

Теория экситонного спектра массива удаленных друг от друга шестигранных нанотрубок

© Н.В. Ткач, А.М. Маханец, Н.Н. Довганюк

Черновицкий национальный университет им. Юрия Федьковича,
Черновцы, Украина

E-mail: ktf@chnu.edu.ua

(Поступила в Редакцию 17 ноября 2008 г.
В окончательной редакции 16 февраля 2009 г.)

В рамках эффективной массы и прямоугольных потенциалов предложена теория экситонного спектра отдельной сложной шестигранной нанотрубки в массиве шестигранных квантовых трубок, практически реализованном на основе InP, InAs.

Показано, что теоретически рассчитанный экситонный спектр не только по положению пиков в шкале энергий, но и по их интенсивности хорошо согласуется с экспериментальным спектром излучения массива достаточно удаленных друг от друга шестигранных нанотрубок.

PACS: 78.67.-n, 78.67.Ch

1. Введение

Экситонные спектры в полупроводниковых квантовых точках, проволоках и пленках изучаются уже давно, поэтому результаты теоретических работ с достаточно обоснованными моделями неплохо согласуются с экспериментальными данными [1–7].

Интенсивное развитие нанотехнологий дало возможность создать новые наносистемы с четкими геометрическими формами. В частности, в серии работ [8–12] авторы получили и исследовали спектры излучения массива шестигранных нанопроволок и нанотрубок. В работе [12] на основе простой модели низкоэнергетический пик фотолуминесценции был идентифицирован с основным экситонным состоянием, но другие особенности спектра не нашли теоретического объяснения.

Насколько нам известно, последовательной теории экситонов в полупроводниковых многослойных шестигранных нанотрубках еще нет. Основное затруднение, возникающее при построении последовательной теории экситонного спектра в такой системе, заключается в том, что необходимо сочетать аксиальную симметрию шестигранной формы нанотрубки и сферическую симметрию потенциала взаимодействия электрона и дырки в этой наносистеме. Целью настоящей работы и является построение одного из возможных теоретических подходов к решению задачи об экситонном спектре в сложных шестигранных нанотрубках на основе модели эффективных масс и прямоугольных потенциалов с использованием вариационного метода Бете.

Развитая здесь теория позволяет идентифицировать энергетическое положение обоих экспериментально выявленных пиков, а также объясняет соотношение их интенсивностей и дает возможность изучить эволюцию параметров экситонных спектров с изменением толщины шестигранной нанотрубки.

2. Теория экситонного спектра и интенсивностей квантовых переходов в отдельной шестигранной нанотрубке

Будем изучать экспериментально реализованную в работе [12] наногетеросистему, которая является массивом параллельных полупроводниковых шестигранных нанотрубок. Продольные размеры L и расстояния между нанотрубками L_1 считаются значительно большими, чем поперечный размер наибольшего из шестиугольников на рис. 1 ($L_1 \gg d + 2(h + \Delta)$). Элементы шестигранной наносистемы обозначены на рис. 1 цифрами: 0 — внутренняя среда, 1 — нанотрубка, 2 — внешняя трубка, 3 — внешняя среда. В предположении, что постоянные решеток и диэлектрические проницаемости ε элементов наносистемы слабо различаются между собой, для расчета спектров электрона и дырки используется модель эффективных масс $\mu^{e,h}$ и прямоугольных потенциалов $U^{e,h}$, которые считаются известными во всех областях наносистемы

$$\varepsilon(\mathbf{r}) = \varepsilon_k, \quad \mu^{(e,h)}(\mathbf{r}) = \mu_k^{(e,h)},$$

$$U^{(e,h)}(\mathbf{r}) = U_k^{(e,h)}, \quad k = 0, 1, 2, 3. \quad (1)$$

Здесь нижние индексы k соответствуют обозначениям областей наносистемы на рис. 1, $U_1^{(e,h)} = 0$, $\varepsilon_2 = \varepsilon_0$, $\mu_2^{(e,h)} = \mu_0^{(e,h)}$, $U_2^{(e,h)} = U_0^{(e,h)}$, $\varepsilon_3 = 1$, $\mu_3^{(e)} = m_0$, $U_3^{(h)} = \infty$, m_0 — масса электрона в вакууме.

Поскольку предполагается исследовать массив нанотрубок, в котором расстояние между ними значительно превышает их поперечные размеры, фактически предложена теория экситонного спектра отдельной шестигранной нанотрубки во внешней среде.

Для исследования экситонных состояний в одиночной полупроводниковой шестигранной нанотрубке, располо-

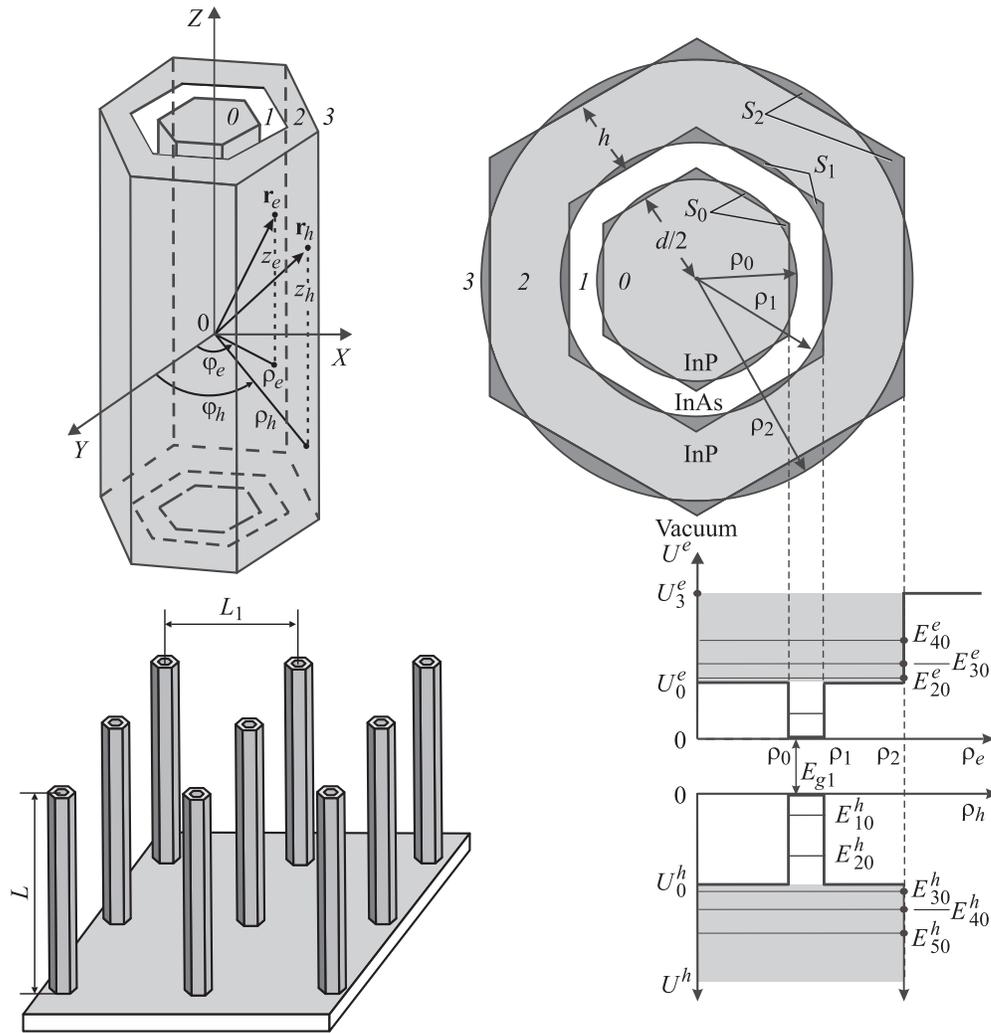


Рис. 1. Геометрические и энергетическая схемы наносистемы.

женной во внешней среде, необходимо решать стационарное уравнение Шредингера

$$\widehat{H}_{\text{ex}}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h)\Psi_{\text{ex}}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = E_{\text{ex}}\Psi_{\text{ex}}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) \quad (2)$$

с гамильтонианом

$$\widehat{H}_{\text{ex}}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = E_{g_1} + \widehat{H}_e(\mathbf{r}_e) + \widehat{H}_h(\mathbf{r}_h) + U(|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|), \quad (3)$$

где E_{g_1} — ширина запрещенной зоны материала квантовой нанотрубки,

$$\widehat{H}_i = -\frac{\hbar^2}{2} \left(\nabla_{\rho_i, \varphi_i} \frac{1}{\mu^i(\rho_i, \varphi_i)} \nabla_{\rho_i, \varphi_i} + \frac{1}{\mu^i(\rho_i, \varphi_i)} \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} \right) + U^i(\rho_i, \varphi_i) \quad (i = e, h) \quad (4)$$

— гамильтонианы невзаимодействующих между собой электрона и дырки,

$$U(|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|) = -\frac{e^2}{\varepsilon(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h)|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} \quad (5)$$

— потенциальная энергия взаимодействия электрона и дырки в среде с диэлектрической проницаемостью

$\varepsilon(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h)$, которая является сложной функцией, зависящей от пространственного расположения электрона и дырки в наногетеросистеме.

Уравнение Шредингера (2) с гамильтонианом (3) точно не решается из-за сложной зависимости потенциальной энергии взаимодействия электрона и дырки (5) и физических параметров μ^i , U^i этих квазичастиц (1) от геометрических параметров шестигранной трубки. Приближенное решение задачи будем выполнять в два этапа. Учитывая, что энергия взаимодействия между электроном и дыркой намного меньше, чем энергии их размерного квантования, сначала найдем последние для модели шестигранной трубки, а затем по теории возмущений учтем потенциал взаимодействия обеих квазичастиц (5).

Итак, в цилиндрической системе координат (рис. 1) будем решать стационарные уравнения Шредингера для невзаимодействующих между собой электрона и дырки, но с учетом размерного квантования

$$\widehat{H}_i\Psi_i(\rho_i, \varphi_i, z_i) = E_i\Psi_i(\rho_i, \varphi_i, z_i) \quad (i = e, h). \quad (6)$$

Поскольку эффективные массы μ^i и потенциальные энергии U^i в плоскости, перпендикулярной оси трубки, как функции переменных $\rho_i \varphi_i$ имеют симметрию шестиугольника, переменные в уравнениях (6) не разделяются, и они не решаются точно. Приближенное решение целесообразно искать вариационным методом Бете [13], выделяя в гамильтониане (6) основную часть так, чтобы в ней величины μ^i и U^i были функциями только переменных ρ_i (т.е. заменяя шестиугольники окружностями соответствующих радиусов ρ_0 , $\rho_1 = \rho_0 + \Delta$, $\rho_2 = \rho_0 + \Delta + h$), а возникающую разницу между массами $\mu^i(\rho_i, \varphi_i)$ и $\mu^i(\rho_i)$, а также потенциалами $U^i(\rho_i, \varphi_i)$ и $U^i(\rho_i)$ учитывая в гамильтониане возмущения. При этом радиус наименьшей окружности (ρ_0), согласно методу Бете, считается вариационным параметром.

Следовательно, гамильтониан \hat{H}_i теперь можно представить в виде

$$\hat{H}_i = \hat{H}_i^0 + \Delta \hat{H}_i, \quad (7)$$

где

$$\hat{H}_i^0 = -\frac{\hbar^2}{2} \left(\nabla_{\rho_i, \varphi_i} \frac{1}{\mu^i(\rho_i)} \nabla_{\rho_i, \varphi_i} + \frac{1}{\mu^i(\rho_i)} \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} \right) + U^i(\rho_i) \quad (i = e, h) \quad (8)$$

— основная часть гамильтониана, описывающая невзаимодействующие квазичастицы в цилиндрической нанотрубке, с эффективными массами $\mu^i(\rho_i)$ и потенциальными энергиями $U^i(\rho_i)$, которые теперь уже являются простыми функциями от переменных ρ_i

$$\mu^i(\rho_i) = \begin{cases} \mu_0^i, & 0 \leq \rho_i \leq \rho_0, \\ \mu_1^i, & \rho_0 \leq \rho_i \leq \rho_1, \\ \mu_2^i, & \rho_1 \leq \rho_i \leq \rho_2, \\ \mu_3^{(e)} = m_0, & \rho_2 \leq \rho_i < \infty, \end{cases}$$

$$U^i(\rho_i) = \begin{cases} U_0^i, & 0 \leq \rho_i \leq \rho_0, \\ 0, & \rho_0 \leq \rho_i \leq \rho_1, \\ U_0^i, & \rho_1 \leq \rho_i \leq \rho_2, \\ U_3^{(e)}, & \rho_2 \leq \rho_e < \infty, \\ \infty, & \rho_2 \leq \rho_h < \infty. \end{cases} \quad (9)$$

Поправка $\Delta \hat{H}_i$ к основному гамильтониану \hat{H}_i^0

$$\Delta \hat{H}_i = \frac{\hbar^2}{2} \left[\nabla_{\rho_i, \varphi_i} \left(\frac{1}{\mu^i(\rho_i)} - \frac{1}{\mu^i(\rho_i, \varphi_i)} \right) \nabla_{\rho_i, \varphi_i} - \left(\frac{1}{\mu^i(\rho_i)} - \frac{1}{\mu^i(\rho_i, \varphi_i)} \right) \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} \right] + U^i(\rho_i, \varphi_i) - U^i(\rho_i) \quad (10)$$

учитывает разницу между точным и аппроксимирующим гамильтонианами и дальше рассматривается как возмущение.

Теперь уравнение Шредингера с основным гамильтонианом (8) решается точно. Если волновые функции искать в виде

$$\Psi_{n_z i m_i}^{(0)(I,II)}(\mathbf{r}_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi L}} R_{n_z i m_i}^{(I,II)}(\rho_i) f_{n_z i}(z_i) e^{i m_i \varphi_i}, \quad (11)$$

то вид радиальных функций $R_{n_z i m_i}^{(I,II)}(\rho_i)$ зависит от величины энергии E_i . В случаях (I), когда $0 \leq E_i \leq U_0^i$, и (II), когда $U_0^i \leq E_i$,

$$R_{n_z i m_i}^{(I,II)}(\rho_i) = \begin{cases} A_{n_z i m_i}^{(0)\pm} \left\{ H_m^+ \left(\sqrt{\pm k_i^{(0)2} \rho_i} \right) + H_m^- \left(\sqrt{\pm k_i^{(0)2} \rho_i} \right) \right\}, & 0 \leq \rho_i \leq \rho_0, \\ A_{n_z i m_i}^{(1)\pm} J_{m_i}(k_i^{(1)} \rho_i) + B_{n_z i m_i}^{(1)\pm} N_{m_i}(k_i^{(1)} \rho_i), & \rho_0 \leq \rho_i \leq \rho_1, \\ A_{n_z i m_i}^{(2)\pm} H_m^+ \left(\sqrt{\pm k_i^{(2)2} \rho_i} \right) + B_{n_z i m_i}^{(2)\pm} H_m^- \left(\sqrt{\pm k_i^{(2)2} \rho_i} \right), & \rho_1 \leq \rho_i \leq \rho_2, \\ B_{n_z e m_e}^{(3)\pm} K_{m_e}(k_e^{(3)} \rho_i), \quad B_{n_z h m_h}^{(3)\pm} \equiv 0, & \rho_2 \leq \rho_i < \infty, \end{cases} \quad (12)$$

где

$$k_i^{(0)} = k_i^{(2)} = \sqrt{2\mu_0^i(U_0^i - E_i)/\hbar^2 + \pi^2 n_z^2 / L^2},$$

$$k_i^{(1)} = \sqrt{2\mu_1^i E_i / \hbar^2 - \pi^2 n_z^2 / L^2},$$

$$k_e^{(3)} = \sqrt{2\mu_0(U_3^e - E_e)/\hbar^2 + \pi^2 n_z^2 / L^2}, \quad (13)$$

J_m , N_m — функция Бесселя целого порядка, K_m — модифицированная функция Бесселя, H_m^+ , H_m^- — функции Ханкеля.

Фолновые функции продольного движения квазичастиц имеют вид

$$f_{n_z i}(z_i) = \begin{cases} \cos\left(\frac{\pi n_z i}{L} z_i\right), & n_z i = 1, 3, 5, \dots, \\ \sin\left(\frac{\pi n_z i}{L} z_i\right), & n_z i = 2, 4, 6, \dots \end{cases} \quad (14)$$

Условия непрерывности волновых функций и потоков плотности вероятности на всех трех границах наносистемы (при ρ , равном ρ_0, ρ_1, ρ_2) вместе с условием нормировки определяют все коэффициенты $A_{n_z i m_i}^{(j)\pm}$, $B_{n_z i m_i}^{(j)\pm}$ ($j = 0, 1, 2, 3$) (из-за громоздкости их явный вид не приводится), а следовательно, и аналитические выражения для волновых функций $\Psi_{n_{\rho i} n_z i m_i}^{(0)(I,II)}(\rho_0, \mathbf{r}_i)$, и дисперсионные

уравнения ($m_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$)

$$\begin{aligned} & \frac{k_i^{(0)} \left(J_{m_i-1}(\sqrt{\pm k_i^{(0)2} \rho_0}) + J_{m_i+1}(\sqrt{\pm k_i^{(0)2} \rho_0}) \right)}{\mu_0^i J_{m_i}(\sqrt{\pm k_i^{(0)2} \rho_0})} = \\ & = \frac{k_i^{(1)} (J_{m_i-1}(k_i^{(1)} \rho_0) - J_{m_i+1}(k_i^{(1)} \rho_0))}{\mu_1^i \left(J_{m_i}(k_i^{(1)} \rho_0) + \frac{B_{n_{z_i} m_i}^{(1) \pm}}{A_{n_{z_i} m_i}^{(1) \pm}} N_{m_i}(k_i^{(1)} \rho_0) \right)} \\ & + \frac{\frac{B_{n_{z_i} m_i}^{(1) \pm}}{A_{n_{z_i} m_i}^{(1) \pm}} k_i^{(1)} (N_{m_i-1}(k_i^{(1)} \rho_0) - N_{m_i+1}(k_i^{(1)} \rho_0))}{\mu_1^i \left(J_{m_i}(k_i^{(1)} \rho_0) + \frac{B_{n_{z_i} m_i}^{(1) \pm}}{A_{n_{z_i} m_i}^{(1) \pm}} N_{m_i}(k_i^{(1)} \rho_0) \right)}. \quad (15) \end{aligned}$$

При фиксированных квантовых числах n_{z_i}, m_i решения дисперсионных уравнений (15), которые нумеруются радиальными квантовыми числами $n_{\rho_i} = 1, 2, \dots$, определяют спектр энергий ($E_{n_{\rho_i} n_{z_i} m_i}^{(0)}$) квазичастиц в зависимости от вариационного параметра ρ_0 в нулевом (главном) приближении.

Согласно методу Бете, далее рассчитываются поправки первого порядка к энергиям обеих квазичастиц как функции вариационного параметра ρ_0

$$\begin{aligned} \Delta E_{N_i}(\rho_0) &= \int_{-L/2}^{L/2} \sum_{j=0}^2 \int_{S_j} \Psi_{N_i}^{(0)*}(\rho_0, \rho_i, z_i, \varphi_i) \\ &\times \Delta \hat{H}_i \Psi_{N_i}^{(0)}(\rho_0, \rho_i, z_i, \varphi_i) d\rho_i d\varphi_i dz_i. \quad (16) \end{aligned}$$

Чтобы избежать громоздких обозначений, здесь и далее совокупность трех квантовых чисел обозначается $N_i = \{n_{\rho_i}, n_{z_i}, m_i\}$.

Заметим, что в силу очевидных аналитических свойств гамильтониана возмущения (10) интегрирование по переменным ρ_i, φ_i в (16) осуществляется лишь по областям S_j , которые находятся между соответствующими шестиугольниками и аппроксимирующими их окружностями (области, выделенные наиболее темным тоном на рис. 1).

Теперь энергетические уровни в спектрах обеих взаимодействующих между собой квазичастиц (электрона и дырки) как функции вариационного параметра ρ_0 известны в первом приближении

$$E_{N_i}(\rho_0) = E_{N_i}^{(0)}(\rho_0) + \Delta E_{N_i}(\rho_0). \quad (17)$$

Здесь второе слагаемое (см. (16)) компенсирует ошибку, возникающую из-за аппроксимации в нулевом приближении шестигранной цилиндрической нанотрубки.

Найденные с учетом размерного квантования энергии электрона и дырки позволяют определить спектр экситонных энергий в отдельной шестигранной нанотрубке

$$E_{N_h}^{N_e} = E_{g_1} + \varepsilon_{N_h}^{N_e} + \delta E_{N_h}^{N_e}. \quad (18)$$

Физические параметры полупроводников, из которых состоит нанотрубка

	$\mu^{(e)}/m_0$	$\mu^{(h)}/m_0$	$a, \text{\AA}$	E_g, eV	ε_0	ε_∞	$U_0^{(e)}, \text{eV}$	$U_0^{(h)}, \text{eV}$
InAs	0.022	0.41	6.05	0.57	15.15	12.3	0.33	0.52
InP	0.077	0.6	5.87	1.42	12.5	9.61		

Здесь E_{g_1} — ширина запрещенной зоны материала нанотрубки;

$$\varepsilon_{N_h}^{N_e} = \varepsilon E_{N_h}^{N_e}(\bar{\rho}) = \min \{ E_{N_e}(\rho_0) + E_{N_e}(\rho_0) \}_{\rho_0=\bar{\rho}} \quad (19)$$

— энергетические уровни (17) не взаимодействующих между собой электрона и дырки, найденные, согласно методу Бете, из условия минимума энергии, реализуемого при $\rho_0 = \bar{\rho}$;

$$\delta E_{N_h}^{N_e} = -\frac{e^2}{\bar{\varepsilon}} \int d^3 \mathbf{r}_e \int d^3 \mathbf{r}_h \frac{|\Psi_{N_h}^{N_e}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h)|^2}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} \quad (20)$$

— энергия связи электрона и дырки в соответствующих состояниях, которые определены экситонными волновыми функциями

$$\Psi_{N_h}^{N_e}(\bar{\rho}, \mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = \Psi_{N_e}(\bar{\rho}, \rho_e, z_e, \varphi_e) \Psi_{N_h}(\bar{\rho}, \rho_h, z_h, \varphi_h). \quad (21)$$

В численных расчетах диэлектрическая проницаемость $\bar{\varepsilon}$ полагается равной ε_1 , если энергии электрона и дырки таковы, что обе частицы находятся в своих глубоких ямах, и $\bar{\varepsilon} = (\varepsilon_0 + \varepsilon_1)/2$, если дырка в глубокой яме, а электрон в мелкой или же обе частицы в мелких ямах. Поскольку разница диэлектрических постоянных контактирующих в наносистеме кристаллов несущественна (см. таблицу), это приближение не вносит значительной погрешности в величину экситонных энергий.

Подынтегральная функция в формуле (20) содержит полюсной множитель $|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|^{-1}$, наличие которого усложняет интегрирование по всему пространству в переменных $\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h$. Поэтому с использованием известного разложения по плоским волнам

$$\frac{1}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} = \frac{4\pi}{V} \sum_q \frac{1}{q^2} e^{iq(\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h)} \quad (22)$$

после точных, но громоздких математических преобразований выражение (20) сводится к виду

$$\begin{aligned} \Delta E_{N_h}^{N_e} &= -\frac{8\pi e^2}{\bar{\varepsilon}} \\ &\times \int_0^\infty dq \int_0^1 dx \frac{n_z^e n_z^h \mathcal{L}_{N_e}(q, x, \bar{\rho}) \mathcal{L}_{N_h}(q, x, \bar{\rho})}{[(2\pi n_z^e)^2 - (Lqx)^2] [(2\pi n_z^h)^2 - (Lqx)^2]} \\ &\times \left(\frac{\sin(Lqx/2)}{Lqx/2} \right)^2, \quad (23) \end{aligned}$$

где

$$\mathcal{L}_{N_i}(q, x, \bar{\rho}) = \int_0^{\infty} |R_{N_i}(\bar{\rho}, \rho_i)|^2 J_0(\sqrt{1-x^2}\rho_i) \rho_i d\rho_i \quad (i = e, h). \quad (24)$$

Дальнейшее интегрирование в формуле (23) аналитически выполнить не удастся, но, так как подынтегральная функция уже не содержит особенностей, значение интеграла находится численно без особых затруднений.

Теперь экситонный спектр и волновые функции определены во всех состояниях. Остается получить оценку интенсивностей оптических квантовых переходов в исследуемой наносистеме в соответствии с известной формулой [14]

$$I_{N_h^e}^N \sim \left| \int \Psi_{N_e}(\bar{\rho}, \rho, z, \varphi) \Psi_{N_h}(\bar{\rho}, \rho, z, \varphi) \rho d\rho dz d\varphi \right|^2. \quad (25)$$

Дальнейший расчет и анализ экситонного спектра, а также интенсивностей межзонных квантовых переходов выполнялись численными методами на примере описанного в работе [12] массива достаточно изолированных шестигранных нанотрубок InP/InAs/InP.

3. Анализ и обсуждение результатов

Чтобы изучить эволюцию экситонного спектра в зависимости от геометрических размеров рассмотренного в работе [12] массива нанотрубок InP/InAs/InP, по формуле (18) были рассчитаны все составляющие экситонной энергии. Физические параметры наносистемы (потенциальные энергии, эффективные массы квазичастиц, диэлектрические проницаемости) были взяты такими же, как и в [12] (см. таблицу).

Результаты расчета следующие. Зависимости от толщины Δ нанотрубки InAs энергий электрона $E_{n_p,10}^e$ и тяжелой дырки $E_{n_p,10}^h$ приведены на рис. 2, а энергий экситона $E_{n_p,10}^{e,h}$ и интенсивностей межзонных квантовых переходов $I_{n_p,10}^{e,h}$ — на рис. 3. Из рис. 2 видно, что при типичных в эксперименте толщинах нанотрубки (1–5 nm) и при фиксированных квантовых числах $m^{(e,h)} = 0$, $n_z^{(e,h)} = 1$ в области энергий самой глубокой квантовой ямы (InAs) существуют пять дырочных энергетических уровней с $n_p^h = 1, 2, 3, 4, 5$ и только один электронный с квантовым числом $n_p^e = 1$. Энергии всех этих уровней с увеличением Δ быстро уменьшаются, как и должно быть из физических соображений.

Возбужденные энергетические уровни электрона как легкой квазичастицы с $n_p^e \geq 2$ размещаются выше дна мелкой потенциальной ямы InP (затемненная область на рисунке). Естественно, что энергетические уровни электрона в этих состояниях слабо зависят от толщины Δ более глубокой ямы InAs, и антикроссинг не заметен. Поскольку эффективная масса дырки большая (см. таблицу), в этой же области энергий ее энергетические

уровни расположены достаточно плотно, поэтому (как видно из рис. 2, b) в их зависимостях от толщины Δ наблюдаются слабо выраженные антикроссинги, которые возникают вследствие „взаимодействия“ трех квантовых ям наногетеросистемы.

Заметим, что геометрические размеры экспериментально реализованного массива нанотрубок таковы, что абсолютная величина энергии связи экситона, рассчитанная по формуле (23), оказывается на два порядка меньше ($\delta E \sim 5-10$ meV), чем энергии электрона или дырки ($E_{n_p, n_z, m}^{(e,h)} \sim 100-500$ meV), поэтому и зависимость от Δ энергий экситонных состояний в низкоэнергетической части спектра в основном обусловлена особенностями поведения энергий электрона и дырки, что хорошо видно из рис. 3, a.

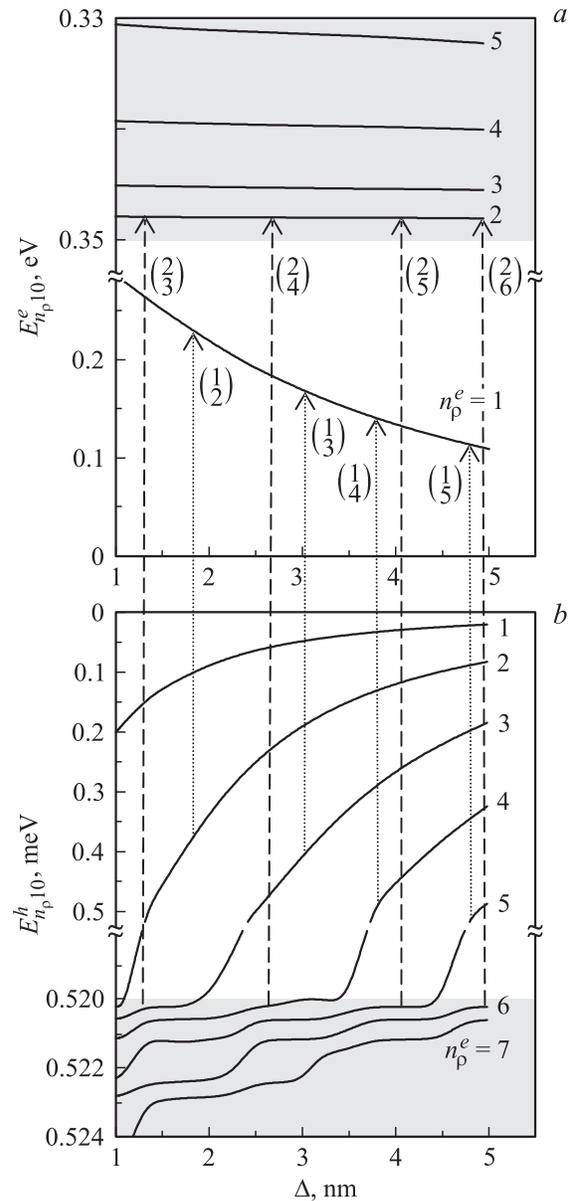


Рис. 2. Зависимости энергий электрона (a) и дырки (b) от толщины Δ нанотрубки InAs.

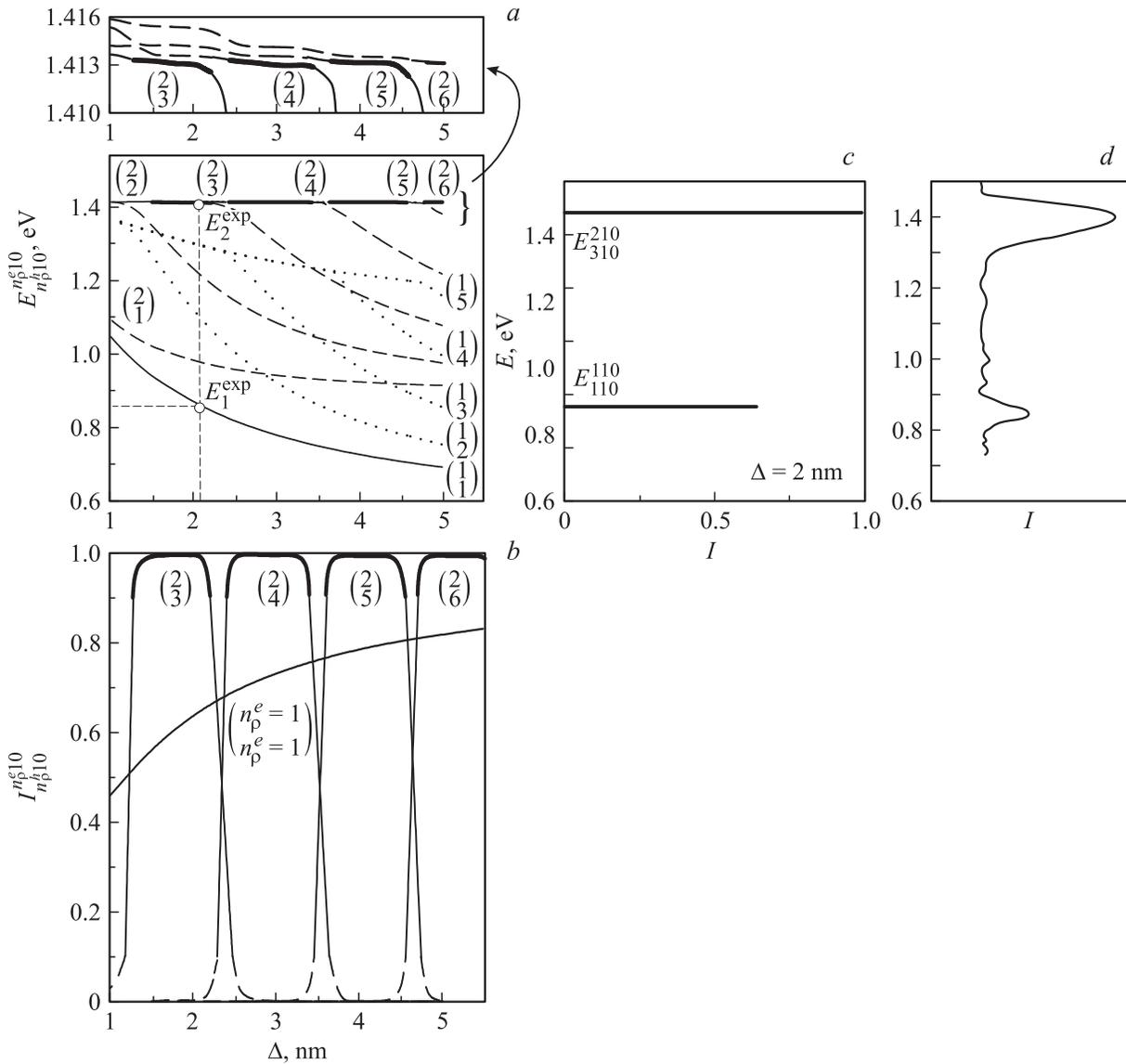


Рис. 3. Зависимости энергий электрона (*a*) и интенсивностей квантовых переходов (*b*) от толщины Δ нанотрубки InAs и зависимости интенсивностей квантовых переходов от энергии, рассчитанные теоретически при $\Delta = 2$ nm (*c*) и полученные в работе [12] экспериментально (*d*).

На рис. 3, *b* приведены зависимости интенсивностей $I_{n_p^{e10}, n_p^{h10}}^{e10}$ межзонных квантовых переходов от толщины Δ нанотрубки InAs, рассчитанные по формуле (25). Для ясности дальнейшего анализа на рис. 3, *a, b* энергии $E_{n_p^{e10}, n_p^{h10}}^{e10}$ и интенсивности $I_{n_p^{e10}, n_p^{h10}}^{e10}$ как функции толщины Δ в одних и тех же состояниях $\begin{pmatrix} n_p^e \\ n_p^h \end{pmatrix}$ изображены разными линиями в зависимости от величины интенсивности перехода. Если $I \geq 0.9$ — линия жирная, $0.9 > I \geq 0.1$ — тонкая, $0.1 > I \geq 10^{-3}$ — штриховая, $10^{-3} > I$ — пунктирная.

Из рис. 3, *a, b* видно, что с увеличением толщины Δ энергия основного экситонного состояния E_{110}^{110} только уменьшается, а интенсивность I_{110}^{110} только возрастает.

Поскольку при изменении толщины в границах $1 \leq \Delta \leq 5$ nm интенсивность основного состояния значительная и изменяется в пределах $0.5 \leq I_{110}^{110} \leq 0.8$, это состояние хорошо проявляется в эксперименте (рис. 3, *d*). Поведение I_{110}^{110} и E_{110}^{110} с изменением Δ понятно из физических соображений. Действительно, увеличение размера Δ более глубокой ямы увеличивает в ней локализацию электрона и дырки, вследствие чего увеличивается интеграл перекрытия, а значит, и интенсивность. Что же касается уменьшения энергии основного экситонного состояния с увеличением толщины слоя Δ , то оно происходит вследствие уменьшения энергий электрона и дырки при увеличении величины отрицательной энергии их взаимодействия.

В пределах изменения толщины нанотрубки ($1 \leq \Delta \leq 5 \text{ nm}$) кроме основного экситонного уровня ($n_{\rho}^e = 1$), которому, как уже отмечалось, отвечает квантовый переход значительной интенсивности, на рис. 3, *a* приведены еще две серии экситонных энергетических уровней: $(n_{\rho}^e = 1, n_{\rho}^h = 2, 3, 4, 5, 6)$ и $(n_{\rho}^e = 2, n_{\rho}^h = 1, 2, 3, 4, 5, 6)$. Переходы, которые реализуют первую из этих серий, происходят между электронными и дырочными состояниями разной симметрии, поэтому их волновые функции слабо перекрываются. Следовательно, интенсивности настолько малы ($I_{n_{\rho}^e=1, n_{\rho}^h=2,3,4,5,6} \leq 10^{-3}$), что в масштабе рис. 3, *b* они незаметны. Переходы, которые реализуют серию уровней $(n_{\rho}^e = 2, n_{\rho}^h = 1, 2, 3, 4, 5, 6)$, более разнообразны, поскольку в интервале толщин $1 \leq \Delta \leq 5 \text{ nm}$ электронный уровень с $n_{\rho}^e = 2$ постоянно находится выше дна мелкой ямы, а дырочные уровни с квантовыми числами $n_{\rho}^h = 1, 2, 3, 4, 5, 6$ по мере уменьшения толщины ямы Δ „выталкиваются“ из глубокой ямы в мелкую. Вследствие этого при уменьшении величины Δ , пока уровни дырки находятся в глубокой яме, симметрия электронных и дырочных волновых функций такова, что они слабо перекрываются, и поэтому интенсивности этих переходов малы ($I \sim 10^{-3} - 10^{-4}$). В масштабе рис. 3, *b* они незаметны.

При заметном уменьшении толщины Δ дырочные уровни последовательно „выталкиваются“ в мелкую яму. Тогда на определенных участках кривых $E_{n_{\rho}^h, 10}^h$ симметрия соответствующих им дырочных волновых функций становится близкой к симметрии волновых функций электрона в состоянии с $n_{\rho}^e = 2$. Это приводит к значительному перекрытию волновых функций обеих квазичастиц, а следовательно, и к большой интенсивности переходов. В частности, этим объясняется интенсивный высокоэнергетический пик, полученный экспериментально в работе [12] (рис. 3, *d*). Его максимуму при $\Delta = 2 \text{ nm}$, как видно из рис. 3, *a-c*, отвечает энергетический уровень E_{310}^{210} .

Как видно из рис. 3, если последовательно увеличивать толщину нанотрубки Δ от 1 до 5 nm, наращивая ее по одному монослою, то при определенном числе монослоев толщина трубки становится такой (в изучаемой системе $\Delta \approx 6a_{\text{лп}} \approx 3.6 \text{ nm}$), при которой $I_{n_{\rho}^h}^2 \approx I_{n_{\rho}^h+1}^2 \approx 0.5$. Тогда высокоэнергетический пик формируется уже не одним состоянием с $I \sim 1$, а двумя состояниями $|_{410}^{210}\rangle, |_{510}^{210}\rangle$ с близкими по величине энергиями $E_{410}^{210} \sim 1.4127 \text{ eV}$, $E_{510}^{210} \sim 1.4132 \text{ eV}$ и интенсивностями ~ 0.5 . Поскольку же пики излучения массивами квантовых трубок сильно размыты из-за взаимодействия экситонов с диссипативными подсистемами и разброса размеров квантовых трубок, следует ожидать того, что интенсивность высокоэнергетического пика с изменением толщины Δ будет изменяться слабо.

4. Выводы

1) В рамках модели эффективной массы и прямоугольных потенциалов для электрона и дырки с использованием вариационного метода Бете развита теория экситонного спектра и интенсивностей квантовых переходов для отдельной шестигранной нанотрубки во внешней среде. Результаты расчета энергий экситонного спектра и интенсивностей квантовых переходов, полученные на основе развитой теории, удовлетворительно согласуются с экспериментальным спектром и интенсивностями излучения в экситонной области энергий массива достаточно удаленных друг от друга шестигранных нанотрубок.

2) Показано, что с увеличением толщины нанотрубки основной пик излучения должен сдвигаться в длинноволновую область спектра, плавно увеличивая интенсивность. Высокоэнергетический пик излучения формируется либо одним, либо двумя близкими по энергиям состояниями, поэтому его положение в шкале энергий практически не изменяется, а интенсивность должна изменяться очень слабо.

Список литературы

- [1] Ж.И. Алфёров. ФТП **32**, 3 (1998).
- [2] G. Schlegel, J. Bohnenberger, I. Potapova, A. Mews. Phys. Rev. Lett. **88**, 137401 (2002).
- [3] F. Koberling, A. Mews, T. Basché. Phys. Rev. B **60**, 1921 (1999).
- [4] E.A. Muljarov, E.A. Zhukov, V.S. Dneprovskii, Y. Masumoto. Phys. Rev. B **62**, 7420 (2000).
- [5] A.F. Slachmuylders, B. Partoens, W. Magnus, F.M. Peeters. J. Phys.: Cond. Matter **18**, 3951 (2001).
- [6] M. Tkach, V. Holovatsky, O. Voitsekhivska, M. Mykhalyova, R. Fartushynsky. Phys. Status Solidi B **225**, 331 (2001).
- [7] Н.В. Ткач, В.А. Головацкий. ФТТ **43**, 350 (2001).
- [8] P. Mohan, J. Motohisa, T. Fukui. Appl. Phys. Lett. **88**, 013 110 (2006).
- [9] J. Noborisaka, J. Motohisa, T. Fukui. Appl. Phys. Lett. **86**, 2132 102 (2005).
- [10] P. Mohan, J. Motohisa, T. Fukui. Nanotechnology **16**, 2903 (2005).
- [11] J. Motohisa, J. Noborisaka, J. Takeda, M. Inari, T. Fukui. J. Cryst. Growth **272**, 180 (2004).
- [12] P. Mohan, J. Motohisa, T. Fukui. Appl. Phys. Lett. **88**, 133 105 (2006).
- [13] H.A. Bethe, E.E. Salpeter. Quantum mechanics of one- and two-electron atoms. Plenum Publ. Corp., N.Y. (1977). 382 p.
- [14] J.H. Davies. The physics of low-dimensional semiconductors: an introduction. Cambridge University Press, N.Y. (1998). 438 p.