

О.М. Маханець, В.І. Гуцул, Н.Р. Цюпак

Вплив магнітного поля на енергетичний спектр електрона у складній циліндричній напівпровідниковій нанотрубці

*Чернівецький національний університет імені Ю. Федьковича,
58012 вул. Коцюбинського, 2, Чернівці, Україна, e-mail: ktf@chnu.edu.ua*

У наближенні ефективних мас та прямокутних потенціалів побудовано теорію енергетичного спектра та хвильових функцій електрона у складній циліндричній напівпровідниковій ($GaAs / Al_xGa_{1-x}As$) нанотрубці, розташованій у зовнішньому однорідному магнітному полі. Досліджено залежності енергетичного спектра від геометричних характеристик нанотрубки та величини індукції магнітного поля.

Ключові слова: напівпровідникова нанотрубка, магнітне поле, електрон, енергетичний спектр.

Стаття поступила до редакції 06.07.2012; прийнята до друку 15.12.2012.

Вступ

Сучасні теоретичні та експериментальні дослідження різноманітних наногетеросистем відіграють провідну роль у фізиці напівпровідників. Це зумовлено новими фізичними властивостями наноструктур та перспективами їх практичного використання 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 [1].

Інтенсивний розвиток нанотехнологій дав можливість створювати нові наносистеми з чіткими геометричними формами. Зокрема, експериментаторами вже створені прості (з однією квантовою ямою для електрона) [2, 3] та складні (багатоямні) кількшарові [4, 5] напівпровідникові нанотрубки. Для таких наносистем у роботах [6 - 8] була побудована теорія енергетичного спектра електронів, дірок, фононів та взаємодії цих квазічастинок між собою, яка досягла не тільки якісного, але й кількісного узгодження з експериментальними даними.

Значний вплив на спектри квазічастинок чинять зовнішні поля, зокрема, і постійне магнітне поле, в яке можуть бути поміщені наноструктури. При накладанні зовнішнього магнітного поля енергетичний спектр електронів у нанотрубці тепер формуватиметься не тільки за рахунок просторового обмеження носіїв заряду, але й внаслідок магнітного квантування Ландау. Врахування обох чинників приводить до нових і цікавих особливостей в

електронному енергетичному спектрі та його залежності від геометричних параметрів наносистеми і величини індукції магнітного поля.

Зауважимо, що для простих напівпровідникових квантових дротин циліндричної форми питання впливу магнітного поля на енергетичні спектри квазічастинок вивчене досить детально [9 - 10]. Однак, наскільки нам відомо, теоретичних робіт, що стосуються складних циліндричних нанотрубок, поміщених у магнітне поле, немає.

Тому метою даної роботи є побудова теорії енергетичного спектра та хвильових функцій електрона у складній циліндричній нанотрубці на основі напівпровідників $GaAs / Al_xGa_{1-x}As$, що розташована в зовнішньому однорідному магнітному полі з індукцією \vec{B} . При цьому буде досліджено залежність розмірно-квантованих енергетичних електронних рівнів від геометричних параметрів нанотрубки та величини індукції магнітного поля.

I. Теорія спектра і хвильових функцій електрона у складній циліндричній напівпровідниковій нанотрубці, яка розташована в постійному магнітному полі

У роботі досліджується наносистема, що є складною циліндричною напівпровідниковою нанотрубкою. Вона складається із квантового дроту (r_0) (середовище "0"), тонкого напівпровідникового

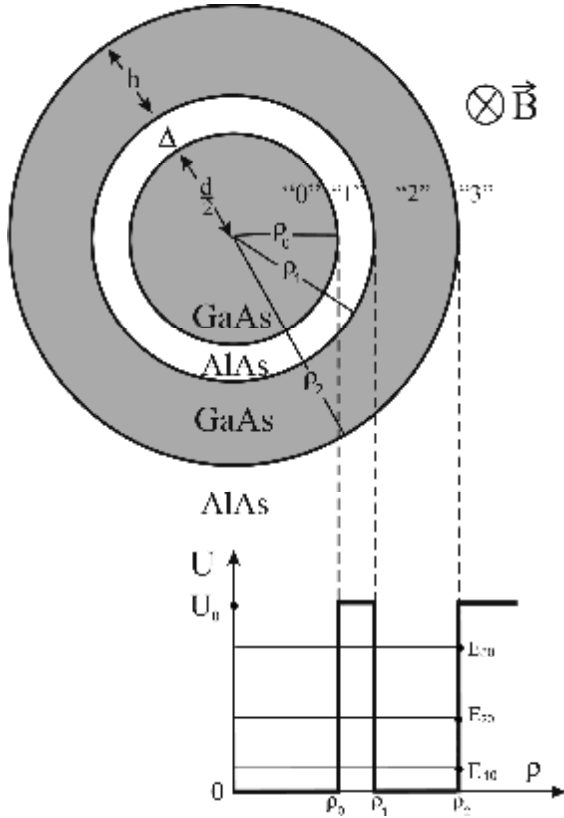


Рис. 1. Геометрична та енергетична схеми складної циліндричної нанотрубки.

шару – бар'єру (Δ) ("1") та нанотрубки (h) ("2") у зовнішньому середовищі ("3") (рис.1). Дана наноструктура розташована в постійному магнітному полі, вектор індукції (\vec{B}) якого направлений уздовж її аксіальної осі.

Оскільки постійні ґраток (a_0, a_1) та діелектричні проникності (ϵ_0, ϵ_1) складових наносистеми слабо відрізняються між собою, а самі розміри наносистеми такі, що $r_0, \Delta, h > a_0(a_1)$, то для розрахунку енергетичного спектра електрона можна використати наближення ефективних мас (m) та прямокутних потенціалів (U). Отже ефективні маси та потенціальні енергії електрона вважаються відомими у всіх областях складної нанотрубки, і в циліндричній системі координат з віссю OZ уздовж аксіальної осі наносистеми визначаються так

$$m(r) = \begin{cases} m_0 = m_2 \\ m_1 = m_3 \end{cases},$$

$$U(r) = \begin{cases} V_0 = V_2 = 0, & 0 \leq r \leq r_0, \quad r_1 \leq r \leq r_2 \\ V_1 = V_3 = U_0, & r_0 \leq r \leq r_1, \quad r > r_2 \end{cases}, \quad (1)$$

Гамільтоніан електрона у кожній із областей складної нанотрубки має вигляд

$$\hat{H}_j(\vec{r}) = \frac{1}{2m_j} \left(\vec{p} - q\vec{A}(\vec{r}) \right)^2 + V_j, \quad (j = 0, 1, 2, 3) \quad (2)$$

де q – заряд електрона, $\vec{A}(\vec{r})$ – векторний потенціал магнітного поля, який у даному випадку доцільно записати у вигляді симетричної калібрівки

$$\vec{A}(\vec{r}) = \frac{1}{2} [\vec{B} \times \vec{r}]. \quad (3)$$

З урахуванням (3), гамільтоніан (2) у циліндричній системі координат набуває вигляду:

$$\hat{H}_j(\vec{r}) = \frac{1}{2m_j} \left[-\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial f^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + i\hbar q B \frac{\partial}{\partial f} + \frac{q^2 B^2 r^2}{4} \right] + V_j \quad (j = 0, 1, 2, 3), \quad (4)$$

Розв'язок стаціонарного рівняння Шредінґера

$$\hat{H}_j(r, f, z) \Psi^{(j)}(r, f, z) = E \Psi^{(j)}(r, f, z), \quad (j = 0, 1, 2, 3), \quad (5)$$

доцільно шукати у вигляді

$$\Psi_{mk}^{(j)}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{2pL}} R_{mk}^{(j)}(r) e^{ikz} e^{imf}, \quad (j = 0, 1, 2, 3), \quad (6)$$

де k – аксіальний квазіімпульс; $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ – магнітне квантове число; L – величина ефективної області руху електрона вздовж аксіальної осі нанотрубки.

Підстановка (6) у (5) дає можливість відділити змінні та отримати рівняння для радіальної хвильової функції

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_j} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{m^2}{r^2} - k^2 \right) + V_j^B(r) \right] R_{mk}^{(j)}(r) = E R_{mk}^{(j)}(r), \quad (j = 0, 1, 2, 3) \quad (7)$$

де

$$V_j^B(r) = V_j - \frac{\hbar q B}{2m_j} + \frac{q^2 B^2 r^2}{8m_j} \quad (8)$$

описує ефективний потенціал, в якому рухається електрон у магнітному полі.

Рівняння (7) розв'язується точно у всіх областях складної нанотрубки

$$\begin{aligned}
 R_{mk}^{(0)}(r) &= e^{-\frac{x(r)}{2}} \left[x(r) \right]^{\frac{|m|}{2}} A_{mk}^{(0)} L_k \left(b_k - \frac{|m|+1}{2}, |m|, x(r) \right), & 0 \leq r \leq r_0, \\
 R_{mk}^{(1)}(r) &= e^{-\frac{x(r)}{2}} \left[x(r) \right]^{\frac{|m|}{2}} \times \\
 &\times \left[A_{mk}^{(1)} U_k \left(\frac{|m|+1}{2} + g_k, |m|+1, x(r) \right) + B_{mk}^{(1)} L_k \left(-\frac{|m|+1}{2} - g_k, |m|, x(r) \right) \right], & r_0 \leq r \leq r_1, \\
 R_{mk}^{(2)}(r) &= e^{-\frac{x(r)}{2}} \left[x(r) \right]^{\frac{|m|}{2}} \times \\
 &\times \left[A_{mk}^{(2)} U_k \left(\frac{|m|+1}{2} - b_k, |m|+1, x(r) \right) + B_{mk}^{(2)} L_k \left(b_k - \frac{|m|+1}{2}, |m|, x(r) \right) \right], & r_1 \leq r \leq r_2, \\
 R_{mk}^{(3)}(r) &= e^{-\frac{x(r)}{2}} \left[x(r) \right]^{\frac{|m|}{2}} B_{mk}^{(3)} U_k \left(\frac{|m|+1}{2} + g_k, |m|+1, x(r) \right), & r \geq r_2.
 \end{aligned} \tag{9}$$

Тут

$$\begin{aligned}
 b_k &= \frac{m}{2} + \frac{1}{\hbar w_c^{(0)}} \left(E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right), \\
 g_k &= \frac{1}{\hbar w_c^{(1)}} \left(U_0 - E + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_1} \right) - \frac{m}{2}, \quad x(r) = \frac{qB}{2\hbar} r^2, \tag{10} \\
 w_c^{(0,1)} &= \frac{qB}{m_{(0,1)}} - \text{циклотронна частота, } L_k -
 \end{aligned}$$

узагальнений поліном Лагерра, U_k – конфлюентна гіпергеометрична функція.

Умови неперервності хвильових функцій та відповідних потоків густин ймовірностей на всіх трьох межах наносистеми ($r = r_0, r_1, r_2$)

$$\begin{cases} R_{mk}^{(j)}(r_j) = R_{mk}^{(j+1)}(r_j) \\ \left. \frac{1}{m_j} \frac{\partial R_{mk}^{(j)}(r)}{\partial r} \right|_{r=r_j} = \left. \frac{1}{m_{j+1}} \frac{\partial R_{mk}^{(j+1)}(r)}{\partial r} \right|_{r=r_j} \end{cases} \quad (j = 0, 1, 2) \tag{11}$$

разом з умовою нормування

$$\int_0^\infty |R_{mk}(r)|^2 r dr = 1 \tag{12}$$

визначають усі невідомі коефіцієнти $A_{mk}^{(j)}$, $B_{mk}^{(j)}$ ($j = 0, 1, 2, 3$), що входять у (9), а отже, і аналітичні вирази для хвильових функцій $\Psi_{n_{\Gamma}mk}^{(j)}(\mathbf{r})$ та дисперсійне рівняння, розв'язки якого нумеруються радіальними квантовими числами $n_{\Gamma} = 1, 2, \dots$ і

визначають спектр енергій ($E_{n_{\Gamma}m}(k)$) електрона.

II. Аналіз та обговорення результатів

Розрахунок енергетичних спектрів електрона $E_{n_{\Gamma}m}(k)$ виконувався для складної нанотрубки, основою якої є напівпровідники $GaAs / Al_xGa_{1-x}As$ з матеріальними параметрами: $m_0 = 0.063m_0$, $m_1 = (0.063 + 0.083x)m_0$, $U_0 = 0.57(1.155x + 0.37x^2)eB$ (m_0 – маса вільного електрона у вакуумі).

На рис. 2 зображено залежності енергій ($E_{n_{\Gamma}m}$) електрона від радіуса (r_0) внутрішньої дротини при $k = 0$, фіксованих товщинах нанотрубки $h = 4i$, шару – бар'єру $\Delta = 4a_{GaAs}$, концентрації $x = 0,4$ та різних значеннях індукції магнітного поля: $B = 0$ (рис. 2,а), $B = 10T\tilde{e}$ (рис. 2,б), $B = 20T\tilde{e}$ (рис. 2,в), $B = 30T\tilde{e}$ (рис. 2,г).

З рис. 2,а видно, що за відсутності магнітного поля та при $r_0 = 0$ у наносистемі є скінченне число енергетичних рівнів, які, природно, збігаються з рівнями електрона у простій нанотрубі товщиною h .

З появою квантової дротини та збільшенням її радіуса (r_0) у наносистемі з'являються нові електронні енергетичні рівні. Всі вони зміщуються в область менших енергій, утворюючи дві серії рівнів за магнітним квантовим числом m : $m = 0$, $m = \pm 1$.

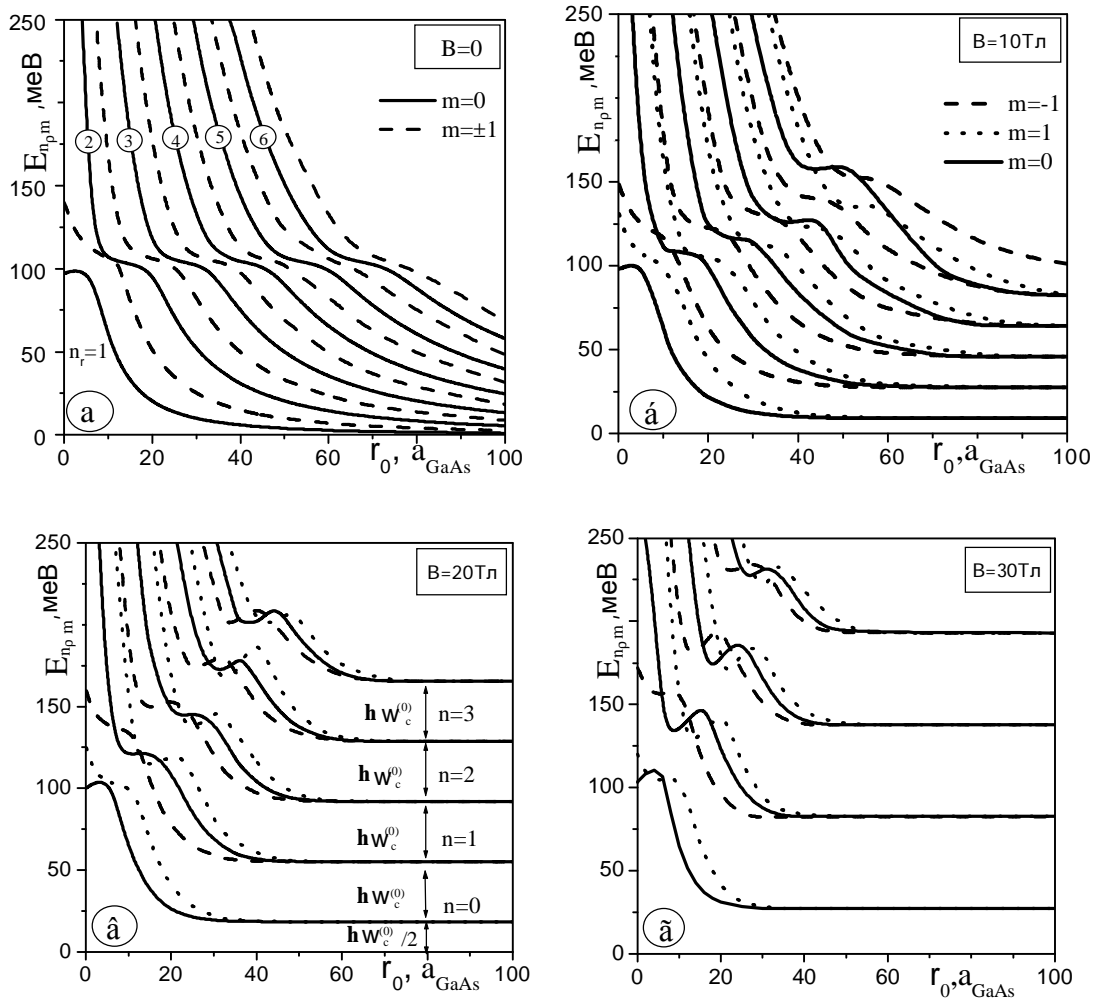


Рис. 2. Залежність енергії електрона $E_{n,r,m}$ від радіуса (r_0) внутрішньої дротини при фіксованих товщинах шару – бар’єру $\Delta = 4a_{GaAs}$ та нанотрубки $h = 4nm$, концентрації $x = 0,4$, $k = 0$ та при різних значеннях індукції магнітного поля B : $B = 0$ (рис. 2,а), $B = 10Tл$ (рис. 2,б), $B = 20Tл$ (рис. 2,в), $B = 30Tл$ (рис. 2,г).

Серії рівнів із $|m| \geq 2$ будуть цілком аналогічними до тих, що приведені на рис. 2,а, однак розташовуватимуться вони у більш високоенергетичній області спектра.

Електронні енергетичні рівні як для $m = 0$, так і для $m = \pm 1$ зі збільшенням r_0 еволюціонують так, що у їхніх спектрах з’являються антикросінги. Явище антикросінгу зумовлене ефектом розштовхування енергетичних рівнів внаслідок тунельного зв’язку між внутрішньою дротиною радіуса r_0 і нанотрубкою h через скінченний потенціальний бар’єр товщиною Δ . На тих ділянках залежностей $E_{n,r,m}$ від r_0 , де енергія електрона практично не змінюється, квазічастинка локалізується в просторі нанотрубки, товщиною h . Ті ж області зміни r_0 , де енергія електрона швидко зменшується зі

збільшенням r_0 , відповідають станам, перебуваючи в яких, електрон з близькою до одиниці ймовірністю знаходиться у внутрішній дротині.

Нові і цікаві особливості в енергетичному спектрі електрона з’являються при “вмиканні” однорідного магнітного поля з індукцією B (рис. 2,б – 2,г).

Якщо у випадку $B = 0$ (рис. 2,а) всі енергетичні рівні зі збільшенням r_0 зміщуються у бік менших енергій і наближаються до дна квантової ями (середовище $GaAs$), то при $B \neq 0$ це вже не так. Всі енергетичні рівні із різними квантовими числами n_r та m еволюціонують так, що зі збільшенням r_0 вони переходять у систему еквідистантних рівнів, енергія яких не залежить від r_0 (рис. 2,б – 2,г). Ці рівні, що нумеруються квантовим числом n ($n = 0, 1, 2, \dots$), природньо, 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 r_0 електрон виявляється локалізованим у внутрішній дротині, а сама вона при $r_0 \rightarrow \infty$ переходить у масивний кристал $GaAs$.

Зауважимо, що чим більша індукція магнітного поля, тим менші радіуси (r_0) внутрішньої дротини, за яких відповідні енергетичні рівні $E_{n_r m}$ переходять у рівні Ландау.

Як видно з рис. 2,б – 2,г, однорідне магнітне поле знімає двократне виродження електронного енергетичного спектра за магнітним квантовим числом m (крім $m=0$), яке має місце у випадку $B=0$. При цьому енергії електрона у станах $|n_r, 1\rangle$

і $|n_r, -1\rangle$ навіть якісно неоднаково залежать від радіуса (r_0) внутрішньої дротини. Так, наприклад, якщо енергія E_{11} зі збільшенням r_0 зменшується і наближається до енергії $\left(\hbar\omega_c^{(0)}/2\right)$ першого рівня Ландау ($n=0$), то енергія $E_{1,-1}$, хоча також зменшується, однак при великих r_0 прямує до енергії $\left(3\hbar\omega_c^{(0)}/2\right)$ другого рівня Ландау ($n=1$). Аналогічні міркування, проведені для енергетичних станів з іншими квантовими числами n_r і m приводять до асимптотичних виразів для енергій

$$E_{n_r, |m|} \Big|_{r_0 \rightarrow \infty} \rightarrow \hbar\omega_c^{(0)} \left(n_r - \frac{1}{2} \right), \quad E_{n_r, -|m|} \Big|_{r_0 \rightarrow \infty} \rightarrow \hbar\omega_c^{(0)} \left(n_r + |m| - \frac{1}{2} \right), \quad (13)$$

Як видно з рис. 2 "вмикання" магнітного поля при фіксованому значенні r_0 приводить до зсуву енергетичних рівнів $E_{n_r 0}$ в область більших енергій. Така поведінка енергетичного спектра також цілком зрозуміла. Адже збільшення величини B збільшує величину ефективного потенціалу (8), в якому рухається електрон, а отже, веде до зростання його енергії.

Залежність магнітного зсуву основного енергетичного рівня від радіуса (r_0) внутрішньої дротини при різних значеннях індукції (B) магнітного поля та фіксованих $\Delta = 4a_{GaAs}$, $h = 4nm$, $x = 0,4$, $k = 0$ зображено на рис. 3.

З рис. 3 видно, що магнітний зсув немонотонно залежить від r_0 , досягаючи певних мінімальних та максимальних значень. Так, наприклад, при $B = 40Tл$ (штрих-пунктирна крива на рис. 3) та $r_0 = 0$ (точка 1 на рис. 3) величина магнітного зсуву складає ~ 11 meV. При цьому електрон виявляється локалізованим у нанотрубці товщиною h . При наступному зростанні r_0 магнітний зсув зростає, оскільки збільшується величина ефективного потенціалу (8). Починаючи із значень $r_0 \sim 4 - 5a_{GaAs}$ (точка 2 на рис. 3), електрон зі все більшою ймовірністю проникає в область внутрішньої дротини, де його ефективний потенціал (8) менший. Це, в свою чергу, приводить до зменшення величини магнітного зсуву. Після того, як електрон вже з близькою до одиниці ймовірністю

локалізується у внутрішній дротині (точка 3 на рис. 3), магнітний зсув зі збільшенням r_0 лише зростає, виходячи на насичення при достатньо великих величинах радіуса внутрішньої дротини.

Нарешті зауважимо, що як показують дослідження магнітний зсув практично не залежить від концентрації x Al у сполучі $Al_x Ga_{1-x} As$.

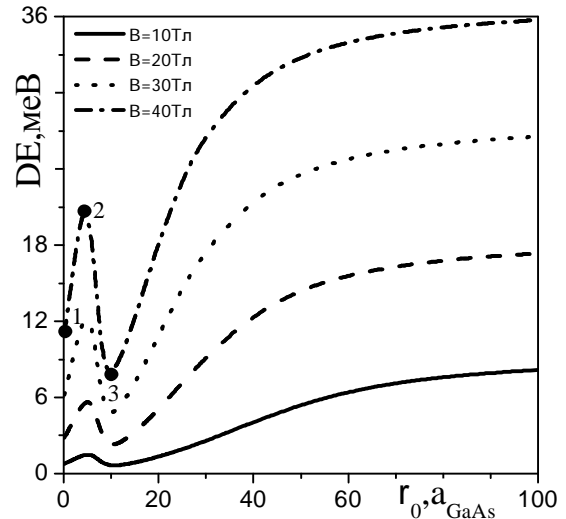


Рис. 3. Залежність магнітного зсуву (ΔE) основного енергетичного рівня електрона від радіуса (r_0) внутрішньої дротини при фіксованих товщинах шару – бар'єру $\Delta = 4a_{GaAs}$ та нанотрубки $h = 4nm$, концентрації $x = 0,4$, $k = 0$ та при різних значеннях індукції магнітного поля: $B = 10Tл$, $B = 20Tл$, $B = 30Tл$, $B = 40Tл$.

Висновки

У наближенні ефективних мас та прямокутних потенціалів побудовано теорію енергетичного спектра та хвильових функцій електрона у складній циліндричній напівпровідниковій нанотрубці в однорідному магнітному полі.

Показано, що магнітне поле знімає виродження енергетичного спектра електрона за магнітним квантовим числом m , а відповідні енергії $E_{n,r|m}$ та

$E_{n,r,-|m|}$ по-різному залежать від радіуса внутрішньої дротини.

"Вмикання" магнітного поля приводить до зміщення всіх енергетичних рівнів в область більших енергій, а величина магнітного зсуву немонотонно

залежить від товщини (r_0) внутрішньої дротини, досягаючи певних мінімальних та максимальних значень.

За достатньо великих значень r_0 та при $B \neq 0$ всі енергетичні рівні $E_{n,r,m}$ електрона переходять у систему еквідистантних рівнів Ландау, як і повинно бути з фізичних міркувань.

Маханець О.М. - доктор фізико-математичних наук, доцент, професор кафедри теоретичної фізики;
Гуцул В.І. - кандидат фізико-математичних наук, асистент кафедри теоретичної фізики;
Цюпак Н.Р. - аспірантка кафедри теоретичної фізики.

- [1] V.G. Dubrovskij, G.Je. Cyrilin, V.M. Ustinov. FTP, 43, 1585 (2009).
- [2] P. Mohan, J. Motohisa, T. Fukui. Appl. Phys. Lett. 88, 013110 (2006).
- [3] P. Mohan, J. Motohisa, T. Fukui. Appl. Phys. Lett. 88, 133105 (2006).
- [4] M. Heigoldt, J. Arbiol, D Spirkoska, J. M. Rebled, S. Conesa-Boj, G. Abstreiter, F. Peiro, J. R. Morantece, A. Fontcuberta i Morral. J. Mater. Chem. 19, 840 (2009).
- [5] A. Fontcuberta i Morral, D. Spirkoska, J. Arbiol, M. Heigoldt, J. R. Morante, G. Abstreiter. Small 4, 899 (2008).
- [6] M. Tkach, O. Makhanets, M. Dovganiuk, O. Voitsekhivska. Physica E 41, 1469 (2009).
- [7] O.M. Makhanets, V.I. Gutsul, N.R. Tsiupak, O.M. Voitsekhivska. Condensed Matter Physics 15(3), 33704:1 (2012).
- [8] O.M. Mahanec', N.R. Cjupak, V.I. Gucul. UFZh 57(10), 1060 (2012).
- [9] A. Balandin, S. Bandyopadhyay. Physical Review B 52(11), 8312 (1995).
- [10] Li. Gang, V. Spiros, V. Branis, K.K. Bajaj. J. Appl. Phys. 77(3), 1097 (1995).

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

Influence of Magnetic Field on Electron Energy Spectrum in Complicated Cylindrical Semiconductor Nanotube

Chernivtsi National University, 58012 Kotsiubynsky Str., 2, Chernivtsi, Ukraine, e-mail: ktf@chnu.edu.ua

The theory of energy spectrum and wave functions of electron in complicated cylindrical semiconductor ($GaAs / Al_xGa_{1-x}As$) nanotube placed into the outer homogeneous magnetic field is established within the approximation of effective masses and rectangular potentials. The dependences of energy spectrum on geometrical characteristics of nanotube and on the magnitude of magnetic field induction are investigated.