

©2011 р. О.М. Маханець, Н.Р. Цюпак, В.І. Гуцул

Чернівецький національний університет ім. Юрія Федьковича, Чернівці

ФОНОННИЙ СПЕКТР У СКЛАДНІЙ ЦИЛІНДРИЧНІЙ НАПІВПРОВІДНИКОВІЙ НАНОТРУБЦІ

У моделі діелектричного континууму запропоновано теорію енергетичного спектра обмежених та інтерфейсних оптичних фононів у складній кількшаровій циліндричній напівпровідниковій нанотрубці. Досліджено залежності енергій відповідних коливань від аксіального квазіімпульса та геометричних параметрів наносистеми. Показано, що обмежені фонони - бездисперсійні, а енергія інтерфейсних, окрім аксіального квазіімпульса, характеризується ще двома квантовими числами i , в загальному випадку, складно залежить від геометричних розмірів нанотрубки.

Ключові слова: нанотрубка, обмежені фонони, інтерфейсні фонони.

В модели диэлектрического континуума предложена теория энергетического спектра ограниченных и интерфейсных оптических фононов в сложной цилиндрической полупроводниковой нанотрубке. Исследовано зависимости энергий соответствующих колебаний от аксиального квазиимпульса и геометрических параметров наносистемы. Показано, что ограниченные фононы – бездисперсионные, а энергия интерфейсных, кроме аксиального квазиимпульса, характеризуется ещё двумя квантовыми числами i , в общем случае, сложно зависит от геометрических размеров нанотрубки.

Ключевые слова: нанотрубка, ограниченные фононы, интерфейсные фононы.

In the paper it is proposed a theory for energy spectra of confined and interface optical phonons in multi-shell cylindrical semiconductor nano-tube. The dependences of the respective vibrations energies on the axial quasi-momentum and geometric parameters of nano-system are investigated. It is shown that the confined phonons have not the dispersion and the energies of interface ones, besides the axial quasi-momentum, are characterized by two more quantum numbers and, in general case, are compound functions of nano-tube geometrical sizes.

Keywords: nano-tube, confined phonons, interface phonons.

Вступ

Останнє десятиліття значно зросла інтенсивність досліджень напівпровідникових квантових дротів з радіальною гетероструктурою. Ці наносистеми є базовими елементами світловипромінюючих діодів, детекторів, транзисторів та світлоперетворювачів нового покоління [1].

Перпендикулярна до осі квантового дроту гетероструктура, з одного боку може локалізувати носії заряду у внутрішній дротині, зменшуючи поверхневе розсіювання [2], а з іншого - у залежності від її геометричних параметрів дозволяє цілеспрямовано змінювати спектральні параметри основних квазічастинок (електронів, екситонів, фононів) у наносистемі.

Нещодавно німецькими вченими методом молекулярно-променевої епітаксії були ви-

рошені складні кількшарові нанотрубки шестигранної форми на основі напівпровідників GaAs/Al_xGa_{1-x}As та досліджено спектри люмінесценції у них [3,4].

У роботі [5] нами було запропоновано теорію екситонного спектра для такої системи і отримано задовільне узгодження теоретично одержаних значень екситонних енергій із експериментальними. При цьому складна шестигранна нанотрубка замінялася відповідною їй циліндричною, а поправки до енергій знаходилися за допомогою модифікованого варіаційного методу Бете.

Метою роботи полягає в дослідженні енергетичного спектра усіх типів поляризаційних коливань, що виникають у складній циліндричній нанотрубці. Це дасть змогу в майбутньому побудувати теорію взаємодії екситонів з фононами у таких наносистемах,

що, безумовно, зменшить неузгодженість між теоретичними та експериментальними результатами.

1. Теорія фононного спектра у складній циліндричній нанотрубці

Досліджується наносистема, що є складною циліндричною напівпровідниковою нанотрубкою. Вона складається із квантового дроту (середовище "0"), тонкого напівпровідникового шару - бар'єру ("1") та нанотрубки ("2") у зовнішньому середовищі ("3"). Поперечний переріз такої наносистеми наведено на рис.1.

Поле поляризації складної нанотрубки у моделі діелектричного континууму визначається системою рівнянь Максвела для середовищ

$$\begin{cases} \vec{D} = \varepsilon(\vec{r}, \omega) \vec{E} = \vec{E} + 4\pi\vec{P}, \\ \vec{E} = -\vec{\nabla}\Phi, \\ \vec{\nabla}\vec{D} = 0, \end{cases} \quad (1)$$

де \vec{D} - вектор індукції електричного поля, Φ - потенціал поля поляризації, \vec{P} - вектор поляризації.

Комбінуючи систему рівнянь (1) отримується рівняння

$$\nabla(\varepsilon(\vec{r}, \omega) \nabla\Phi(\vec{r})) = 0. \quad (2)$$

Очевидно, що рівняння (2) має два можливих розв'язки, які зумовлюють існування двох типів фононного поля:

а) поляризаційне поле обмежених фононів, яке визначається умовами

$$\varepsilon(\vec{r}, \omega) = 0, \quad \Delta\Phi_L(\vec{r}) \neq 0, \quad (3)$$

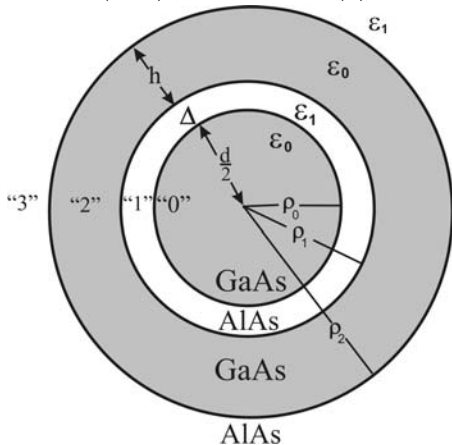


Рис. 1. Поперечний переріз складної циліндричної нанотрубки.

б) поляризаційне поле інтерфейсних фононів, яке визначається умовами

$$\varepsilon(\vec{r}, \omega) \neq 0, \quad \Delta\Phi_I(\vec{r}) = 0. \quad (4)$$

Спектр енергій усіх гілок фононів у нанотрубці знаходиться так.

а) Обмежені фонони

Діелектрична проникність кожного із напівпровідникових шарів складної нанотрубки вважається відомою функцією частоти

$$\varepsilon_i(\omega) = \varepsilon_{i\infty} \frac{\omega^2 - \omega_{L_i}^2}{\omega^2 - \omega_{T_i}^2} \quad (i = 0,1), \quad (5)$$

де $\varepsilon_{i\infty}, \omega_{L_i}, \omega_{T_i}$ - високочастотні діелектричні проникності та частоти поздовжніх і поперечних фононів у відповідних масивних кристалах. Аналіз співвідношень (3) і (5) вказує на те, що спектр власних енергій обмежених фононів циліндричної нанотрубки збігається з частотами поздовжніх оптичних фононів відповідних масивних кристалів, з яких утворена нанотрубка

$$\Omega_{L_i} = \hbar\omega_{L_i}. \quad (6)$$

Далі знаходиться потенціал поля поляризації $\Phi_L(\vec{r})$ і відповідна складова вектора зміщення \vec{u}_L , що зумовлені обмеженими оптичними фононами. Для цього, враховуючи циліндричну симетрію системи, складові потенціалу $\Phi_L(\vec{r})$ шукаються у вигляді розкладу за повною системою циліндрично-симетричних функцій у кожній із областей наносистеми

$$\Phi_{L_0}(\vec{r}) = \sum_{mk_0q} \Phi_{mq}(k_0) B_{k_0} J_m(k_0\rho) e^{iqz} e^{im\varphi},$$

$$\begin{aligned} \Phi_{L_i}(\vec{r}) = \sum_{mk_iq} \Phi_{mq}(k_i) & (B_{k_i} J_m(k_i\rho) + \\ & + A_{k_i} N_m(k_i\rho)) e^{iqz} e^{im\varphi}, \quad (i=1,2) \end{aligned} \quad (7)$$

$$\Phi_{L_3}(\vec{r}) = \sum_{mk_3q} \Phi_{mq}(k_3) A_{k_3} N_m(k_3\rho) e^{iqz} e^{im\varphi}.$$

Тут $J_m(k_i\rho), N_m(k_i\rho)$ - функції Бесселя і Неймана цілого порядку, q - аксіальний квазі-імпульс. Усі невідомі коефіцієнти $A_{k_i}, B_{k_i}, \Phi_{mq}(k_i)$ знаходяться з умов зникнення потенціалів поляризації на межах між середо-

вищами наносистеми та з умов ортонормованості повної системи функцій, на яких здійснюється квантування цього фононного поля.

б) Інтерфейсні фонони.

Поляризаційне поле інтерфейсних фононів визначається рівняннями (4).

Функцію, яка задовольняє рівнянню Лапласа (4), з урахуванням циліндричної симетрії нанотрубки, зручно шукати у вигляді

$$\Phi_I(\vec{r}) = f_m(\rho) e^{im\varphi} e^{iqz}. \quad (8)$$

Підстановка (8) у (4) приводить до рівняння Бесселя для функції $f_m(\rho)$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \left(\frac{m^2}{\rho^2} + q^2 \right) \right) f_m(\rho) = 0, \quad (9)$$

розв'язками якого у різних областях зміни ρ є модифіковані функції Бесселя

$$f_{mq}(\rho) = \begin{cases} A_0 I_m(q\rho), & \rho \leq \rho_0 \\ A_1 I_m(q\rho) + B_1 K_m(q\rho), & \rho_0 \leq \rho \leq \rho_1 \\ A_2 I_m(q\rho) + B_2 K_m(q\rho), & \rho_1 \leq \rho \leq \rho_2 \\ B_3 K_m(q\rho), & \rho \geq \rho_2 \end{cases} \quad (10)$$

Потенціал поля поляризації інтерфейсних фононів Φ_I , згідно із законами електродинаміки, повинен бути таким, щоб створені ним тангенційна складова напруженості і нормальна складова індукції були неперервними на кожній із меж складної циліндричної нанотрубки

$$\vec{E}_{\tau_i}(\rho_i) = \vec{E}_{\tau_{i+1}}(\rho_i), \quad \vec{D}_{n_i}(\rho_i) = \vec{D}_{n_{i+1}}(\rho_i), \quad (i = 0, 1, 2). \quad (11)$$

Граничні умови (11) приводять до системи лінійних однорідних рівнянь відносно невідомих коефіцієнтів A_i, B_i . З цієї системи отримується дисперсійне рівняння, розв'язки якого ($\omega_{ms}(q)$) і визначають енергетичний спектр інтерфейсних фононів системи

$$\Omega_{ms}(q) = \hbar \omega_{ms}(q). \quad (12)$$

Самі ж невідомі коефіцієнти A_i, B_i однозначно визначаються в процесі квантування фононного поля.

2. Аналіз та обговорення результатів

Числові розрахунки енергій інтерфейсних фононів виконувались для складної циліндричної нанотрубки на основі напівпровідників GaAs/Al_{0,4}Ga_{0,6}As, матеріальні параметри яких такі. Енергії поздовжніх та поперечних оптичних фононів середовищ "0" та "1": $\Omega_{L0} = 35$ меВ, $\Omega_{T0} = 32,2$ меВ, $\Omega_{L1} = 39,4$ меВ, $\Omega_{T1} = 35,95$ меВ; постійні ґратки $a = a_0 \approx a_1 = 5,65$ Å; відповідні діелектричні проникності такі: $\epsilon_{0\infty} = 10,85$, $\epsilon_{1\infty} = 9,8$.

Результати розрахунку фононного спектра у досліджуваній наносистемі при фіксованих товщинах нанотрубки $h = 4$ нм і шару бар'єру $\Delta = 4$ нм та різних значеннях радіуса внутрішньої дротини наведені на рис. 2. Показані властивості цього спектру і його еволюція зі зміною геометричних параметрів наносистеми.

З рис. 2 а видно, що при відсутності внутрішнього середовища ($\rho_0 = 0$) фононний спектр містить бездисперсійні енергії обмежених фононів (Ω_{L0}, Ω_{L1}) і чотири групи з безмежною кількістю гілок ($m = 0, 1, \dots, \infty$) енергій інтерфейсних фононів ($\Omega_{ms}(q)$), зі слабкою дисперсією по q .

При $m=0$ та $m=1$ дві гілки I-фононів мають позитивну, а дві – від'ємну дисперсію. Енергії кожної з груп I-фононів знаходяться у межах між Ω_{L1} і Ω_{T1} – верхні, а між Ω_{L0} і Ω_{T0} – нижні.

Якщо ж циліндрична нанотрубка має внутрішній радіус $\rho_0 \neq 0$ (рис.2 б,в,г), то у спектрі інтерфейсних фононів з'являються ще дві групи гілок: у низькоенергетичній області $\Omega_{ms}(q)$ – група з додатною дисперсією, а в області вищих енергій – $\Omega_{ms}(q)$ – група з від'ємною дисперсією. Фізичною причиною наявності при $\rho_0 = 0$ чотирьох, та шести при $\rho_0 \neq 0$ груп гілок інтерфейсних фононів є існування у наносистемі двох ($\rho_0 = 0$) чи трьох ($\rho_0 \neq 0$) поверхонь розділу напівпровідникових середовищ GaAs/Al_{0,4}Ga_{0,6}As (рис.1).

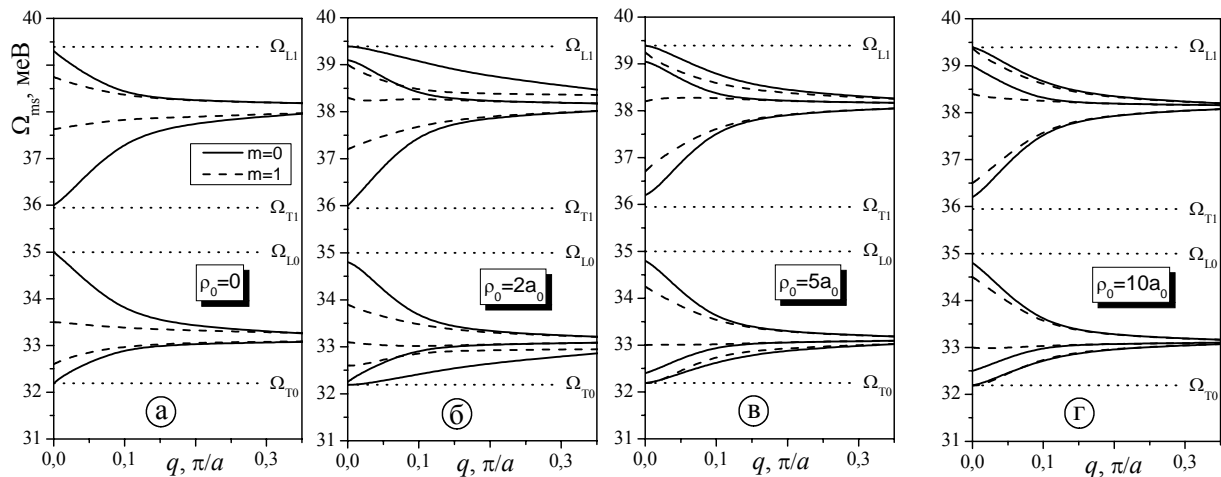


Рис. 2. Залежності енергій інтерфейсних фононів від аксіального квазіімпульса q при фіксованих товщинах нанотрубки $h=4$ нм і шару-бар'єру $\Delta=4$ нм та різних значеннях радіуса внутрішньої дротини ρ_0 .

При фіксованій ширині трубки ($\Delta=4$ нм) дисперсія інтерфейсних фононів лише при малих величинах q чутлива до зміни ρ_0 (рис. 2б,в,г). У області $q \geq 0,1\pi/a$ при всіх значеннях $\rho_0 \neq 0$ енергії інтерфейсних фононів практично не змінюються.

На завершення зауважимо, що при $\rho_0 > 10a_0$ спектр інтерфейсних фононів вже практично не змінюється і співпадає із відповідним спектром, що є у плоскій квантовій плівці товщиною Δ .

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Дубровский В.Г., Цырлин Г.Э., Устинов В.М. Полупроводниковые нитевидные нанокристаллы: синтез, свойства, применения // ФТП. – 2009. – **43**. – С.1585.
2. Persson A.I., Larsson M.W., Stenstro S., Ohlsson B.J., Samuelson L., Wallenberg L.R. Solid-phase diffusion mechanism for GaAs nanowire growth // Nat. Mater. – 2004. – **3**. – P.677.
3. Fontcuberta i Morral A., Spirkoska D., Arbiol J., Heigoldt M., Morante J.R., Abstreiter G. Prismatic quantum heterostructures synthesized on molecular-beam epitaxy GaAs nanowires // Small. – 2008. – **4**. – P.899.
4. Heigoldt M., Arbiol J., Spirkoska D., Rebled J.M., Conesa-Boj S., Abstreiter G., Peiro F., Morantece J.R., Fontcuberta i Morral A. Long range epitaxial growth of prismatic heterostructures on the facets of catalyst-free GaAs nanowires // J. Mater. Chem. – 2009. – **19**. – P.840.
5. Makhanets O., Tsiupak N., Voitsekhivska O. Exciton spectrum in multi-shell hexagon semiconductor nanotubes // 12th International Balkan Workshop on Applied Physics, 2011. – Constanta, Romania. – P.94.