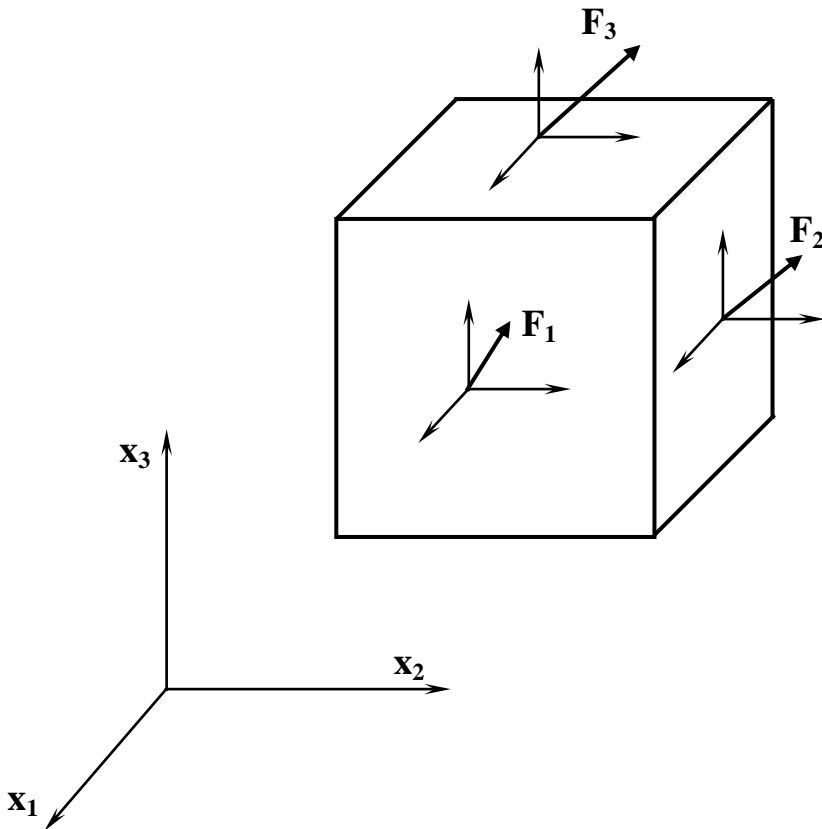
2.1 ТЕНЗОР МЕХАНИЧКОГ НАПОНА

У неком чврстом телу посматрајмо делић волумена инфинитезималне величине облика паралелоипеда (Слика 2.1). На сваку површ паралелоипеда делују силе које се могу разложити на две компоненте - нормалну, која је управна на површ, и тангенцијалну која се налази у равни површи. Тангенцијалну компоненту је могуће додатно разложити на две компоненте у правцу одговарајућих оса координатног система. Тако је сила која делује на одговарајућу

површ паралелопипеда једнака

$$dF_i = \sigma_{ji} \mathbf{e}_j dS \quad (1)$$

где је dS површина стране паралелопипеда на коју сила делује.



Слика 2.1 *Правци дејства одговарајућих унутрашњих сила на делићу запремине облика паралелопипеда.*

Лако се може показати да је, када не постоје унутрашњи дистрибуирани моменти сила, тензор напона симетричан [45], тј.

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ji} \quad (2)$$

Изведимо сада израз који повезује унутрашњу силу механичког напона у некој тачки на неку површину и тензор напона.

Нека је задат координатни систем $0x_1x_2x_3$. Не умањујући општост, можемо

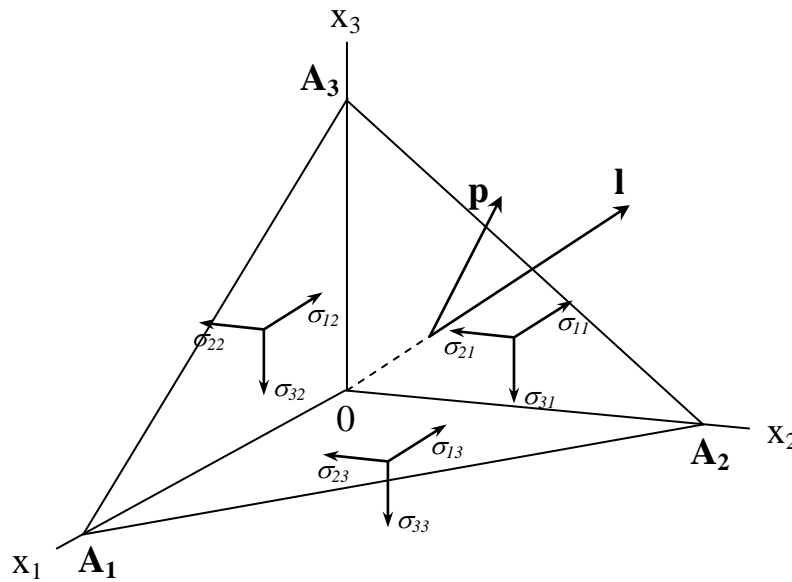
произвољно поставити координатни почетак, а поставићемо га довољно близу места посматрања. Тачке пробоја оса координатног система на посматраној површи означимо са A_1, A_2, A_3 респективно (Слика 2.2).

Посматрајмо јединични вектор нормале на задату површ и означимо са \mathbf{l} , чији је интензитет једнак површини dS од $\Delta A_1 A_2 A_3$. На задату површину у посматраној тачки делује нека сила $d\mathbf{F} = \mathbf{p}dS$. Изједанчавајући прву векторску компоненту леве и десне стране добијамо:

$$p_1 dS = \sigma_{11} dS_1 + \sigma_{12} dS_2 + \sigma_{13} dS_3 \quad (3)$$

или, деобом са dS :

$$p_1 = \sigma_{11} l_1 + \sigma_{12} l_2 + \sigma_{13} l_3 \quad (4)$$



Слика 2.2. Налажење одговарајућих компоненти напона у односу на произвољну раван

и аналогно за друге две векторске компоненте

$$\begin{aligned} p_2 &= \sigma_{21} l_1 + \sigma_{22} l_2 + \sigma_{23} l_3 \\ p_3 &= \sigma_{31} l_1 + \sigma_{32} l_2 + \sigma_{33} l_3 \end{aligned} \quad (5)$$

Последње три релације се могу написати скраћено, у тензорској нотацији

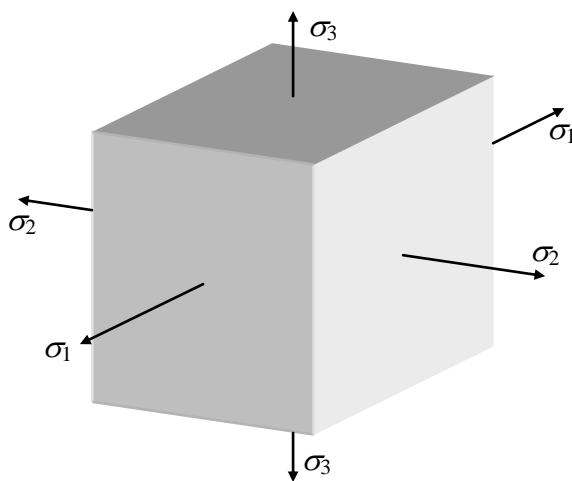
$$P_i = \sigma_{ij} l_j \quad (6).$$

Како се, погодним избором оса (довођењем тензора на главне осе) координатног система могу анулирати све компоненте тензора, осим дијагоналних, то се и тангенцијалне компоненте тензора напона такође могу анулирати, тј тензор напона постаје облика:

$$\begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_2 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_3 \end{bmatrix} \quad (7)$$

Правци главних оса у овом случају називају се главним правцима напона (Слика 2.3).

Иначе, тензори који представљају одређене особине кристалних тела (као нпр. електрична пермитивност или магнетна сусцептибилност), често се називају тензори супстанце или материје. Између тензора напона и тензора супстанце постоји значајна разлика. Наиме, тензор напона поред врсте супстанце од које је тело начињено, зависи и од спољашњих сила односно момената. У том смислу тензори истог типа као што је тензор напона, подложни променама под утицајем спољашњих векторских величина, називају се тензори поља.



Слика 2.3 Правци дејства сила у координатном систему главних оса. Све тангенцијалне компоненте напона у овом систему су једнаке нули.

2.2 ТЕНЗОР ДЕФОРМАЦИЈЕ

Посматрајмо произвољну тачку $A(x_1, x_2, x_3)$ неког чврстог тела у неком тродимензионалном координатном систему $(Ox_1x_2x_3)$. Нека се у напрегнутом стању тела та тачка помери за вектор помераја $\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3)$ у односу на свој положај у ненапрегнутом стању тела. Варијација компоненте помераја u_i са координатом тачке A x_j је

$$e_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \quad (i, j = 1, 2, 3) \quad (8)$$

Матрица $[e_{ij}]$ ($i, j = 1, 2, 3$) представља тензор варијације помераја посматраног чврстог тела. На тај начин, имамо везу између помераја тачке и њене координате:

$$u_i = e_{ij}x_j \quad (9)$$

Приликом деформације тела мења се растојање између тачака. Да би деформацију окарактерисали на локалном нивоу узмимо две веома блиске тачке $M(x_1, x_2, x_3)$ и $M'(x_1 + dx_1, x_2 + dx_2, x_3 + dx_3)$. До деформације растојање између ове две тачке износило је:

$$dl = \sqrt{dx_1^2 + dx_2^2 + dx_3^2} . \quad (10)$$

Након деформације растојање је

:

$$dl' = \sqrt{dx_1'^2 + dx_2'^2 + dx_3'^2} , \quad (11)$$

где је $dx_i' = dx_i + du_i$. У скраћеној тензорској нотацији можемо написати

$$dl'^2 = dl^2 + 2 \frac{\partial u_i}{\partial x_k} dx_i dx_k + \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \frac{\partial u_i}{\partial x_m} dx_k dx_m . \quad (12)$$

Како се сумирање врши по свим индексима i, k, l , у тензорској нотацији можемо написати

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_k} dx_i dx_k = \frac{\partial u_k}{\partial x_i} dx_k dx_i \quad (13)$$

и други сабирак у изразу (12) заменити са

$$\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \right) dx_i dx_k \quad (14)$$

док код трећег сабирка можемо заменити места индексима

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_k} \frac{\partial u_i}{\partial x_m} dx_k dx_m = \frac{\partial u_m}{\partial x_i} \frac{\partial u_m}{\partial x_k} dx_i dx_k, \quad (15)$$

па се једнакост (12) написати у облику

$$dl'^2 = dl^2 + 2\varepsilon_{ik} dx_i dx_k$$

где је

$$\varepsilon_{ik} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} + \frac{\partial u_l}{\partial x_i} \frac{\partial u_l}{\partial x_k} \right) \quad (16)$$

За мале помераје важи:

$$\varepsilon_{ik} \approx \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \right)$$

Увек треба имати у виду да последња једначина важи само за мале помераје, али не и генерално, иако у постојећој литератури аутори често чине овакву грешку, па долази до неслагања неких резултата, што се онда не тумачи на прави начин.

У случају малих помераја се тензор деформације може се такође представити и преко компоненти тенора помераја $[e_{ij}]$ ($i, j = 1, 2, 3$):

$$[\varepsilon_{ij}] = \begin{bmatrix} e_{11} & \frac{1}{2}(e_{12} + e_{21}) & \frac{1}{2}(e_{13} + e_{31}) \\ \frac{1}{2}(e_{12} + e_{21}) & e_{22} & \frac{1}{2}(e_{23} + e_{32}) \\ \frac{1}{2}(e_{13} + e_{31}) & \frac{1}{2}(e_{23} + e_{32}) & e_{33} \end{bmatrix}. \quad (17)$$

Компоненте ε_{ii} ($i = 1, 2, 3$), називају се нормалне компоненте деформације, док се остале компоненте називају тангенцијалне или попречне компоненте деформације.

Уколико би се за осе координатног система узеле главне осе тензора, тензор би се свео на дијагоналну форму. Означимо дијагоналне вредности компоненти тензора у том случају са ε_i , $i = 1, 2, 3$. Запремина елемента облика паралелопипеда чије се једно теме налази у тачки M , а дужине ивица су dx_1, dx_2, dx_3 (посматрано у координатном систему где осе имају правац главних оса тензора), након напрезања у тензорској нотацији износи

$$dV' = dV(1 + \varepsilon_i)$$

Релативна промена запремине ће износити:

$$(dV' - dV)/dV = (1 + \varepsilon_1)(1 + \varepsilon_2)(1 + \varepsilon_3) - 1 \approx \varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3 \quad (18)$$

У неким случајевима је погодно користити цилиндрични или сферни координатни систем. Ти случајеви одговарају геометријама аксијалне или сферне симетрије. Тензорске једначине у таквим ситуацијама имају далеко једноставнију форму у овим координатним системима него у Декартовом координатном систему, тако да се разни проблеми са аналитичке стране много лакше посматрају. Тензорске компоненте у овим системима су:

(1) За цилиндрични координатни систем:

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_{rr} & \varepsilon_{r\varphi} & \varepsilon_{rz} \\ \varepsilon_{r\varphi} & \varepsilon_{\varphi\varphi} & \varepsilon_{\varphi z} \\ \varepsilon_{rz} & \varepsilon_{\varphi z} & \varepsilon_{zz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial u_r}{\partial r} & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_\varphi}{\partial r} - \frac{u_\varphi}{r} + \frac{1}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \varphi} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_r}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial r} \right) \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_\varphi}{\partial r} - \frac{u_\varphi}{r} + \frac{1}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \varphi} \right) & \frac{1}{r} \frac{\partial u_\varphi}{\partial \varphi} + \frac{u_r}{r} & \frac{1}{2} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \varphi} + \frac{\partial u_\varphi}{\partial z} \right) \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_r}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial r} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \varphi} + \frac{\partial u_\varphi}{\partial z} \right) & \frac{\partial u_z}{\partial z} \end{bmatrix} \quad (19)$$

(2) За сферни координатни систем:

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_{rr} & \varepsilon_{r\theta} & \varepsilon_{r\varphi} \\ \varepsilon_{r\theta} & \varepsilon_{\theta\theta} & \varepsilon_{\theta\varphi} \\ \varepsilon_{r\varphi} & \varepsilon_{\theta\varphi} & \varepsilon_{\varphi\varphi} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial u_r}{\partial r} & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_\theta}{\partial r} - \frac{u_\theta}{r} + \frac{1}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial u_r}{\partial \varphi} + \frac{\partial u_\varphi}{\partial r} - \frac{u_\varphi}{r} \right) \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_\theta}{\partial r} - \frac{u_\theta}{r} + \frac{1}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} \right) & \frac{1}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + \frac{u_r}{r} & \frac{1}{2r} \left(\frac{\partial u_\varphi}{\partial \theta} - u_\varphi \operatorname{ctg} \theta \right) \\ \frac{1}{2} \left(\frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial u_r}{\partial \varphi} + \frac{\partial u_\varphi}{\partial r} - \frac{u_\varphi}{r} \right) & \frac{1}{2r} \left(\frac{\partial u_\varphi}{\partial \theta} - u_\varphi \operatorname{ctg} \theta \right) & \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial u_\varphi}{\partial \varphi} + \frac{u_\theta}{r} \operatorname{ctg} \theta + \frac{u_r}{r} \end{bmatrix} \quad (20)$$

2.3 ЕЛАСТИЧНОСТ МАТЕРИЈАЛА. ТЕНЗОР ЕЛАСТИЧНОСТИ

Код чврстих тела услед дејства сила долази до деформације. Уколико је деформација довољно мала (мања од тзв. границе еластичности), тело се враћа у своје првобитно стање након престанка дејства спољњих сила. Посматрајмо штап дужине l попречног пресека S причвршћен на једном крају. Нека на другом крају штапа делује сила F у правцу осе штапа. Хуков закон повезује релативно издужење штапа и попречни напон $\sigma = \frac{F}{S}$:

$$\frac{\Delta l}{l} = \frac{1}{E} \sigma = C \sigma \quad (21)$$

Овде је E тзв Јунгов модуо еластичности док је $C = \frac{1}{E}$, тзв коефицијент еластичности.

Релација (21) може се генерализовати. Хуков закон у својој генералној форми повезује тензор деформације u_{ij} са тензором напона σ_{kl} :

$$u_{ij} = s_{ijkl} \sigma_{kl} \quad (22)$$

Релација (22) може се написати и у својој инверзној форми:

$$\sigma_{ij} = c_{ijkl} u_{kl} \quad (23)$$

где је c_{ijkl} тзв. тензор еластичности.

Због компликоване форме, често се тензор еластичности представља у својој редукованој или *матричној нотацији*:

$$[C_{ij}] = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{11} & C_{11} & C_{11} & C_{11} & C_{11} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{41} & C_{42} & C_{43} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{51} & C_{52} & C_{53} & C_{54} & C_{55} & C_{56} \\ C_{61} & C_{62} & C_{63} & C_{64} & C_{65} & C_{66} \end{bmatrix} \quad (24)$$

Матрична нотација у огромној мери поједностављује одговарајуће проблеме, јер повећава прегледност појединих компоненти тензора, а повећава и читљивост и разумљивост једначина које одговарају разним проблемима, а могућност грешке приликом сагледавања проблема, и постављања одговарајућих једначина, далеко је мања. Начињене грешке је далеко лакше уочити и отклонити, те отуда и велика популарност матричне нотације.

У матричној нотацији се и тензори деформације односно напона представљају као вектори

$$[\varepsilon_{ij}] = \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 & \frac{1}{2}\varepsilon_6 & \frac{1}{2}\varepsilon_5 \\ \frac{1}{2}\varepsilon_6 & \varepsilon_2 & \frac{1}{2}\varepsilon_4 \\ \frac{1}{2}\varepsilon_5 & \frac{1}{2}\varepsilon_4 & \varepsilon_3 \end{bmatrix},$$

$$[\sigma_{ij}] = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_1 & \frac{1}{2}\sigma_6 & \frac{1}{2}\sigma_5 \\ \frac{1}{2}\sigma_6 & \sigma_{22} & \frac{1}{2}\sigma_4 \\ \frac{1}{2}\sigma_5 & \frac{1}{2}\sigma_4 & \sigma_{33} \end{bmatrix}$$

Тако да имамо следећу шему означавања индекса за прва два и друга два индекса четвородимензионалних тензора c_{ijkl} односно s_{ijkl} :

Тензорска нотација 11 22 33 23, 32 13, 31 12, 21

Матрична нотација 1 2 3 4 5 6

Даље, у матричној нотацији се уводе следеће смене у зависности од индекса:

$$C_{mn} = C_{ijkl}, \text{ за } m, n = 1, 2, 3$$

$$C_{mn} = 2C_{ijkl}, \text{ када је или } m \text{ или } n \text{ узима једну од вредности } 4, 5, 6$$

$$C_{mn} = 4C_{ijkl} \text{ за } m, n = 4, 5, 6.$$

У матричној нотацији вреди иста међузависност као и у тензорској:

$$\varepsilon_i = S_{ij}\sigma_j \quad (25)$$

или

$$\sigma_j = C_{ij}\varepsilon_i \quad (26)$$

Најчешће се у модерној литератури, да би се одржао физички смисао појма деформације, и механичког напона, задржава тензорско представљање ове две величине, док се тензори s_{ijkl} и c_{ijkl} представљају матрично.

2.4 ЕНЕРГИЈА КРИСТАЛА У НАПРЕГНУТОМ СТАЊУ

Израз за енергију кристала у напрегнутом стању [45] може се одредити једноставном методом виртуалних радова. Наиме, на сваку од страна паралелоипеда запремине $dV = dx_1 dx_2 dx_3$ делују по 3 силе. Посматрајући те силе у паровима, може се закључити да је енергија нагомилана у посматраном делићу паралелоипеда једнака раду које изврше околне силе које на тај делић делују. Конкретно за одређене паралелне стране, и одговарајући правац дејства силе овај рад по јединици запремине је једнак

$$\frac{dA_{ij}}{dV} = \frac{1}{2} \sigma_{ij} \varepsilon_{ij}, \quad (27)$$

колико износи и енергија деформације депонована у посматраном делићу. Изражавајући тензор напона σ_{ij} преко тензора деформације ε_{ij} добијамо тензорски израз за укупну густину енергије деформације делића

$$w = \frac{1}{2} c_{ijkl} \varepsilon_{ij} \varepsilon_{kl} \quad (28)$$

или ако би тензора деформације ε_{ij} изразили преко тензора напона σ_{ij}

$$w = \frac{1}{2} s_{ijkl} \sigma_{ij} \sigma_{kl} \quad (29)$$

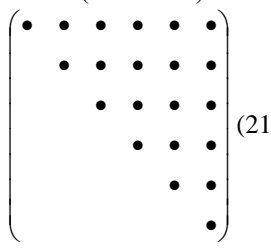
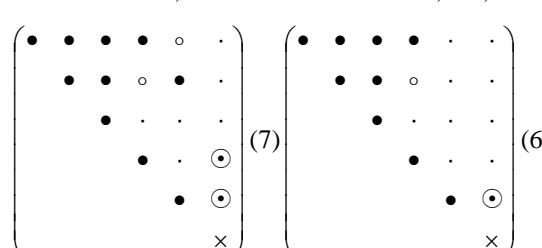
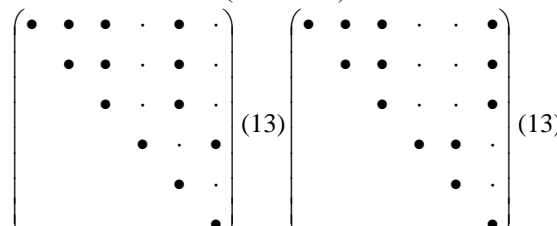
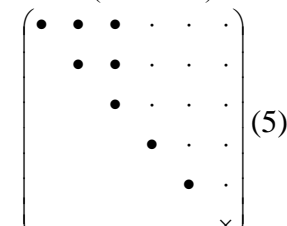
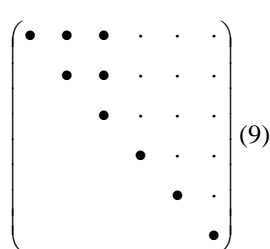
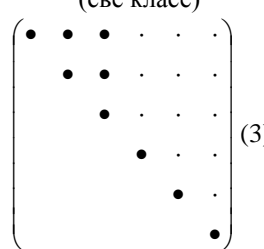
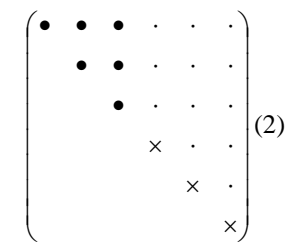
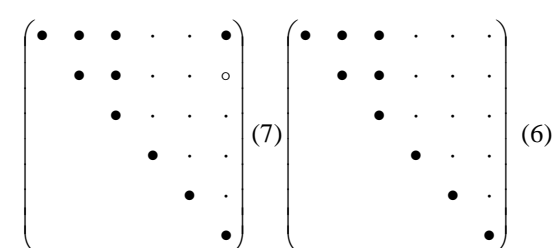
Уколико користимо матричну нотацију, изрази за густину енергије постају крајње једноставни:

$$w = \frac{1}{2} C_{ij} \varepsilon_i \varepsilon_j, \text{ тј. } w = \frac{1}{2} S_{ij} \sigma_j \sigma_i.$$

У извесним ситуацијама деформацију је могуће лакше одредити минимизацијом еластичне енергије, него класичним путем.

2.5 СИМЕТРИЈЕ КРИСТАЛА И МАТРИЦА ЕЛАСТИЧНОСТИ

Табела 2.1. Облик матрица еластичности кристалних система:

<p>ТРИКЛИНИЧНИ (обе класе)</p>  <p>(21)</p>	<p>ТРИГОНАЛНИ Класе 3, 3 Класе 32, 3m, 3m</p>  <p>(7) (6)</p>	
<p>МОНОКЛИНИЧКИ (све класе)</p>  <p>(13) (13)</p>	<p>ХЕКСАГОНАЛНИ (све класе)</p>  <p>(5)</p>	
<p>ОРТОРОМБИЧНИ (све класе)</p>  <p>(9)</p>	<p>КУБИЧНИ (све класе)</p>  <p>(3)</p>	<p>ИЗОТРОПНИ МАТЕРИЈАЛИ</p>  <p>(2)</p>
<p>ТЕТРАГОНАЛНИ Класе 4, 4, 4/m Класе 4mm, 42m, 422, 4/mmm</p>  <p>(7) (6)</p>		<p>Легенда:</p> <ul style="list-style-type: none"> • компонента једнака нули •• компонента различита од нуле • једнаке компоненте • ○ једнаке компоненте супротног знака ⊙ за s- компоненте двострука вредност од придружене компоненте, за c- компоненте једнака компонента придруженој компоненти × за s- компоненте $2(s_{11} - s_{12})$, за c- компоненте $(c_{11} - c_{12})/2$

Геометријске симетрије тачкастих група које поседују 7 кристалних система, додатно упрошћавају изглед матрица $[S_{ij}]$ и $[C_{ij}]$. Наиме услед поменутих симетрија већи број чланова матрице биће једнак нули, а неки од преосталих коефицијената биће линеарно зависан од преосталих, и то у веома једноставној форми. У табели 2.1 дат је облик матрица еластичности односно крутости за свих седам кристалних система [45].

У табели 2.1 су дати резултати и за изотропне материјале. За разлику од анизотропних материјала код изотропних тензор константи еластичности не зависи од правца и оријентације оса одабараног координатног система $(Ox_1x_2x_3)$.

Сходно матричном означавању коефицијената, а задржавајући тензорско означавање напона и деформације, лако можемо за било који од кристалних система написати израз за густину еластичне енергије, или енергије напрезања. Нпр. израз за густину енергије код великог броја познатих полупроводника који кристалишу по кубичном систему је:

$$E = \int_V \left[\frac{1}{2} C_{11} (\varepsilon_{xx}^2 + \varepsilon_{yy}^2 + \varepsilon_{zz}^2) + C_{12} (\varepsilon_{xx} \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{yy} \varepsilon_{zz} + \varepsilon_{zz} \varepsilon_{xx}) + 2C_{44} (\varepsilon_{xy}^2 + \varepsilon_{yz}^2 + \varepsilon_{zx}^2) \right] dV$$

Расподела деформације код чврстих тела нумерички се може добити минимизацијом еластичне енергије на више начина у зависности од примењеног математичког модела. Овде ћемо поменути најпознатије моделе. Најпре, као најједноставнији модел поменимо Континуалну Механичку Апроксимацију [46] (CM). Друга два модела су математички сложенији и нумерички доста захтевнији. То су такозвани VFF (Valence Force Field) [47,48,49,50] метод, и Scheffler-ов [51] метод. Што се блискости резултата ове три методе тиче напоменимо да је приближно поклапање резултата показано у специјалним случајевима као нпр. у раду Bernarda и Zungera [52] који су добили исту расподелу напрезања користећи сва три теоретска модела, у случају споја InAs/GaAs у правцу (001).

Компаративна анализа различитих метода на примеру једне и две блиско поравнате цилиндричне квантне тачке дата је у раду [53].

Деформација унутар полупроводника игра и кључну улогу у полупроводничким технологијама приликом формирања тзв. самоасемблираних

квантних тачака [54,55]. Самоасемблиране квантне тачке се веома једноставно добијају, и представљају најјефтинији начин формирања квантних тачака у комерцијално коришћеним полупроводничким технологијама. До сада највише проучаване су самоасемблиране квантне тачке од легуре $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$.

Постоје три позната мода формирања самоасемблираних квантних тачака, и то су Frank-Van der Merwe [56], Volmer-Weber [57] и Stranski-Krastanov [58] модови који се разликују по процедури добијања квантних тачака.

Веома важна карактеристика самоасемблираних квантних тачака је њихова висока чистоћа - оне практично немају ни дефеката, нити садрже неке атоме примеса, што је од фундаменталне важности у многим применама. Њихова величина генерално зависи од температуре на којој се врши депозиција, кинетике епитаксијалног раста, и генерално је није могуће прецизно контролисати (стандардна девијација геометријских димензија је око 10%), као ни распоред квантних тачака [55]. Што се самог облика самоасемблираних квантних тачака тиче, у многим случајевима ни њега није могуће познавати са неком великом тачношћу. У циљу посматрања њихове величине, распореда, и облика коришћена је AFM (Atomic Force Microscopy) микроскопија [59,60,61]. Облик и величина самоасемблираних InAs квантних тачака, унутар GaAs супстрата разматани су у [62], где је представљена и новоразвијена процедура раста самоасемблираних квантних тачака у форми вертикалних стекова.

3. УТИЦАЈ МЕХАНИЧКИХ ДЕФОРМАЦИЈА НА ЕЛЕКТРОНСКУ СТРУКТУРУ ПОЛУПРОВОДНИКА

Утицај механичких деформација на електронску структуру полупроводника, подробно је описан у радовима Pikkus-a i Vir-a [63], и проучаван на различитим полупроводничким наноструктурама од стране многих аутора [64,65,66,67].

3.1 BLOCH-ове ФУНКЦИЈЕ

Размотримо најпре чврсто кристално тело. Укупна енергија тог тела једнака је збиру кинетичких и потенцијалних енергија свих атома и електрона тог тела. Потенцијалну енергију чине потенцијална енергија електрона у електричном пољу језгара атома, потенцијална енергија међусобног електричног дејства електрона, магнетна енергија интеракције спина електрона са орбиталним магнетним моментом електрона, као и магнетна енергија међусобне спин-спин интеракције, и на крају сама потенцијална енергија нуклеарних сила у самоме језгру. Укупна енергија карактерисана је тоталним хамилтонијаном, тако да би се свако могуће стање система могло окарактерисати веома компликованом

Schredinger-овом једначином, која је теоретски решива само уз известан број апроксимација. Најпре коришћена је тзв. адијабатска апроксимација по којој се претпоставља да је Schredinger-ову једначину могуће раставити на две одвојене једначине Schredinger-ове једначине [68], и то једне за атомска језгра, за које је апроксимативно претпостављено да електрони а друге за електроне:

$$H_J \psi_J(\mathbf{R}) = E_J \psi_J(\mathbf{R}) \quad (1)$$

$$H_e \psi_e(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = E_e \psi_e(\mathbf{r}, \mathbf{R})$$

овде \mathbf{r} означава положаје свих електрона, док \mathbf{R} означава положаје свих јона. По адијабатској апроксимацији претпостављено је да електрони немају утицаја на атомска језгра.

У даљем поједностављењу модела, претпоставља се да се кулоновско дејство осталих електрона може усредњено сматрати константним приликом дејства на један електрон, па се посматра упрошћена једноелектронска Schredinger-ова једначина:

$$H\psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = E\psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \quad (2)$$

где \mathbf{r} означава положај посматраног електрона, док \mathbf{R} означава положаје свих атомских језгара. Једноелектронски хамилтонијан је:

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + \sum_i V(\mathbf{r}, \mathbf{R}_i) \quad (3)$$

где је m_0 маса електрона, \mathbf{p} његов импулс, а \mathbf{R}_i вектор положаја атомског језгра i , а $V(\mathbf{r}, \mathbf{R}_i)$ међусобну потенцијалну енергију кулоновске интеракције електрона и атомског језгра i .

У даљим апроксимацијама, са становишта рачунања потенцијалне енергије електрона, јони се сматрају непокретним, а њихово померање посматра као петурбација, тако да се хамилтонијан једноелектронске Schredinger-ове једначине

додатно упрошћава:

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + \sum_i V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \quad (4)$$

Функција потенцијалне енергије у електричном пољу јона је периодична, а својствене вредности Schredinger-ове једначине могу се представити у форми Bloch-ових функција [69]:

$$\psi_{nk}(\mathbf{r}) = U_{nk}(\mathbf{r})e^{j\mathbf{k}\mathbf{r}} \quad (5)$$

где је $U_{nk}(\mathbf{r})$ тродимензионална периодична функција:

$$U_{nk}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = U_{nk}(\mathbf{r}) \quad (6)$$

Лако се показује да важи

$$\psi_{nk}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = \psi_{nk}(\mathbf{r})e^{j\mathbf{k}\mathbf{R}} \quad (7)$$

Нормализоване Bloch-ове функције су једнаке:

$$\psi_{nk}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V_0}} U_{nk}(\mathbf{r})e^{j\mathbf{k}\mathbf{r}} \quad (8)$$

где је V_0 запремина примитивне ћелије кристала [70,71].

Bloch-ове функције су ортогоналне, тако да уколико су нормализоване важи

$$\int_V \psi_{mk1}(\mathbf{r})\psi_{nk2}^*(\mathbf{r})dV = \delta_{m,n}\delta_{k1,k2} \quad (9)$$

где се интеграција обавља по запремини примитивне ћелије кристала.

3.2 кр ПЕРТУРБАЦИОНА ТЕОРИЈА

Да би се добила електронска структура полупроводника, мора се решити Schredinger-ова једначина, што је доста копликовано услед непознавања функције електричног потенцијала, односно потенцијалне енергије носилаца наелектрисања у укупном електричном пољу. Са друге стране, познато је да се највећи број попуњених енергетских нивоа електрона и шупљина налази веома близу граница енергетских зона, тако да је довољно Schredinger-ову једначину решити у тачкама екстремума енергије зона, а за тачке у околини тих екстремума применити неку приближну методу рачунања. Управо је за ту сврху добродошла у квантној механици позната *Пертурбациона теорија* [72], која се у овом специјалном случају назива *кр- Пертурбациона теорија* [73,74,75,76,77] или скраћено *кр теорија*.

Основно полазиште кр теорије се састоји у томе да функције $U_{m\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ формирају комплетан ортонормалан скуп. Уколико се минимум зоне n налази у тачки $\mathbf{k} = 0^2$, таласна функција електрона ће бити

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = U_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = \left[\sum_m g_m U_{m0}(\mathbf{r}) \right] e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \quad (10)$$

Заменом у Schredinger-ову једначину (2) добијамо:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) \right] U_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k}) U_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (11)$$

Из горње једначине за $n = m$, и $\mathbf{k} = 0$ добија се:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) \right] U_{m0}(\mathbf{r}) = E_m(0) U_{m0}(\mathbf{r}) \quad (12)$$

² Разматрање случаја када се минимум зоне налази у некој другој тачки $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$, је аналогно, осим што се уместо \mathbf{k} у једначину ставља разлика $\mathbf{k} - \mathbf{k}_0$.

Сменом једначине (9) и (11) у једначину (10) добија се

$$\sum_m g_m \left(E_m(0) + \frac{\hbar^2}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right) U_{m0}(\mathbf{r}) = \sum_m g_m E_n(\mathbf{k}) U_{m0}(\mathbf{r}) \quad (13)$$

Уколико последњу једначину помножимо са $U_{m'0}^*(\mathbf{r})$, а затим извршимо интеграцију по запремини примитивне ћелије добићемо једначину

$$g_{m'} \left(E_n(\mathbf{k}) - E_{m'}(0) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right) - \frac{\hbar^2}{m_0} \sum_m g_m \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}_{m'm} = 0 \quad (14)$$

где је

$$\mathbf{p}_{m'm} = \int_V U_{m'}^*(\mathbf{r}) \mathbf{p} U_m(\mathbf{r}) dV \quad (15)$$

Уколико се једначине (14) напишу по свим вредностима индекса m' , добија се систем једначина који има нетривијална решења различита од 0 уколико је детерминанта система једнака 0. Изједначавањем детерминанте система са нулом добијају се својствене вредности енергије $E_m(0)$. Након тога се израчунавају вредности $\mathbf{p}_{m'm}$, а на крају и вредности енергије $E_n(\mathbf{k})$ у околини екстремних тачака зона. Вредности коефицијената g_m добијају се нормализацијом таласне функције ψ . Тачност добијеног резултата увећава се са бројем коефицијената, односно зона полупроводника. За највећи број полупроводника у израчунавањима се узимају у обзир зоне тешких (*HH Heavy Hole*) и лаких шупљина (*LH - Light Hole*), *split-off (SO)* зона шупљина, као и проводна зона (*C - Conduction*).

Једнозонски модел. Уколико претпоставимо да је $U_{nk}(\mathbf{r})$ једино под утицајем $U_{n0}(\mathbf{r})$, а да се утицај осталих зона може занемарити, ми у ствари претпостављамо да, за свако $m \neq n$. важи

$$g_m \ll g_n \quad (16)$$

тако да се таласна функција ψ може добити као

$$\psi(\mathbf{r}) = \left[g_n U_{n0}(\mathbf{r}) + \sum_{m \neq n} g_m U_{m0}(\mathbf{r}) \right] e^{j\mathbf{k}\mathbf{r}} \quad (17)$$

Због нормализованости таласне функције

$$\int_V |\psi|^2 dV = 1$$

мора бити

$$\sum_m |g_m|^2 = 1 \quad (18)$$

одакле због (16) следи $g_n \approx 1$. Занемарујући све коефицијенте g_m у односу на g_n :

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}_{nn} \approx E_n(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \quad (19)$$

где смо занемарили вредност $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}_{nn}$ због близине екстремума енергије $E_n(\mathbf{k})$.

Сада из једначине (14) добијамо остале коефицијенте:

$$g_m = \frac{\hbar}{m_0} \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}_{mn}}{E_n(0) - E_m(0)} g_n \quad (20)$$

Заменом у једначину (14) добијамо још тачнију вредност енергије:

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \left(\frac{\hbar}{m_0} \right)^2 \sum_{m \neq n} \frac{|\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}_{mn}|}{E_n(0) - E_m(0)} = E_n(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0^*} \quad (21)$$

где смо са m_0^* означили тзв. ефективну масу електрона:

$$\frac{1}{m_0^*} = \frac{1}{m_0} + \frac{2}{m_0^2} \sum_{m \neq n} \frac{|\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}_{mn}|}{E_n(0) - E_m(0)} \quad (22)$$

Модел са четири зоне. Код овог модела разматрају се проводна зона (C), и три зоне шупљина - зоне тешких (HH) и лаких (LH) шупљина и тзв. split-off (SO) зона. Претпоставка је да се врх проводне зоне и дно валентне зоне налазе у тачки $\mathbf{k} = 0$. У овом моделу нећемо узимати у обзир спин-орбитску интеракцију. Ради лакше читљивости, уместо индекса користићемо ознаке зона. Сходно томе, таласна функција ће бити:

$$\psi(\mathbf{r}) = [g_C U_C(\mathbf{r}) + g_{LH} U_{LH}(\mathbf{r}) + g_{HH} U_{HH}(\mathbf{r}) + g_{SO} U_{SO}(\mathbf{r})] e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \quad (23)$$

Сагласно једначини (14) имаћемо хомогени систем једначина:

$$\begin{aligned} g_C (\tilde{E} - E_C) - \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} (g_{HH} \mathbf{p}_{C,HH} + g_{LH} \mathbf{p}_{C,LH} + g_{SO} \mathbf{p}_{C,SO}) &= 0 \\ -\frac{\hbar}{m_0} g_C \mathbf{k} \mathbf{p}_{HH,C} + g_{HH} (\tilde{E} - E_V) - \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} (g_{LH} \mathbf{p}_{HH,LH} + g_{SO} \mathbf{p}_{HH,SO}) &= 0 \\ -\frac{\hbar}{m_0} g_C \mathbf{k} \mathbf{p}_{LH,C} - \frac{\hbar}{m_0} g_{HH} \mathbf{k} \mathbf{p}_{LH,HH} + g_{LH} (\tilde{E} - E_V) - \frac{\hbar}{m_0} g_{SO} \mathbf{k} \mathbf{p}_{LH,SO} &= 0 \\ -\frac{\hbar}{m_0} g_C \mathbf{k} \mathbf{p}_{SO,C} - \frac{\hbar}{m_0} g_{HH} \mathbf{k} \mathbf{p}_{SO,HH} - \frac{\hbar}{m_0} g_{LH} \mathbf{k} \mathbf{p}_{SO,LH} + g_{SO} (\tilde{E} - E_V) &= 0 \end{aligned} \quad (24)$$

У овом систему једначина се вредности облика $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}_{m'm}$ сходно једначини (15) рачунају по изразу

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}_{m'm} = \int_V U_{m'}^*(\mathbf{r}) \left(k_x \frac{\partial}{\partial x} + k_y \frac{\partial}{\partial y} + k_z \frac{\partial}{\partial z} \right) U_m(\mathbf{r}) dV \quad (25)$$

Услед непарности функција $\frac{\partial}{\partial x} U_m(\mathbf{r})$ по x , $\frac{\partial}{\partial y} U_m(\mathbf{r})$ по y , и $\frac{\partial}{\partial z} U_m(\mathbf{r})$ по z , много сабирака у интегралу (25) је једнако нули, тако да се систем једначина (24) своди на:

$$\begin{aligned}
g_C(\tilde{E} - E_C) - g_{LH}Pk &= 0 \\
g_{HH}(\tilde{E} - E_V) &= 0 \\
-g_CPk + g_{LH}(\tilde{E} - E_V) &= 0 \\
g_{SO}(\tilde{E} - E_V) &= 0
\end{aligned}$$

Из овог система једначина добијамо својствене вредности енергије $\tilde{E} = E_C$, $\tilde{E} = E_V$, а из прве и треће једначине система добијамо једначину:

$$(\tilde{E} - E_C)(\tilde{E} - E_C + E_g) - P^2k^2 = 0 \quad (26)$$

У последњој једначини занемаривањем $(\tilde{E} - E_C)^2$ добија се приближно трећа својствена вредност енергије:

$$\tilde{E} \approx E_C + \frac{P^2k^2}{E_g} \quad (27)$$

На тај начин за ефективну масу у проводној зони добијамо из једначине (22):

$$\frac{1}{m_0^*} \approx \frac{1}{m_0} + \frac{2P^2}{m_0^2} \quad (28)$$

одакле је

$$m_0^* \approx \frac{m_0}{1 + \frac{2P^2}{m_0}} \quad (29)$$

Урачунавање спин-орбиталне интеракције. Luttinger-Kohn-ов модел.

Електрон као честица поседује сопствени спин једнак $\pm \hbar/2$. Услед кретања по орбити ствара се и орбитални магнетни момент електрона $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$, где је \mathbf{r} полупречник кружне путање а \mathbf{p} импулс електрона. Интеракција на квантном нивоу ова два магнетана момента доводи до промена које често морају бити узете

у обзир приликом израчунавања. Спин-орбитална реакција се лако израчунава када су у питању изоловани атоми. Код кристала се приликом њеног израчунавања поступак прилично усложњава.

Укупни хамилтонијан је једнак

$$H = H_0 + H_{so}$$

где је H_0 хамилтонијан без урачунате спин-орбиталне интеракције, а H_{so} његова промена под дејством интеракције:

$$H_{so} = \lambda \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$$

где је \mathbf{L} оператор угаоног момента електрона, а \mathbf{S} оператор спина електрона. Тотални угаони момент једнак је

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$$

и његовим квадрирањем добијамо

$$\mathbf{J}^2 = (\mathbf{L} + \mathbf{S})^2 = L^2 + S^2 + 2\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$$

Одавде се добија:

$$\langle \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \rangle = \frac{1}{2} \langle J^2 - L^2 - S^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{2} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)] \quad (30)$$

где су j , l и s одговарајући квантни бројеви. Стања p_x , p_y и p_z можемо представити преко простих стања угаоног момента на следећи начин [74]:

$$p_x = \frac{1}{\sqrt{2}} (-\phi_{1,1} + \phi_{1,-1})$$

$$p_y = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_{1,1} + \phi_{1,-1})$$

$$p_z = \phi_{1,0}$$

У горњим једначинама ϕ_{ij} одговарају својственим векторима за стања од \mathbf{L}^2 и L_z , где се први индекс i односи на \mathbf{L}^2 а други индекс j на L_z .

Применом тзв. *Clebsch-Gordan*-ове технике [74,78] добијамо следеће једначине:

$$\begin{aligned}\Phi_{3/2,3/2}^{CG} &= \phi_{1,1} \uparrow = \\ &= -\frac{1}{\sqrt{2}}(p_x + jp_y) \uparrow \\ \Phi_{3/2,1/2}^{CG} &= \frac{1}{\sqrt{3}}\phi_{1,1} \downarrow + \sqrt{\frac{2}{3}}\phi_{1,0} \uparrow = \\ &= -\frac{1}{\sqrt{6}}[(p_x + jp_y) \downarrow - 2p_z \uparrow] \\ \Phi_{3/2,1/2}^{CG} &= \sqrt{\frac{2}{3}}\phi_{1,0} \downarrow + \frac{1}{\sqrt{3}}\phi_{1,-1} \uparrow = \\ &= \frac{1}{\sqrt{6}}[(p_x - jp_y) \uparrow + 2p_z \downarrow] \\ \Phi_{3/2,-3/2}^{CG} &= \phi_{1,-1} \uparrow = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(p_x - jp_y) \downarrow \\ \Phi_{1/2,1/2}^{CG} &= -\frac{1}{\sqrt{3}}\phi_{1,0} \uparrow + \sqrt{\frac{2}{3}}\phi_{1,1} \downarrow \\ &= -\frac{1}{\sqrt{3}}[(p_x + jp_y) \downarrow + p_z \uparrow] \\ \Phi_{1/2,-1/2}^{CG} &= -\sqrt{\frac{2}{3}}\phi_{1,-1} \uparrow + \frac{1}{\sqrt{3}}\phi_{1,0} \downarrow = \\ &= -\frac{1}{\sqrt{3}}[(p_x - jp_y) \uparrow - p_z \downarrow]\end{aligned}$$

Другачијом конвенцијом у означавању фаза, добијају се коефицијенти који

се разликују по фази (Luttinger-Kohn [79]):

$$\begin{aligned}\Phi_{3/2,3/2}^{LK} &= -\Phi_{3/2,3/2}^{CG} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(p_x + jp_y)\uparrow\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\Phi_{3/2,1/2}^{LK} &= -j\Phi_{3/2,1/2}^{CG} = \\ &= \frac{j}{\sqrt{6}}[(p_x + jp_y)\downarrow - 2p_z\uparrow]\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\Phi_{3/2,1/2}^{LK} &= \Phi_{3/2,1/2}^{CG} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{6}}[(p_x - jp_y)\uparrow + 2p_z\downarrow]\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\Phi_{3/2,-3/2}^{LK} &= j\Phi_{3/2,-3/2}^{CG} = \\ &= \frac{j}{\sqrt{2}}(p_x - jp_y)\downarrow\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\Phi_{1/2,1/2}^{LK} &= -\Phi_{1/2,1/2}^{CG} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{3}}[(p_x + jp_y)\downarrow + p_z\uparrow]\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\Phi_{1/2,-1/2}^{LK} &= j\Phi_{1/2,-1/2}^{CG} = \\ &= -\frac{j}{\sqrt{3}}[(p_x - jp_y)\uparrow - p_z\downarrow]\end{aligned}$$

Матричне елементе хамилтонијана који потичу од спин орбитске интеракције сада је лакше израчунати јер су познате вредности (остале комбинације дају вредност једнаку нули):

$$\langle p_x \uparrow | H_{so} | p_y \uparrow \rangle = -\frac{j}{3} \Delta$$

$$\langle p_x \downarrow | H_{so} | p_y \downarrow \rangle = \frac{j}{3} \Delta$$

$$\langle p_y \uparrow | H_{so} | p_z \downarrow \rangle = -\frac{j}{3} \Delta$$

$$\langle p_y \downarrow | H_{so} | p_z \uparrow \rangle = -\frac{j}{3} \Delta$$

$$\langle P_x \uparrow | H_{so} | P_z \downarrow \rangle = \frac{1}{3} \Delta$$

$$\langle P_x \downarrow | H_{so} | P_z \uparrow \rangle = -\frac{1}{3} \Delta$$

Узимањем у обзир спин-орбитске интеракције, применом *кр-петурбационе теорије* [80] на полупроводнике, са базисним Bloch-овим функцијама [1] из валентне зоне, које одговарају зонама тешких шупљина - стања $|3/2, \pm 3/2\rangle$, лаких шупљина - стања $|3/2, \pm 1/2\rangle$, и (*SO-Split-Off*) зони шупљина - стања $|1/2, \pm 1/2\rangle$ добија се Luttinger-Kohn-ов хамилтонијан [79], који са Pikkus-Bir-овом модификацијом [63] за механички напегнуте полупроводнике има следећи облик:

$$\begin{bmatrix} P+Q & -S & R & 0 & -S/\sqrt{2} & \sqrt{2}R \\ -S^+ & P-Q & 0 & R & -\sqrt{2}Q & S\sqrt{3/2} \\ R^+ & 0 & P-Q & S & S^+\sqrt{3/2} & \sqrt{2}Q \\ 0 & R^+ & S^+ & P+Q & -\sqrt{2}R^+ & -S^+/\sqrt{2} \\ -S^+/\sqrt{2} & -\sqrt{2}Q & S\sqrt{3/2} & -\sqrt{2}R & P+\Delta & 0 \\ \sqrt{2}R^+ & S^+\sqrt{3/2} & \sqrt{2}Q & -S/\sqrt{2} & 0 & P+\Delta \end{bmatrix} \begin{array}{l} |3/2, 3/2\rangle \\ |3/2, 1/2\rangle \\ |3/2, -1/2\rangle \\ |3/2, -3/2\rangle \\ |1/2, 1/2\rangle \\ |1/2, -1/2\rangle \end{array} \quad (31)$$

где је

$$P = P_k + P_\varepsilon, \quad Q = Q_k + Q_\varepsilon, \quad R = R_k + R_\varepsilon, \quad S = S_k + S_\varepsilon$$

и

$$P_k = \frac{\hbar^2}{2m_e} \gamma_1 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2), \quad Q_k = \frac{\hbar^2}{2m_e} \gamma_2 (k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2)$$

$$R_k = \frac{\hbar^2}{2m_e} \sqrt{3} [-\gamma_2 (k_x^2 - k_y^2) + 2j\gamma_3 k_x k_y], \quad S_k = \frac{\hbar^2}{2m_e} 2\sqrt{3}\gamma_3 (k_x - jk_y) k_z$$

$$P_\varepsilon = -a_v (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}), \quad Q_\varepsilon = -\frac{b}{2} (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz})$$

$$R_\varepsilon = \frac{\sqrt{3}}{2} b (\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy}) - jd\varepsilon_{xy}, \quad S_\varepsilon = -b (\varepsilon_{xz} - j\varepsilon_{yz})$$

У многим израчунавањима сматрано је да се SO зона увек може искључити из разматрања, чиме би се електронска структура на ивицама зона лаких и тешких

шупљина могла израчунати преко (4×4) хамилтонијана:

$$\begin{bmatrix} P+Q & -S & R & 0 \\ -S^+ & P-Q & 0 & R \\ R^+ & 0 & P-Q & S \\ 0 & R^+ & S^+ & P+Q \end{bmatrix}$$

Међутим у раду [81] показано је да се у случају постојања механичке деформације, таквим приступом чини грешка која се не може занемарити, и то конкретно на примеру полупроводничке легуре $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Из тог разлога се у циљу налажења границе НН и ЛН зона, поготову за легуре овог типа, морају тражити својствене вредности матричног хамилтонијана (31), где је утицај SO зоне узет у обзир.

Карактеристични полином матричног хамилтонијана (31) због његове симетрије представља производ два идентична полинома трећег реда [81], тако да се налажење својствених вредности своди се решавање кубне једначине:

$$\det[\mathbf{H}(\mathbf{k}) - \lambda \mathbf{I}] = 0 \Leftrightarrow [E(\mathbf{k})^3 - 3\lambda E(\mathbf{k}) - \mu(\mathbf{k}) + \Delta(E(\mathbf{k}) - \lambda(\mathbf{k}))]^2 = 0 \quad (32)$$

где је \mathbf{I} јединична матрица, и

$$\begin{aligned} E(\mathbf{k}) &= E + P_{\mathbf{k}} + P_{\varepsilon} \\ \lambda(\mathbf{k}) &= (Q_{\mathbf{k}} + Q_{\varepsilon})^2 + |S_{\mathbf{k}}|^2 + |R_{\mathbf{k}}|^2 \\ \mu(\mathbf{k}) &= 2(Q_{\mathbf{k}} + Q_{\varepsilon})^3 + 3Q|S_{\mathbf{k}}|^2 - 6Q|R_{\mathbf{k}}|^2 + \frac{3\sqrt{3}}{2}(S^2 R^+ + S^{+2} R) \end{aligned} \quad (33)$$

У наноструктурама које су предмет ове докторске дисертације, важи

$$\begin{aligned} \varepsilon_{xx} &= \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{xy} &= \varepsilon_{yz} = \varepsilon_{zx} = 0 \end{aligned}$$

услед чега је

$$R_\varepsilon = S_\varepsilon = 0$$

па карактеристична једначина постаје лако решива за енергије које одговарају границима зона, где је $\mathbf{k} = \mathbf{0}$:

$$\begin{aligned}\Delta E_{HH}(\mathbf{0}) &= -P_\varepsilon - Q_\varepsilon \\ \Delta E_{LH}(\mathbf{0}) &= -P_\varepsilon + \frac{1}{2} \left(Q_\varepsilon - \Delta + \sqrt{\Delta^2 + 2\Delta Q_\varepsilon + 9Q_\varepsilon^2} \right) \\ \Delta E_{SO}(\mathbf{0}) &= -P_\varepsilon + \frac{1}{2} \left(Q_\varepsilon - \Delta - \sqrt{\Delta^2 + 2\Delta Q_\varepsilon + 9Q_\varepsilon^2} \right)\end{aligned}\tag{34}$$

Дно проводне зоне се помера сразмерно хидростатичком напрезању [82]:

$$\Delta E_C(\mathbf{0}) = a_c (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz})$$

Растојање дна проводне зоне и врха зоне тешких шупљина и лаких шупљина је

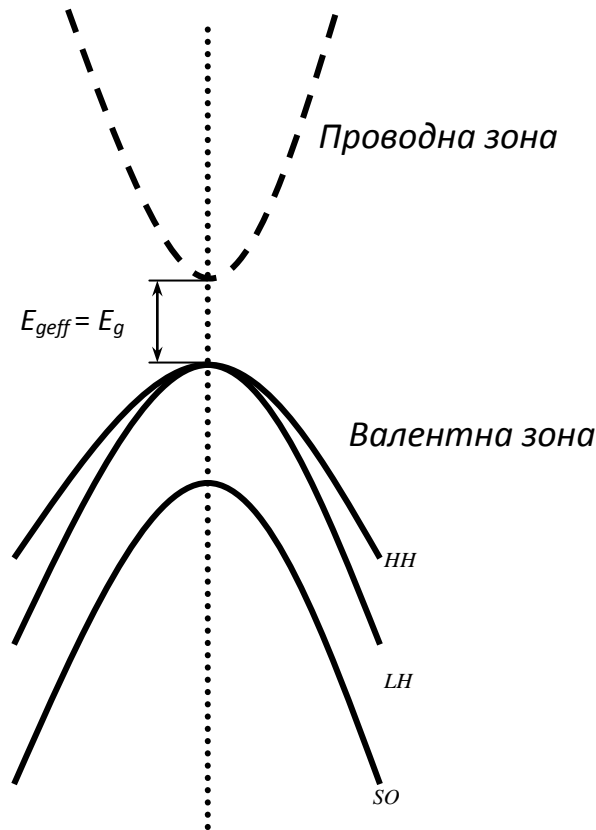
$$\begin{aligned}E_{C-HH}(\mathbf{0}) &= E_g + \Delta E_C(\mathbf{0}) - \Delta E_{HH}(\mathbf{0}) = E_g + a_c (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) + P_\varepsilon + Q_\varepsilon = \\ &= E_g + a (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) - \frac{b}{2} (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz})\end{aligned}\tag{35}$$

$$\begin{aligned}E_{C-LH}(\mathbf{0}) &= E_g + \Delta E_C(\mathbf{0}) - \Delta E_{LH}(\mathbf{0}) = \\ &= E_g + a_c (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) + P_\varepsilon - \frac{1}{2} \left(Q_\varepsilon - \Delta + \sqrt{\Delta^2 + 2\Delta Q_\varepsilon + 9Q_\varepsilon^2} \right) \\ &= E_g + a (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) - \frac{1}{2} \left(Q_\varepsilon - \Delta + \sqrt{\Delta^2 + 2\Delta Q_\varepsilon + 9Q_\varepsilon^2} \right)\end{aligned}\tag{36}$$

где је $a = a_c - a_v$.

Код ненапрегнутог полупроводника се врхови зона лаких и тешких

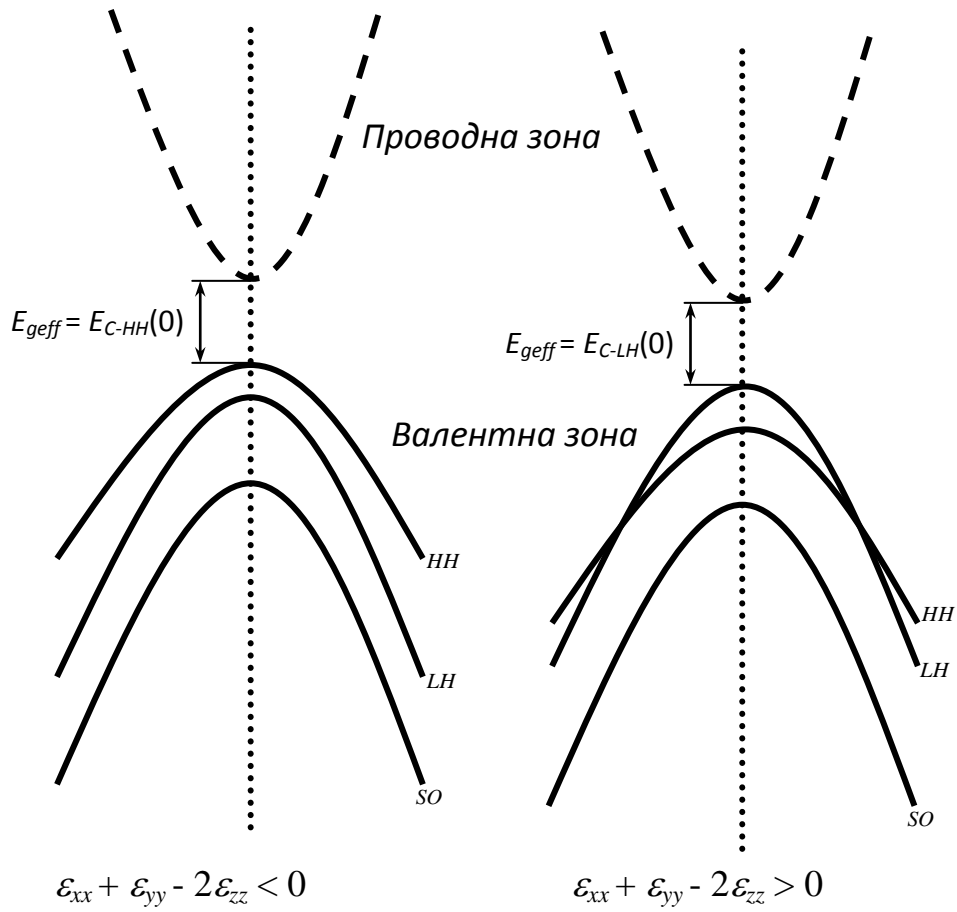
шупљина поклапају, док се врх Split-off зоне налази померено за Δ испод те тачке (слика 3.1). На слици 3.2 приказано је дејство деформације на померање зона тешких и лаких шупљина. У случају $\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz} < 0$, зона тешких шупљина се налази изнад зоне лаких шупљина, док је у случају $\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz} > 0$ ситуација обрнута - зона тешких шупљина се налази испод зоне лаких шупљина.



Слика 3.1 *Ненапрегнути полупроводник. Врхови зона лаких и тешких и тешких шупљина се поклапају. Врх Split-off зоне налази се за величину Δ испод те тачке.*

Услед дејства механичке деформације, доћи ће и до промене енергетског процепца полупроводника и то за вредност:

$$\Delta E_g = \min(E_{C-HH}(\mathbf{0}) - E_g, E_{C-LH}(\mathbf{0}) - E_g)$$



Слика 3.2 Раздвајање зона лаких и тешких и тешких шупљина под дејством механичке деформације

У близини врхова зона, границе зона описане су следећим једначинама [81]:

$$E_{HH}(\mathbf{k}) = E_{HH}(0) - \left(\frac{\hbar^2}{2m_0} \right) [(\gamma_1 + \gamma_2)k_{\parallel}^2 + (\gamma_1 - 2\gamma_2)k_{\perp}^2]$$

$$E_{LH}(\mathbf{k}) = E_{LH}(0) - \left(\frac{\hbar^2}{2m_0} \right) [(\gamma_1 - f_+\gamma_2)k_{\parallel}^2 + (\gamma_1 + 2f_+\gamma_2)k_{\perp}^2]$$

$$E_{SO}(\mathbf{k}) = E_{SO}(0) - \left(\frac{\hbar^2}{2m_0} \right) [(\gamma_1 - f_-\gamma_2)k_{\parallel}^2 + (\gamma_1 + 2f_-\gamma_2)k_{\perp}^2]$$

где се фактори f_{\pm} рачунају на следећи начин:

$$f_{\pm} = \frac{2x \left[1 + \frac{3}{2} \left(x - 1 \pm \sqrt{1 + 2x + 9x^2} \right) \right] + 6x^2}{\frac{3}{4} \left(x - 1 \pm \sqrt{1 + 2x + 9x^2} \right)^2 + x - 1 \pm \sqrt{1 + 2x + 9x^2} - 3x^2}$$

где је $x = \frac{Q_{\varepsilon}}{\Delta}$.

Одговарајуће ефективне масе шупљина по правцима су:

$$\begin{aligned} m_{HH\parallel}^* &= \frac{1}{\gamma_1 + \gamma_2}, & m_{HH\perp}^* &= \frac{1}{\gamma_1 - 2\gamma_2} \\ m_{LH\parallel}^* &= \frac{1}{\gamma_1 - f_+\gamma_2}, & m_{LH\perp}^* &= \frac{1}{\gamma_1 + 2f_+\gamma_2} \\ m_{SO\parallel}^* &= \frac{1}{\gamma_1 - f_-\gamma_2}, & m_{SO\perp}^* &= \frac{1}{\gamma_1 + 2f_-\gamma_2} \end{aligned}$$

Горње једначине важе само у близини врхова зона. јер је кр-метода рачунања апроксимативна метода намењена израчунавањима у околини тачака екстремума. Даље од врхова зона ефективне масе доста варирају у зависности од вредности вектора \mathbf{k} .

Под утицајем деформације, и за тачке у околини врхова зона се могу јавити одступања, поготову за ефективне масе лаких шупљина и шупљина из Split-off зоне, па се приликом израчунавања у модел урачунава дејство више зона. Једна компаративна анализа у том смислу, где се разматра вредност ефективне масе у зависности од броја зона које се узимају у обзир у кр-моделу дата је у раду [83].

Промена ефективне масе са деформацијом за полупроводнике који кристалишу по дијамантској кристалној решетки, са применом представљеног модела на германијуму дата је у раду [84].

Што се InAs квантних тачака унутар GaAs супстрата тиче, електронска структура самоасемблираних тачака за пирамидални облик тачака израчуната је у раду [85], а за израчунавања је коришћен четворозонски модел. У раду [86] је исти проблем решаван са осмозонским кр-моделом.

Електронска структура цилиндричних квантних InAs тачака унутар GaAs супстрата проучавана је у радовима [53, 87]. У раду [87] су рачуната енергија основног енергетског стања танке цилиндричне InAs квантне тачке унутар GaAs супстрата за различите пречнике и дебљине тачака. Коришћена су три различита алгоритма за израчунавање. Одступање добијених резултата се смањивало са полупречником квантне тачке. На тај начин, за квантне тачке полупречника већег од 20 nm, сва три метода су била применљива са веома задовољавајућом тачношћу.

4. МЕХАНИЧКА ДЕФОРМАЦИЈА УНУТАР ВЕРТИКАЛНОГ СТЕКА КВАНТНИХ ТАЧАКА

Током последњих двадесет година много пута је показано да је технолошки могуће добити наноструктуре у облику вертикално и периодично поређаних квантних тачака - КТ стека [88,89,90,91]. Овакве наноструктуре могу наћи потеницијалну примену у полупроводничкој ласерској технологији [92,93], или за израду соларних ћелија [91].

До данас није објављен ниједан научни рад у коме су изведени аналитички изрази за израчунавање механичких деформација унутар КТ стекова. Известан број радова бавио се израчунавањем деформација применом нумеричких метода, и то за КТ стекове састављене од мањег броја квантних тачака [94,95].

У овом поглављу биће разматрани вертикални КТ стекови састављени од танких цилиндричних квантних тачака сачињених од полупроводника 2 и уграђених у супстрат од полупроводника 1. Полазне претпоставке су следеће:

- (1) Дебљине квантних тачака, и раздвојних слојева супстрата много су мање од њихових попречних димензија;
- (2) Кохерентан епитаксијални раст којим су добијене наноструктуре без дефеката;
- (3) Полупроводници 1 и 2 имају кубичну дијамантску или сфалеритну кристалну структуру;

(4) Квантне тачке су равне и константне дебљине, осим евентуално близу омотача КТ стека;

(5) Попречни пресек КТ стека може бити произвољног облика.

Последица претпоставке (1) је врло мала запремина области (у поређењу са запремином одговарајућег дела стека) у околини омотача стека у којој деформација варира, тако да се њен утицај може занемарити. Сходно томе имаћемо константну вредност деформације унутар квантних тачака стека, и другу такође константну деформацију у раздвојним слојевима супстрата.

4.1 АНАЛИТИЧКО ИЗВОЂЕЊЕ ИЗРАЗА ЗА ДЕФОРМАЦИЈУ УНУТАР КТ СТЕКА

Поставимо координатни систем $0xyz$ тако да z оса буде постављена у кристалном правцу (001) , а x -оса и y -оса у кристалним правцима (100) и (010) респективно (Слика 4.1). Због симетрије кубичне кристалне решетке, а за овако постављени координатни систем, важиће

$$\begin{aligned}\varepsilon_{xx} &= \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{xy} &= \varepsilon_{yz} = \varepsilon_{zx} = 0\end{aligned}\tag{1}$$

Означимо трансверзалне компоненте деформације са

$$\varepsilon_p = \varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy}$$

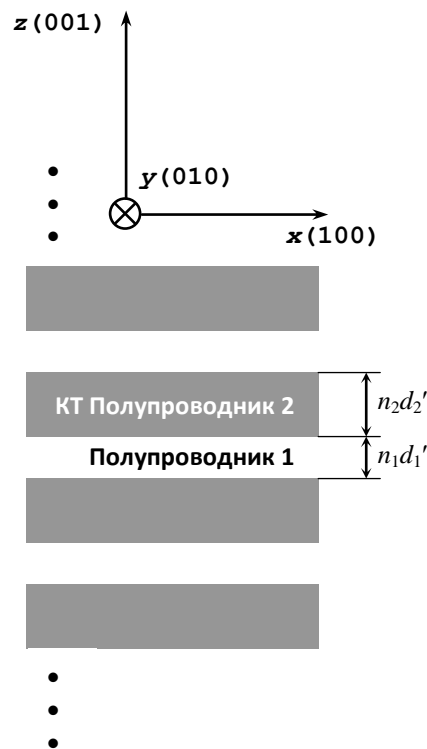
а лонгитудиналну компоненту са

$$\varepsilon_n = \varepsilon_{zz}$$

Даље, нека су a_1 и a_2 недеформисане константе решетке полупроводника 1 и 2, нека су a_1' и a_2' њихове деформисане вредности у xy равни КТ стека. Означимо са

ε_{1p} и ε_{2p} трансверзалне компоненте деформације у полупроводницима 1 и 2. Због претпоставке кохерентног епитаксијалног раста кристала, биће $a_1' = a_2' = a'$. Сходно томе,

$$\begin{aligned}\varepsilon_{1p} &= \frac{a' - a_1}{a_1} = \frac{a'}{a_1} - 1 \\ \varepsilon_{2p} &= \frac{a' - a_2}{a_2} = \frac{a'}{a_2} - 1\end{aligned}\quad (2)$$



Слика 4.1 *Стек квантних тачака од полупроводника 2 унутар супстрата од полупроводника 1.*

Нека су n_1 и n_2 бројеви монослојева у полупроводницима 1 и 2 унутар периода КТ стека, d_1 и d_2 недеформисане дебљине монослојева, а d_1' и d_2' одговарајуће деформисане дебљине унутар стека. Због претпоставке кохерентног раста кристала мора бити подједнак број монослојева унутар периода КТ стека и

околног недеформисаног супстрата тако да важи

$$n_1 d_1' + n_2 d_2' = (n_1 + n_2) d_1 \quad (3)$$

Са друге стране, имамо

$$\frac{d_1'}{d_1} = \frac{d_1'}{d_1} - 1 + 1 = \frac{d_1' - d_1}{d_1} + 1 = \varepsilon_{1n} + 1$$

и аналогно са тим

$$\frac{d_2'}{d_2} = \varepsilon_{2n} + 1.$$

Након замене последњих једнакости у (3) добијамо

$$n_1 d_1 (1 + \varepsilon_{1n}) + n_2 d_2 (1 + \varepsilon_{2n}) = (n_1 + n_2) d_1 \quad (4)$$

односно

$$\frac{n_1}{n_1 + n_2} (1 + \varepsilon_{1n}) + \frac{n_2}{n_1 + n_2} \frac{d_2}{d_1} (1 + \varepsilon_{2n}) = 1 \quad (5)$$

Због идентичне кристалне структуре, сви одговарајући геометријски параметри полупроводника 1 и 2 биће пропорционални, тако да важи

$$\frac{d_2}{d_1} = \frac{a_2}{a_1}$$

Заменом ове једнакости у (5) добијамо

$$(1 - \xi)(1 + \varepsilon_{1n}) + \xi \frac{a_2}{a_1} (1 + \varepsilon_{2n}) = 1 \quad (6)$$

где је

$$\xi = \frac{n_2}{n_1 + n_2}$$

Густина еластичне енергије кристала кубичне структуре је [96,45]:

$$w = \frac{1}{2} C_{11} (\varepsilon_{xx}^2 + \varepsilon_{yy}^2 + \varepsilon_{zz}^2) + C_{12} (\varepsilon_{xx} \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{yy} \varepsilon_{zz} + \varepsilon_{zz} \varepsilon_{xx}) + 2C_{44} (\varepsilon_{xy}^2 + \varepsilon_{yz}^2 + \varepsilon_{zx}^2)$$

где су C_{ij} коефицијенти еластичности кубичног кристала. Из једнакости (1) следи да један период КТ стека има еластичну енергију

$$\begin{aligned} \Delta E &= w_1 \Delta V_1 + w_2 \Delta V_2 = \\ &= Sn_1 d_1 (1 + \varepsilon_{1n}) \left[\frac{1}{2} C_{11}^{(1)} (2\varepsilon_{1p}^2 + \varepsilon_{1n}^2) + C_{12}^{(1)} (\varepsilon_{1p}^2 + 2\varepsilon_{1n} \varepsilon_{1p}) \right] + \\ &+ Sn_2 d_2 (1 + \varepsilon_{2n}) \left[\frac{1}{2} C_{11}^{(2)} (2\varepsilon_{2p}^2 + \varepsilon_{2n}^2) + C_{12}^{(2)} (\varepsilon_{2p}^2 + 2\varepsilon_{2n} \varepsilon_{2p}) \right] \end{aligned} \quad (7)$$

где су w_1 и w_2 густине еластичне енергије у полупроводницима 1 и 2, док су ΔV_1 и ΔV_2 запремине једне КТ и једног одстојника. Сагласно принципу минимума енергије, вредности деформације унутар стека могу се одредити из једначина за минимум енергије ΔE уз услов (4):

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \varepsilon_{1n}} (\Delta E - \beta f(\varepsilon_{1n}, \varepsilon_{2n})) &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial \varepsilon_{2n}} (\Delta E - \beta f(\varepsilon_{1n}, \varepsilon_{2n})) &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial a'} (\Delta E - \beta f(\varepsilon_{1n}, \varepsilon_{2n})) &= 0 \end{aligned} \quad (8)$$

где је β нека константа и

$$f(\varepsilon_{1n}, \varepsilon_{2n}) = n_1 d_1 (1 + \varepsilon_{1n}) + n_2 d_2 (1 + \varepsilon_{2n}) - (n_1 + n_2) d_1$$

Након замене једнакости (4) и (7) у једначине (8), и налажења парцијалних извода, добија се у апроксимацији првог реда:

$$\begin{aligned} S \left[C_{11}^{(1)} \varepsilon_{1n} + \frac{2C_{12}^{(1)}}{a_1} (a' - a_1) \right] - \beta &\approx 0 \\ S \left[C_{11}^{(2)} \varepsilon_{2n} + \frac{2C_{12}^{(2)}}{a_2} (a' - a_2) \right] - \beta &\approx 0 \\ n_1 \frac{d_1}{a_1} \left[\frac{C_{11}^{(1)} + C_{12}^{(1)}}{a_1} (a' - a_1) + C_{12}^{(1)} \varepsilon_{1n} \right] + n_2 \frac{d_2}{a_2} \left[\frac{C_{11}^{(2)} + C_{12}^{(2)}}{a_2} (a' - a_2) + C_{12}^{(2)} \varepsilon_{2n} \right] &\approx 0 \end{aligned}$$

где је претпостављено да су деформације $\varepsilon_{(1;2)n}$ и $\varepsilon_{(1;2)p}$ мале, тако да се сабирци другог реда могу занемарити. Након елиминације β из горњих једначина, и њиховим комбиновањем са једначином (6), добија се следећи систем једначина:

$$\begin{aligned} C_{11}^{(1)} \varepsilon_{1n} - C_{11}^{(2)} \varepsilon_{2n} + 2 \left(\frac{C_{12}^{(1)}}{a_1} - \frac{C_{12}^{(2)}}{a_2} \right) a' &= 2(C_{12}^{(1)} - C_{12}^{(2)}) \\ (1 - \xi) C_{12}^{(1)} \varepsilon_{1n} + \xi C_{12}^{(2)} \varepsilon_{2n} + \\ + \left[(1 - \xi) \frac{C_{11}^{(1)} + C_{12}^{(1)}}{a_1} + \xi \frac{C_{11}^{(2)} + C_{12}^{(2)}}{a_2} \right] a' &= (1 - \xi)(C_{11}^{(1)} + C_{12}^{(1)}) + \xi(C_{11}^{(2)} + C_{12}^{(2)}) \quad (9) \\ (1 - \xi)(1 + \varepsilon_{1n}) + \xi \frac{a_2}{a_1} (1 + \varepsilon_{2n}) &= 1 \end{aligned}$$

Решавањем система једначина (9), добијају се компоненте лонгитудиналне деформације, $\varepsilon_{(1;2)n}$ као и a' - деформисана вредност константи решетке за оба полупроводника 1 и 2 у равни попречног пресека КТ стека:

$$\varepsilon_{1n} = \frac{D_1}{D}, \quad \varepsilon_{2n} = \frac{D_2}{D}, \quad a' = \frac{D_3}{D}$$

где су D_i и D аге одговарајуће детерминанте овог система једначина. Након тога,

трансверзалне компоненте деформације се добијају из (2).

4.2 ПРАКТИЧНИ РЕЗУЛТАТИ

Теоретске резултате изведене у претходном делу применићемо на случај и КТ стека сачињеног од:

(1) InAs квантних тачака, унутар GaAs супстрата;

(2) In_xGa_{1-x}As квантних тачака, унутар GaAs супстрата, за вредности моларног удела $x = 0,25$; $x = 0,5$ и $x = 0,75$;

Параметри InAs, GaAs [97] и накнадно израчунати параметри In_xGa_{1-x}As дати су у Табели 4.1.

Табела 4.1 Параметри GaAs, InAs и In_xGa_{1-x}As:

	Lattice constant:	C ₁₁ (10 ¹⁰ Pa)	C ₁₂ (10 ¹⁰ Pa)	C ₄₄ (10 ¹⁰ Pa)
GaAs	5,6533 Å	11,88	5,38	5,94
InAs	6,0583 Å	8,329	4,526	3,959
In _{0.25} Ga _{0.75} As	5,7357 Å	11,1577	5,2063	5,5370
In _{0.5} Ga _{0.5} As	5,8290 Å	10,3397	5,0096	5,0807
In _{0.75} Ga _{0.25} As	5,9355 Å	9,4056	4,7849	4,5596

У случају (1), након замене вредности ових параметара у систем једначина (9), и решавања система добија се:

$$\begin{aligned}
 \varepsilon_{1n}^{(1)} &= \frac{-0,1810\xi^2 + 1,0583\xi}{\xi^2 - 1,4412\xi - 7,0792} \\
 \varepsilon_{2n}^{(1)} &= \frac{-0,2357\xi^2 + 1,2528\xi - 0,5143}{\xi^2 - 1,4412\xi - 7,0792} \\
 a'^{(1)} &= \frac{4,6303\xi^2 - 11,2424\xi - 40,0207}{\xi^2 - 1,4412\xi - 7,0792} [\text{nm}]
 \end{aligned} \tag{10}$$

након тога се деформације $\varepsilon_{(1;2)p}^{(1)}$ могу добити из (2):

$$\begin{aligned}\varepsilon_{1p}^{(1)} &= \frac{-0,1810\xi^2 - 0,5475\xi}{\xi^2 - 1,4412\xi - 7,0792} \\ \varepsilon_{2p}^{(1)} &= \frac{-0,2357\xi^2 - 0,4145\xi + 0,4732}{\xi^2 - 1,4412\xi - 7,0792}\end{aligned}\quad (11)$$

Добијени изрази за деформације (10) и (11) приказани су графички на Сликама 4.14-4.17.

Унутар GaAs одстојника трансверзална деформација унутар одстојника је увек позитивна и расте на интервалу $\xi \in [0,1]$ од $\varepsilon_{1p} = 0\%$ до $\varepsilon_{1p} = 9,69\%$, док је лонгитудинална деформација увек негативна и опада на интервалу $\xi \in [0,1]$ од $\varepsilon_{1n} = 0\%$ до $\varepsilon_{1n} = -11,67\%$.

Унутар InAs квантних тачака трансверзална деформација расте на интервалу $\xi \in [0,1]$ од $\varepsilon_{2p} = -6,68\%$ до $\varepsilon_{2p} = 2,35\%$, мењајући знак у тачки $\xi \approx 0,778$, док лонгитудинална деформација опада на интервалу $\xi \in [0,1]$ од $\varepsilon_{2n} = 7,27\%$ до $\varepsilon_{2n} = -6,68\%$, и мења знак у тачки $\xi \approx 0,448$.

У случају (2) примењена је Fournet-ова [98] метода за израчунавање одговарајућих параметара легуре $\text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}$ од које су сачињене квантне тачке. Наиме, експериментално је показано [99] да управо ова метода даје најбоље резултате у случају $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ легуре. Било који параметар легуре A_xB_{1-x} се по Fournet-овој методи рачуна према формули:

$$\gamma(x) = x\gamma_A + (1-x)\gamma_B + bx(1-x) \quad (12)$$

где је

$$b = (\gamma_A - \gamma_B) \left(\frac{\frac{\chi_A}{\chi_B} - 1}{x + (1-x)\frac{\chi_A}{\chi_B}} \right) \quad (13)$$

Овде су γ_A и γ_B одговарајући параметри полупроводничких једињења А и В, а χ_A и

χ_V њихове компресибилности, које се могу израчунати по формули за кубичне кристале [45]:

$$\chi = 3(S_{11} + 2S_{12}) \quad (14)$$

Из [97] налазимо вредности параметара S_{11} и S_{12} за GaAs:

$$S_{11} = 1,173 \cdot 10^{-11} Pa^{-1}$$

$$S_{12} = -0,366 \cdot 10^{-11} Pa^{-1}$$

као и за InAs:

$$S_{11} = 1,945 \cdot 10^{-11} Pa^{-1}$$

$$S_{12} = -0,6847 \cdot 10^{-11} Pa^{-1}$$

на основу којих из једначине (14) добијамо одговарајуће компресибилности

$$\chi_{InAs} = 1,727 \cdot 10^{-11} Pa^{-1}$$

$$\chi_{GaAs} = 1,323 \cdot 10^{-11} Pa^{-1} \quad (15)$$

Применом формула (12) и (13) сада се могу израчунати сви параметри за легуру $In_xGa_{1-x}As$ и добијеним вредностима попунити Табела 4.1.

Након замене одговарајућих параметара из Табеле 4.1 у систем једначина (9), решавања система, и након тог примене једначине (2) добија се редом за следеће вредности мораног удела x :

- За $x = 0,25$:

$$\varepsilon_{1n} = \frac{-0,2248\xi^2 + 6,1140\xi}{\xi^2 - 3,0535\xi - 216,9770}$$

$$\varepsilon_{2n} = \frac{-0,2357\xi^2 + 6,2911\xi - 2,9089}{\xi^2 - 3,0535\xi - 216,9770} \quad (16)$$

$$a' = \frac{4,3834\xi^2 - 39,7823\xi - 254,0401}{\xi^2 - 3,0535\xi - 1226,6363} [nm]$$

$$\begin{aligned}\varepsilon_{1p}^{(2)} &= \frac{-0,2248\xi^2 - 3,9835\xi}{\xi^2 - 3,0535\xi - 216,9770} \\ \varepsilon_{2p}^{(2)} &= \frac{-0,2357\xi^2 - 3,8824\xi + 3,1171}{\xi^2 - 3,0535\xi - 216,9770}\end{aligned}\quad (17)$$

Добијени изрази за деформације (16) и (17) приказани су графички на Сликама 4.2-4.5.

Унутар GaAs одстојника трансверзална деформација унутар одстојника је увек позитивна и расте на интервалу $\xi \in [0,1]$ од $\varepsilon_{1p} = 0\%$ до $\varepsilon_{1p} = 1,92\%$, док је лонгитудинална деформација увек негативна и опада на интервалу $\xi \in [0,1]$ од $\varepsilon_{1n} = 0\%$ до $\varepsilon_{1n} = -2,69\%$.

Унутар $\text{In}_{0,25}\text{Ga}_{0,75}\text{As}$ квантних тачака трансверзална деформација расте на интервалу $\xi \in [0,1]$ од $\varepsilon_{2p} = -1,44\%$ до $\varepsilon_{2p} = 0,46\%$, мењајући знак у тачки $\xi \approx 0,767$, док лонгитудинална деформација опада на интервалу $\xi \in [0,1]$ од $\varepsilon_{2n} = 1,34\%$ до $\varepsilon_{2n} = -1,44\%$, и мења знак у тачки $\xi \approx 0,471$.

- За $x = 0,50$:

$$\begin{aligned}\varepsilon_{1n} &= \frac{-0,2120\xi^2 + 2,7499\xi}{\xi^2 - 1,9786\xi - 44,9367} \\ \varepsilon_{2n} &= \frac{-0,2357\xi^2 + 2,9322\xi - 1,3125}{\xi^2 - 1,9786\xi - 44,9367} \\ a' &= \frac{4,4548\xi^2 - 20,6873\xi - 254,0401}{\xi^2 - 1,9786\xi - 44,9367} [\text{nm}]\end{aligned}\quad (18)$$

$$\begin{aligned}\varepsilon_{1p}^{(2)} &= \frac{-0,2120\xi^2 - 1,6807\xi}{\xi^2 - 1,9786\xi - 44,9367} \\ \varepsilon_{2p}^{(2)} &= \frac{-0,2357\xi^2 - 1,5704\xi + 1,3546}{\xi^2 - 1,9786\xi - 44,9367}\end{aligned}\quad (19)$$

Добијени изрази за деформације (16) и (17) приказани су графички на Сликама 4.6-4.9.

Унутар GaAs одстојника трансверзална деформација унутар одстојника је увек позитивна и расте на интервалу $\xi \in [0,1]$ од $\varepsilon_{1p} = 0\%$ до $\varepsilon_{1p} = 4,12\%$, док је

лонгитудинална деформација увек негативна и опада на интервалу $\xi \in [0,1]$ од $\varepsilon_{1n} = 0\%$ до $\varepsilon_{1n} = -5,53\%$.

Унутар $\text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}$ квантних тачака трансверзална деформација расте на интервалу $\xi \in [0,1]$ од $\varepsilon_{2p} = -3,01\%$ до $\varepsilon_{2p} = 0,98\%$, мењајући знак у тачки $\xi \approx 0,773$, док лонгитудинална деформација опада на интервалу $\xi \in [0,1]$ од $\varepsilon_{2n} = 2,92\%$ до $\varepsilon_{2n} = -3,01\%$, и мења знак у тачки $\xi \approx 0,465$.

- За $x = 0,75$:

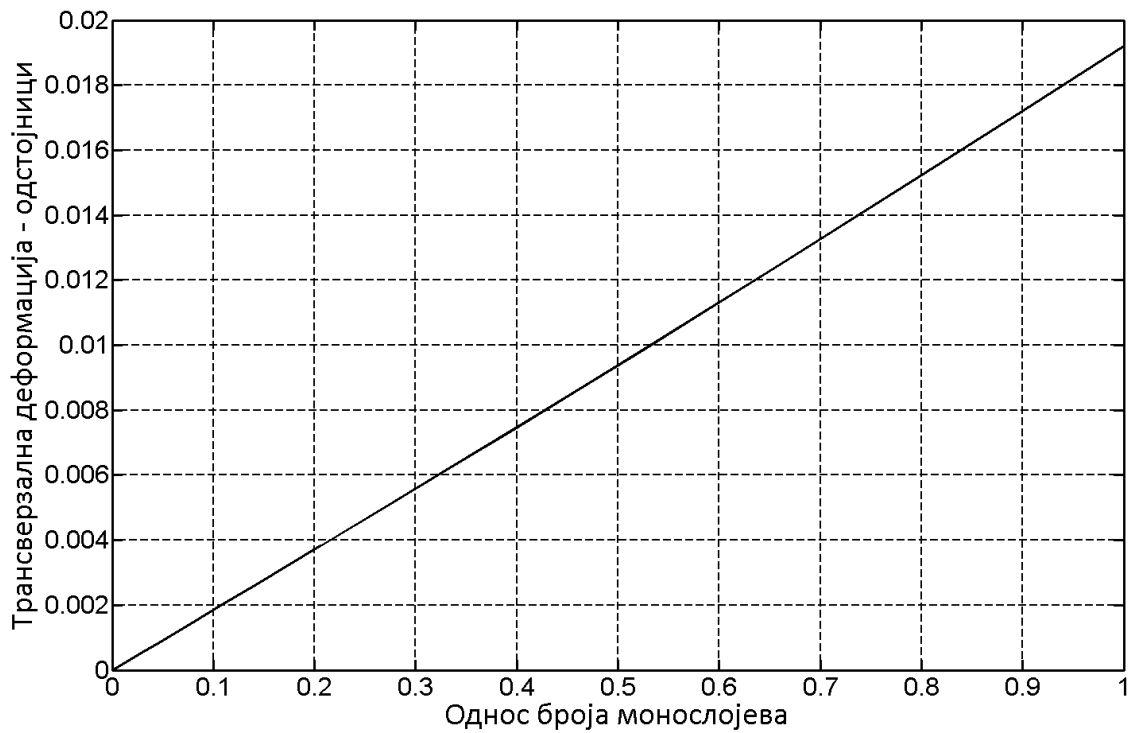
$$\begin{aligned}\varepsilon_{1n} &= \frac{-0,1976\xi^2 + 1,6245\xi}{\xi^2 - 1,6203\xi - 16,1308} \\ \varepsilon_{2n} &= \frac{-0,2357\xi^2 + 1,8124\xi - 0,7803}{\xi^2 - 1,6203\xi - 16,1308}\end{aligned}\quad (20)$$

$$\begin{aligned}a' &= \frac{4,5365\xi^2 - 14,3643\xi - 91,1924}{\xi^2 - 1,6203\xi - 16,1308} [\text{nm}] \\ \varepsilon_{1p}^{(2)} &= \frac{-0,1976\xi^2 - 0,9206\xi}{\xi^2 - 1,6203\xi - 16,1308} \\ \varepsilon_{2p}^{(2)} &= \frac{-0,2357\xi^2 - 0,7998\xi + 0,7669}{\xi^2 - 1,6203\xi - 16,1308}\end{aligned}\quad (21)$$

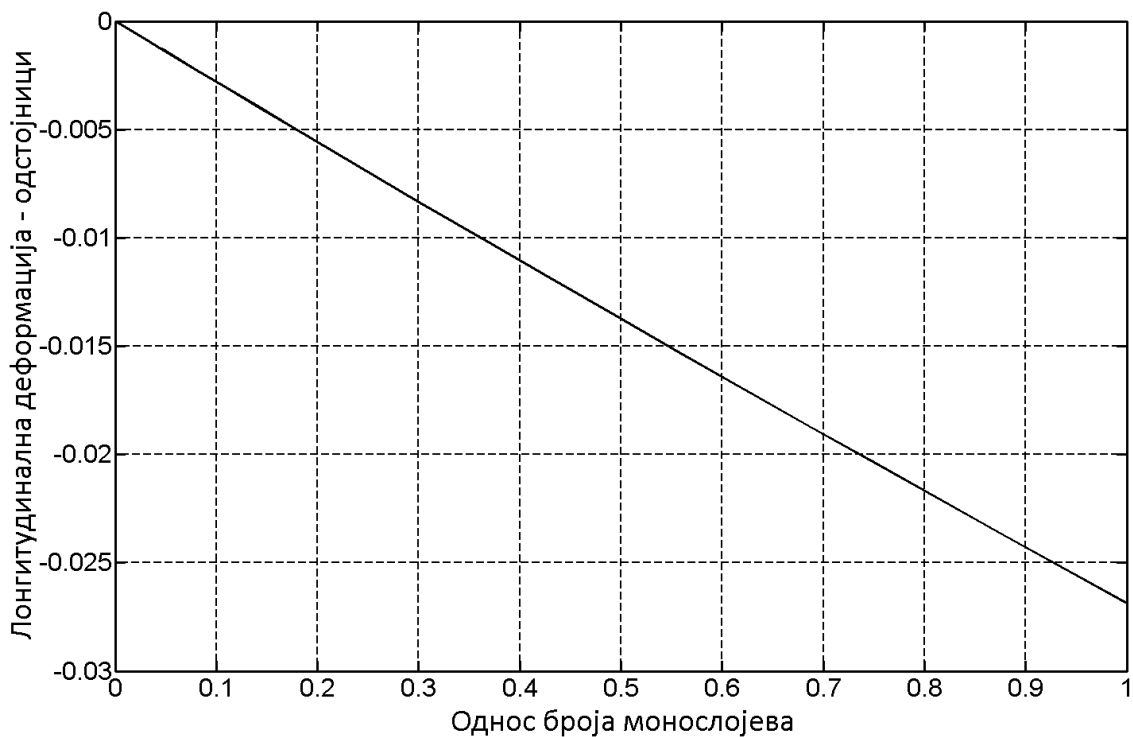
Добијени изрази за деформације (20) и (21) приказани су графички на Сликама 4.10-4.13.

Унутар GaAs одстојника трансверзална деформација унутар одстојника је увек позитивна и расте на интервалу $\xi \in [0,1]$ од $\varepsilon_{1p} = 0\%$ до $\varepsilon_{1p} = 6,67\%$, док је лонгитудинална деформација увек негативна и опада на интервалу $\xi \in [0,1]$ од $\varepsilon_{1n} = 0\%$ до $\varepsilon_{1n} = -8,52\%$.

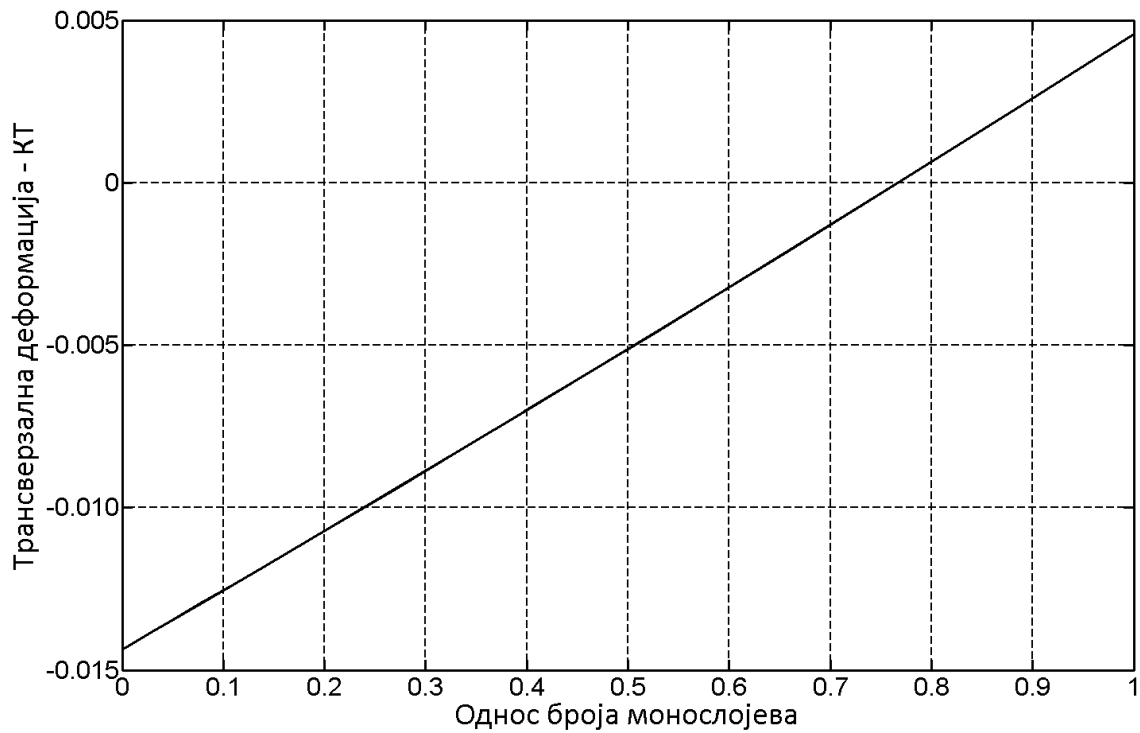
Унутар $\text{In}_{0,75}\text{Ga}_{0,25}\text{As}$ квантних тачака трансверзална деформација расте на интервалу $\xi \in [0,1]$ од $\varepsilon_{2p} = -4,75\%$ до $\varepsilon_{2p} = 1,60\%$, мењајући знак у тачки $\xi \approx 0,780$, док лонгитудинална деформација опада на интервалу $\xi \in [0,1]$ од $\varepsilon_{2n} = 4,84\%$ до $\varepsilon_{2n} = -4,75\%$, и мења знак у тачки $\xi \approx 0,458$.



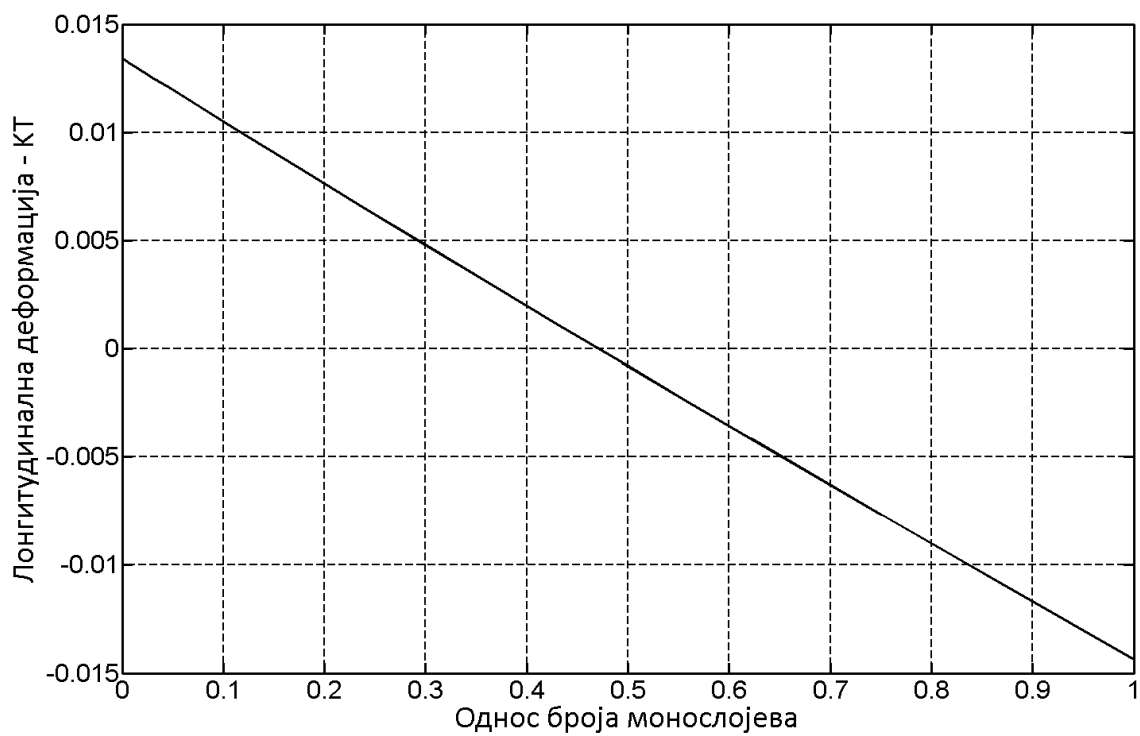
Слика 4.2 Трансверзална деформација унутар GaAs одстојника у $In_{0.25}Ga_{0.75}As$ КТ стеку.



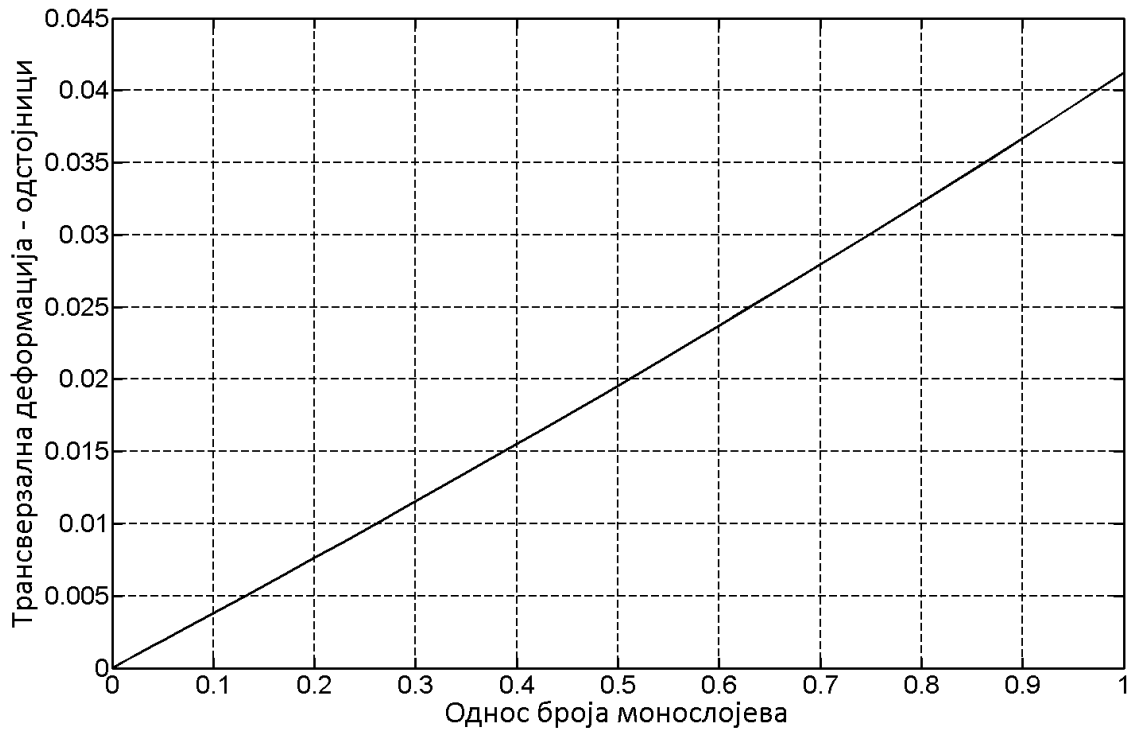
Слика 4.3 Лонгитудинална деформација унутар GaAs одстојника у $In_{0.25}Ga_{0.75}As$ КТ стеку.



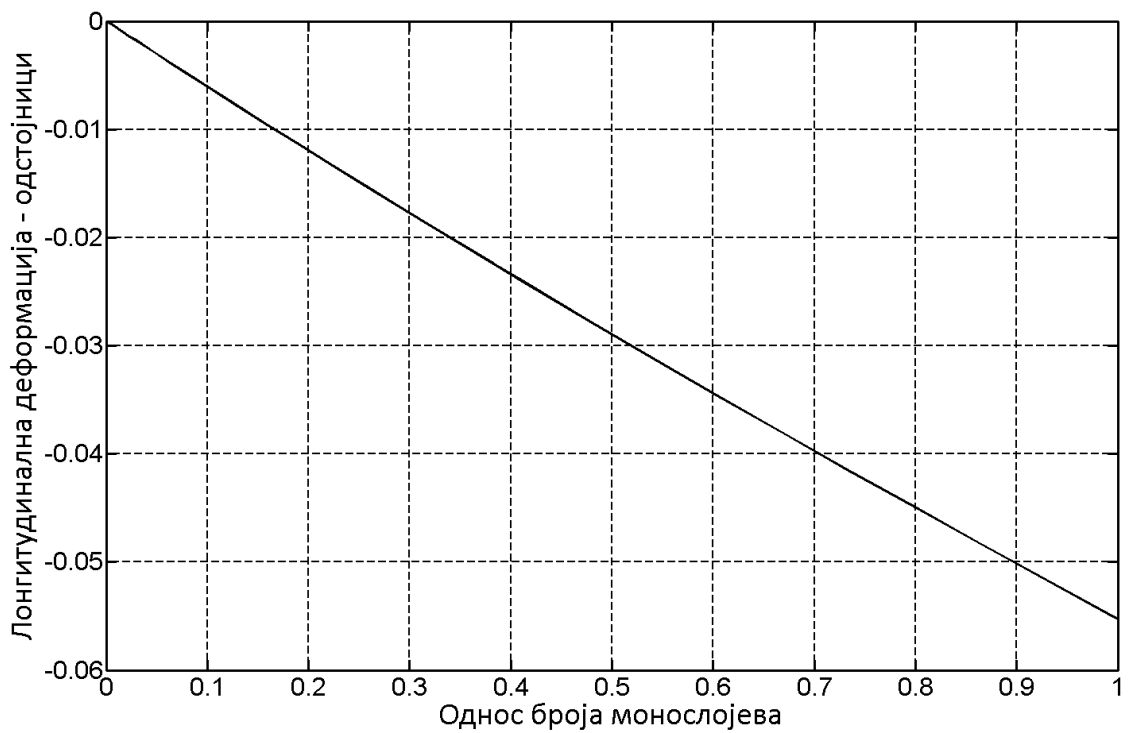
Слика 4.4 Трансверзална деформација унутар $In_{0.25}Ga_{0.75}As$ квантне тачке у $In_{0.25}Ga_{0.75}As$ КТ стеку.



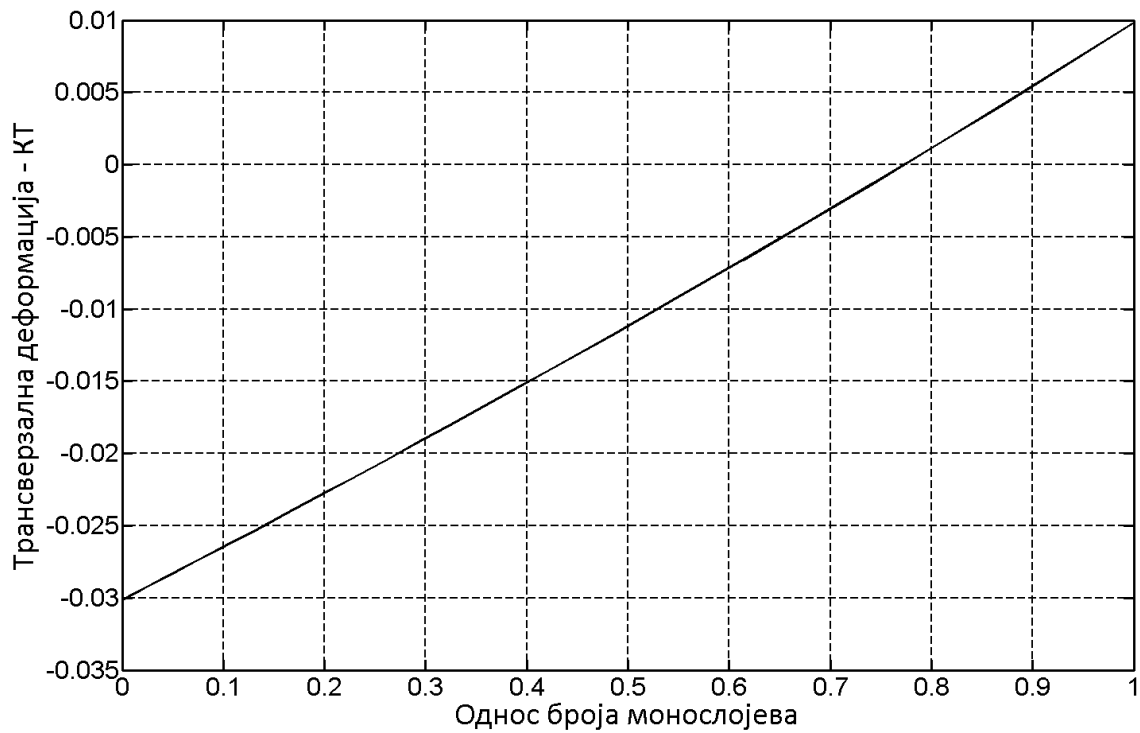
Слика 4.5 Лонгитудинална деформација унутар $In_{0.25}Ga_{0.75}As$ квантне тачке у $In_{0.25}Ga_{0.75}As$ КТ стеку.



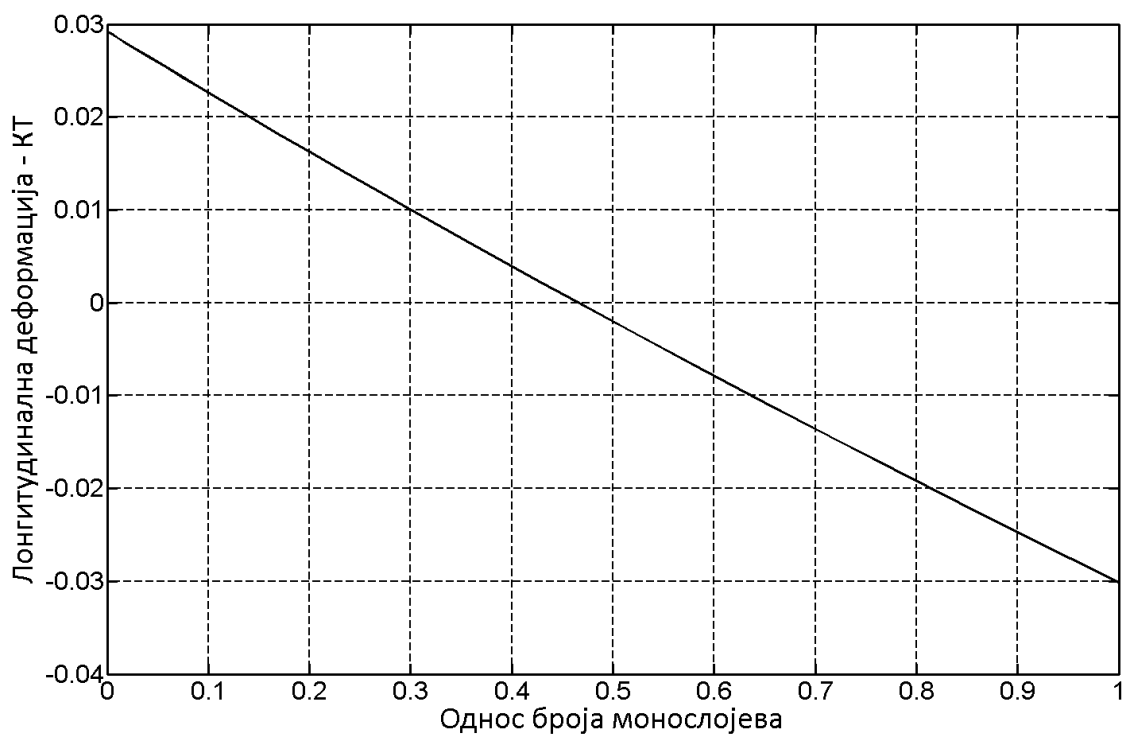
Слика 4.6 Трансверзална деформација унутар GaAs одстојника у $In_{0,5}Ga_{0,5}As$ КТ стеку.



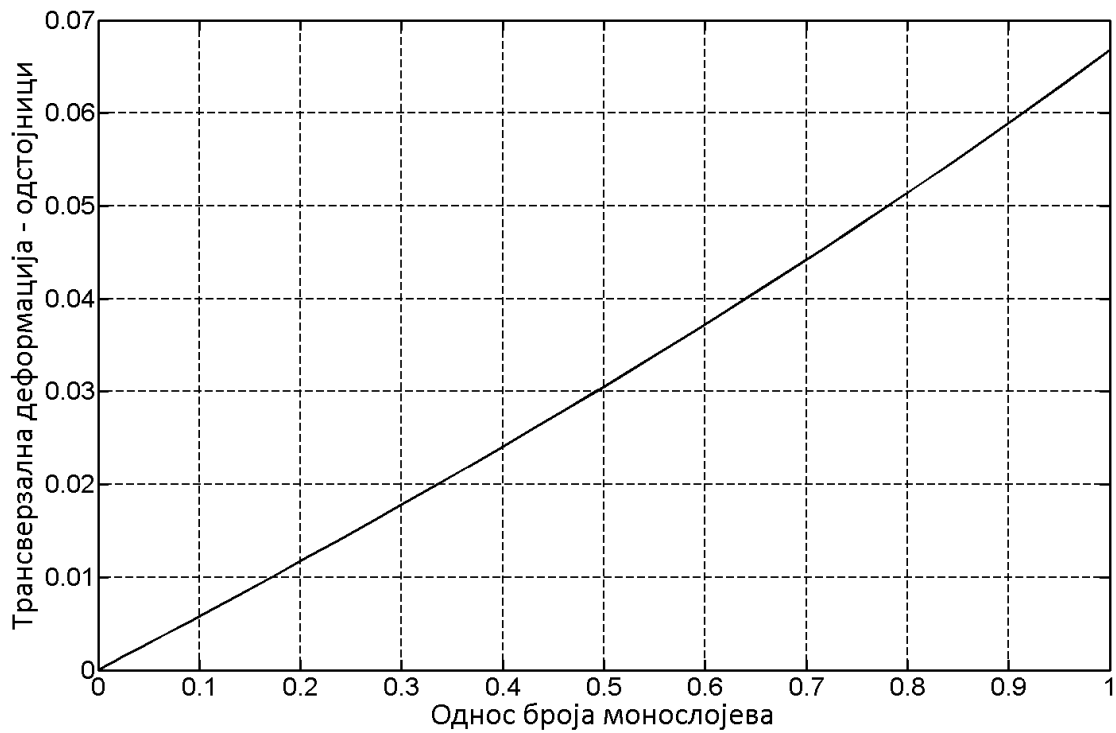
Слика 4.7 Лонгитудинална деформација унутар GaAs одстојника у $In_{0,5}Ga_{0,5}As$ КТ стеку.



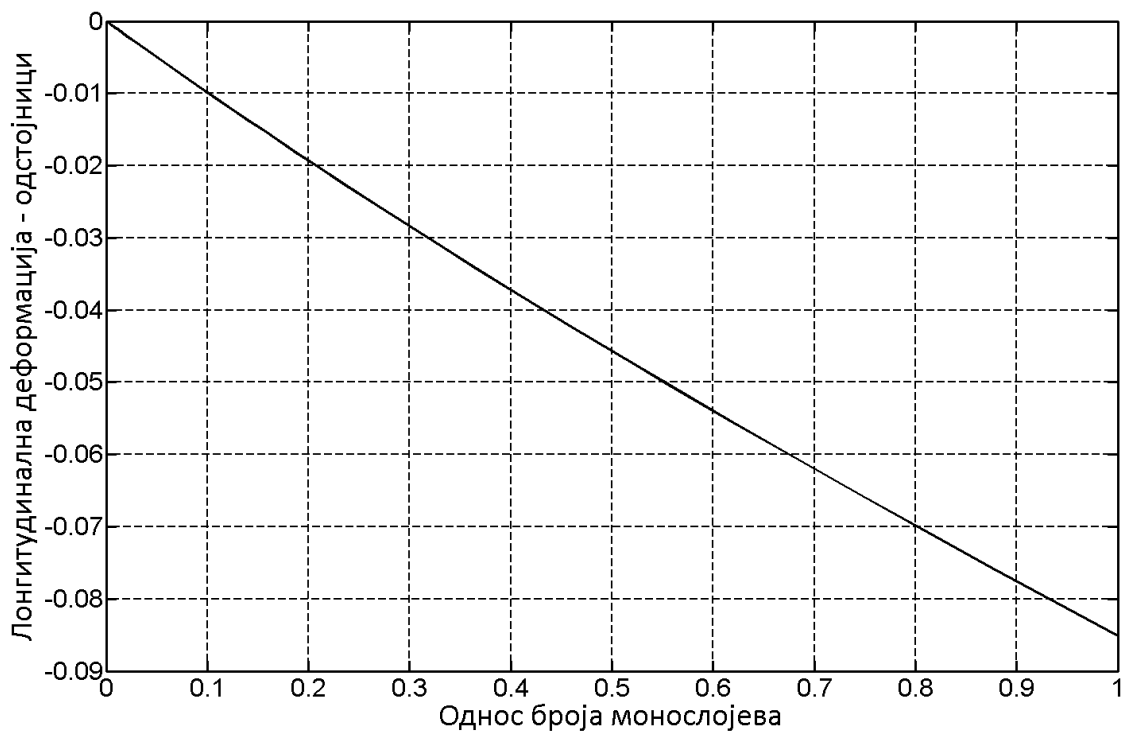
Слика 4.8 Трансверзална деформација унутар $In_{0,5}Ga_{0,5}As$ квантне тачке у $In_{0,5}Ga_{0,5}As$ КТ стеку.



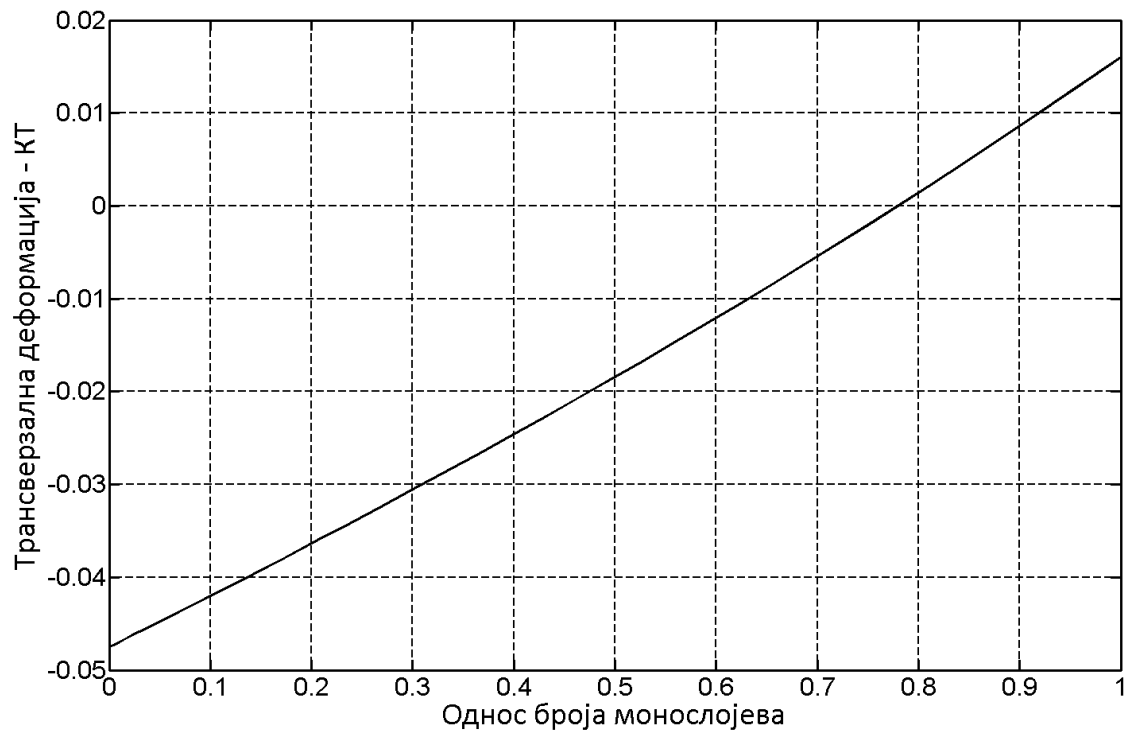
Слика 4.9 Лонгитудинална деформација унутар $In_{0,5}Ga_{0,5}As$ квантне тачке у $In_{0,5}Ga_{0,5}As$ КТ стеку.



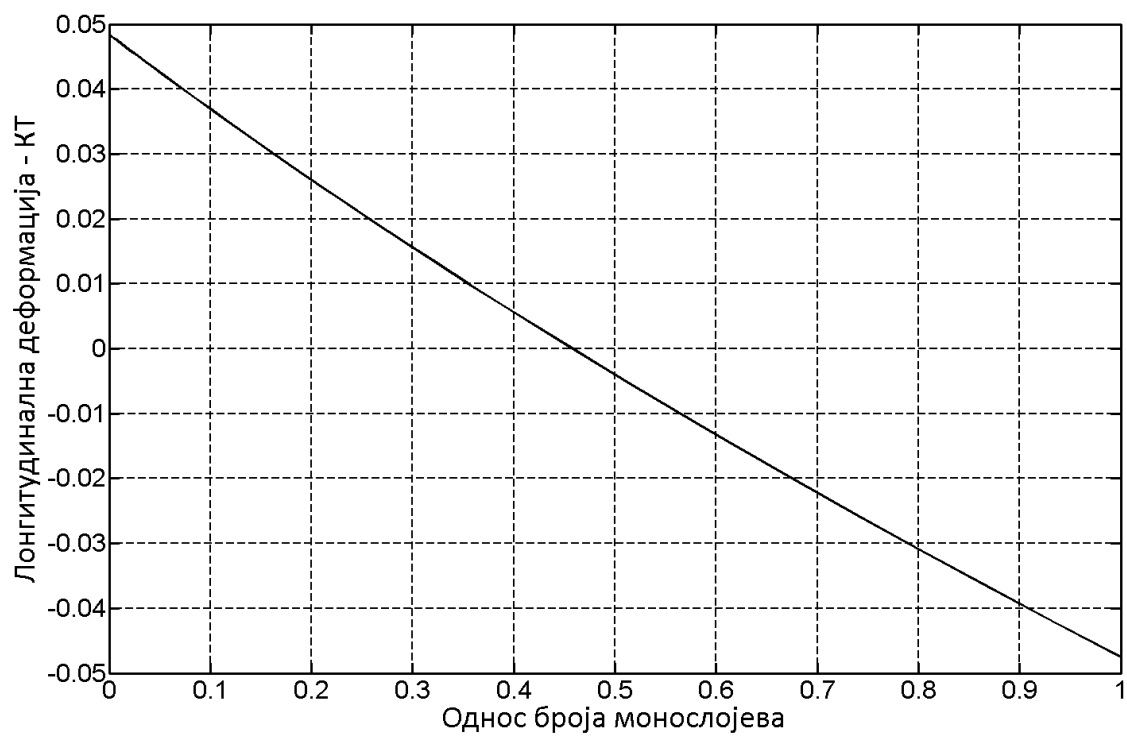
Слика 4.10 Трансверзална деформација унутар GaAs одстојника у $In_{0,75}Ga_{0,25}As$ КТ стеку.



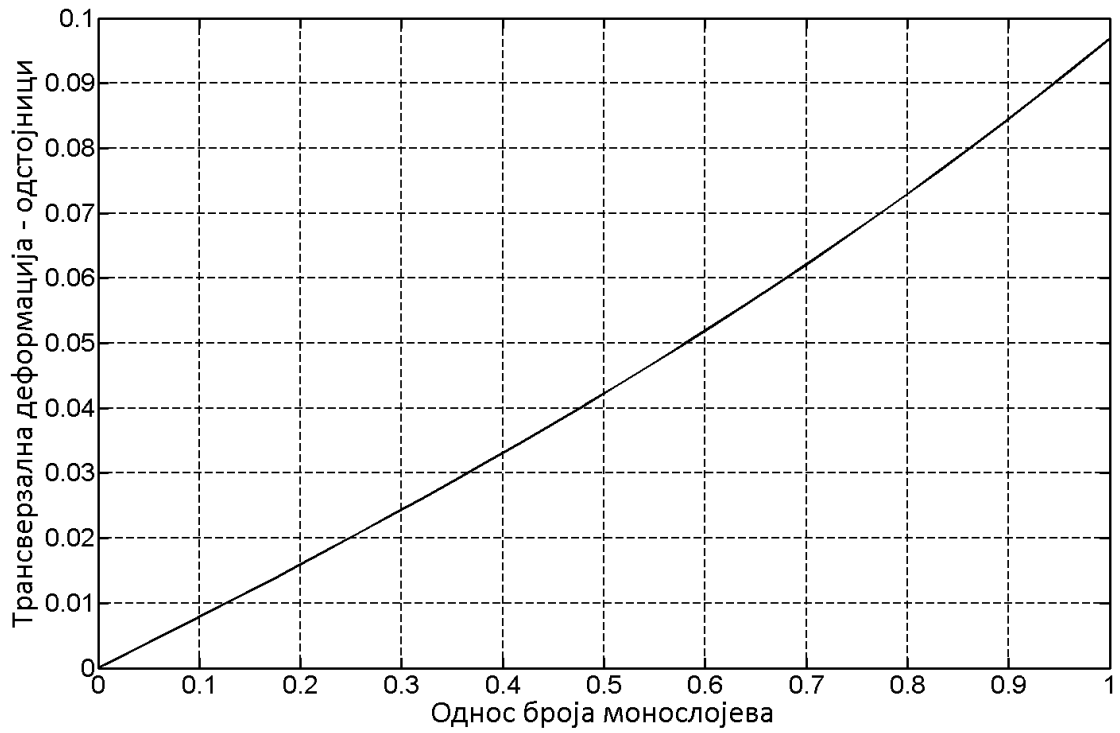
Слика 4.11 Лонгитудинална деформација унутар GaAs одстојника у $In_{0,75}Ga_{0,25}As$ КТ стеку.



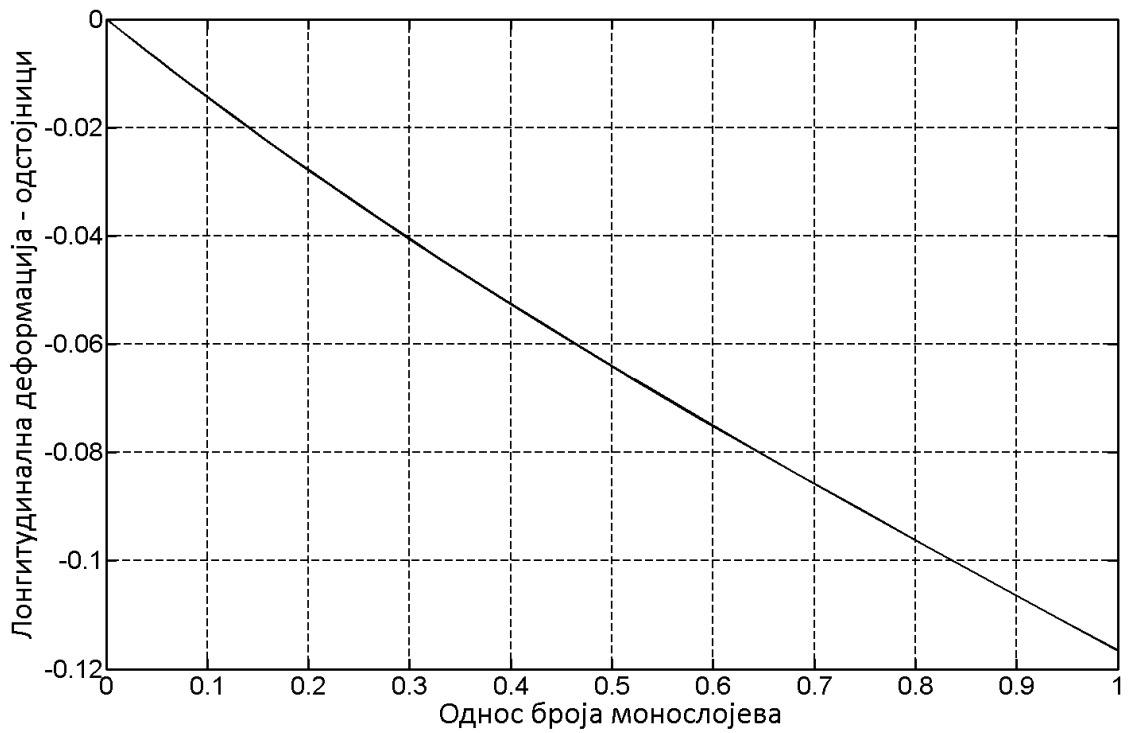
Слика 4.12 Трансверзална деформација унутар $In_{0,75}Ga_{0,25}As$ квантне тачке у $In_{0,75}Ga_{0,25}As$ КТ стеку.



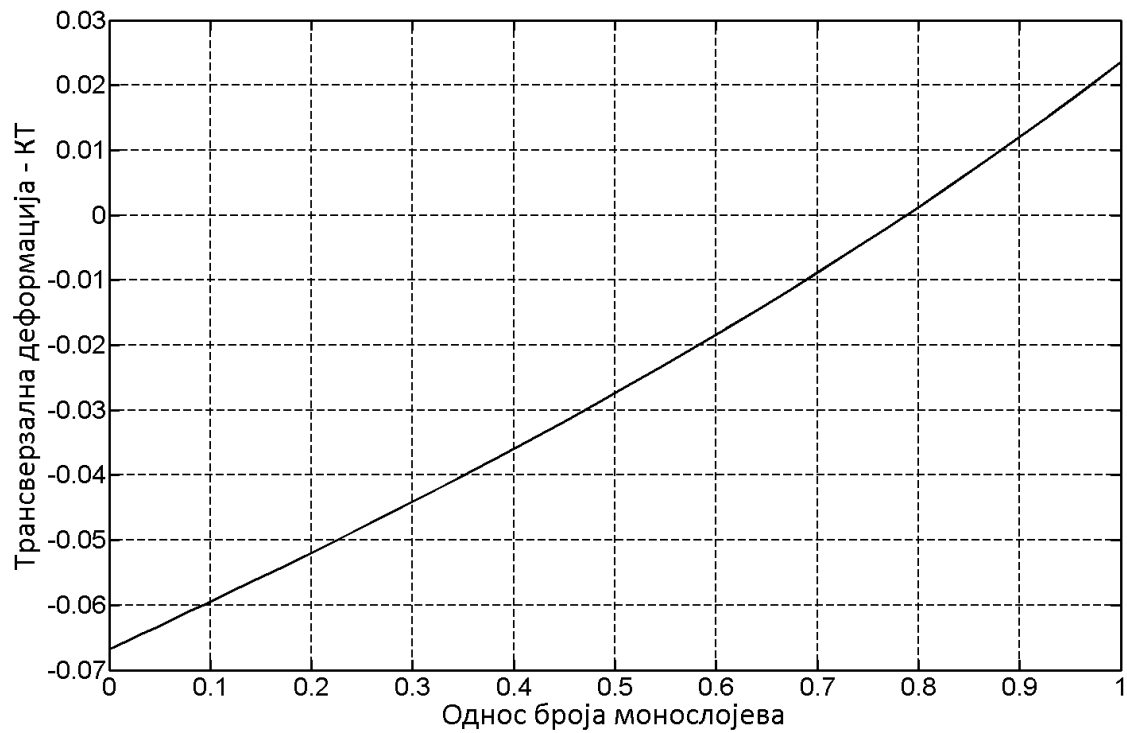
Слика 4.13 Лонгитудинална деформација унутар $In_{0,5}Ga_{0,5}As$ квантне тачке у $In_{0,75}Ga_{0,25}As$ КТ стеку.



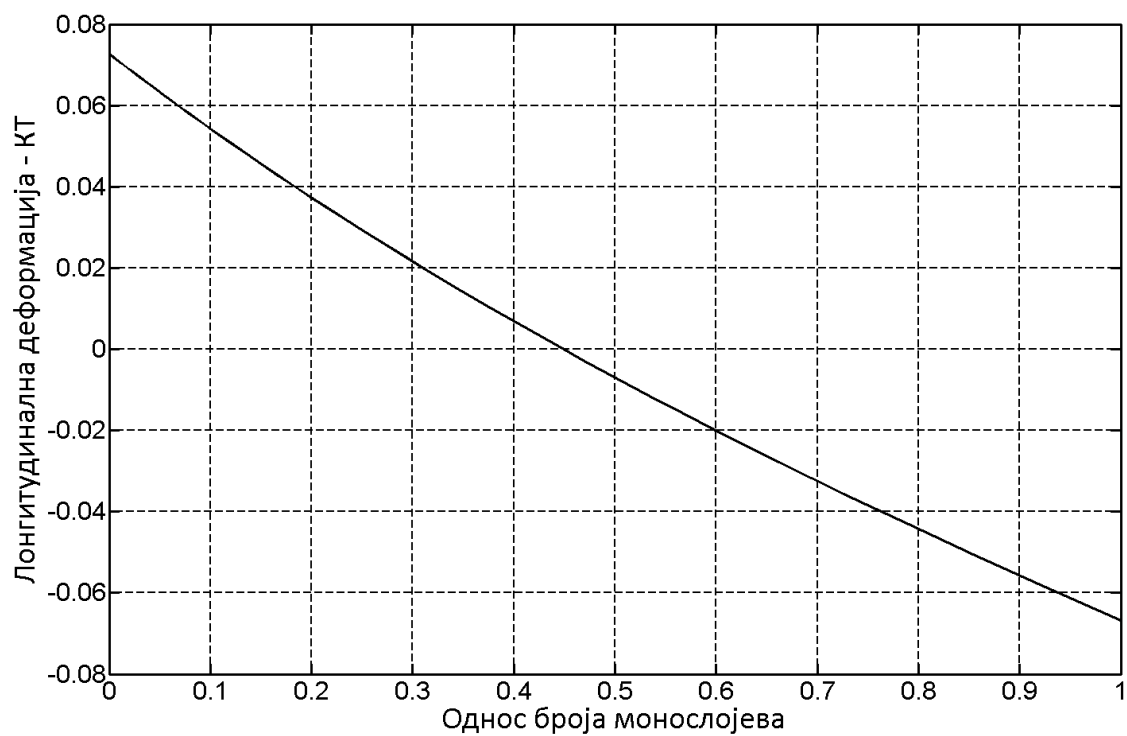
Слика 4.14 Трансверзална деформација унутар GaAs одстојника у InAs КТ стеку.



Слика 4.15 Лонгитудинална деформација унутар GaAs одстојника у InAs КТ стеку.



Слика 4.16 Трансверзална деформација унутар InAs квантне тачке у InAs КТ стеку.



Слика 4.17 Лонгитудинална деформација унутар InAs квантне тачке у InAs КТ стеку.

Одавно је познато како механичка деформација утиче на електронске и оптичке особине полупроводника [100]. У разматраном случају добијене вредности деформације унутар квантних тачака прилично варирају, што има велики утицај на њихове електронске и оптичке особине. Савременим полупроводничким технологијама је могућа израда наноструктура са тачно одређеним бројем монослојева у епитаксијалном слоју. Механичке деформације се мењају континуално са односом ξ броја монослојева унутар квантне тачке и периода КТ стека, чиме се отварају могућности за технолошки веома прецизни инжињеринг електронских и оптичких особина наноструктура овог типа.

На основу израчунатих вредности деформације унутар квантних тачака могуће је и израчунати померање зона тешких и лаких шупљина (видети (35) и (36) у глави 3):

$$\Delta E_{C-HH}(\mathbf{0}) = E_{C-HH}(\mathbf{0}) - E_g = a(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) - \frac{b}{2}(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz}) \quad (19)$$

$$\Delta E_{C-LH}(\mathbf{0}) = a(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) - \frac{1}{2}(Q_\varepsilon - \Delta + \sqrt{\Delta^2 + 2\Delta Q_\varepsilon + 9Q_\varepsilon^2}) \quad (20)$$

где је

$$Q_\varepsilon = -\frac{b}{2}(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz})$$

Ефективни енергетски процеп наноструктуре се мења за износ (видети једначину (7) у глави 3):

$$\Delta E_g = \min(\Delta E_{C-HH}(\mathbf{0}), \Delta E_{C-LH}(\mathbf{0}))$$

У табели 4.2 задате су вредности параметара GaAs и InAs потребни за израчунавања (19) и (20). Вредности енергетских процела GaAs и InAs преузети су из [101], док су вредности осталих параметара преузети из [102]. Параметри за $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ израчунати су по формулама (12) и (13).

Табела 4.2 Параметри GaAs, InAs и $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ за израчунавање померања граничних тачака зона:

	E_g (eV)	Δ (eV)	a (eV)	b (eV)
GaAs	1,424	0,34	-8,33	-1,6
InAs	0,354	0,38	-6,08	-1,8
$\text{In}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{As}$	1,2145	0,3481	-7,8723	-1,6407
$\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$	0,9772	0,3574	-7,3540	-1,6868
$\text{In}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{As}$	0,7063	0,3679	-6,7622	-1,7394

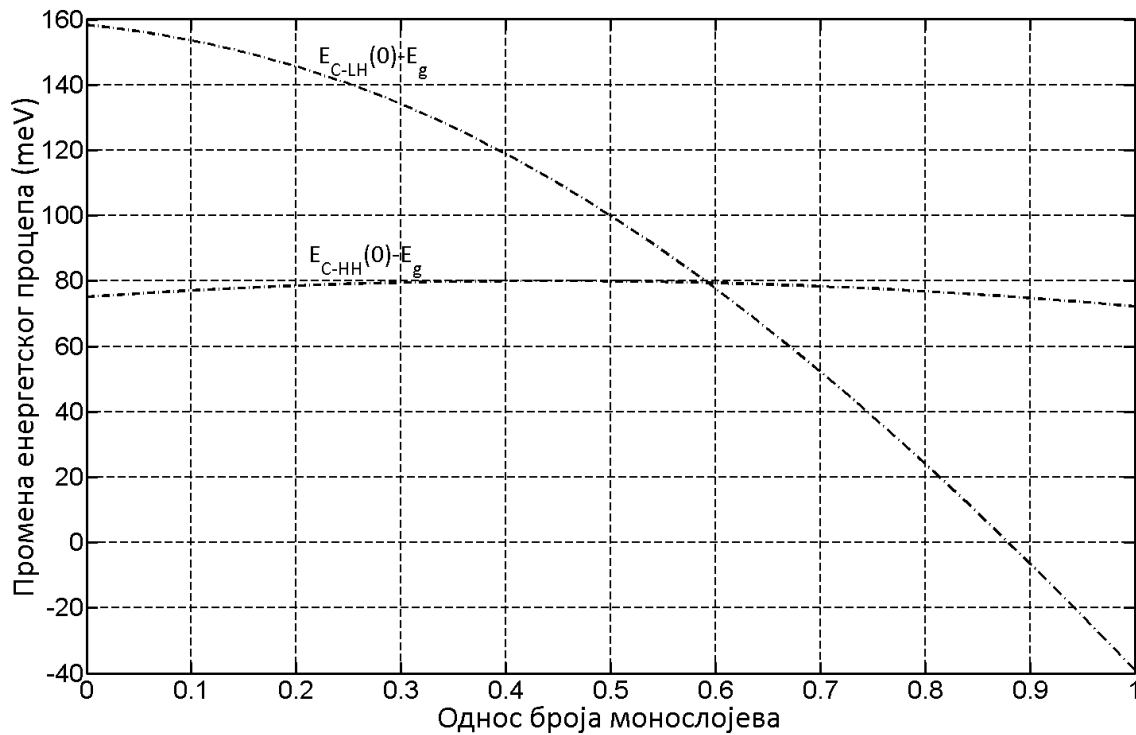
На сликама 4.18, 4.19, 4.20 и 4.21 приказана је зависност су величина $\Delta E_{C-HH}(\mathbf{0})$ и $\Delta E_{C-LH}(\mathbf{0})$ од односа броја монослојева ξ , као и одговарајуће промене ефективног енергетског процепа наноструктуре.

Са слика 4.18-4.21 се може приметити да се криве $\Delta E_{C-HH}(\mathbf{0})$ и $\Delta E_{C-LH}(\mathbf{0})$ увек секу у тачки $\xi = 0,592$, независно од моларног удела x у легури $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. За случај квантних тачака од InAs, криве имају још једну пресечну тачку и то и близу почетка у тачки $\xi = 0,0492$.

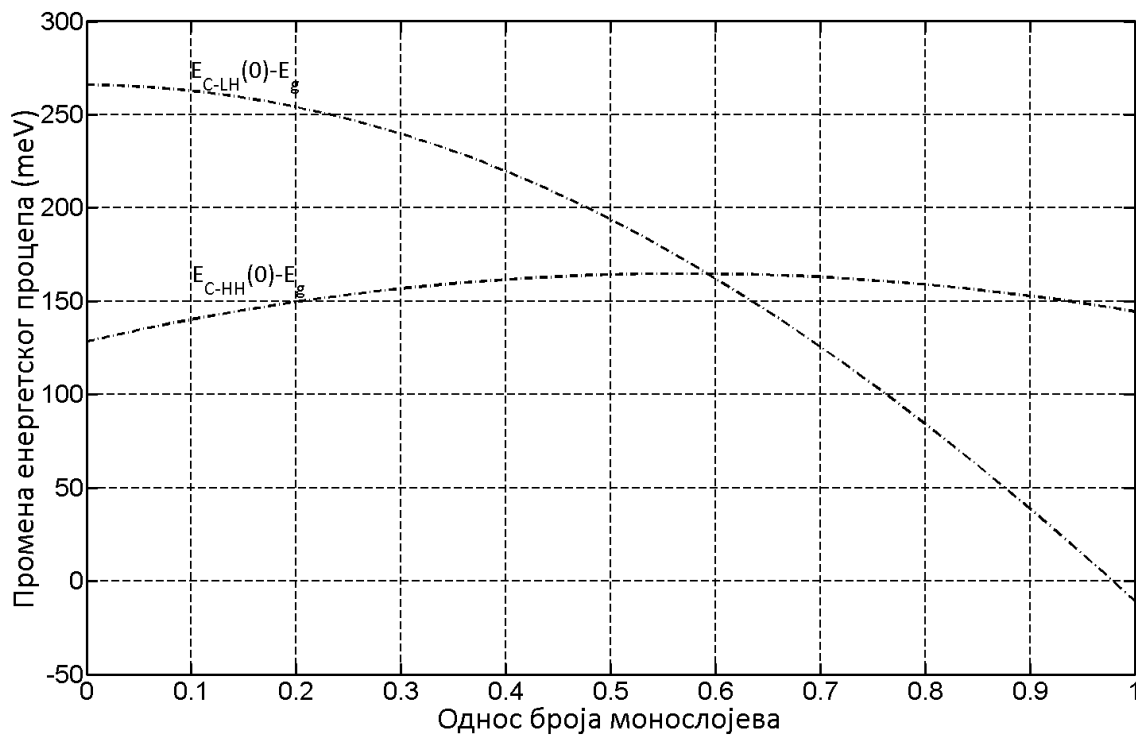
Са слика 4.18-4.21 се може уочити да је промена растојања дна проводне зоне од врха зоне тешких шупљина мала, док се растојање од врха зоне лаких шупљина мења са много већим нагибом, па се ту отварају могућности за контролу енергетског процепа са односом ξ . Промену енергетског процепа са променом односа ξ диктира растојања дна проводне зоне од врха зона лаких шупљина, почевши од вредности односа $\xi = 0,592$, тј у интервалу $0,592 \leq \xi \leq 1$, што је управо интервал од интереса за потенцијалне примене. Параметар ξ (однос броја монослојева унутар квантне тачке и броја монослојева у једном периоду стека) са данашњим степеном развоја технолошки је могуће лако контролисати, а преко њега и промену ефективног енергетског процепа наноструктуре, чиме се потенцијално отвара могућност за читав низ примена, које зависе од величине енергетског процепа, као фундаментални параметар у полупроводничким технологијама.

За промене односа ξ на интервалу $0,592 \leq \xi \leq 1$, промена ефективног енергетског процепа се мења у границама:

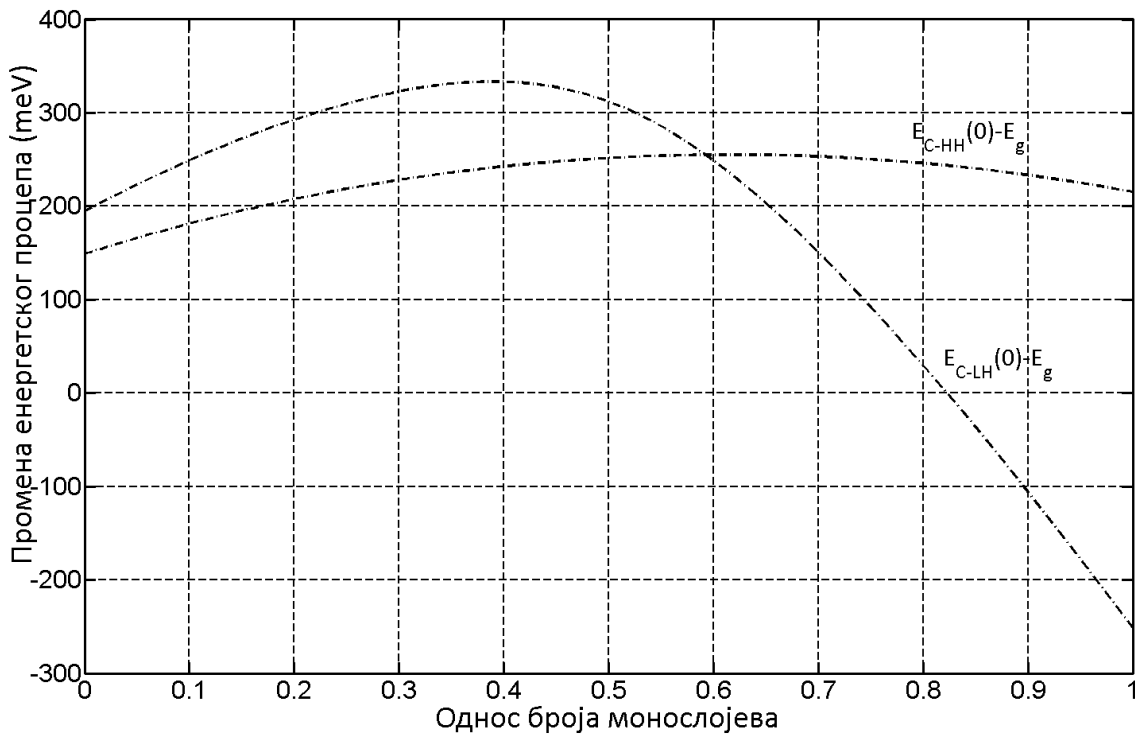
- за $x = 0,25$ од 79,4 meV до -39 meV;
- за $x = 0,50$ од 164,7 meV до -10,8 meV;



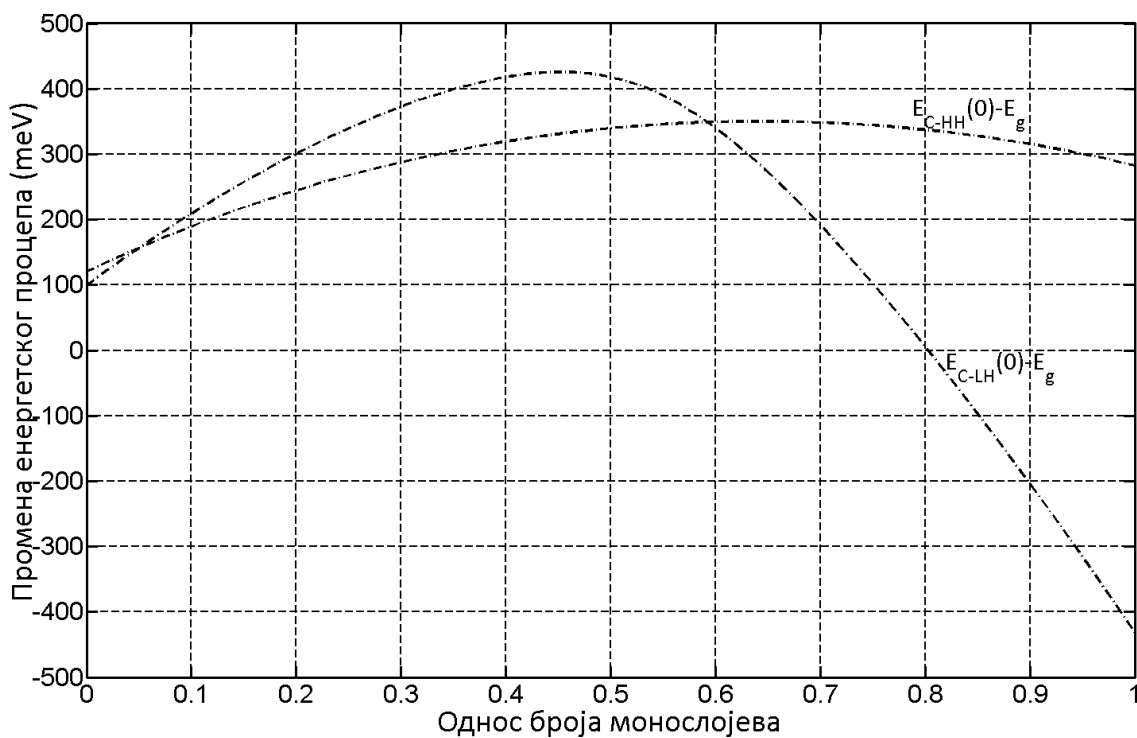
Слика 4.18 Промена растојања дна проводне зоне од врхова зона лаких шупљина (LH), и тешких шупљина (HH) за $\text{In}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{As}$ КТ.



Слика 4.19 Промена растојања дна проводне зоне од врхова зона лаких шупљина (LH), и тешких шупљина (HH) за $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$ КТ.



Слика 4.20 Промена растојања дна проводне зоне од врхова зона лаких шупљина (LH), и тешких шупљина (HH) за $\text{In}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{As}$ КТ.



Слика 4.21 Промена растојања дна проводне зоне од врхова зона лаких шупљина (LH), и тешких шупљина (HH) за InAs КТ.

- за $x = 0,75$ од 255,1 meV до -251,6;

- за $x = 1,00$ од 348,8 meV до -432,2 meV;

Материјал који би се састојао од стекова $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ квантних тачака унутар GaAs супстрата, са различитим односима ξ броја монослојева унутар квантне тачке и периода КТ стека, могао би се користити за израду активног слоја широкопојасног ласера у оптичким телекомуникацијама, где се користе материјали енергетског процепца 0,7410 eV ÷ 0,9851 eV, који одговарају таласним дужинама опсега 1260 nm ÷ 1675 nm. Квантне тачке у стековима са различитим односом ξ , који би се налазили унутар активног слоја ласера, представљале би групе у којима ефективни енергетски процеп варира, покривајући читав континуални интервал таласних дужина, па би се то могло користити и за генерисање оптичког сигнала модулисаног по таласним дужинама. На пријемној страни био би фотодетектор са активним слојем од истог материјала, чиме би била остварена могућност пријема широкопојасног сигнала.

ЗАКЉУЧАК

У овој докторској дисертацији изведени су апроксимативни аналитички изрази за деформацију унутар наноструктура облика вертикалног стека квантних тачака - КТ стека. Стек се налазио у супстрату од полупроводника 1, а састојао се од од идентичних цилиндричних квантних тачака од полупроводника 2, чији хоризонтални попречни пресек може имати било какав геометријски облик. Квантне тачке су биле танке, дебљине много мање од њихових трансверзалних димензија. Унутар стека су међусобно биле одвојене супстратским одстојницима једнаких дебљина, тако да је просторна структура КТ стека била периодична у вертикалном правцу. Полазне претпоставке су биле и да су оба полупроводника исте кубичне дијамантске или сфалеритне кристалне структуре, да се епитаксијални раст одвијао у (001) кристалном правцу, и да је био кохерентан, тако да је наноструктура била без дефекта.

Аналитички изрази за деформацију изведени су из услова минимума еластичне енергије унутар једног периода стека, уз одговарајуће граничне услове између квантних тачака и супстрата. Гранични услови су били постављени у трансверзалној граничној равни између квантне тачке и супстратског одстојника, као и на омотачу стека.

Изведени изрази примењени су на четири конкретне наноструктуре. У свим случајевима супстрат је био GaAs, док су квантне тачке у првој наноструктури биле од InAs, а у остале три од легуре $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, за моларни удео x који је узимао вредности 0,25; 0,5 и 0,75. Све деформације су биле израчунате и

графички представљене у зависности од односа ξ - броја монослојева унутар квантне тачке и броја монослојева у једном периоду стека. У сва четири посматрана случаја добијени резултати су показали да обе компоненте деформације унутар квантних тачака, и трансверзална и лонгитудинална, мењају знак са променом ξ . За тађе квантне тачке, односно дебље одстојнике, доминира биаксијални механички напон у трансверзалној равни попречног пресека стека, услед чега долази до сабијања квантне тачке у трансверзалној равни, и растезања у аксијалном правцу. За дебље квантне тачке односно тађе одстојнике, доминира униаксијални механички напон у аксијалном правцу, услед чега долази до растезања квантне тачке у трансверзалној равни, и сабијања у аксијалном правцу.

Што се конкретних бројних вредности тиче, када се ξ мења у границама $0 \leq \xi \leq 1$, резултати су били следећи:

- Код наноструктуре са $\text{In}_{0,25}\text{Ga}_{0,75}\text{As}$ квантним тачкама, трансверзална деформација је расла у интервалу од од -1,44% до 0,46%, док је лонгитудинална деформација опадала од 1,34% до -1,44%.
- Код наноструктуре са $\text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}$ квантним тачкама, трансверзална деформација је расла у интервалу од -3,01% до 0,98%, док је лонгитудинална деформација опадала од 2,92% до -3,01%.
- Код наноструктуре са $\text{In}_{0,75}\text{Ga}_{0,25}\text{As}$ квантним тачкама, трансверзална деформација је расла у интервалу од -4,75% до 1,60%, док је лонгитудинална деформација опадала од 4,84% до -4,75%.
- Код наноструктуре са InAs квантним тачкама, трансверзална деформација је расла у интервалу од -6,68% до 2,35%, док је лонгитудинална деформација опадала од 7,27% до -6,68%;

Од електронских својстава структуре испитане су и графички представљене промене растојања дна проводне зоне од врха зона лаких и тешких шупљина у случају све четири испитане наноструктуре. Мања од тих двеју промена одређује и промену ефективног енергетског процепа. Промена растојања дна проводне зоне од врха зоне тешких шупљина се благо мења са односом ξ , док се растојање од врха зоне лаких шупљина мења са много већим нагибом, па се ту отварају могућности за контролу енергетског процепа са односом ξ . Промену енергетског процепа са променом односа ξ диктира растојања дна проводне зоне

од врха зона лаких шупљина, почевши од вредности односа $\xi = 0,592$, тј у интервалу $0,592 \leq \xi \leq 1$, и то је управо интервал од интереса, у поменутом смислу, и то за све четири испитане наноструктуре.

Зависност ефективног енергетског процепа од деформације интензивно расте са повећањем моларног удела x InAs, јер се тада повећава разлика у параметру кристалне решетке квантних тачака и супстрата, што доводи до директног пораста уграђене деформације. У поменутом интервалу промене односа ξ , долази до драстичног повећања варијације енергетског процепа на поменутом интервалу $0,592 \leq \xi \leq 1$, и то:

- за $x = 0,25$ од 79,4 meV до -39 meV;

- за $x = 0,50$ од 164,7 meV до -10,8 meV;

- за $x = 0,75$ од 255,1 meV до -251,6;

- за $x = 1,00$ од 348,8 meV до -432,2 meV;

па се и на свим овим примерима, види како велики утицај има деформација полупроводника на његову електронску структуру, чиме свакако доприноси и мали енергетски процеп InAs, што га и иначе чини веома пожељним и широко коришћеним материјалом за израду полупроводничких легура које се користе у различитим применама.

С обзиром на све наведено допринос докторске дисертације се састоји у:

(1) Извођењу апроксимативних аналитичких израза за деформацију унутар наноструктура облика вертикалног стека квантних тачака - КТ стека, у случају равних тачака, мале дебљине у односу на полупречник стека, а за најчешће коришћени кристални правац епитаксијалног раста (001), поготову што до сада није објављен ниједан научни рад у коме су изведени аналитички изрази за израчунавање механичких деформација унутар КТ стекова;

(2) Проналажењу параметра који је технолошки могуће лако контролисати (а то је управо ξ - однос броја монослојева унутар квантне тачке и броја монослојева у једном периоду стека), чијим би мењањем у неком интервалу била могућа промена ефективног енергетског процепа наноструктуре, што би омогућило читав

низ примена које диктира величина енергетског процепа као фундаментални параметар у полупроводничким технологијама.

(3) Перспективи коришћења нових материјала на бази оваквих КТ стекова са променљивим односом ξ броја монослојева унутар квантне тачке и периода КТ стека. Материјал који би се састојао од стекова квантних тачака са различитим односима ξ , могао би се користити за израду активног слоја широкопојасног ласера у оптичким телекомуникацијама. Квантне тачке у стековима са различитим односом ξ , који би се налазили унутар активног слоја ласера, представљале би групе у којима ефективни енергетски процеп варира, покривајући читав континуални интервал таласних дужина, па би се то могло користити и за генерисање оптичког сигнала модулисаног по таласним дужинама. На пријемној страни би био фотодетектор са активним слојем од истог материјала, чиме би била остварена могућност пријема широкопојасног сигнала.

Литература:

- [1] Davies, H., J., *"The Physics of Low-dimensional Semiconductors: An Introduction"*, Cambridge University Press, 1997.
- [2] Harrison, P., *"Quantum Wells, Wires and Dots: Theoretical and Computational Physics of Semiconductor Nanostructures"*, John Wiley & Sons, 2000.
- [3] H Haug, SW Koch, *"Quantum theory of the optical and electronic properties of semiconductors"*, World Scientific Publishing Co., 2004.
- [4] D. I. Lubyshev, P. P. González Borrero, E. Marega Jr., E. Petitprez, N. La Scala Jr. and P. Basmaji, *"Exciton localization and temperature stability in self-organized InAs quantum dots"*, Appl. Phys. Lett. 68, 1996, pp. 205-207.
- [5] Matthew Pelton, Charles Santori, Jelena Vuckovic, Bingyang Zhang, Glenn S. Solomon, Jocelyn Plant, and Yoshihisa Yamamoto, *"Efficient Source of Single Photons: A Single Quantum Dot in a Micropost Microcavity"*, Phys. Rev. Lett. 89, 2002, pp. 233602(1-4).
- [6] J.R. Lakowicz, *"Principles of Fluorescence Spectroscopy"*, Springer US, 2006.
- [7] Poznyak, S.K., Osipovich, N.P., Shavel, A., Talapin, D.V., Gao, M.Y., Eychmuller, A., Gaponik, N., *"Size-dependent electrochemical behavior of thiol-capped CdTe nanocrystals in aqueous solution"*, J. Phys. Chem. B 109, 2005, pp. 1094–1100.
- [8] Qu, S.C.; Zhou, W.H.; Liu, F.Q.; Chen, N.F.; Wang, Z.G.; Pan, H.Y.; Yu, D.P., *"Photoluminescence properties of Eu³⁺-doped ZnS nanocrystals prepared in a water/methanol solution"*, Appl. Phys. Lett., 80, 2002, pp. 3605–3607.
- [9] Muller, C.D.; Falcou, A.; Reckefuss, N.; Rojahn, M.; Wiederhirn, V.; Rudati, P.;

- Frohne, H., Nuyken, O., Becker, H.; Meerholz, K., *"Multi-colour organic light-emitting displays by solution processing"*, Nature, 421, 2003, pp. 829–833.
- [10] Choudhury, K.R.; Sahoo, Y.; Prasad, P.N., *"Hybrid quantum-dot-polymer nanocomposites for infrared photorefractivity at an optical communication wavelength"*, Adv. Mater. 17, 2005, pp. 2877–2881.
- [11] Hirate, T., Sasaki, S., Li, W.C.; Miyashita, H.; Kimpara, T.; Satoh, T., *"Effects of laser-ablated impurity on aligned ZnO nanorods grown by chemical vapor deposition"*, Thin Solid Films, 487, 2005, pp. 35–39.
- [12] Y. Arakawa and H. Sakaki, *"Multidimensional Quantum Well Lasers and Temperature Dependence of Its Threshold Current "*, Appl. Phys. Lett., vol. 40, 1982, pp. 939-941.
- [13] www.fujitsu.com
- [14] www.u-tokyo.ac.jp
- [15] www.cleoconference.org
- [16] www.qdlaser.com
- [17] Dong Pan, Elias Towe and Steve Kennerly, *"Normal-incidence intersubband (In, Ga)As/GaAs quantum dot infrared photodetectors"*, Appl. Phys. Lett. 73, 1998, pp. 1937-1939.
- [18] Gerasimos Konstantatos, Ian Howard, Armin Fischer, Sjoerd Hoogland, Jason Clifford, Ethan Klem, Larissa Levina and Edward H. Sargent, *"Ultrasensitive solution-cast quantum dot photodetectors"*, Nature 442, 2006, pp. 180-183.
- [19] Phillips, J., Pallab Bhattacharya, S. W. Kennerly, D. W. Beekman, and Mitra

- Dutta, "*Self-assembled InAs-GaAs quantum-dot intersubband detectors*" *Quantum Electronics*, IEEE Journal of 35, 1999, pp. 936-943.
- [20] H.S. Chen, C.K. Hsu, H.Y. Hong, "*InGaN-CdSe-ZnSe quantum dots white LEDs*", *IEEE Photonics Technology Letters*, Vol. 18, 2006, pp. 193-195.
- [21] Dong Ick Son, Byoung Wook Kwon, Dong Hee Park, Won-Seon Seo, Yeonjin Yi, Basavaraj Angadi, Chang-Lyoul Lee and Won Kook Choi, "*Emissive ZnO-graphene quantum dots for white-light-emitting diodes*", *Nature Nanotechnology* 7, 2012, pp. 465-471.
- [22] Devendra Kumar Sen, Awesh Kumar Yadav, Ajay Shukla, "*An incredible diagnostic tool Quantum Dots: A review*", *Asian Journal of Biomaterial Research*, 1(2), 2015, pp. 46-50.
- [23] A. J. Nozik, "*Quantum dot solar cells*", *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, Vol. 14, 2002, pp. 115-120.
- [24] Gi-Hwan Kim, F. Pelayo García de Arquer, Yung Jin Yoon, Xinzheng Lan, Mengxia Liu, Oleksandr Voznyy, Zhenyu Yang, Fengjia Fan, Alexander H. Ip, Pongsakorn Kanjanaboos, Sjoerd Hoogland, Jin Young Kim, and Edward H. Sargent, "*High-Efficiency Colloidal Quantum Dot Photovoltaics via Robust Self-Assembled Monolayers*", *Nano letters* 15, 2015, pp. 7691-7696.
- [25] Love, J. C., Estroff, L. A., Kriebel, J. K., Nuzzo, R. G., & Whitesides, G. M., "*Self-assembled monolayers of thiolates on metals as a form of nanotechnology*" , *Chemical reviews*, 105, 2005, pp. 1103-1170.
- [26] T. C. Harman, P. J. Taylor, M. P. Walsh, B. E. LaForge, "Quantum Dot Superlattice Thermoelectric Materials and Devices", *Science*, Vol. 297, 2002, pp. 2229-2232.

[27] www.idtechex.com

[28] www.coloriq.com

[29] www.nanosysinc.com

[30] www.rohsguide.com

[31] www.nanocotechnologies.com

[32] Timothy Jamieson, Raheleh Bakhshi, Daniela Petrova, Rachael Pocock, Mo Imani, Alexander M. Seifalian, "*Biological applications of quantum dots*", *Biomaterials*, Vol. 28, 2007, pp. 4717–4732.

[33] Robert A. Freitas Jr., "*Nanomedicine, Volume I: Basic Capabilities*", Landes Bioscience, Georgetown, TX, U.S., 1999.

[34] Rao Shasha, Tan Angel, Thomas Nicky, Prestidge Clive, "*Perspective and potential of oral lipid-based delivery to optimize pharmacological therapies against cardiovascular diseases*", *Journal of Controlled Release*, Vol. 193, 2014, pp. 174–187.

[35] Puri A, Loomis K, Smith B, Lee JH, Yavlovich A, Heldman E, Blumenthal R., "*Lipid-based nanoparticles as pharmaceutical drug carriers: from concepts to clinic*", *Critical Reviews™ in Therapeutic Drug Carrier Systems*, Vol. 26, 2009, pp. 523-580.

[36] Wafa T. Al-Jamal, Kostas Kostarelos, "*Liposome–nanoparticle hybrids for multimodal diagnostic and therapeutic applications*", *Nanomedicine*, Vol. 2, 2007, pp. 89-98.

[37] www.fda.gov

- [38] Herrmann I.K., Schlegel A., Graf R., Schumacher C.M., Senn N., Hasler M., Gschwind S., Hirt A.M., Günther D., Clavien P.A. and Stark W.J., "*Nanomagnet-based removal of lead and digoxin from living rats*" *Nanoscale*, 5, 2013, pp 8718–8723.
- [39] Berry C. C., Curtis A. S. G., "*Functionalisation of magnetic nanoparticles for applications in biomedicine*", *Journal of Physics D: Applied Physics*, Vol. 36, 2003, pp. 198-206.
- [40] Inge K. Herrmann, Martin Urner, Samuel Graf, Christoph M. Schumacher, Birgit Roth-Z'graggen, Melanie Hasler, Wendelin J. Stark and Beatrice Beck-Schimmer, "*Endotoxin Removal by Magnetic Separation-Based Blood Purification*", *Advanced Healthcare Materials*, Vol. 2, 2013, pp. 829–835.
- [41] Jung-Jae Lee, Kyung Jae Jeong, Michinao Hashimoto, Albert H. Kwon, Alina Rwei, Sahadev A. Shankarappa, Jonathan H. Tsui, and Daniel S. Kohane, "*Synthetic Ligand-Coated Magnetic Nanoparticles for Microfluidic Bacterial Separation from Blood*", *Nano Letters*, Vol. 14, 2014 pp. 1–5.
- [42] Yung C. W., Fiering J., Mueller A. J., Ingber D. E., "*Micromagnetic–microfluidic blood cleansing device*", *Lab on a Chip*, Issue 9, 2009, pp. 1171–1177.
- [43] Rob Burgess, "*Understanding Nanomedicine: An Introductory Textbook*", Pan Stanford, 2012.
- [44] www.proteinatlas.org
- [45] Nye, J. F., "*Physical Properties of Crystals: Their Representation by Tensors and Matrices*", Oxford Press, London 1957.
- [46] Saada, A. S., "*Elasticity Theory and Applications*", Pergamon Press, New York 1974.

- [47] Musgrave, M. J. P., Popple, J. A., "*A General Valence Force Field for Diamond*", Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences, Vol. 268, 1962, pp. 474-484.
- [48] Keating, P. N., "*Effect of Invariance Requirements on the Elastic Strain Energy of Crystals with Application to the Diamond Structure*", Phys. Rev. 145, 1966, pp. 637-645.
- [49] Martin, R. M., "*Elastic Properties of ZnS Structure Semiconductors*", Phys. Rev. B 1, pp. 4005-4011 (1970).
- [50] Kane, E. O., "*Phonon spectra of diamond and zinc-blende semiconductors*", Phys. Rev. B, Vol. 31, 1985, pp. 7865-7876.
- [51] Scheffler, M., Vigneron, J. P., Bachelet, G., B., "*Total-energy gradients and lattice distortions at point defects in semiconductors*", Phys. Rev. B 31, 1985, pp. 6541-6551.
- [52] Bernard, E., Zunger, A., "*Is there an elastic anomaly for a (001) monolayer of InAs embedded in GaAs?*" Applied Physics Letters, Vol 65, 1994, pp. 165-167.
- [53] M. Tadic, F. M. Peeters, K. L. Janssens, M. Korkusinski and P. Hawrylak, "*Strain and band edges in single and coupled cylindrical InAs/GaAs and InP/InGaP self-assembled quantum dots*", Journal Of Applied Physics, Vol. 92, 2002, pp. 5819-5829.
- [54] Xie, Q., Madhukar, A., Chen, P., & Kobayashi, N. P., "*Vertically self-organized InAs quantum box islands on GaAs (100)*", Physical review letters, 75(13), 1995, pp. 2542-2545.
- [55] Pierre M. Petroff, "*Epitaxial Growth and Electronic Structure of Self-Assembled Quantum Dots*", Series: Topics in Applied Physics, Vol. 90, 2003, pp. 1-24.

- [56] Frank, F. C., and Jan H. van der Merwe. "*One-dimensional dislocations. I. Static theory*" Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences, 1949, pp. 205-216.
- [57] Volmer, M., and A. Weber, "*Keimbildung in übersättigten Gebilden*" Z. phys. Chem 119.3/4, 1926, pp. 277-301.
- [58] Ivan N. Stranski and Lubomir Krastanow, "*Zur Theorie der orientierten Ausscheidung von Ionenkristallen aufeinander*", Abhandlungen der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Klasse Iib. Akademie der Wissenschaften Wien, 146, 1938, pp. 797-810.
- [59] Liu, N., Lyeo, H. K., Shih, C. K., Oshima, M., Mano, T., & Koguchi, N., "*Cross-sectional scanning tunneling microscopy study of InGaAs quantum dots on GaAs (001) grown by heterogeneous droplet epitaxy*", Applied physics letters, 80, 2002, pp. 4345-4347.
- [60] Bruls, D. M., J. W. A. M. Vugs, P. M. Koenraad, H. W. M. Salemink, J. H. Wolter, M. Hopkinson, M. S. Skolnick, Fei Long, and S. P. A. Gill, "*Determination of the shape and indium distribution of low-growth-rate InAs quantum dots by cross-sectional scanning tunneling microscopy*" Applied physics letters 81, 2002, pp. 1708-1710.
- [61] Chao, Kuo-Jen, Chih-Kang Shih, D. W. Gotthold, and B. G. Streetman, "*Determination of 2D pair correlations and pair interaction energies of In atoms in molecular beam epitaxially grown InGaAs alloys*" Physical review letters 79, 1997, pp. 4822-4825.
- [62] Wasilewski, Z. R., Fafard, S., & McCaffrey, J. P., "*Size and shape engineering of vertically stacked self-assembled quantum dots*", Journal of crystal growth, Vol. 201, 1999, pp. 1131-1135.

- [63] G.L. Bir, G.E. Pikus, *"Symmetry and Strain-induced Effects in Semiconductors"*, Wiley, New York, 1974.
- [64] C. Mailhot and D. L. Smith, *"Electronic structure of [001]- and [111]-growth-axis semiconductor superlattices"*, Phys. Rev. B, Vol. 35, 1987, pp. 1242-1259.
- [65] M. Grundmann, O. Stier, and D. Bimberg, *"InAs/GaAs pyramidal quantum dots: Strain distribution, optical phonons, and electronic structure"*, Phys. Rev. B 52, 1995, pp. 11969-11981.
- [66] M. Tadic, F. M. Peeters, K. L. Janssens, M. Korkusinski and P. Hawrylak, *"Strain and band edges in single and coupled cylindrical InAs/GaAs and InP/InGaP self-assembled quantum dots"*, Journal of Applied Physics, Vol. 92, 2002, pp. 5819-5829.
- [67] D. Veljkovic, M. Tadic, and F. M. Peeters, *"Intersublevel Absorption in Stacked n-Type Doped Self-Assembled Quantum Dots"*, Materials Science Forum, Vol. 494, 2005, pp. 37-42.
- [68] M. Born, V. Fock, *"Beweis des Adiabatenatzes"*, Zeitschrift für Physik, Vol. 51, 1928, pp. 165-180.
- [69] Felix Bloch, *"Über die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern"*, Zeitschrift für Physik, Vol. 52, 1928, pp. 165-180.
- [70] N.W. Ashcroft, N.D. Mermin, *"Solid State Physics"*, Saunders, Philadelphia, 1976.
- [71] Dejan Raković, *"Fizičke osnove i karakteristike elektrotehničkih materijala"*, Elektrotehnički fakultet, Beograd, 1995.
- [72] David J. Griffiths *"Introduction to quantum mechanics"*, Prentice Hall, Upper Saddle River, New Jersey, 1995.

- [73] Lok C., Lew Yan Voon, Morten Willatzen, *"The k-p Method - Electronic Properties of Semiconductors"*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 2009.
- [74] Singh, J., *"Electronic and Optoelectronic Properties of Semiconductor Structures"*, Cambridge University Press, Cambridge, New York, 2003.
- [75] Madelung, O., *"Introduction to Solid State Theory"*, Springer, Berlin, 1978.
- [76] Wang, S., *"Fundamentals of Semiconductor theory and Device Physics"*, Prentice Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1989.
- [77] Ridley, B.K., *"Quantum Processes in Semiconductors"*, Oxford University Press, Oxford, 1982.
- [78] D. A. Varshalovich, A. N. Moskalev, and V. K. Khersonskii, *"Quantum theory of angular momentum"*, World Scientific Publishing, 1988.
- [79] J. M. Luttinger and W. Kohn, "Motion of Electrons and Holes in Perturbed Periodic Fields" *Phys. Rev.* 97, 1955, pp. 869-883.
- [80] P. Y. Yu, M. Cardona, *"Fundamentals of Semiconductors"*, Springer, Berlin Heidelberg New York, 2005.
- [81] Calvin Yi-Ping Chao and Shun Lien Chuang, *"Spin-orbit-coupling effects on the valence-band structure of strained semiconductor quantum wells"*, *Phys. Rev. B* Vol. 46, 1992, pp. 4110-4122.
- [82] S. L. Chuang, *"Physics of Optoelectronic Devices"*, John Wiley & Sons, 1995.
- [83] Pryor, C., *"Eight-band calculations of strained InAs/GaAs quantum dots compared with one-, four-, and six-band approximations"*, *Physical Review B*, Vol.57, 1998, pp. 7190-7195.

- [84] Aspnes D.E. and Cardona M., "*Strain dependence of effective masses in tetrahedral semiconductors*" Physical Review B, 17, 1978, pp. 726-740.
- [85] Cusack, M. A., P. R. Briddon, and M. al Jaros, "*Electronic structure of InAs/GaAs self-assembled quantum dots*", Physical Review B Vol.54, 1996, pp. 2300-2303.
- [86] Jiang Hongtao, and Jasprit Singh, "*Strain distribution and electronic spectra of InAs/GaAs self-assembled dots: An eight-band study.*", Physical Review B Vol.56, 1997, pp. 4696-4701.
- [87] Li, Y., Liu, J. L., Voskoboynikov, O., Lee, C. P., & Sze, S. M., "*Electron energy level calculations for cylindrical narrow gap semiconductor quantum dot*", Computer physics communications, Vol. 140, 2001, pp. 399-404.
- [88] Z.R. Wasilewski, , S. Fafard, J.P. McCaffrey, "*Size and shape engineering of vertically stacked self-assembled quantum dots*", Journal of Crystal Growth, Vol. 201-202, 1999, pp. 1131-1135.
- [89] N. N. Ledentsov, V. A. Shchukin, M. Grundmann, N. Kirstaedter, J. Böhrer, O. Schmidt, D. Bimberg, V. M. Ustinov, A. Yu. Egorov, A. E. Zhukov, P. S. Kop'ev, S. V. Zaitsev, N. Yu. Gordeev, Zh. I. Alferov, A. I. Borovkov, A. O. Kosogov, S. S. Ruvimov, P. Werner, U. Gösele, and J. Heydenreich, "*Direct formation of vertically coupled quantum dots in Stranski-Krastanow growth*", Phys. Rev. B, Vol. 54, 1996, pp. 8743-8750.
- [90] Yoshihiro Sugiyama, Yoshiaki Nakata, Kenichi Imamura, Shunichi Muto and Naoki Yokoyama, "*Stacked InAs Self-Assembled Quantum Dots on (001) GaAs Grown by Molecular Beam Epitaxy*", Japanese Journal of Applied Physics, Vol. 35, 1996, pp. 1320-1324.
- [91] T. Sugaya, Y. Kamikawa, S. Furue, T. Amano, M. Mori, S. Niki, "*Multi-stacked quantum dot solar cells fabricated by intermittent deposition of InGaAs*", Solar

Energy Materials and Solar Cells, Vol. 95, 2011, pp. 163-166.

- [92] F. Heinrichsdorff, M.-H. Mao, N. Kirstaedter, A. Krost, D. Bimberg, A. O. Kosogov and P. Werner, "*Room-temperature continuous-wave lasing from stacked InAs/GaAs quantum dots grown by metalorganic chemical vapor deposition*", Appl. Phys. Lett. Vol. 71, 1997, pp. 22-24.
- [93] P. Chen, Q. Gong, C. F. Cao, S. G. Li, Y. Wang, Q. B. Liu, L. Yue, Y. G. Zhang, S. L. Feng, C. H. Ma and H. L. Wang, "*High performance external cavity InAs/InP quantum dot lasers*", Appl. Phys. Lett. 98, 2011, p 121102.
- [94] Hyunho Shin, Woong Lee and Yo-Han Yoo, "*Effect of the stacking period on the strain field in InAs/GaAs quantum dots*", Nanotechnology, Volume 14, Number 7, 2003, pp. 742-747.
- [95] T. Saito, T. Nakaoka, T. Kakitsuka, c, Y. Yoshikuni, Y. Arakawaa, "*Strain distribution and electronic states in stacked InAs/GaAs quantum dots with dot spacing 0–6 nm*", Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures, Volume 26, 2005, pp. 217–221.
- [96] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, "*Theory of Elasticity*", Pergamon Press, Oxford, 1970.
- [97] S. Adachi, "*Properties of Semiconductor Alloys: Group-IV, III-V and II-VI Semiconductors*", John Wiley & Sons, New York, 2009.
- [98] Gérard Fournet "*Étude de la loi de Vegard*", J. Phys. Radium, Tome 14 (6), 1953, pp.374-380.
- [99] Elena Villaggi, Claudio Bocchi, Nicola Armani, Giovanni Carta, Gilberto Rossetto and Claudio Ferrari, "*Deviation from Vegard Law in Lattice-Matched InGaAs/InP Epitaxial Structures*", Japanese Journal of Applied Physics, Volume 41, Part 1, Number 2B, 2002. pp. 1000-1003.

[100] G.L. Bir, G.E. Pikus, *"Symmetry and Strain-induced Effects in Semiconductors"*, Wiley, New York, 1974.

[101] www.ioffe.ru

[102] F. Cerdeira, C. J. Buchenauer, Fred H. Pollak, and Manuel Cardona, "Stress-Induced Shifts of First-Order Raman Frequencies of Diamond- and Zinc-Blende-Type Semiconductors" *Phys. Rev. B* Vol. 5, 1972, pp. 580-593.

БИОГРАФИЈА

Дејан Вељковић је рођен 26.10.1966. године у Урошевцу. Основну и средњу школу завршио је у Горњем Милановцу. У средњој школи је на републичким такмичењима из математике и физике више пута освајао једно од прва три места. У периоду 1985-1986 служио је војни рок. На Електротехнички факултет у Београду уписао се 1986 године. Дипломирао је на Одсеку за електронику истог факултета 04.03.1992. године са просечном оценом 9,20.

По завршетку факултета радио је кратко време у Дирекцији за развој и инвестиције ЈП ПТТ САОБРАЋАЈА "СРБИЈА". Од 1993 године био је запослен на Електротехничком факултету у Београду, где је држао наставу из Технологије Електротехничких материјала, Електротехничких материјала, Физике Материјала, Биофизике и Биоматеријала до 2008 године. На истом факултету је магистрирао 1997 године.

Од 2008 запослен је на месту предавача на Високој школи техничких струковних студија у Чачку, где ради и данас, као предавач из више предмета на Електротехничком одсеку школе.

Учествовао је на више научно-истраживачких пројеката Министарства за науку Републике Србије. Објавио је шест радова, од којих два у међународним часописима са IMPACT фактором, три на међународним конференцијама, и један на домаћој конференцији. Коаутор је две књиге.

Прилог 1.

Изјава о ауторству

Потписани Дејан К. Вељковић

број индекса /

Изјављујем

да је докторска дисертација под насловом

„Моделовање механичког напрезања у полупроводничким наноструктурама“

- резултат сопственог истраживачког рада,
- да предложена дисертација у целини ни у деловима није била предложена за добијање било које дипломе према студијским програмима других високошколских установа,
- да су резултати коректно наведени и
- да нисам кршио/ла ауторска права и користио интелектуалну својину других лица.

Потпис докторанда

У Београду, 05.05.2016.

Дејан Вељковић

Прилог 3.

Изјава о коришћењу

Овлашћујем Универзитетску библиотеку „Светозар Марковић“ да у Дигитални репозиторијум Универзитета у Београду унесе моју докторску дисертацију под насловом:

„Моделовање механичког напрезања у полупроводничким
наноструктурама“

која је моје ауторско дело.

Дисертацију са свим прилозима предао/ла сам у електронском формату погодном за трајно архивирање.

Моју докторску дисертацију похрањену у Дигитални репозиторијум Универзитета у Београду могу да користе сви који поштују одредбе садржане у одабраном типу лиценце Креативне заједнице (Creative Commons) за коју сам се одлучио/ла.

1. Ауторство
2. Ауторство - некомерцијално
3. Ауторство – некомерцијално – без прераде
4. Ауторство – некомерцијално – делити под истим условима
5. Ауторство – без прераде
6. Ауторство – делити под истим условима

(Молимо да заокружите само једну од шест понуђених лиценци, кратак опис лиценци дат је на полеђини листа).

Потпис докторанда

У Београду, 05.05.2016.

Ђејан Велковић

1. Ауторство - Дозвољавање умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце, чак и у комерцијалне сврхе. Ово је најслободнија од свих лиценци.
2. Ауторство – некомерцијално. Дозвољавање умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце. Ова лиценца не дозвољава комерцијалну употребу дела.
3. Ауторство - некомерцијално – без прераде. Дозвољавање умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, без промена, преобликовања или употребе дела у свом делу, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце. Ова лиценца не дозвољава комерцијалну употребу дела. У односу на све остале лиценце, овом лиценцом се ограничава највећи обим права коришћења дела.
4. Ауторство - некомерцијално – делити под истим условима. Дозвољавање умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце и ако се прерада дистрибуира под истом или сличном лиценцом. Ова лиценца не дозвољава комерцијалну употребу дела и прерада.
5. Ауторство – без прераде. Дозвољавање умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, без промена, преобликовања или употребе дела у свом делу, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце. Ова лиценца дозвољава комерцијалну употребу дела.
6. Ауторство - делити под истим условима. Дозвољавање умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце и ако се прерада дистрибуира под истом или сличном лиценцом. Ова лиценца дозвољава комерцијалну употребу дела и прерада. Слична је софтверским лиценцама, односно лиценцама отвореног кода.