

МІКРОСИСТЕМНІ ТА НАНОТЕХНОЛОГІЇ
(MST, LIGA-ТЕХНОЛОГІЯ, АКТЮАТОРИ ТА ІН)

MICROSYSTEM AND NANOTECHNOLOGIES
(MST, LIGA-TECHNOLOGIES, ACTUATORS)

PACS: 73.21Hb, 78.67.Ch, 78.67.Lt

**ЕКСИТОННИЙ СПЕКТР ШЕСТИГРАННОЇ НАНОТРУБКИ,
ЯК НАНОСЕНСОРНОГО ЕЛЕМЕНТА**

О.М. Маханець, В.І. Гуцул, Н.Р. Цюпак

*Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича,
м. Чернівці, вул. Коцюбинського 2, тел. 80372244816, e-mail: ktf@chnu.edu.ua*

**ЕКСИТОННИЙ СПЕКТР ШЕСТИГРАННОЇ НАНОТРУБКИ,
ЯК НАНОСЕНСОРНОГО ЕЛЕМЕНТА**

О.М. Маханець, В.І. Гуцул, Н.Р. Цюпак

Анотація. Методом Бете і функцій Гріна побудована теорія екситонного спектра у складній шести-гранній нанотрубці з урахуванням екситон-фононої взаємодії. Теорія базується на моделі ефективних мас і прямокутних потенціалів для екситонних електрона і дірки та моделі діелектричного континууму для інтерфейсних і обмежених фононів.

На прикладі шестигранної нанотрубки на основі напівпровідників GaAs і $Al_{0.4}Ga_{0.6}As$ показано, що теоретичні значення енергій та інтенсивностей квантових переходів узгоджуються з експериментальними вимірами.

Ключові слова: шестигранна нанотрубка, квантовий дріт, екситонний спектр

EXCITON SPECTRUM OF HEXAGON NANOTUBE AS NANOSENSOR ELEMENT

O.M. Makhanets, V.I. Gutsul, N.R. Tsiupak

Abstract. The theory of exciton spectrum of multi-shell hexagon nanotube is developed within the Bethe method and Green functions taking into account the exciton-phonon interaction. The theory is based at the effective masses model for the excitons' electron and hole and dielectric continuum model for the interface and confined phonons.

For the hexagon nanotube at the base of GaAs and $Al_{0.4}Ga_{0.6}As$ semiconductors it is proven that the calculated magnitudes of energies and intensities of quantum transitions correlate to the experimental data.

Keywords: hexagon nanotube, quantum wire, exciton spectrum

ЭКСИТОННЫЙ СПЕКТР ШЕСТИГРАННОЙ НАНОТРУБКИ, КАК НАНОСЕНСОРНОГО ЭЛЕМЕНТА

А.М. Маханец, В.И. Гуцул, Н.Р. Цюпак

Аннотация. Методом Бете и функций Грина построена теория экситонного спектра в сложной шестигранной нанотрубке с учетом экситон-фононного взаимодействия. Теория базируется на модели эффективных масс и прямоугольных потенциалов для экситонных электрона и дырки и модели диэлектрического континуума для интерфейсных и ограниченных фононов.

На примере шестигранной нанотрубки на основе полупроводников GaAs и Al_{0.4}Ga_{0.6}As показано, что теоретические значения энергий и интенсивностей квантовых переходов согласуются с экспериментальными измерениями.

Ключевые слова: шестигранная нанотрубка, квантовая проволока, экситонный спектр

1. Вступ

Экситонні спектри в напівпровідникових квантових точках, дротах і квантових плівках вивчаються вже тривалий час, тому результати теоретичних робіт з достатньо обґрунтованими моделями непогано узгоджуються з експериментальними даними [1-7].

Інтенсивний розвиток нанотехнологій дав можливість створювати нові наносистеми з чіткими геометричними формами. Зокрема, в роботах [8, 9] автори отримали масиви складних шестигранних нанотрубок та дослідили спектри випромінювання таких систем. Унікальні властивості квазічастинок в таких системах дозволяють використовувати їх в якості базових елементів тунельних нанодіодів, нанотранзисторів з високою рухливістю електронів, високоефективних світловипромінюючих приладів, фотоелектричних перетворювачів, наносенсорів для діагностики різних біологічних і хімічних з'єднань [10].

Наскільки нам відомо, послідовної теорії екситонів у кількашарових шестигранних напівпровідникових нанотрубках поки що немає взагалі. Тож відсутня і теорія взаємодії екситона з фононами, як однією з головних дисипативних підсистем будь-якої наносистеми.

Метою цієї роботи є розробка теорії екситонного спектра складної кількашарової шестигранної нанотрубки з урахуванням взаємодії екситонів з обмеженими і інтерфейсними фононами на основі моделі ефективних мас і прямокутних потенціалів для екситонних електрона і дірки, та моделі діелектричного континууму для поляризаційних фононів.

Розвинута теорія дозволяє не тільки дослідити залежність параметрів екситонних спектрів від геометричних розмірів наносистеми, але й співставити розраховані значення екситонних енергій із положенням піків люмінесценсії, отриманих експериментально в роботі [9].

2. Экситонный спектр і екситон-фононна взаємодія у шестигранній квантовій нанотрубці

У роботі досліджується експериментально реалізована у праці [9] наносистема, що є складною шестигранною 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 зображено на рис. 1. Вважаючи, що постійні ґраток і діелектричні проникності (ϵ) складових наносистеми мало відрізняються, для розрахунку екситонного спектру використовується модель ефективних мас ($\mu^{(e,h)}$) і прямокутних потенціалів ($U^{(e,h)}$)

$$\epsilon(\vec{r}) = \begin{cases} \epsilon_0, \\ \epsilon_1, \end{cases} \quad \mu^{(e,h)}(\vec{r}) = \begin{cases} \mu_0^{(e,h)}, \\ \mu_1^{(e,h)}, \end{cases} \quad U^{(e,h)}(\vec{r}) = \begin{cases} U_0^{(e,h)}, & -"0", "2" \\ U_1^{(e,h)} = 0, & -"1", "3" \end{cases}, \quad (1)$$

які вважаються відомими.

У моделі ефективних мас електрона і дірки та діелектричного континууму для фононів гамільтоніан екситон-фононної системи має вигляд

$$\hat{H} = \hat{H}_e + \hat{H}_h + U(\vec{r}_e, \vec{r}_h) + \hat{H}_{ph} + \hat{H}_{e-ph} + \hat{H}_{h-ph}. \quad (2)$$

$$\text{Тут } \hat{H}_{(e,h)} = -\frac{\hbar^2}{2} \left(\bar{\nabla}_{\rho,\varphi}^{(e,h)} \frac{1}{\mu^{(e,h)}(\rho,\varphi)} \bar{\nabla}_{\rho,\varphi}^{(e,h)} + \frac{1}{\mu^{(e,h)}(\rho,\varphi)} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + U^{(e,h)}(\rho,\varphi) \quad (3)$$

- гамільтоніани невзаємодіючих між собою електрона (e) чи дірки (h) зі складними залежностями $\mu^{(e,h)}$ і $U^{(e,h)}$ від просторових координат (рис.1);

$$U(\vec{r}_e, \vec{r}_h) = -\frac{e^2}{\epsilon(\vec{r}_e, \vec{r}_h) |\vec{r}_e - \vec{r}_h|} \quad (4)$$

- потенціальна енергія електрон-діркової взаємодії;

$$\hat{H}_{ph} = \hat{H}_{LO} + \hat{H}_I = \sum_{i=0}^2 \sum_{mqs_i} \Omega_{Li} (\hat{b}_{mqs_i}^+ \hat{b}_{mqs_i} + \frac{1}{2}) + \sum_{mqs} \Omega_{mqs} (\hat{b}_{mqs}^+ \hat{b}_{mqs} + \frac{1}{2}) \quad (5)$$

- гамільтоніан обмежених та інтерфейсних фононів; \hat{H}_{e-ph} , \hat{H}_{h-ph} - гамільтоніани взаємодії електрона і дірки з обмеженими та інтерфейсними фононами, явний вигляд яких буде подано далі в зображенні вторинного квантування за всіма змінними системи.

Енергетичний спектр електрона і дірки невзаємодіючих між собою і фононами, знаходиться варіаційним методом Бете [11] у комбінації з теорією збурень. Для цього шестигранна нанотрубка апроксимується циліндричною так, як показано на рис.1. Радіус внутрішнього кола ρ_0 відіграє роль варіаційного параметра. Різниця точного (3) й апроксимуючого

$$\hat{H}_{(e,h)}^{(0)} = -\frac{\hbar^2}{2} \left(\bar{\nabla}_{\rho,\varphi}^{(e,h)} \frac{1}{\mu^{(e,h)}(\rho)} \bar{\nabla}_{\rho,\varphi}^{(e,h)} + \frac{1}{\mu^{(e,h)}(\rho)} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + U^{(e,h)}(\rho) \quad (6)$$

гамільтоніанів з простою залежністю $\mu^{(e,h)}(\rho)$ і $U^{(e,h)}(\rho)$ від просторових координат розглядається як збурення.

Рівняння Шредінгера з гамільтоніаном типу (6) розв'язується точно. Хвильові функції електрона чи дірки (індекси e, h тимчасово опущені) мають вигляд

$$\Psi_{mk}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi L}} R_m(\rho) e^{ikz} e^{im\varphi}, \quad (7)$$

де k - аксіальний квазіімпульс; m - магнітне квантове число.

Розв'язати рівняння Шредінгера зі складним гамільтоніаном (2) неможливо, тому наближений розв'язок шукається за умови, що енергії взаємодії електрона і дірки між собою, а також кожної квазі-частинки з фононами, є малими у порівнянні з енергіями їх розмірного квантування. Тоді екситонний спектр наносистеми є адитивною сумою розмірно квантованих енергій електрона і дірки та відповідних поправок на згадані взаємодії.

Умови неперервності хвильових функцій (7) та потоків густин ймовірностей на всіх трьох межах наносистеми ($\rho = \rho_0, \rho_1, \rho_2$) разом з умовою нормування визначають аналітичні вирази для радіальних функцій $R_m(\rho)$, а отже й аналітичні вирази для хвильових функцій $\Psi_{n\rho mk}^{(e,h)}(\rho_0, \vec{r})$, та дисперсійні

рівняння, з яких знаходиться спектр енергій невзаємодіючих квазічастинок $E_{n\rho m}^{(0)(e,h)}(k, \rho_0)$, як функцій варіаційного параметра ρ_0 . Квантове число n_ρ нумерує розв'язки відповідних дисперсійних рівнянь.

Поправки до енергій невзаємодіючих електрона чи дірки розраховуються як функції параметра ρ_0

$$\Delta E_{n\rho m}^{(e,h)}(\rho_0) = \int \Psi_{n\rho mk}^{(e,h)*}(\rho_0, \vec{r}) \left[\hat{H}_{(e,h)} - \hat{H}_{(e,h)}^{(0)} \right] \Psi_{n\rho mk}^{(e,h)}(\rho_0, \vec{r}) d^3\vec{r}. \quad (10)$$

Тепер енергетичний спектр екситона $\mathcal{E}_{n_{\rho}^e m^e}^{n_{\rho}^h m^h}$ без врахування електрон-діркової та взаємодії

обох квазічастинок з фононами, знаходиться з умови мінімуму функціоналу

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{n_{\rho}^e m^e}^{n_{\rho}^h m^h} &= E_{g_0} + E_{n_{\rho}^e m^e} + E_{n_{\rho}^h m^h} = \\ &= E_{g_0} + \min_{\rho_0 = \bar{\rho}_0} \left\{ E_{n_{\rho}^e m^e}^{(0)}(\rho_0) + \Delta E_{n_{\rho}^e m^e}(\rho_0) + E_{n_{\rho}^h m^h}^{(0)}(\rho_0) + \Delta E_{n_{\rho}^h m^h}(\rho_0) \right\}, \end{aligned} \quad (11)$$

що реалізується при $\rho_0 = \bar{\rho}_0$; E_{g_0} - ширина забороненої зони матеріалу нанотрубки.

Енергії зв'язку $\delta E_{n_{\rho}^e m^e}^{n_{\rho}^h m^h}$ електрона і дірки у відповідних станах розраховуються так.

Спочатку виконується усереднення потенціальної енергії взаємодії (4) на хвильових функціях електрона і дірки, що описують їх рух у площині, перпендикулярній до аксіальної осі у системі центра мас

$$(z = z_e - z_h, Z = (z_e \mu_0^e + z_h \mu_0^h) / (\mu^e + \mu^h))$$

$$V_{n_{\rho}^e m^e}^{n_{\rho}^h m^h}(z) = -\frac{e^2}{\varepsilon} \int d\bar{\rho}_e d\bar{\rho}_h \frac{|\Psi_{n_{\rho}^e m^e}(\bar{\rho}_0, \bar{\rho}_e)|^2 |\Psi_{n_{\rho}^h m^h}(\bar{\rho}_0, \bar{\rho}_e)|^2}{\sqrt{(\bar{\rho}_e - \bar{\rho}_h)^2 + z^2}}. \quad (12)$$

Тоді подальший розрахунок енергій зв'язку $\delta E_{n_{\rho}^e m^e}^{n_{\rho}^h m^h}$ виконується розв'язуванням рівняння Шре-дінгера

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_z^2 + V_{n_{\rho}^e m^e}^{n_{\rho}^h m^h}(z) \right) \Phi(z) = \delta E_{n_{\rho}^e m^e}^{n_{\rho}^h m^h} \Phi(z), \quad \left(\mu = \frac{\mu_0^e \mu_0^h}{\mu_0^e + \mu_0^h} \right) \quad (13)$$

методом, що детально описаний у роботі [5].

Гамільтоніан екситон-фононної взаємодії, переведений у зображення вторинного квантування за всіма змінними системи, знаходиться через потенціал поля поляризації у моделі діелектричного континууму на ортонормованій системі хвильових функцій електрона і дірки (7)

$$\hat{H}_{ex-ph} = \hat{H}_{e-ph} + \hat{H}_{h-ph} = \hat{H}_{e-L} + \hat{H}_{e-I} + \hat{H}_{h-L} + \hat{H}_{h-I}. \quad (14)$$

Оскільки гамільтоніан взаємодії дірки з фононами цілком подібний до електрон-фононного, то приводяться лише аналітичні вирази для останнього.

Отже гамільтоніан взаємодії електрона з обмеженими L - фононами

$$\hat{H}_{e-L} = \sum_{i=0}^3 \sum_k \sum_{s_i q m} F_{n_{\rho 1} m_1 k}^{n_{\rho 2} m_1 + m}(s_i, q, m) \hat{a}_{n_{\rho 1} m_1 k + q}^+ \hat{a}_{n_{\rho 2} m_1 + m k} (\hat{b}_{s_i q m}^+ + \hat{b}_{s_i -q -m}) \quad (15)$$

містить функції зв'язку

$$F_{n_{\rho 1} m_1 k}^{n_{\rho 2} m_1+m}(s_0, q, m) = \sqrt{\frac{2e^2 \Omega_{L0}}{L} \left(\frac{1}{\varepsilon_{\infty 0}} - \frac{1}{\varepsilon_{00}} \right)} \frac{1}{\bar{\rho}_0 \sqrt{k_{s_0}^2 + q^2}} \frac{1}{|J_{m+1}(k_{s_0} \bar{\rho}_0)|} \times$$

$$\times \int_0^{\bar{\rho}_0} R_{n_{\rho 1} m_1 k+q}^*(\rho) R_{n_{\rho 2} m_1+m k}(\rho) J_m(k_{s_0} \rho) \rho d\rho \quad (16)$$

$$F_{n_{\rho 1} m_1 k}^{n_{\rho 2} m_1+m}(s_{i=1,2}, q, m) = \sqrt{\frac{2e^2 \Omega_{Li}}{L} \left(\frac{1}{\varepsilon_{\infty i}} - \frac{1}{\varepsilon_{0i}} \right)} \frac{\pi}{2} \frac{k_{s_i}}{\sqrt{k_{s_i}^2 + q^2}} \left[\frac{1}{N_m^2(k_{s_i} \bar{\rho}_i)} - \frac{1}{N_m^2(k_{s_i} \bar{\rho}_{i-1})} \right]^{-1/2} \times$$

$$\times \int_{\bar{\rho}_{i-1}}^{\bar{\rho}_i} R_{n_{\rho 1} m_1 k+q}^*(\rho) R_{n_{\rho 2} m_1+m k}(\rho) \left[J_m(k_{s_i} \rho) - \frac{J_m(k_{s_i} \bar{\rho}_{i-1})}{N_m(k_{s_i} \bar{\rho}_{i-1})} N_m(k_{s_i} \rho) \right] \rho d\rho \quad (17)$$

$$F_{n_{\rho 1} m_1 k}^{n_{\rho 2} m_1+m}(s_3, q, m) = \sqrt{\frac{2e^2 \Omega_{L1}}{L} \left(\frac{1}{\varepsilon_{\infty 1}} - \frac{1}{\varepsilon_{01}} \right)} \frac{1}{\bar{\rho}_2 \sqrt{k_3^2 + q^2}} \frac{1}{|N_{m+1}(k_3 \bar{\rho}_2)|} \times$$

$$\times \int_{\bar{\rho}_2}^{\infty} R_{n_{\rho 1} m_1 k+q}^*(\rho) R_{n_{\rho 2} m_1+m k}(\rho) N_m(k_3 \rho) \rho d\rho \quad (18)$$

Значення коефіцієнтів k_{s_i} ($i = 0, 1, 2, 3$) визначаються коренями рівнянь

$$J_m(k_{s_0} \bar{\rho}_0) = 0, \quad N_m(k_{s_3} \bar{\rho}_2) = 0, \quad \frac{J_m(k_{s_i} \bar{\rho}_{i-1})}{N_m(k_{s_i} \bar{\rho}_{i-1})} = \frac{J_m(k_{s_i} \bar{\rho}_i)}{N_m(k_{s_i} \bar{\rho}_i)} \quad (i = 1, 2), \quad (18)$$

де величини s_i ($i = 0, 1, 2, 3$) нумерують ці корені.

Гамільтоніан взаємодії електрона з інтерфейсними I – фононами

$$\hat{H}_{e-I} = \sum_k \sum_{n_{\rho 1} n_{\rho 2} m_1} F_{n_{\rho 1} m_1 k}^{n_{\rho 2} m_1+m}(s, q, m) \hat{a}_{n_{\rho 1} m_1 k+q}^+ \hat{a}_{n_{\rho 2} m_1+m k} (\hat{b}_{sqm}^+ + \hat{b}_{s-q-m}) \quad (19)$$

містить функції зв'язку

$$F_{n_{\rho 1} m_1 k}^{n_{\rho 2} m_1+m}(s, q, m) = \sqrt{\frac{e^2 \Omega_{qs}}{LY_{qs}}} \int_0^{\infty} R_{n_{\rho 1} m_1 k+q}^*(\rho) R_{n_{\rho 2} m_1+m k}(\rho) \rho d\rho \times$$

$$\times \left\{ I_m(q\rho) \theta(\rho - \bar{\rho}_0) + \sum_{i=1}^2 [A_i I_m(q\rho) + B_i K_m(q\rho)] \theta(\rho - \bar{\rho}_i) + B_3 K_m(q\rho) \theta(\bar{\rho}_2 - \rho) \right\} \quad (20)$$

Тут енергії шести віток інтерфейсних фононів Ω_{qs} та коефіцієнти A_i , B_i ($i = 1, 2, 3$) визначаються граничними умовами для радіальних складових вектора індукції і тангенційних складових вектора напруженості потенціалу поля поляризації. Величина Y_{qs} отримується з вимоги діагональності га-

мільтоніану інтерфейсних фононів (5). Аналітичний вигляд дисперсійного рівняння та вирази для A_i , B_i , Y_{qs} через їхню громіздкість не приводяться.

Як відомо [6], у випадку багатозонної системи квазічастинок, що взаємодіють з фононами при $T = 0\text{ K}$ фур'є-образ функції Гріна зв'язаний з масовим оператором рівнянням Дайсона

$$G_v^{(e,h)}(k, \omega) = G_{v_v}^{(e,h)}(k, \omega) = \left\{ \omega - E_v^{(e,h)}(k) - M_{v_v}^{(e,h)}(k, \omega) \right\}^{-1}, \quad (v = n_\rho, m). \quad (21)$$

Оскільки в системі $\text{GaAs}/\text{Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}$ електрон-і дірково-фононна взаємодія слабкі, то в масовому операторі достатньо обмежитись однофононним наближенням

$$M_{n_\rho m_1}^{(e,h)}(k, \omega) = M_{L n_\rho m_1}^{(e,h)}(k, \omega) + M_{I n_\rho m_1}^{(e,h)}(k, \omega) = \\ = \sum_{i=0}^3 \sum_{s_i} \sum_{q m} \sum_{n_\rho m_2} \frac{\left| F_{n_\rho m_1}^{n_\rho m_2 m_1+m}(s_i, q, m) \right|_{(e,h)}^2}{\omega - E_{n_\rho m_2}^{(e,h)}(k-q) - \Omega_{L_i}} + \sum_{s q m} \sum_{n_\rho m_2} \frac{\left| F_{n_\rho m_1}^{n_\rho m_2 m_1+m}(s, q, m) \right|_{(e,h)}^2}{\omega - E_{n_\rho m_2}^{(e,h)}(k-q) - \Omega_{q_s}}. \quad (22)$$

Перенормована фононами енергія електрона чи дірки ($E_{n_\rho m}^{(e,h)}(k)$) визначається з дисперсійних рівнянь

$$\omega - E_{n_\rho m}^{(e,h)}(k) - M_{n_\rho m}^{(e,h)}(k, \omega) = 0. \quad (23)$$

Внаслідок слабкої взаємодії обох квазічастинок з L – та I – фононами $M_{n_\rho m}^{(e,h)}(k, \omega)$ слабо залежить від ω , тому парціальні зсуви енергетичних рівнів визначаються дійсними частинами відповідних масових операторів

$$\Delta_{n_\rho m}^{e-L, I} = \text{Re} M_{n_\rho m}^{e-L, I}, \quad \Delta_{n_\rho m}^{h-L, I} = \text{Re} M_{n_\rho m}^{h-L, I}. \quad (24)$$

У результаті спектр екситонних енергій з урахуванням електрон-діркової взаємодії та взаємодії обох квазічастинок з L – та I – фононами має вигляд

$$E_{n_\rho m^e}^{n_\rho m^e} = E_{g_0} + E_{n_\rho m^e}^e + E_{n_\rho m^h}^h + \delta E_{n_\rho m^h}^{n_\rho m^e} + \Delta_{n_\rho m^e}^{e-L} + \Delta_{n_\rho m^h}^{h-L} + \Delta_{n_\rho m^e}^{e-I} + \Delta_{n_\rho m^h}^{h-I}. \quad (25)$$

Крім екситонного спектра, отримані хвильові функції дозволяють виконати оцінку інтенсивностей міжзонних оптичних квантових переходів [12]

$$I_{n_\rho m^e k^e}^{n_\rho m^h k^h} \sim \left| \int_0^{\bar{\rho}^2} R_{n_\rho m^e k^e}(\rho) R_{n_\rho m^h k^h}(\rho) \rho d\rho \right|^2. \quad (26)$$

Подальший розрахунок і аналіз перенормованого взаємодією з фононами екситонного спектра та інтенсивностей міжзонних квантових переходів виконувався числовими методами.

3. Аналіз та обговорення результатів

Еволюція екситонного спектра в залежності від геометричних розмірів наносистеми вивчалася на прикладі складної кількашарової шестигранної нанотрубки $\text{GaAs}/\text{Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}$ з такими фізичними параметрами: $\mu_0^e = 0,063 m_0$, $\mu_1^e = 0,096 m_0$, $\mu_0^h = 0,51 m_0$, $\mu_1^h = 0,61 m_0$, $U_0^e = 297\text{ meV}$, $U_0^h = 224\text{ meV}$, $E_{g_0} = 1520\text{ meV}$ (m_0 – маса електрона у вакуумі), $\varepsilon_{\infty 0} = 10,85$, $\varepsilon_{\infty 1} = 9,8$; постійна ґратки середовища GaAs $a_{\text{GaAs}} = 5,65\text{ \AA}$; енергії поздовжніх та поперечних оптичних фононів середовищ „0” та „1”: $\Omega_{L_0} = 35\text{ meV}$,

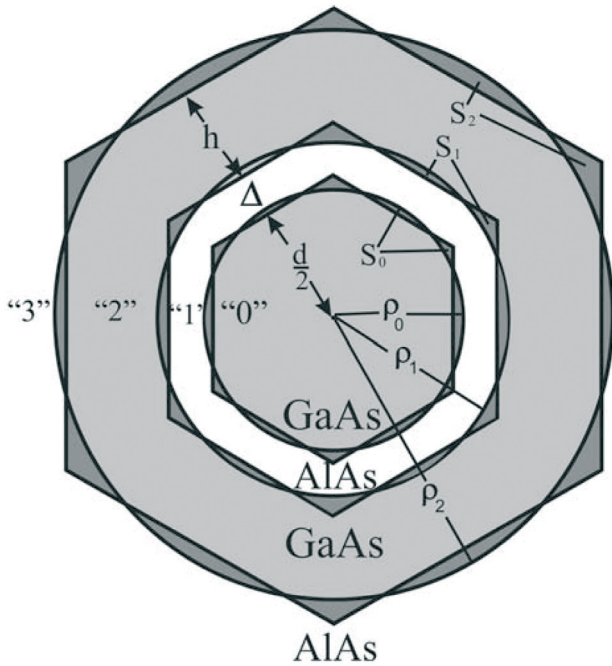


Рис.1. Геометрична схема складної шестигранної нанотрубки

$\Omega_{L0} = 35$ меВ, $\Omega_{T0} = 32,2$ меВ, $\Omega_{L1} = 39,4$ меВ, $\Omega_{T1} = 35,95$ меВ; $\varepsilon_{\infty 0} = 10,85$, $\varepsilon_{\infty 1} = 9,8$.

На рис.2, в якості прикладу, приведено залежності від товщини (d) внутрішньої дротини енергій основних станів електрона E_{10}^e (а), дірки E_{10}^h (б), енергії зв'язку екситона δE_{10}^{10} (в) та зсувів основного електронного рівня $\Delta_{10}^{e-L, I}$ (г) при $\Delta=4$ нм, $h=4$ нм.

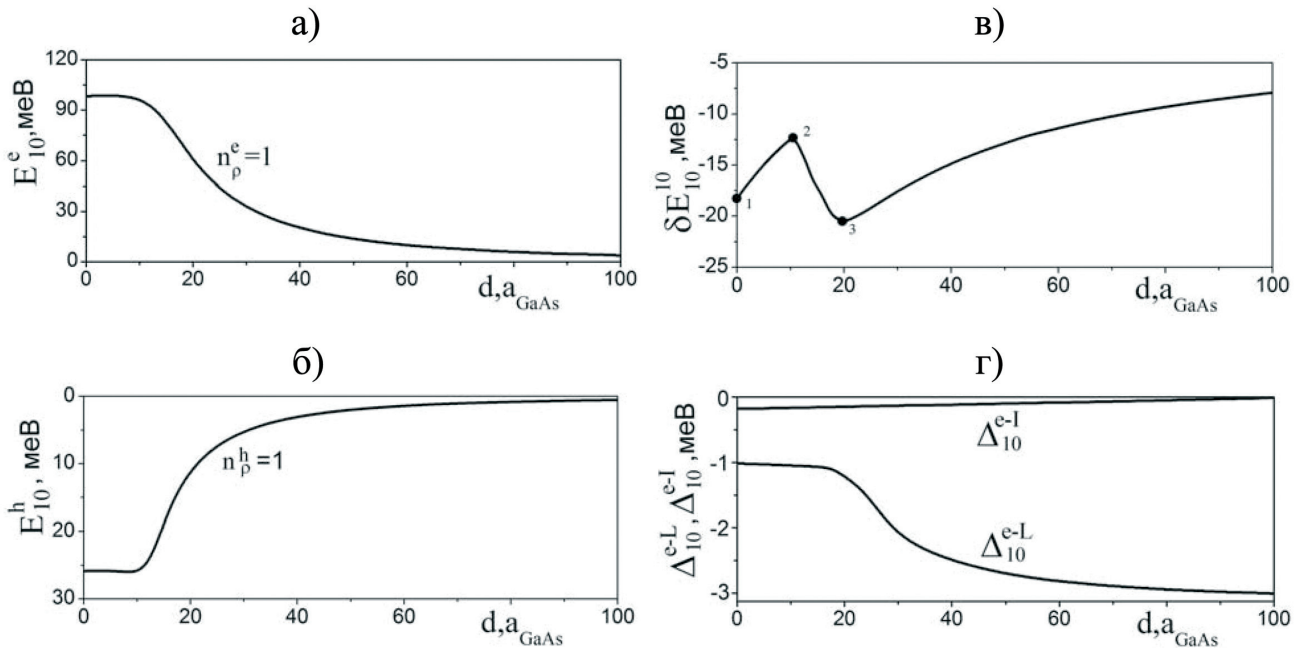


Рис.2. Залежності від товщини (d) внутрішньої дротини енергій основних станів електрона E_{10}^e (а), дірки E_{10}^h (б), енергії зв'язку екситона δE_{10}^{10} (в) та зсувів основного електронного рівня $\Delta_{10}^{e-L, I}$ (г) при $\Delta=4$ нм, $h=4$ нм.

E_{10}^h (б), енергії зв'язку екситона δE_{10}^{10} (в) та зсувів основного електронного рівня $\Delta_{10}^{e-L, I}$ (г) при $\Delta=4$ нм, $h=4$ нм.

З рис.2 а,б видно, що при малих значеннях товщини внутрішньої дротини енергії електрона і дірки не змінюються зі збільшенням d . При цьому обидві квазічастинки виявляються локалізованими у нанотрубці товщиною h . Ті ж області зміни товщини внутрішньої дротини, де енергія обох квазічастинок швидко зменшується зі збільшенням d відповідають станам, перебуваючи в яких, електрон і дірка з близькою до одиниці ймовірністю знаходяться у внутрішній дротині.

Як видно з рис.2 в, енергія зв'язку екситона (δE_{10}^{10}) немонотонно залежить від товщини внутрішньої дротини d , досягаючи певних мінімальних та максимальних значень. Таку поведінку δE_{10}^{10} легко зрозуміти із простих фізичних міркувань. Справді, якщо електрон і дірка знаходяться у своїх основних станах, то при $d = 0$ квантова дротина відсутня, а обидві квазічастинки локалізуються у просторі нанотрубки товщиною $h=4$ нм з певним значенням енергії зв'язку $\delta E_{10}^{10} \approx 18$ меВ (точка «1» на рис.2в). З появою і збільшенням товщини внутрішньої дротини абсолютне значення енергії зв'язку дещо зменшується, оскільки хвильова функція електрона, як легкої квазічастинки, все

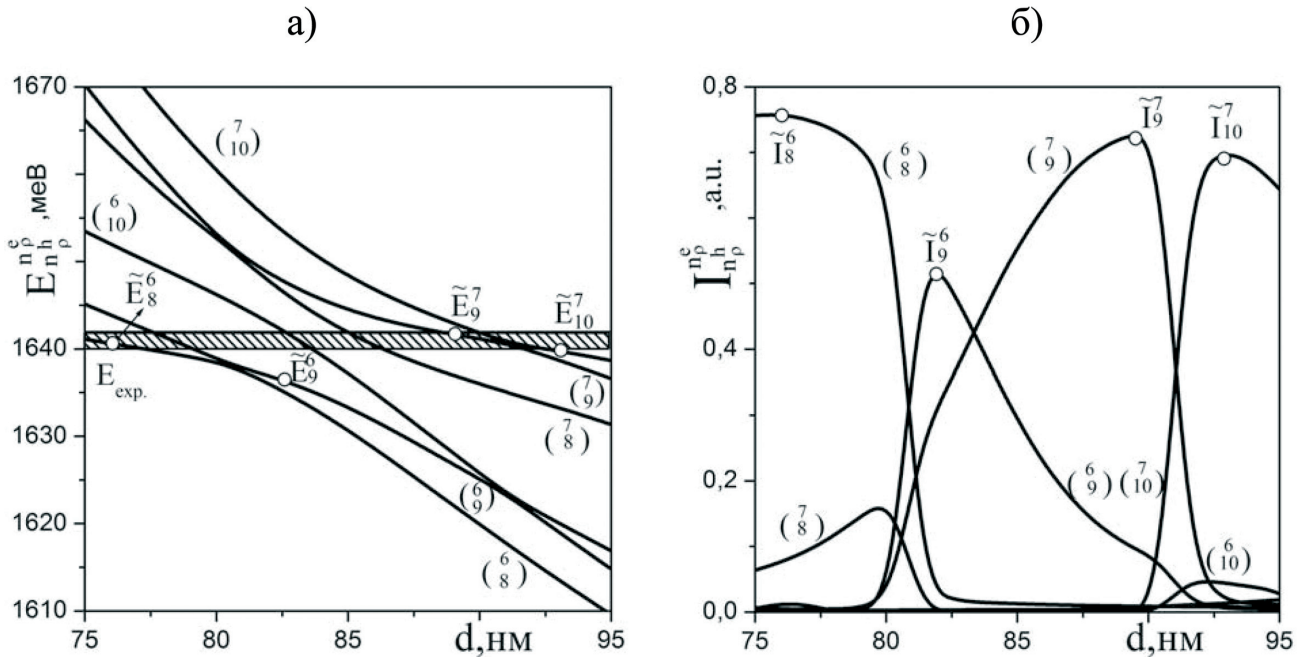


Рис.3. Залежності екситонних енергій $E_{n_p}^{n_h}$ (а) та інтенсивностей квантових переходів $I_{n_p}^{n_h}$ (б) від товщини (d) внутрішньої дротини в межах $d=85 \pm 10$ нм при $\Delta=4$ нм, $h=4$ нм.

більше проникає в область внутрішньої дротини товщиною d, а масивна дірка практично не змінює своєї локалізації у наносистемі. При цьому ефективна відстань між квазічастинками збільшується. При досягненні деякого критичного значення d (точка «2» на рис.2 в) масивна дірка також починає проникати до внутрішньої дротини, ефективна відстань між квазічастинками зменшується, а, відповідно, збільшується абсолютне значення енергії зв'язку. Найбільше значення енергії зв'язку ($\delta E_{10}^{10} \approx 22$ меВ) отримується тоді, коли і електрон, і дірка з близькою до одиниці ймовірністю виявляються у внутрішній дротині (точка 3 на рис.2в). Далі зі збільшенням d енергія зв'язку лише зменшується, що пояснюється збільшенням ефективної відстані між електроном і діркою у просторі внутрішньої дротини, товщиною d.

З рис.2г видно, що зсув основного електронного енергетичного рівня, в основному, зумовлений обмеженими фонами, а внесок інтерфейсних нехтовно малий. Більший внесок L-фононів пов'язаний з тим, що за тих геометричних розмірів складної нанотрубки, які досліджувалися, електрон з великою ймовірністю перебуває або у внутрішній дротині, або ж у нанотрубіці, де поле поляризації обмежених фононів є великим, а інтерфейсних - малим.

Для того, щоб співставити отримані теоретичні результати з експериментальними, на рис.3 зобра-

жено залежності екситонних енергій $E_{n_p}^{n_h}$ (рис.3 а)

та відповідних інтенсивностей квантових переходів $I_{n_p}^{n_h}$ (рис.3 б) від товщини (d)

внутрішньої дротини в межах $d = 85 \pm 10$ нм, що відповідає геометричним розмірам складної нанотрубки, при яких на експерименті спостерігається пік випромінювання з енергією $E_{exp} \approx 1640$ меВ [9]. Індекс „0”, що характеризує величину магнітного квантового числа для спрощення опущений.

З обох рисунків видно, що лише чотири із шести екситонних кривих з енергіями $E_8^6, E_9^6, E_9^7, E_{10}^7$ можуть характеризуватися інтенсивностями, що перевищують 0.5. Максимумам інтенсивностей (\tilde{I}) відповідають екситонні енергії $\tilde{E}_8^6, \tilde{E}_9^6, \tilde{E}_9^7, \tilde{E}_{10}^7$, на яких, очевидно, і повинен спостерігатися експериментальний пік випромінювання. Отже, у залежності від точних експериментальних розмірів (d) внутрішньої дротини пік випромінювання, що спостерігався у роботі [9], може формуватися різними екситонними станами, енергії яких слабо відрізняються між собою.

4. Висновки

На основі моделі ефективних мас і прямокутних потенціалів для електрона і дірки, та в моделі

діелектричного континууму для фононів, запропонована теорія екситонного спектра у складній шестигранній нанотрубці з урахуванням екситон-фононної взаємодії.

Показано, що енергія зв'язку екситона не-монотонно залежить від товщини внутрішньої дротини d , досягаючи певних мінімальних та максимальних значень. Така поведінка енергії зв'язку цілком зумовлена складним характером розподілу густини ймовірності знаходження електрона і дірки у просторі кількешарової нанотрубки.

Встановлено, що за типових в експерименті геометричних розмірів складної нанотрубки зсуви екситонних енергетичних рівнів, в основному, зумовлені обмеженими фононами, а внесок інтерфейсних нехтовно малий.

Встановлено, що результати розрахунку енергій екситонного спектра і інтенсивностей квантових переходів, отримані на основі розвинутої теорії, добре узгоджуються з експериментальним спектром випромінювання у нанотрубках на основі напівпровідників $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$.

Література

1. F. Guffarth, R. Heitz, A. Schliwa, O. Stier, A.R. Kovsh, V. Ustinov, N.N. Ledentsov, D. Bimberg, Electronic Properties of InAs/GaAs Quantum Dots Covered by an $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ Quantum Well // *Phys. Stat. Sol. (b)*.-2001.-V. 224.-P. 61-65.
2. G.Schlegel, J. Bohnenberger, I. Potapova, and Alf Mews, Fluorescence Decay Time of Single Semiconductor Nanocrystals // *Phys. Rev. Lett.*-2002.-V. 88.- 137401 (4 pages).
3. F. Koberling, A. Mews, and T. Basché, Single-dot spectroscopy of CdS nanocrystals and CdS/HgS heterostructures // *Phys. Rev. B*.-1999.-V. 60.-P. 1921-1927.
4. E.A. Muljarov, E. A. Zhukov, V.S. Dneprovskii, Yasuaki Masumoto, Dielectrically enhanced excitons in semiconductor-insulator quantum wires: Theory and experiment. // *Phys.Rev. B*.-2000.-V. 62.-P.7420-7432 (2000).
5. A.F. Slachmuylders, B. Partoens, W. Magnus and F.M. Peeters, Exciton states in cylindrical nanowires // *J. Phys.: Condens. Matter*.-2006.-V. 18.-P.3951-3966.
6. Tkach M., Holovatsky V., Voitsekhivska O., Mykhalyova M., Fartushynsky R., Electron-Phonon Interaction in Semiconductor Spherical Quantum Dot Embedded in a Semiconductor Medium (HgS/CdS) // *Phys. Stat. Sol.*-2001.-V. 225.-P.331-342.
7. N.V. Tkach and V.A. Golovatskii, Quasi-stationary states of electrons and holes in an open composite cylindrical quantum wire // *Phys. Sol. State*.-2001.-V. 43, P.365-372.
8. M. Heigoldt, J. Arbiol, D Spirkoska, et. al., Long range epitaxial growth of prismatic heterostructures on the facets of catalyst-free GaAs nanowires // *J. Mater. Chem*.-2009.-V. 19.-P.840-848.
9. A. Fontcuberta i Morral, D. Spirkoska, J. Arbiol, et.al., Prismatic quantum heterostructures synthesized on molecular-beam epitaxy GaAs nanowires // *Small*.-2008.-V. 4.-P.899-903.
10. В.Г.Дубровский, Г.Э.Цырлин, В.М.Устинов, Полупроводниковые нитевидные нанокристаллы: синтез, свойства, применения // *ФТП*.-2009.-Т. 43.-С. 1585-1629.
11. Н.А. Bethe, Е.Е. Salpeter, Quantum mechanics of one- and two-electron atoms.- New York: Plenum Publishing Corp., 1977 .-382 p.
12. John H. Davies, The physics of low-dimensional semiconductors: an introduction.- New York: Cambridge University Press, 1998.- 438 p.