

ВПЛИВ ДОНОРНОЇ ДОМІШКИ НА ЕНЕРГЕТИЧНИЙ СПЕКТР І ХВИЛЬОВІ ФУНКЦІЇ ЕЛЕКТРОНА В ЦИЛІНДРИЧНІЙ НАПІВПРОВІДНИКОВІЙ НАНОТРУБЦІ В МАГНІТНОМУ ПОЛІ

У моделі ефективних мас та прямокутних потенціалів запропоновано теорію енергетичного спектра та хвильових функцій електрона у складній кількшаровій циліндричній напівпровідниковій нанотрубці з донорною домішкою у магнітному полі. На прикладі нанотрубки на основі напівпровідників GaAs/Al_{0,4}Ga_{0,6}As проаналізовано залежність енергій електрона від радіуса внутрішньої дротини наносистеми.

Ключові слова: нанотрубка, донорна домішка, магнітне поле, енергетичний спектр електрона.

В модели эффективных масс и прямоугольных потенциалов предложена теория энергетического спектра и волновых функций электрона в сложной многослойной цилиндрической полупроводниковой нанотрубке с донорной примесью в магнитном поле. На примере нанотрубки на основе полупроводников GaAs/Al_{0,4}Ga_{0,6}As проанализирована зависимость энергий электрона от радиуса внутренней проволоки наносистемы.

Ключевые слова: нанотрубка, донорная примесь, магнитное поле, энергетический спектр электрона.

The theory of energy spectrum and wave functions of electron in complicated multi-shell cylindrical semiconductor nanotube with donor impurity in magnetic field is proposed in the frames of the model of effective mass and rectangular potentials. The electron energy as function of inner wire radius of nano system is analyzed for the nanotube composed of GaAs/Al_{0,4}Ga_{0,6}As semiconductors.

Key words: nanotube, donor impurity, magnetic field, energy spectrum.

На даний час експериментальні можливості дозволяють вченим формувати ансамблі простих (з однією квантовою ямою для електрона) та складних кількшарових напівпровідникових нанотрубок з чіткими геометричними формами [1-4].

Такі наносистеми є перспективними щодо їхнього використання як базових елементів у приладах сучасної електроніки.

Для нанотрубок циліндричної і шестигранної симетрії уже розроблена теорія екситонного і фононного спектрів, а також теорія електрон- та екситон-фононної взаємодії, яка добре узгоджується як з експериментальними результатами, так і з загальними фізичними міркуваннями [5,6].

Оскільки нам відомо, питання взаємодії електрона з донорною домішкою у складній кількшаровій напівпровідниковій нанотрубці, що знаходиться у постійному магнітному полі не досліджувалося взагалі.

Тому метою даної роботи є побудова одного із можливих теоретичних підходів для дослідження енергетичного спектра електрона у складній циліндричній напівпровідниковій нанотрубці з донорною домішкою на її аксіальній осі. Як приклад будуть проаналізовані залежності енергій електрона від індукції магнітного поля та геометричних параметрів наносистеми на основі напівпровідників GaAs і Al_{0,4}Ga_{0,6}As.

1. Теорія енергетичного спектра і хвильових функцій електрона у циліндричній напівпровідниковій нанотрубці з донорною домішкою в магнітному полі.

Досліджується складна циліндрична напівпровідникова нанотрубка, що складається із квантового дроту радіуса ρ_0 (середовище "0"), тонкого напівпровідникового шару – бар'єра товщиною Δ ("1"), та нанотрубки товщиною h ("2"), вміщених у зовнішнє середовище ("3"). Поперечний переріз такої нанотрубки зображено на рис.1.

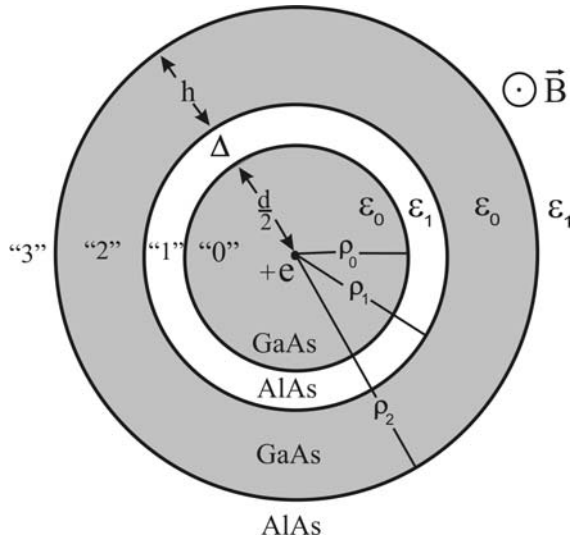


Рис. 1. Поперечний переріз складної циліндричної напівпровідникової нанотрубки.

Донорна домішка розташована в початку координат, а магнітне поле прикладене так, що його індукція \vec{B} паралельна до аксіальної осі нанотрубки.

Діелектричні проникності, ефективні маси і потенціальні енергії електрона вважаються відомими у всіх областях складної нанотрубки

$$\varepsilon(\rho) = \begin{cases} \varepsilon_0, & \mu(\rho) = \begin{cases} \mu_0, \\ \mu_1, \end{cases} \end{cases} \quad (1)$$

$$U(\rho) = \begin{cases} 0, & \text{"0", "2"}, \\ U_0, & \text{"1", "3"}. \end{cases}$$

Для того, щоб знайти енергетичний спектр та хвильові функції електрона необхідно розв'язати стаціонарне рівняння Шредінгера

$$\hat{H}(\rho, \varphi, z)\Psi(\rho, \varphi, z) = E\Psi(\rho, \varphi, z) \quad (2)$$

з гамільтоніаном

$$\hat{H}(\rho, \varphi, z) = \hat{H}_0(\rho, \varphi) - \frac{\hbar^2}{2\mu(\rho)} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(\rho, z). \quad (3)$$

Тут

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2\mu} \left[-\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) + i\hbar V e \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{e^2 B^2 \rho^2}{4} \right] + U(\rho) \quad (4)$$

- гамільтоніан, що описує рух електрона у площині, перпендикулярній до аксіальної осі нанотрубки без домішки;

другий доданок (3) визначає кінетичну енергію електрона вздовж осі Oz ;

$$V(\rho, z) = -\frac{e^2}{\varepsilon(\rho)\sqrt{\rho^2 + z^2}} \quad (5)$$

- потенціальна енергія взаємодії між електроном і домішкою.

Рівняння Шредінгера з гамільтоніаном (4) розв'язується точно в кожній із областей складної нанотрубки. Хвильові функції електрона при цьому доцільно шукати у вигляді

$$\varphi_m^{(p)}(\vec{\rho}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} R_m^{(p)}(\rho) e^{im\varphi}, \quad p = 0, 1, 2, 3, \quad (6)$$

де m - магнітне квантове число.

Уводячи нову незалежну змінну

$$\xi = \left(\frac{|e|B}{2\hbar} \right) \rho^2 \quad (7)$$

та підставляючи (6) у відповідні рівняння Шредінгера з гамільтоніаном (4) для радіальної складової хвильової функції $R_m^{(p)}(\rho)$

отримуються рівняння

$$\left(\xi \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \frac{\partial}{\partial \xi} - \frac{m^2}{4\xi} - \frac{m}{2} - \frac{\xi}{4} + \frac{E - U_p}{\hbar\omega_c^{(p)}} \right) R_m^{(p)}(\xi) = 0. \quad (8)$$

Тут

$$\omega_c^{(p)} = \begin{cases} \omega_c^{(0)} = \frac{|e|B}{\mu_0}, \\ \omega_c^{(1)} = \frac{|e|B}{\mu_1}. \end{cases} \quad (9)$$

Аналітичними розв'язками рівнянь (8) є функції

$$R_m^{(p)}(\xi) = e^{-\frac{\xi}{2}} \xi^{\frac{|m|}{2}} W(\xi), \quad (10)$$

де

$$W(\xi) = \begin{cases} A_m^{(0)} L\left(\beta_k - \frac{|m|+1}{2}, |m|, \xi\right), & \text{"0"} \\ A_m^{(1)} L\left(-\frac{|m|+1}{2} - \gamma_k, |m|, \xi\right) + B_m^{(1)} U\left(\frac{|m|+1}{2} + \gamma_k, |m|+1, \xi\right), & \text{"1"} \end{cases}$$

$$W(\xi) = \begin{cases} A_m^{(2)} L\left(\beta_k - \frac{|m|+1}{2}, |m|, \xi\right) + \\ + B_m^{(2)} U\left(\frac{|m|+1}{2} - \beta_k, |m|+1, \xi\right), & \text{"2"} \\ B_m^{(3)} U\left(\frac{|m|+1}{2} + \gamma_k, |m|+1, \xi\right), & \text{"3"} \end{cases} \quad (11)$$

$$\beta_k = -\frac{m}{2} + \frac{E}{\hbar\omega_c^{(0)}}, \quad \gamma_k = \frac{1}{\hbar\omega_c^{(1)}}(U_0 - E) + \frac{m}{2},$$

U - конфлюентна гіпергеометрична функція, L - узагальнений поліном Лагерра.

Усі невідомі коефіцієнти, що входять у (11) та спектр електрона однозначно визначаються крайовими умовами

$$\begin{cases} R_m^{(p)}(\rho_p) = R_m^{(p+1)}(\rho_p), \\ \left. \frac{1}{\mu_p} \frac{\partial R_m^{(p)}(\rho)}{\partial \rho} \right|_{\rho=\rho_p} = \left. \frac{1}{\mu_{p+1}} \frac{\partial R_m^{(p+1)}(\rho)}{\partial \rho} \right|_{\rho=\rho_p}, \end{cases} \quad (p = 0, 1, 2). \quad (12)$$

та умовою нормування

$$\int_0^\infty \left| R_m^{(p)}(\rho) \right|^2 \rho d\rho = 1. \quad (13)$$

Отже, рівняння (12) і (13) однозначно визначають хвильові функції ($\varphi_{n_\rho m}^{(p)}(\vec{\rho})$) і енергетичний спектр ($E_{n_\rho m}^{(0)}$) електрона у нанотрубці в магнітному полі без домішки (n_ρ - радіальне квантове число).

Рівняння Шредінгера (2) з гамільтоніаном (3) точно не розв'язується через складну залежність потенціальної енергії взаємодії (5) та діелектричної проникності від змінної ρ . Наближений розв'язок задачі можна шукати так.

Здійснимо усереднення потенціальної енергії взаємодії електрона з домішкою на електронних хвильових функціях (6)

$$V_{n_\rho m}(z) = \frac{e^2}{\bar{\epsilon}} \iint \frac{\left| \varphi_{n_\rho m}^{(p)}(\rho, \varphi) \right|^2}{\sqrt{\rho^2 + z^2}} \rho d\rho d\varphi, \quad (14)$$

де $\bar{\epsilon} = (\epsilon_0 + \epsilon_1)/2$.

Тепер у просторі внутрішньої дротини, або нанотрубки гамільтоніан (3) набуде вигляду

$$\hat{H}(z) = -\frac{\hbar^2}{2\mu_0} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - V_{n_\rho m}(z) + E_{n_\rho m}^{(0)}. \quad (15)$$

Зрозуміло, що рівняння Шредінгера з гамільтоніаном (15) для z -ої компоненти точно не розв'язується. Для його наближеного розв'язку скористаємось модифікованим варіаційним методом Бете. Для цього у гамільтоніані (15) додамо і віднімемо потенціал

$$V(z) = -\frac{e^2}{\bar{\epsilon}} \frac{1}{(\beta + |z|)}. \quad (16)$$

Рівняння Шредінгера для z -ї компоненти

$$\hat{H}_z \Psi_{n_z}(z) = E_{n_z} \Psi_{n_z}(z) \quad (17)$$

з гамільтоніаном

$$\hat{H}_z = -\frac{\hbar^2}{2\mu_0} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{e^2}{\bar{\epsilon}} \frac{1}{(\beta + |z|)} \quad (18)$$

розв'язується точно, а хвильова функція отримується у вигляді

$$\begin{aligned} \Psi_{n_z}(\beta, z) &= A \exp(-\chi(z + \beta)) \times \\ &\times U\left(-\frac{\nu}{2\chi}; 0; 2\chi(z + \beta)\right), \end{aligned} \quad (19)$$

де $\nu = \frac{2\mu_0}{\hbar^2} \frac{e^2}{\bar{\epsilon}}$, $\chi^2 = \frac{2\mu_0}{\hbar^2} E_{n_z}$, (20)

A - константа нормування, U - конфлюентна гіпергеометрична функція.

Енергетичний спектр $E_{n_z}(\beta)$ однозначно визначається з крайових умов

$$\begin{cases} \left. \frac{\partial \Psi_{n_z}(z)}{\partial z} \right|_{z=0} = 0, & \Psi_{n_z} - \text{парна}, \\ \Psi_{n_z}(0) = 0, & \Psi_{n_z} - \text{непарна}. \end{cases} \quad (21)$$

Тепер енергія електрона, як функція варіаційного параметра β , задається виразом

$$E_{n_\rho m n_z}(\beta) = E_{n_\rho m}^{(0)} + \Delta E_{n_\rho m n_z}(\beta), \quad (22)$$

а хвильові функції

$$\begin{aligned} \Psi_{n_\rho m n_z}(\beta, \vec{r}) &= \Psi_{n_z}(\beta, z) \varphi_{n_\rho m}^{(p)}(\rho, \varphi) = \\ &= |n_\rho m n_z\rangle. \end{aligned} \quad (23)$$

Енергія зв'язку ($\Delta E_{n_\rho m n_z}(\beta)$) електрона

з домішкою у (22), природно, складається із енергії зв'язаного стану (E_{n_z}) вздовж осі Oz і поправки ($\delta E_{n_p m n_z}(\beta)$), яка розраховується, як діагональний матричний елемент оператора збурення

$$\Delta V_{n_p m}(z) = \frac{e^2}{\varepsilon} \left(\frac{1}{\beta + |z|} - V_{n_p m}(z) \right) \quad (24)$$

на хвильових функціях (23)

$$\Delta E_{n_p m n_z}(\beta) = E_{n_z}(\beta) + \delta E_{n_p m n_z}(\beta), \quad (25)$$

$$\delta E_{n_p m n_z}(n_z, \beta) =$$

$$= \frac{e^2}{\varepsilon} \langle n_z | \left(\frac{1}{\beta + |z|} - V_{n_p m}(z) \right) | n_z \rangle. \quad (26)$$

Знайшовши значення $\bar{\beta}$, яка реалізує мінімум функціоналу (25) $\Delta E_{n_p m n_z}(\bar{\beta})$ отримуються кінцеві вирази для енергетичного спектра (22) і хвильових функцій (23) електрона у складній циліндричній напівпровідниковій нанотрубці з донорною домішкою, яка перебуває у постійному магнітному полі з індукцією \vec{B} .

2. Аналіз залежності енергії електрона від радіуса внутрішньої дротини на прикладі кількешарової нанотрубки GaAs/Al_{0,4}Ga_{0,6}As

Еволюція електронного спектра, як функції радіуса внутрішньої дротини вивчалась на прикладі циліндричної кількешарової напівпровідникової нанотрубки на основі напівпровідників GaAs і Al_{0,4}Ga_{0,6}As з такими матеріальними параметрами: $\mu_0=0,063 \cdot m_0$, $\mu_1=0,096 \cdot m_0$, $U_0=297$ меВ, $\varepsilon_0=12,9$, $\varepsilon_0^{\infty}=11,76$ (m_0 - маса вільного електрона у вакуумі), постійна ґратки середовища GaAs - $a_{\text{GaAs}}=5,65$ Å.

На рис.2 наведено залежність енергій електрона від радіуса внутрішньої дротини при фіксованих товщинах шару – бар'єру $\Delta = 4a_{\text{GaAs}}$, нанотрубки $h=4$ нм, $B=20$ Тл за наявності (суцільна крива) та відсутності (штрихова крива) домішки.

З рис.2 видно, що всі електронні енергетичні рівні складно і немонотонно залежать

від радіуса внутрішньої дротини. Така поведінка енергій електрона зумовлена можливістю різної локалізації квазічастинки у складній наносистемі. Ті області, де зі збільшенням ρ_0 енергія зростає, відповідають станам, перебуваючи в яких електрон із переважною ймовірністю локалізується у нанотрубці товщиною h . Якщо ж електрон локалізується у внутрішній дротині, то зі збільшенням ρ_0 його енергія, природно, зменшується із виходом на насичення.

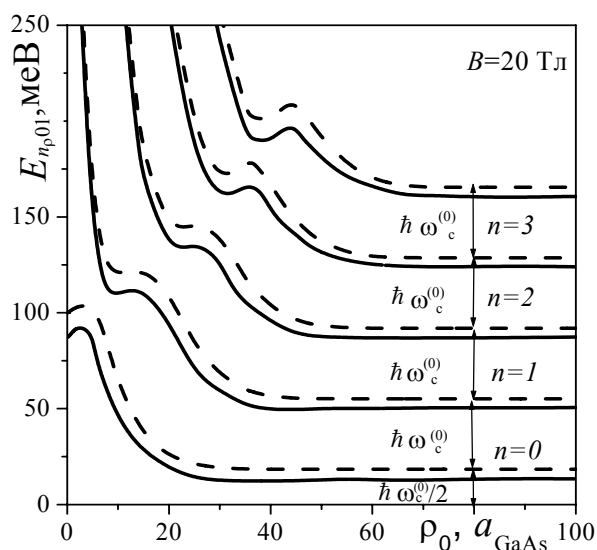


Рис. 2. Залежність енергій електрона від радіуса внутрішньої дротини при фіксованих товщинах шару – бар'єру $\Delta=4 a_{\text{GaAs}}$, нанотрубки $h=4$ нм, $B=20$ Тл за наявності (суцільна крива) та відсутності (штрихова крива) домішки.

Всі енергетичні рівні із різними квантовими числами n_p еволюціонують так, що зі збільшенням ρ_0 вони переходять у систему еквідистантних рівнів, енергія яких не залежить від ρ_0 . Ці рівні, що нумеруються квантовим числом n збігаються із рівнями квантування Ландау, що має місце у випадку масивного напівпровідника GaAs в однорідному магнітному полі. Це зрозуміло з фізичних міркувань, адже при великих значеннях ρ_0 електрон виявляється локалізованим у внутрішній дротині, а сама вона при $\rho_0 \rightarrow \infty$ переходить у масивний кристал GaAs. З рис.2 видно, що чим нижче знаходиться енергетичний рівень у шкалі енергій, тим менші радіуси (ρ_0) внутрішньої дротини, за яких

відповідні енергетичні рівні переходять у рівні Ландау.

Зауважимо, що за наявності домішки енергії електрона у всіх станах зменшуються. Енергія зв'язку електрона з домішкою виявляється більшою у тих областях зміни ρ_0 (крім великих ρ_0), в яких електрон локалізується у внутрішній дротині.

Основні результати і висновки

1. Вперше побудовано теорію енергетичного спектра та хвильових функцій електрона у циліндричній кількешаровій напівпровідниковій нанотрубці з донорною домішкою в магнітному полі.

2. Показано, що всі електронні енергетичні рівні складно і немонотонно залежать від радіуса ρ_0 внутрішньої дротини із виходом на насичення за достатньо великих ρ_0 .

3. За наявності домішки енергії електрона у всіх станах зменшуються, а відповідні величини енергії зв'язку залежать від того, де у складній нанотрубці локалізована квазічастинка.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. *Mohan P., Motohisa J., Fukui T.* Realization of conductive InAs nanotubes based on lattice-mismatched InP/InAs core-shell nanowires // *Appl. Phys. Lett.* – 2006. – **88**. – P. 013110-013115.
2. *Mohan P., Motohisa J., Fukui T.* Fabrication of InP/InAs/InP core-multishell heterostructure nanowires by selective area metalorganic vapor phase epitaxy // *Appl. Phys. Lett.* – 2006. – **88**. – P. 133105-133118.
3. *Heigoldt M., Arbiol J., Spirkoska D. et al.* Long range epitaxial growth of prismatic heterostructures on the facets of catalyst-free GaAs nanowires // *J. Mater. Chem.* – 2009. – **19** (9). – P. 840-848.
4. *Fontcuberta i Morral A., Spirkoska D., Arbiol J. et al.* Prismatic Quantum Heterostructures Synthesized on Molecular-Beam Epitaxy GaAs Nanowires // *Small*. – 2008. – **4**, (7). – P. 899-903.
5. *Маханець О.М., Цюпак Н.Р., Гуцул В.І.* Фононні спектри та електрон-фононна взаємодія у складній циліндричній напівпровідниковій нанотрубці // *УФЖ*. – 2012. – **51** (10). – С. 1060-1068.
6. *Makhanets O., Tsiupak N., Gutsul V., Voitsekhivska O.* Exciton spectrum in multi-shell hexagonal semiconductor nanotube // *Condensed Matter Physics*. – 2012. – **15**, (3). – P. 33704:1-9.