

В.А. Головацький, В.І. Гуцул, Т.Я. Федоруца

Анізотропні оптичні властивості еліптичних напівпровідникових нанотрубок GaAs

Чернівецький національний університет ім. Ю.Федьковича
58012 м. Чернівці, вул. Коцюбинського, 2, тел.:(803722)4-48-16, e-mail: ktff@chnu.edu.ua

На основі методу ефективних мас розраховано енергетичний спектр та хвильові функції електронів в еліптичних напівпровідникових нанотрубках GaAs. Досліджено еволюцію енергетичного спектру та хвильових функцій від еліптичності нанотрубки. В дипольному наближенні розраховано сили осциляторів міжпідзонних квантових переходів електронів, на основі яких досліджено поляризацію та направленість випромінювання. Показано, що переходи між квантовими станами з різною парністю є у-поляризованими, а переходи між станами з однаковою парністю – х-поляризовані. Сила осцилятора у-поляризованого світла зменшується, а сила осцилятора х-поляризованого світла – зростає з ростом фокусної відстані нанотрубки.

Ключові слова: Енергетичний спектр електрона, напівпровідникова еліптична нанотрубка, сили осциляторів квантових переходів.

Стаття поступила до редакції 07.12.2008; прийнята до друку 15.03.2009.

Вступ

Розвиток сучасної напівпровідникової електроніки і перехід до наноелектроніки пов'язані з використанням напівпровідникових наноматеріалів і нанотехнологій. Очікується, що їх застосування в наноелектроніці дозволить створити наноструктурні мікропроцесори, терабітні схеми пам'яті, збільшить пропускну здатність каналів зв'язку. Останніми роками найбільший інтерес дослідників викликають одновимірні напівпровідникові наноструктури, які досліджуються як теоретично, так і експериментально вже більше десяти років. Сучасні технології дозволяють вирощувати напівпровідникові квантові дроти, нанотрубки різної форми поперечного перетину [1-2]. Теоретичні дослідження в основному виконуються для циліндричних квантових дротів, для яких існують точні розв'язки рівняння Шредінгера на основі функцій Бесселя. Не достатньо дослідженими залишаються напівпровідникові квантові дроти та нанотрубки зі складною формою поперечного перетину, що отримуються внаслідок особливостей кристалічної структури напівпровідникового матеріалу чи поперечної деформації внаслідок одновісного тиску. В роботах [3-6] у рамках наближення ефективних мас побудована теорія енергетичного спектру та хвильових функцій електрона в еліптичних квантових дротах (ЕКД).

У даній роботі досліджено енергетичний спектр, хвильові функції електронів у еліптичних

напівпровідникових нанотрубках (ЕНН), обмежених еліпсами з однаковою фокусною відстанню. На основі точного розв'язку рівняння Шредінгера виконано розрахунок сил осциляторів квантових переходів електронів між декількома найнижчими енергетичними рівнями.

I. Гамільтоніан системи та розв'язки рівняння Шредінгера

Розглянемо еліптичну напівпровідникову нанотрубку GaAs, обмежену внутрішнім та зовнішнім еліптичним циліндром з півосями a_1 , b_1 та a_2 , b_2 відповідно, поміщену в діелектричну матрицю або вакуум. Систему координат виберемо так, що вісь Oz направлена вздовж трубки, осі Ox та Oy вздовж півосей a і b відповідно.

У напрямку вздовж нанотрубки електрон здійснює вільний рух з енергією $E_z = \hbar^2 k_z^2 / 2\mu$, де μ – ефективна маса електрона. Енергія, зумовлена поперечним рухом знаходиться з розв'язку рівняння Шредінгера

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

де $U(x, y)$ – потенціал розмірного квантування.

Рівняння (1) в еліптичній системі координат (ξ, η, z) матиме вигляд

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} + \frac{f^2 k_{nm}^2}{2} (\cosh 2\xi - \cos 2\eta) \right] \Psi_{nm}(\xi, \eta) = 0, \quad (2)$$

де $f = \sqrt{a_1^2 - b_1^2} = \sqrt{a_2^2 - b_2^2}$ – фокусна відстань внутрішнього та зовнішнього еліпса, а $k_{nm} = \sqrt{2\mu E_{nm}}/\hbar$. У випадку непроникливих для електрона стінок нанотрубки хвильова функція допускає розділення змінних [3-5]

$$\Psi_{nm}(\xi, \eta) = R_{nm}(\xi)\theta_m(\eta). \quad (3)$$

Кутова частина хвильової функції збігається з

$$R_{nm}(q_{nm}, \xi) = \begin{cases} A_m^e J_e(q_{nm}, \xi) + B_m^e N_e(q_{nm}, \xi), & \text{для парних станів} \\ A_m^o J_o(q_{nm}, \xi) + B_m^o N_o(q_{nm}, \xi), & \text{для непарних станів.} \end{cases} \quad (4)$$

де $q_{nm} = f^2 k_{nm}^2 / 4$.

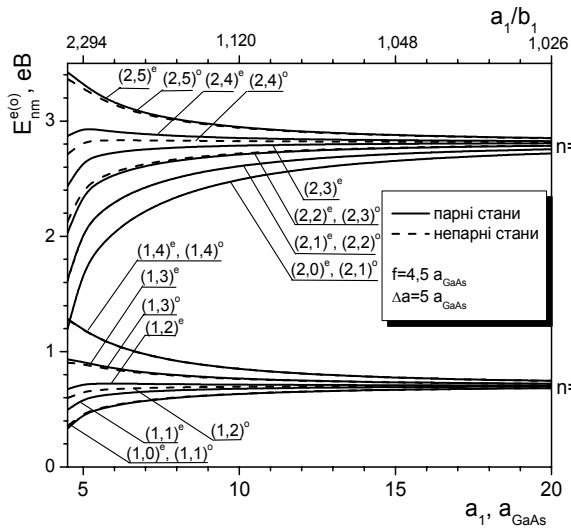


Рис. 1. Залежність енергетичного спектра електрона в ЕНН GaAs від величини a_1 при $\Delta a=5 a_{\text{GaAs}}$ та $f=4,5 a_{\text{GaAs}}$.

Співвідношення між коефіцієнтами $A_m^e, A_m^o, B_m^e, B_m^o$, та енергетичний спектр електрона визначаються граничними умовами:

$$\left. \begin{aligned} A_m^e J_e(q_{nm}, \xi_1) + B_m^e N_e(q_{nm}, \xi_1) &= 0 \\ A_m^e J_e(q_{nm}, \xi_2) + B_m^e N_e(q_{nm}, \xi_2) &= 0 \end{aligned} \right\}, \quad (5)$$

$$\left. \begin{aligned} A_m^o J_o(q_{nm}, \xi_1) + B_m^o N_o(q_{nm}, \xi_1) &= 0 \\ A_m^o J_o(q_{nm}, \xi_2) + B_m^o N_o(q_{nm}, \xi_2) &= 0 \end{aligned} \right\},$$

де $\xi_1 = \text{arctanh}(b_1/a_1)$, $\xi_2 = \text{arctanh}(b_2/a_2)$.

Системи рівнянь (5) відносно коефіцієнтів $A_m^e, A_m^o, B_m^e, B_m^o$ мають ненульові розв'язки лише при значеннях $q_{nm}^{(e,o)}$, які задовольняють відповідні дисперсійні рівняння

парною $se_m(q, \eta)$ та непарною $se_m(q, \eta)$ функціями Мат'є першого роду, які задовольняють умовам періодичності.

Радіальна частина хвильової функції виражається через лінійну комбінацію парних та непарних модифікованих функцій Мат'є першого і другого роду

$$\begin{aligned} J_e(q_{nm}, \xi_1) N_e(q_{nm}, \xi_2) - \\ - N_e(q_{nm}, \xi_1) J_e(q_{nm}, \xi_2) &= 0, \end{aligned} \quad (6)$$

$$\begin{aligned} J_o(q_{nm}, \xi_1) N_o(q_{nm}, \xi_2) - \\ - N_o(q_{nm}, \xi_1) J_o(q_{nm}, \xi_2) &= 0. \end{aligned} \quad (7)$$

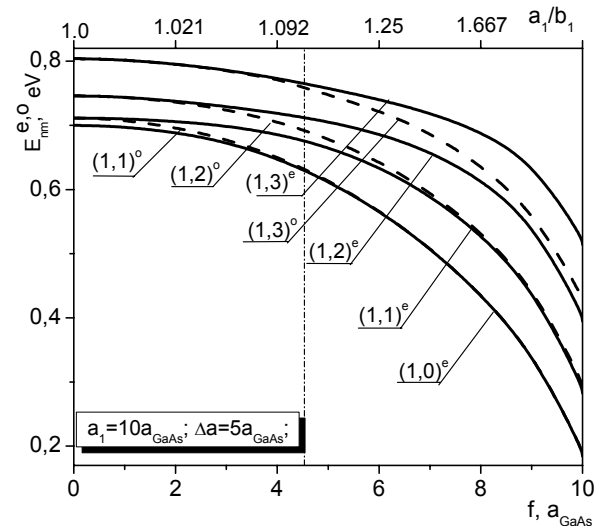


Рис. 2. Залежність енергетичного спектра електрона в нанотрубіці GaAs від величини фокусної відстані f при $a_1=10 a_{\text{GaAs}}$. Суцільні лінії – парні стани, штрихові – непарні.

Значення $q_{nm}^{(e,o)} = f^2 \frac{\mu}{2\hbar^2} E_{nm}^{(e,o)}$, які задовольняють рівняння (6, 7) визначають безмежний набір дискретних енергетичних рівнів квазічастинки $E_{nm}^{(e,o)}$, де $n=1, 2$ – головне квантове число, яке нумерує порядковий номер кореня відповідного рівняння.

Сили осциляторів, через які виражаються ймовірності оптичних квантових переходів визначаються співвідношенням

$$F_{nm}^{n'm'} = \frac{2\mu}{e^2 \hbar^2} (E_{n'm'} - E_{nm}) \langle \Psi_{nm}(\xi, \eta) | d_e | \Psi_{n'm'}(\xi, \eta) \rangle^2, \quad (8)$$

де E_{nm} та $E_{n'm'}$ – енергії початкового та кінцевого

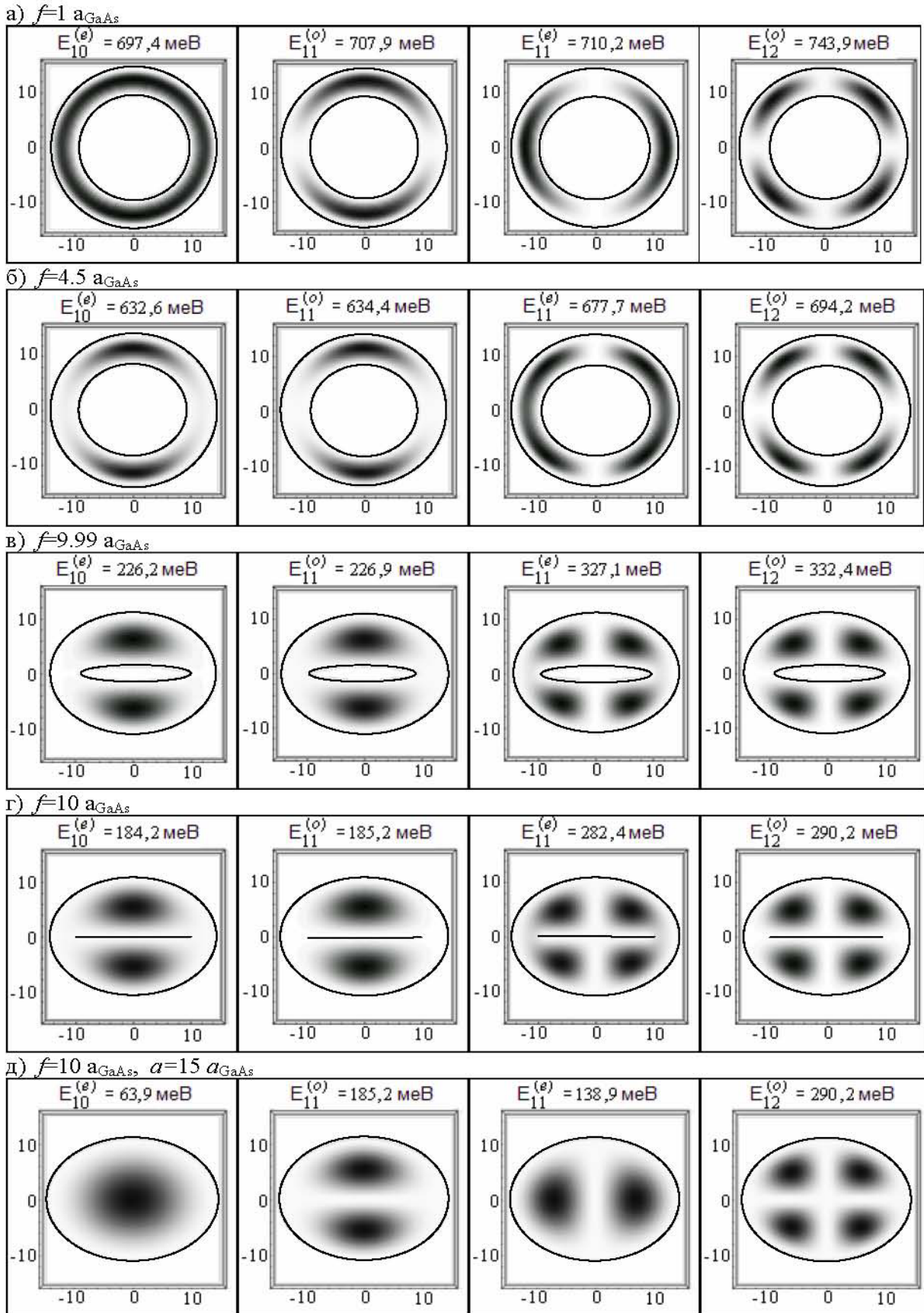


Рис. 3. Розподіл густини ймовірності знаходження електрона для станів $(1,0)^e, (1,1)^o, (1,1)^e, (1,2)^o$ в ЕНН GaAs з $a_1=10a_{\text{GaAs}}, \Delta a=5a_{\text{GaAs}}$ та при фокусній відстані (а) $-f=1 a_{\text{GaAs}}$, (б) $-f=4.5 a_{\text{GaAs}}$ (в) $-f=9.99 a_{\text{GaAs}}$, (г) $-f=10 a_{\text{GaAs}}$, а також у ЕКД з $f=10a_{\text{GaAs}}$ та $a=15 a_{\text{GaAs}}$ - д).

станів, d_e – оператор проекції дипольного моменту на напрямок поляризації.

III. Результати розрахунків і висновки

Числові розрахунки виконувалися для еліптичної нанотрубки GaAs з непроникними для квазічастинки стінками при $k_z=0$, $\mu=0,067m_0$ (m_0 – маса вільного електрона) і $a_{\text{GaAs}}=5,62\text{Å}$.

На рис.1 наведено залежність енергетичного спектра електрона у нанотрубці з півосями a_1 , $b_1 = \sqrt{a_1^2 - f^2}$ та $a_2 = a_1 + \Delta a$, $b_2 = \sqrt{a_2^2 - f^2}$ від величини a_1 при $\Delta a = 5 a_{\text{GaAs}}$ і $f=4,5 a_{\text{GaAs}}$.

З рисунка видно, що збільшення величини a_1 при постійній величині фокусної відстані приводить до швидкого виродження ЕНН в нанотрубку кругового перерізу, у результаті цього енергії парних та непарних станів, отриманих з рівнянь (6) та (7) зближаються між собою і наближаються до значень енергій у циліндричній нанотрубці. Подальше збільшення величини a_1 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 рис. 2, на якому наведено залежність енергетичного спектра електрона в нанотрубці від величини фокусної відстані еліптичних циліндрів, що обмежують ЕНН GaAs при постійних величинах $a_1 = 10 a_{\text{GaAs}}$ та $\Delta a = 5 a_{\text{GaAs}}$.

З рис. 2. видно, що коли $f=0$ енергії парних та непарних станів збігаються (еліпс вироджується в коло). Із збільшенням величини фокусної відстані при постійних величинах a_1 та Δa всі енергетичні рівні зсуваються в область менших енергій, що пояснюється зменшенням розмірного квантування, оскільки зростає величина 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 . Із збільшенням квантового числа m величина розщеплення енергетичних рівнів зменшується. У граничному випадку $f=a_1$ (внутрішній еліпс вироджується у відрізок) нанотрубка є близькою до еліптичного квантового дроту. Енергії парних станів електрона в нанотрубці в цьому випадку не збігаються з енергіями таких же станів електрона в еліптичному квантовому дроті відповідних розмірів.

Особливості залежностей наведених на рис. 1-2 можна зрозуміти, розглянувши наведені на рис.3 вигляди розподілу густини ймовірності знаходження електрона для станів $(1,0)^e$, $(1,1)^o$, $(1,1)^e$, $(1,2)^o$ в ЕНН

GaAs з $a_1=10a_{\text{GaAs}}$, $\Delta a=5a_{\text{GaAs}}$ при фокусних відстанях $f=4.5, 9.99, 10 a_{\text{GaAs}}$. З цього рисунка видно, що розподіл густини ймовірності як парних так і непарних станів є симетричним відносно осей Ox та Oy . Для всіх непарних станів, на відміну від парних, ймовірність знаходження електрона в точках на осі Ox дорівнює нулю. При малих величинах фокусної відстані розподіл густини ймовірності знаходження електрона у парних та непарних станах з однаковими квантовими числами n та m відрізняється лише орієнтацією (рис.3а), а при f близьких до a_1 , розподіли густини ймовірності знаходження електрона у станах $(1,0)^e$ і $(1,1)^o$, а також $(1,1)^e$ і $(1,2)^o$ мають дуже подібний вигляд, внаслідок цього енергії цих станів близькі за величиною.

Для порівняння, на рис.3 д) наведено розподіл густини ймовірності знаходження електрона у чотирьох найнижчих квантових станах у напівпровідниковому квантовому дроті GaAs.

Залежність сил осциляторів декількох дозволених квантових переходів від величини фокусної відстані наведена на рис. 4, з якого видно, що переходи між квантовими станами з різною парністю є у-поляризованими, а переходи між станами з однаковою парністю – х-поляризовані. Отримані результати для напівпровідникових еліптичних нанотрубок якісно узгоджуються з результатами розрахунку сил осциляторів квантових переходів між станами у еліптичних квантових дротах [6].

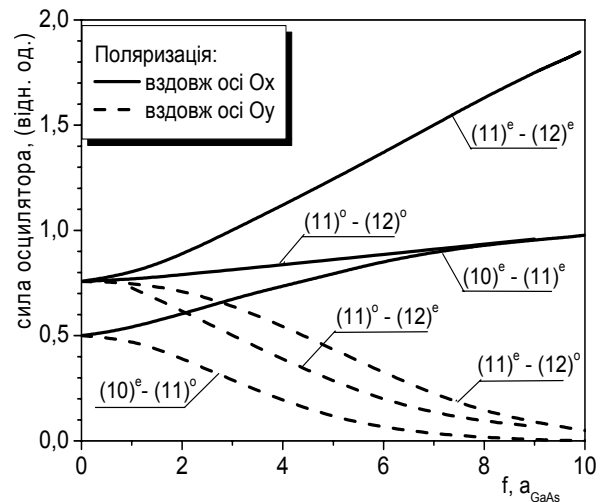


Рис. 4. Залежність сил осциляторів міжпідзонних квантових переходів від фокусної відстані нанотрубки.

Сила осцилятора квантового переходу між парними станами F_{10}^{11} при великих значеннях фокусної відстані збігається з силою осцилятора квантового переходу між непарними станами F_{11}^{12} . Це є наслідком того, що відповідні парні та непарні квантові стани при $f \rightarrow a_1$ дуже близькі між собою.

Інтенсивність випромінювання світла в напрямку малої півосі еліпса при великих значеннях фокусної відстані значно переважає інтенсивність випромінювання вздовж великої півосі. А при $f=0$,

коли еліптична нанотрубка вироджується в циліндричну, інтенсивність випромінювання x- та y-поляризованого світла збігаються, що і повинно бути для ізотропної в радіальному напрямку наносистеми.

Такі поляризаційні особливості нанотрубок можуть знайти практичне використання при побудові на їх основі оптоелектронних приладів.

Головацький В.А. – професор кафедри теоретичної фізики;
Гуцул В.І. – асистент кафедри теоретичної фізики;
Федоруца Т.Я. – пошукувач кафедри теоретичної фізики.

- [1] J. Noborisaka, J. Motohisa, S. Hara, and T. Fukui Fabrication and characterization of freestanding GaAs/AlGaAs core-shell nanowires and AlGaAs nanotubes by using selective-area metalorganic vapor phase epitaxy // *Appl. Phys. Lett.*, **87**, pp. 093109-09316 (2005).
- [2] P. Mohan, J. Motohisa, and T. Fukui Realization of conductive InAs nanotubes based on lattice-mismatched InP/InAs core-shell nanowires // *Appl. Phys. Lett.*, **88**, pp. 013110-013108 (2006).
- [3] M.van den Broek, F.M.Peeters Confined states in two-dimensional flat elliptic quantum dots and elliptic quantum wires // *Physica E.*, **11**, pp. 345-355 (2001).
- [4] В.А. Головацький, В.І. Гуцул. Енергетичний спектр електрона в еліптичному напівпровідниковому квантовому дріті // *Фізика та хімія твердого тіла*, **8**(3), сс. 457-462 (2007).
- [5] V. Holovatsky, V. Gutsul. Electron energy spectrum and wave functions in complicated elliptic quantum wires // *Journal of Optoelectronics and Advanced Materials*, **9**(5), pp. 1437-1441 (2007).
- [6] J. Even, S. Loualiche, P. Miska and C. Platz, In-plane anisotropy of quantum elliptic heterostructures studied with symmetry-adapted Mathieu functions: an application to self-organized InAs quantum dots on InP // *J.Phys.:Condens.Matter*, (15), pp. 8737 (2003).
- [7]

V.A. Holovatsky , V.I. Gutsul , T.Y. Fedorutsa

Anisotropic Optical Characteristics of Elliptic Semiconductor Nanotubes GaAs

*Chernivtsi National University
2, Kotsyubynskyi Str., Chernivtsi 58012, Ukraine, tel.: (803722)4-48-16, e-mail: ktf@chnu.edu.ua*

Within the effective mass approximation the energy spectra and wave functions of the electron and the hole in elliptic semiconductor nanotubes GaAs are calculated. The evolution of the energy spectrum and wave functions on the elliptic of the nanotube is researched. The oscillator strength of the intraband quantum transitions of the electron in the dipole approximate is calculated. It is shown that the transitions between the states with the different evenness are y-polarizations, and the transitions between the states with the equal evenness are x-polarizations. The oscillator strength of the y-polarization light is decrease, and the oscillator strength of the x-polarization light is increases with increase the focal distance.

Key words: electron energy spectrum, oscillator strength.