ЖУРНАЛ ФІЗИЧНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ
т. 10, № 2 (2006) с. 108–116

JOURNAL OF PHYSICAL STUDIES
v. 10, No. 2 (2006) p. 108–116

ОСОБЛИВОСТІ ЕНЕРҐЕТИЧНОГО СПЕКТРА ЕЛЕКТРОНА В ЕЛІПТИЧНОМУ КВАНТОВОМУ ДРОТІ ТА ЕЛІПТИЧНІЙ НАНОТРУБЦІ

В. А. Головацький, В. І. Гуцул
Чернівецький національний університет ім. Ю. Федьковича
58012, Чернівці, вул. Коцюбинського, 2
(Отримано 10 травня 2006 р.; в остаточному вигляді — 12 вересня 2006 р.)

У наближенні ефективної маси досліджено спектр електрона в еліптичному квантовому дроті (ЕКД) та еліптичній напівпровідниковій нанотрубці (ЕНН). Отримано точний енерґетичний спектр електрона в ЕКД і ЕНН GaAs з непроникними стінками та наближені розв'язки рівняння Шредінґера при скінченній висоті потенціяльного бар'єра в ЕКД GaAs/Al$_x$Ga$_{1-x}$As. Показано, що еліптичність квантового дроту й нанотрубки знімає виродження енерґетичного спектра квазічастинок. Залежність енерґій парних та непарних станів від співвідношення півосей еліпса має немонотонний характер. У граничному випадку виродження еліптичних квантових дротів та нанотрубок у кругові, енерґетичний спектр квазічастинок збігається з відповідними спектрами в циліндричних наносистемах.

Ключові слова: спектр розмірного квантування, еліптичний квантовий дріт, еліптична нанотрубка.

PACS number(s): 68.65.Hb, 68.65.La, 74.25.Kc, 79.60.Jv

I. ВСТУП

Теоретичні дослідження енерґетичного спектра квазічастинок у наносистемах, що виконуються в межах наближення ефективних мас, зводяться до розв'язання рівняння Шредінґера з потенціялом розмірного квантування, форма якого визначається геометрією наносистеми. У найпростіших випадках для сферичних квантових точок та циліндричних квантових дротів у моделі прямокутного потенціялу існують точні енерґетичний спектр і хвильові функції квазічастинок. На основі аналітичних виразів для хвильових функцій квазічастинок у напівпровідникових наногетеросистемах будують наближені розв'язки складніших задач [1]. Геометрична форма нанодротів та нанотрубок, що отримуються в реальних експериментальних умовах, не завжди є циліндричною [2–5], це значно ускладнює їх теоретичне дослідження. Особливий інтерес серед них останнім часом викликають еліптичні наносистеми. Наприклад, у роботі [2] вирощено еліптичні напівпровідникові нанодроти, про що свідчить зображення їх поперечного перерізу. У праці [6] вивчено умови стабільности еліптичних нанодротів, отриманих у результаті одновісної деформації. Результати досліджень еліптичних наноструктур можуть бути корисними для опису фізичних явищ, що виникають у циліндричних квантових дротах вирощених з анізотропних напівпровідникових матеріялів. Автори статті [7] показали, що задача розмірного квантування квазічастинки з анізотропною ефективною масою в циліндричній квантовій ямі зводиться до задачі для квазічастинки з ізотропною ефективною масою в еліптичній потенціяльній ямі.

Велике зацікавлення дослідників напівпровідниковими нанотрубками, про що свідчить поява великої кількости експериментальних і теоретичних праць, викликана можливістю створення на їх основі квантових транзисторів і високоефективних світловипромінювачів. Розроблені технології вирощування напівпровідникових нанотрубок дають змогу отримувати нанотрубки з різною геометрією поперечного перерізу [3,8]. Розрахунок спектрів розмірного квантування квазічастинок у циліндричних напівпровідникових нанотрубках можна виконувати згідно з загальною теорією, побудованою для складних квантових дротів [1]. Теорії спектрів розмірного квантування носіїв заряду в еліптичних нанотрубках на сьогодні не існує, хоча такі наносистеми можна вирощувати методом селективного епітаксійного росту [3] або отримувати внаслідок деформації з відповідних циліндричних нанотрубок.

Отже, задача розрахунку спектра розмірного квантування квазічастинок в еліптичних наносистемах є актуальною. Про це також свідчать недавні теоретичні дослідження різних авторів [9–11]. Для еліптичної потенціяльної ями з безмежно високими стінками й довільною величиною ексцентриситету існують точні розв'язки рівняння Шредінґера як для 3-вимірного (еліптична квантова точка) [9], так і для 2-вимірного (еліптичний квантовий дріт) [10] випадків, що отримуються в результаті числових розрахунків. Коли ексцентриситет еліпса достатньо малий, то можна застосувати теорію збурень граничних умов [12] або варіяційний метод із варіяційним параметром у гамільтоніяні [11]. Для спектра розмірного квантування в еліптичній квантовій точці в першому порядку теорії збурень отримуємо простий аналітичний вираз для поправок, що враховують деформацію сферичної безмежно глибокої потенціяльної ями [12]. Для 2-вимірного випадку розрахунок подібних поправок є не простішим, ніж знаходження точного розв'язку задачі.

Якщо напівпровідникова еліптична наногетеросистема описується потенціяльною ямою скінченної глибини і квазічастинка характеризується різними значеннями ефективної маси всередині й зовні наносистеми, то розрахунок спектрів розмірного квантування квазічастинок значно ускладнюється. Перші спроби таких розрахунків виконували для еліптичних квантових точок HgS/CdS варіяційним методом [11]. Цей метод можна також застосувати і для квантових дротів з малою анізотропією. У роботі [10] автори спробували на основі функцій Матьє побудувати точні розв'язки рівняння Шредінґера для квантового дроту зі скінченною висотою потенціяльного бар'єра на еліптичній межі. Але, як справедливо зазначено в праці [13], такі розв'язки будуть точними лише для безмежно глибокої квантової ями чи виродження еліпса в коло. У роботі [13] отримано енерґетичний спектр електрона в ЕКД як результат числового розв'язування диференціяльного рівняння методом сіток і наведено його залежність від співвідношення півосей (a/b). На жаль, у праці не зіставлено цей спектр із результатами статті [10], що дало б змогу оцінити точність розв'язків [10] і визначити сферу їх можливого застосування.

У цій роботі досліджено енерґетичний спектр електронів в ЕКД і ЕНН, щоб простежити еволюцію цього спектра залежно від геометричних параметрів досліджуваних наносистем. Оскільки для створення світловипромінювальних напівпровідникових приладів найліпшим матеріялом є прямозонний GaAs, то саме параметри цього матеріялу використані в числових розрахунках.

II. ГАМІЛЬТОНІЯН СИСТЕМИ ТА РОЗВ'ЯЗОК РІВНЯННЯ ШРЕДІНҐЕРА

Розгляньмо еліптичний квантовий дріт GaAs (середовище 0), поміщений у напівпровідникову чи діелектричну матрицю (середовище 1). Систему координат виберімо так, що вісь Oz спрямована вздовж дроту. Потенціяльна енерґія і ефективна маса електрона в декартових координатах матимуть вигляд

$$\mu(x,y)=\begin{cases}\mu_0, & x^2/a^2+y^2/b^2\le 1,\\ \mu_1, & x^2/a^2+y^2/b^2>1\,,\end{cases} \tag{1}$$

$$U(x,y)=\begin{cases}0, & x^2/a^2+y^2/b^2\le 1,\\ V, & x^2/a^2+y^2/b^2>1\,,\end{cases} \tag{2}$$

де a і b — півосі еліпса.

У напрямку вздовж квантового дроту електрон рухається вільно. Внаслідок тунельного ефекту хвильова функція квазічастинки проникає в середовище 1 і доля енерґії, що зумовлена поздовжнім рухом електрона, має вигляд $E_z=\hbar^2k_z^2/2\mu^*$, де μ^*— усереднена ефективна маса, яка у випадку безмежних потенціяльних бар'єрів збігається з μ_0.

Енерґію, зумовлену поперечним рухом електрона, знаходимо з розв'язку рівняння Шредінґера, яке у загальному випадку координатно залежної маси має вигляд

$$\begin{aligned}&-\frac{\hbar^2}{2}\nabla\frac{1}{\mu(x,y)}\nabla\Psi\,(x,y)\\&+U(x,y)\Psi\,(x,y)=E\Psi\,(x,y)\,.\end{aligned} \tag{3}$$

Підставляючи (1) і (2) в рівняння (3), отримаємо для кожного середовища такі рівняння:

$$\nabla^2\Psi^{(i)}\,(x,y)+k_i^2\Psi^{(i)}\,(x,y)=0,\qquad (i=0,1), \tag{4}$$

де $k_i^2=2\mu_i(E-V_i)/\hbar^2$, $V_0=0$.

Ураховуючи те, що ця наногетеросистема має еліптичну симетрію, рівняння (2.4) зручно розв'язувати в еліптичних координатах $(\xi,\ \eta,\ z)$, які мають зв'язок із декартовими, за такими співвідношеннями:

$$\left.\begin{array}{ll}x=f\,\cosh\xi\,\cos\,\eta, & 0\le\xi<\infty\\ y=f\,\sinh\xi\,\sin\eta, & 0\le\eta<2\pi\\ z=z, & -\infty<z<+\infty\end{array}\right\}, \tag{5}$$

де $f=\sqrt{a^2-b^2}$ — фокусна відстань, ξ виконує роль радіяльної координати, а η — кутової. Радіяльна координата ξ визначається співвідношенням півосей еліпса $(\tanh\xi=b/a)$.

Перейшовши в рівняннях (2.4) від декартових координат до еліптичних, отримаємо

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}+\frac{\partial^2}{\partial\eta^2}+\frac{f^2k_i^2}{2}(\cosh 2\xi-\cos 2\eta)\right]\Psi^{(i)}(\xi,\eta)=0,$$

$$(i=0,1) \tag{6}$$

Як показано в праці [13], змінні в рівнянні (6) у загальному випадку розділити неможливо, оскільки неможливо забезпечити неперервність хвильової функції на еліптичній межі поділу середовищ. Тому хвильову функцію $\Psi(\xi,\eta)$ треба записувати так:

$$\Psi^{(i)}(\xi,\eta)=\sum_m C_m R_m^{(i)}(\xi)\theta_m^{(i)}(\eta), \tag{7}$$

де $R_m^{(i)}(\xi)$— радіяльна і $\theta_m^{(i)}(\eta)$— кутова частини, які задовольняють рівняння

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

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

де $q_i=f^2k_i^2/4$, c — константа розділення.

Лише у випадку непроникних стінок на межі квантового дроту хвильова функція допускає розділення змінних і такі квантові стани квазічастинки характеризується певним значенням квантового числа m

$$\Psi_m(\xi,\eta)=R_m(\xi)\theta_m(\eta). \tag{10}$$

Рівняння (8) і (9) є характеристичними рівняннями для функцій Матьє. Їх розв'язками є парна та непарна функції Матьє першого і другого роду. Оскільки умови періодичності можуть задовольняти лише парна $ce_m(q,\eta)$ та непарна $se_m(q,\eta)$ функції Матьє першого роду, то кутова частина хвильової функції матиме вигляд

$$\theta_m(q,\eta) = \begin{cases} ce_m(q,\eta), \\ se_m(q,\eta). \end{cases} \qquad (11)$$

Розв'язками радіяльного рівняння (9) є лінійна комбінація парних та непарних модифікованих функцій Матьє першого і другого роду:

$$R_m^e(q,\xi) = \begin{cases} A_m^e Je_m(q,\xi) + B_m^e Ne_m(q,\xi), & q > 0, \\ A_m^e Ie_m(q,\xi) + B_m^e Ke_m(q,\xi), & q < 0, \end{cases} \qquad (12)$$

$$R_m^o(q,\xi) = \begin{cases} A_m^o Jo_m(q,\xi) + B_m^o No_m(q,\xi), & q > 0, \\ A_m^o Io_m(q,\xi) + B_m^o Ko_m(q,\xi), & q < 0, \end{cases} \qquad (13)$$

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

Модифіковані функції Матьє, що входять у радіяльну хвильову функцію, мають складну залежність від коефіцієнта розділення c, який визначається з умови періодичности кутової частини хвильової функції (10). У граничному випадку, коли еліптичні координати прямують до циліндричних, модифіковані функції Матьє збігаються з відповідними функціями Бесселя [14,15].

Енерґетичний спектр квазічастинки знаходимо, використовуючи граничні умови для хвильової функції. У випадку непроникних стінок для електрона в еліптичному квантовому дроті парна та непарна хвильові функції при $\xi = \xi_0$ дорівнюють нулеві. З умови збіжности хвильових функцій (12, 13) при $\xi = 0$ отримаємо $B_m^e = B_m^o = 0$. Отже, дисперсійні рівняння для знаходження енерґій парних та непарних станів електрона з певним значенням квантового числа m матимуть вигляд

$$\left.\begin{array}{ll} Je_m(q,\xi)|_{\xi=\xi_0} = 0, & m = 0, 1, 2, \ldots \\ Jo_m(q,\xi)|_{\xi=\xi_0} = 0, & m = 1, 2, \ldots \end{array}\right\}. \qquad (14)$$

Значення $q_{nm}^{e(o)} = f^2\mu_0 E_{nm}^{e(o)}/2\hbar^2$, які задовольняють рівняння (14), визначають безмежний набір дискретних енерґетичних рівнів квазічастинки $E_{nm}^{e(o)}$, де $n = 1, 2, 3\ \ldots$— головне квантове число, яке нумерує порядковий номер кореня відповідного рівняння (14).

Далі дослідимо енерґетичний спектр електрона в еліптичній нанотрубці з непроникними стінками. Щоб знайти енерґетичний спектр квазічастинок в еліптичній нанотрубці, запишімо граничні умови для парної та непарної радіяльних хвильових функцій на зовнішній та внутрішній еліптичних межах. Точні розв'язки рівняння Шрединґера можливі тільки тоді, коли еліпси, що визначають внутрішню та зовнішню межі, мають однакову фокусну відстань. Цього вимагає вибрана еліптична система координат, у якій $f = \mathrm{const}$. У результаті співвідношення півосей (a_0/b_0) внутрішнього та (a_1/b_1) зовнішнього еліпсів буде різним. Хвильові функції парних та непарних станів електрона з певним значенням квантового числа m на внутрішній та зовнішній межі еліптичної нанотрубки дорівнюють нулеві

$$\left.\begin{array}{l} A_m^e Je_m(q,\xi_0) + B_m^e Ne_m(q,\xi_0) = 0 \\ A_m^e Je_m(q,\xi_1) + B_m^e Ne_m(q,\xi_1) = 0 \end{array}\right\}, \qquad (15)$$

$$\left.\begin{array}{l} A_m^o Jo_m(q,\xi_0) + B_m^o No_m(q,\xi_0) = 0 \\ A_m^o Jo_m(q,\xi_1) + B_m^o No_m(q,\xi_1) = 0 \end{array}\right\}, \qquad (16)$$

де $\xi_0 = \mathrm{artanh}(\mathrm{b_0/a_0})$, $\xi_1 = \mathrm{artanh}(\mathrm{b_1/a_1})$. Отримані системи рівнянь щодо 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

$$Je_m(q,\xi_0)\, Ne_m(q,\xi_1) - Ne_m(q,\xi_0)\, Je_m(q,\xi_1) = 0, \qquad (17)$$

$$Jo_m(q,\xi_0)\, No_m(q,\xi_1) - No_m(q,\xi_0)\, Jo_m(q,\xi_1) = 0. \qquad (18)$$

Отже, рівняння Шрединґера для електрона в ЕКД та ЕНН з непроникними межами мають точні розв'язки. Модель потенціялу з безмежними стінками можна використовувати тоді, коли енерґія досліджуваної частинки значно менша за висоту потенціяльного бар'єра на межі поділу середовищ, що часто реалізується для напівпровідникових наносистем, поміщених у діелектричне середовище.

Складніша ситуація виникає тоді, коли напівпровідниковий ЕКД чи ЕНН поміщені в напівпровідникову матрицю. Тоді висота потенціяльного бар'єра V порівняна з величинами найнижчих енерґетичних рівнів наносистеми. Застосувати звичайні умови зшивки хвильових функцій (7) та густин потоків ймовірності, побудованих на основі таких хвильових функцій на еліптичній межі, яка допускає можливість проникнення квазічастинок, дуже складно. Квантові стани в такій наносистемі не характеризуються певним значенням квантового числа m, а є комбінацією станів із різними значеннями m. Виникає питання, скільки доданків необхідно враховувати в розкладі хвильової функції (7). Зрозуміло, що при виродженні еліпса в коло достатньо одного доданка, який і визначає певне значення квантового числа m. При цьому функції Матьє вироджуються у відповідні функції Бесселя. Отже, збільшення величини співвідношення півосей еліпса a/b вимагає врахування більшого числа доданків у розкладі (7). Щоб визначити, до яких значень величини a/b можна зберігати лише один доданок у розкладі (7), порівняймо енерґетичні спектри, отримані в роботах [10] та [13] для електрона в ЕКД з висотою потенціяльного бар'єра на еліптичній межі $V = 0.75$ еВ.

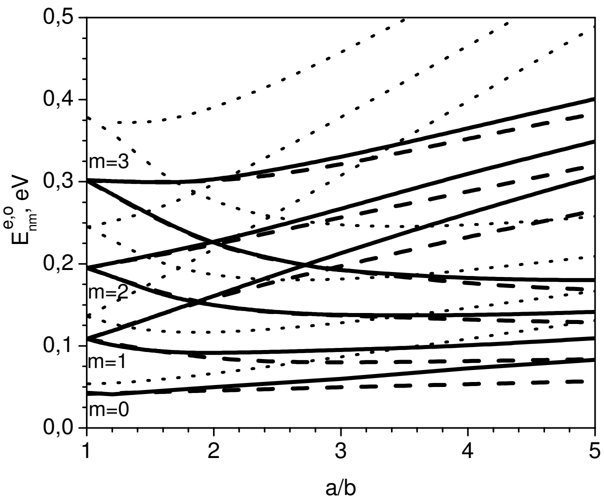


Рис. 1. Залежність енерґетичного спектра електрона в ЕКД ($V = 0.75$ еВ, $\mu_0 = \mu_1 = 0.041m_e$, $R_0 = \sqrt{ab} = 10$ нм) від співвідношення півосей еліпса a/b. Суцільні лінії — числовий розв'язок дифрівняння [13], штрихові — розв'язок дисперсійних рівнянь (19, 20) [10], пунктирні — спектр у безмежно глибокій еліптичній потенціяльній ямі.

У праці [13] отримано енерґетичний спектр електрона як результат числового розв'язування диференціяльного рівняння методом сіток. Досліджувана ділянка була поділена на 400×400 прямокутників із таким же співвідношенням сторін, як і співвідношення півосей еліпса. Такий підхід забезпечив високу точність отриманого спектра, зображеного на рис. 1 суцільними лініями. На цьому ж рисунку штриховими лініями показано еволюцію електронного спектра у залежно від величини a/b, одержану в роботі [10], у якій автори зберегли лише один доданок у формулі (7). Для порівняння на рис. 1 пунктирними лініями наведено точний енерґетичний спектр електрона в тому ж квантовому дроті з непроникними стінками.

З рис. 1 видно, що отримані енерґетичні спектри мають якісно однаковий вигляд. Величини енерґій електрона в моделі безмежно глибокої потенціяльної ями є значно вищими за відповідні значення, одержані наближеними методами для квантової ями скінченної глибини. Така відмінність є тим більшою, чим більший ексцентриситет еліпса і чим вище знаходяться рівні в енерґетичній шкалі. Наближені розв'язки [10] для всіх станів дають менші значення енерґії6 ніж результати числового розв'язування рівняння Шредінґера [13], але в ділянці $1 < a/b < 2$ результати, отримані різними методами, збігаються. В ЕКД з $2 < a/b < 3$ найбільша відмінність в енерґіях становить 15%, хоча енерґії багатьох станів відрізняються не більше ніж на 3–5%.

Отже, для дослідження еліптичних квантових дротів зі скінченною висотою потенціяльного бар'єра й ексцентриситетом $\varepsilon = f/a < 0.7$ достатньо зберігати один доданок у розкладі (7), який становить основну долю у формуванні цього квантового стану.

Використовуючи стандартні граничні умови для хвильової функції та густини потоку ймовірности на еліптичній межі поділу середовищ, отримуємо дисперсійні рівняння для знаходження енерґій парних і непарних станів електрона в еліптичному квантовому дроті

$$\frac{1}{\mu_0}\left.\frac{Je'_m(q_0,\xi)}{Je_m(q_0,\xi)}\right|_{\xi=\xi_0} = \frac{1}{\mu_1}\left.\frac{Ke'_m(q_1,\xi)}{Ke_m(q_1,\xi)}\right|_{\xi=\xi_0}, \qquad (19)$$

$$\frac{1}{\mu_0}\left.\frac{Jo'_m(q_0,\xi)}{Jo_m(q_0,\xi)}\right|_{\xi=\xi_0} = \frac{1}{\mu_1}\left.\frac{Ko'_m(q_1,\xi)}{Ko_m(q_1,\xi)}\right|_{\xi=\xi_0}, \qquad (20)$$

де $q_1 = f^2\mu_1(E-V)/2\hbar^2 < 0$.

III. АНАЛІЗ ТА ОБГОВОРЕННЯ РЕЗУЛЬТАТІВ ЧИСЛОВИХ РОЗРАХУНКІВ

A. Еліптичний дріт GaAs з непроникними стінками.

На рис. 2а наведено результати розрахунку енерґій розмірного квантування електрона в ЕКД GaAs з непроникними стінками залежно від співвідношення півосей еліпса a/b при сталій його площі (радіус рівновеликого з еліпсом кола $R_0 = 10$ нм). Ефективна маса електрона $\mu_0 = 0.067m_e$, m_e — маса вільного електрона. Парні стани зображено суцільними лініями, непарні — штриховими. Для порівняння на рис. 2б наведено розрахунки енерґетичного спектра електрона в квантовому дроті прямокутного перерізу (рівновеликому з еліптичним) за формулою

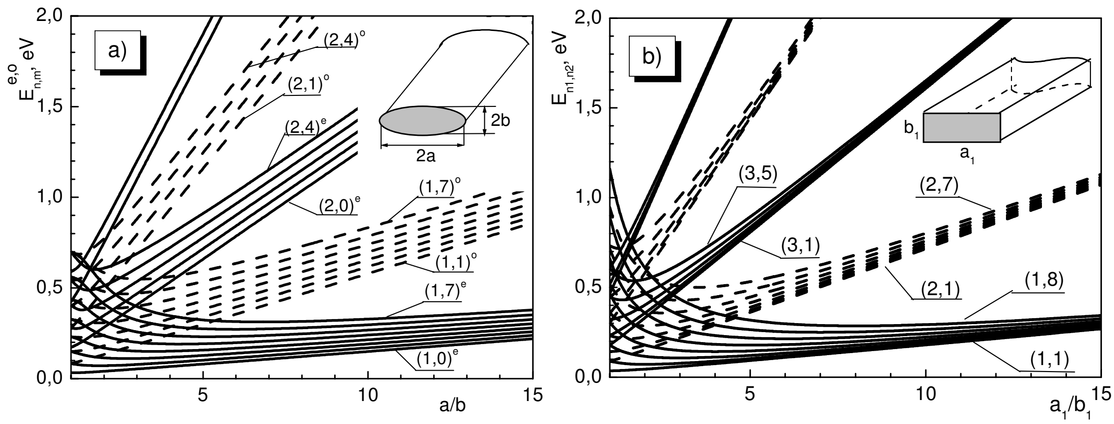


Рис. 2. Залежність енерґетичного спектра електрона в еліптичному (a) та в прямокутному (b) квантових дротах GaAs однакової площі поперечного перетину від співвідношення a/b.

$$E_{n_1 n_2} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu_0}\left(\frac{n_1^2}{b_1^2}+\frac{n_2^2}{a_1^2}\right), \qquad (21)$$

де a_1, b_1 — поперечні розміри квантового дроту.

З рисунка 2a видно, що парні та непарні стани утворюють серії рівнів, причому енерґії парних станів розташовані нижче в енерґетичній шкалі за відповідні енерґії непарних станів. Найнижчу енерґію має парний стан $(1,0)^e$, який залишається невиродженим при $a/b = 1$.

Якісно подібний спектр спостерігаємо у квантовому дроті прямокутного перерізу (рис. 2б). Добрий кількісний збіг величин енерґій електрона в ЕКД з відповідними енерґіями у квантовому дроті прямокутного поперечного перетину спостерігаємо тільки для декількох нижніх енерґетичних рівнів при невеликих значеннях асиметрії a/b. Збільшення співвідношення a/b при постійній площі поперечного перерізу дроту приводить до створення квазінеперервних зон енерґії як у ЕКД, так і в квантовому дроті прямокутного перерізу. У граничному випадку, коли еліпс вироджується в коло ($a/b = 1$), а прямокутник — у квадрат, спостерігаємо двохкратне виродження всіх збуджених електронних енерґетичних рівнів.

B. Еліптичний дріт GaAs/Al$_x$Ga$_{1-x}$As.

На рис. 3 наведено результати розрахунку залежности електронного енерґетичного спектра в ЕКД GaAs/Al$_x$Ga$_{1-x}$As від співвідношення a/b (суцільні лінії). Обчислювали енерґії E^e_{nm}, E^o_{nm} за формулами (19,20) для електрона в ЕКД GaAs/Al$_x$Ga$_{1-x}$As з такими параметрами напівпровідникових кристалів: $x = 0.4$, $\mu_1 = (0.067 + 0.083x)\,\mu_e$ — ефективна маса електрона в напівпровіднику Al$_x$Ga$_{1-x}$As, $V = 0.57(1.55x + 0.37x^2)$ eВ — висота потенціяльного бар'єра для електрона, $a_{\mathrm{GaAs}} = 0.565$ нм — стала ґратки GaAs. Для порівняння пунктирними лініями наведено енерґетичний спектр в ЕКД GaAs з непроникними стінками.

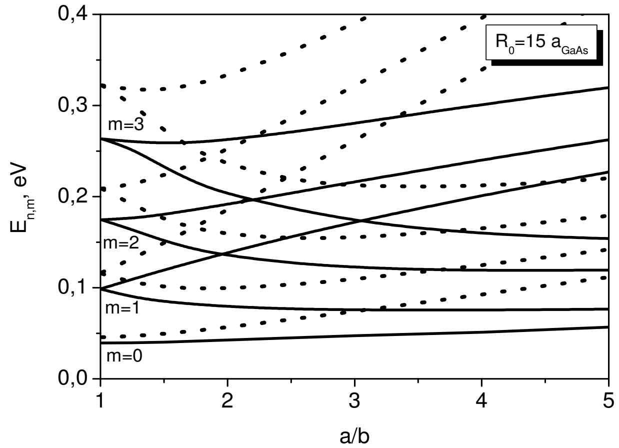


Рис. 3. Залежність енерґетичного спектра електрона в ЕКД GaAs/Al$_x$Ga$_{1-x}$As від співвідношення a/b (суцільні лінії). Пунктирні лінії — енерґетичний спектр в еліптичній потенціяльній ямі з безмежними стінками.

З рисунка видно таке. Енерґії всіх парних та непарних станів електрона в безмежно глибокій потенціяльній ямі знаходяться вище за відповідні енерґії в ЕКД з скінченним потенціяльним бар'єром V на межі поділу середовищ, оскільки розмірне квантування спектра квазічастинки в наносистемі з непроникними стінками проявляється сильніше. При співвідношенні $a/b \approx 1$ відмінність у величинах відповідних енерґій електрона в безмежній та скінченній потенціяльних ямах для розгляданої наносистеми не перевищує 10%. Збільшення співвідношення a/b приводить до значного зростання цієї поправки. Отже, для квантових дротів із малим ексцентриситетом при дослідженні глибоких електронних енерґетичних рівнів можливе застосування моделі безмежно глибокої потенціяльної ями, але збільшення енерґій квантових станів за рахунок зменшення розмірів квантового дроту чи його ексцентриситету приводить до значних похибок в енерґетичному спектрі. У такому разі необхідно використовувати модель еліптичної потенціяльної ями скінченної глибини.

C. Еліптична нанотрубка GaAs з непроникними стінками.

Еліптична нанотрубка обмежена внутрішнім та зовнішнім еліптичними циліндрами з відповідними півосями a_0, b_0, a_1, b_1. Оскільки обидва циліндри характеризуються однаковою величиною фокусної відстані f, то $b_0 = \sqrt{a_0^2 - f^2}$ і $b_1 = \sqrt{a_1^2 - f^2}$. Отже, геометрія еліптичної нанотрубки повністю визначається таким набором параметрів: f, a_0 та $\Delta a = a_1 - a_0$.

Для дослідження еволюції спектра розмірного квантування електрона в еліптичній нанотрубці при зміні її геометричної форми розгляньмо залежності енерґій від a_0 при сталих f і Δa та від f при сталих a_0 і Δa.

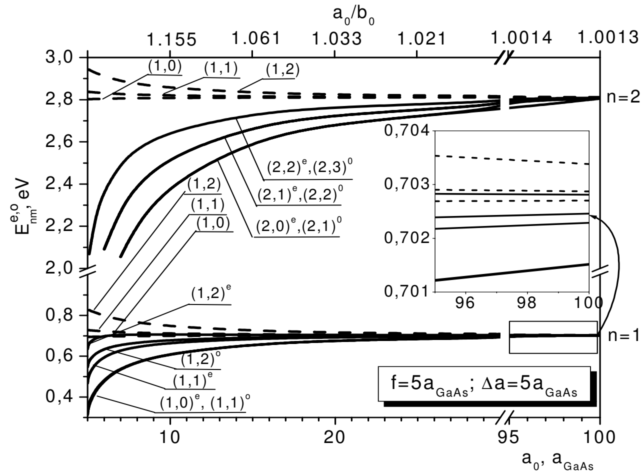


Рис. 4. Залежність енерґетичного спектра електрона в ЕНН (суцільні лінії) та циліндричній нанотрубці (штрихові лінії) від величини a_0 при постійній товщині $\Delta a = 5a_{\mathrm{GaAs}}$.

На рис. 4 показано залежність енерґетичного спектра електрона в нанотрубці від a_0 при $f = 5a_{\mathrm{GaAs}}$ і $\Delta a = 5a_{\mathrm{GaAs}}$(суцільні лінії). Для порівняння штриховими лініями наведено електронний спектр у відповідній нанотрубці кругового перерізу з внутрішнім радіусом a_0 та товщиною $\Delta a = 5a_{\mathrm{GaAs}}$. Для наочности в додатку 1 показано схематичні зображення поперечних перетинів серії нанотрубок з $f = 5a_{\mathrm{GaAs}}, \Delta a = 5a_{\mathrm{GaAs}}$ та a_0=5, 5.5, 6, 7, 15, 20 a_{GaAs}.

З рис. 4 видно, що у випадку $a_0 \to f$ ($b_0 \to 0$) нанотрубка вироджується в суцільний еліптичний квантовий дріт (додаток 1а) і електронний енерґетичний спектр нанотрубки прямує до спектра у відповідному суцільному квантовому дроті. Збільшення величини a_0 при f = const приводить до швидкого виродження ЕНН в нанотрубку кругового перерізу (додаток 1 г,д,е), у результаті цього енерґії парних та непарних станів, отриманих за формулами (17, 18), зближаються між собою і наближаються до значень енерґій у циліндричній нанотрубці. Подальше збільшення величини a_0 спричиняє виродження енерґій за квантовим числом m, і отримуємо енерґетичний спектр електрона в плоскій напівпровідниковій плівці товщиною Δa, який характеризується одним квантовим числом n.

При $a_0 = 100a_{\mathrm{GaAs}}$, коли еліптичність квантового дроту є дуже малою ($a_0/b_0 = 1.0013$), зсув енерґетичних рівнів циліндричної нанотрубки щодо відповідних рівнів в ЕНН перевищує 1 меВ навіть для станів з $n = 1$ (див. вставку на рис. 4), тобто дорівнює величині, яку ще можна встановити експериментально. Отже, за зміщенням енерґетичних рівнів можна оцінити величину еліптичности квантового дроту, а значить, і величину одновісного тиску, що призводить до цієї деформації.

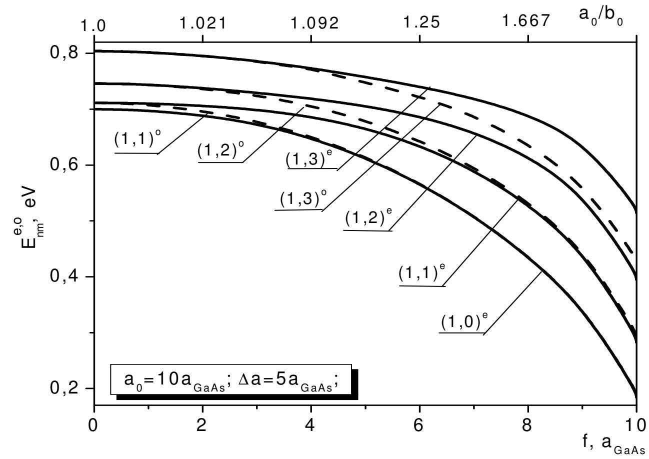


Рис. 5. Залежність енерґетичного спектра електрона в нанотрубці від величини фокусної відстані еліптичних циліндрів, що обмежують ЕНН GaAs. Суцільні лінії — парні стани, штрихові — непарні.

На рис. 4 також видно, що енерґії парних станів $(n, m)^e$ близькі або навіть збігаються з енерґіями непарних станів $(n, m + 1)^o$. Таку поведінку спектра можна зрозуміти, проаналізувавши рис. 5.

На рис. 5 показано залежність енерґетичного спектра електрона в нанотрубці від f при $a_0 = 10a_{\mathrm{GaAs}}$ і $\Delta a = 5a_{\mathrm{GaAs}}$ (серію перерізу нанотрубок з різними величинами f наведено в додатку 2). З рис. 5 видно, що при $f = 0$ (нанотрубка кругового перерізу) енерґії парних та непарних станів збігаються. Зі збільшенням величини фокусної відстані всі енерґетичні рівні зміщуються в ділянку менших енерґій, що пояснюється зменшенням розмірного квантування, оскільки, як видно з додатка 2, зростає величина Δb. Енерґії непарних станів спадають швидше і наближаються до сусідніх парних станів з меншим на одиницю значенням квантового числа m.

У граничному випадку $f = a_0$ (додаток 2е) ЕНН вироджується в еліптичний квантовий дріт з півосями $a_1 = a_0 + \Delta a$, $b_1 = (a_1^2 - f^2)^{1/2}$. При цьому енерґетичні рівні парних станів знаходяться нижче за відповідні рівні непарних станів, так як це і повинно бути для еліптичного квантового дроту (рис. 2а). Різниця між енерґіями відповідних парних та непарних станів буде тим менша, чим ближчим до кола буде еліпс з півосями a_1 і b_1.

Спектри електронів у ЕКД та ЕНН отримані при величині поздовжнього квазіімпульсу $k_z = 0$. При $k_z \neq 0$, внаслідок вільного руху електрона вздовж квантового дроту, одержуємо відповідні енерґетичні зони. Аналогічні розрахунки можна виконати і для дірок, що дасть змогу оцінити енерґії міжзонних переходів. Таких розрахунків не виконували, оскільки авторам на сьогодні не відомі експериментальні дані, з якими можна зіставити результати теорії. Обмеживши рух електрона вздовж осі Oz плоскими непроникними межами, з отриманих результатів можна знайти дискретний спектр електрона в плоских еліптичних квантових точках та еліптичних квантових кільцях, адитивно додавши енерґію додаткового поздовжнього квантування.

IV. ВИСНОВКИ

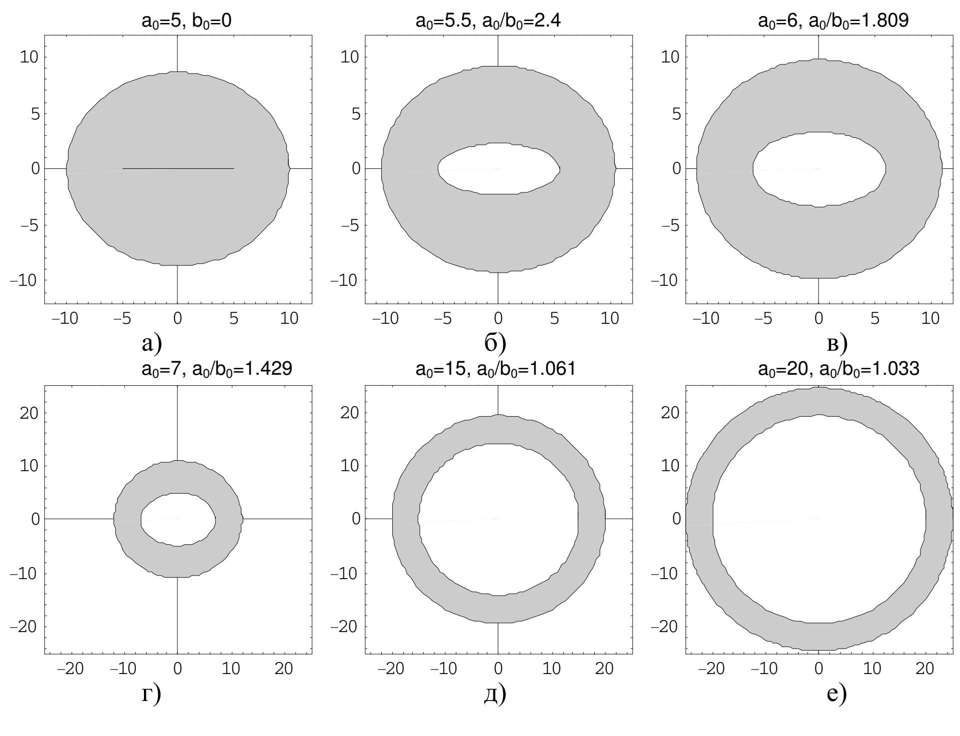
В еліптичній системі координат є точні розв'язки рівняння Шредінґера для електрона в еліптичному квантовому дроті та еліптичній нанотрубці з непроникними стінками.

Енергетичний спектр електрона складається із серій енерґетичних рівнів, що відповідають парним та непарним станам електрона. Навіть незначна еліптичність квантового дроту та нанотрубки помітно впливає на енерґетичний спектр квазічастинок у ній. Це створює можливість визначити величину одновісного тиску за зміщенням енерґетичних рівнів квазічастинок.

Наближений розрахунок енерґетичного спектра квазічастинки в ЕКД зі скінченною глибиною потенціяльної ями методом розділення змінних в еліптичних координатах можна використовувати при $a/b < 2$. При більших значеннях ексцентриситету цей метод дає занижені значення енерґій. Використовуючи точні розв'язки в моделі безмежно глибокої потенціяльної ями, можна отримати лише грубі оцінки величин енерґій для найнижчих електронних енерґетичних рівнів в ЕКД GaAs/Al$_x$Ga$_{1-x}$As.

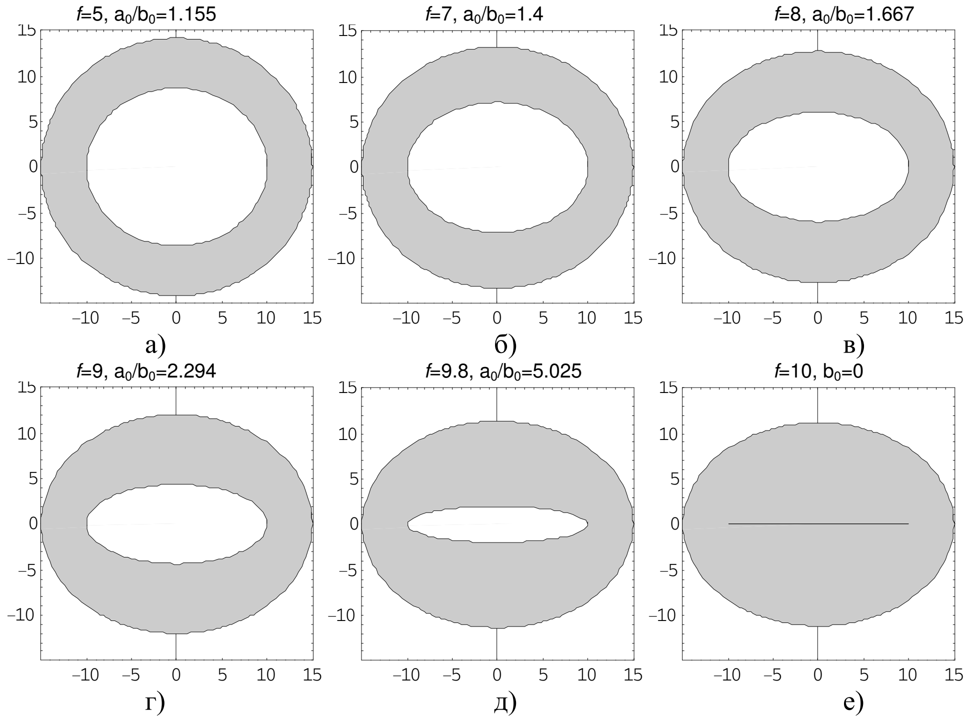
Додаток 1

Геометричний вигляд серії нанотрубок з $f = 5a_{\mathrm{GaAs}}$, $\Delta a = 5a_{\mathrm{GaAs}}$ та a_0=5, 5.5, 6, 7, 15, 20 a_{GaAs}.



Додаток 2

Геометричний вигляд серії нанотрубок з $a_0 = 10a_{\mathrm{GaAs}}$, $\Delta a = 5a_{\mathrm{GaAs}}$ та f=5, 7, 8, 9, 9.8, 10 a_{GaAs}.



[1] М. В. Ткач, *Спектри і взаємодія квазічастинок у наногетеросистемах* (Рута, Чернівці, 2003).
[2] J. Hu, Y. Bando, Z. Liu, T. Sekiguchi, D. Golberg, J. Zhan, J. Am. Chem. Soc. **125**, 11306 (2003).
[3] P. Mohan, J. Motohisa, T. Fukui, Appl. Phys. Lett. **88**, 133105 (2006).
[4] P. Mohan, J. Motohisa, T. Fukui, Appl. Phys. Lett. **88**, 013110 (2006).
[5] J. Noborisaka, J. Motohisa, S. Hara, T. Fukui, Appl. Phys. Lett. **87**, 093109 (2005).
[6] D. F. Urban, J. Burki, A. I. Yanson, I. K. Yanson, C. A. Stafford, J. M. van Ruitenbeek, H. Grabert, Solid State Commun. **131**, 609 (2004).
[7] I. M. Bejenari, V. G. Kantser, M. Myronov, O. A. Mironov, D. R. Leadley, Semicond. Sci. Technol. **19**, 106 (2004).
[8] V. Seleznev, H. Yamaguchi, Y. Hirayama, V. Prinz, Jpn. J. Appl. Phys. **42**, L791 (2003).
[9] G. Cantele, D. Ninno, G. Iadonisi, J. Phys.: Cond. Matt. **12**, 9019 (2000).
[10] M. van den Broek, F. M. Peeters, Physica E **11**, 345 (2001).
[11] V. A. Holovatsky, O. M. Voitsekhivska, M. J. Mikhalyova, M. M. Tkach, Condens. Matter. Phys. **3**, 863 (2000).
[12] А. Б. Мигдал, *Качественные методы в квантовой теории* (Наука, Москва, 1975).
[13] L. C. Lew Yan Voon, C. Galeriu, M. Willatzen, Physica E **18**, 547 (2003).
[14] M. Abramowitz, I. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions* (New York, Dover Publications, 1974).
[15] J. C. Gutierrez-Vega, S. Chavez-Cerda, A. Meneses-Nava, R. M. Rodriguez-Dagnino, *Theory and numerical analysis of the Mathieu functions* (Monterrey, NL, Mexico, 2003).

ELECTRON ENERGY SPECTRUM IN ELLIPTIC QUANTUM WIRE AND ELLIPTIC NANOTUBE

V. A. Holovatsky, V. I. Gutsul
Chernivtsi National Univercity, 2 Kotsubynsky St., Chernivtsi, UA–58012, Ukraine
E-mail: theorphys@chnu.cv.ua

Whithin the effective mass approximation, the electron energy spectrum in elliptic quantum wire (EQW) and elliptic semiconductor nanotube (ESN) is investigated. The exact electron energy spectrum in EQW and ESN GaAs with hard walls and approximate solution of the Shrödinger equation at the finite height of the potential barrier in EQW GaAs/$Al_xGa_{1-x}As$ are obtained. It is shown that the ellipticity of a quantum wire and a nanotube leads to the breaking of the degeneration quasiparticle energy spectrum. The dependencies of the energy of odd and even electron states on the ratio semiaxes have a nonmonotonous character. In the limited case of the degeneracy of elliptic quantum wires and elliptic nanotubes into circle ones the quasiparticle energy spectrum coincides with the corresponding quasiparticle spectrum in cylindrical nanosystems.