

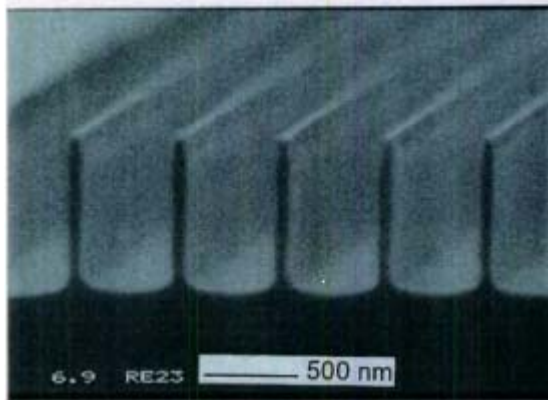


ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ  
ΣΧΟΛΗ ΗΛΕΚΤΡΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ  
ΚΑΙ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΩΝ  
ΤΟΜΕΑΣ ΗΛΕΚΤΡΟΜΑΓΝΗΤΙΚΩΝ ΕΦΑΡΜΟΓΩΝ  
ΗΛΕΚΤΡΟΟΠΤΙΚΗΣ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΩΝ ΥΛΙΚΩΝ

## ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

**ΘΕΜΑ : ΕΝΤΟΠΙΣΜΟΣ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΩΝ ΣΕ ΚΒΑΝΤΙΚΟΥΣ ΠΥΛΩΝΕΣ**

**Καπαρός Εμμανουήλ του Συμεών  
Α.Μ. 03091025**



Επιβλέπων : **Ιωάννης Ξανθάκης**  
**Καθηγητής Ε.Μ.Π.**

**Αθήνα Ιούνιος 2004**



## **ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ**

Με την ολοκλήρωση της παρούσης διπλωματικής εργασίας θα ήθελα να ευχαριστήσω τον Καθηγητή μου κ. Ι. Ξανθάκη υπό της επίβλεψη του οποίου αυτή πραγματοποιήθηκε, για τη συνεργασία του, το ενδιαφέρον και την επιστημονική του καθοδήγηση. Επίσης θα ήθελα να ευχαριστήσω τον Καθηγητή κ. Ι. Τίγκελη για τη σημαντική βοήθειά του στην επίλυση προβλημάτων κατά την επεξεργασία του βασικού προγράμματος FORTRAN.

Μανώλης Καπαρός



## ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Σκοπός της εργασίας αυτής είναι η μελέτη φαινομένων εντοπισμού ηλεκτρονίων εντός κβαντικών πυλώνων που δύνανται να προσομοιωθούν από σύστημα δύο κύβων που είναι τοποθετημένοι ο ένας πάνω στον άλλον. Όπως λοιπόν αναφέρθηκε πρόκειται για δύο κύβους διαστάσεων  $D_x^I, D_y^I, D_z^I$  και  $D_x^{II}, D_y^{II}, D_z^{II}$  ως προς τους άξονες  $x, y, z$  αντίστοιχα. Ο Κύβος I είναι ο μικρότερος σε όγκο και ο οποίος είναι τοποθετημένος πάνω στον Κύβο II. Δεν υπάρχει διαχωριστική επιφάνεια μεταξύ τους (ο εσωτερικός χώρος και των δύο κύβων επικοινωνεί). Τέλος ο πάνω κύβος προσομοιώνει τον κβαντικό πυλώνα.

Αναπτύσσουμε σε μια βάση κυκλικών συναρτήσεων χρησιμοποιώντας το θεώρημα Bloch και αντικαθιστούμε στην εξίσωση Schrödinger ενώ ταυτόχρονα λαμβάνουμε υπόψη και τις συνοριακές συνθήκες του συστήματος των δυο κύβων. Η λύση που προκύπτει έχει την μορφή εκθετικής περιοδικής συνάρτησης  $\psi(x + L) = e^{ikL} \psi(x)$  όπου  $L$  η περίοδος και  $\psi(x) = U_k(x)e^{ikx}$ . Για την αριθμητική επίλυση των εξισώσεων που προκύπτουν χρησιμοποιούμε πρόγραμμα FORTRAN που μας δίνει τις λύσεις που παρουσιάζουν φαινόμενα εντοπισμού.

Από τις λύσεις αυτές συμπεραίνουμε ότι όντως υπάρχουν περιπτώσεις εντοπισμού των ηλεκτρονίων αποκλειστικά σε έναν από τους δύο κύβους. Ιδιαίτερο ενδιαφέρον παρουσιάζουν οι περιπτώσεις εκείνες που αφορούν εγκλωβισμό των σωματιδίων στον άνω κύβο (Κύβος I). Η διαπίστωση αυτή έχει σημαντική αξία για τον τομέα της οπτοηλεκτρονικής και τις τεχνικές εφαρμογές του γιατί μας δίνει την δυνατότητα να αλλάξουμε κατά βούληση τις ενέργειες-συχνότητες των ηλεκτρονίων μέσα από τις γεωμετρικές διαστάσεις του συστήματος των δύο κύβων.

## **Λέξεις Κλειδιά:**

Κβαντικοί Πυλώνες, Εντοπισμός Ηλεκτρονίων, Θεώρημα Bloch, Εξίσωση Schrödinger, Οπτοηλεκτρονική

## ABSTRACT

The scope of this thesis, was the study of cases of electron detection inside quantum pillars, which can be simulated by a system of two cubes that are situated one on top of the other .As has already been mentioned, there are two cubes with dimensions  $D_x^I, D_\psi^I, D_z^I$  and  $D_x^{II}, D_\psi^{II}, D_z^{II}$  with reference to the axis  $x, \psi, z$  respectively .Cube Nr I is the smallest in size and is situated on top of Cube Nr II .There is no demarcation surface between them ( the internal area of both cubes is inseparate ) .Cube Nr I simulates the quantum pillar .

We develop on a basis of cyclic functions using the Bloch theorem and substitute in the Schrödinger equation ,while simultaneously we take under consideration the border compacts of the system of the two cubes .The emerging solution has the form of an exponential periodic function  $\psi(x + L) = e^{ikL} \psi(x)$  where  $L$  is the period and  $\psi(x) = U_k(x)e^{ikx}$  .For the arithmetic solution of the equations we use a program written in FORTRAN ,which gives us results that represent cases of electron detection .

From these results we can come to the conclusion that there are indeed cases of electron detection exclusively in one of the two cubes .Of special interest are the cases that concern electron isolation in the upper cube (Cube Nr I) .This finding has further value in the field of optoelectronics and its applications ,because it gives us the capability to change at will the energies-frequencies of electrons ,through the geometric dimensions of the system of the two cubes .

### Key Words :

Quantum Pillars ,Electron Detection ,Bloch Theorem , Schrödinger Equation ,Optoelectronics

## ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

<b>1.1.</b>	Η εξίσωση Schrödinger .....	9
<b>1.2</b>	Εξισώσεις Schrödinger για σωματίδιο σε τρισδιάστατο κουτί .....	12
<b>2.1</b>	Κύματα Bloch στα κρυσταλλικά σώματα .....	15
<b>2.2</b>	Προσέγγιση ενεργού μάζας .....	18
<b>3.</b>	Πειραματικές εφαρμογές και μελέτες πάνω σε κβαντικές στήλες .....	21
<b>4.</b>	Εξισώσεις Schrödinger που καθορίζουν την συμπεριφορά σωματιδίων εντός συστήματος δύο εφραπτόμενων κυβικών αντικειμένων.....	28
<b>5.</b>	Αριθμητικά αποτελέσματα – Γραφικές παραστάσεις .....	36
<b>6.</b>	Συμπεράσματα.....	63

## ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ

Πρόγραμμα σε γλώσσα Fortran το οποίο υπολογίζει την κβαντική συμπεριφορά σωματιδίου εντός κυβικών αντικειμένων. ....	65
---	----





## 1.1 Η Εξίσωση SCHRÖEDINGER

Η εξίσωση που διέπει τα φαινόμενα του κλάδου της κβαντομηχανικής είναι η εξίσωση Schrödinger η οποία έχει δυο μορφές, την χρονοεξαρτημένη και την χρονοανεξάρτητη.

Ξεκινάμε από την βασική έκφραση της εξίσωσης ενός κύματος ως προς τον χώρο και τον χρόνο :

$$\Psi = A \exp[i[(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r})/(\hbar/2\pi) - \omega t]] \quad (1)$$

όπου  $A$  μια σταθερά και  $\lambda = \hbar/p$  και  $h$  η σταθερά του Planck. Η εξίσωση αυτή μετατρέπεται στην

$$\Psi = A \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)$$

όπου  $\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$  .

Διαφορίζοντας δυο φορές ως προς τον χώρο την ανωτέρω συνάρτηση προκύπτει η ακόλουθη :

$$\nabla^2 \Psi + k^2 \Psi = 0 \quad (2)$$

Θεωρώντας χρονοανεξάρτητα φαινόμενα όπου η ενέργεια  $E$  των ηλεκτρονίων είναι σταθερή ως προς τον χρόνο θα έχουμε

$$E = \text{Κινητ.Ενεργ.} + \text{Δυναμ.Ενεργ.} = p^2/2m + V \quad (3)$$

όπου  $V$  το ηλεκτροστατικό δυναμικό στο οποίο κινούνται τα ηλεκτρόνια και  $m$  η μάζα του ηλεκτρονίου. Από την παραπάνω σχέση έχουμε ότι

$$k = \frac{[2m(E-V)]^{1/2}}{\hbar} \quad p/\hbar$$

Αντικαθιστώντας στην εξίσωση (2) έχουμε

$$-(\hbar^2 \nabla^2 / 2m) \Psi + V \Psi - E \Psi = 0 \quad (4)$$

Η (3) είναι η *χρονοανεξάρτητη μορφή της εξίσωσης του Schrödinger*.

Προχωρούμε έπειτα στην επαναδιατύπωση της ανωτέρω εξίσωσης με διαφορετικό τρόπο που κάνει την φυσική της σημασία πιο προφανή.

$$[-(\hbar^2 \nabla^2 / 2m) + V]\Psi = E\Psi \quad (5)$$

$$H\Psi_n = E_n\Psi_n, \quad H = -(\hbar^2 \nabla^2 / 2m) + V$$

Η εξίσωση (5) είναι μαθηματικά μια εξίσωση ιδιοτιμών όπου  $H$  είναι ο τελεστής,  $\Psi_n$  το ιδιοδιάνυσμα και  $E_n$  η ιδιοτιμή που αληθεύει για διακριτές τιμές του  $E$  (εκτός από το άπειρο κενό). Αν κοιτάξουμε πιο προσεκτικά τον τελεστή  $H$  θα δούμε ότι:

- A. Έχει διαστάσεις ενέργειας.
- B. Η δομή του, δηλαδή οι δυο όροι του μοιάζουν πάρα πολύ με την εξίσωση (3). Για την ακρίβεια η (5) θα γίνει ίδια με την (3) αν αντιστοιχίσουμε την ορμή  $\mathbf{p}$  του ηλεκτρονίου με τον τελεστή  $i\hbar\nabla$

$$\mathbf{p} = i\hbar\nabla$$

Πρόκειται σαφώς για ένα λογικό άλμα και μάλιστα ιδιαίτερα δυσκατάληπτο. Η διαδικασία της κατασκευής της εξίσωσης Schrödinger αποκτά πλέον μια νέα φυσική σημασία βάσει και των ακόλουθων τριών κανόνων :

1. Για οποιοδήποτε φυσικό σύστημα γράφουμε την ενέργεια του συστήματος υπό εξέταση με καθαρά κλασικούς όρους όπως π.χ. στην σχέση (3).
2. Στην έκφραση που παίρνουμε, αντικαθιστούμε την ορμή  $\mathbf{p}$  με τον τελεστή  $i\hbar\nabla$  και το διάνυσμα θέσης  $\mathbf{r}$  ( π.χ. μέσα στο δυναμικό  $\mathbf{V}$  ) το αφήνουμε ως έχει. Κατ' αυτόν τον τρόπο κατασκευάζουμε ένα τελεστή, τον τελεστή ενέργειας  $H$ .
3. Η εξίσωση του Schrödinger κατασκευάζεται ταυτίζοντας την με το πρόβλημα ιδιοτιμών  $H\Psi = E\Psi$ .

Ξεκινήσαμε την κβαντομηχανική με καθαρά κυματικούς όρους και φθάσαμε στην επίσημη γλώσσα της κβαντομηχανικής, την γλώσσα των τελεστών και της γραμμικής άλγεβρας. Μ' αυτήν την γλώσσα η σύνδεση με την κλασική μηχανική είναι πλέον προφανής. Μέχρι στιγμής η ανάλυση που δώσαμε ισχύει για χρονοανεξάρτητα φαινόμενα ή σε κυματικούς όρους για στάσιμα κύματα. Για να βρούμε την χρονοεξαρτημένη μορφή της εξίσωσης του Schrödinger θ' ακολουθήσουμε την ίδια τακτική, θα ξεκινήσουμε από την εξίσωση (1) και θα γενικεύσουμε.

Διαφορίζοντας ως προς τον χρόνο την (1) και χρησιμοποιώντας την σχέση  $E = \hbar\omega$  έχουμε :

$$d\Psi/dt = -(iE/\hbar)\Psi$$

$$H\Psi = E\Psi \Rightarrow i\hbar(d\Psi/dt) = H\Psi$$

Η εξίσωση (6) είναι η χρονομεταβλητή εξίσωση του Schrödinger. Σημειώστε ότι οι προηγούμενες γραμμές δεν συνιστούν καμία απόδειξη της. Είναι μια σειρά εικασιών. Η ορθότητα της (6) έγκειται στο γεγονός ότι συμφωνεί κατ' αρχάς με τα πειραματικά δεδομένα και επιπλέον αποδεικνύει ότι εάν το  $\Psi$  είναι μια κυματοσυνάρτηση πολύ εντοπισμένη στο χώρο π.χ. μια γκαουσιανή συνάρτηση τότε το πιο πιθανό σημείο της συνάρτησης αυτής μετακινείται στο χώρο σύμφωνα με τον νόμο του Νεύτωνα , δηλαδή από την (6) συνεπάγεται ότι :

$$m \, du / dV = -\nabla V$$

όπου  $u$  η ταχύτητα του κέντρου βάρους, δηλαδή του πιο πιθανού σημείου της γκαουσιανής.

Στις σημειώσεις αυτές δεν θα ασχοληθούμε καθόλου με φαινόμενα όπου είναι αναγκαία η χρήση της (6).

Κλείνουμε αυτή την ενότητα λέγοντας ότι όταν η  $\Psi$  υπολογίζεται είτε από την (5) είτε από την (6) είναι απροσδιόριστη κατά μια πολλαπλασιαστική σταθερά. Αυτή υπολογίζεται από την συνθήκη κανονικοποίησης

$$\int |\Psi|^2 \, dV = 1$$

## 1.2 Εξισώσεις SCHRÖEDINGER για σωματίδιο σε τρισδιάστατο κουτί

Θεωρούμε σωματίδιο που περιορίζεται στον ορθογώνιο χώρο κουτιού όπου το δυναμικό  $V$  είναι μηδενικό ( $V=0$ ) και τα μήκη των πλευρών του κουτιού είναι  $a$ ,  $b$  και  $c$  αντίστοιχα. Η ενέργεια του σωματιδίου είναι τότε :

$$E = p^2/2m = (1/2m) (p_x^2 + p_\psi^2 + p_z^2) \quad (1)$$

Όπου οι συνιστώσες ορμής είναι :

$$\begin{aligned} p_x &= n_1 (n\hbar/a) \\ p_\psi &= n_2 (n\hbar/b) \\ p_z &= n_3 (n\hbar/c) \end{aligned} \quad (2)$$

όπου  $n_1$ ,  $n_2$  και  $n_3$  είναι ακέραιοι αριθμοί .  
Επομένως οι ενεργειακές στάθμες στο κουτί δίνονται από την σχέση :

$$E = (n^2\hbar^2/2m) (n_1^2/a^2 + n_2^2/b^2 + n_3^2/c^2) \quad (3)$$

και οι λύσεις για το χωρικό μέρος της κυματοσυνάρτησης μπορούν να γραφούν ως εξής :

$$\Psi(x,\psi,z) = A \sin(n_1\pi x/a) \sin(n_2\pi\psi/a) \sin(n_3\pi z/c)$$

Σε συμφωνία με την τρισδιάστατη λύση για τους θεμελιώδεις αρχές της ταλάντωσης. Αν το κουτί είναι κυβικό , αν δηλαδή  $a = b = c$  οι επιτρεπόμενες ενεργειακές στάθμες γίνονται:

$$E = (n^2\hbar^2/2ma^2) (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2) = (n^2\hbar^2/2ma^2) k^2$$

όπου  $k^2 = n_1^2 + n_2^2 + n_3^2$  με κυματοσυναρτήσεις

$$\Psi(x,\psi,z) = A \sin(n_1\pi x/a) \sin(n_2\pi\psi/a) \sin(n_3\pi z/c)$$

Γνωρίζουμε όμως από την θεωρία ότι συνδυασμοί διαφορετικών τιμών των  $n$  μπορούν να δώσουν την ίδια τιμή για το  $k$ , την ίδια δηλαδή τιμή για την ενέργεια. Όταν  $n_1$ ,  $n_2$  και  $n_3$  αναδιαταχθούν χωρίς να αλλάξει η τιμή του  $k$ , αλλάζει και η κυματοσυνάρτηση , επομένως μια ενεργειακή στάθμη μπορεί να συνδέεται με διαφορετικές κυματοσυναρτήσεις ή δυναμικές καταστάσεις. Η ενεργειακή στάθμη λέγεται ότι είναι εκφυλισμένη και η τάξη εκφυλισμού καθορίζεται από τον αριθμό των διαφορετικών ή ανεξάρτητων κυματοσυναρτήσεων που συνδέονται με τη συγκεκριμένη αυτή ενέργεια.

Στην περίπτωση του κυβικού κουτιού δυναμικού , η χαμηλότερη ενεργειακή στάθμη είναι η  $3E_1$  , δηλαδή

$$(n_1 = n_2 = n_3 = 1)$$

όπου

$$E_1 = n^2 \hbar^2 / 2ma^2$$

Η επόμενη ενεργειακή στάθμη είναι  $6E_1$  με εκφυλισμό 3, όπου οι τιμές των  $n$  είναι  $(2,1,1)$ ,  $(1,2,1)$  και  $(1,1,2)$ . Μεγαλύτερες ενεργειακές τιμές και οι αντίστοιχες τάξεις εκφυλισμού δίνονται στον πίνακα που ακολουθεί :

Ενέργεια	Συνδυασμοί $n_1, n_2, n_3$	Εκφυλισμός
$3E_1$	$(1,1,1)$	1
$6E_1$	$(2,1,1)$ $(1,2,1)$ $(1,1,2)$	3
$9E_1$	$(2,2,1)$ $(2,1,2)$ $(1,2,2)$	3
$11E_1$	$(3,1,1)$ $(1,3,1)$ $(1,1,3)$	3
$12E_1$	$(2,2,2)$	1
$14E_1$	$(1,2,3)$ $(3,2,1)$ $(2,3,1)$ $(1,3,2)$ $(2,1,3)$ $(3,1,2)$	6

Όσο οι διαστάσεις του παραπάνω κυβικού κουτιού είναι μικρές, οι ενεργειακές στάθμες παραμένουν διακριτές. Όταν όμως ο όγκος αυξάνει, όπως στην περίπτωση των ελευθέρων ηλεκτρονίων σε ένα μέταλλο, οι διαδοχικές ενεργειακές στάθμες πλησιάζουν τόσο πολύ που σχηματίζεται ένα σχεδόν συνεχές φάσμα.

Αν θέλουμε να βρούμε πόσες ενεργειακές στάθμες μπορούν να περιέχονται στο μικρό ενεργειακό διάστημα  $dE$  όταν το κουτί δυναμικού είναι πολύ μεγάλο, αρκεί μόνο να εφαρμόσουμε την επόμενη σχέση που εκφράζει τον αριθμό των δυνατών κανονικών τρόπων ταλάντωσης ανά μονάδα όγκου μιας κοιλότητας στο διάστημα συχνοτήτων  $(\mathbf{v}, \mathbf{v} + d\mathbf{v})$  και έχει ως εξής :

$$dn = 4\pi v^2 dv / c^3$$

Εκεί τονίσαμε ότι το αποτέλεσμα δεν εξαρτάται από κανένα ιδιαίτερο σύστημα και το εφαρμόσαμε στο νόμο ακτινοβολίας του Planck και στη θεωρία για τις ειδικές θερμότητες. Εδώ το χρησιμοποιούμε με τις ακόλουθες εξισώσεις:

$$E = p^2 / 2m = h\nu \quad \text{και} \quad p = E/c = h\nu/c$$

οπότε

$$dE = p/m dp = h dv$$

και

$$dp = h dv/c$$

για να πάρουμε τον αριθμό καταστάσεων ανά μονάδα όγκου στο ενεργειακό διάστημα  $dE$ ,

$$dn(E) = [4\pi(2m^3)^{1/2} E^{1/2}] / h^3 dE$$

Το αποτέλεσμα αυτό μπορούμε να το εφαρμόσουμε αμέσως για να προσδιορίσουμε τον τρόπο με τον οποίο τα ελεύθερα ηλεκτρόνια ενός μετάλλου κατανέμονται σε μια ενεργειακή ζώνη με

τιμές από μηδέν ως  $E$ . Επομένως σύμφωνα με την αρχή του Pauli ο ολικός αριθμός των ηλεκτρονίων ανά μονάδα όγκου στην ενεργειακή περιοχή από μηδέν ως  $E$  είναι

$$\begin{aligned}n &= \int dn(E) = [2 \cdot 4\pi(2m_e)^3]^{1/2} / h^3 \int_0^E E^{1/2} dE = \\ &= \{ [16\pi(2m_e)^3]^{1/2} / 3h^3 \} E^{3/2}\end{aligned}$$

όπου  $m_e$  είναι η μάζα του ηλεκτρονίου.

## 2.1 Κύματα BLOCH στα κρυσταλλικά σώματα

Το βασικό θεώρημα που περιγράφει τις ιδιότητες των κυματοσυναρτήσεων εντός κρυσταλλικών σωμάτων είναι το θεώρημα Bloch. Έχουμε κατ' αρχήν την εξίσωση του Schrödinger που γράφεται ως εξής :

$$[(-\hbar^2\nabla^2/2m)+V(\mathbf{r})]\Psi = E\Psi$$

όπου το  $\mathbf{V}(\mathbf{r})$  είναι το ηλεκτροστατικό δυναμικό που ασκείται σ' ένα τυχαίο εξωτερικό ηλεκτρόνιο ενός ατόμου και το οποίο οφείλεται στους πυρήνες, στα εσωτερικά και στα εξωτερικά ηλεκτρόνια όλων των ατόμων (πλην φυσικά του υπόψη ηλεκτρονίου). Είναι επίσης γνωστό ότι το κρυσταλλικό δυναμικό  $\mathbf{V}(\mathbf{r})$  έχει την συμμετρία , δηλαδή περιοδικότητα του κρυστάλλου. Αυτό σημαίνει ότι

$$\mathbf{V}(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = \mathbf{V}(\mathbf{r})$$

όπου  $\mathbf{R}$  οποιοδήποτε διάνυσμα θέσης του πλέγματος Bravais που υπακούει στην σχέση :

$$\mathbf{R} = m_1\mathbf{a}_1 + m_2\mathbf{a}_2 + m_3\mathbf{a}_3$$

όπου  $m_1, m_2, m_3$  ακέραιοι αριθμοί και  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$  τα διανύσματα μετατοπίσεων.

Δηλαδή αν είμαστε σε κάποιο σημείο  $\mathbf{r}$  του ημιαγωγού και μετακινηθούμε κατά ακέραια πολλαπλάσια των βασικών μετατοπίσεων  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$  θα βρούμε το ίδιο δυναμικό. Επειδή τα  $\mathbf{a}_i$  είναι της τάξεως των ενδοατομικών αποστάσεων ( $2-4 \text{ \AA}$ ) σημαίνει ότι σε μακροσκοπική κλίμακα το δυναμικό είναι σταθερό. Η περιοδικότητα του δυναμικού έχει καταλυτικές συνέπειες για τις κυματοσυναρτήσεις. Εφόσον το  $\mathbf{V}(\mathbf{r})$  είναι σε μακροσκοπική κλίμακα σταθερό, οι κυματοσυναρτήσεις δεν πρέπει να διαφέρουν πολύ από τα γνωστά κύματα  $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$  του κενού. Για την ακρίβεια το θεώρημα του Bloch λέει ότι οι  $\Psi$  έχουν την μορφή

$$\Psi(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$$

όπου  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  είναι περιοδική με περίοδο την μοναδιαία κυψελίδα.

Για την απλούστερη απόδειξη του θεωρήματος Bloch θεωρούμε ότι ο κρύσταλλος είναι μονοκρυσταλλικός ή απλά μια αλυσίδα ατόμων. Ο αριθμός των ατόμων στην αλυσίδα είναι ίσος με τον αριθμό των κυψελίδων ( $N$ ). Για να αποφύγουμε την ύπαρξη επιφανειακών φαινομένων θεωρούμε ότι η αλυσίδα είναι κλειστή, ή εναλλακτικά ότι έχουμε περιοδικές οριακές συνθήκες δηλαδή

$$\Psi(\mathbf{x}) = \Psi(\mathbf{x}+\mathbf{L})$$

όπου  $\mathbf{L} = N\mathbf{a}$  το μήκος της αλυσίδας

Εφόσον το δυναμικό  $\mathbf{V}(\mathbf{x})$  είναι περιοδικό τότε και η πυκνότητα φορτίου  $\rho(\mathbf{x})$  πρέπει να είναι περιοδική. Αλλά

$$\rho(\chi) = e^{|\Psi(\chi)|^2}$$

Άρα  $|\Psi(\chi+a)|^2 = |\Psi(\chi)|^2$

Όταν οι δυο μιγαδικοί αριθμοί έχουν το ίδιο μέτρο διαφέρουν μόνο κατά ένα παράγοντα φάσης

Άρα είναι  $\Psi(\chi+a) = e^{i\theta} \Psi(\chi) = \lambda \Psi(\chi)$  (7)

Με το ίδιο ακριβώς σκεπτικό μπορούμε να γράψουμε

$$|\Psi(\chi+2a)|^2 = |\Psi(\chi+a)|^2 \Rightarrow \Psi(\chi+2a) = \lambda \Psi(\chi+a) = \lambda^2 \Psi(\chi) \quad \text{κ.ο.κ.}$$

Επαναλαμβάνοντας **N** φορές την ίδια διαδικασία και χρησιμοποιώντας την σχέση (7) έχουμε

$$\lambda^N = 1 \Rightarrow \lambda = e^{2\pi i \nu / N}$$

όπου  $\nu=0,1,2,\dots,N-1$

Άρα το  $\theta$  στην (7) είναι

$$\theta = 2\pi \nu / N = 2\pi a \nu / L = (2\pi \nu / L) a$$

Ο όρος  $2\pi \nu / L = \mathbf{k}$  έχει διαστάσεις και μορφή κυματάριθμου, άρα τελικά η σχέση γράφεται

$$\Psi(\chi+a) = e^{i\mathbf{k}a} \Psi(\chi)$$

Γενικότερα είναι

$$\Psi(\chi+na) = e^{i\mathbf{k}na} \Psi(\chi)$$

Ενώ στις τρεις διαστάσεις λαμβάνει την μορφή

$$\Psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \Psi(\mathbf{r}) \quad (8)$$

Όπου το **R** είναι τυχόν διάνυσμα του πλέγματος Bravais. Η εξίσωση (8) συνιστά την συνθήκη Bloch (αλλιώς και θεώρημα Bloch) που είναι και η απαίτησή μας επί των κυματοσυνατήσεων. Είναι προφανές ότι η εξίσωση (8) αποτελεί μια αποδεκτή μορφή λύσης της εξίσωσης Schrödinger.

Για την μετάβαση από την μονοδιάστατη συνθήκη Bloch στην τρισδιάστατη μορφή της είναι προφανές ότι πρέπει η μεταβλητή **k** να εκφραστεί ως εξής:

$$\mathbf{k} = 2\pi \nu / N a = 2\pi \nu \mathbf{b} / N$$

Δηλαδή σε τρισδιάστατη μορφή έχουμε ότι

$$\mathbf{k} = 2\pi \nu_1 \mathbf{b}_1 / N_1 + 2\pi \nu_2 \mathbf{b}_2 / N_2 + 2\pi \nu_3 \mathbf{b}_3 / N_3$$



όπου ισχύει ότι είναι

$$\mathbf{b}_1 = (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3) / (\mathbf{a}_1 \bullet \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3) \quad \mathbf{b}_2 = (\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1) / (\mathbf{a}_1 \bullet \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3) \quad \mathbf{b}_3 = (\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2) / (\mathbf{a}_1 \bullet \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)$$

όπου  $N_1, N_2, N_3$  οι ακέραιοι αριθμοί μετατοπίσεων των  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$  και  $\mathbf{a}_3$  που απαιτούνται για να σαρωθεί ο κρύσταλλος .

## 2.2. Προσέγγιση ενεργού μάζας

Η προσέγγιση ενεργού μάζας μπορεί να εφαρμοσθεί και για την επεξήγηση της συμπεριφοράς ηλεκτρονίου υπό δυναμικό  $\mathbf{V}(\mathbf{r})$ . Η εξίσωση Schrödinger είναι:

$$[\mathbf{H}_{cr} + \mathbf{V}(\mathbf{r})] \Psi(\mathbf{r}) = E \Psi(\mathbf{r}) \quad (1)$$

Επεκτείνοντας την κυματομορφή στη σειρά

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{a}, \mathbf{k}} C_{\mathbf{a}, \mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{a}, \mathbf{k}'} \quad (2)$$

Χρησιμοποιώντας την βασική μέθοδο μπορούμε να μετατρέψουμε την εξίσωση (1) σε μια νέα εξίσωση της παρακάτω μορφής :

$$E_{\mathbf{a}}(\mathbf{k}) C_{\mathbf{a}, \mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{a}', \mathbf{k}'} (\mathbf{a}, \mathbf{k} | \mathbf{V} | \mathbf{a}', \mathbf{k}') C_{\mathbf{a}', \mathbf{k}'} = E C_{\mathbf{a}, \mathbf{k}} \quad (3)$$

όπου τα στοιχεία του πίνακα είναι

$$(\mathbf{a}, \mathbf{k} | \mathbf{V} | \mathbf{a}', \mathbf{k}') = (1/NV_0) \int_{V_0} d\mathbf{r} e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} \mathbf{u}_{\mathbf{a}, \mathbf{k}}(\mathbf{r}) \mathbf{V}(\mathbf{r}) \mathbf{u}_{\mathbf{a}', \mathbf{k}'}(\mathbf{r})$$

Έπειτα επεκτείνοντας το δυναμικό σε μια σειρά Fourier έχουμε ότι :

$$\mathbf{V}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{K}} \mathbf{V}_{\mathbf{K}} e^{i(\mathbf{K} \cdot \mathbf{r})} \quad (4)$$

Αφού το δυναμικό  $\mathbf{V}(\mathbf{r})$  είναι μια μεταβλητή συνάρτηση με σχετικά μικρούς ρυθμούς μεταβολής κατά την επέκταση της εξίσωσης (4) μόνο δείκτες με μικρό  $\mathbf{K}$  είναι αναγκαίοι ενώ οι λοιποί δύνανται να παραληφθούν. Τότε η συνάρτηση (4) μπορεί να ξαναγραφεί όπως ακολουθεί :

$$\begin{aligned} (\mathbf{a}, \mathbf{k} | \mathbf{V} | \mathbf{a}', \mathbf{k}') &= (1/NV_0) \sum_{\mathbf{K}} \int d\mathbf{r} e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k} + \mathbf{K} \cdot \mathbf{r})} \mathbf{u}_{\mathbf{a}, \mathbf{k}}(\mathbf{r}) \mathbf{V}_{\mathbf{K}} \mathbf{u}_{\mathbf{a}', \mathbf{k}'}(\mathbf{r}) \\ &\approx (1/NV_0) \sum_{\mathbf{K}} \mathbf{V}_{\mathbf{K}} \sum_{\mathbf{n}} e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k} + \mathbf{K}) \cdot \mathbf{n}} \int_{V_0} d\mathbf{r} \mathbf{u}_{\mathbf{a}, \mathbf{k}}(\mathbf{r}) \mathbf{u}_{\mathbf{a}', \mathbf{k}'}(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

Όπου  $\mathbf{n}$  είναι η θέση του  $n$ -οστού κελιού. Λαμβάνοντας υπόψη ότι οι συνθήκες Bloch είναι περιοδικές και ότι μόνο μικρά  $\mathbf{K}$  συμβάλλουν στο αποτέλεσμα τότε η σειρά  $1/N \sum_{\mathbf{n}} (\dots)$  εξαφανίζεται ολοκληρωτικά εκτός και αν

$$\mathbf{k}' - \mathbf{k} + \mathbf{K} = \mathbf{0}$$

Τότε μπορούμε να παραστήσουμε την συνάρτηση (3) ως εξής :

$$\mathbf{E}_a(\mathbf{k})\mathbf{C}_{a,\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{a}',\mathbf{k}'-\mathbf{K}} \mathbf{U}_{\mathbf{k}} \mathbf{C}_{\mathbf{a}',\mathbf{k}-\mathbf{K}} \Delta^{aa'}_{\mathbf{k}\mathbf{k}-\mathbf{K}} = \mathbf{E}\mathbf{C}_{a,\mathbf{k}'} \quad (5)$$

όπου

$$\Delta^{aa'}_{\mathbf{k}\mathbf{k}-\mathbf{K}} = 1/V_0 \int_{V_0} d\mathbf{r} \mathbf{u}_{a,\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \mathbf{u}_{\mathbf{a}',\mathbf{k}-\mathbf{K}}(\mathbf{r})$$

Για μικρά  $\mathbf{K}$  (γεγονός που είναι πραγματικότητα στην περίπτωση μας) μπορούμε να κάνουμε την προσέγγιση

$$\Delta^{aa'}_{\mathbf{k}\mathbf{k}-\mathbf{K}} \approx \Delta^{aa'}_{\mathbf{k}\mathbf{k}} = \delta_{aa'} \quad (6)$$

Το φυσικό νόημα της προσέγγισης της σχέσης (5) είναι ότι διαφορετικές ενεργειακές στάθμες είναι πλήρως ανεξάρτητες και ότι το δυναμικό  $\mathbf{V}(\mathbf{r})$  δεν προκαλεί διασταθμικές μεταβολές. Τώρα μπορούμε να απλοποιήσουμε την εξίσωση (4) στη νέα της μορφή :

$$\mathbf{E}_a(\mathbf{k})\mathbf{C}_{a,\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{a}',\mathbf{k}'-\mathbf{K}} \mathbf{U}_{\mathbf{k}} \mathbf{C}_{\mathbf{a}',\mathbf{k}-\mathbf{K}} = \mathbf{E}\mathbf{C}_{a,\mathbf{k}'} \quad (7)$$

Επιστρέφοντας στην εξίσωση  $\Psi(\mathbf{r})$  και χρησιμοποιώντας στη σχέση (2) με παράγοντες σταθερού  $a$  βρίσκουμε ότι :

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{K}} \mathbf{C}_{a,\mathbf{k}} \Psi_{a,\mathbf{k}} = (1 / V^{1/2}) \sum_{\mathbf{K}} \mathbf{C}_{a,\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \mathbf{u}_{a,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (8)$$

Για τον υπολογισμό του  $\Psi(\mathbf{r})$  εισάγουμε την συνάρτηση

$$\mathbf{F}_a(\mathbf{r}) = (1 / V^{1/2}) \sum_{\mathbf{K}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \mathbf{C}_{a,\mathbf{k}} \quad \mathbf{K}$$

Από την εξίσωση (7) παίρνουμε ότι :

$$\sum_{\mathbf{k}} \mathbf{E}_a(\mathbf{k})\mathbf{C}_{a,\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + \sum_{\mathbf{k},\mathbf{K}} \mathbf{V}_{\mathbf{k}} \mathbf{C}_{a,\mathbf{k}-\mathbf{K}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = \mathbf{E} \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{C}_{a,\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$$

Ο πρώτος όρος της εξίσωσης μπορεί να μετασχηματισθεί ως εξής :

$$\sum_{\mathbf{k}} \mathbf{E}_a(\mathbf{k})\mathbf{C}_{a,\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \equiv \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{E}_a(-i\nabla)\mathbf{C}_{a,\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = \mathbf{E}_a(-i\nabla) \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{C}_{a,\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$$

$$= \mathbf{E}_a(-i\nabla) \mathbf{V}^{1/2} \mathbf{F}_a(\mathbf{r})$$

όπου  $\mathbf{E}_a(-i\nabla)$  είναι ενεργειακή διασπορά με το φέρον κύμα  $\mathbf{k}$  αντικατεστημένο με τον παράγοντα  $-i\nabla$ . Ο δεύτερος όρος είναι παρόμοιος με τον όρο

$$\sum_{\mathbf{k}} \mathbf{V}_{\mathbf{k}} \mathbf{e}^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{K}} \mathbf{e}^{i(\mathbf{k}-\mathbf{K})\mathbf{r}} \mathbf{C}_{\mathbf{a},\mathbf{k}-\mathbf{K}}$$

Για συγκεκριμένο  $\mathbf{K}$  μπορούμε να δείξουμε για το εσωτερικό άθροισμα ότι :

$$\sum_{\mathbf{k}} \mathbf{e}^{i(\mathbf{k}-\mathbf{K})\mathbf{r}} \mathbf{C}_{\mathbf{a},\mathbf{k}-\mathbf{K}} = \sum_{\mathbf{k}-\mathbf{K}} \mathbf{e}^{i(\mathbf{k}-\mathbf{K})\mathbf{r}} \mathbf{C}_{\mathbf{a},\mathbf{k}-\mathbf{K}} = \mathbf{V}^{1/2} \mathbf{F}_a(\mathbf{r})$$

Το αποτέλεσμα είναι ανεξάρτητο του  $\mathbf{K}$ . Προφανώς το άθροισμα άνω του  $\mathbf{K}$  δίνει το δυναμικό  $\mathbf{V}(\mathbf{r})$ . Κατ' αυτόν τον τρόπο παίρνουμε την εξίσωση για το  $\mathbf{F}_a(\mathbf{r})$  :

$$[ \mathbf{E}_a(-i\nabla) + \mathbf{V}(\mathbf{r}) ] \mathbf{F}_a(\mathbf{r}) = \mathbf{E} \mathbf{F}_a(\mathbf{r}) \quad (9)$$

Στην προσέγγιση ενεργού μάζας  $\mathbf{E}_a(\mathbf{k}) = \mathbf{E}(\mathbf{0}) + \hbar^2 \mathbf{k}^2 / (2m^*)$  έτσι ώστε αντί της εξίσωσης (9) παίρνουμε ότι :

$$[ (-\hbar^2 \nabla^2 / 2m^*) + \mathbf{V}(\mathbf{r}) ] \mathbf{F}_a(\mathbf{r}) = [\mathbf{E} - \mathbf{E}(\mathbf{0})] \mathbf{F}_a(\mathbf{r}) \quad (10)$$

Η παραπάνω εξίσωση έχει την μορφή της εξίσωσης Schrödinger για ένα ηλεκτρόνιο με ενεργό μάζα  $m^*$  που κινείται στο εξωτερικό δυναμικό  $\mathbf{V}(\mathbf{r})$ . Στην ίδια προσέγγιση μπορούμε να παραστήσουμε την κυματοσυνάρτηση της σχέσης (8) ως εξής :

$$\Psi(\mathbf{r}) \approx (\mathbf{1} / \mathbf{V}^{1/2}) \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{C}_{\mathbf{a},\mathbf{k}} \mathbf{e}^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \mathbf{u}_{\mathbf{a},\mathbf{0}}(\mathbf{r}) = \mathbf{F}_a(\mathbf{r}) \mathbf{u}_{\mathbf{a},\mathbf{0}}(\mathbf{r})$$

Κατ' αυτόν τον τρόπο ανακαλύψαμε ότι σε ένα αργά μεταβαλλόμενο εξωτερικό δυναμικό το κρυσταλλικό ηλεκτρόνιο μπορεί να περιγραφεί με τη βοήθεια του θεωρήματος Bloch και της συνάρτησής του  $\mathbf{u}_{\mathbf{a},\mathbf{0}}$ . Η συνάρτηση  $\mathbf{F}_a(\mathbf{r})$  καλείται περιβάλλουσα συνάρτηση και ικανοποιεί την εξίσωση Schrödinger με τη χρήση της ενεργούς μάζας που περιγράφεται στην εξίσωση (10). Η συνθήκη κανονικοποίησης της  $\mathbf{F}_a(\mathbf{r})$  είναι η

$$\int d\mathbf{r} |\mathbf{F}_a(\mathbf{r})|^2 = \mathbf{1}$$

### **3. Πειραματικές εφαρμογές και μελέτες πάνω σε κβαντικές στήλες**

#### **3.1 Ορατή Φωταύγεια από μονό- και δισδιάστατες πυριτικές κατασκευές παραγόμενες με συμβατικές λιθογραφικές και ιοντικές μεθόδους χάραξης**

Η ορατή φωταύγεια πυριτικών νανοκατασκευών, που έχουν παραχθεί με τη χρήση συμβατικών λιθογραφικών και ιοντικών αντιδραστήρων σε συνθήκες θερμικής οξειδωσης υψηλής θερμοκρασίας, επιτεύχθηκε σε θερμοκρασία δωματίου υπό εξόρυξη λείζερ αργού των 488nm. Υψηλά ανισοτροπικές κάθετες πυριτικές στήλες με αναλογίες υψηλές ως 25:1 και διαμέτρου υπό τα 0,1 μm καθώς και πυριτικά τείχη παρομοίου μεγέθους παρήχθησαν αρχικά και λεπτύνθηκαν περαιτέρω έπειτα από αρκετούς κύκλους θερμικής οξειδωσης και κατοπινής απομάκρυνσης οξειδίων με τη χρήση κατεργασμένου HF ώστε να δημιουργηθούν τείχη με ύψη της τάξεως των μm. Η διαδικασία παραγωγής περιλάμβανε υψηλής πιστότητας λιθογραφία UV, υψηλή ανισοτροπική πυριτική χάραξη και οριστική λέπτυνση με οξειδωση και απομάκρυνση οξειδίων. Το αρχικό πρότυπο σημείων και γραμμών προσδιορίστηκε με οπτική λιθογραφία ώστε ο υπολογισμός μεγέθους να είναι της τάξης των 0,22 μm ,αλλά μικρότερες διαστάσεις (κάτω από 0,1 μm) επιτεύχθηκαν σε υπερεκτεθειμένες περιοχές κατά τη διάρκεια ξηρής δημιουργίας σε πλασματικό αντιδραστήρα. Τρεις διαφορετικές μάσκες χρησιμοποιήθηκαν για την πυριτική χάραξη: Χρώμιο, Αλουμίνιο ή Φωτοαντιιστατικό και τα τρία αντιστάτες των πυριτικών χαράξεων.

Η ανακάλυψη από του Canham το 1990 ότι η ορατή φωταύγεια σε θερμοκρασία δωματίου επιτεύχθηκε από υψηλά πορώδες πυρίτιο, αύξησε περαιτέρω το ενδιαφέρον για τη χρήση υλικών από πυρίτιο σε οπτοηλεκτρονικές εφαρμογές.

Η κατασκευή πορώδους πυριτίου είναι βασισμένη στην ηλεκτροχημική χάραξη του πυριτίου κάτω από ανοδική επίδραση και είναι πλέον αποδεκτό ότι το υψηλά πορώδες υλικό αποτελείται από ένα πυριτικό σκελετό με κατασκευές της τάξεως των nm πάνω του και έκτασης που εξαρτάται από την πορώτητα υλικού. Ένα κβαντικό μοντέλο απομόνωσης προτάθηκε για την επεξήγηση του φαινομένου της φωταύγειας. Μία εναλλακτική μέθοδος επεξήγησης απέδιδε την φωταύγεια σε επιφανειακές συνθήκες ή συγκροτήματα Si-O-H που δημιουργήθηκαν κατά τη διάρκεια υγρής χημικής χάραξης. Θεωρητικές μελέτες ιδεωδών κβαντικών καλωδίων πυριτίου επιβεβαιώνουν επίσης ότι υπάρχει μετάπτωση από το μη ευθύ στο απευθείας κενό υλικού του πυριτίου που επηρεάζεται από τον ηλεκτροδιακό περιορισμό στις νανοκατασκευές. Αυτό το θεωρητικό αποτέλεσμα μπορεί να ελεγχθεί από την κατασκευή καλά υπολογισμένων νανοκατασκευών οι οποίες αναμένεται να δώσουν φωταύγεια αν τα θεωρητικά αποτελέσματα είναι έγκυρα. Η κατασκευή τέτοιου είδους νανοκατασκευών παρουσιάζει επιπλέον ενδιαφέρον γιατί παράγονται με τεχνικές συμβατές με την τεχνολογία κατασκευών πυριτίου ώστε να γίνεται ένα επιπλέον βήμα για τη δημιουργία οπτοηλεκτρονικών συσκευών από πυρίτιο.

Σε παλαιότερες έρευνες είχε επιτευχθεί η παραγωγή πυριτικών νανοκατασκευών με λιγότερο εξελιγμένες μεθόδους όπως ο συνδυασμός ηλεκτροδιακής λιθογραφικής δέσμης ηλεκτρονίων με ανισοτροπική ιοντική χάραξη βάσει πλασματικής χημείας Cl<sub>2</sub> ή NI<sub>3</sub> (αέρια που είναι διαβρωτικά και τοξικά και απαιτούν ειδικούς αντιδραστήρες). Κατ' αυτό τον τρόπο παρήχθησαν πυριτικά καλώδια διαμέτρου 20 nm που λεπτύνθηκαν περαιτέρω με θερμική οξειδωση.

Στην παρούσα έρευνα έγινε χρήση λιθογραφικών και ιοντικών μεθόδων χάραξης και παρήχθησαν πυριτικές νανοκατασκευές (συμπεριλαμβανομένων τειχών και στηλών) με αναλογία ύψους προς πάχος ή διάμετρο της τάξης του 25:1 που λεπτύνθηκαν περαιτέρω με τη βοήθεια θερμικής οξειδωσης υψηλής θερμοκρασίας. Οπτική λιθογραφία χρησιμοποιήθηκε για τον αρχικό προσδιορισμό. Το πάχος 1,1 μm φωτοαντιστατικό AZ 5214 υπέστη επιφανειακή επεξεργασία υπό συνθήκες βαθέως βήματος UV ώστε να επιτευχθούν διαστάσεις της τάξεως των 0,22μm. Το δεύτερο στάδιο ήταν η εναπόθεση φύλλου αλουμινίου (Al) ή Χρωμίου (Cr) πάχους 40-80 nm και η επακόλουθη αφαίρεση του υπερκείμενου άχρηστου στρώματος υλικού ώστε να δημιουργηθεί μία μεταλλική μάσκα αρνητικού φορτίου. Η πυριτική χάραξη έγινε σε ένα αντιδραστικό ιοντικό χαρακτή με τη χρήση ως μάσκας είτε του μεταλλικού μοντέλου είτε του φωτοαντιστατικού με ικανοποιητικά αποτελέσματα. Μία υψηλά ανισοτροπική μέθοδος πυριτικής χάραξης δημιουργήθηκε η οποία βασίζεται σε αέρια SF<sub>6</sub> με CHF<sub>3</sub> που είναι λιγότερο τοξικά και φιλικά με το περιβάλλον. Παρότι το SF<sub>6</sub> είναι γνωστό ότι προκαλεί ιστροπική πυριτική χάραξη, ένα μίγμα SF<sub>6</sub> με CHF<sub>3</sub> και η επεξεργασία σε θερμοκρασία δωματίου οδηγούν σε υψηλά ανισοτροπικά πρότυπα που αποδίδονται στην παθητικοποίηση των κατασκευών από πολυμερή φύλλα εναπόθεσης κατά τη χάραξη.

Τα δείγματα που περιείχαν ταυτόχρονα πυριτικά τείχη και στήλες υποβλήθηκαν σε ξηρά θερμική οξειδωση υψηλής θερμοκρασίας. Αυτό έγινε στους 900 βαθμούς Κελσίου και χρησιμοποιήθηκαν διαφορετικές διάρκειες οξειδωσης. Το καταμετρημένο πάχος οξειδωσης πάνω σε ένα συγκεκριμένο πυριτικό στρώμα που οξειδώθηκε αλλά και στο κάτω μέρος του ήταν της τάξεως των 30-40 nm. Λόγω του ότι τα στίγματα στην μεταλλική μάσκα δημιουργήθηκαν σε μη προκαθορισμένες θέσεις (λόγω του τρόπου κατασκευής τους) και η διάμετρος των στηλών δεν ήταν τυποποιημένη. Έτσι παρατηρήθηκαν μεγέθη μικρότερα των 20 nm μετά την απομάκρυνση των οξειδίων ενώ και οι στήλες που δημιουργήθηκαν, παρά τη μικρή διάμετρο τους, είχαν σχεδόν κάθετο σχήμα δημιουργώντας μακριές κάθετες μονοδιάστατες πυριτικές κατασκευές. Παρόμοια πυριτικά τείχη επιφάνειας μικρότερης των 20 nm παρατηρήθηκαν μετά την απομάκρυνση των οξειδίων. Επιπλέον στάδιο οξειδωσης χωρίς την απομάκρυνση των οξειδίων, απαιτήθηκε σε μερικά δείγματα.

Πειράματα φωταύγειας έγιναν σε θερμοκρασία δωματίου με χρήση λέιζερ Αργού (Ar) των 488nm και με ισχύ μικρότερη των 50 mW. Δύο είδη δειγμάτων ερευνήθηκαν:

- A.** Δείγματα οξειδωμένα μια φορά στους 900 βαθμούς Κελσίου σε επίπεδη επιφάνεια (χωρίς ανωμαλίες) στην τάξη των 30-40 nm. Τα οξείδια απομακρύνθηκαν με χημικό τρόπο.
- B.** Δείγματα που υποβλήθηκαν και σε δεύτερο στάδιο οξειδωσης δίχως την απομάκρυνση των προκυπτομένων οξειδίων.

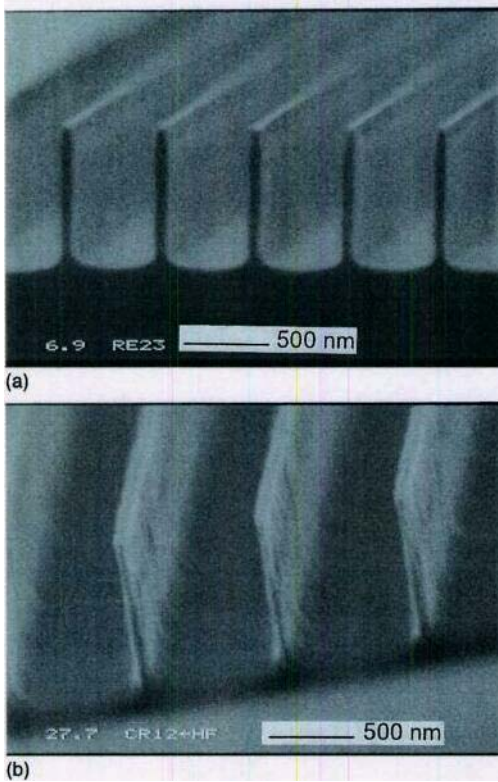
Και στις δύο περιπτώσεις τα δείγματα περιελάμβαναν πυριτικές κατασκευές της τάξεως των 10 nm ή και μεγαλύτερες, γεγονός που οφείλεται στην ύπαρξη πολλαπλών παράλληλων γραμμών διαφορετικού μεγέθους στην αρχική μάσκα.

Επίσης και στις δύο περιπτώσεις τα δείγματα είχαν φωταύγεια διαφορετικής έντασης ανά την επιφάνεια τους. Επειδή τα δείγματα δεν υποβλήθηκαν σε θερμική οξειδωση κατασκευές άνω των 50 nm δεν είχαν φωταύγεια.

Τα αίτια φωταύγειας από τις παραγόμενες κατασκευές απαιτούν περαιτέρω ξεκαθάρισμα. Η εξήγηση που βασίζεται στα κβαντικά φαινόμενα δεν καλύπτει όλες τις πτυχές. Γι' αυτό το λόγο πειράματα φωταύγειας σε χαμηλές θερμοκρασίες στα υφιστάμενα δείγματα είναι αναγκαίες.

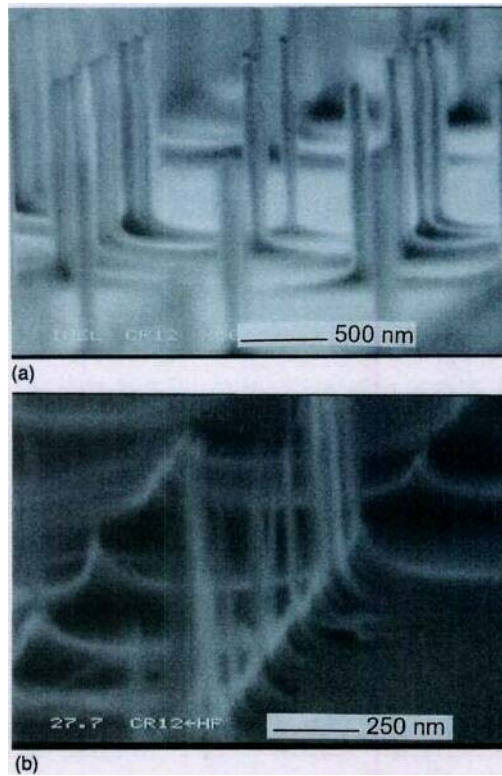
Συμπερασματικά πυριτικές κατασκευές με υψηλά ανισοτροπικό ύψος προς ανάλογο μέγεθος, συμπεριλαμβανομένων πυριτικών στηλών και τειχών μεγέθους και πάχους νανόμετρου παρήχθησαν για πρώτη φορά με τη χρήση συμβατικής λιθογραφικής και ιοντικής μεθόδου χάραξης. Επιπλέον στη λιθογραφία διερευνήθηκαν επιπλέον τεχνικές οπτικής λιθογραφίας με την έρευνα για υπερεκτεθειμένες περιοχές επιφανειών και με τη χρήση μεταλλικής μάσκας που προέκυψε από την εναπόθεση του εξεταζόμενου μετάλλου σε στρώμα αντιστάτη. Μια υψηλά ανισοτροπική ιοντική μέθοδος χάραξης που επινοήθηκε βασίζονταν στην χρήση μίγματος αερίων SF<sub>6</sub> με CHF<sub>3</sub>. Η μέθοδος αυτή επιτυγχάνει την κατασκευή πυριτικών κατασκευών εξαιρετικά μικρού μεγέθους συμπεριλαμβανομένων στηλών και τειχών της τάξης των 0,1 μm. Περαιτέρω λέπτυνση είναι δυνατή μέσω οξειδωσης σε υψηλή θερμοκρασία και αφαίρεση των οξειδίων. Ορατή φωταύγεια των πυριτικών κατασκευών επετεύχθη σε θερμοκρασία δωματίου με τη χρήση λέιζερ Αργού (Ar) κάτω από 488 nm. Τα πειράματα συνεχίζονται για την πλήρη διαλεύκανση της πηγής της φωταύγειας.

**Figure 1.**

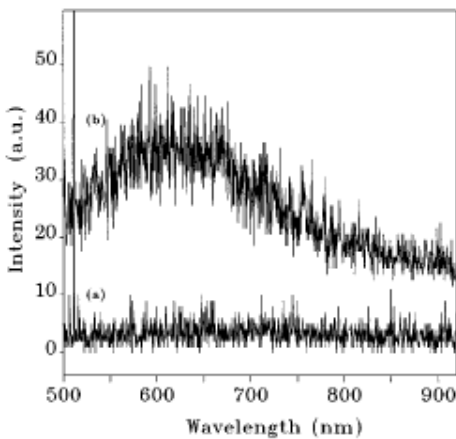


**Fig. 1 :** Εικόνες SEM πυριτικών τειχών. Χρησιμοποιήθηκε στην **εικ. (a)** φωτοαντιστατικό ως μάσκα χάραξης και στην **εικ. (b)** μάσκα Cr. Στην **εικ. (a)** οι δημιουργηθείσες κατασκευές προέκυψαν απευθείας από την χάραξη ενώ στην **εικ. (b)** μετά από θερμική οξείδωση στους 900 °C και αφαίρεση οξειδίου με τη χρήση HF.

**Figure 2.**



**Fig. 2 :** Εικόνες SEM πυριτικών στηλών που προέκυψαν με τη χρήση μάσκας Cr και μείγμα αερίων SF<sub>6</sub> και CHF<sub>3</sub>. Στην **εικ. (a)** οι στήλες προέκυψαν απευθείας από την χάραξη, ενώ στην **εικ. (b)** μετά από θερμική οξείδωση στους 900 °C και αφαίρεση του επιφανειακού στρώματος οξειδίου.



Φάσμα φωταύγειας από δείγμα πυριτικών νανοκατασκευών (στηλών-τειχών) που προέκυψαν από οπτική λιθογραφία και πυριτική χάραξη βασισμένη στην χημεία του φθορίου.



### 3.2 Κβαντικές στήλες σε $n^+$ αρσενίδιο Γαλλίου παρασκευασμένο βάσει φυσικής λιθογραφίας

Τυχαίες διατάξεις από νησίδες CsCl ημισφαιρικού σχήματος, με διαμέτρους της τάξης των 200 Å έχουν δημιουργηθεί σε υποστρώματα  $n^+$ GaAs. Το CsCl συμπεριφέρεται ως αντιστάτης μεγάλης επιλεκτικότητας όταν το GaAs χαραχθεί σε ένα πλάσμα  $\text{BCl}_3$ . Το οικοδόμημα που δημιουργείται εμπεριέχει στήλες του ίδιου ύψους αλλά διαφορετικών διαμέτρων. Οι μετρήσεις φωταύγειας έγιναν σε  $10^0$  K θερμοκρασία χρησιμοποιώντας ραδιενέργεια διέγερσης των 514,5 nm.

Η φυσική λιθογραφία σε ημιαγώγιμες επιφάνειες ως ένα μέσο επίτευξης κατασκευών με χαρακτηριστικές διαστάσεις της τάξης των εκατοντάδων Å έχει προταθεί από αρκετούς συγγραφείς. Ο Deckman και ο Dunsmuir χρησιμοποίησαν σφαίρες πολυστερίνης διασκορπισμένες πάνω στην επιφάνεια του υποστρώματος, προκειμένου να δημιουργηθεί ένα μόνο στρώμα πυκνής κατανομής σφαιρών, με αποτέλεσμα ώστε όταν το υπόστρωμα (πυριτίου) χαραχθεί μέσω της ραδιενεργού ιοντικής χάραξης, οι σφαίρες να λειτουργήσουν ως αντιστάτης-μάσκα. Πιο πρόσφατα οι Feug, Zeller και Stiles έχουν βελτιώσει περαιτέρω την τεχνική και έχουν επιτύχει πιο ομοιόμορφες διατάξεις. Επιπλέον οι κατασκευές αυτές φτιάχτηκαν από γαλλικό αρσενίδιο στο οποίο η παρατήρηση των κβαντικών φαινομένων είναι περισσότερο εμφανής. Αντιθέτως, στον τρόπο επεξεργασίας που παρουσιάζουμε, έχει χρησιμοποιηθεί διαφορετική προσέγγιση για την επίτευξη παρόμοιων αποτελεσμάτων.

Η μέθοδος αυτή έχει προκύψει από μελέτες διάφορων μεταλλικών χαλιδίων που χρησιμοποιούνται στις διεργασίες μικροκατασκευής ημιαγωγών.

Χρησιμοποιήθηκε χλωρίδιο του κεσίου για την δημιουργία άτακτων διατάξεων ημισφαιρίων σε ημιαγώγιμα υποστρώματα. Το υπόστρωμα κατόπιν χαράσσεται για να προκύψουν στήλες. Η διαδικασία συνίσταται στην απόθεση στην επιφάνεια του προετοιμασμένου υποστρώματος σε μια συσκευή εκτοπισμού ενός λεπτού στρώματος CsCl. Από την έκθεση στην υγρή ατμόσφαιρα το στρώμα του CsCl διασπάται σε ημισφαιροειδή νησίδες. Έπειτα τοποθετείται στη συσκευή RIE υφίσταται χάραξη και οδηγεί στη δημιουργία στηλών. Το CsCl καθαρίζεται με τη βοήθεια νερού και τα προκύπτοντα δείγματα εξετάζονται με δύο τρόπους. Πρώτα από ηλεκτρικό μικροσκόπιο (SEM) από όπου τραβιέται και φωτογραφία. Τέλος τοποθετείται σε κρυστάτη χαμηλής θερμοκρασίας ( $10^0$  K) και το φάσμα φωταύγειας καταγράφεται. Μια σύγκριση του μεγέθους των νησίδων, υπολογισμένου με βάση τα ημισφαίρια, με το μέγεθος του αρχικού λεπτού στρώματος CsCl είναι σε πλήρη αντιστοιχία τάξης. Η βασική αιτία που οδηγεί στη διάσπαση του στρώματος και στη δημιουργία των νησίδων είναι η τάση για ελαχιστοποίηση της ελεύθερης ενέργειας επιφάνειας. Οι συνθήκες χάραξης που αποδείχθηκε ότι είναι επαρκείς για τη δημιουργία κατάλληλων κατασκευών μορφής στηλών στο εργαστήριο ήταν  $\text{BCl}_3$  σε πίεση 13 mTorr και ροή 25 sccm.

Τα φάσματα (PL) φωταύγειας των δειγμάτων GaAs διεγέρθηκαν με τη χρήση δέσμης λέιζερ αργού των 514,5 nm και κρατήθηκαν σε κρυστάτη  $10^0$  βαθμών Kelvin. Η φωτεινότητα διαθλάσθηκε με ένα 0,85m διπλό μονοχρωματιστή και εντοπίσθηκε με τη βοήθεια φωτοενισχυτή GaAs (που βασίζεται σε τεχνικές μέτρησης φωτονίων).

Τα κυριότερα χαρακτηριστικά των (PL) φασμάτων ήταν :

**(a)** Ημιενισχυμένο GaAs δύο ιδιοτήτων :

**(I)** Ελεύθερη εκπομπή της τάξης των 1,515 eV.

**(II)** Εκπομπή που συνδυάζει ελεύθερα (φωτογεννηθέντα) ηλεκτρόνια με ουδέτερους ανθρακικούς αποδέκτες της τάξης των 1,493 eV.

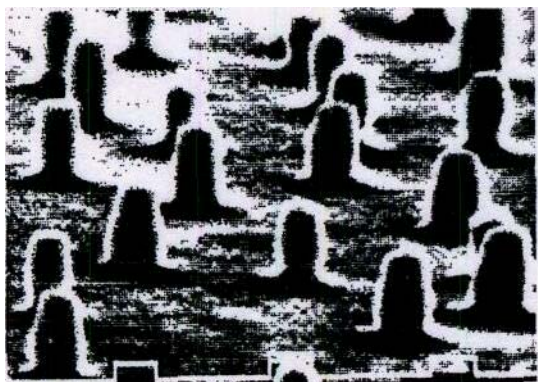
**(b)**  $n^+$  GaAs : Στους 10 Βαθμούς Kelvin η διανομή των ηλεκτρονίων και οι κορυφές εκπομπών είναι μεγάλες με μία ακραία αποκοπή στην υψηλή πλευρά της ενέργειας Fermi.

Έχοντας ερευνήσει τα PL φάσματα των υγρής χάραξης και RIE GaAs δειγμάτων δεν βρίσκουμε εμφανή διαφορά μεταξύ τους. Συνεπάγεται ότι η φθορά της επιφάνειας GaAs από τις συνθήκες RIE είναι μηδαμινή ενώ δεν είναι ορατά και ηλεκτρονικά επακόλουθα της αλληλεπίδρασης αερίου με τον ημιαγωγό εξαιτίας του RIE.

Αν κάποιος χρησιμοποιήσει ως οδηγό τη θεωρία της δέσμης στο κουτί για να υπολογίσει τις κβαντικές μεταβολές του ενεργειακού επιπέδου των στηλών τότε η έκταση των PL εναλλαγών που παρατηρούνται στην περίπτωση του  $n^+$  GaAs είναι εντυπωσιακή. Αν από την άλλη πλευρά υπάρχει μια μείωση στο μέγεθος εκπομπής της στήλης που οφείλεται στην απομόνωση του φορτίου χώρου τότε τα αποτελέσματα είναι ιδιαίτερα ικανοποιητικά. Αυτό τείνει να εξηγήσει τη διαφορά μεταξύ  $n^+$  και SI (semi-insulating) GaAs. Ένα πληρέστερο μοντέλο των παρατηρουμένων φαινομένων θα πρέπει να λάβει υπόψη του και την αποτελεσματικότητα της εξωτερικής ραδιενέργειας σαν παράγοντα των διαστάσεων της στήλης (είναι αποδεκτό ότι η αποτελεσματικότητα είναι μεγαλύτερη από αυτή που επιτυγχάνεται με γεωμετρικά οπτικά μέσα αφού το μέγεθος στήλης είναι μικρότερο του  $\lambda_0 / n$  όπου  $\lambda_0$  το μήκος κύματος της ραδιενέργειας ανασυγκρότησης και  $n$  το σθένος ανάκλασης του GaAs στο συγκεκριμένο μήκος κύματος.

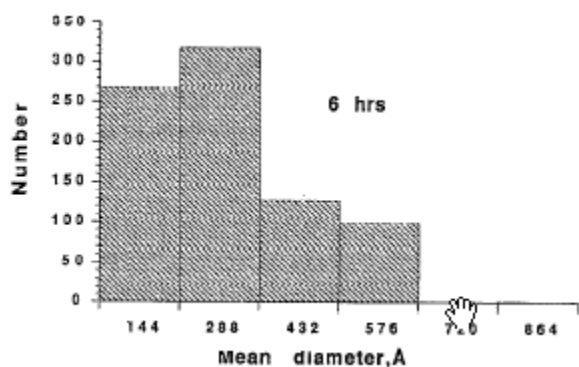
Επιπρόσθετα πειράματα απαιτούνται για την εξαγωγή ασφαλέστερων συμπερασμάτων ενώ επιθυμητή είναι και η μελέτη της επίδρασης στις συχνότητες PL από επιφάνειες υλικών  $n^+$  και SI με τη μορφή στήλης.

**Figure 1.**

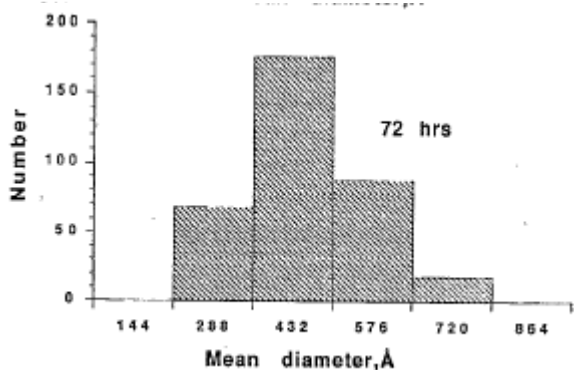
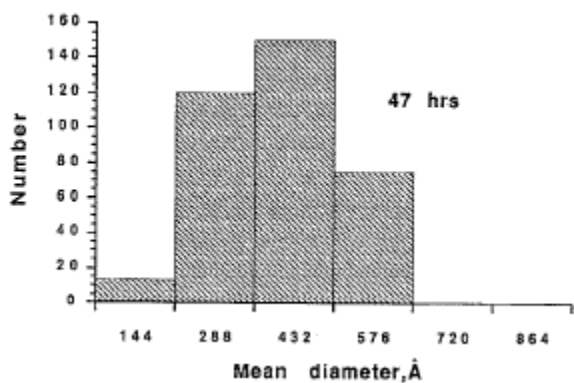


Διάταξη στηλών. SEM φωτογραφία ενός δείγματος GaAs έπειτα από ιοντική χάραξη. Τα χαρακτηριστικά έχουν προκύψει με τη χρήση ημισφαιρικών νησίδων CsCl που λειτουργήσε ως αντιστάτης. Η θέση λήψης της εικόνας είναι  $20^\circ$  ως προς το οριζόντιο επίπεδο. Ενώ το μήκος προσεγγίζει το  $1\mu\text{m}$ .

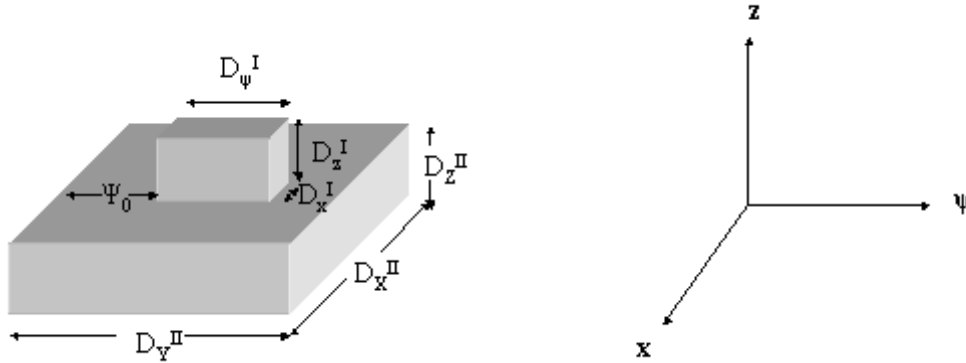
**Figure 2.**



Εξέλιξη κατανομής μεγέθους σημείου για μια αρχικό πάχος CsCl της τάξεως των  $31,4 \text{ \AA}$  που αφέθηκε με ρυθμό  $3,2 \text{ \AA} / \text{sec}$ , διατηρήθηκε σε 22% RH για 7 min και έπειτα μεταφέρθηκε στο συνεχές δωμάτιο RH.



#### 4. Εξισώσεις Schrödinger που καθορίζουν την συμπεριφορά σωματιδίων εντός συστήματος δύο εφαπτόμενων κυβικών αντικειμένων



Οι διαστάσεις των δύο εφαπτόμενων κύβων είναι οι εξής :

Άνω Κύβος (I)  $D_x^I$   $D_ψ^I$   $D_z^I$  για τις διαστάσεις  $x, \psi, z$  αντίστοιχα

Κάτω Κύβος (II)  $D_x^{II}$   $D_ψ^{II}$   $D_z^{II}$  για τις διαστάσεις  $x, \psi, z$  αντίστοιχα

Διαφορίζοντας δύο φορές ως προς τον χώρο την εξίσωση Schrödinger έχουμε ότι είναι :

$$\nabla^2 \psi = -E\psi \Leftrightarrow \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial \psi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi = -E\psi \quad (1)$$

Επίσης έχουμε ότι  $\psi = A(x) \cdot B(\psi) \cdot \Gamma(z) \quad (1)$

$$\Leftrightarrow B(\psi) \cdot \Gamma(z) \cdot \frac{\partial^2 A(x)}{\partial x^2} + A(x) \cdot \Gamma(z) \cdot \frac{\partial^2 B(\psi)}{\partial \psi^2} + A(x) \cdot B(\psi) \cdot \frac{\partial^2 \Gamma(z)}{\partial z^2} = -E \cdot A(x) \cdot B(\psi) \cdot \Gamma(z)$$

$$\Leftrightarrow 1 / A(x) \ddot{A}(x) + 1 / B(\psi) \ddot{B}(\psi) + 1 / \Gamma(z) \ddot{\Gamma}(z) = -E \quad (2)$$

$$\text{Θέτουμε } \ddot{A}(x) / A(x) = -k_x^2 \text{ και } \ddot{B}(\psi) / B(\psi) = -k_\psi^2 \quad (3)$$

Η σχέση (2) γίνεται μέσω των σχέσεων (3) :

$$\Gamma(z) / \Gamma(z) = -E + k_x^2 + k_\psi^2 = -(E - k_x^2 - k_\psi^2) = -k_z^2 \quad (4)$$

$$\text{με } k_x^2 + k_\psi^2 + k_z^2 = E$$

Οι σχέσεις (3) δίνουν ότι :

$$A(x) = C_1 \cos(k_x x) + C_2 \sin(k_x x)$$

$$B(\psi) = C_3 \cos(k_\psi \psi) + C_4 \sin(k_\psi \psi)$$

Και η σχέση (4) δίνει ότι :

$$\Gamma(z) = C_5 \cos(k_z z) + C_6 \sin(k_z z) \quad \text{αν } k_z^2 > 0$$

$$\text{ή } \Gamma(z) = C_5 \cosh(t_z z) + C_6 \sinh(t_z z) \quad \text{αν } k_z^2 = -t_z^2 < 0$$

### Προσδιορισμός των Πεδίων :

Πεδίο Περιοχής (1) (όπου  $z > 0$ )

$$\Phi_1(x, \psi, z) = \sum_{m,n} f_1(x, \psi) \Gamma_1(z)$$

Όπου  $f_1(x, \psi) = \{ C_1 \cos[k_x^I (x + D_x^I / 2)] + C_2 \sin[k_x^I (x + D_x^I / 2)] \}$

$$\bullet \{ C_3 \cos[k_\psi^I (\psi - \psi_0)] + C_4 \sin[k_\psi^I (\psi - \psi_0)] \}$$

$$C_5 \cos[k_z^I (z - D_z^I)] + C_6 \sin[k_z^I (z - D_z^I)] \quad , \text{ αν } k_z^I{}^2 > 0$$

$$\text{και } \Gamma_1(z) = \begin{cases} C_5 \cos[k_z^I (z - D_z^I)] + C_6 \sin[k_z^I (z - D_z^I)] & , \text{ αν } k_z^I{}^2 > 0 \\ C_5 \cosh[t_z^I (z - D_z^I)] + C_6 \sinh[t_z^I (z - D_z^I)] & , \text{ αν } k_z^I{}^2 < 0 \end{cases}$$

### Συνοριακές συνθήκες:

$$X_1 = -D_x^I / 2 \quad \text{για κάθε } \psi, z \quad \Phi_1(x_1, \psi, z) = 0 \Leftrightarrow f_1(x_1, \psi) = 0 \Leftrightarrow C_1 = 0$$

$$X_2 = D_x^I / 2 \quad \text{για κάθε } \psi, z \quad \Phi_1(x_2, \psi, z) = 0 \Leftrightarrow f_2(x_2, \psi) = 0 \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow \sin(k_x^I D_x^I) = 0 \Leftrightarrow k_x^I D_x^I = m\pi \Leftrightarrow k_x^I = m\pi / D_x^I$$

όπου  $m = 0, 1, 2$

$$\text{και } \psi_1 = \psi_0 \quad \text{για κάθε } x, z \quad \Phi_1(x, \psi_1, z) = 0 \Leftrightarrow f_1(x, \psi_1) = 0 \Leftrightarrow C_3 = 0$$

$$\psi_2 = \psi_0 + D_\psi^I \quad \text{για κάθε } x, z \quad \Phi_1(x, \psi_2, z) = 0 \Leftrightarrow f_1(x, \psi_2) = 0 \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow \sin(k_{\psi}^I D_{\psi}^I) = 0 \Leftrightarrow k_{\psi}^I D_{\psi}^I = n\pi \Leftrightarrow k_{\psi}^I = n\pi / D_{\psi}^I$$

όπου  $n = 0, 1, 2$

και  $z_1 = D_z^I$  για κάθε  $x, \psi$        $\Phi_1(x, \psi, z_1) = 0 \Leftrightarrow \Gamma_1(z_1) = 0 \Leftrightarrow C_5 = 0$

Άρα  $\Phi_1(x, \psi, z) = \sum_{m=1}^{+\infty} \sum_{n=1}^{+\infty} A_{m,n} \sin[k_x^I (x + D_x^I / 2)] \sin[k_{\psi}^I (\psi - \psi_0)] \Theta_1(z)$

$$\text{Με } \Theta_1(z) = \begin{cases} \sin[k_z^I (z - D_z^I)] & \text{αν } k_z^{I2} > 0 \\ \sinh[t_z^I (z - D_z^I)] & \text{αν } k_z^{I2} = -t_z^{I2} < 0 \end{cases}$$

Στην περιοχή (2) (όπου  $z < 0$ )

Ομοίως ισχύει ότι  $\nabla^2 \psi = -E\psi$

Γνωρίζοντας ότι σε περιοδικά συστήματα οι γενικές λύσεις των συστημάτων πρέπει να ικανοποιούν σχέσεις της

μορφής  $\psi(x + L) = e^{ikL} \psi(x)$  όπου  $L$  η περίοδος του συστήματος. Δηλαδή  $\psi(x) = U_k(x) e^{ikx}$

Συγκεκριμένα στην περίπτωση μας είναι :

Γενική λύση ως προς  $x$  της μορφής  $U(x) e^{ikx}$  ως προς  $x$

$$\text{με } U(x) = \sum_n a_n e^{ikx} \Rightarrow \sum_n a_n e^{i(kx + 2\pi n/L)x}$$

$$\text{όπου } k_n = 2\pi n/L_x + k_x$$

και γενική λύση ως προς τη  $\psi$  της μορφής :

$$\text{με } U(\psi) = \sum_m \beta_m e^{ikm\psi} \Rightarrow \sum_m \beta_m e^{i(k\psi + 2\pi m/L\psi)\psi}$$

$$\text{όπου } k_m = 2\pi m/L_{\psi} + k_{\psi}$$

$$\text{Επίσης ισχύει ότι : } E^2 = k_n^{II2} + k_m^{II2} + k_{n,m}^{II2}$$

Συνεπώς ισχύει ότι :

$$\Phi_2(x, \psi, z) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} B_{m,n} e^{i(k_n \text{II } x + (k_m \text{II } \psi))} \Theta_2(z)$$

$$\text{Όπου } \Theta_2(z) = \begin{cases} \sin[k_z^{\text{II}}(z + D_z^{\text{II}})] & \text{αν } k_z^{\text{II}2} > 0 \\ \sinh[t_z^{\text{II}}(z + D_z^{\text{II}})] & \text{αν } k_z^{\text{II}2} = (-t_z^{\text{II}2}) < 0 \end{cases}$$

$$\text{και } \Phi_2(x, \psi, z=0) = \begin{cases} 0 & \text{για περιοχή έξω από την στήλη} \\ \Phi_1(x, \psi, z=0) & \text{για την περιοχή εντός της στήλης} \end{cases}$$

Ομοίως  $\partial\Phi_1/\partial z^2 = \partial\Phi_2/\partial z^2$  μέσα στον πυλώνα

$$\sum_{i=-\infty}^{+\infty} \sum_{j=-\infty}^{+\infty} B_{i,j} e^{i(k_i \text{III } x + (k_j \text{III } \psi))} \Theta_2(z=0) =$$

$$\begin{cases} \sum_{m=1}^{+\infty} \sum_{n=1}^{+\infty} A_{m,n} \sin[k_x^{\text{I}}(x + D_x^{\text{I}}/2)] \sin[k_\psi^{\text{I}}(\psi - \psi_0)] \Theta_2(z=0) & \forall x, \psi \in S \\ 0 & \forall x, \psi \notin S \end{cases}$$

$$\mu\epsilon \quad k_i^{\text{II}} = k_x + 2\pi i/D_x^{\text{II}}$$

$$\text{και } k_j^{\text{II}} = k_\psi + 2\pi j/D_\psi^{\text{II}}$$

$$\Leftrightarrow \int_{-D_x^{\text{II}}/2}^{D_x^{\text{II}}/2} dx e^{-ik_i^{\text{II}} x} \int_0^{D_\psi^{\text{II}}} d\psi e^{-ik_j^{\text{II}} \psi} \sum_{i=1}^{+\infty} \sum_{j=1}^{+\infty} B_{i,j} e^{i(k_i \text{III } x + (k_j \text{III } \psi))} \Theta_2(z=0) =$$

$$\int_{-D_x^{\text{I}}/2}^{D_x^{\text{I}}/2} dx e^{-ik_i^{\text{I}} x} \int_{\psi_0}^{\psi_0 + D_\psi^{\text{I}}} d\psi e^{-ik_j^{\text{I}} \psi} \sum_{m=1}^{+\infty} \sum_{n=1}^{+\infty} A_{m,n} \sin[k_x^{\text{I}}(x + D_x^{\text{I}}/2)] \sin[k_\psi^{\text{I}}(\psi - \psi_0)] \Theta_1(z=0)$$

$$\Leftrightarrow \sum_{i=-\infty}^{+\infty} \sum_{j=-\infty}^{+\infty} B_{i,j} \Theta_2(z=0) \int_{-D_x^{II}/2}^{D_x^{II}/2} dx e^{-i(k_i^{II} - k_j^{II})x} dx \int_0^{D_\psi^{II}} e^{-i(k_j^{II} - k_i^{II})\psi} d\psi =$$

$$= \sum_{m=1}^{+\infty} \sum_{n=1}^{+\infty} A_{m,n} \Theta_1(z=0) \int_{-D_x^I/2}^{D_x^I/2} e^{-ik_m^I x} \sin[k_m^I (x+D_x^I/2)] dx \int_{\psi_0}^{\psi_0+D_\psi^I} e^{-ik_n^I \psi} \sin[k_n^I (\psi-\psi_0)] d\psi \quad (5)$$

$$\text{Είναι } I_{i,i'} = \int_{-D_x^{II}/2}^{D_x^{II}/2} dx e^{-i(k_i^{II} - k_{i'}^{II})x} dx = D_x^{II} \delta_{i,i'}$$

$$\text{και } I_{j,j'} = \int_0^{D_\psi^{II}} d\psi e^{-i(k_j^{II} - k_{j'}^{II})\psi} d\psi = D_\psi^{II} \delta_{j,j'}$$

Επίσης έχουμε ότι :

$$I_{i'm} = \int_{-D_x^I/2}^{D_x^I/2} e^{-ik_i'^I x} \sin[k_m^I (x+D_x^I/2)] dx$$

$$\text{Θέτουμε } \xi = x+D_x^I/2 \Rightarrow x = \xi - D_x^I/2 \quad \text{και} \quad D = D_x^I/2$$

Συνεπώς είναι :

$$I_{i'm} = \int_0^{2D} e^{-ik_i'^I (\xi - D)} \sin(k_m^I \xi) d\xi = e^{ik_i'^I D} \int_0^{2D} e^{-ik_i'^I \xi} \sin(k_m^I \xi) d\xi =$$

Αλλά

$$\int_0^{2D} e^{-ik_i'^I \xi} \sin(k_m^I \xi) d\xi = \int_0^{2D} \sin(k_m^I \xi) d\xi \quad [ d e^{-ik_i'^I \xi} / -ik_i'^I ] =$$

$$= (-1 / ik_i'^I) \left\{ \left[ \sin(k_m^I \xi) e^{-ik_i'^I \xi} \right]_0^{2D} - \int_0^{2D} e^{-ik_i'^I \xi} k_m^I \cos(k_m^I \xi) d\xi \right\} =$$



$$\begin{aligned}
&= (-1 / i k_i' \Pi) \int_0^{2D} \sin(k_m^I \xi) e^{-i k_i' \Pi \xi} d\xi + (k_m^I / i k_i' \Pi) \int_0^{2D} \cos(k_m^I \xi) [d e^{-i k_i' \Pi \xi} / -i k_i' \Pi] d\xi = \\
&= (-1 / i k_i' \Pi) \int_0^{2D} \sin(k_m^I \xi) e^{-i k_i' \Pi \xi} d\xi + (k_m^I / k_i' \Pi^2) \int_0^{2D} \cos(k_m^I \xi) e^{-i k_i' \Pi \xi} d\xi - \\
&\quad - (k_m^I / k_i' \Pi^2) \int_0^{2D} e^{-i k_i' \Pi \xi} k_m^I \sin(k_m^I \xi) d\xi \Rightarrow \\
&\Rightarrow [1 - (k_m^I / k_i' \Pi^2)] \int_0^{2D} e^{-i k_i' \Pi \xi} \sin(k_m^I \xi) d\xi = \\
&= (-1 / i k_i' \Pi) \int_0^{2D} \sin(k_m^I \xi) e^{-i k_i' \Pi \xi} d\xi + (k_m^I / k_i' \Pi^2) \int_0^{2D} \cos(k_m^I \xi) e^{-i k_i' \Pi \xi} d\xi
\end{aligned}$$

Συνεπώς είναι :

$$I_{i'm} = \int_{-D_x^I/2}^{D_x^I/2} e^{-i k_i' \Pi x} \sin[k_m^I (x + D_x^I/2)] dx =$$

$$= \exp(-i k_i' \Pi D_x^I/2) \left\{ (-1 / i k_i' \Pi) \int_0^{D_x^I/2} \sin(k_m^I \xi) e^{-i k_i' \Pi \xi} d\xi + (k_m^I / k_i' \Pi^2) \int_0^{D_x^I/2} \cos(k_m^I \xi) e^{-i k_i' \Pi \xi} d\xi / 1 + (k_m^I / k_i' \Pi^2) \right\}$$

όπου είναι :  $k_i' \Pi = k_i' \Pi = i' \pi / D_x^I$  και  $k_m^I = m \pi / D_x^I$

Όμοια προκύπτει ότι :

$$I_{j'n} = \int_{\psi_0}^{\psi_0 + D_\psi^I} e^{-i k_j' \Pi \psi} \sin[k_n^I (\psi - \psi_0)] d\psi$$

Θέτουμε  $\xi = \psi - \psi_0$  και δουλεύοντας όπως και προηγούμενα προκύπτει ότι :

$$I_{j'n} = \exp(-i k_j' \Pi \psi_0) \left\{ (-1 / i k_j' \Pi) \int_0^{D_\psi^I} \sin(k_n^I \xi) e^{-i k_j' \Pi \xi} d\xi + (k_n^I / k_j' \Pi^2) \int_0^{D_\psi^I} \cos(k_n^I \xi) e^{-i k_j' \Pi \xi} d\xi / 1 + (k_n^I / k_j' \Pi^2) \right\}$$

όπου  $k_j' \Pi = k_j' \Pi = j' \pi / D_\psi^I$  και  $k_n^I = n \pi / D_\psi^I$

Αντικαθιστώντας τα προηγούμενα αποτελέσματα στη σχέση (5) προκύπτει ότι :

$$\sum_{i=-\infty}^{\infty} \sum_{j=-\infty}^{\infty} B_{ij} \Theta_2 D_x^{II} \delta_{i'j'} D_\psi^{II} \delta_{jj'} = \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} A_{mn} \Theta_1 I_{i'm} I_{j'n} \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow B_{ij} = (1 / \Theta_2 D_x^{II} D_\psi^{II}) \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} A_{mn} \Theta_1 I_{i'm} I_{j'n} \quad (6)$$

Από τη δεύτερη συνοριακή συνθήκη για  $z=0$  έχουμε δεδομένης της συνέχειας των συναρτήσεων  $\Phi_1$  και  $\Phi_2$  ότι :

$$\begin{aligned} \partial\Phi_1/\partial z^2 = \partial\Phi_2/\partial z^2 &\Rightarrow \sum_{m=1}^{+\infty} \sum_{n=1}^{+\infty} A_{mn} \sin[k_m^I(x + D_x^I/2)] \sin[k_n^I(\psi - \psi_0)] \Theta_1(z=0) = \\ &= \sum_{i=-\infty}^{+\infty} \sum_{j=-\infty}^{+\infty} B_{ij} e^{ki II x} e^{ikj II \psi} \Theta_2(z=0) \quad \text{για κάθε } x, \psi \in S \end{aligned}$$

Άρα είναι :

$$\begin{aligned} &\int_{-D_x^I/2}^{D_x^I/2} \sin[k_m^I(x + D_x^I/2)] dx \int_{\psi_0}^{\psi_0 + D_\psi^I} \sin[k_n^I(\psi - \psi_0)] d\psi \sum_{m=1}^{+\infty} \sum_{n=1}^{+\infty} A_{mn} \sin[k_m^I(x + D_x^I/2)] \sin[k_n^I(\psi - \psi_0)] \Theta_1 = \\ &= \int_{-D_x^I/2}^{D_x^I/2} \sin[k_m^I(x + D_x^I/2)] dx \int_{\psi_0}^{\psi_0 + D_\psi^I} \sin[k_n^I(\psi - \psi_0)] d\psi \sum_{i=-\infty}^{+\infty} \sum_{j=-\infty}^{+\infty} e^{ki II x} e^{ikj II \psi} \Theta_2 \Rightarrow \\ &\Rightarrow \sum_{m=1}^{+\infty} \sum_{n=1}^{+\infty} A_{mn} \Theta_1 D_x^I/2 \delta_{mm'} D_\psi^I/2 \delta_{nn'} = \sum_{i=-\infty}^{+\infty} \sum_{j=-\infty}^{+\infty} B_{ij} \Theta_2 J_{m'I} J_{n'j} \Rightarrow \\ &\Rightarrow A_{m'n'} \Theta_1 (D_x^I D_\psi^I/4) = \sum_{i=-\infty}^{+\infty} \sum_{j=-\infty}^{+\infty} B_{ij} \Theta_2 J_{m'I} J_{n'j} \quad (7) \end{aligned}$$

όπου :

$$J_{m'I} = \int_{-D_x^I/2}^{D_x^I/2} e^{iki II x} \sin[k_m^I(x + D_x^I/2)] dx = I_{i'm} = J^x(k_m^I, k_i^{II})$$

και :

$$J_{n'j} = \int_{\psi_0}^{\psi_0 + D_\psi^I} e^{ikj II \psi} \sin[k_n^I(\psi - \psi_0)] d\psi = I_{j'n} = J^\psi(k_n^I, k_j^{II})$$

Θέτουμε :

$$R_1(k_m^I, k_i^{II}) = I_{i'm} = J_{mi}$$

$$R_2(k_n^I, k_j^{II}) = I_{jn} = J_{nj}$$

Αντικαθιστώντας στις σχέσεις (6) και (7) έχουμε αντιστοιχα :

$$(6) \Rightarrow B_{ij} = (1 / D_x^{II} D_\psi^{II} \Theta_2) \sum_{m=1}^{+\infty} \sum_{n=1}^{+\infty} A_{mn} \Theta_1 R_1(k_m^I, k_i^{II}) R_2(k_n^I, k_j^{II}) \quad (8)$$

$$(7) \Rightarrow A_{m'n'} \Theta_1 (D_x^I D_\psi^I / 4) = \sum_{i=-\infty}^{+\infty} \sum_{j=-\infty}^{+\infty} B_{ij} \Theta_2 R_1(k_m^I, -k_i^{II}) R_2(k_{n'}^I, -k_j^{II}) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow A_{mn} \Theta_{1mn} (D_x^I D_\psi^I / 4) = \sum_{i=-\infty}^{+\infty} \sum_{j=-\infty}^{+\infty} \Theta_2 R_1(k_m^I, -k_i^{II}) R_2(k_n^I, -k_j^{II}) \cdot$$

$$(1 / D_x^{II} D_\psi^{II} \Theta_2) \sum_{m'=1}^{+\infty} \sum_{n'=1}^{+\infty} A_{m'n'} \Theta_{1m'n'} R_1(k_{m'}^I, k_i^{II}) R_2(k_{n'}^I, k_j^{II}) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow A_{mn} \Theta_{1mn} (D_x^I D_\psi^I D_x^{II} D_\psi^{II} / 4) = \sum_{m'=1}^{+\infty} \sum_{n'=1}^{+\infty} A_{m'n'} \Theta_{1m'n'} \sum_{i=-\infty}^{+\infty} \sum_{j=-\infty}^{+\infty} \Theta_{2ij} / \Theta_{2ij} \cdot$$

$$R_1(k_{m'}^I, -k_i^{II}) R_2(k_{n'}^I, -k_j^{II}) R_1(k_m^I, k_i^{II}) R_2(k_n^I, k_j^{II}) \quad (9)$$

και

$$B_{ij} = (1 / D_x^I D_\psi^I D_x^{II} D_\psi^{II} \Theta_{2ij}) \sum_{i'=-\infty}^{+\infty} \sum_{j'=-\infty}^{+\infty} B_{i'j'} \Theta_{2i'j'} \sum_{m=1}^{+\infty} \sum_{n=1}^{+\infty} \Theta_{1mn} / \Theta_{1mn} \cdot$$

$$R_1(k_m^I, -k_i^{II}) R_2(k_n^I, -k_j^{II}) R_1(k_{m'}^I, k_{i'}^{II}) R_2(k_{n'}^I, k_{j'}^{II}) \quad (10)$$

## 5. Αριθμητικά αποτελέσματα – Γραφικές παραστάσεις

Όπως έχει γίνει ήδη κατανοητό σκοπός της εργασίας είναι η μελέτη της συμπεριφοράς σωματιδίου εντός συστήματος δύο κύβων που αντικατοπτρίζει την προσομοίωση του φυσικού συστήματος των κβαντικών πυλώνων. Οι κύβοι αυτοί είναι τοποθετημένοι ο ένας πάνω στον άλλο. Ο άνω κύβος με διαστάσεις  $D_x^I, D_\psi^I, D_z^I$  είναι μικρότερος σε όγκο από τον κάτω κύβο στον οποίο και επικάθεται. Απέχει μάλιστα διάστημα  $\Psi_0$  από την άκρη της επιφάνειας του κάτω κύβου στο επίπεδο των  $\Psi$ . Ο κάτω κύβος χαρακτηρίζεται από τις διαστάσεις του  $D_x^{II}, D_\psi^{II}, D_z^{II}$  ως προς τους άξονες  $x, \psi, z$  αντίστοιχα.

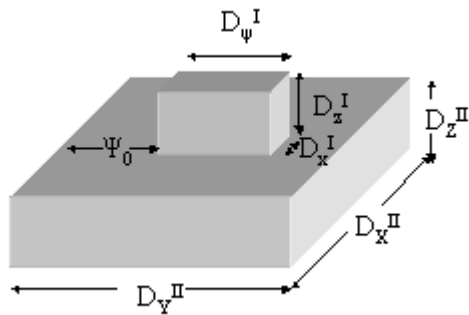
Για την λύση του προβλήματος γράφουμε πρόγραμμα FORTRAN που λύνει τις τελικές εξισώσεις (9) και (10) του Κεφαλαίου 4. Το πρόγραμμα αυτό λαμβάνει ως αρχείο αρχικών τιμών (input file) τις διαστάσεις των δύο κύβων, τον αριθμό των αρμονικών που εκτελούνται και την ακρίβεια εξεύρεσης λύσεων ώστε να επιτευχθούν τα επιθυμητά αποτελέσματα.

Εργαζόμενοι για διαστάσεις  $D_x^I, D_\psi^I, D_z^I$  του άνω κύβου μικρότερες των  $D_x^{II}, D_\psi^{II}, D_z^{II}$  του κάτω κύβου αντίστοιχα προσπαθούμε να βρούμε λύσεις του προγράμματος που παρουσιάζουν φαινόμενα εντοπισμού. Τέτοιες λύσεις είναι εκείνες που εμφανίζουν το υπό μελέτη σωματίδιο να κινείται αποκλειστικά σε έναν από τους δύο κύβους. Τα αποτελέσματα αυτά επιτυγχάνονται κατόπιν μελέτης της κυματομορφής του συστήματος από όπου και προκύπτει ότι μπορούμε να περιορίσουμε την κίνηση του σωματιδίου σε έναν από τους δύο κύβους.

Ιδιαίτερης αξίας είναι η περίπτωση εκείνη που το σωματίδιο εμφανίζεται εγκλωβισμένο στον άνω κύβο. Η διαπίστωση αυτή έχει σπουδαιότητα στον τομέα των κατασκευών της οπτοηλεκτρονικής διότι δίνει την δυνατότητα διαμόρφωσης της συχνότητας εκπομπής ή απορρόφησης EM ακτινοβολίας μέσω της γνωστής σχέσης  $\hbar\omega = E_g$ .

Τα αριθμητικά δεδομένα και οι προκύπτουσες ομάδες λύσεων παρουσιάζονται κατά περίπτωση στις επόμενες σελίδες με τις αντίστοιχες γραφικές παραστάσεις και τις αρχικές συνθήκες που επιβάλλαμε στο πρόγραμμα FORTRAN για την επίτευξή τους.

Στη συνέχεια παρατίθεται το σύστημα των δύο κύβων :



Τα ακόλουθα αριθμητικά δεδομένα είναι οι διαστάσεις των δυο κύβων του προβλήματος και οι αριθμητικοί συντελεστές που αφορούν τον βαθμό ακρίβειας του αποτελέσματος ( π.χ. ο αριθμός των αρμονικών που εκτελούνται )  
Για αυτή την περίπτωση είναι :

**Άνω Κύβος**  $D_x^I=3$   $D_y^I=3$   $D_z^I=3$

**Κάτω Κύβος**  $D_x^{II}=10$   $D_y^{II}=10$   $D_z^{II}=10$

$\Psi_0 = 3.5$  είναι η απόσταση του άνω κύβου από την άκρη της επιφάνειας του κάτω κύβου στον οποίο και είναι τοποθετημένος .

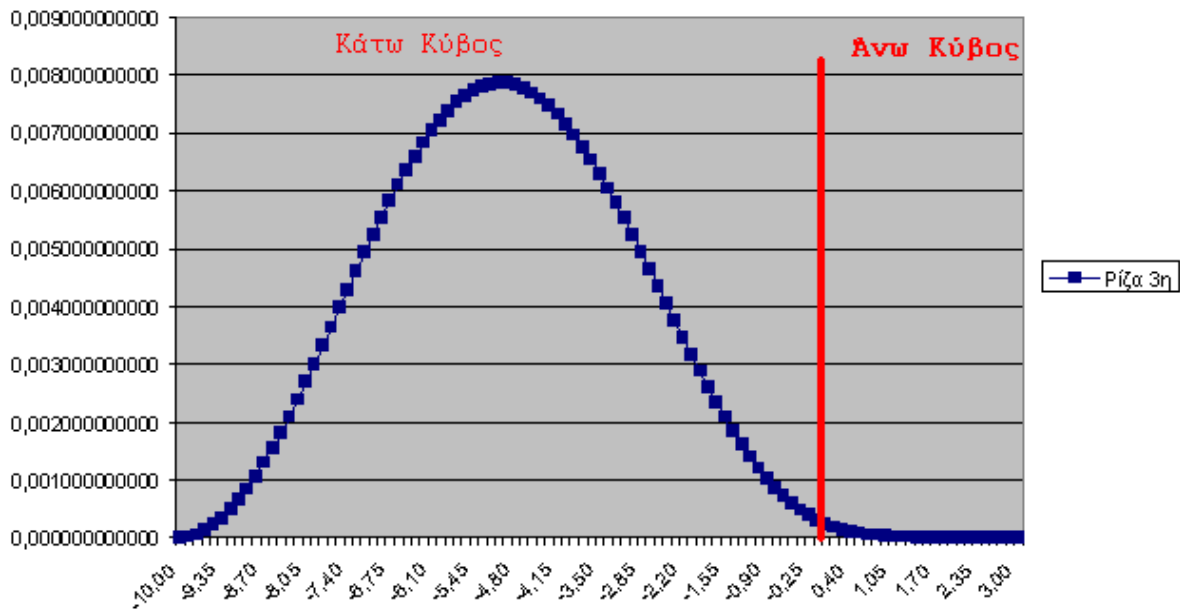
$M_{MAX1}, N_{MAX1}, M_{MAX2}, N_{MAX2}$  είναι ο αριθμός των αρμονικών που εκτελούνται για την εξεύρεση των λύσεων και στην περίπτωση μας είναι

$M_{MAX1} = N_{MAX1} = M_{MAX2} = N_{MAX2} = 5$

Οι τιμές αυτές περιλαμβάνονται στο αρχείο CARTES.dat που είναι το input file του προγράμματος FORTRAN που χρησιμοποιήσαμε και το οποίο είναι συνημμένο στο παράρτημα της εργασίας αυτής.

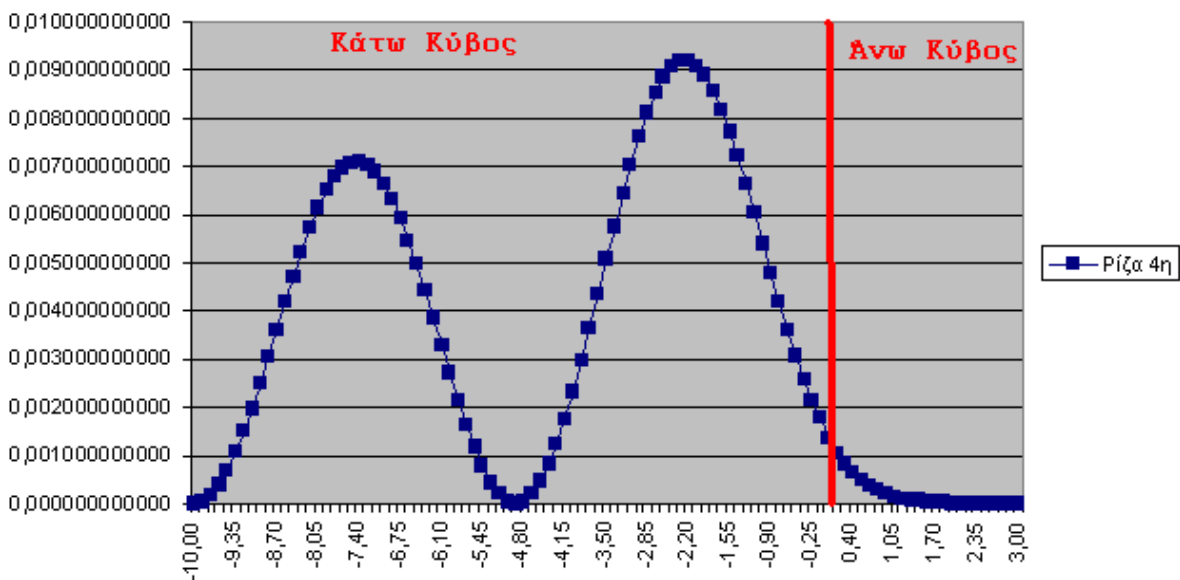
Τα αποτελέσματα που προκύπτουν είναι τα ακόλουθα :

Ρίζα 3η



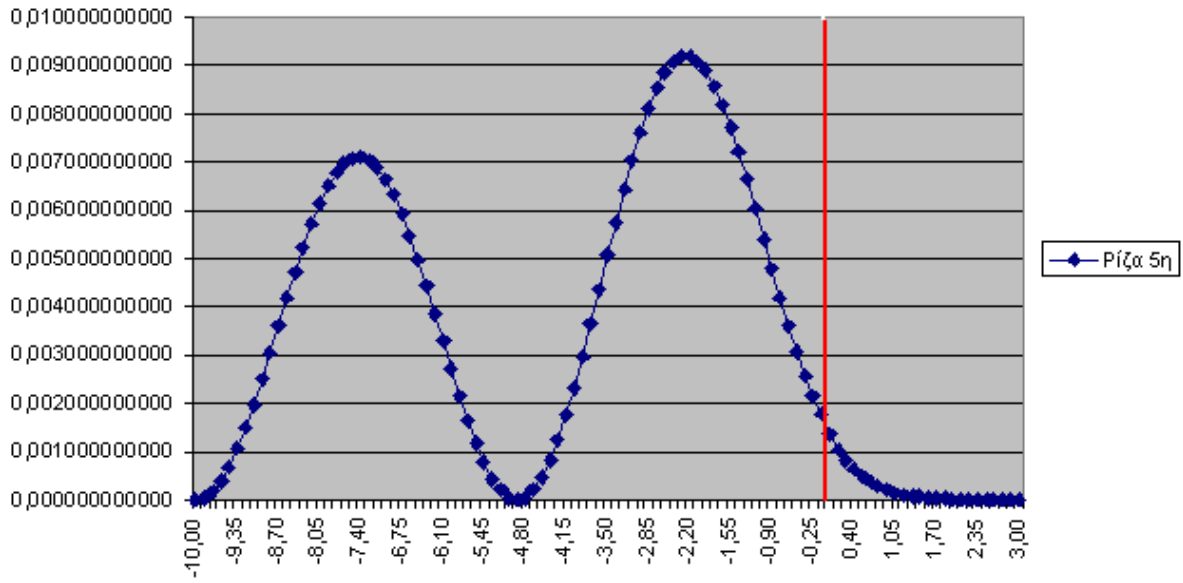
Παρατηρούμε ότι η λύση αυτή είναι περιορισμένη στον κάτω κύβο.

Ρίζα 4η

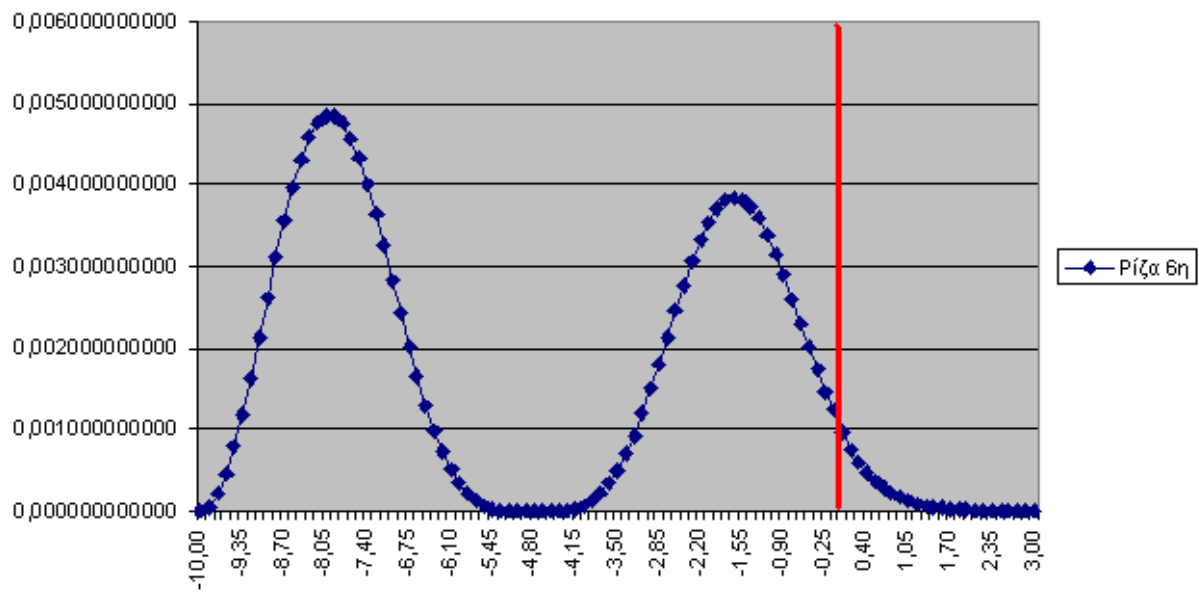


Η συγκεκριμένη ρίζα είναι εγκλωβισμένη και αυτή στον κάτω κύβο ενώ παρουσιάζει δυο καμπύλες στην γραφική της παράσταση .

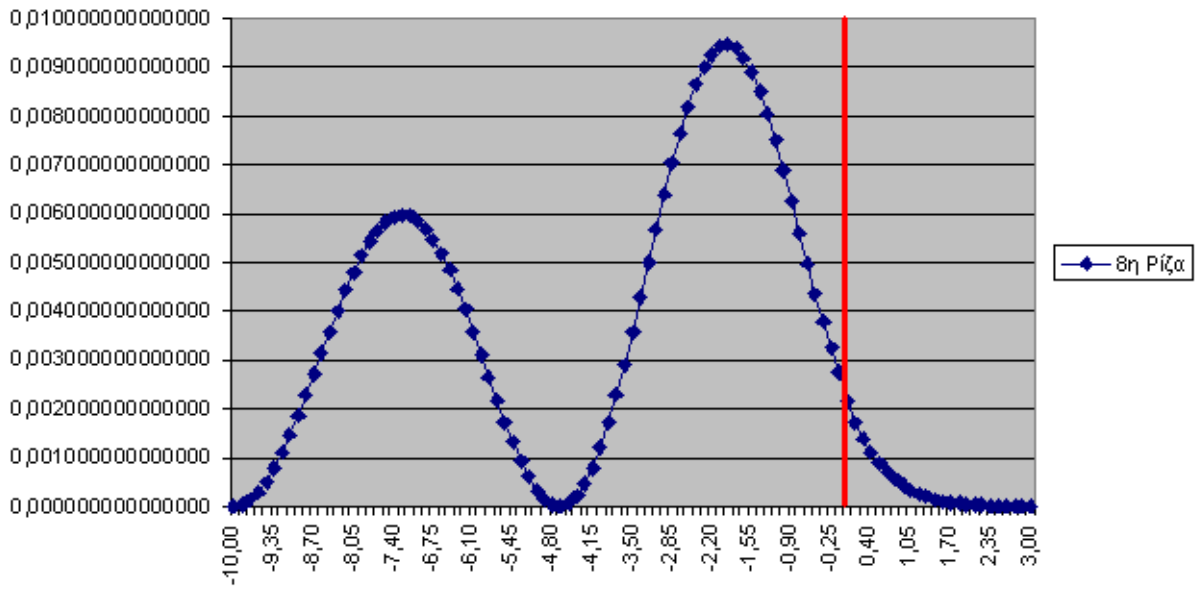
Πίζα 5η



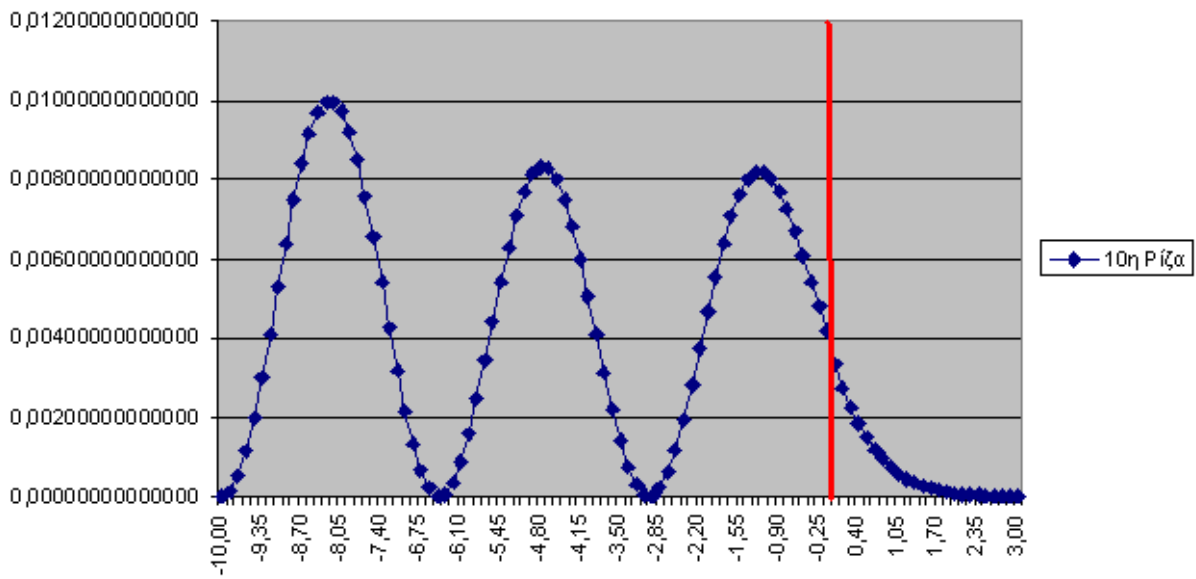
Πίζα 6η



8η Πίζα

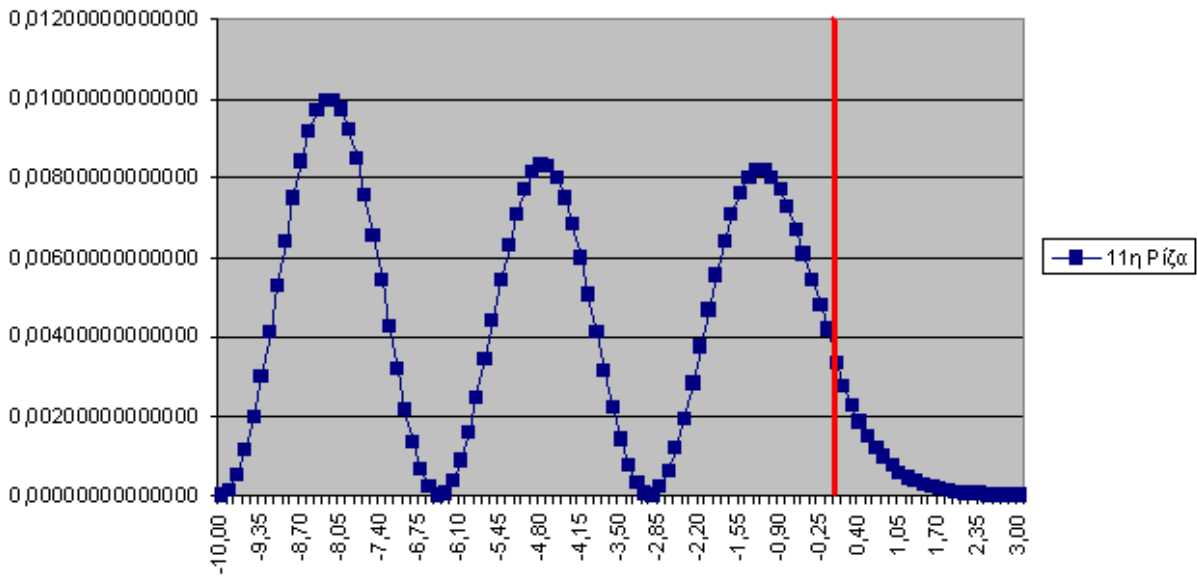


10η Πίζα



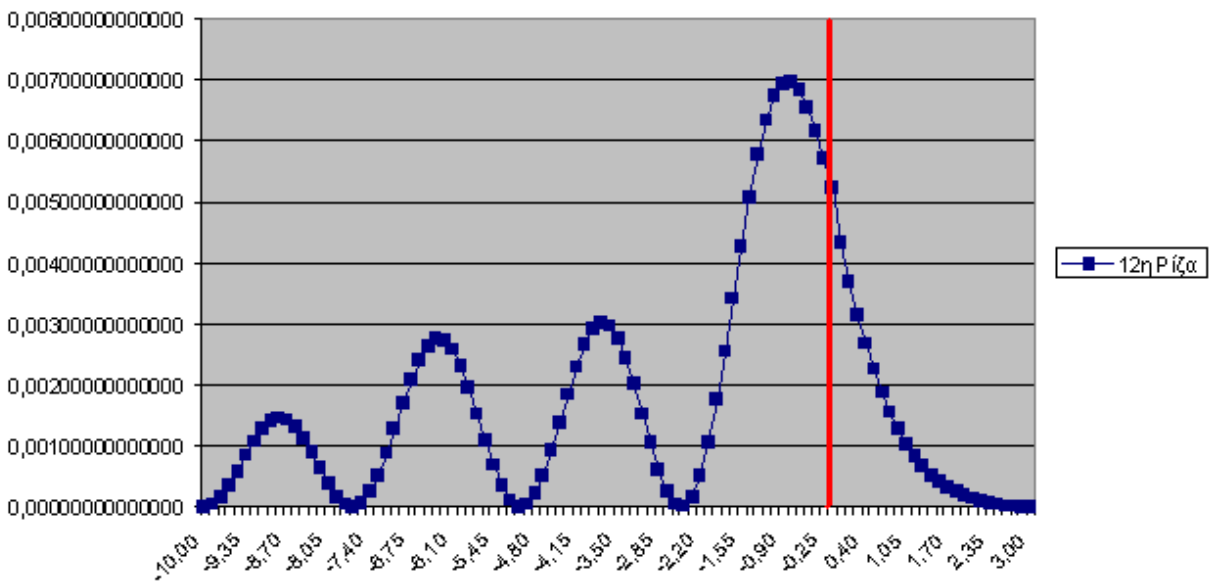


11η Ρίζα

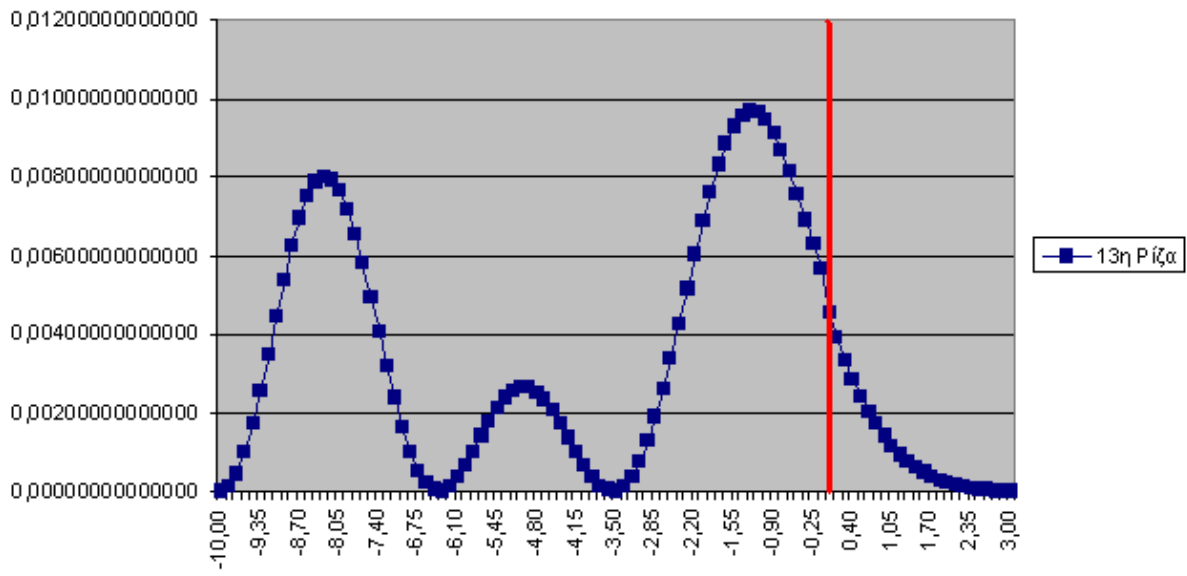


Οι ρίζες που προηγήθηκαν ( 5<sup>η</sup> έως και 11<sup>η</sup>) εμφανίζουν την ίδια μορφή καθώς είναι περιορισμένες εξ' ολοκλήρου στον κάτω κύβο παρουσιάζοντας παραπλήσιο αριθμό καμπυλών στις γραφικές τους παραστάσεις (δύο ή τρεις ανάλογα με την περίπτωση). Για αυτή την ομάδα ριζών το σωματίδιο εμφανίζεται εγκλωβισμένο στον κάτω κύβο .

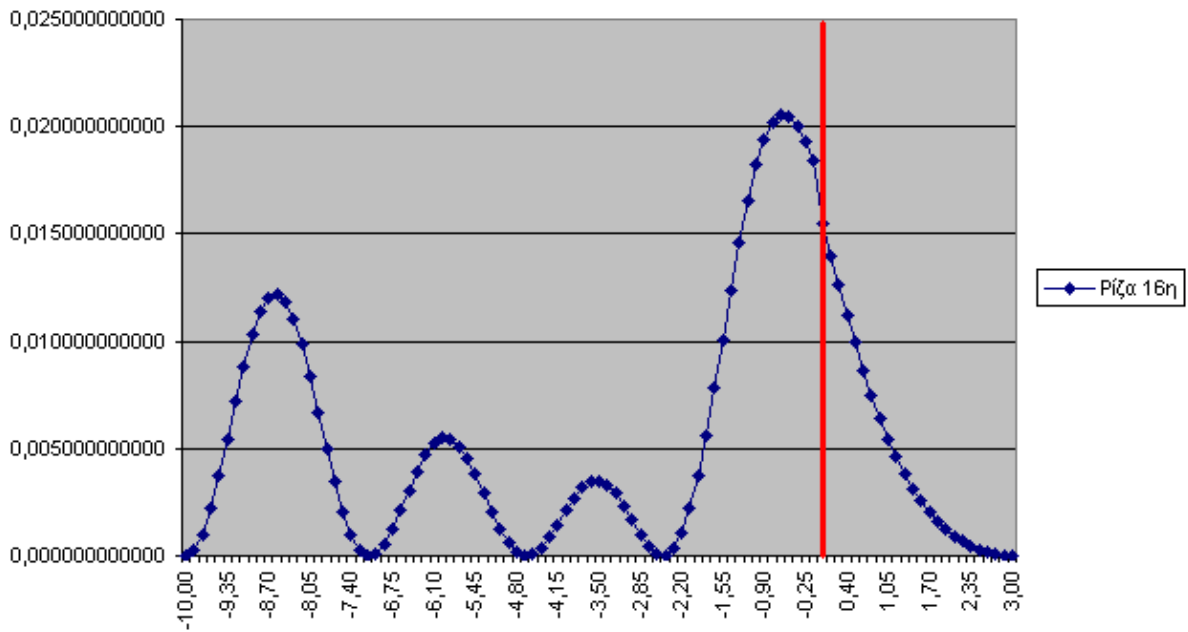
12η Ρίζα



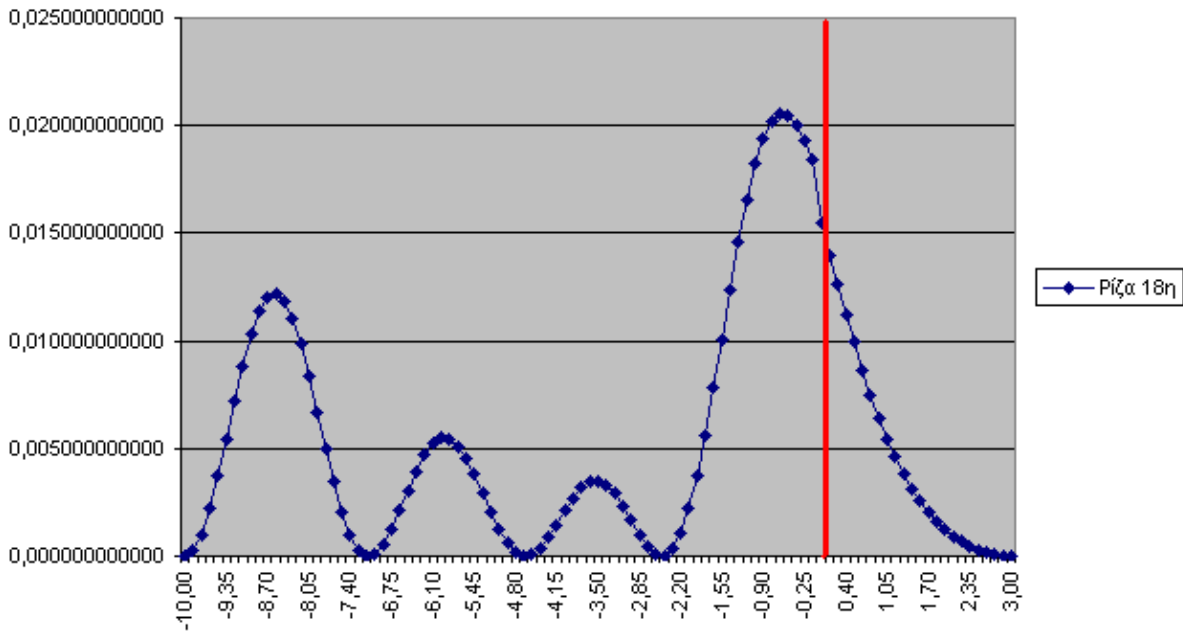
13η Πίζα



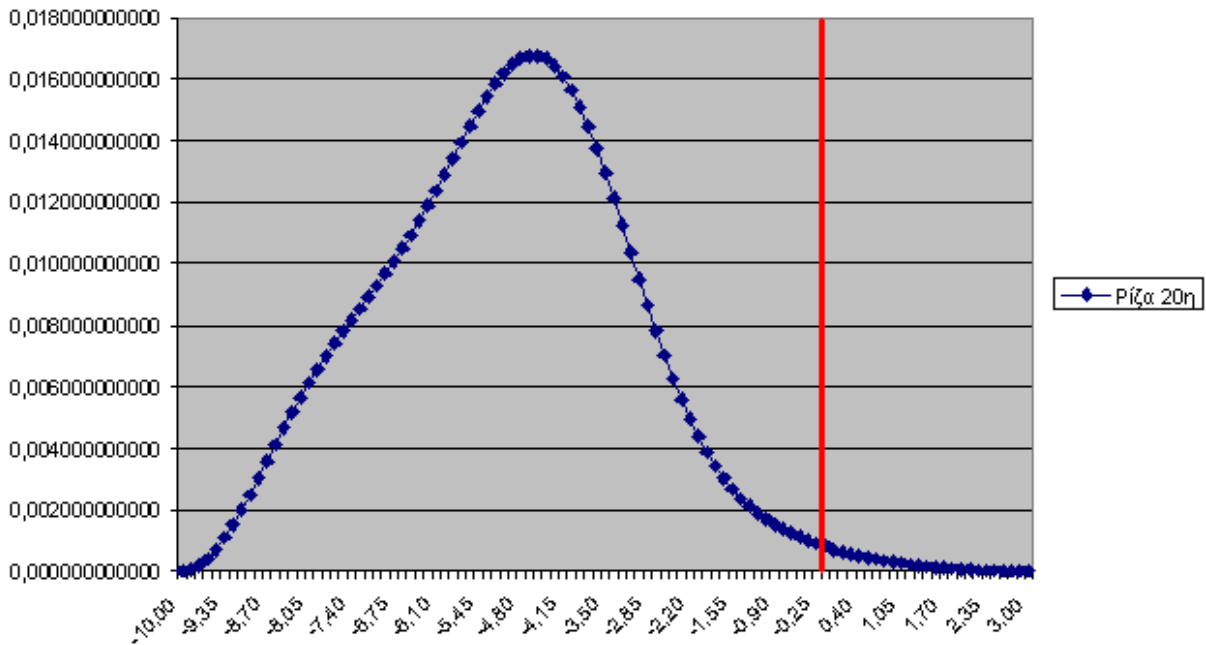
Πίζα 16η



Πίζα 18η

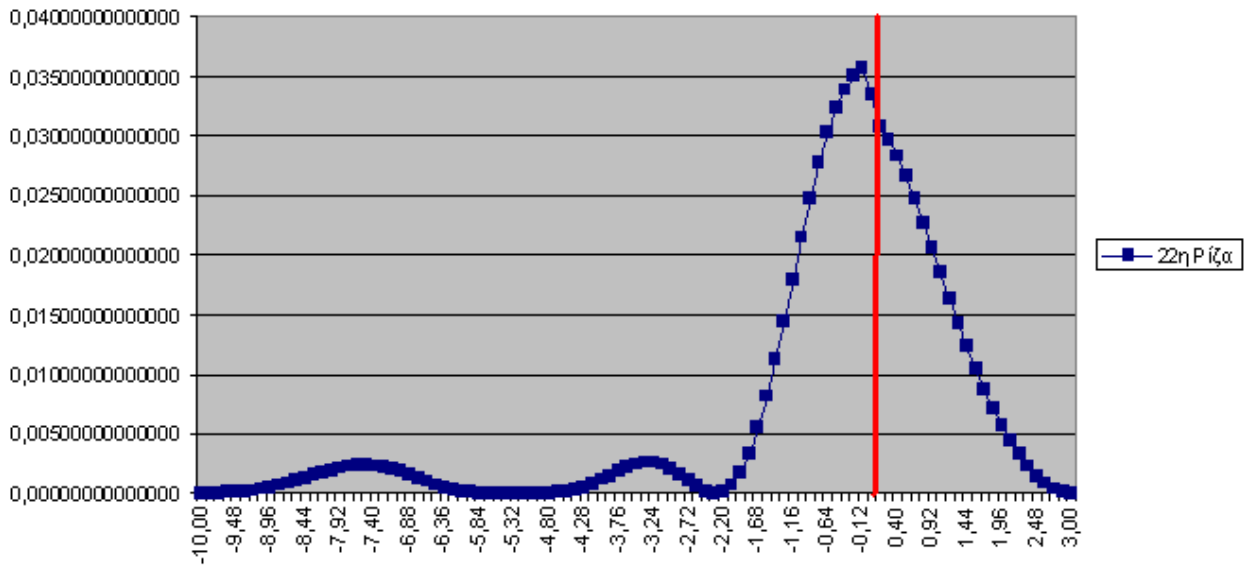


Πίζα 20η



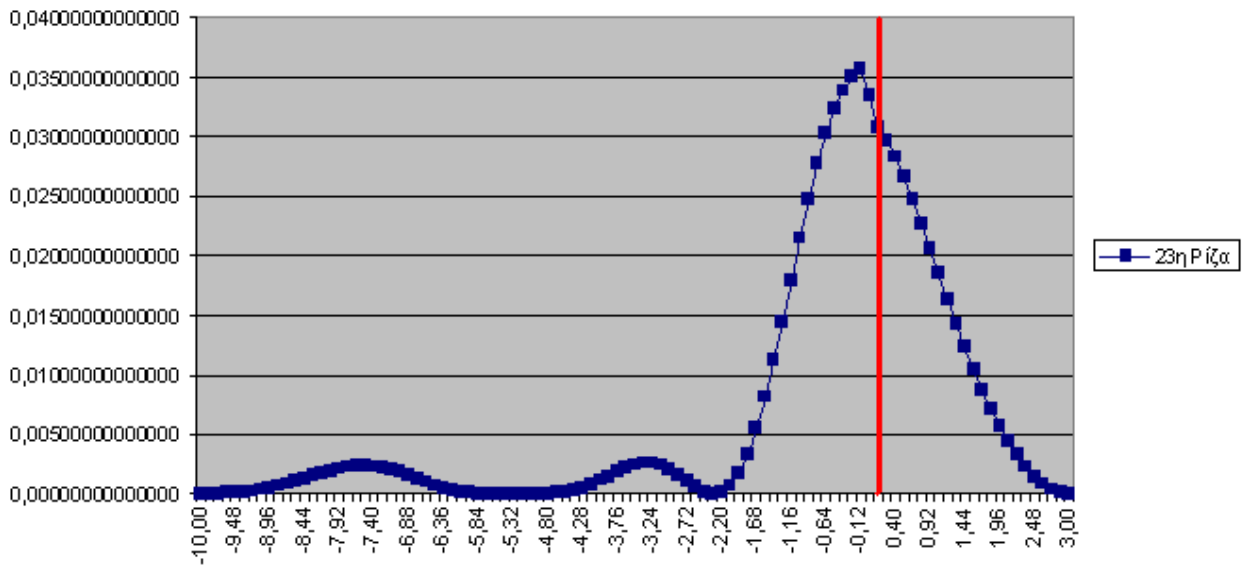
Ισχύει και για αυτήν την λύση η παρατήρηση ότι έχουμε περιορισμό στον κάτω κύβο όπως και στην λύση υπ' αριθμόν 3. Υπάρχει δηλαδή πλήρης εγκλωβισμός του σωματιδίου στον κάτω κύβο.

22η Ρίζα

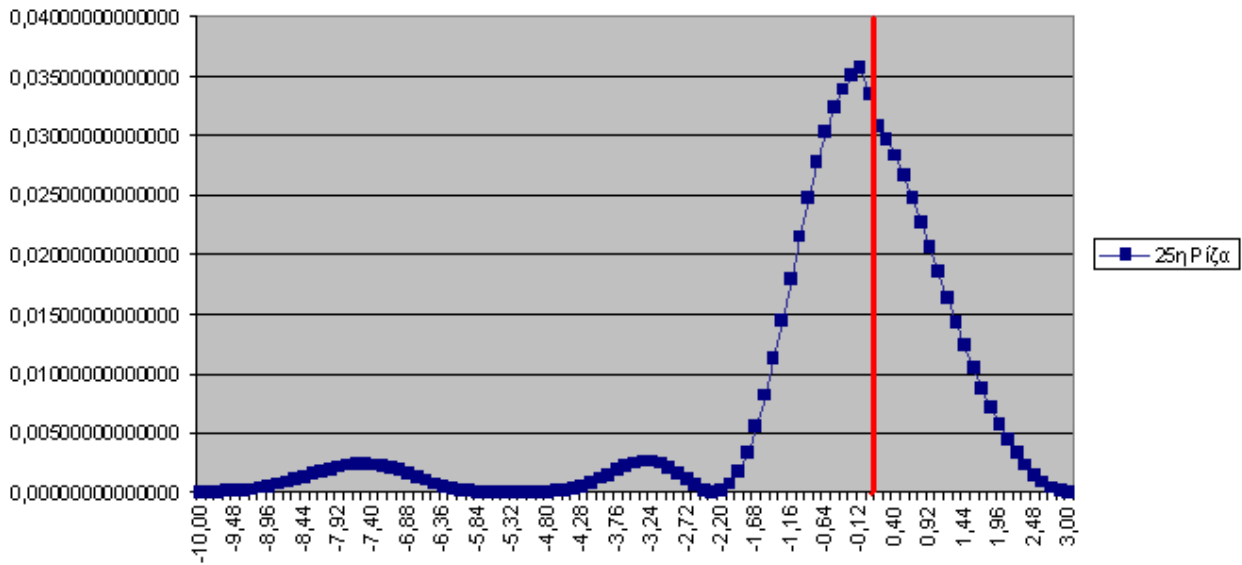


Παρατηρούμε εδώ ότι η λύση περιορίζεται ουσιαστικά στον πάνω κύβο , δηλαδή τα σωματίδια παγιδεύονται εξ' ολοκλήρου στον πάνω κύβο.

23η Ρίζα

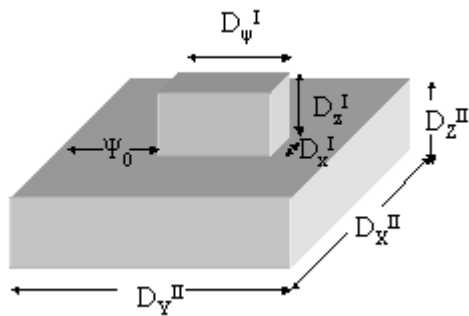


25η Πίζα



Είναι εμφανές ότι ο περιορισμός της λύσης στον πάνω κύβο διαρκεί για συγκεκριμένο αριθμό λύσεων (22, 23, 24 και 25). Η διαπίστωση αυτή είναι σημαντική καθώς συνεπάγεται τον εγκλωβισμό του σωματιδίου αποκλειστικά στον πάνω κύβο ακόμη και στην περίπτωση που η επιφάνεια επαφής των δύο κύβων δεν υπήρχε καθόλου (δηλαδή το σύστημα των δύο κύβων θα επικοινωνούσε εσωτερικά). Το φαινόμενο αυτό που χαρακτηρίζει το κρυσταλλικό πλέγμα συγκεκριμένων μετάλλων όπως το πυρίτιο έχει εξέχουσα σημασία για τον τομέα της οπτικής ηλεκτρονικής και τις εφαρμογές της (π.χ. οπτικές ίνες).

Για την περαιτέρω επίλυση του προβλήματος έχουμε τις εξής δεδομένα :



Τα ακόλουθα αριθμητικά δεδομένα είναι οι διαστάσεις των δυο κύβων του προβλήματος και οι αριθμητικοί συντελεστές που αφορούν τον βαθμό ακρίβειας του αποτελέσματος.

Για αυτή την περίπτωση είναι :

**Άνω Κύβος**  $D_x^I=3$   $D_{\psi}^I=3$   $D_z^I=3$

**Κάτω Κύβος**  $D_x^{II}=10$   $D_{\psi}^{II}=10$   $D_z^{II}=10$

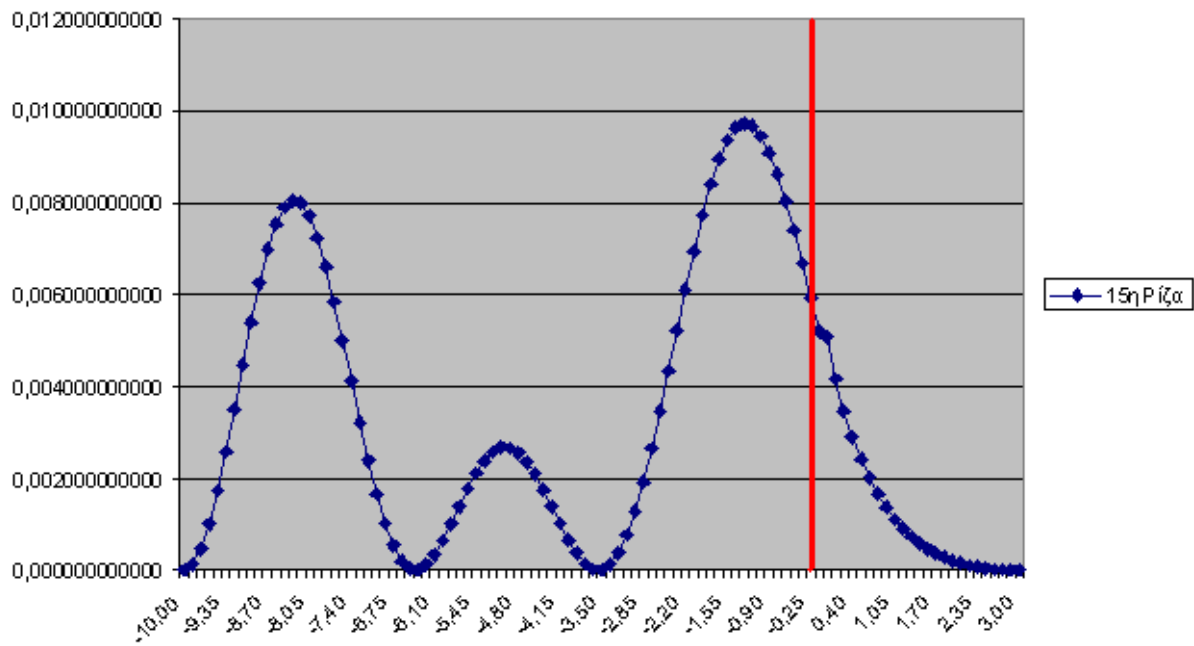
ενώ ο αριθμός των αρμονικών είναι ίσος με έξι ,

( $M_{MAX1} = N_{MAX1} = M_{MAX2} = N_{MAX2} = 6$ ) .Αυτή είναι και η μοναδική διαφορά σε σχέση με τις αρχικές συνθήκες που δίνουμε στο πρόγραμμά μας σε σχέση με την προηγούμενη ομάδα λύσεων. Τα  $E1, E2, DE, TOL, NSP$  παραμένουν όπως και στην προηγούμενη περίπτωση τα ίδια.

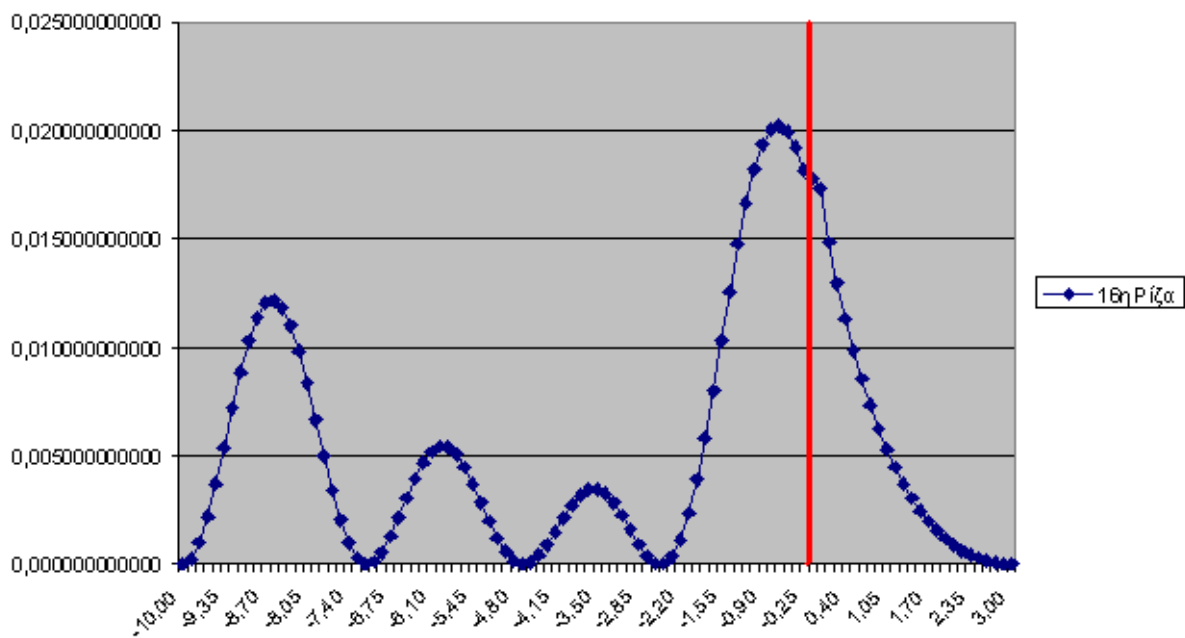
Οι τιμές αυτές περιλαμβάνονται στο αρχείο `CARTES.dat` που είναι το input file του προγράμματος FORTRAN που χρησιμοποιήσαμε.

Τα αποτελέσματα που προκύπτουν είναι τα ακόλουθα :

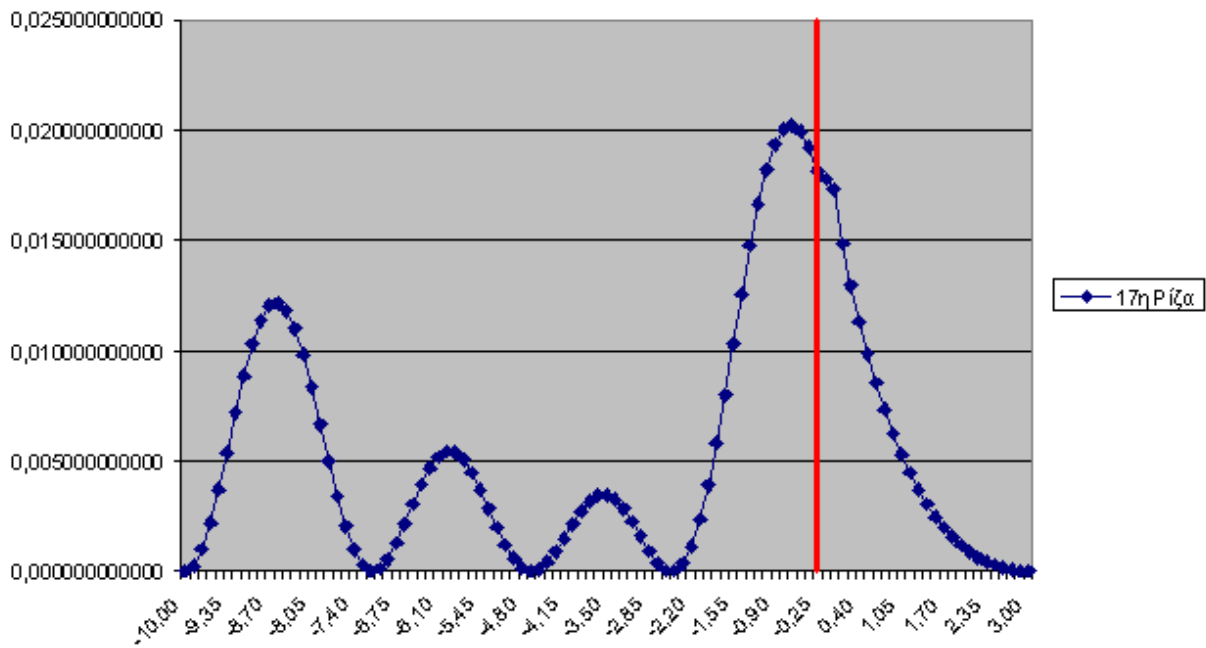
15η Ρίζα



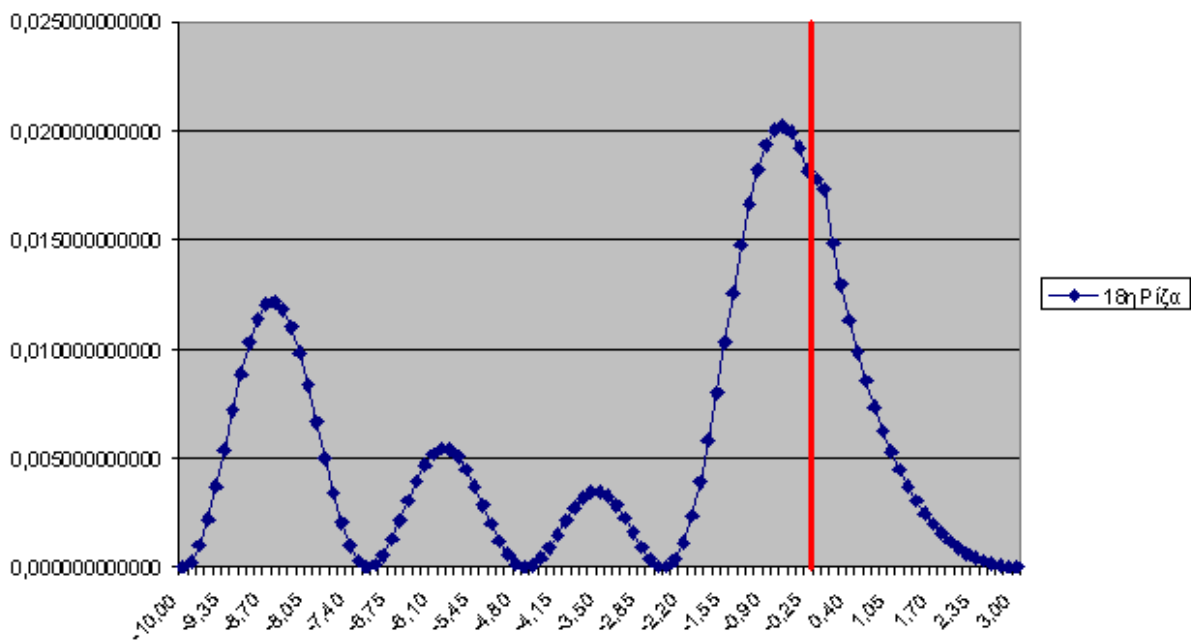
16η Ρίζα



17η Ρίζα

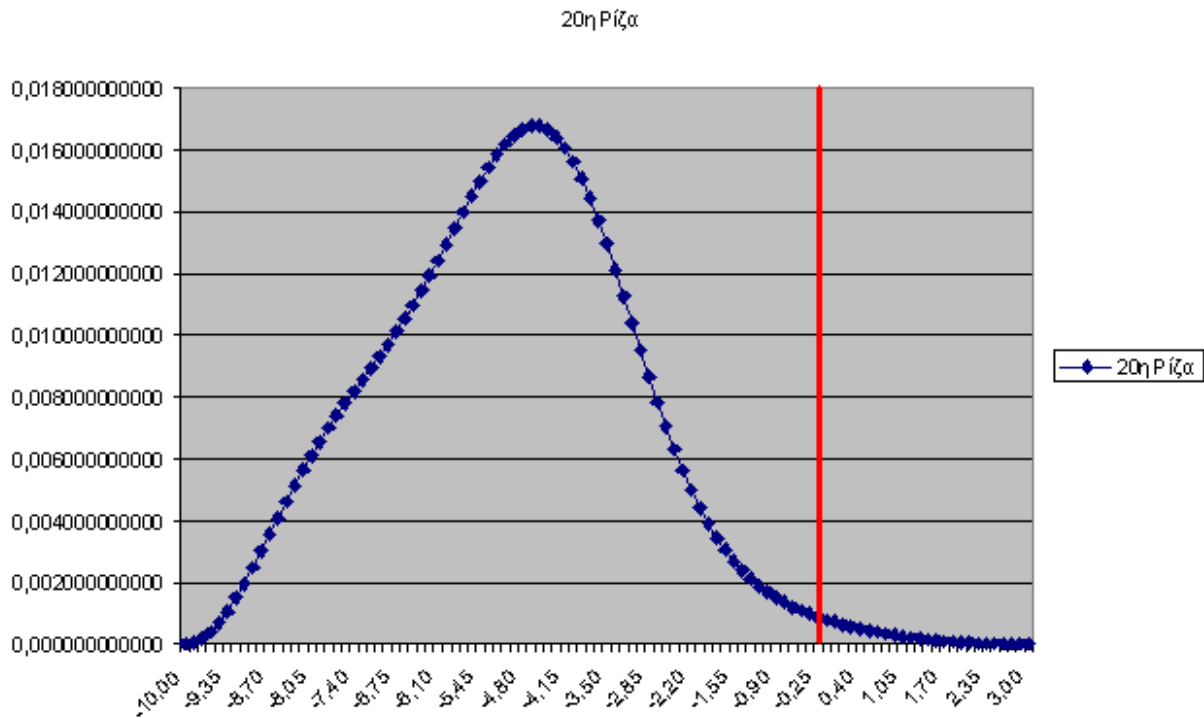


18η Ρίζα



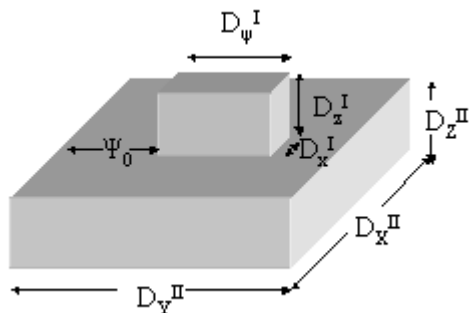
Οι ρίζες 15<sup>η</sup> έως 18<sup>η</sup> περιορίζονται αποκλειστικά στον κάτω κύβο ενώ μοιάζουν εξαιρετικά με τις αντίστοιχες λύσεις της προηγούμενης περίπτωσης γεγονός που είναι αυτονόητο.





Παρατηρούμε ότι για αυτή την λύση έχουμε περιορισμό στον κάτω κύβο. Το ίδιο παρατηρήσαμε να συμβαίνει και στην προηγούμενη ομάδα λύσεων (εκεί όμως είχαμε αριθμό αρμονικών ίσο με πέντε) και για τη συγκεκριμένη υπ' αριθμό 20 λύση. Η παρατήρηση αυτή είναι αυτονόητη καθώς το input αρχείο CARTES.dat είναι πανομοιότυπο και στις δυο περιπτώσεις με μόνη διαφορά τον αριθμό αρμονικών που ήδη αναφέραμε ανωτέρω και για τις υπόλοιπες εξ' άλλου λύσεις οι ομοιότητες είναι πασιφανείς και αναμενόμενες.

Αλλάζοντας τώρα διαστάσεις έχουμε ότι:



Τα ακόλουθα αριθμητικά δεδομένα είναι οι διαστάσεις των δυο κύβων του προβλήματος και οι αριθμητικοί συντελεστές που αφορούν τον βαθμό ακρίβειας του αποτελέσματος( π.χ. ο αριθμός των αρμονικών που εκτελούνται).

Για αυτή την περίπτωση είναι :

**Άνω Κύβος**  $D_x^I=5$   $D_y^I=5$   $D_z^I=5$   
**Κάτω Κύβος**  $D_x^{II}=10$   $D_y^{II}=10$   $D_z^{II}=10$

ενώ ο αριθμός των αρμονικών είναι ίσος με τρεις.

Όπου  $\Psi_0 = 2$  είναι η απόσταση του άνω κύβου από την άκρη της επιφάνειας του κάτω κύβου στον οποίο και επικάθεται .

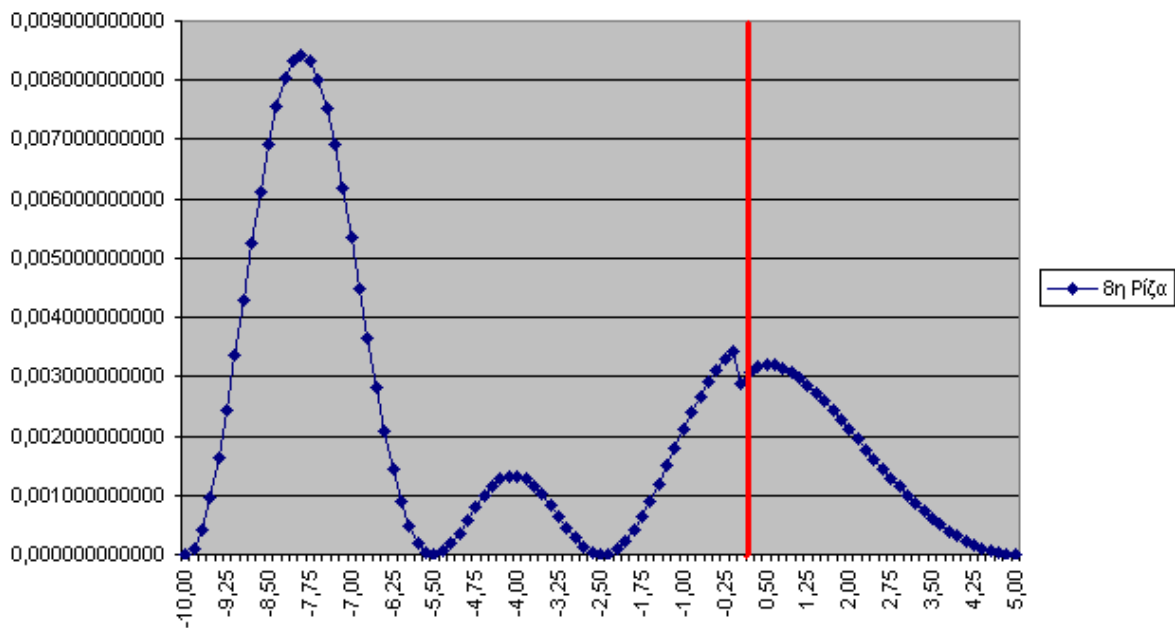
Αντίστοιχα MMAX1,NMAX1,MMAX2,NMAX2 είναι ο αριθμός των αρμονικών που εκτελούνται για την εξεύρεση των λύσεων και στην περίπτωσή μας είναι

$MMAX1 = NMAX1 = MMAX2 = NMAX2 = 3$

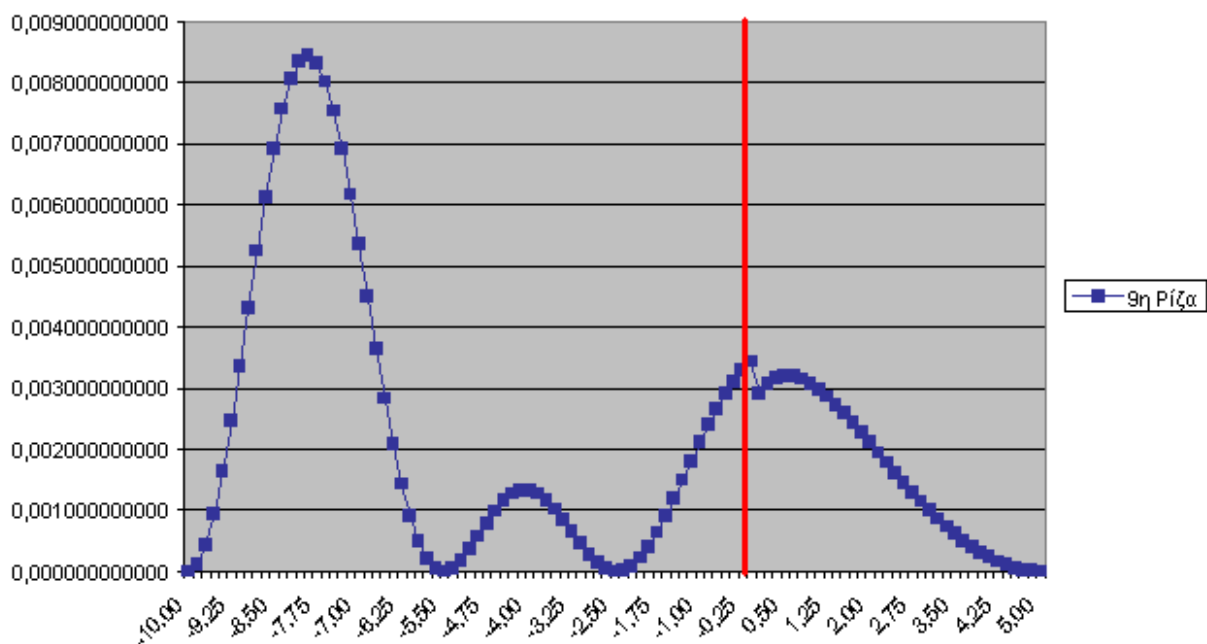
Οι τιμές αυτές περιλαμβάνονται στο αρχείο CARTES.dat που είναι το input file του προγράμματος FORTRAN που χρησιμοποιήσαμε.

Τα αποτελέσματα που προκύπτουν είναι τα ακόλουθα :

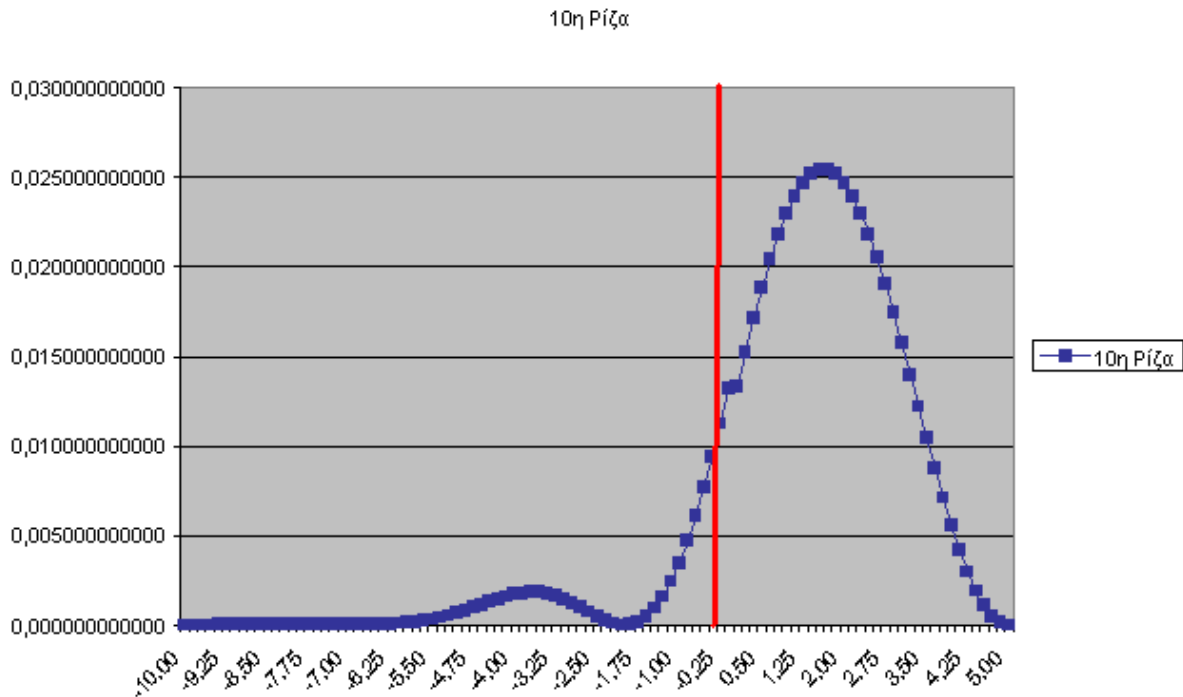
8η Ρίζα



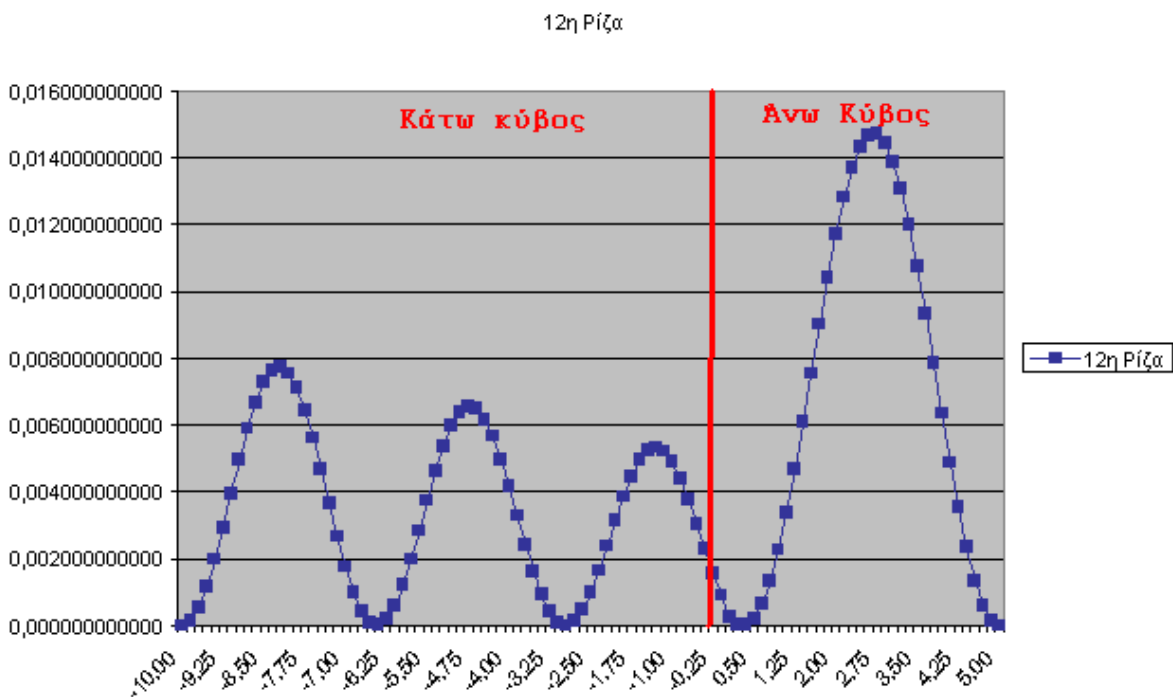
9η Ρίζα



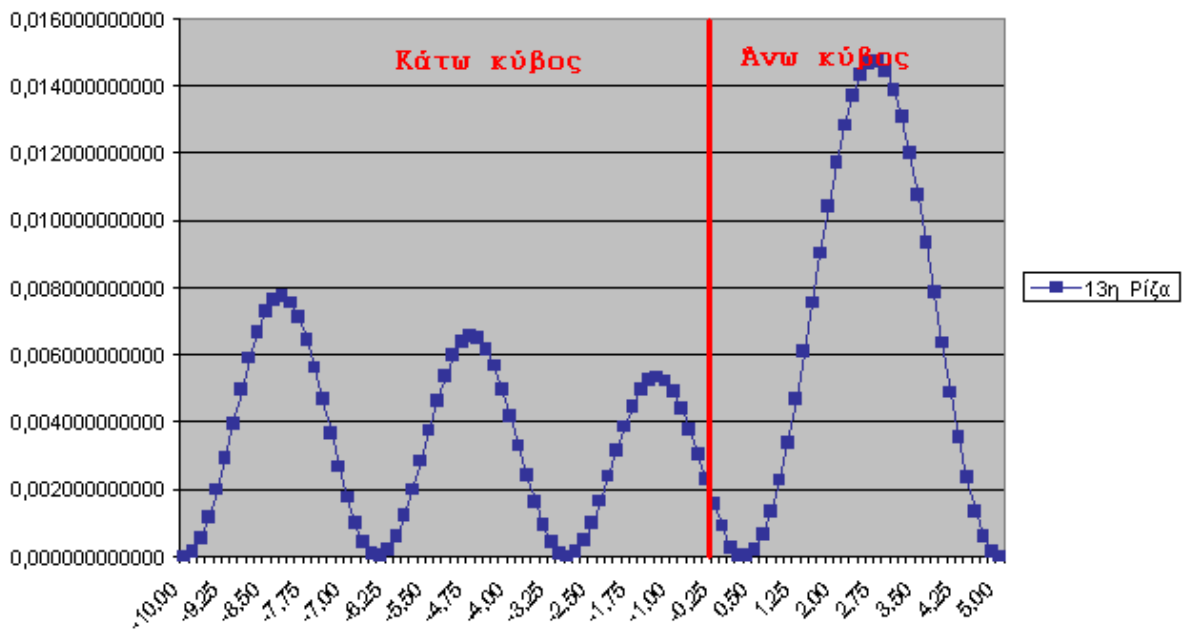
Στις δύο προηγούμενες ρίζες (8<sup>η</sup> και 9<sup>η</sup>) το σωματίδιο εμφανίζεται να κινείται εντός και των δύο κύβων αλλά με μεγαλύτερη διάρκεια στον κάτω .



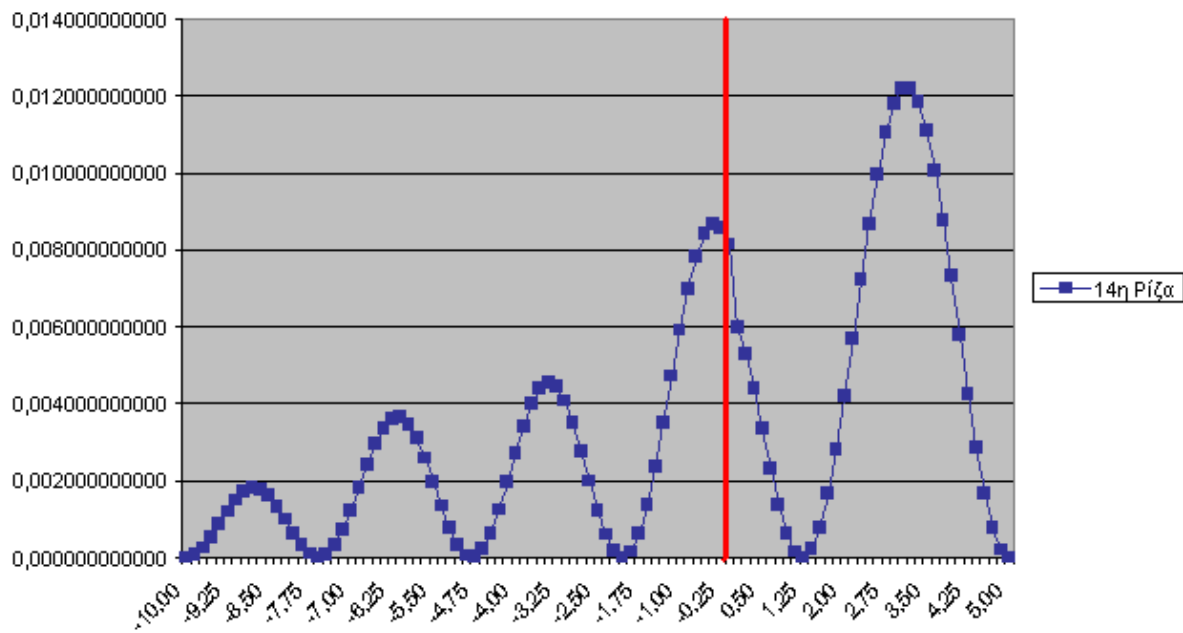
Παρατηρούμε ότι η 10η ρίζα περιορίζεται ουσιαστικά στον πάνω κύβο (εγκλωβισμός των σωματιδίων στον κύβο I) .Το φαινόμενο αυτό είναι όπως αναφέρθηκε και προηγουμένως πολύ σημαντικό για τη θεωρία της οπτοηλεκτρονικής καθώς μπορεί να εφαρμοσθεί για την κατασκευή συγκεκριμένων υλικών που εκμεταλλεύονται αυτή την ιδιότητα του κρυσταλλικού πλέγματος του πυριτίου .



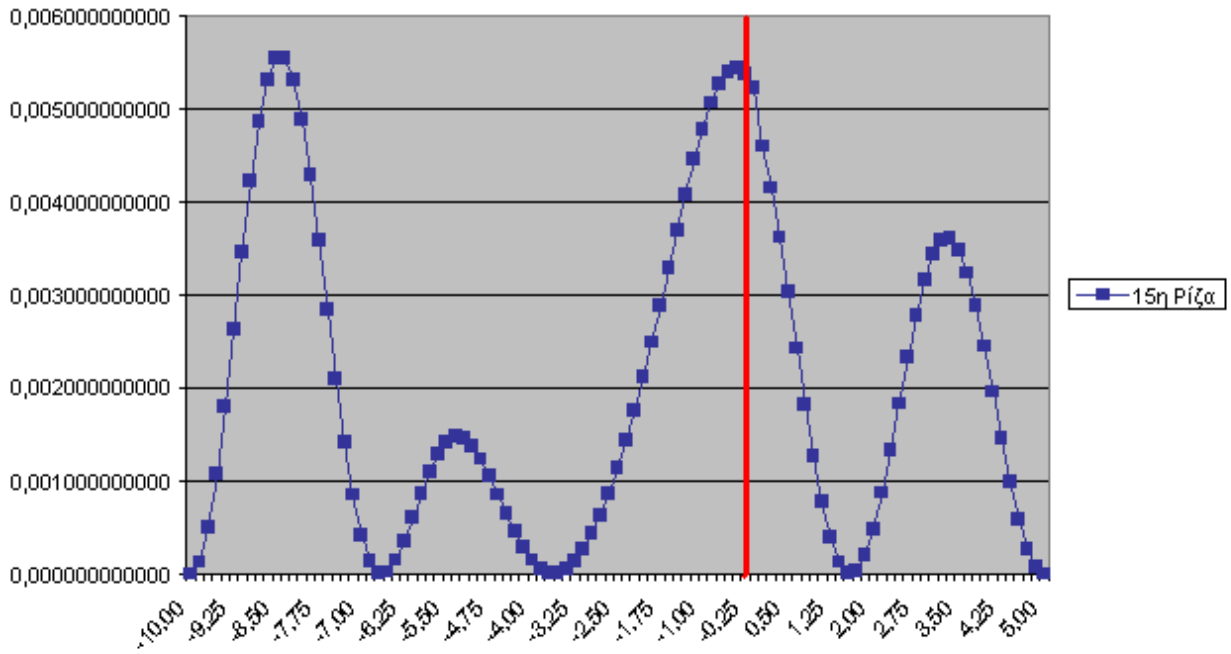
13η Ρίζα



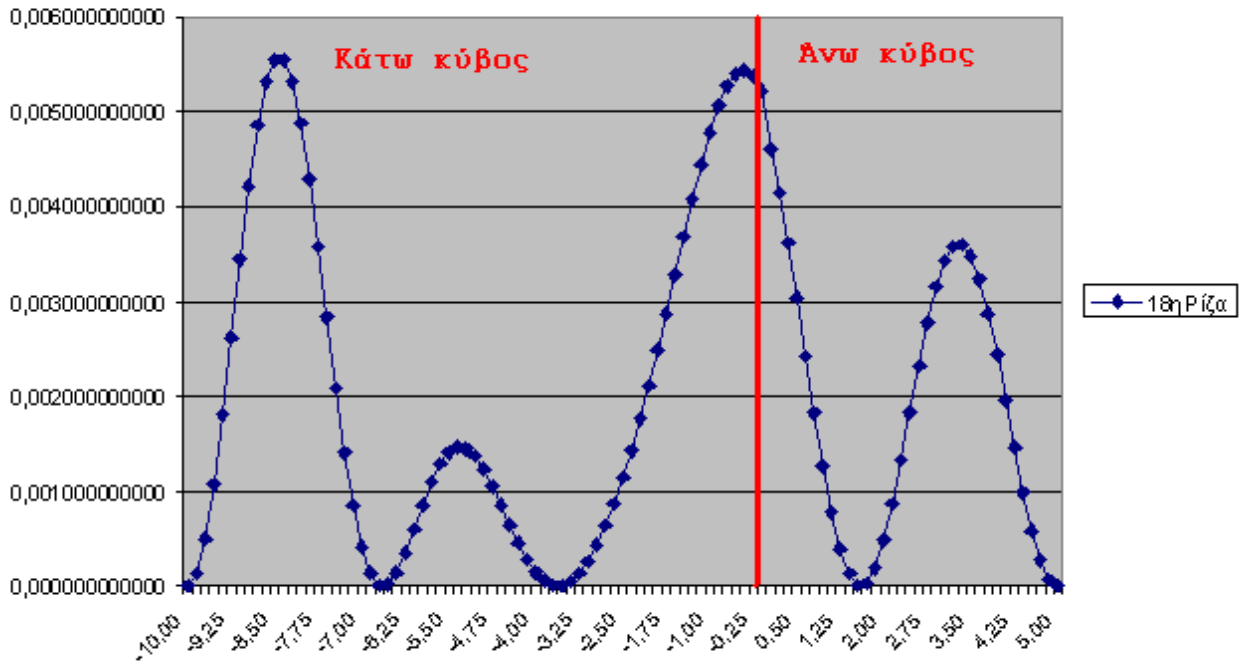
14η Ρίζα



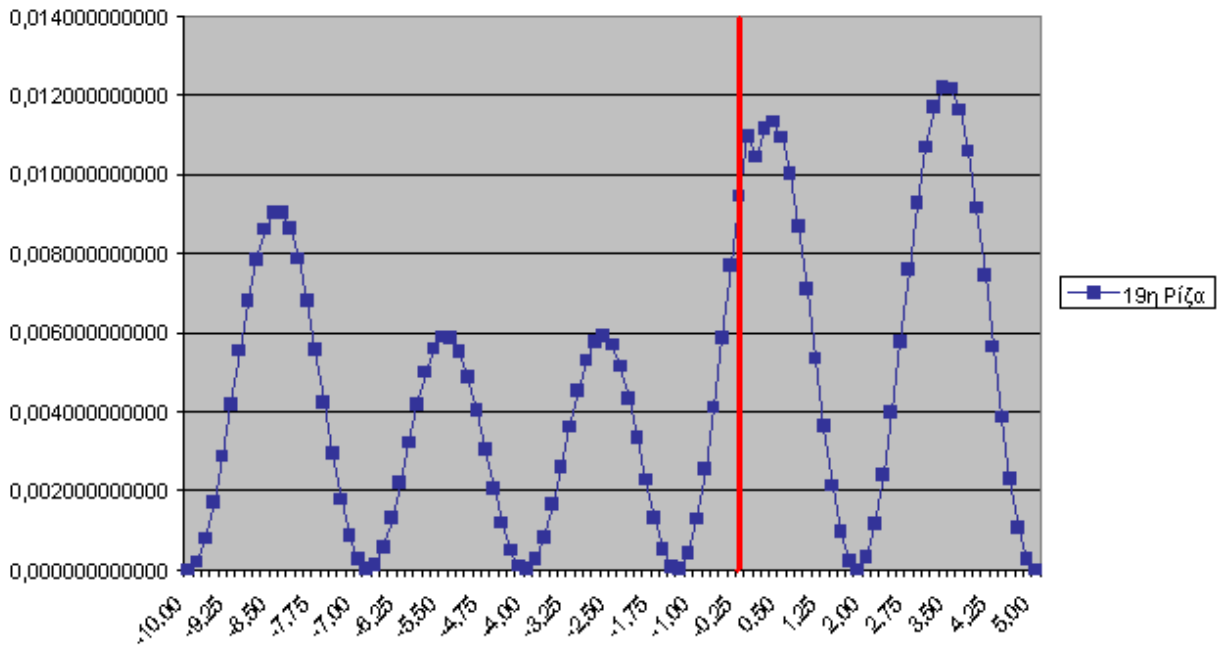
15η Ρίζα



18η Ρίζα

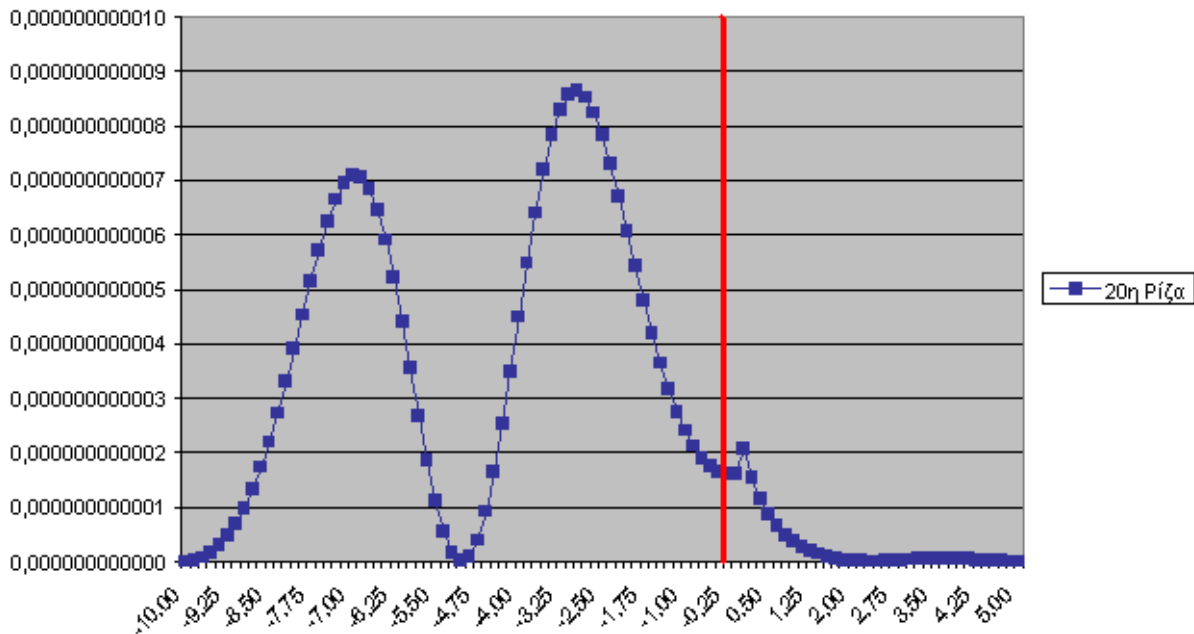


19η Ρίζα



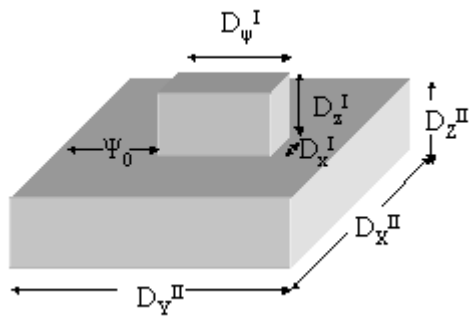
Για την ομάδα των ριζών από την 12<sup>η</sup> έως και την 19<sup>η</sup> η μορφή της λύσης όπως φαίνεται από τις γραφικές παραστάσεις είναι παραπλήσια (με μόνη διαφορά τον αριθμό των υπάρχουσών καμπυλών) και εμφανίζουν τα σωματίδια να κινούνται εντός του εσωτερικού και των δύο κύβων .

20η Ρίζα



Η 20η ρίζα παρουσιάζεται περιορισμένη στον κάτω κύβο όπου και έχουμε προφανώς εγκλωβισμένη την κίνηση του σωματιδίου .

Στη συνέχεια μεταβάλλοντας τον αριθμό των αρμονικών έχουμε ότι:



Τα ακόλουθα αριθμητικά δεδομένα είναι οι διαστάσεις των δυο κύβων του προβλήματος και οι αριθμητικοί συντελεστές που αφορούν τον βαθμό ακρίβειας του αποτελέσματος (π.χ. ο αριθμός των αρμονικών που εκτελούνται).

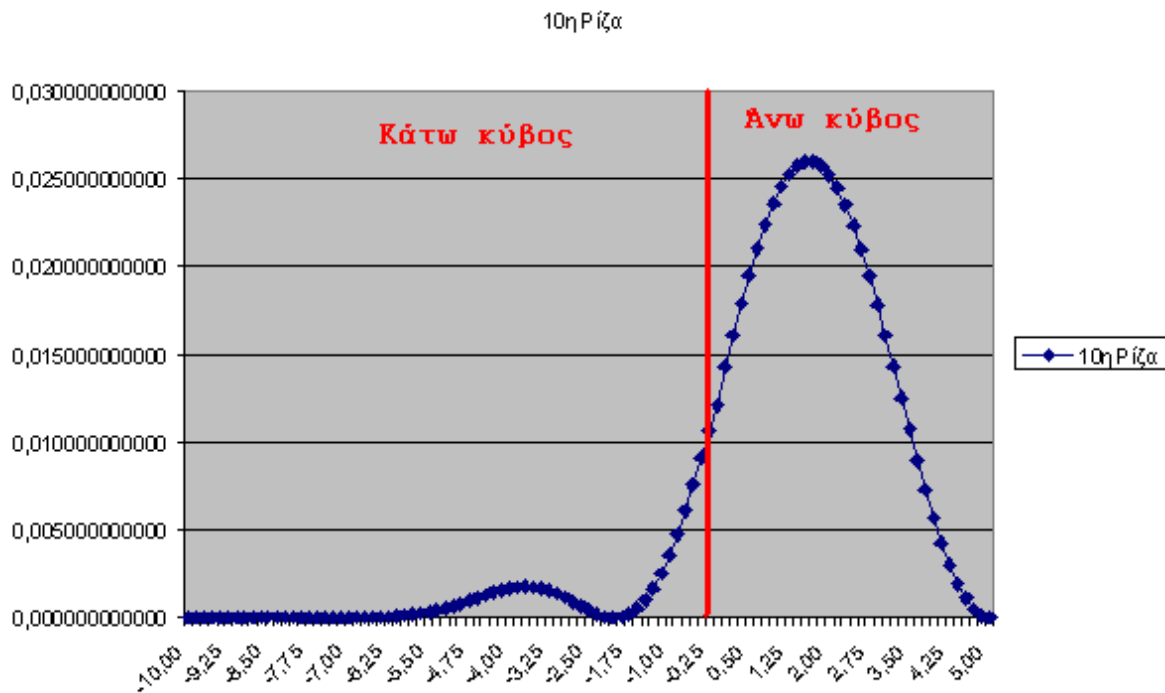
Για αυτή την περίπτωση είναι :

**Άνω Κύβος**  $D_x^I=5$   $D_y^I=5$   $D_z^I=5$   
**Κάτω Κύβος**  $D_x^{II}=10$   $D_y^{II}=10$   $D_z^{II}=10$

ενώ ο αριθμός των αρμονικών είναι πλέον  $M_{MAX1} = N_{MAX1} = M_{MAX2} = N_{MAX2} = 4$  παρουσιάζεται δηλαδή μια αύξηση του αριθμού τους σε σχέση με την προηγούμενη ομάδα λύσεων. Οι λοιπές αρχικές τιμές και διαστάσεις του προβλήματος παραμένουν οι ίδιες .

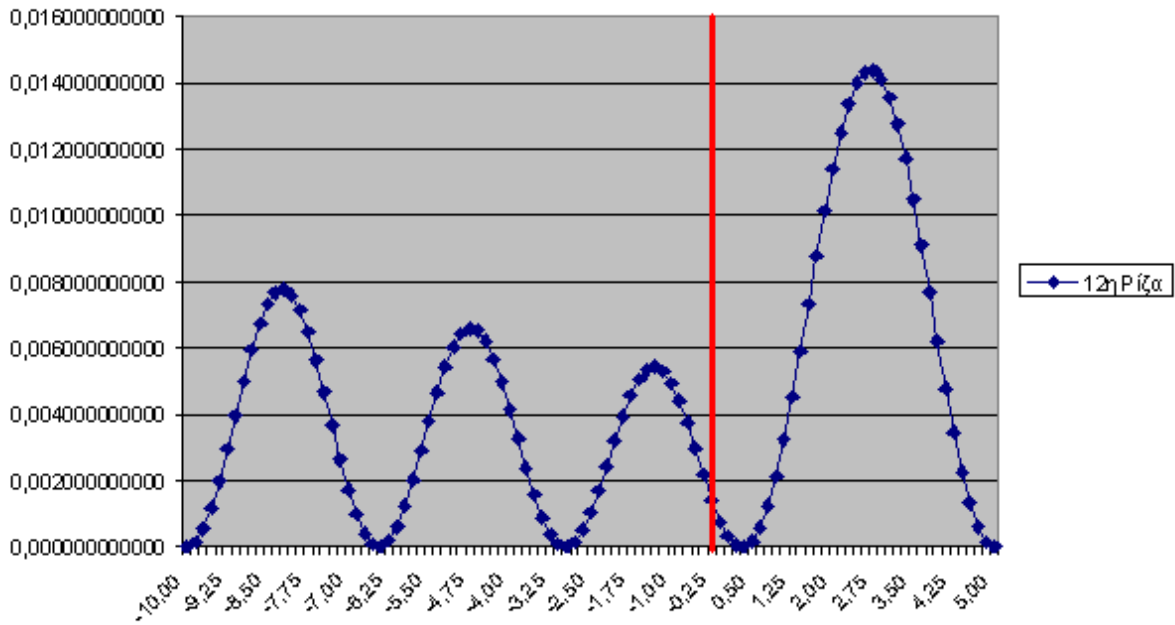


Τα αποτελέσματα που προκύπτουν είναι τα ακόλουθα :

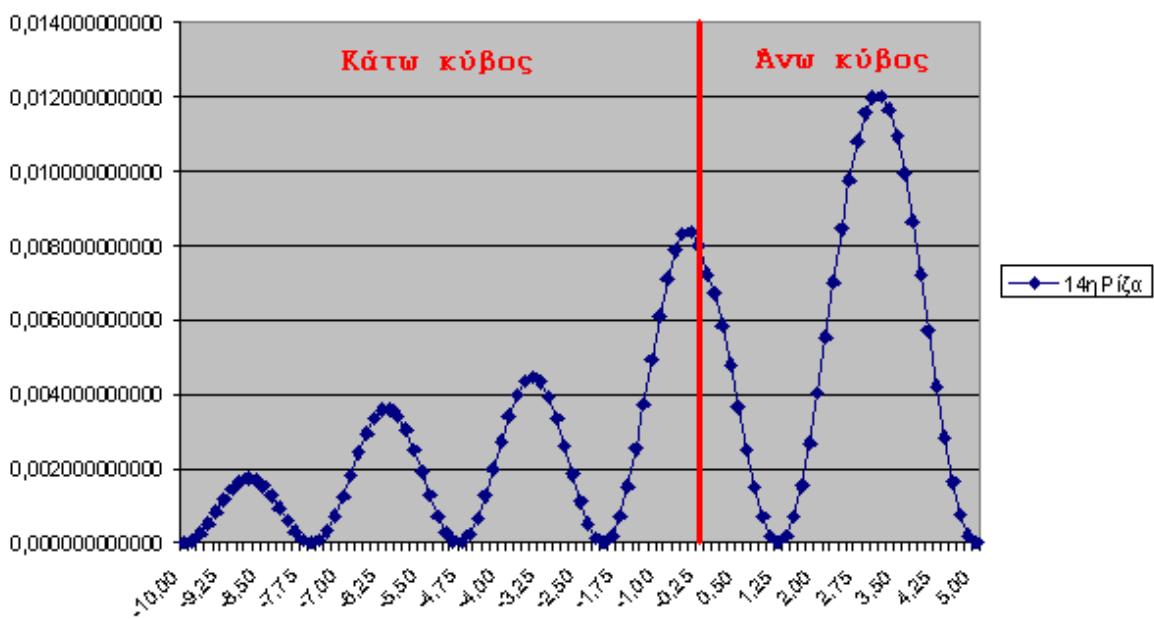


Η 10<sup>η</sup> ρίζα είναι εμφανώς περιορισμένη στον πάνω κύβο (Κύβο Ι) .Ακόμη μια σημαντική παρατήρηση για την μελέτη του φαινομένου που βρίσκει όπως έχουμε αναφέρει εφαρμογή στη θεωρία της οπτικής ηλεκτρονικής και τις κατασκευές της .

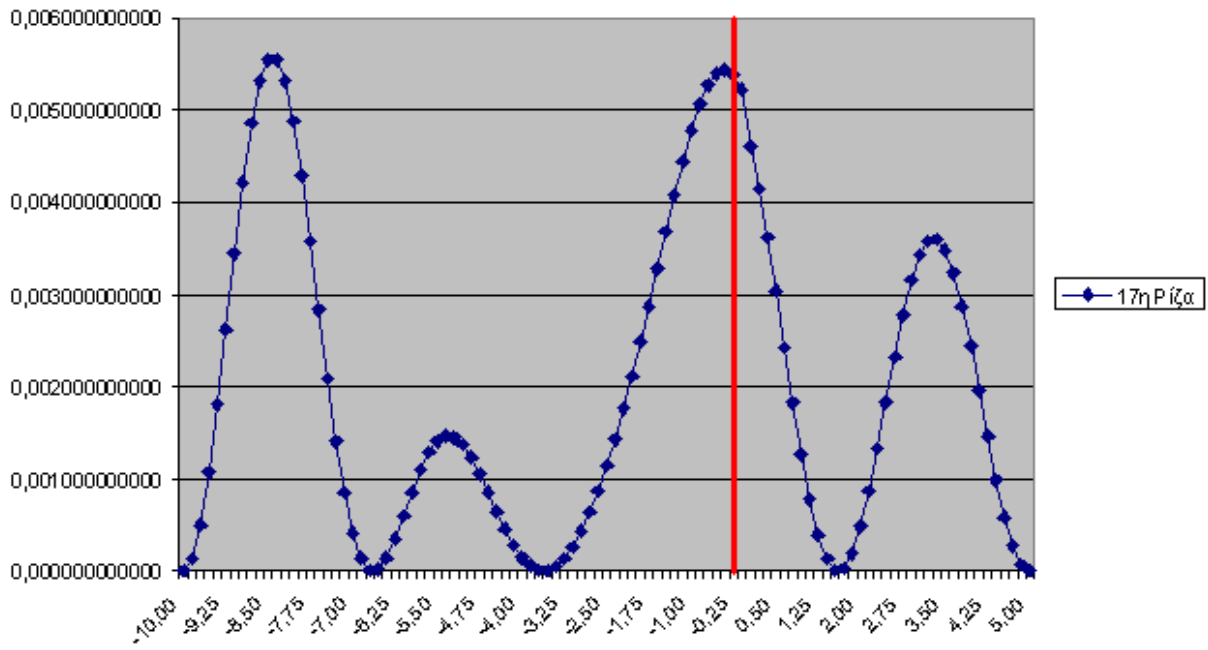
12η Πίζα



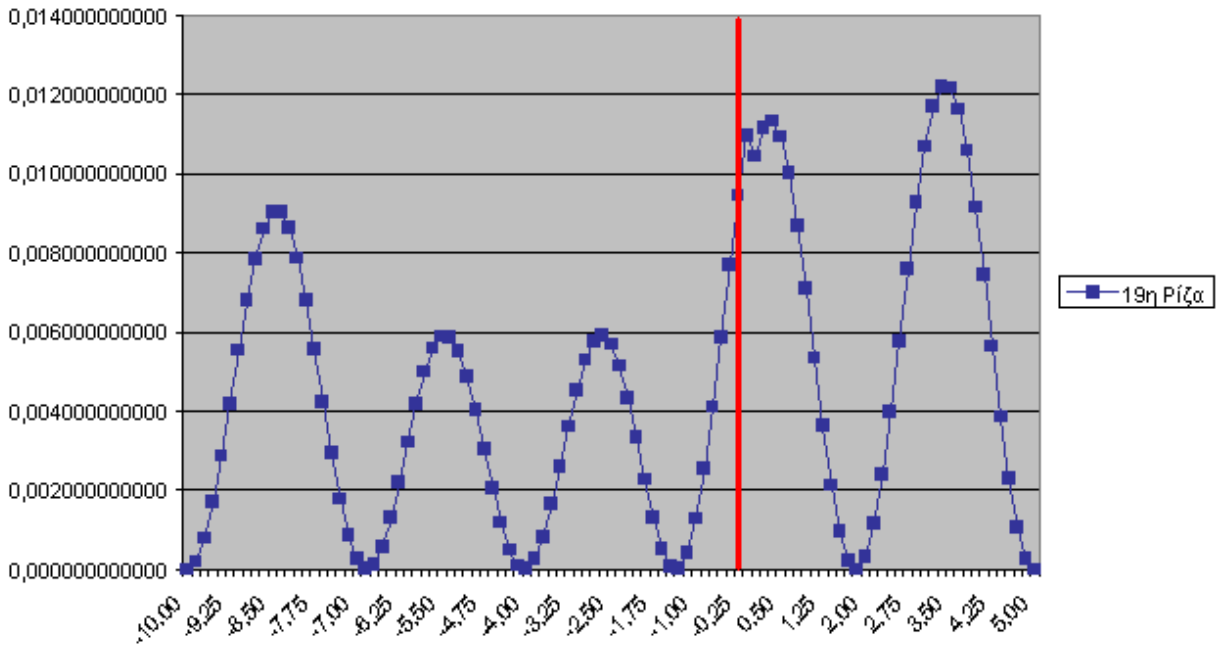
14η Πίζα



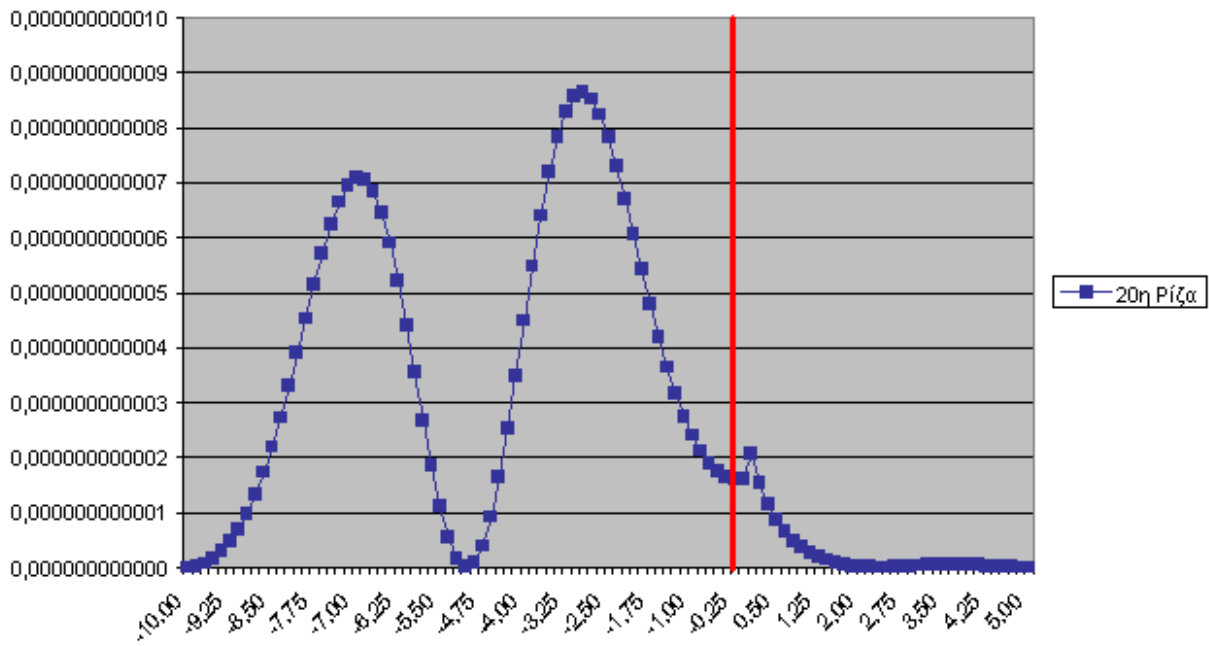
17η Πίζα



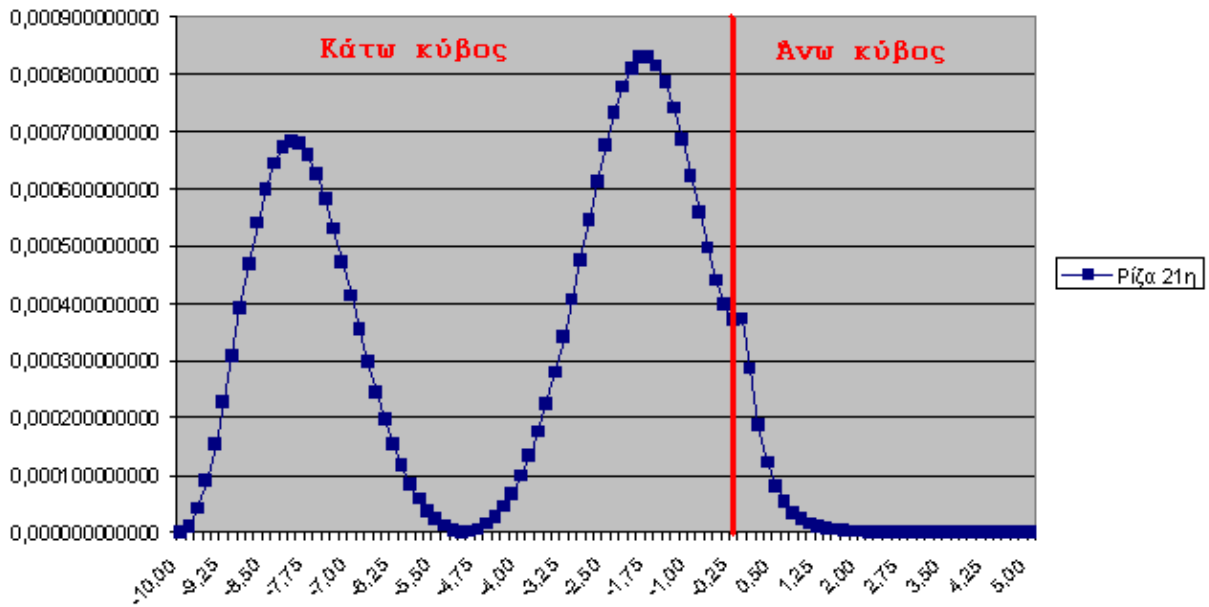
19η Πίζα



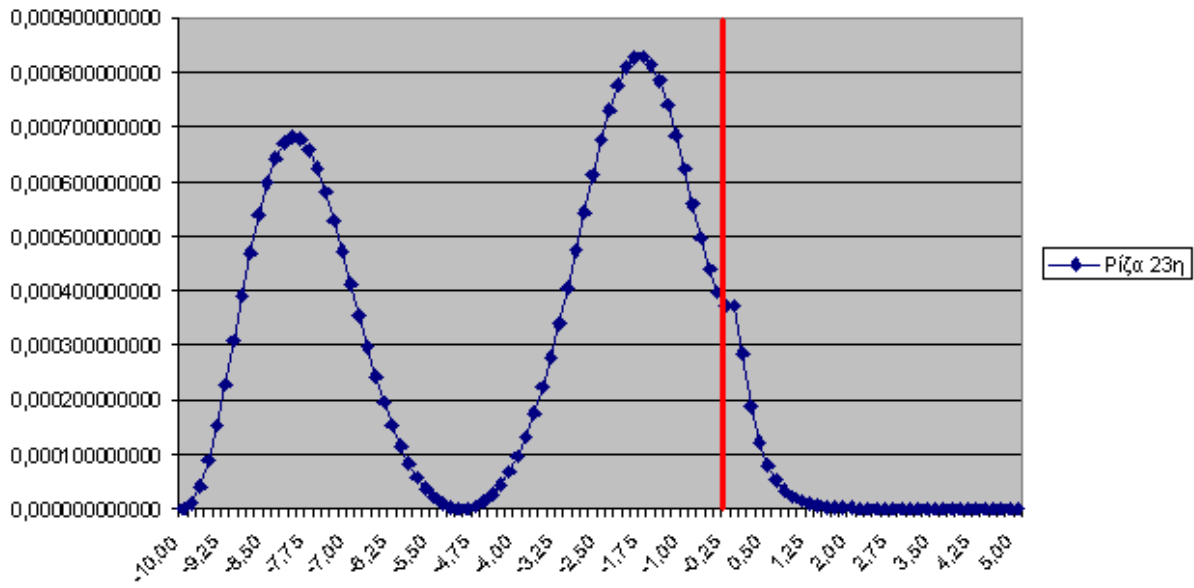
20η Πίζα



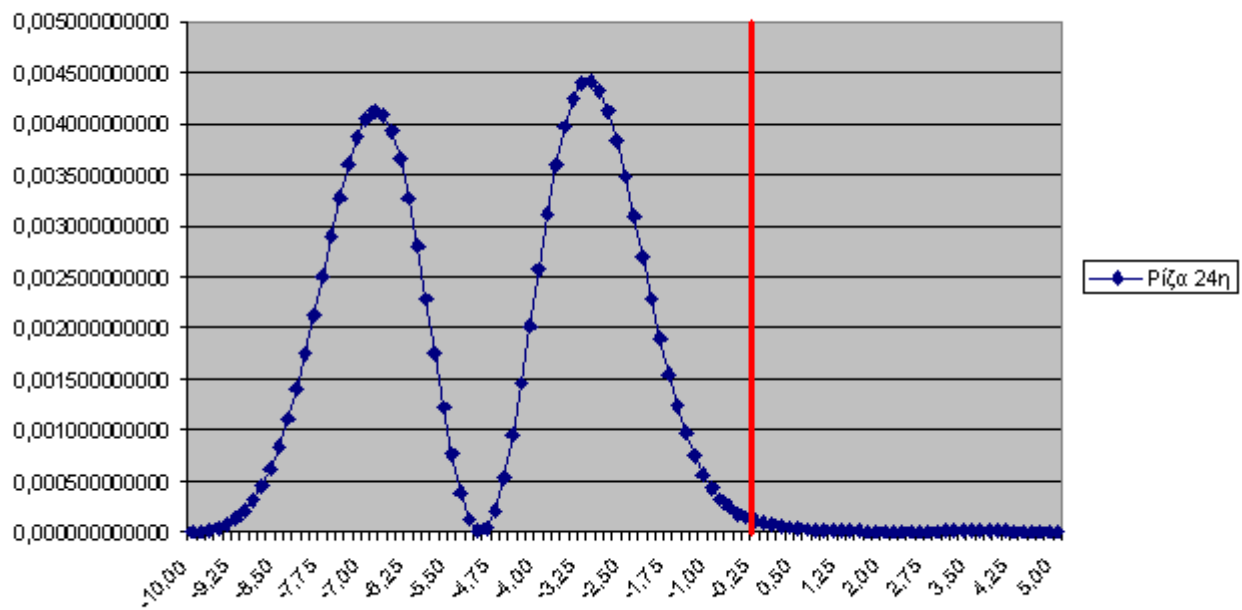
Πίζα 21η



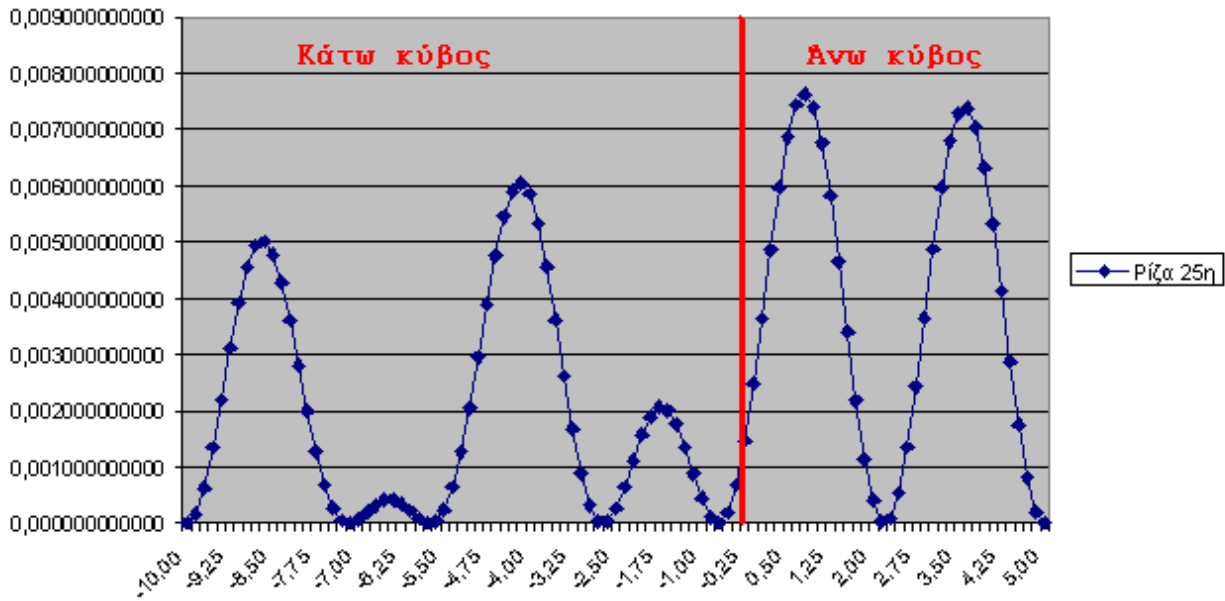
Piζα 23η



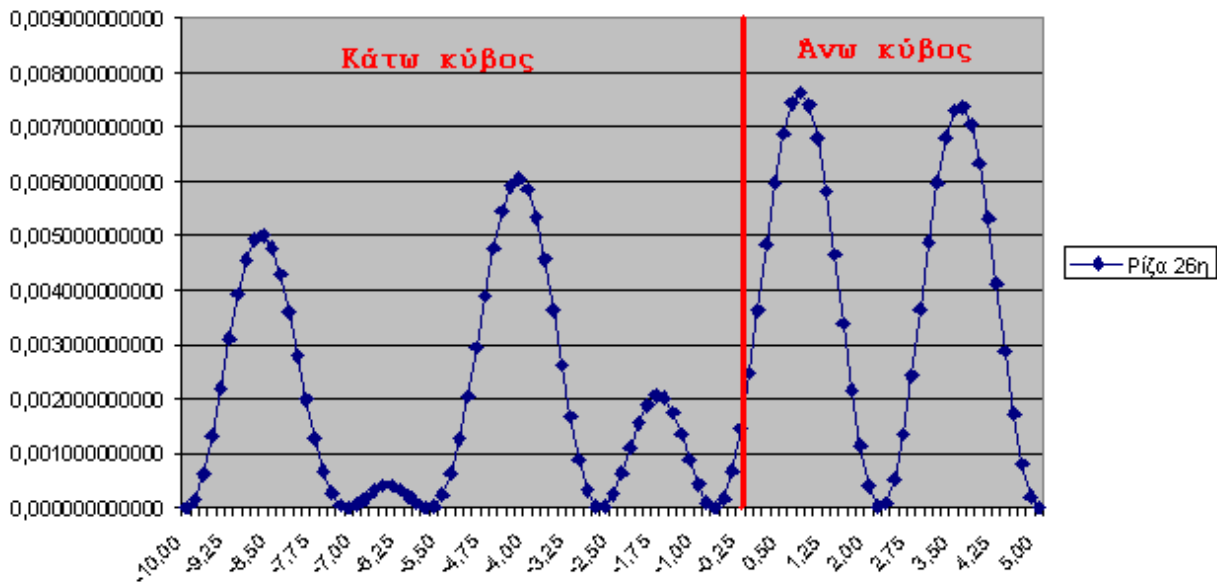
Piζα 24η



Ρίζα 25η



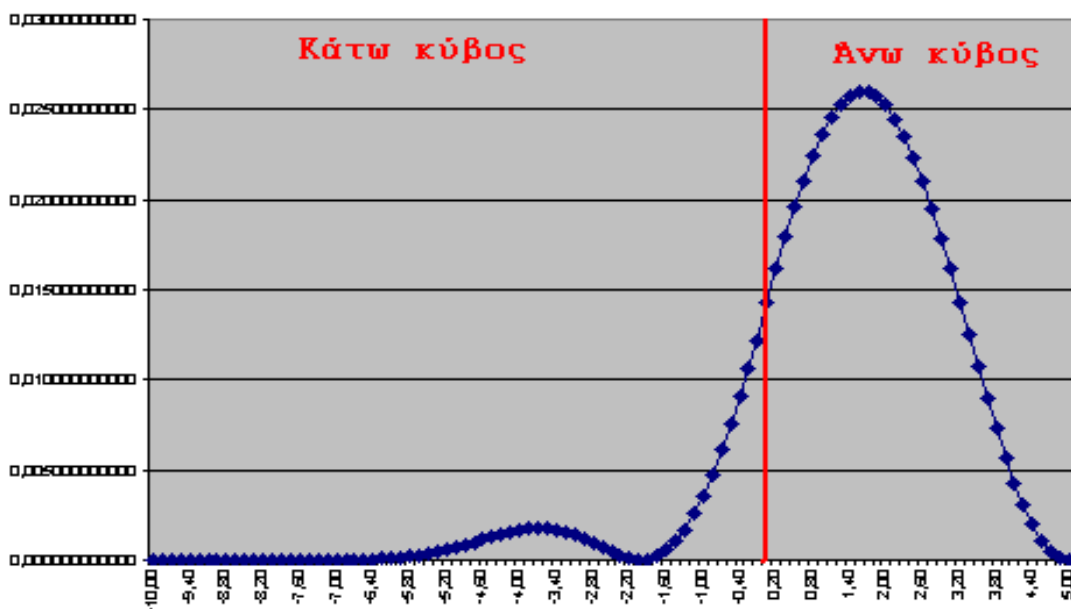
Ρίζα 26η



Παρατηρούμε μια συγκεκριμένη ομοιότητα στις λύσεις αυτής της ομάδας με τις λύσεις της προηγούμενης ομάδας, γεγονός απόλυτα αναμενόμενο, καθώς και οι δυο ομάδες χρησιμοποιούν ως input αρχείο το ίδιο CARTES.dat ( με μόνη διαφορά στον αριθμό των αρμονικών συναρτήσεων). Οι ρίζες από (12<sup>η</sup> έως 19<sup>η</sup>) και (25<sup>η</sup> έως 26<sup>η</sup>) καλύπτουν τον εσωτερικό χώρο και των δύο κύβων ενώ διαφέρουν μόνο ως προς τον αριθμό των καμπυλών που παρουσιάζουν. Αντίθετα η ομάδα ριζών από την 20<sup>η</sup> έως την 24<sup>η</sup> εμφανίζονται να εγκλωβίζονται αποκλειστικά και μόνο στον κάτω κύβο.

## 7. ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Σκοπός της εργασίας ήταν η μελέτη της δυνατότητας εντοπισμού ηλεκτρονίων σε κβαντικούς πυλώνες. Αποδείχθηκε ότι για ορισμένες τιμές-λύσεις του ανωτέρω προγράμματος, ήταν δυνατόν να επιτευχθεί ο εγκλωβισμός των σωματιδίων αποκλειστικά στον άνω κύβο του υπό εξέταση συστήματος, γεγονός που λαμβάνει χώρα σε υψηλότερες ενέργειες και είναι πιο δύσκολο να παρατηρηθεί. Επίσης όσο μικρότερες είναι οι διαστάσεις  $D_x^I, D_y^I, D_z^I$  από τις αντίστοιχες  $D_x^{II}, D_y^{II}, D_z^{II}$  τόσο πιο εμφανές είναι το υπό εξέταση φαινόμενο του εγκλωβισμού του σωματιδίου στον άνω κύβο. Επιπλέον απαιτείται και ιδιαίτερη προσοχή στην επιλογή του αριθμού των αρμονικών που χρησιμοποιεί το πρόγραμμα FORTRAN για την επίτευξη των ανωτέρω αποτελεσμάτων. Έτσι παρατηρούμε ότι όσο αυξάνουμε τον αριθμό των αρμονικών τόσο πιο ομαλοποιημένη εμφανίζεται η γραφική παράσταση της κάθε λύσης του προγράμματος. Οι λύσεις συνεπώς που έχουν μεγαλύτερη αξία για την εργασία αυτή αντιπροσωπεύονται ικανοποιητικότερα από την ακόλουθη γραφική παράσταση:



Τονίζεται επίσης ότι οι ανωτέρω προαναφερόμενες λύσεις προκύπτουν χωρίς να υπάρχει κάποιο διαχωριστικό διάφραγμα ανάμεσα στους δυο κύβους.

Μπορούμε συνεπώς να επεκτείνουμε τις προηγούμενες διαπιστώσεις και να υποθέσουμε ότι η συμπεριφορά του σωματιδίου σε περίπτωση που είχαμε σειρά τέτοιων κυβικών συστημάτων το ένα δίπλα στο άλλο θα είχε παρόμοια χαρακτηριστικά. Είναι άλλωστε αποδεδειγμένο ότι πυριτικές κατασκευές (στήλες ή τείχη) με υψηλά ανισοτροπικό ύψος προς την επιφάνεια επικάθισής τους παρουσιάζουν έντονο το φαινόμενο της φωταύγειας. Η δημιουργία αυτών των διατάξεων είναι δυνατόν να γίνει με τη χρήση συμβατικών λιθογραφικών αλλά και ιοντικών μεθόδων χάραξης.

Είναι άρα προφανώς δυνατή η εσκεμμένη διόδευση σωματιδίων προς μία προκαθορισμένη κατεύθυνση υπό συγκεκριμένες συνθήκες (ενέργεια ηλεκτρονίων , διαστάσεις και σχήμα των υλικών κατασκευής).



## **ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ**

**Πρόγραμμα σε γλώσσα Fortran το οποίο υπολογίζει την πιθανότητα εντοπισμού σωματιδίου εντός κυβικών αντικειμένων**

Πρόγραμμα σε γλώσσα Fortran το οποίο υπολογίζει την κβαντική συμπεριφορά σωματιδίου εντός κυβικών αντικειμένων.

```

PROGRAM MAIN
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A,B,D-H,O-Z)
IMPLICIT COMPLEX*16(C)
DIMENSION RIZES(100),CXX(500),CAMN(20,20),CBMN(-10:10,-10:10)
COMMON/IA/PI,PVX1,PVX2,PVY1,PVY2
COMMON/IB/DX1,DY1,DZ1,DX2,DY2,DZ2,YO,DX12
COMMON/IC/MAX1,NMAX1,MMAX2,NMAX2,MMAX
COMMON/IE1/NSP
COMMON/IE2/TOL
COMMON/IF1/ERR
COMMON/IG/CI
COMMON/IH/KX,KY
COMMON/II/IRESU
COMMON/IJ/CAMN
COMMON/IK/CBMN
CHARACTER INT2,INT3
DOUBLE PRECISION KX,KY,KX1,KX2,KY1,KY2
EXTERNAL RFDET,XFDET
C-----
PI=DACOS(-1.0D0)
CI=(0.0,1.0)
C-----
OPEN(11,FILE='CARTES.DAT')
READ(11,*) DX1T,DY1T,DZ1T,DX2T,DY2T,DZ2T,YOT
READ(11,*) MMAX1,NMAX1,MMAX2,NMAX2
READ(11,*) E1,E2,DE
READ(11,*) TOL,NSP,ERR
READ(11,*) KX1,KX2,DKX
READ(11,*) KY1,KY2,DKY
READ(11,*) IRESU
CLOSE(11)
C-----
MMAX=MMAX1*NMAX1
C-----
OPEN(14,FILE='SOLUTION.DAT')
WRITE(*,10) DX1T,DY1T,DZ1T,
1 DX2T,DY2T,DZ2T,YOT,
2 MMAX1,NMAX1,MMAX2,NMAX2,MMAX
WRITE(14,10) DX1T,DY1T,DZ1T,
1 DX2T,DY2T,DZ2T,YOT,
2 MMAX1,NMAX1,MMAX2,NMAX2,MMAX
10 FORMAT(20X,'ALL DIMENSIONS ARE IN Ao [10(-10) m]',/,1X,'UPPER SEM
+ICONDUCTOR BOX (1) : Dx=',F9.4,2X,'Dy=',F9.4,2X,'Dz=',F9.4,/,1X,'L
+OWER SEMICONDUCTOR BOX (2) : Dx=',F9.4,2X,'Dy=',F9.4,2X,'Dz=',F9.4
+/,1X,'DISPLASMENT IN Y OF UPPER SEMICONDUCTOR BOX (1) : Yo=',F9.4
+/,1X,'Mmax1=',I3,5X,'Nmax1=',I3,5X,'Mmax2=',I3,5X,'Nmax2=',I3,5X,
+'Mmax1*Nmax1=',I3,/,1X,'=====
+=====')
C-----
C NORMALISATION OF THE LENGTHS WITH THE MAXIMUM DIMENSION OF THE LOWER
C BOX
C-----
DMAX=0.0
IF (DX1T.GT.DMAX) DMAX=DX1T
IF (DY1T.GT.DMAX) DMAX=DY1T
IF (DZ1T.GT.DMAX) DMAX=DZ1T
IF (DX2T.GT.DMAX) DMAX=DX2T

```

```

IF (DY2T.GT.DMAX) DMAX=DY2T
IF (DZ2T.GT.DMAX) DMAX=DZ2T
IF (YOT.GT.DMAX) DMAX=YOT
DMAX=1.0
C-----
DX1=DX1T/DMAX
DY1=DY1T/DMAX
DZ1=DZ1T/DMAX
DX2=DX2T/DMAX
DY2=DY2T/DMAX
DZ2=DZ2T/DMAX
YO =YOT/DMAX
C-----
PVX1=PI/DX1
PVX2=PI/DX2
PVY1=PI/DY1
PVY2=PI/DY2
DXY12=DX1*DX2*DY1*DY2/4.
C-----
KX=KX1
KY=KY1
WRITE(*,11)
11  FORMAT(1X,'IF YOU WANT TO LOOK FOR ROOTS PRESS 1',/,1X,'IF YOU WAN
+T TO FIND THE EXPANSION COEFFICIENTS PRESS 2')
WRITE(*,*)
READ(*,*) INT1
C-----
IF (INT1.EQ.1) THEN
OPEN(12,FILE='EK.DAT')
CALL RIZA(XFDET,E1,E2,DE,NR,RIZES)
WRITE(*,12) NR
WRITE(12,12) NR
12  FORMAT(I4)
DO 15 I=1,NR
IF (NR.GT.100) GOTO 17
WRITE(*,16) I,RIZES(I)
WRITE(12,16) I,RIZES(I)
16  FORMAT(1X,I3,3X,F25.16)
15  CONTINUE
17  WRITE(12,18)
18  FORMAT(1X,'101',15X,'0.0')
CLOSE(12)
C-----
ELSEIF (INT1.EQ.2) THEN
OPEN(13,FILE='EK.DAT')
READ(13,*) NR
DO 20 I=1,NR
READ(13,*) K,RIZES(K)
WRITE(*,22) K,RIZES(K)
22  FORMAT(1X,'ROOT(',I3,' )=',F22.16)
20  CONTINUE
CLOSE(13)
WRITE(*,26)
26  FORMAT(1X,'GIVE ME THE ORDER OF ROOT, FOR WHICH YOU WANT TO FI
+ND THE EXPANSION COEFFICIENTS ')
READ(*,*) JN
WRITE(*,27)
27  FORMAT(1X,'IF YOU WANT TO CHANGE THE DIMENSIONS OF THE ARRAY,
+PRESS Y ')
READ(*,*) INT2
IF (INT2.EQ.'Y'.OR.INT2.EQ.'y') THEN

```

```

WRITE(*,*) ' MMAX1='
  READ(*,*) MMAX1
WRITE(*,*) ' NMAX1='
  READ(*,*) NMAX1
WRITE(*,*) ' MMAX2='
  READ(*,*) MMAX2
WRITE(*,*) ' NMAX2='
  READ(*,*) NMAX2
MMAX=MMAX1*NMAX1
ENDIF
WRITE(*,*) 'IF YOU WANT TO FIND THE EXACT ROOT, PRESS Y '
READ(*,*) INT3
IF (INT3.EQ.'N'.OR.INT3.EQ.'n') THEN
  ROOT=RIZES(JN)
  GOTO 30
ELSE
  DOWN=RIZES(JN)*0.95
  UP=RIZES(JN)*1.05
  STEP=0.11*RIZES(JN)
  NSP=100
  CALL RIZA(XFDET,DOWN,UP,STEP,NR,RIZES)
  IF (NR.EQ.0) STOP
  DO 31 I=1,NR
    WRITE(*,32) I,RIZES(I)
32    FORMAT(1X,'ROOT(' ,I3,' )=' ,F22.16)
31  CONTINUE
  WRITE(*,*) ' GIVE THE ORDER OF ROOT NRR '
  READ(*,*) NRR
  ROOT=RIZES(NRR)
ENDIF
30 CONTINUE
C-----
E=ROOT
CD1=CFDET(E)
RD1=RFDET(E)
C-----
CALL SOLVE(E,CXX,IEQU,IREM,INIT)
  IF (IEQU.EQ.1) WRITE(*,*) 'THE EQUATIONS OF THE SOLVED SYSTEM
1    ARE NOT SATISFIED'
  IF (IREM.EQ.1) WRITE(*,*) 'THE REMAIN EQUATIONS ARE NOT SATISF
1    IED'
  IF (INIT.EQ.1) WRITE(*,*) 'THE INITIAL EQUATIONS ARE NOT SATIS
1    FIED'
C-----
CALL COEFF(E,CXX,CAMN,CBMN)
C-----
WRITE(14,*)
OPEN(15,FILE='Amn.DAT')
DO 40 M=1,MMAX1
DO 40 N=1,NMAX1
  RAMN=CDABS(CAMN(M,N))**2
  WRITE(14,43) M,N,RAMN
  WRITE(*,43) M,N,RAMN
  WRITE(15,44) M,N,RAMN
43  FORMAT(1X,'Amn_NORMALIZED(' ,I5,' ,',I5,' )=' ,F22.16)
44  FORMAT(2I5,F22.16)
40  CONTINUE
CLOSE(15)
WRITE(14,*)
WRITE(*,*)
OPEN(15,FILE='Bmn.DAT')

```

```

DO 45 M=-MMAX2,MMAX2
DO 45 N=-NMAX2,NMAX2
  RBMN=CDABS(CBMN(M,N))**2
  WRITE(14,46) M,N,RBMN
  WRITE(*,46) M,N,RBMN
  WRITE(15,47) M,N,RBMN
46   FORMAT(1X,'Bmn_NORMALIZED('',I5,'','',I5,'')=',F22.16)
47   FORMAT(2I5,F22.16)
45  CONTINUE
    CLOSE(15)
    WRITE(*,*) 'X VARIATION OF THE PSI^2, PRESS 0'
    READ(*,*) IFX
    IF (IFX.NE.0) GOTO 65
48  WRITE(*,49) -DZ2,DZ1,DY2
49  FORMAT(1X,'give me the values of z,y',/,
1     1X,F8.2,' < Z < ',F8.2,/,
2     5X,'0.00 < Y < ',F8.2)
    READ(*,*) Z,Y
    IF (Z.LT.(-DZ2).OR.Z.GT.DZ1.OR.Y.LT.0.OR.Y.GT.DY2) GOTO 48
    OPEN(11,FILE='VARX.DAT')
    IF (Z.LE.0.0) THEN
      DO 50 X=-DX2/2,DX2/2,DX2/100.
        PSZ=PSI22(ROOT,X,Y,Z)
        WRITE(*,52) X*DMAX,PSZ
        WRITE(11,52) X*DMAX,PSZ
52     FORMAT(F10.6,D18.10)
50     CONTINUE
    ELSE
      DO 60 X=-DX1/2,DX1/2,DX1/100.
        PSZ=PSI12(ROOT,X,Y,Z)
        WRITE(*,62) X*DMAX,PSZ
        WRITE(11,62) X*DMAX,PSZ
62     FORMAT(F10.6,D18.10)
60     CONTINUE
    ENDIF
    CLOSE(11)
65  WRITE(*,*) 'Y VARIATION OF THE PSI^2, PRESS 0'
    READ(*,*) IFY
    IF (IFY.NE.0) GOTO 85
68  WRITE(*,69) -DZ2,DZ1,-DX2/2,DX2/2
69  FORMAT(1X,'give me the values of z,x',/,
1     1X,F8.2,' < Z < ',F8.2,/,
2     1X,F8.2,' < X < ',F8.2)
    READ(*,*) Z,X
    IF (Z.LT.(-DZ2).OR.Z.GT.DZ1.OR.DABS(X).GT.(0.5*DX2)) GOTO 68
    OPEN(11,FILE='VARY.DAT')
    IF (Z.LE.0.0) THEN
      DO 70 Y=0.0,DY2,DY2/100.
        PSZ=PSI22(ROOT,X,Y,Z)
        WRITE(*,72) Y*DMAX,PSZ
        WRITE(11,72) Y*DMAX,PSZ
72     FORMAT(F10.6,D18.10)
70     CONTINUE
    ELSE
      DO 80 Y=YO,YO+DY1,DY1/100.
        PSZ=PSI12(ROOT,X,Y,Z)
        WRITE(*,82) Y*DMAX,PSZ
        WRITE(11,82) Y*DMAX,PSZ
82     FORMAT(F10.6,D18.10)
80     CONTINUE
    ENDIF

```

```

      CLOSE(11)
85      WRITE(*,*) 'Z VARIATION OF THE PSI^2, PRESS 0'
      READ(*,*) IFZ
      IF (IFZ.NE.0) GOTO 105
88      WRITE(*,89) DY2,-DX2/2,DX2/2
89      FORMAT(1X,'give me the values of y,x',/,
1         5X,'0.00 < Y < ',F8.2,/,
2         1X,F8.2,' < X < ',F8.2)
      READ(*,*) Y,X
      IF (Y.LT.0.0.OR.Y.GT.DY2.OR.DABS(X).GT.(0.5*DX2)) GOTO 88
      OPEN(11,FILE='VARZ.DAT')
      DO 90 Z=-DZ2,DZ1,(DZ2+DZ1)/100.
          IF (Z.LT.0.0) THEN
              PSZ=PSI22(ROOT,X,Y,Z)
          ELSE
              PSZ=0.0
              IF (Y.LT.YO.OR.Y.GT.(YO+DY1).OR.
1              DABS(X).GT.(0.5*DX1)) GOTO 91
              PSZ=PSI12(ROOT,X,Y,Z)
          ENDIF
91      WRITE(*,92) Z*DMAX,PSZ
          WRITE(11,92) Z*DMAX,PSZ
92      FORMAT(F10.6,D18.10)
90      CONTINUE
      CLOSE(11)

105     CONTINUE
      ELSE
135     WRITE(*,135)
          FORMAT(1X,'THE NUMBER YOU HAVE TYPED IS INCORRECT')
      ENDIF
999     CLOSE(14)
      STOP
      END
C*****
C*****
      COMPLEX*16 FUNCTION CRX(KL1,KM2,L,M)
      IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A,B,D-H,O-Z)
      IMPLICIT COMPLEX*16 (C)
      COMMON/IA/PI,PVX1,PVX2,PVY1,PVY2
      COMMON/IB/DX1,DY1,DZ1,DX2,DY2,DZ2,YO,DXY12
      COMMON/IG/CI
      DOUBLE PRECISION KL1,KL12,KM2,KM22
      KL12 = KL1*KL1
      KM22 = KM2*KM2
      TEMP = DABS(1.0-KM22/KL12)
      IF (TEMP.GT.1.D-6) THEN
1         CRX = CDEXP(-CI*KM2*DX1/2.0)*KL1/(KL12-KM22)*
          (1.0-(-1.0)**L*CDEXP(CI*KM2*DX1))
      ELSE
          IF (KM2.GT.0.0) CRX = +0.5*CI*DX1*CDEXP(-CI*L*PI/2.0)
          IF (KM2.LT.0.0) CRX = -0.5*CI*DX1*CDEXP(+CI*L*PI/2.0)
      ENDIF
      RETURN
      END
C*****
C*****
      COMPLEX*16 FUNCTION CRY(KQ1,KN2,Q,N)
      IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A,B,D-H,O-Z)
      IMPLICIT COMPLEX*16(C)
      COMMON/IA/PI,PVX1,PVX2,PVY1,PVY2

```

```

COMMON/IB/DX1,DY1,DZ1,DX2,DY2,DZ2,YO,DXY12
COMMON/IG/CI
DOUBLE PRECISION KQ1,KQ12,KN2,KN22
INTEGER Q
KQ12 = KQ1*KQ1
KN22 = KN2*KN2
TEMP = DABS(1.0-KN22/KQ12)
IF (TEMP.GT.1.D-6) THEN
    CRY = CDEXP(CI*KN2*YO)*KQ1/(KQ12-KN22)*
1      (1.0-(-1.0)**Q*CDEXP(CI*KN2*DY1))
ELSE
    IF (KN2.GT.0.0) CRY = +0.5*CI*DY1*CDEXP(+CI*KQ1*YO)
    IF (KN2.LT.0.0) CRY = -0.5*CI*DY1*CDEXP(-CI*KQ1*YO)
ENDIF
RETURN
END
C*****
DOUBLE PRECISION FUNCTION TH1(Z,KZ12)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A,B,D-H,O-Z)
COMMON/IB/DX1,DY1,DZ1,DX2,DY2,DZ2,YO,DXY12
DOUBLE PRECISION KZ12,KZ1
IF (KZ12.GT.0.0) THEN
    KZ1=DSQRT(KZ12)
    TH1=DSIN(KZ1*(Z-DZ1))
ELSEIF (KZ12.LT.0.0) THEN
    TZ1=DSQRT(-KZ12)
    TH1=DSINH(TZ1*(Z-DZ1))
ELSE
    TH1=0.0
ENDIF
RETURN
END
C*****
DOUBLE PRECISION FUNCTION TH1D(Z,KZ12)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A,B,D-H,O-Z)
COMMON/IB/DX1,DY1,DZ1,DX2,DY2,DZ2,YO,DXY12
DOUBLE PRECISION KZ12,KZ1
IF (KZ12.GT.0.0) THEN
    KZ1=DSQRT(KZ12)
    TH1D=KZ1*DCOS(KZ1*(Z-DZ1))
ELSEIF (KZ12.LT.0.0) THEN
    TZ1=DSQRT(-KZ12)
    TH1D=TZ1*DCOSH(TZ1*(Z-DZ1))
ELSE
    TH1D=0.0
ENDIF
RETURN
END
C*****
DOUBLE PRECISION FUNCTION TH2(Z,KZ22)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A,B,D-H,O-Z)
COMMON/IB/DX1,DY1,DZ1,DX2,DY2,DZ2,YO,DXY12
DOUBLE PRECISION KZ22,KZ2
IF (KZ22.GT.0.0) THEN
    KZ2=DSQRT(KZ22)
    TH2=DSIN(KZ2*(Z+DZ2))
ELSEIF (KZ22.LT.0.0) THEN
    TZ2=DSQRT(-KZ22)
    TH2=DSINH(TZ2*(Z+DZ2))
ELSE
    TH2=0.0

```

```

ENDIF
RETURN
END
C*****
DOUBLE PRECISION FUNCTION TH2D(Z,KZ22)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A,B,D-H,O-Z)
COMMON/IB/DX1,DY1,DZ1,DX2,DY2,DZ2,YO,DXY12
DOUBLE PRECISION KZ22,KZ2
IF (KZ22.GT.0.0) THEN
    KZ2=DSQRT(KZ22)
    TH2D=KZ2*DCOS(KZ2*(Z+DZ2))
ELSEIF (KZ22.LT.0.0) THEN
    TZ2=DSQRT(-KZ22)
    TH2D=TZ2*DCOSH(TZ2*(Z+DZ2))
ELSE
    TH2D=0.0
ENDIF
RETURN
END
C*****
SUBROUTINE MKARRAY(E,CARR)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A,B,D-H,O-Z)
IMPLICIT COMPLEX*16 (C)
DIMENSION CB(MMAX1,NMAX1,MMAX1,NMAX1),CARR(MMAX,MMAX)
COMMON/IA/PI,PVX1,PVX2,PVY1,PVY2
COMMON/IB/DX1,DY1,DZ1,DX2,DY2,DZ2,YO,DXY12
COMMON/IC/MMAX1,NMAX1,MMAX2,NMAX2,MMAX
COMMON/IH/KX,KY
DOUBLE PRECISION KL1 ,KQ1 ,KL12 ,KQ12 ,KZ12

DOUBLE PRECISION KLT1,KQT1,KLT12,KQT12,KZT12
DOUBLE PRECISION KM2 ,KN2 ,KM22 ,KN22 ,KZ22
DOUBLE PRECISION KX ,KY
INTEGER Q,QT
DO 10 L=1,MMAX1
    KL1=L*PVX1
    KL12=KL1*KL1
    DO 20 Q=1,NMAX1
        KQ1=Q*PVY1
        KQ12=KQ1*KQ1
        KZ12=E-KL12-KQ12
        TERM=TH1D(0.0D0,KZ12)*DXY12
        DO 30 LT=1,MMAX1
            KLT1=LT*PVX1
            KLT12=KLT1*KLT1
            DO 40 QT=1,NMAX1
                KQT1=QT*PVY1
                KQT12=KQT1*KQT1
                KZT12=E-KLT12-KQT12
                CSUMM=(0.0,0.0)
                DO 50 M=-MMAX2,MMAX2
                    KM2=KX+M*2.0*PVX2
                    KM22=KM2*KM2
                    CSUMN=(0.0,0.0)
                    DO 60 N=-NMAX2,NMAX2
                        KN2=KY+N*2.0*PVY2
                        KN22=KN2*KN2
                        KZ22=E-KM22-KN22
                        CSUMN=CSUMN+TH2D(0.0D0,KZ22)/TH2(0.0D0,KZ22)*
                            CRY(KQ1,KN2,Q,N)*CRY(KQT1,-KN2,QT,N)
                    END DO
                END DO
            END DO
        END DO
    END DO
END DO
1
60
CONTINUE

```



```

                CSUMM=CSUMM+
1                CSUMN*CRX(KL1,KM2,L,M)*CRX(KLT1,-KM2,LT,M)
50                CONTINUE
                CB(L,Q,LT,QT)=TH1(0.0D0,KZT12)*CSUMM/TERM
                IF(L.EQ.LT.AND.Q.EQ.QT) CB(L,Q,LT,QT)=
1                CB(L,Q,LT,QT)-1.0D0
40                CONTINUE
30                CONTINUE
20                CONTINUE
10                CONTINUE
                I=0
                DO 100 L=1,MMAX1
                DO 110 Q=1,NMAX1
                I=I+1
                J=0
                DO 120 LT=1,MMAX1
                DO 130 QT=1,NMAX1
                J=J+1
                CARR(I,J)=CB(L,Q,LT,QT)
130                CONTINUE
120                CONTINUE
110                CONTINUE
100                CONTINUE
                RETURN
                END

```

C\*\*\*\*\*

```

SUBROUTINE LUDCMP(CA,N,INDX,D)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A,B,D-H,O-Z)
IMPLICIT COMPLEX *16(C)
PARAMETER (TINY=1.D-100)
DIMENSION CA(N,N),INDX(N),CVV(N)
D=1.
DO 12 I=1,N
    AAMAX=0.0
    DO 11 J=1,N
        IF (CDABS(CA(I,J)).GT.AAMAX) AAMAX=CDABS(CA(I,J))
11    CONTINUE
        IF (AAMAX.EQ.0.0D0) PAUSE 'Singular matrix.'
        CVV(I)=1./AAMAX
12    CONTINUE
    DO 19 J=1,N
        IF (J.GT.1) THEN
            DO 14 I=1,J-1
                CSUM=CA(I,J)
                IF (I.GT.1) THEN
                    DO 13 K=1,I-1
                        CSUM=CSUM-CA(I,K)*CA(K,J)
13                CONTINUE
                    CA(I,J)=CSUM
                ENDIF
14            CONTINUE
        ENDIF
        AAMAX=0.0
        DO 16 I=J,N
            CSUM=CA(I,J)
            IF (J.GT.1) THEN
                DO 15 K=1,J-1
                    CSUM=CSUM-CA(I,K)*CA(K,J)
15                CONTINUE
            CA(I,J)=CSUM
        ENDIF

```

```

        CDUM=CVV(I)*CDABS(CSUM)
        IF (CDABS(CDUM).GE.AAMAX) THEN
            IMAX=I
            AAMAX=CDABS(CDUM)
        ENDIF
16    CONTINUE
        IF (J.NE.IMAX) THEN
            DO 17 K=1,N
                CDUM=CA(IMAX,K)
                CA(IMAX,K)=CA(J,K)
                CA(J,K)=CDUM
17    CONTINUE
            D=-D
            CVV(IMAX)=CVV(J)
        ENDIF
        INDX(J)=IMAX
        IF (J.NE.N) THEN
            IF (CDABS(CA(J,J)).EQ.0.0D0) CA(J,J)=TINY
            CDUM=1./CA(J,J)
            DO 18 I=J+1,N
                CA(I,J)=CA(I,J)*CDUM
18    CONTINUE
        ENDIF
19    CONTINUE
        IF (CDABS(CA(N,N)).EQ.0.0D0) CA(N,N)=TINY
        RETURN
        END
C*****
SUBROUTINE SORT(N,CA)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A,B,D-H,O-Z)
IMPLICIT COMPLEX*16 (C)
DIMENSION CA(N)
L=N/2+1
IR=N
10    CONTINUE
        IF (L.GT.1) THEN
            L=L-1
            CRA=CA(L)
        ELSE
            CRA=CA(IR)
            CA(IR)=CA(1)
            IR=IR-1
            IF (IR.EQ.1) THEN
                CA(1)=CRA
                RETURN
            ENDIF
        ENDIF
        ENDIF
        I=L
        J=L+L
20    IF (J.LE.IR) THEN
            IF (J.LT.IR) THEN
                IF (CDABS(CA(J)).LT.CDABS(CA(J+1))) J=J+1
            ENDIF
            IF (CDABS(CRA).LT.CDABS(CA(J))) THEN
                CA(I)=CA(J)
                I=J
                J=J+J
            ELSE
                J=IR+1
            ENDIF
        ENDIF
        GoTo 20

```

```

        ENDIF
        CA(I)=CRA
        GoTo 10
    END
C*****
    DOUBLE PRECISION FUNCTION RFDET(E)
    IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A,B,D-H,O-Z)
    IMPLICIT COMPLEX*16(C)
    DIMENSION CARR(MMAX,MMAX),INDX(MMAX),CAB(MMAX)
    COMMON/IC/MMAX1,NMAX1,MMAX2,NMAX2,MMAX
    COMMON/II/IRESU
    CALL MKARRAY(E,CARR)
    CALL LUDCMP(CARR,MMAX,INDX,DD)
    DO 10 I=1,MMAX
        CAB(I)=CARR(I,I)
10    CONTINUE
    CALL SORT(MMAX,CAB)
    CDD=DD
    IMAX=(MMAX/2)*2
    IF (IMAX.EQ.MMAX) THEN
        DO 20 I =1,MMAX/2
            CDD=CDD*CAB(I)*CAB(MMAX-I+1)
20    CONTINUE
    ELSE
        CDD=CDD*CAB(MMAX)
        DO 30 I=1,(MMAX-1)/2
            CDD=CDD*CAB(I)*CAB(MMAX-I)
30    CONTINUE
    ENDIF
    IF (IRESU.EQ.0) WRITE(*,33) E,CDD
33    FORMAT(2X,'E_LU=',F15.8,2X,'DET=(',D20.10,',',D20.10,')')
    RFDET=DBLE(CDD)
    RETURN
    END
C*****
    COMPLEX*16 FUNCTION CFDET(E)
    IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A,B,D-H,O-Z)
    IMPLICIT COMPLEX*16 (C)
    DIMENSION CA(MMAX,MMAX),CB(MMAX,MMAX),CC(MMAX,MMAX)
    DIMENSION CZ(MMAX,MMAX),IPVT(MMAX),CWORK(MMAX)
    COMMON/IC/MMAX1,NMAX1,MMAX2,NMAX2,MMAX
    COMMON/II/IRESU
    CALL MKARRAY(E,CA)
    DO 10 I=1,MMAX
        DO 10 J=1,MMAX
            CC(I,J)=(0.0,0.0)
            cz(i,j)=(0.0,0.0)
10    CONTINUE
    DO 20 I=1,MMAX
        DO 20 J=1,MMAX
            CB(I,J)=CA(I,J)
            CZ(I,J)=CA(I,J)
20    CONTINUE
    CP=CA(1,1)
    DO 30 I=2,MMAX
        DO 35 I1=1,MMAX
            DO 35 J1=1,MMAX
                CC(I1,J1)=CB(I1,J1)-CB(I1,I-1)*CB(I-1,J1)/CB(I-1,I-1)
35    CONTINUE
    CP=CP*CC(I,I)
    DO 40 I1=1,MMAX

```

```

        DO 40 J1=1,MMAX
            CB(I1,J1)=CC(I1,J1)
40        CONTINUE
30        CONTINUE
        CFDET=CP
        IF (IRESU.EQ.0) WRITE(*,33) E,CP
33        FORMAT(2X,'E_G=',F15.8,2X,'DET=(',D20.10,',',D20.10,')')

        call CXDECOM(MMAX,MMAX,CZ,CDET,IPVT,CWORK,IER)
        IF (IRESU.EQ.0) WRITE(*,34) E,CDET,IER
34        FORMAT(2X,'E_M=',F15.8,2X,'DET=(',D20.10,',',D20.10,')',I5)
        RETURN
    END
C*****
    DOUBLE PRECISION FUNCTION XFDET(E)
    IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A,B,D-H,O-Z)
    IMPLICIT COMPLEX*16 (C)
C    XFDET=DBLE(CFDET(E))
    XFDET=TEST(E)
    RETURN
    END
C*****
    DOUBLE PRECISION FUNCTION test(e)
    IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A,B,D-H,O-Z)
    IMPLICIT COMPLEX*16 (C)
    DIMENSION INDX(MMAX),CAB(MMAX)
    DIMENSION CA(MMAX,MMAX),CB(MMAX,MMAX),CC(MMAX,MMAX),cz(mmax,mmax)
    DIMENSION IPVT(MMAX),CWORK(MMAX)
    COMMON/IC/MMAX1,NMAX1,MMAX2,NMAX2,MMAX
    COMMON/II/IRESU
    CALL MKARRAY(E,CA)
    do 11 i=1,mmax
    do 11 j=1,mmax
        cb(i,j)=ca(i,j)
        cc(i,j)=(0.0,0.0)
        cz(i,j)=ca(i,j)
11    continue
C iro        write(*,*) 'start of LU'
    CALL LUDCMP(CA,MMAX,INDX,DD)
    DO 10 I=1,MMAX
        CAB(I)=CA(I,I)
10    CONTINUE
    CALL SORT(MMAX,CAB)
    CDD=DD
    IMAX=(MMAX/2)*2
    IF (IMAX.EQ.MMAX) THEN
        DO 20 I =1,MMAX/2
            CDD=CDD*CAB(I)*CAB(MMAX-I+1)
20    CONTINUE
    ELSE
        CDD=CDD*CAB(MMAX)
        DO 30 I=1,(MMAX-1)/2
            CDD=CDD*CAB(I)*CAB(MMAX-I)
30    CONTINUE
    ENDIF
    if (iresu.eq.0) WRITE(*,33) E,CDD
33    FORMAT(2X,'E_LU=',F15.8,2X,'DET=(',D20.10,',',D20.10,')')
    test=dble(cdd)
    RETURN
    END
C*****

```

c This subroutine finds the intervals (XB1,XB2), where the function FX  
 c changes sign. The X1 and X2 are the initial and final value of the  
 c searching area, N is the number of subdivisions of the interval (X1,X2)  
 c and NB the maximum number of the intervals (XB1,XB2). NB less or equal  
 c 100.

```

c
SUBROUTINE ZBRAK(FX,X1,X2,N,XB1,XB2,NB)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A,B,D-H,O-Z)
DIMENSION XB1(100),XB2(100)
EXTERNAL FX
NBB=NB
NB=0
X=X1
DX=(X2-X1)/N
FP=FX(X)
DO 11 I=1,N
  X=X+DX
  FC=FX(X)
  IF (FC*FP.LT.0.0) THEN
    NB=NB+1
    XB1(NB)=X-DX
    XB2(NB)=X
  ENDIF
  FP=FC
  IF (NB.EQ.NBB) RETURN
11 CONTINUE
RETURN
END

```

c\*\*\*\*\*

c This function is searching for the root, if it exists, of the  
 c function FUNC in the interval X1-X2, and the accuracy is TOL.

```

c
DOUBLE PRECISION FUNCTION ZBRENT(FUNC,X1,X2,TOL)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A,B,D-H,O-Z)
PARAMETER (ITMAX=200,EPS=1.D-10)
COMMON/IF1/ERR
EXTERNAL FUNC
A=X1
B=X2
FA=FUNC(A)
FB=FUNC(B)
ERR1=DABS(FA)
IF (DABS(FB).GT.ERR1) ERR1=DABS(FB)
ERR1=ERR*ERR1
IF (FB*FA.GT.0.0) PAUSE 'Root must be bracketed for ZBRENT.'
FC=FB
DO 11 ITER=1,ITMAX
  IF (FB*FC.GT.0.0) THEN
    RC=A
    FC=FA
    D=B-A
    E=D
  ENDIF
  IF (DABS(FC).LT.DABS(FB)) THEN
    A=B
    B=RC
    RC=A
    FA=FB
    FB=FC
    FC=FA
  ENDIF

```

```

TOL1=2.*EPS*DABS(B)+0.5*TOL
XM=.5*(RC-B)
IF (DABS(FB).GT.ERR1.OR.DABS(FC).GT.ERR1.OR.
1  DABS(FA).GT.ERR1) THEN
    ZBRENT=-1.0
    RETURN
ENDIF
IF (DABS(XM).LE.TOL1.OR.FB.EQ.0.0) THEN
    ZBRENT=B
    RETURN
ENDIF
IF (DABS(E).GE.TOL1.AND.DABS(FA).GT.DABS(FB)) THEN
    S=FB/FA
    IF (A.EQ.RC) THEN
        P=2.*XM*S
        Q=1.-S
    ELSE
        Q=FA/FC
        R=FB/FC
        P=S*(2.*XM*Q*(Q-R)-(B-A)*(R-1.))
        Q=(Q-1.)*(R-1.)*(S-1.)
    ENDIF
    IF (P.GT.0.) Q=-Q
    P=DABS(P)
    IF (2.*P.LT.MIN(3.*XM*Q-DABS(TOL1*Q),DABS(E*Q))) THEN
        E=D
        D=P/Q
    ELSE
        D=XM
        E=D
    ENDIF
ELSE
    D=XM
    E=D
ENDIF
A=B

FA=FB
IF (DABS(D).GT.TOL1) THEN
    B=B+D
ELSE
    B=B+SIGN(TOL1,XM)
ENDIF
FB=FUNC(B)
11  CONTINUE
PAUSE 'ZBRENT exceeding maximum iterations.'
ZBRENT=B
RETURN
END
C*****
SUBROUTINE RIZA(XFDET,DOWN,UP,STEP,NR,RIZES)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A,B,D-H,O-Z)
DIMENSION XB1(100),XB2(100),RIZES(100)
COMMON/IE1/NSP
COMMON/IE2/TOL
COMMON/II/IRESU
EXTERNAL XFDET
NR=0
EA=DOWN
10  IF (EA.GE.DOWN.AND.EA.LE.UP) THEN
    IF (IRESU.EQ.0) WRITE(*,*)

```

```

        ZX1=EA
        ZX2=EA+STEP
        NROOT=100
        CALL ZBRAK(XFDET,ZX1,ZX2,NSP,XB1,XB2,NROOT)
        IF (NROOT.NE.0) THEN
            IF (IRESU.EQ.0) WRITE(*,*)
            DO 15 NW=1,NROOT
                IF (IRESU.EQ.0) WRITE(*,16)
16      FORMAT(2X,'I am looking for roots in the found interval')
                X1=XB1(NW)
                X2=XB2(NW)
                ROOT=ZBRENT(XFDET,X1,X2,TOL)
                IF (ROOT.LT.0.0) GOTO 15
                IF (IRESU.EQ.0) WRITE(*,17)
17      FORMAT(2X,'I am checking, if the found solution is root or pole')
                FA=XFDET(ROOT*(1.0-1.D-6))
                FB=XFDET(ROOT)
                FC=XFDET(ROOT*(1.0+1.D-6))
                IER=0
                IF (FA*FB.LT.0.0.AND.DABS(FB).LT.DABS(FC)) IER=1
                IF (FB*FC.LT.0.0.AND.DABS(FB).LT.DABS(FA)) IER=1
                IF (IER.EQ.1) THEN
                    NR=NR+1
                    RIZES(NR)=ROOT
                ENDIF
15      CONTINUE
            ENDIF
            EA=EA+STEP
            GOTO 10
        ENDIF
        RETURN
        END
C*****
SUBROUTINE SBRLSE(CZ1A,CB,N,CX)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A,B,D-H,O-Z)
IMPLICIT COMPLEX*16(C)
DIMENSION CA(500,501),CB(500),CX(500),CBB(501),CZ1A(500,500)
INTEGER R,T,S,R11
N1=N+1
DO 11 I=1,N
DO 11 J=1,N
    CA(I,J)=CZ1A(I,J)
11 CONTINUE
DO 15 I=1,N
    CA(I,N1)=CB(I)
15 CONTINUE
N0=N-1
DO 85 R=1,N0
    AA=0.0D0
    K=R
25    IF (AA.GE.CDABS(CA(K,R))) GOTO 35
    AA=CDABS(CA(K,R))
    T=K
35    IF (K.GE.N) GOTO 45
    K=K+1
    GOTO 25
45    DO 55 S=R,N1
        CBB(S)=CA(R,S)
        CA(R,S)=CA(T,S)
        CA(T,S)=CBB(S)
55 CONTINUE

```

```

        R11=R+1
        DO 75 I=R11,N
            DO 65 M=R11,N1
                CA(I,M)=CA(I,M)-CA(I,R)/CA(R,R)*CA(R,M)
65         CONTINUE
75         CONTINUE
85         CONTINUE
        CX(N)=CA(N,N1)/CA(N,N)
        DO 10 J=1,N0
            I=N-J
            CSUM=(0.0,0.0)
            I1=I+1
            DO 95 M=I1,N
                CSUM=CSUM+CA(I,M)*CX(M)
95         CONTINUE
            CX(I)=(CA(I,N1)-CSUM)/CA(I,I)
10        CONTINUE
        RETURN
        END
C*****
SUBROUTINE SOLVE(E,CXX,IEQU,IREM,INIT)
IMPLICIT COMPLEX*16 (C)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A,B,D-H,O-Z)
DIMENSION CA1(MMAX,MMAX),CA2(MMAX,MMAX),A2(MMAX),INDX(MMAX)
DIMENSION CWORK(MMAX),IPTVT(MMAX)
DIMENSION CAA(500,500),CAB(500),CAX(500),IOUT(500),CXX(500)
COMMON/IC/MMAX1,NMAX1,MMAX2,NMAX2,MMAX
COMMON/II/IRESU
C
CALL MKARRAY(E,CA1)
DO 10 I=1,MMAX
DO 10 J=1,MMAX
    CA2(I,J)=CA1(I,J)
10 CONTINUE
C
CALL LUDCMP(CA2,MMAX,INDX,DDA)
C
A2MAX=0.0
DO 20 I=1,MMAX
    A2(I)=CDABS(CA2(I,I))
    IF (A2(I).GT.A2MAX) A2MAX=A2(I)
20 CONTINUE
DO 25 I=1,MMAX
    A2(I)=A2(I)/A2MAX
25 CONTINUE
A2MIN=1.D+100
DO 30 I=1,MMAX
    IF (A2(I).LT.A2MIN) A2MIN=A2(I)
30 CONTINUE
SMALL=A2MIN
IOUTMAX=0
DO 35 I=1,MMAX
    IF (A2(I).GT.SMALL) GOTO 35
    IOUTMAX=IOUTMAX+1
    IOUT(IOUTMAX)=I
35 CONTINUE
K=0
DO 40 I=1,MMAX
DO 41 I1=1,IOUTMAX
    IF (I.EQ.IOUT(I1)) Go To 40
41 CONTINUE

```



```

K=K+1
IL=0
DO 42 J=1,MMAX
  DO 43 J1=1,IOUTMAX
    IF (J.EQ.IOUT(J1)) Go To 42
43  CONTINUE
    IL=IL+1
    CAA(K,IL)=CA1(I,J)
42  CONTINUE
    CSUM=(0.0,0.0)
    DO 44 K1=1,IOUTMAX
      CSUM=CSUM+CA1(I,IOUT(K1))
44  CONTINUE
    CAB(K)=-CSUM
40  CONTINUE

C
CALL SBRLSE(CAA,CAB,MMAX-IOUTMAX,CAX)
C

K=0
DO 50 I=1,MMAX
  DO 51 I1=1,IOUTMAX
    IF (I.EQ.IOUT(I1)) THEN
      CXX(I)=(1.0,0.0)
      GoTo 50
    ENDIF
51  CONTINUE
    K=K+1
    CXX(I)=CAX(K)
50  CONTINUE
C

IEQU=0
DO 60 I=1,MMAX-IOUTMAX
  CSUM=(0.0,0.0)
  DO 61 J=1,MMAX-IOUTMAX
    CSUM=CSUM+CAA(I,J)*CAX(J)
61  CONTINUE
  RDIF=DABS(1.-CDABS(CSUM/CAB(I)))
  IF (RDIF.GT.1.D-3) THEN
    IEQU=1
    WRITE(*,62) I,CSUM-CAB(I),RDIF,IEQU
62  FORMAT(' [AX-B](',I3,')=(',F22.16,',',F22.16,')',F15.10,I3)
  ELSE
    IF (IRESU.EQ.0) WRITE(*,63) I,CSUM-CAB(I),RDIF,IEQU
63  FORMAT(' [AX-B](',I3,')=(',F22.16,',',F22.16,')',F15.10,I3)
  ENDIF
60  CONTINUE
IF (IEQU.EQ.1) WRITE(*,*)
IF (IRESU.EQ.0) WRITE(*,*)
C

IREM=0
DO 70 I=1,IOUTMAX
  CSUM=(0.0,0.0)
  DO 75 J=1,MMAX
    CSUM=CSUM+CA1(IOUT(I),J)*CXX(J)
75  CONTINUE
  RDIF=CDABS(CSUM)
  IF (RDIF.GT.1.D-3) THEN
    IREM=1
    WRITE(*,77) IOUT(I),CSUM,RDIF,IREM
77  FORMAT(' [AX-B](',I3,')=(',F22.16,',',F22.16,')',F15.10,I3)

```

```

ELSE
  IF (IRESU.EQ.0) WRITE(*,78) IOUT(I),CSUM,RDIF,IREM
78   FORMAT(' [AX-B](',I3,')=(',F22.16,',',F22.16,')',F15.10,I3)
  ENDIF
70  CONTINUE
  IF (IRESU.EQ.0) WRITE(*,*)
  IF (IREM.EQ.1)  WRITE(*,*)
C
  INIT=0
  DO 80 I=1,MMAX
    CSUM=(0.0,0.0)
    DO 81 J=1,MMAX
      CSUM=CSUM+CA1(I,J)*CXX(J)
81   CONTINUE
      RDIF=CDABS(CSUM)
      IF (RDIF.GT.1.D-3) THEN
        INIT=1
        WRITE(*,82) I,CSUM,RDIF,INIT
82   FORMAT(' [EQUA](',I3,')=(',F22.16,',',F22.16,')',F15.10,I3)
      ELSE
        IF (IRESU.EQ.0) WRITE(*,83) I,CSUM,RDIF,INIT
83   FORMAT(' [EQUA](',I3,')=(',F22.16,',',F22.16,')',F15.10,I3)
      ENDIF
80  CONTINUE
  IF (IRESU.EQ.0) WRITE(*,*)
  IF (INIT.EQ.1)  WRITE(*,*)
  PAUSE
  WRITE(*,*) 'AAAAAAAAAA'
  CALL MKARRAY(E,CA1)
  CALL CXDECOM(MMAX,MMAX,CA1,CDET,IPVT,cWORK,IER)
  WRITE(*,34) E,CDET,IER
34  FORMAT(F15.8,2X,F30.20,2X,F30.20,I5)
  WRITE(*,*) 'BBBBBBBBBB'
  CF1=CFDET(E)
  WRITE(*,33) E,CF1
33  FORMAT(F15.8,2X,F30.20,2X,F30.20)
  PAUSE

  RETURN
  END
C*****
  SUBROUTINE COEFF(E,CXX,CAMN,CBMN)
  IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A,B,D-H,O-Z)
  IMPLICIT COMPLEX*16(C)
  DIMENSION CAMN(20,20),CBMN(-10:10,-10:10),CXX(500)
  COMMON/IA/PI,PVX1,PVX2,PVY1,PVY2
  COMMON/IB/DX1,DY1,DZ1,DX2,DY2,DZ2,YO,DXY12
  COMMON/IC/MMAX1,NMAX1,MMAX2,NMAX2,MMAX
  COMMON/IH/KX,KY
  COMMON/II/IRESU
  DOUBLE PRECISION KL1,KQ1,KL12,KQ12,KZ12,KZ1
  DOUBLE PRECISION KM2,KN2,KM22,KN22,KZ22,KZ2
  DOUBLE PRECISION KX,KY
  INTEGER Q
  IN=0
  DO 10 I=1,MMAX1
    DO 11 J=1,NMAX1
      IN=IN+1
      CAMN(I,J)=CXX(IN)
11   CONTINUE
10  CONTINUE

```

```

DO 20 M=-MMAX2,MMAX2
  KM2=KX+M*2.0*PVX2
  KM22=KM2*KM2
  DO 30 N=-NMAX2,NMAX2
    KN2=KY+N*2.0*PVY2
    KN22=KN2*KN2
    KZ22=E-KM22-KN22
    CSUML=(0.0,0.0)
    DO 40 L=1,MMAX1
      KL1=L*PVX1
      KL12=KL1*KL1
      CSUMQ=(0.0,0.0)
      DO 50 Q=1,NMAX1
        KQ1=Q*PVY1
        KQ12=KQ1*KQ1
        KZ12=E-KL12-KQ12
        CSUMQ=CSUMQ+CAMN(L,Q)*TH1(0.0D0,KZ12)
1          *CRY(KQ1,-KN2,Q,N)
50      CONTINUE
        CSUML=CSUML+CSUMQ*CRX(KL1,-KM2,L,M)
40      CONTINUE
        CBMN(M,N)=CSUML/TH2(0.0D0,KZ22)/DX2/DY2
30      CONTINUE
20      CONTINUE
C
DO 60 L=1,MMAX1
  KL1=L*PVX1
  KL12=KL1*KL1
  DO 65 Q=1,NMAX1
    KQ1=Q*PVY1
    KQ12=KQ1*KQ1
    KZ12=E-KL12-KQ12
    CSUMM=(0.0,0.0)
    DO 70 M=-MMAX2,MMAX2
      KM2=KX+M*2.0*PVX2
      KM22=KM2*KM2
      CSUMN=(0.0,0.0)
      DO 75 N=-NMAX2,NMAX2
        KN2=KY+N*2.0*PVY2
        KN22=KN2*KN2
        KZ22=E-KM22-KN22
        CSUMN=CSUMN+CBMN(M,N)*TH2D(0.0D0,KZ22)
1          *CRY(KQ1,KN2,Q,N)
75      CONTINUE
        CSUMM=CSUMM+CSUMN*CRX(KL1,KM2,L,M)
70      CONTINUE
        CTERM1=CSUMM*4/DX1/DY1/TH1D(0.0D0,KZ12)
        RDIF=DABS(1.0-CDABS(CTERM1/CAMN(L,Q)))
        IDIF=0
        IF (RDIF.GT.1.D-3) THEN
          IDIF=1
          WRITE(*,77) L,Q,RDIF,IDIF
77          FORMAT(' [E_21](',I3,',',I3,')=',F15.10,I3)
        ELSE
          IF (IRESU.EQ.0) WRITE(*,78) L,Q,RDIF,IDIF
78          FORMAT(' [E_21](',I3,',',I3,')=',F15.10,I3)
        ENDIF
65      CONTINUE
60      CONTINUE
        IF (IRESU.EQ.0) WRITE(*,*)
C

```

```

RNORM=0.0
DO 80 L=1,MMAX1
  KL1=L*PVX1
  KL12=KL1*KL1
  DO 85 Q=1,NMAX1
    KQ1=Q*PVY1
    KQ12=KQ1*KQ1
    KZ12=E-KL12-KQ12
    IF (KZ12.GT.0.0) THEN
      KZ1=DSQRT(+KZ12)
      RJ1=+0.5*DZ1-0.25/KZ1*DSIN(2*KZ1*DZ1)
    ELSEIF (KZ12.LT.0.0) THEN
      TZ1=DSQRT(-KZ12)
      RJ1=-0.5*DZ1+0.25/TZ1*DSINH(2*TZ1*DZ1)
    ELSE
      RJ1=0.0
    ENDIF
    RNORM=RNORM+CDABS(CAMN(L,Q))**2*RJ1*DX1*DY1/4.0
85    CONTINUE
80  CONTINUE
DO 90 M=-MMAX2,MMAX2
  KM2=KX+M*2.0*PVX2
  KM22=KM2*KM2
  DO 95 N=-NMAX2,NMAX2
    KN2=KY+N*2.0*PVY2
    KN22=KN2*KN2
    KZ22=E-KM22-KN22
    IF (KZ22.GT.0.0) THEN
      KZ2=DSQRT(+KZ22)
      RJ2=+0.5*DZ2-0.25/KZ2*DSIN(2*KZ2*DZ2)
    ELSEIF (KZ22.LT.0.0) THEN
      TZ2=DSQRT(-KZ22)
      RJ2=-0.5*DZ2+0.25/TZ2*DSINH(2*TZ2*DZ2)
    ELSE
      RJ2=0.0
    ENDIF
    RNORM=RNORM+CDABS(CBMN(M,N))**2*RJ2*DX2*DY2
95    CONTINUE
90  CONTINUE
DO 100 L=1,MMAX1
DO 100 Q=1,NMAX1
  CAMN(L,Q)=CAMN(L,Q)/DSQRT(RNORM)
100 CONTINUE
DO 110 M=-MMAX2,MMAX2
DO 110 N=-NMAX2,NMAX2
  CBMN(M,N)=CBMN(M,N)/DSQRT(RNORM)
110 CONTINUE
RETURN
END
C*****
DOUBLE PRECISION FUNCTION PSI12(E,X,Y,Z)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A,B,D-H,O-Z)
IMPLICIT COMPLEX*16(C)
DIMENSION CAMN(20,20)
COMMON/IA/PI,PVX1,PVX2,PVY1,PVY2
COMMON/IB/DX1,DY1,DZ1,DX2,DY2,DZ2,YO,DXY12
COMMON/IC/MMAX1,NMAX1,MMAX2,NMAX2,MMAX
COMMON/IJ/CAMN
DOUBLE PRECISION KL1,KQ1,KL12,KQ12,KZ12
INTEGER Q
CSUML=(0.0,0.0)

```

```

DO 10 L=1,MMAX1
  KL1=L*PVX1
  KL12=KL1*KL1
  CSUMQ=(0.0,0.0)
  DO 20 Q=1,NMAX1
    KQ1=Q*PVY1
    KQ12=KQ1*KQ1
    KZ12=E-KL12-KQ12
    CSUMQ=CSUMQ+CAMN(L,Q)*DSIN(KQ1*(Y-YO))*TH1(Z,KZ12)
20  CONTINUE
    CSUML=CSUML+CSUMQ*DSIN(KL1*(X+0.5*DX1))
10  CONTINUE
  CPSI1=CSUML
  PSI12=CDABS(CPSI1)**2
  RETURN
  END
C*****
DOUBLE PRECISION FUNCTION PSI22(E,X,Y,Z)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A,B,D-H,O-Z)
IMPLICIT COMPLEX*16(C)
DIMENSION CBMN(-10:10,-10:10)
COMMON/IA/PI,PVX1,PVX2,PVY1,PVY2
COMMON/IB/DX1,DY1,DZ1,DX2,DY2,DZ2,YO,DXY12
COMMON/IC/MMAX1,NMAX1,MMAX2,NMAX2,MMAX
COMMON/IG/CI
COMMON/IH/KX,KY
COMMON/IK/CBMN
DOUBLE PRECISION KM2,KN2,KM22,KN22,KZ22
DOUBLE PRECISION KX,KY
CSUMM=(0.0,0.0)
DO 10 M=-MMAX2,MMAX2
  KM2=KX+M*2.0*PVX2
  KM22=KM2*KM2
  CSUMM=(0.0,0.0)
  DO 20 N=-NMAX2,NMAX2
    KN2=KY+N*2.0*PVY2
    KN22=KN2*KN2
    KZ22=E-KM22-KN22
    CSUMM=CSUMM+CBMN(M,N)*CDEXP(CI*KN2*Y)*TH2(Z,KZ22)
20  CONTINUE
  CSUMM=CSUMM+CSUMM*CDEXP(CI*KM2*X)
10  CONTINUE
  CPSI2=CSUMM
  PSI22=CDABS(CPSI2)**2
  RETURN
  END
C*****
C -- (c) MANENKOV A. -- 2000
C .....
C
SUBROUTINE CXDECOM(NDIM,N,A,DET,IPVT,WORK,IER)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A,B,D-H,O-Z)
IMPLICIT COMPLEX*16 (C)
C
C PURPOSE: TO SOLVE A GENERAL SYSTEM OF LINEAR EQUATIONS
C           'AX=B' BY MEANS OF CROUT'S METHOD.
C
C AUTHORS:  J.H. WILKINSON, C. REINSCH.
C           HANDBOOK FOR AUTOMATIC COMPUTATION,
C           MOSCOW, P. 97 (RUSSIAN TRANSLATION).
C
C Complex Double Precision Arithmetic

```

```

C
C   DESCRIPTION OF PARAMETERS:
C
C       A - COEFFICIENT MATRIX (DESTROYED ON RETURN).
C       N - THE NUMBER OF EQUATIONS IN THE SYSTEM.
C       NDIM - THE MAXIMUM SIZE OF THE FIRST DIMENSION
C              OF THE ARRAY 'A' IN THE CALLING PROGRAM.
C       B - VECTOR OF RIGHT HAND SIDE. ON RETURN 'B'
C              CONTAINS THE SOLUTION OF THE EQUATIONS (B=X).
C       DET - THE DETERMINANT OF THE 'A'.
C       IPVT,WORK - WORK VECTORS OF DIMENSION 'N'.
C       IER - ERROR INDICATOR:
C               IER=0 - NO ERROR,
C               IER=1 - 'A' IS NEARLY SINGULAR,
C               IER=2 - DET[A]=0.
C .....
C
C   REAL*8 X,Y,EPS,ANORM
C   COMPLEX*16 A(NDIM,N),WORK(N),YY,DET,D1,FCR
C   INTEGER N,NDIM,IPVT(N)
C
C   INTEGER I,J,K,L,KM1,ID2
C   COMPLEX*16 YZ
C
C   PARAMETER (EPS=2.220446049D-16, EPS8=8.D0*EPS)
C   PARAMETER (ZERO=0.D0)
C ***   PARAMETER (TINY1=1.D-64)
C
C   DET=(0.D0,0.D0)
C   ANORM=ZERO
C   IER=2
C
C   DO 10 I=1,N
C       Y=ZERO
C       DO 5 J=1,N
C           Y=Y+CDABS(A(I,J))
C   5   CONTINUE
C       IF(Y .EQ. ZERO) RETURN
C       IF(Y .GT. ANORM) ANORM=Y
C       WORK(I)=1.0D0/Y
C   10  CONTINUE
C       D1=(1.0D0,0.0D0)
C       ID2=0
C   FOR K=1 TO N DO:
C       DO 200 K=1,N
C           L=K
C           X=ZERO
C           KM1=K-1
C   COMPUTATION OF THE L-MATRIX
C       DO 30 I=K,N
C           YZ=A(I,K)
C           IF(K .EQ. 1) GO TO 25
C           DO 20 J=1,KM1
C               YZ=YZ-A(I,J)*A(J,K)
C   20  CONTINUE
C       A(I,K)=YZ
C   25  CONTINUE
C       Y=CDABS(YZ)*CDABS(WORK(I))
C       IF(Y .LE. X) GO TO 30
C       X=Y
C       L=I

```

```

30     CONTINUE
C     PERMUTATION OF ROWS IF REQUIRED
      IF(L .EQ. K) GO TO 50
      D1=-D1
      DO 40 J=1,N
        YY=A(K,J)
        A(K,J)=A(L,J)
40     A(L,J)=YY
        WORK(L)=WORK(K)
50     CONTINUE
      IPVT(K)=L
      D1=D1*A(K,K)
      IF(X .LT. EPS) IER=1
      IF(X .EQ. ZERO) RETURN
60     IF(CDABS(D1) .LT. 1.0D0) GO TO 70
      D1=D1*(0.0625D0,0.0D0)
      ID2=ID2+4
      GO TO 60
70     IF(CDABS(D1) .GE. 0.0625D0) GO TO 80
      D1=D1*(16.0D0,0.0D0)
      ID2=ID2-4
      GO TO 70
80     CONTINUE
      IF(K .EQ. N) GO TO 110
C     COMPUTATION OF THE U-MATRIX
      FCTR=(1.D0,0.D0)/A(K,K)
      DO 100 J=K+1,N
        YZ=A(K,J)
        IF(K .EQ. 1) GO TO 95
        DO 90 I=1,KM1
          YZ=YZ-A(K,I)*A(I,J)
90     CONTINUE
95     A(K,J)=FCTR*YZ
100    CONTINUE
110    CONTINUE
C     END 'K'
200    CONTINUE
      IER=0
      DET=D1*DCMPLX(2.0D0**ID2,0.0D0)
C
      IF(CDABS(DET) .EQ. ZERO) RETURN
      IF(IER .NE. 1) IER=0
      RETURN
      END
C.....
      SUBROUTINE CXSOLVE(NDIM,N,UL,B,IPVT,IER)
      IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A,B,D-H,O-Z)
      IMPLICIT COMPLEX*16 (C)
C     UL - ARRAY OF THE FACTORIZATION OF THE COEFFICIENT MATRIX.
C     B - RIGHT HAND SIDE VECTOR. ON RETURN 'B'
C     CONTAINS THE SOLUTION OF THE EQUATIONS.
C .....
C
      COMPLEX*16 UL(NDIM,N),B(N),X
      INTEGER N,NDIM,IPVT(N)
C
      INTEGER IP,IM1,I,J
      COMPLEX*16 Y
C
      IF(IER.GE. 2) RETURN
      DO 10 I=1,N

```

```

        IP=IPVT(I)
        IF(IP .EQ. I) GO TO 10
        X=B(I)
        B(I)=B(IP)
        B(IP)=X
10     CONTINUE
        B(1)=B(1)/UL(1,1)
        DO 25 I=2,N
            Y=B(I)
            IM1=I-1
            DO 20 J=1,IM1
                Y=Y-UL(I,J)*B(J)
20     CONTINUE
            B(I)=Y/UL(I,I)
25     CONTINUE
        DO 40 I=N-1,1,-1
            Y=B(I)
            DO 30 J=I+1,N
                Y=Y-UL(I,J)*B(J)
30     CONTINUE
            B(I)=Y
40     CONTINUE
        RETURN
        END
C .....
SUBROUTINE CXINVRT(NDIM,N,A,UL,AINV,IPVT,WORK,IER,DET)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A,B,D-H,O-Z)
IMPLICIT COMPLEX*16 (C)
C   UL - ARRAY OF THE FACTORIZATION OF THE 'A'.
C   AINV - INVERT MATRIX: AINV=A**(-1).
C .....
C
COMPLEX*16 A(NDIM,N),UL(NDIM,N),AINV(NDIM,N),
&   WORK(N),DET
INTEGER NDIM,N,IPVT(N),IER
C
DATA ZERO/0.D0/,CZERO/(0.D0,0.D0)/
C
DO 10 J=1,N
DO 10 I=1,N
    UL(I,J)=A(I,J)
10 CONTINUE
CALL CXDECOM(NDIM,N,UL,DET,IPVT,WORK,IER)
C
IF(ABS(DET) .EQ. ZERO) RETURN
DO 50 J=1,N
    DO 20 I=1,N
20     WORK(I)=CZERO
        WORK(J)=(1.D0,0.D0)
        CALL CXSOLVE(NDIM,N,UL,WORK,IPVT,IER)
C
        DO 40 I=1,N
40     AINV(I,J)=WORK(I)
50 CONTINUE
RETURN
END
C .....
SUBROUTINE CXIMPRV(NDIM,N,A,UL,B,X,IPVT,WORK,IER,DIGITS)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A,B,D-H,O-Z)
IMPLICIT COMPLEX*16 (C)
C   UL - ARRAY OF THE FACTORIZATION OF THE 'A'.

```



```

C      B - RIGHT HAND SIDE VECTOR.
C      X - SOLUTION OF THE EQUATIONS.
C      DIGITS - THE NUMBER OF EXACT DECIMAL DIGITS OF 'X'
C              AFTER FIRST ITERATION IN THE SUBROUTINE.
C      IER - ERROR INDICATOR:
C              IER=0 - NO ERROR,
C              IER=3 - NO CONVERGENCE IN THE SOUBROUTINE,
C              IER=4 - CONVERGENCE IS VERY SLOW.
C
C .....
C
C      COMPLEX*16 A(NDIM,N),UL(NDIM,N),B(N),X(N),WORK(N),T
C      INTEGER IPVT(N)
C
C      REAL*8 XNORM,DXNORM,P0,P1
C      COMPLEX*16 SUM
C
C      PARAMETER (EPS=2.220446049D-16)
C      PARAMETER (ZERO=0.D0)
C
C      IF(IER .GE. 2) RETURN
C
C      ITMAX=14
C      IER=0
C      DIGITS=-DLOG10(0.5D0*EPS)
C      P0=2.0D0
C
C      DO 100 ITER=1,ITMAX
C          DO 20 I=1,N
C              SUM=ZERO
C              DO 10 J=1,N
10                 SUM=SUM+A(I,J)*X(J)
C              SUM=B(I)-SUM
C              WORK(I)=SUM
20                 CONTINUE
C              CALL CXSOLVE(NDIM,N,UL,WORK,IPVT,IER)
C              XNORM=ZERO
C              DXNORM=ZERO
C              DO 40 I=1,N
C                  T=X(I)
C                  X(I)=T+WORK(I)
C                  DXNORM=MAX(DXNORM,CDABS(WORK(I)))
C                  XNORM=DMAX1(CDABS(T),XNORM)
40                 CONTINUE
C              IF(XNORM .EQ. ZERO) RETURN
C              P1=DXNORM/XNORM
C              IF(ITER .NE. 1) GO TO 50
C              IF(P1 .NE. ZERO) DIGITS=-DLOG10(MAX(0.5D0*EPS,P1))
50                 IF(DXNORM .LT. EPS*XNORM) RETURN
C              IF((P1 .LT. 0.5D0*P0) .OR. (ITER .EQ. 1)) GO TO 80
C              DIGITS=ZERO
C              IER=4
C              RETURN
80                 P0=P1
100                CONTINUE
C              IER=3
C              RETURN
C              END
C .....

```

## **ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ**

- 1)** Εξισώσεις Schrödinger :  
Κεφ. 1. Σημειώσεις Μαθήματος Ηλεκτροτεχνικά Υλικά  
Ι. Ξανθάκης Δ. Τσαμάκης Αθήνα 2004
- 2)** Συνθήκη Bloch :  
Κεφ. 2. Σημειώσεις Μαθήματος Ηλεκτροτεχνικά Υλικά  
Ι. Ξανθάκης Δ. Τσαμάκης Αθήνα 2004
- 3)** Σωματίδιο σε τρισδιάστατο κουτί  
Κεφ. 12. Ενότητα 12.7 Φυσική των Ταλαντώσεων και των Κυμάτων  
H.J.Pain , Imperial College University of London
- 4)** Geometry induced Localization of Electronics in Quantum Pillars  
I.Tigelis and J. Xanthakis Athens 1996
- 5)** Quantum Pillar Structures on  $n^+$  GaAs fabricated using Natural Lithography  
Appl. Phys. Letter 62 pp 264 ,1993  
M. Green, M. Garcia-Parajo, F. Khaleque and R. Murray
- 6)** Visible Luminescence from one- and two-dimensional silicon structures produced  
by conventional lithographic and reactive ion etching techniques  
Appl. Phys. Letter 66 pp 1115 ,1995  
A.G. Nassiopoulou, G. Grigoropoulos, E. Gogolides and D. Papadimitriou
- 7)** Πρόγραμμα FORTRAN  
Ι. Τίγκελης Τμήμα Φυσικής Πανεπιστημίου Αθηνών

.....  
Εμμανουήλ Σ. Καπαρός

Διπλωματούχος Ηλεκτρολόγος Μηχανικός και Μηχανικός Υπολογιστών Ε.Μ.Π.

Copyright © Εμμανουήλ Σ. Καπαρός, 2004.  
Με επιφύλαξη παντός δικαιώματος. All rights reserved.

Απαγορεύεται η αντιγραφή, αποθήκευση και διανομή της παρούσας εργασίας, εξ ολοκλήρου ή τμήματος αυτής, για εμπορικό σκοπό. Επιτρέπεται η ανατύπωση, αποθήκευση και διανομή για σκοπό μη κερδοσκοπικό, εκπαιδευτικής ή ερευνητικής φύσης, υπό την προϋπόθεση να αναφέρεται η πηγή προέλευσης και να διατηρείται το παρόν μήνυμα. Ερωτήματα που αφορούν τη χρήση της εργασίας για κερδοσκοπικό σκοπό πρέπει να απευθύνονται προς τον συγγραφέα.

Οι απόψεις και τα συμπεράσματα που περιέχονται σε αυτό το έγγραφο εκφράζουν τον συγγραφέα και δεν πρέπει να ερμηνευθεί ότι αντιπροσωπεύουν τις επίσημες θέσεις του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου.