

# Влияние адсорбированных молекул на спектр носителей в полупроводниковом нанопроводе

© В.А. Лыках<sup>+¶</sup>, Е.С. Сыркин<sup>+\*¶¶</sup>

<sup>+</sup> Национальный технический университет „Харьковский политехнический институт“, 61002 Харьков, Украина

<sup>\*</sup> Физико-технический институт низких температур, 61103 Харьков, Украина

(Получена 30 июня 2004 г. Принята к печати 8 октября 2004 г.)

Рассмотрен полупроводниковый квантовый нанопровод с адсорбированными органическими молекулами. Показано, что смещение уровней квантования определяется линейным (ориентацией молекулярных диполей и знака носителя) и нелинейным (деформацией молекулярного слоя) механизмами. В случае длинного нанопровода продольное квантование носителя описано самосогласованно нелинейным уравнением Шредингера с граничными условиями. Спектр определяется системой трансцендентных уравнений во всем диапазоне изменения нелинейного параметра взаимодействия. Показано, что влияние нелинейного взаимодействия усиливается для низших энергетических уровней, более тяжелого носителя и менее жесткого молекулярного слоя, возможна локализация носителя (увеличение сопротивления в эксперименте). Рассмотренные процессы могут быть существенны в хемосорбционных датчиках, чипах на основе нанотрубок и ДНК или других адсорбированных слоистых органических структур.

## 1. Введение

Создание новых мезоскопических объектов и перспективы их применений в нанoeлектронике вызывает интерес к исследованию фундаментальных свойств таких объектов. Оптические свойства и проводимость нанобъекта обусловлены набором энергетических квантовых уровней носителей [1]. Влияние структуры уровней на проводимость обнаружено в металлических нанопроводах [2] и в нанотрубках [3]. Квантовый нанопровод может быть обычным собственным полупроводником или углеродной нанотрубкой со средней длиной свободного пробега носителя, превышающей 10 мкм [4], что является важным фактором для обеспечения квантования вдоль оси нанопровода [5]. На физические свойства нанопровода существенное влияние оказывает та среда, которая находится с ним в контакте. Так, проводимость нанопровода чрезвычайно чувствительна к наличию адсорбированных слоев молекул NH<sub>3</sub> [6] и более сложных молекул пленок Ленгмюра–Блоджетт [7]. Рассматривается возможность создания чипов на основе нанотрубок и ДНК [8] или самоорганизующихся на поверхности слоистых органических структур [9].

Данной работой мы хотим привлечь внимание к тому факту, что при взаимодействии с мягкой (soft) средой, состоящей из органических молекул, изменяется фундаментальная характеристика нанопроводника — энергетический спектр носителя. Этот спектр оказывается чрезвычайно чувствительным к состоянию молекулярной подсистемы. Рассмотрено проявление взаимодействия нескомпенсированного заряда носителя, находящегося внутри квантового нанопровода, с соседней средой, обладающей собственными электрическими дипольными

моментами молекул и имеющей малую механическую жесткость. Получены нелинейные нелокальные уравнения, описывающие такую систему. С учетом деформации молекулярного слоя вычислены линейные и нелинейные вклады в сдвиг энергетических уровней носителя в зависимости от поляризации молекул. В случае длинного нанопровода и тонкого молекулярного слоя продольное квантование сведено к спектральной проблеме для нелинейного уравнения Шредингера. В полученном решении существенно проявляется нормировка волновой функции, что качественно отличает его от известного решения для нелинейных классических колебаний ограниченной цепочки [10]. Определение параметра нелинейности и энергии квантового уровня носителя через параметр его нелинейного взаимодействия с молекулами сведено к системе двух трансцендентных уравнений. Проведенный анализ указывает на возможность локализации движения носителя вдоль нанопровода. Физически рассмотренная ситуация является одним из возможных проявлений полярона, но сказывается специфика одномерности и ограниченности движения носителя.

## 2. Модель системы

Стационарное уравнение Шредингера для дополнительного носителя внутри нанопровода — собственного полупроводника может быть записано как [1,11]

$$-\frac{\hbar^2}{2m_{\text{ef}}}\Delta\psi + U(\mathbf{r})\psi = W\psi, \quad (1)$$

где  $\psi \equiv \psi(\mathbf{r})$  — волновая функция,  $m_{\text{ef}}$  — эффективная масса носителя,  $\Delta$  — оператор Лапласа,  $W$  — полная энергия,  $U(\mathbf{r})$  — потенциальная энергия,  $\mathbf{r}(x, y, z)$  — радиус-вектор частицы. В случае глубокой потенциальной ямы применяется аппроксимация прямоугольной

<sup>¶</sup> E-mail: lykah@ilt.kharkov.ua, lukah@kpi.kharkov.ua

<sup>¶¶</sup> E-mail: syrkin@ilt.kharkov.ua

ямь бесконечной глубины:  $U(\mathbf{r}) \equiv U_0(\mathbf{r})$ , где  $U_0(\mathbf{r}) = 0$  внутри и  $U_0(\mathbf{r}) = \infty$  снаружи полупроводника. При учете взаимодействия со средой  $U_{\text{int}}(\mathbf{r})$  потенциал имеет вид

$$U(\mathbf{r}) = U_0(\mathbf{r}) + U_{\text{int}}(\mathbf{r}). \quad (2)$$

Это взаимодействие может проявляться при адсорбции молекул с собственным электрическим дипольным моментом  $\mathbf{d}$  на поверхности квантового нанопровода. Просуммировав вклады всех диполей, получим потенциальную энергию взаимодействия  $U_{\text{int}} = e\phi$  в точке  $\mathbf{r}_0$  внутри нанопровода:

$$U_{\text{int}}^e(\mathbf{r}_0) = e \int d\mathbf{r}' n(\mathbf{r}') \mathbf{d}(\mathbf{r}') \frac{\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}'}{\varepsilon |\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}'|^3}, \quad (3)$$

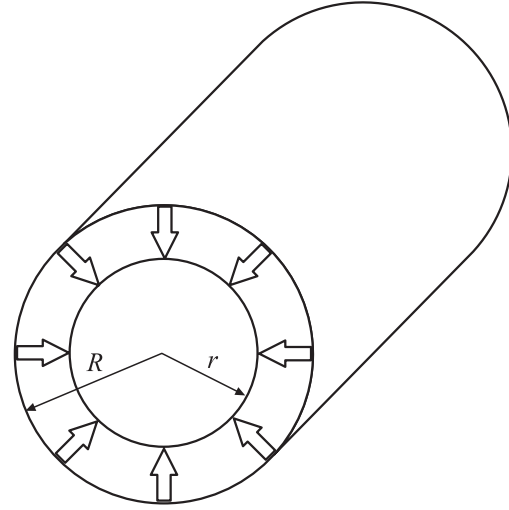
где  $n(\mathbf{r}')$  — объемная концентрация молекул,  $e$  — заряд носителя,  $\mathbf{d}(\mathbf{r}')$  — среднее значение дипольного момента в точке  $\mathbf{r}'$ ,  $\varepsilon$  — относительная диэлектрическая проницаемость среды. Потенциал взаимодействия может быть записан и в терминах вектора электрической поляризации  $\mathbf{P}$  [12] после замены  $n(\mathbf{r}') \mathbf{d}(\mathbf{r}') \rightarrow \mathbf{P}(\mathbf{r}')$  в уравнении (3). В свою очередь напряженность электрического поля  $\mathbf{E}(\mathbf{r}')$ , создаваемого носителем, определяет потенциальную энергию взаимодействия между носителем и индивидуальным молекулярным диполем:

$$U_{\text{int}}^d(\mathbf{r}') = -\mathbf{d}(\mathbf{r}') \int d\mathbf{r}_0 \frac{e|\psi(\mathbf{r}_0)|^2(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_0)}{\varepsilon |\mathbf{r}' - \mathbf{r}_0|^3}. \quad (4)$$

Необходимо дополнить систему (1)–(4) материальными уравнениями

$$n(\mathbf{r}') = n(\mathbf{E}(\mathbf{r}')); \quad \mathbf{d}(\mathbf{r}') = \mathbf{d}(\mathbf{E}(\mathbf{r}')). \quad (5)$$

Взаимодействие (3), (4) — нелокальное и существенно зависит от геометрии системы. Уравнение Шредингера (1) с потенциалами (2)–(4) преобразуется в нелинейное интегро-дифференциальное уравнение. Такие уравнения могут быть решены только методами аппроксимации [11]. Разумно предположить, что все размеры нанопровода и адсорбированного слоя намного меньше, чем его длина:  $r, R \ll 2L$ ; это условие выполняется в эксперименте (см. фото в [7]). Рассмотрим цилиндрическую геометрию системы (рис. 1), в которой при сделанном предположении координаты могут быть разделены:  $\psi(\mathbf{r}) = \psi(x)\psi_{\perp}(y, z)$  и  $W = W_x + W_{\perp}$  ( $x$  — координата вдоль оси провода). Возможно изменение  $\psi_{\perp}(y, z)$  и  $W_{\perp}$  за счет более легкого туннелирования носителя в область, занимаемую молекулами, по сравнению с вакуумом. Мы предполагаем также, что все изменения  $\psi(x)$  происходят на масштабах порядка  $L$ . Укажем вариант, в котором, по нашему мнению, предсказываемые эффекты могут проявиться наиболее ярко. Воздействие поля заряда максимально, если молекулы уже имеют электрический дипольный момент  $\mathbf{d}$ , а сама молекулярная система — мягкая. Однако для расчетов удобна система молекул, в которой только часть степеней свободы является мягкой. Этим требованиям



**Рис. 1.** Цилиндрический квантовый провод с адсорбированными полярными молекулами. Стрелки указывают направление вектора электрической поляризации.

удовлетворяют, например, жидкие кристаллы слоистого смектика А [13]. Считаем, что система молекул является жесткой в направлении вдоль поверхности нанопровода (плотная упаковка в слое длинных линейных молекул) и мягкой в направлении его радиуса (упругие молекулы или связи между слоями) (гл. 10 в [13]), так что оси молекул перпендикулярны слою (гл. 5 в [13], [9]). Электрический дипольный момент в этих молекулах возникает из-за наличия групп атомов, нарушающих зарядовую симметрию ([14], гл. 10 в [13], [9]). Будем для упрощения считать дипольный момент направленным вдоль оси молекул. Возможны как сегнето-, так и антисегнетоэлектрическое упорядочение диполей или разупорядоченная фаза [14]. Отличная от нуля поляризация может возникнуть вследствие флексоэлектрического эффекта (гл. 6 в [13]).

Покажем, что в приближении длинного нанопровода интегральные вклады можно свести к локальным. Запишем интеграл (3) в цилиндрических координатах. Пределы интегрирования  $r$  и  $R$  совпадают с внешними радиусами нанопровода и молекулярного слоя (рис. 1). В отсутствие заряда или в жесткой молекулярной системе концентрация в (3)–(5) постоянна,  $n(\mathbf{r}') = n_0$ , и вместе с  $\mathbf{d}$  может быть вынесена за знак интегрирования. Интегрирование по  $x$  (координате вдоль оси провода) уже на длинах  $x_0 - x' \geq 3R$  сводится к интегрированию в бесконечных пределах. Воспользовавшись [15], получим потенциальную энергию взаимодействия носителя заряда с дипольной подсистемой:

$$U_{\text{int}}^{e0} = -4\pi d n e (R - r). \quad (6)$$

Для аналитических оценок потенциальной энергии взаимодействия между носителем и индивидуальным молекулярным диполем заменяем в (4) пространственное интегрирование нахождение потока, чтобы не конкре-

тизировать вид радиального распределения, т.е. локальное значение радиальной составляющей напряженности заменяем значением для бесконечно длинной нити при локальном значении волновой функции:

$$U_{\text{int}}^d(x) = -\mathbf{E}\mathbf{d} = -\frac{2\tau d}{\varepsilon r'}, \quad (7)$$

$$\tau(x) = e|\psi(x)|^2 F_{\perp}, \quad F_{\perp} = \int |\psi(y, z)|^2 dy dz, \quad (8)$$

где  $\tau(x)$  — локальная линейная плотность заряда. Здесь учтено, что положительное направление дипольного момента  $\mathbf{d}$  совпадает с направлением к центру нанопровода (3). Погрешность приближения определим по теореме Остроградского–Гаусса „утечкой“ потока вектора напряженности через основания цилиндра, соосного нанопроводу. Оценить ее можно как произведение площади основания  $S \propto R^2$  на величину составляющей напряженности вдоль провода  $E_x \propto L^{-2}$ , т.е. погрешность при определении потока составляет величину  $(R/L)^2 \ll 1$ , в то время как поток через боковую поверхность цилиндра  $\sim 1$ .

Вид материального уравнения (5) для тонкого слоя молекул найдем, связав условие равновесного упругого смещения  $\delta = 2\tau d/k\varepsilon r'^2$  одиночного диполя при вытягивании (выталкивании) его в область (из области) более сильных полей  $F_i = -k\delta = -\nabla U_{\text{int}}^d$  с условием сохранения числа молекул

$$\pi(R_0^2 - r^2)n_0 = \pi(R_1^2 - r^2)n_1. \quad (9)$$

Здесь индексы 0 и 1 отвечают случаям отсутствия и наличия поля носителя соответственно, причем  $R_1 = R_0 + \delta$ . Тогда, подставляя в (6) выражение  $(R_1 - r)n_1$  из (9) вместо  $n(R - r)$  и разлагая его по  $\delta/R_0 \ll 1$ , получим потенциальную энергию носителя в самосогласованном поле упруго смещающихся диполей:

$$U_{\text{int}}^e = U_{\text{int}}^{e0} + U_{\text{int}}^{e1}, \quad (10)$$

$$U_{\text{int}}^{e1} = -G|\psi(x)|^2, \quad (11)$$

$$G = \frac{8\pi n_0 d^2 e^2 F_{\perp}}{k\varepsilon R^3} (R_0 - r). \quad (12)$$

В случае пленки, состоящей из нескольких слоев, объемная плотность свободной энергии в континуальном приближении [16] может быть записана для цилиндрического расположения слоев вдоль поверхности нанопровода как

$$w = \frac{1}{2} \left[ B(u_{r'})^2 + K_{11} \left( \frac{1}{r^2} u_{\phi\phi} + u_{xx} \right)^2 \right] - \mathbf{P}\mathbf{E}, \quad (13)$$

где  $u_{r'}$ ,  $u_{xx}$ ,  $u_{\phi\phi}$  — пространственные производные смещения слоя из равновесного положения,  $B$  и  $K_{11}$  — модули упругости при изменении межслоевого расстояния и изгибе слоя в жидком кристалле соответственно. Смещение вдоль слоя пренебрежимо мало [16], а  $K_{11}u_{xx}^2/B \sim \lambda^2 u^2/L^4 \ll u_{r'}^2 \sim u^2/r^2$ , где

$\lambda \sim 50 \text{ \AA}$ , т.е.  $\lambda \sim r \ll L$  (см. [16]). В осесимметричном случае  $u_{\phi\phi} = 0$ . Поэтому в дальнейшем член с  $K_{11}$  опускаем. Воспользуемся приемом, применяемым при получении барометрической формулы: прирост давления при увеличении радиуса слоя на  $\Delta r'$  есть  $\Delta p = -\nabla(EP)\Delta r'$ . Используя выражения для  $E$ ,  $P$  и связь одноосного давления с концентрацией  $n = n_0(1 + p/B)$ , получим после интегрирования

$$n(r') = n_0 \exp[r_d(r'^{-1} - R_1^{-1})], \quad (14)$$

$$r_d = 2\tau n_0 d/\varepsilon B, \quad (15)$$

где  $R_1$  — внешний радиус молекулярного слоя, деформированного электрическим полем носителя,  $|r_d|$  — эффективный радиус деформированного слоя. Здесь использовано граничное условие  $n(R_1) = n_0$ , т.е. отсутствие давления на внешней границе. Для дальнейшего получения аналитических оценок рассмотрим случай малого эффективного радиуса,  $|r_d| \ll r, R_1$ . Тогда

$$n(r') \approx n_0 [1 - r_d(r'^{-1} - R_1^{-1})]. \quad (16)$$

После подстановки (16) в (3), интегрирования, нахождения  $R_1$  из условия постоянства числа молекул (аналог (9)) и линейного разложения по  $r_d$  получим

$$G = -\frac{8\pi(n_0 d e)^2}{\varepsilon B} F_{\perp} \left[ 2 - \frac{r}{R_0} - \left( \frac{r}{R_0} \right)^2 + \ln \frac{R_0}{r} \right]. \quad (17)$$

Тогда уравнение (1) может быть написано для одномерного движения носителя внутри нанопровода в следующем виде:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_{\text{ef}}} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + [U_{\text{int}}^{e0} - G|\psi(x)|^2] \psi(x) = W_x \psi(x). \quad (18)$$

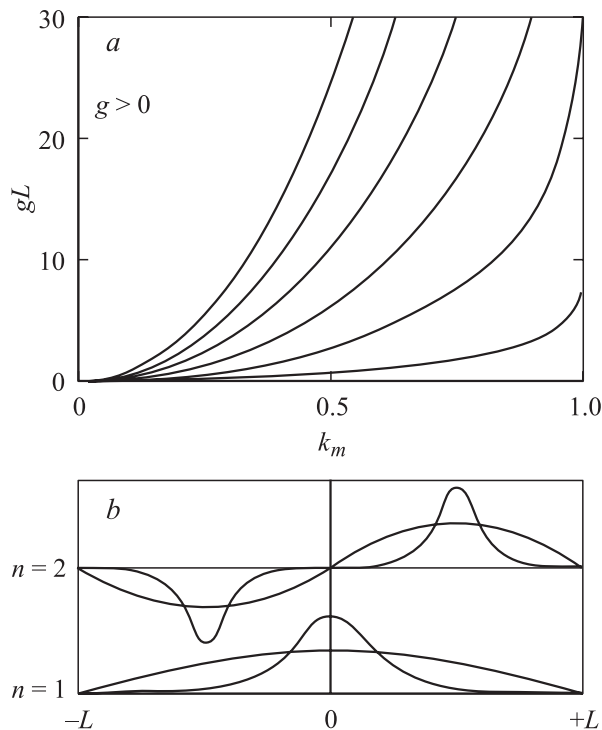
Здесь  $-L < x < +L$ , а  $U_{\text{int}}^{e0}$ , введенное в (6), и  $G$  в (12), (17) определяют параметры линейного и нелинейного взаимодействия носителя с упругой молекулярной подсистемой. Знак линейного параметра взаимодействия зависит от знака заряда и направления диполей. Нелинейное взаимодействие из-за упругой подстройки молекулярного слоя в любом случае обеспечивает уменьшение энергии системы, поэтому в параметр  $G$  входят четные степени заряда и диполя.

### 3. Анализ энергетического спектра

Введем стандартные для квантовой механики [11] переменные:

$$k_p^2 = (W_x - U_{\text{int}}^{e0}) \frac{2m_{\text{ef}}}{\hbar^2}, \quad 2g = G \frac{2m_{\text{ef}}}{\hbar^2}, \quad (19)$$

где  $k_p$  — составляющая волнового вектора частицы вдоль квантового проводника,  $g$  — перенормированный



**Рис. 2.** Графическое изображение уравнения (27). *a* — связь между безразмерным параметром взаимодействия  $gL$  и эллиптическим модулем  $k_m^{(n)}$  для  $n = 1-6$  (кривые снизу вверх). *b* — форма волновой функции носителя для первого и второго уровней согласно уравнению (21): эллиптический модуль  $k_m = 0$  для  $g = 0$  (синусоида) и  $k_m = 0.99$  (острая форма) для нелинейного взаимодействия с упругими молекулами.

параметр взаимодействия. Тогда (18) примет вид

$$\psi''(x) + k_p^2 \psi(x) + 2g |\psi(x)|^2 \psi(x) = 0. \quad (20)$$

Это уравнение имеет первый интеграл, который позволяет разделить переменные. Дальнейшее интегрирование с учетом свойств эллиптических функций [17] дает четное и нечетное решения уравнения Шредингера:

$$\psi_{\text{even}} = b \operatorname{cn} kx, \quad \psi_{\text{odd}} = k'_m b \operatorname{sd} kx, \quad (21)$$

где  $k'_m = \sqrt{1 - k_m^2}$  и  $\operatorname{sd} y = \operatorname{sn} y / \operatorname{dn} y$ , а амплитуда  $b$  и модуль  $k_m$  эллиптических функций связаны с константой интегрирования  $\kappa$  уравнениями

$$b^2 = \frac{1}{2g} (\kappa^2 - k_p^2), \quad (22)$$

$$k_m = b \sqrt{g} / \kappa. \quad (23)$$

Граничные условия  $\psi(\pm L) = 0$  приводят к уравнениям для  $k_m$  и  $\kappa$ :

$$MK(k_m) = \kappa L, \quad (24)$$

где  $M = 2m + 1$  при  $m = 0, 1, 2, \dots$  для четных и  $M = 2m$  при  $m = 1, 2, \dots$  для нечетных решений. Условия нормировки  $\int |\psi(x)|^2 dx = 1$  (мы используем [18]

и (24)) позволяют вывести уравнения для  $k_m$  и  $b$ :

$$\frac{2Lb^2}{k_m^2 K(k_m)} [E(k_m) - k'^2_m K(k_m)] = 1, \quad (25)$$

где  $E(k_m)$  — полный эллиптический интеграл второго рода. Уравнения (22)–(25) образуют замкнутую систему для параметров  $b, \kappa, k_m, k_p$ . Исключая  $b$  и  $\kappa$ , удается найти решение для  $k_p$ , которое имеет следующий вид:

$$k_p^2 = (1 - 2k_m^2) \frac{K^2(k_m)}{L^2} n^2, \quad (26)$$

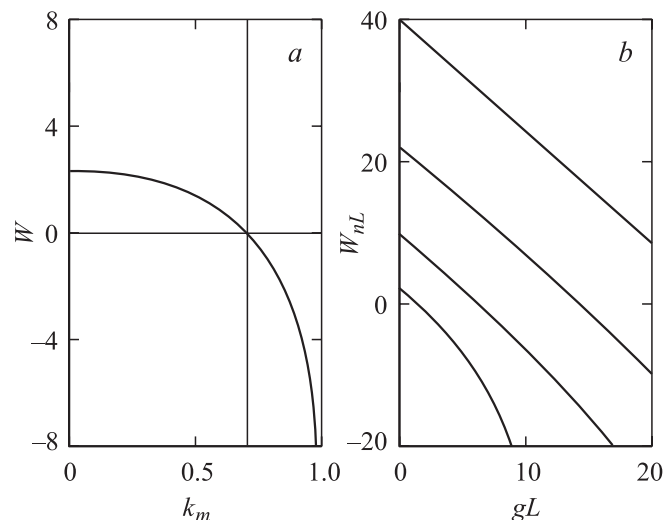
где  $k_m$  является корнем уравнения

$$\frac{2}{gL} K(k_m) [E(k_m) - k'^2_m K(k_m)] = \frac{1}{n^2}. \quad (27)$$

Параметр  $k_p^2$  — квадрат квазиимпульса — определяет энергетический спектр носителя (19), который может быть исследован экспериментально.

Применим для анализа зависимости  $k_p^2$  от параметров системы графическое представление. Уравнение (27) определяет связь между параметром  $k_m$ , характеризующим нелинейность, и параметром нелинейного взаимодействия  $gL$ , она показана на рис. 2. Из вида зависимости можно сделать следующие выводы: 1) большему  $gL$  соответствует большая нелинейность ( $k_m^{(n)}$ ), 2) наиболее сильно нелинейное взаимодействие влияет на низшие уровни.

Рассмотрим проявление этих особенностей в поведении энергетического спектра (19). На рис. 3, *a* представлены энергетические уровни как функция модуля эллиптического интеграла. При  $k_m = 1/\sqrt{2}$  энергетические уровни проходят значение нуль. На рис. 3, *b* дана зависимость энергетических уровней от параметра взаимодействия. Нелинейность четко видна для первого уровня.



**Рис. 3.** Перенормированная энергия уровней  $W = k_p^2 L^2 / n^2$  в зависимости от эллиптического модуля  $k_m$  (*a*) и  $W_{nL} = k_p^2 L^2$  в зависимости от параметра взаимодействия  $gL$  в соответствии с уравнениями (26).

В пределе слабого взаимодействия ( $gL \rightarrow 0$  и  $k_m \rightarrow 0$ ) нелинейность исчезает и  $K(k_m) \rightarrow \pi/2$ . Тогда (26) переходит в известное решение [11] для прямоугольной потенциальной ямы бесконечной глубины: с волновым числом  $k_p^2 = \pi^2 n^2 / 4L^2$ . Предел сильного взаимодействия может быть реализован даже для не очень сильного  $g$ , но для достаточно длинного нанопровода ( $Lg \rightarrow \infty$  и  $k_m \rightarrow 1$ ). Мы используем асимптотическое поведение эллиптических функций [16]:  $K(k_m) \rightarrow \infty$ ,  $E(k_m) \rightarrow 1$  и  $k_m^2 K(k_m) \rightarrow 0$ . Тогда система (27), (26) переходит в

$$K(k_m)n/L = g/2n, \quad k_p^2 = -(g/2n)^2, \quad (28)$$

а волновая функция (21) с учетом (22), (23), (28) примет при  $n = 1$  характерный для локализованных состояний вид солитона:

$$\psi(x) = \frac{\sqrt{g}}{2} \frac{1}{\text{ch}(gx/2)}. \quad (29)$$

Это решение можно получить непосредственно из (20). Влияние стенок ямы исчезает при  $1/g \ll L$ : энергия не зависит от  $L$ , а  $\psi$  от выбора начала отсчета. Появление таких локализованных состояний может быть ответственным за уменьшение проводимости в хемосорбционных датчиках [6] и в нанопроводниках, покрытых пленками Ленгмюра–Блоджетт [7].

Для оценок возьмем следующие значения параметров [16]:  $B \sim (10^6 - 10^8) \text{ Дж/м}^3$ ,  $d = el$  с  $l = 2 \cdot 10^{-10} \text{ м}$ ,  $1/n_0 = 5 \cdot 5 \cdot 20 \cdot 10^{-30} \text{ м}^3$  — объем, занимаемый молекулой,  $F_{\perp} \sim 1$ ,  $\varepsilon \approx 2$ ,  $L \sim (1-10) \cdot 10^{-6} \text{ м}$ . Тогда эффективный радиус деформации молекулярного слоя  $r_d \sim (10^{-8} - 10^{-10}) \text{ м}$  согласно (15) и безразмерный параметр взаимодействия  $gL \sim \mu(1 - 10^{-3})$  согласно (19), (17), где  $\mu = m_{\text{эф}}/m_e \sim (10^{-2} - 10^2)$  — отношение масс носителя и свободного электрона. Следовательно, энергия нелинейного взаимодействия может меняться в широких пределах от  $\sim 10^{-4} \text{ эВ}$  при  $gL = 10$  до  $\sim 1 \text{ эВ}$  при  $gL \sim 10^3$ . Наибольшее нелинейное взаимодействие и локализация носителя достигаются для „мягкого“ покрытия, более длинного нанопровода и тяжелого носителя.

К усилению локализации ведут смещения молекул вдоль поверхности нанопровода и поворот дипольных групп, к ослаблению — отсутствие собственного дипольного момента, его компенсация, повышение температуры. Необходим также учет соотношения времен жизни возбужденного состояния  $\tau_e$  и релаксации молекулярной системы  $\tau_M$ . На рис. 3, б показан спектр при  $\tau_M \ll \tau_e$ . При  $\tau_M \gg \tau_e$  (адиабатическое приближение) возбужденный носитель попадает на уровень, определяемый деформацией для основного состояния. При  $\tau_M \sim \tau_e$  процессы возбуждения и туннелирования носителя должны рассматриваться совместно с возбуждениями молекулярной системы.

## 4. Заключение

Показано, что для длинного нанопровода с адсорбированной пленкой жидкого кристалла задача определения спектра продольного квантования сводится к решению нелинейного уравнения Шредингера с граничными условиями. В широком диапазоне изменения параметров взаимодействия найдены форма волновой функции и энергия носителя, изменяющиеся от характерных для частицы в прямоугольном ящике (жесткий слой молекул) до полностью локализованного носителя с солитообразной волновой функцией при „мягком“ молекулярном слое и тяжелом носителе. Такая локализация носителя при покрытии нанопровода сложными органическими молекулами может быть ответственна за наблюдаемое в эксперименте падение проводимости [7]. В зависимости от знака заряда носителя и поляризации молекул линейное взаимодействие и вызванное им смещение уровней меняют знак.

Энергетический спектр носителя в первую очередь сильно зависит от жесткости молекулярной системы. Кристаллизация жидкокристаллической пленки приводит к скачкообразному росту жесткости и соответствующему падению параметра нелинейного взаимодействия, локализация продольного движения носителя должна исчезнуть, на температурной зависимости проводимости должен наблюдаться скачок. Следовательно, нанопровод может использоваться как датчик состояния молекулярной среды. Рассмотренные процессы должны быть учтены при разработке чипов на основе нанотрубок и ДНК или слоистых органических поверхностных структур [8,9].

## Список литературы

- [1] D.K. Ferry, S.M. Goodnick. *Transport in Nanostructures* (Cambridge University Press, Cambridge, 1997).
- [2] A.I. Yanson, I.K. Yanson, J.M. van Ruitenbeek. *Phys. Rev. Lett.*, **87**, 216 805 (2001).
- [3] D. Orlikowski, H. Mehrez, J. Taylor, H. Guo, J. Wang, C. Roland. *Phys. Rev. B*, **63**, 155 412 (2001).
- [4] P. Poncharal, C. Berger, Yan Yi et al. *J. Phys. Chem. B*, **106**, 12 104 (2002).
- [5] C. Dekker. *Phys. Today*, **52**, 22 (1999).
- [6] H. Dai. *Phys. World*, **13** (6), 43 (2000).
- [7] N.P. Armitage, J.-C.P. Gabriel, G. Gruner. <http://xxx.lanl.gov/abs/cond-mat/0307712>.
- [8] E. Buzaneva, A. Gorchynskyy, G. Popova et al. In: *Frontiers of Multifunctional Nanosystems*, ed. by E. Buzaneva, P. Scharff. NATO Adv. Ser. II (Kluwer, 2002) v. 57, p. 191.
- [9] O. Neilands. In: *Molecular Low Dimensional and Nanostructured Materials for Advanced Applications*, ed. by A. Graja et al. NATO Adv. Ser. II (Kluwer, 2002) v. 59, p. 181.
- [10] А.С. Ковалев. *Теорет. и мат. физика*, **37**, 135 (1978).
- [11] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Квантовая механика* (М., Наука, 1975).
- [12] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Теория поля* (М., Наука, 1973).

- [13] А.С. Сонин. *Введение в физику жидких кристаллов* (М., Наука, 1983).
- [14] Р. Блинци, Б. Жекш. *Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики. Динамика решетки* (М., Мир, 1975). [Пер. с англ.: R. Blinc, B. Zeks. *Soft modes in ferroelectrics and antiferroelectrics* (North-Holland Publ. Co Amsterdam, Oxford American Elsevier Publishing Co, Inc., N. Y., 1974)].
- [15] А.П. Прудников, Ю.А. Брычков, О.И. Маричев. *Интегралы и ряды* (М., Наука, 1981).
- [16] Л.М. Блинов. *Электро- и магнитооптика жидких кристаллов* (М., Наука, 1978).
- [17] Е. Янке, Ф. Эмде, Ф. Леш. *Специальные функции* (М., Наука, 1968). с. 114. [Пер. с нем.: E. Janke, F. Emde, F. Losch. *Tafeln Hoherer Functionen* (Verlagsgesellschaft, Stuttgart 1960)].
- [18] А.П. Прудников, Ю.А. Брычков, О.И. Маричев. *Интегралы и ряды. Дополнительные главы* (М., Наука, 1986). с. 51.

Редактор Л.В. Шаронова

## The effect of adsorbed molecules on the spectrum of carriers in a semiconductor nanowire

V.A. Lykah<sup>+</sup>, E.S. Syrkin<sup>+,\*</sup>

<sup>+</sup> National Technical University „Kharkov Polytechnical Institute“,  
61002 Kharkov, Ukraine

<sup>\*</sup> Institute for Low Temperature Physics and Engineering,  
61103 Kharkov, Ukraine

**Abstract** A semiconducting quantum nanowire with adsorbed organic molecules is considered. It is shown that shifting of quantum levels is determined by the linear (by orientation of the molecular dipoles and signum of a carrier) and the nonlinear (by a molecular layer deformation) mechanisms. In the case of a long nanowire a longitudinal quantization for the carrier is described selfconsistently by a nonlinear Schroedinger equation with boundary conditions. The spectrum is reduced determined to a system of transcendent equations.