

ЕНЕРГЕТИЧНИЙ СПЕКТР ЕЛЕКТРОНА В ЕЛІПТИЧНІЙ НАПІВПРОВІДНИКОВІЙ НАНОТРУБЦІ

Володимир ГОЛОВАЦЬКИЙ, Василь ГУЦУЛ

Чернівецький національний університет
імені Юрія Федьковича,
вул. Коцюбинського 2, Чернівці 58012
e-mail: ktf@chnu.edu.ua

Редакція отримала статтю 10 січня 2010 р.

У наближенні ефективної маси досліджено енергетичний спектр електрона в еліптичній напівпровідниковій нанотрубці GaAs, поміненій у діелектричне середовище. В еліптичній системі координат отримано розв'язок рівняння Шредінгера для електрона на основі парних і непарних функцій Мат'є. Показано, що енергетичний спектр складається з серій рівнів, що відповідають парним і непарним станам електрона, які мають різну поведінку залежно від фокусної віддалі еліптичних циліндрів, що обмежують нанотрубку, а в разі виродження еліптичної нанотрубки в циліндричну, енергії парних і непарних станів збігаються. Отримано залежність електронного енергетичного спектра від геометричних розмірів еліптичної нанотрубки.

1. ВСТУП

Сучасні технології дають змогу вирощувати напівпровідникові квантові дроти, нанотрубки, складні багат шарові квазіодновимірні наноструктури різної форми поперечного перетину [1, 2]. Потенціальні можливості квантових дротів можуть суттєво розширитись за рахунок створення аксіальної гетероструктури вздовж осі квантового дроту методом чергування напівпровідникових матеріалів з різною шириною забороненої зони. Так створюються резонансні діоди [3], квантові транзистори та надгратки вздовж нанодроту [4], які можуть слугувати елементами складних логічних пристроїв наноелектроніки.

На даному етапі розвитку теорії енергетичних спектрів квазічастинки у квазіодновимірних наносистемах переважна більшість досліджень виконана для циліндричних наносистем, адже для них існують прості точні розв'язки рівняння Шредінгера. Для таких систем у наближенні ефективних мас досліджували енергетичні спектри електронів, дірок, екситонів, електрон-фононна й екситон-фононна

взаємодія, енергетичні спектри та потенціали поляризації інтерфейсних і обмежених оптичних фононів.

Усе ще мало досліджені вплив форми поперечного перерізу та поперечної анізотропії напівпровідникового матеріалу квантового дроту на фізичні характеристики наногетеросистеми. Такі дослідження актуальні, оскільки реальні наногетероструктури можуть мати еліптичну форму внаслідок анізотропії росту чи деформації наносистеми. Крім цього, як показано [5], задача знаходження енергетичного спектра квазічастинок у циліндричному квантовому дроті з поперечною анізотропією ефективної маси зводиться до задачі знаходження енергетичного спектра квазічастинок у еліптичному квантовому дроті з ізотропною ефективною масою.

Еліптичні нанодроти та еліптичні нанотрубки завдяки анізотропії форми володіють унікальними фізичними властивостями, на основі яких можна створити нові електронні наноприлади для сучасної наелектроніки. Такі наногетеросистеми можуть знайти застосування як ефективні світловипромінювачі з яскраво вираженою анізотропією інтенсивності та поляризації випроміненого світла.

2. ГАМІЛЬТОНІАН І ХВИЛЬОВІ ФУНКЦІЇ ЕЛЕКТРОНА В ЕЛІПТИЧНІЙ НАПІВПРОВІДНИКОВІЙ НАНОТРУБЦІ

Розглянемо еліптичну напівпровідникову нанотрубку (ЕНН) GaAs (середовище 1), вміщену в діелектричну матрицю (середовища 0 і 2), геометрична і потенціальна схема якої зображена на рис. 1.

Систему координат оберемо так, що вісь Oz спрямована вздовж нанотрубки. Потенціальна енергія та ефективна маса електрона в декартових координатах матиме такий вигляд:

$$\mu(x, y) = \begin{cases} \mu_0, & x^2/a_0^2 + y^2/b_0^2 \leq 1, \\ \mu_1, & x^2/a_0^2 + y^2/b_0^2 > 1 \cap x^2/a_1^2 + y^2/b_1^2 \leq 1 \\ \mu_2 = \mu_0, & x^2/a_1^2 + y^2/b_1^2 > 1, \end{cases} \quad (1)$$

$$U(x, y) = \begin{cases} V_0, & x^2/a_0^2 + y^2/b_0^2 \leq 1, \\ V_1 = 0, & x^2/a_0^2 + y^2/b_0^2 > 1 \cap x^2/a_1^2 + y^2/b_1^2 \leq 1 \\ V_2 = V_0, & x^2/a_1^2 + y^2/b_1^2 > 1, \end{cases} \quad (2)$$

де a_0 , b_0 та a_1 , b_1 – півосі внутрішнього та зовнішнього еліпса відповідно.

У напрямі вздовж ЕНН електрон здійснює вільний рух. Частка енергії, зумовленої поздовжнім рухом, має вигляд $E_z = \hbar^2 k_z^2 / 2\mu^*$, де μ^* – усереднена ефективна маса. Користуючись терміном “усереднена ефективна маса”, ми наголошуємо, що квазічастинка, як єдиний квантовий об’єкт, рухається в поздовжньому напрямку з квазіімпульсом k_z в усіх шарах ЕНН одночасно, хоча при цьому перебуває у різних шарах із різною ймовірністю.

Енергію, зумовлену поперечним рухом електрона, знаходимо з рівняння Шредінгера, яке в загальному випадку координатно залежної

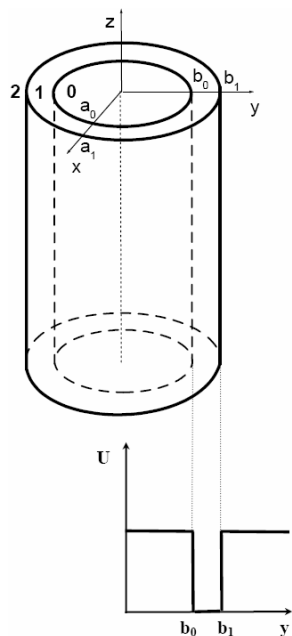


Рис. 1. Геометрична і потенціальна схема еліптичної напівпровідникової нанотрубки.

маси має такий вигляд:

$$-\frac{\hbar^2}{2} \vec{\nabla} \frac{1}{\mu(x, y)} \vec{\nabla} \Psi(x, y) + U(x, y) \Psi(x, y) = E \Psi(x, y). \quad (3)$$

Підставляючи (1) і (2) в рівняння (3), отримуємо для кожного середовища рівняння

$$\Delta \Psi^{(i)}(x, y) + k_i^2 \Psi^{(i)}(x, y) = 0, \quad i = 0, 1, 2, \quad (4)$$

де $k_i^2 = \frac{2\mu_i}{\hbar^2} (E - V_i)$. Позаяк дана наногетеросистема володіє еліптичною симетрією, рівняння (4) зручно розв'язувати в еліптичних координатах (ξ, η, z) , які пов'язані з декартовими такими співвідношеннями:

$$\left. \begin{aligned} x &= f \operatorname{ch} \xi \cos \eta, & 0 \leq \xi < \infty \\ y &= f \operatorname{sh} \xi \sin \eta, & 0 \leq \eta < 2\pi \\ z &= z, & -\infty < z < +\infty \end{aligned} \right\}, \quad (5)$$

де $f = \sqrt{a_0^2 - b_0^2} = \sqrt{a_1^2 - b_1^2}$ – фокусна відстань нанотрубки; ξ виконує роль радіальної, а η – кутової координати.

Перейшовши у рівняннях (4) від декартових координат до еліптичних, отримаємо

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} + \frac{f^2 k_i^2}{2} (\operatorname{ch} 2\xi - \cos 2\eta) \right] \Psi^{(i)}(\xi, \eta) = 0, \quad i = 0, 1, 2. \quad (6)$$

Хвильову функцію $\Psi_m^{(i)}(\xi, \eta)$ можна подати у вигляді

$$\Psi_m^{(i)}(\xi, \eta) = R_m^{(i)}(\xi) \theta_m^{(i)}(\eta), \quad (7)$$

де $R_m^{(i)}(\xi)$ – радіальна і $\theta_m^{(i)}(\eta)$ – кутова частини, які задовольняють рівняння Матґе:

$$\partial^2 \theta_m^{(i)}(\eta) / \partial \eta^2 + (c - 2q_i \cos 2\eta) \theta_m^{(i)}(\eta) = 0; \quad (8)$$

$$\partial^2 R_m^{(i)}(\xi) / \partial \xi^2 - (c - 2q_i \operatorname{ch} 2\xi) R_m^{(i)}(\xi) = 0, \quad (9)$$

де $q_i = f^2 k_i^2 / 4$; c – стала розділення.

Розв'язками рівняння (8) є функції Матґе першого та другого роду. Оскільки умови періодичності можуть задовольнятися лише парною $ce_m(q, \eta)$ та непарною $se_m(q, \eta)$ функціями Матґе першого роду, то кутова частина хвильової функції матиме такий вигляд:

$$\theta_m(q, \eta) = \begin{cases} ce_m(q, \eta), & m = 0, 1, 2, 3, \dots, \\ se_m(q, \eta), & m = 1, 2, 3, \dots \end{cases} \quad (10)$$

Розв'язками радіального рівняння (9) в загальному випадку є лінійна комбінація парних (e) ($m = 0, 1, 2, 3, \dots$) та непарних (o) ($m = 1, 2, 3, \dots$) модифікованих функцій Матґе першого і другого роду:

$$R_m^e(q, \xi) = \begin{cases} A_m^e J e_m(q, \xi) + B_m^e N e_m(q, \xi), & q > 0 \\ A_m^e I e_m(q, \xi) + B_m^e K e_m(q, \xi), & q < 0 \end{cases} \quad (11)$$

$$R_m^o(q, \xi) = \begin{cases} A_m^o J o_m(q, \xi) + B_m^o N o_m(q, \xi), & q > 0 \\ A_m^o I o_m(q, \xi) + B_m^o K o_m(q, \xi), & q < 0 \end{cases} \quad (12)$$

де $A_m^e, A_m^o, B_m^e, B_m^o$ – відповідні коефіцієнти, що визначаються граничними умовами та умовою нормування.

Якщо еліптична напівпровідникова нанотрубка поміщена в діелектричне середовище, то потенціальний бар'єр досить високий, що дає змогу знехтувати можливістю проникнення електрона в середовища (0) та (2). Для знаходження енергетичного спектра електрона в подібній наносистемі запишемо граничні умови для парної та непарної радіальних хвильових функцій квазічастинки на зовнішній і внутрішній еліптичних межах:

$$\left. \begin{aligned} A_m^e J e_m(q, \xi_0) + B_m^e N e_m(q, \xi_0) &= 0 \\ A_m^e J e_m(q, \xi_1) + B_m^e N e_m(q, \xi_1) &= 0 \end{aligned} \right\}; \quad (13)$$

$$\left. \begin{aligned} A_m^o J_{0m}(q, \xi_0) + B_m^o N_{0m}(q, \xi_0) &= 0 \\ A_m^o J_{0m}(q, \xi_1) + B_m^o N_{0m}(q, \xi_1) &= 0 \end{aligned} \right\}, \quad (14)$$

де $\xi_0 = \operatorname{arctanh}(b_0/a_0)$; $\xi_1 = \operatorname{arctanh}(b_1/a_1)$.

Системи рівнянь (13) та (14) відносно коефіцієнтів $A_m^e, A_m^o, B_m^e, B_m^o$ мають ненульові розв'язки лише при значеннях $q = q_{nm}^{e(o)} = \frac{f^2 \mu_1}{2\hbar^2} E_{nm}^{e(o)}$, які задовольняють відповідні дисперсійні рівняння

$$J_{em}(q, \xi_0) N_{em}(q, \xi_1) - N_{em}(q, \xi_0) J_{em}(q, \xi_1) = 0; \quad (15)$$

$$J_{om}(q, \xi_0) N_{om}(q, \xi_1) - N_{om}(q, \xi_0) J_{om}(q, \xi_1) = 0, \quad (16)$$

де $n = 1, 2, 3, \dots$ – головне квантове число, яке нумерує порядковий номер коренів відповідних рівнянь (15) та (16); квантове число m визначається порядком відповідних функцій Матьє, через які виражають радіальну та кутову частини хвильової функції.

Рівняння (15) і (16) визначають безмежний дискретний набір парних E_{nm}^e та непарних E_{nm}^o енергетичних станів квазічастинки.

3. АНАЛІЗ І ОБГОВОРЕННЯ РЕЗУЛЬТАТІВ ОБЧИСЛЕНЬ

Енергетичний спектр електрона визначали для еліптичної нанотрубки GaAs з ефективною масою електрона $\mu_1 = 0,067m_e$ (m_e – маса вільного електрона) та сталою кристалічної ґратки $a_{GaAs} = 5,65 \text{ \AA}$.

На рис. 2 показано залежність енергетичного спектра електрона в нанотрубці від величини a_0 при $\Delta a = 5 a_{GaAs}$, $f = 4,5 a_{GaAs}$ і півосями $a_0, b_0 = \sqrt{a_0^2 - f^2}$ та $a_1 = a_0 + \Delta a, b_1 = \sqrt{a_1^2 - f^2}$.

Із рис. 2 бачимо, що зі збільшенням a_0 при сталому значенні фокусної віддалі ЕНН швидко вироджується в нанотрубку колового перерізу (про це свідчить співвідношення a_0/b_0 на рисунку). Як наслідок, енергії парних $(n, m)^e$ та непарних $(n, m)^o$ станів, отримані з рівнянь (15) та (16), зближаються між собою і наближаються до значень енергій у циліндричній нанотрубці.

Подальше збільшення a_0 приводить до виродження енергій за квантовим числом m і отримується енергетичний спектр електрона в плоскій напівпровідниковій плівці товщиною Δa . При малих значеннях квантового числа m енергії парних станів $(n, m)^e$ близькі до енергій непарних станів $(n, m+1)^o$. Збільшення квантового числа m приводить до перебудови спектра так, що спостерігається зближення енергій станів $(n, m)^e$ та $(n, m)^o$.

Таку поведінку спектра легко пояснити, проаналізувавши залежність енергетичного спектра електрона в нанотрубці від фокусної віддалі еліптичних циліндрів, що обмежують ЕНН GaAs при сталих значеннях $a_0 = 10 a_{GaAs}$ та $\Delta a = 5 a_{GaAs}$ (рис. 3).

Як бачимо з рис. 3, при $f = 0$ (еліпс вироджується в коло) енергії відповідних парних і непарних станів збігаються і відповідають енергетичному спектру електрона в циліндричній нанотрубці. Зі збільшенням величини фокусної віддалі при сталих a_0 та Δa всі енергетичні

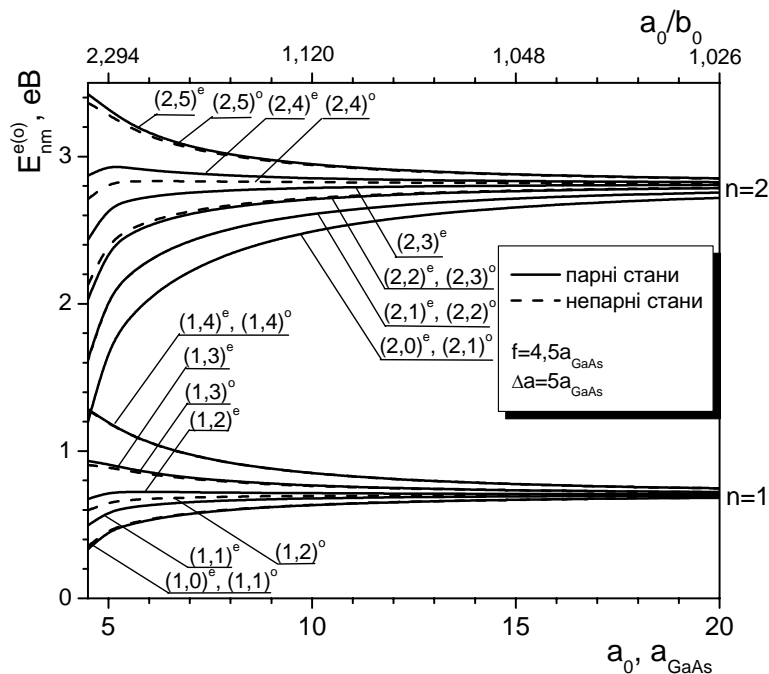


Рис. 2. Залежність енергетичного спектра електрона в ЕНН GaAs від значення a_0 при $\Delta a = 5 a_{GaAs}$ та $f = 4,5 a_{GaAs}$.

рівні зсуваються в область менших енергій, що пояснюється зменшенням розмірного квантування, оскільки зростає Δb . При цьому відбувається розщеплення енергетичних рівнів і енергії непарних станів спадають швидше, наближаючись до сусідніх парних станів з меншим на одиницю значенням квантового числа m . Зі збільшенням квантового числа m величина розщеплення енергетичних рівнів зменшується.

У граничному випадку $f \rightarrow a_0$ нанотрубка близька до еліптичного квантового дроту. Тоді енергії парних і непарних станів електрона в нанотрубці прямують до енергій відповідних станів електрона в еліптичному квантовому дроті, який володіє відповідними геометричними розмірами.

4. ВИСНОВКИ

В еліптичній системі координат на основі функцій Мат'є в наближенні ефективних мас визначено енергетичний спектр електрона в ЕНН GaAs, поміщений у діелектричне середовище. Енергетичний спектр електрона складається з серій енергетичних рівнів, що відповідають парним і непарним станам електрона. Отримані точні розв'язки рівняння Шредінгера можуть бути використані при дослідженні взаємодії квазічастинок у нанотрубках еліптичного перерізу.

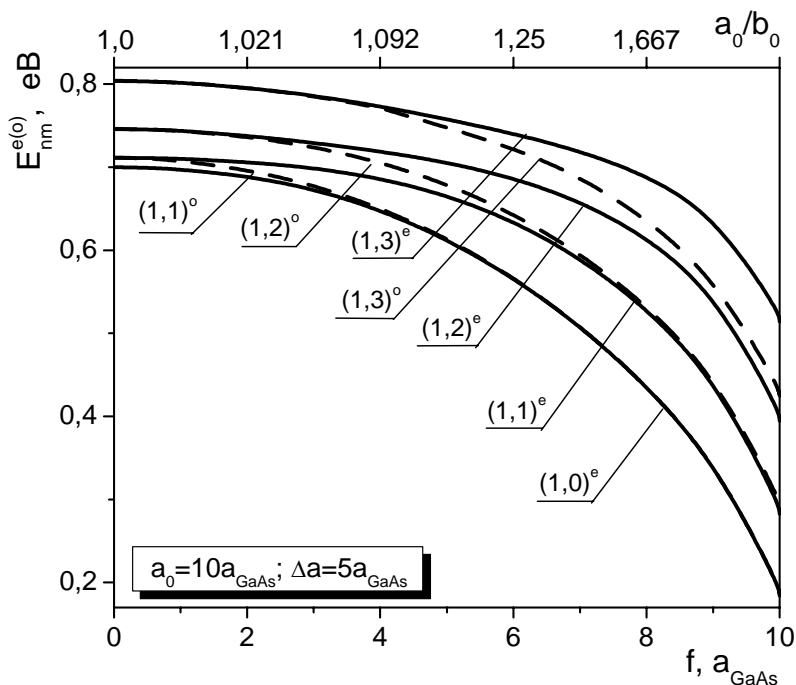


Рис. 3. Залежність енергетичного спектра електрона ЕНН GaAs від f . Суцільні лінії – парні стани, штрихові – непарні.

Результати дослідження енергетичного спектра електрона в ЕНН показують, що величина розщеплення між енергіями парних і непарних станів залежить від ексцентриситету обох меж поділу середовищ, причому навіть незначна деформація нанотрубки істотно впливає на енергетичний спектр електронів.

ЛІТЕРАТУРА

- [1] Mohan P., Motohisa J., Fukui T. Appl. Phys. Lett. 2006. **88**. 0131101–0131103.
- [2] Noborisaka J., Motohisa J., Hara S., Fukui T. Appl. Phys. Lett. 2005. **87**. 931091–931093.
- [3] Bjork, M., Ohlsson B., Thelander C. et al. Appl. Phys. Lett. 2002. **81**. 4458–4462.
- [4] Gudiksen M., Lauhon L., Wang J. Nature. 2002. № 415. 617–622.
- [5] Bejenari I., Kantser V., Myronov M. et al. Semicond. Sci. Technol. 2004. **19**. 106–112.

**ELECTRON ENERGY SPECTRUM
IN ELLIPTIC SEMICONDUCTOR NANOTUBE***Volodymyr HOLOVATSKY, Vasyl GUTSUL*

Yurii Fedkovich Chernivtsi National University,
58012 Chernivtsi, Kotcibinsky Str. 2
e-mail: ktf@chnu.edu.ua

The electron energy spectrum in elliptic semiconductor nanotubes is investigated within the effective mass approximation. In elliptic coordinates, there is obtained a solution of Shroedinger equation based on the Mathieu functions. The dependencies of the electron size quantization spectrum on the sizes and the shape of the nanotube are calculated. It is shown that the ellipticity of the nanotube leads to the breakage of the degeneration quasiparticle energy spectrum. The energy dependencies of odd and even electron states on the focus distance are of nonmonotonous character. In the limiting case of the degeneracy of elliptic nanotubes into circle ones, the quasiparticle energy spectrum coincides with the corresponding quasiparticle spectrum in cylindrical nanosystems.