

## Модифікація зонної структури деформованих квантових дротів InP

В.В. Курилук\*, О.О. Коротченков, А.О. Подолян

Київський національний університет імені Тараса Шевченка, фізичний факультет,  
вул. Володимирська, 64/13, 01601 Київ, Україна

(Одержано 05.08.2014; опубліковано online 29.11.2014)

У роботі описуються особливості зонної структури деформованих нанодротів InP різного діаметру. Показано, що вигин квантових дротів здатний створити віддалені від поверхонь циліндричного дроту локальні мінімуми у зоні провідності та валентній зоні. Цей результат відкриває нові можливості керування часом життя фотозбуджених носіїв заряду шляхом їх утримання на цих мінімумах, а також величиною фотонапруги у пристроях перетворення сонячної енергії на квантових дротах. Робота переслідує загальну мету розробити нові методи функціоналізації наноструктурованих поверхонь з використанням механічної деформації.

**Ключові слова:** Квантовий дріт, Механічна деформація, Носії заряду.

PACS numbers: 73.22. – f, 78.67.Lt

### 1. ВСТУП

Швидкий прогрес, досягнутий у синтезі нанодротів методом VLS (пара-рідина-тверде тіло) [1], дозволив створити напівпровідникові квантові дроти з діаметром до 3 нм [2] (менше десяти атомів по діаметру дроту), а також реалізацію провідних каналів польових транзисторів довжиною до 40 нм [3]. Зі зменшенням діаметру дротів відбувається еволюція їх фізичних властивостей. Навіть за умови, що діаметр виявляється занадто великим для спостереження ефекту розмірного квантування, можуть проявлятися явища балістичного транспорту носіїв заряду, впливу поверхневих станів на границі дроту, орієнтаційні ефекти. Усі вони здатні суттєво вплинути на процеси переносу заряду в нанодротах [4].

Система InP представляє особливий інтерес для досліджень нанодротів через низьку швидкість рекомбінації носіїв заряду на поверхневих станах [5-7] і, тим самим, має значний потенціал для створення високоефективних практичних пристроїв оптоелектронного спрямування.

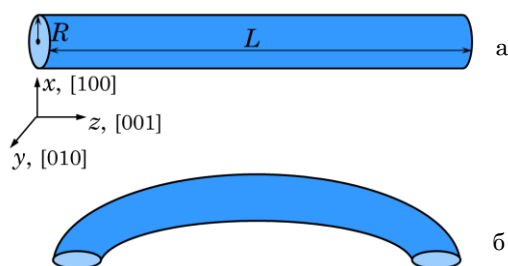
Дана робота присвячена теоретичному дослідженню структури зонної схеми деформованих нанодротів різного діаметру. Результати мають значення для аналізу процесів зарядопереносу у фотоприймаючих пристроях на основі нанодротів InP, а також для вивчення випромінювальної рекомбінації у цих матеріалах.

### 2. МЕТОДИКА РОЗРАХУНКІВ

Для вивчення особливостей зонної структури напружених нанодротів в роботі розглядалась модель деформованого квантового дроту InP у формі циліндра довжиною  $L$  та радіусом  $R$  (рис. 1, а). Виходячи із наявних експериментальних даних [8], квантовий дріт вважається деформованим (рис. 1, б). В рамках загального підходу до розрахунку деформацій [9] оберемо розподіл компонент початкових пружних зміщень  $u_{i0}$  у вигляді:

$$\begin{aligned} u_{x0} &= u_0 \sin\left(\frac{\pi z}{L}\right), \\ u_{y0} &= -\frac{2C_{12}}{C_{11}}, \\ u_{z0} &= -\frac{2C_{13}}{C_{11}}, \end{aligned} \quad (1)$$

де  $C_{ij}$  – компоненти тензора пружних сталей,  $u_0$  – амплітуда початкового зміщення.



**Рис. 1** – Досліджуваний квантовий дріт InP в недеформованому (а) та деформованому (б) стані

Поява деформацій в квантових дротах зумовлює зміну енергії дна зони провідності та вершини валентної зони на величину  $\delta E_c$  та  $\delta E_v$ , відповідно. У наближенні деформаційного потенціалу зсув країв енергетичних зон подамо у вигляді:

$$\delta E_c = a_c \varepsilon_h + e\varphi, \quad (2)$$

$$\delta E_v = a_v \varepsilon_h - \frac{b_v}{2} \varepsilon_b + e\varphi, \quad (3)$$

де  $a_c$ ,  $a_v$ ,  $b_v$  – константи деформаційного потенціалу,  $\varphi$  – п'єзоелектричний потенціал,  $\varepsilon_h$ ,  $\varepsilon_b$  – гідростатична та біаксіальна деформації, які, у свою чергу визначаються співвідношеннями:

$$\varepsilon_h = \frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z}, \quad (4)$$

\* kuryluk@univ.kiev.ua

$$\varepsilon_b = 2 \frac{\partial u_z}{\partial z} - \frac{\partial u_x}{\partial x} - \frac{\partial u_y}{\partial y}. \quad (5)$$

Розподіл компонент вектора пружних зміщень  $u_i$  в досліджуваному квантовому дроті визначався шляхом розв'язку системи рівнянь теорії пружності з урахуванням п'єзоелектричних властивостей InP:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} &= 0, \\ \frac{\partial D_i}{\partial x_i} &= 0, \end{aligned} \quad (6)$$

де  $\sigma_{ij}$  – тензор механічних напружень,  $D_i$  – потік вектора напруженості електричного поля, які зв'язані з тензором деформацій та п'єзоелектричним потенціалом наступним співвідношенням:

$$\begin{aligned} \sigma_{6 \times 1} &= C_{6 \times 6} \varepsilon_{6 \times 1} + e_{6 \times 3} \vec{\nabla} \varphi \\ D_{6 \times 1} &= e_{3 \times 6} \varepsilon_{6 \times 1} - v_{3 \times 3} \vec{\nabla} \varphi \end{aligned} \quad (7)$$

Тут  $e$ ,  $v$  – компоненти тензорів п'єзоелектричних сталей та діелектричної проникності, відповідно. Індексом внизу позначено розмірності відповідних матриць.

Система рівнянь (6)-(7) розв'язувалась чисельно методом скінчених елементів. Отримані в результаті розв'язку зміщення  $u_i$  та п'єзоелектричний потенціал  $\varphi$  підставлялись в рівняння (4)-(5), після чого розраховувались зміни енергетичних зон (2)-(3) квантового дроту InP.

### 3. РЕЗУЛЬТАТИ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

На рис. 2 представлено розраховані зміни країв енергетичних зон по діаметру напруженого дроту InP для двох крайніх перерізів квантового дроту. Видно, що деформація зумовлює зміну ширини забороненої зони InP внаслідок зсуву країв зони провідності та валентної зони. При цьому в різних ділянках нанодроту ширина забороненої зони може як збільшуватись (рис. 2, а), так і зменшуватись (рис. 2, б). Відзначимо, що асиметрія змін країв зон при  $z = 0$ ; і  $z = L$  зумовлена несиметричним характером розподілу біаксіальної та гідростатичної деформацій по перерізу вздовж осей  $Ox$  ( $Oy$ ).

Рис. 2 наочно демонструє, що подібні деформаційні зміни ведуть до появи просторових локальних мінімумів для вільних електронів у зоні провідності та дірок у валентній зоні. Зокрема, при  $z = 0$ , виявляється глибокий мінімум у зоні провідності всередині дроту в околі  $x = 33$  нм (рис. 2, а). Навпаки, при  $z = L$ , вільні електрони локалізуюватимуться поблизу зовнішнього краю дроту (рис. 2, б).

Відповідні зміни положення дна зони провідності та вершини валентної зони вздовж осі квантового дроту наведено на рис. 3. Знову, при реальній конфігурації деформацій всередині дроту біля його країв виникають мінімуми для електронів та дірок. Так, для електронів глибокий мінімум виникає поблизу  $z = 0$ , а локальний мінімум на іншому краю дроту,  $z \approx 30-40$  нм від краю в глибину. Останній мінімум проявляється при достатньо малих значеннях діаметру дроту, менших за  $\approx 10$  нм в розглядуваному випадку.

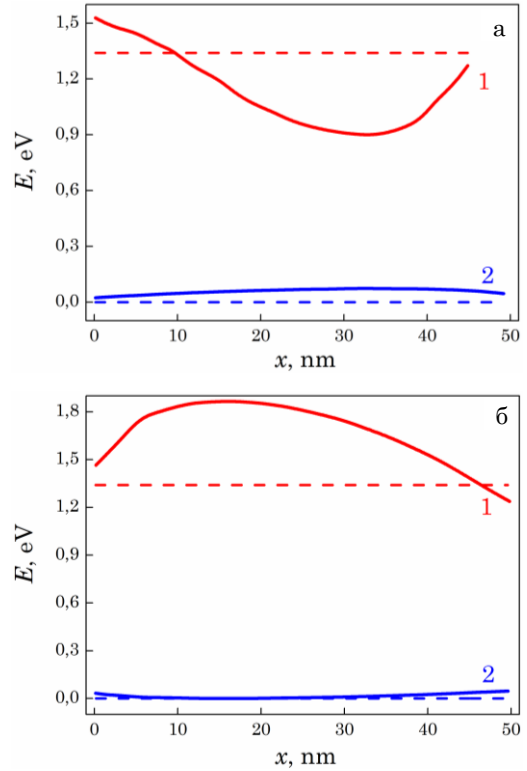


Рис. 2 – Деформаційні зміни положення дна зони провідності (1) та вершини валентної зони (2) вздовж діаметру квантового дроту в різних точках: (а) –  $z = 0$ ; (б) –  $z = L$ . Пунктирні лінії позначають краї зон у недеформованому дроті. Радіус дроту  $R = 25$  нм, його довжина  $L = 500$  нм

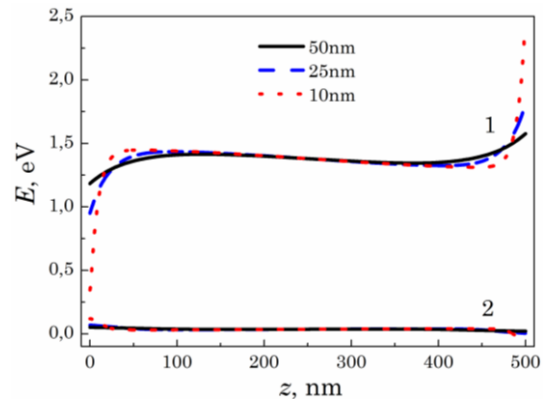


Рис. 3 – Деформаційні зміни положення дна зони провідності (1) та вершини валентної зони (2) вздовж осі квантового дроту довжиною  $L = 500$  нм для трьох значень радіусу квантової нитки (10, 25 і 50 нм)

Наведені дані засвідчують, що у деформованих дротах можуть виникати просторово зсунуті локальні мінімуми у зоні провідності і валентній зоні. Важливим є той факт, що деякі з цих мінімумів віддалені від поверхонь циліндричного дроту (рис. 2, а, рис. 3) із зазвичай значною концентрацією центрів рекомбінації носіїв заряду. Блокування прояву цих центрів із суттєвим збільшенням часу життя носіїв заряду здебільшого здійснюється функціоналізацією поверхні дроту, наприклад, шляхом покриття його полімерною оболонкою [10]. Дана робота пропонує альтернативний шлях – частково блокувати припо-

верхню рекомбінацію шляхом віддалення вільних носіїв заряду від поверхонь дроту при його деформації вигином.

Таким чином, в роботі теоретично показано, що вигин квантових дротів здатний створити віддалені від поверхонь циліндричного дроту локальні міні-

муми у зоні провідності та валентній зоні. Цей результат відкриває нові можливості керування часом життя фотозбуджених носіїв заряду шляхом їх утримання на цих мінімумах, а також величиною фотонапруги у пристроях перетворення сонячної енергії на квантових дротах.

## Модификация зонной структуры деформированных квантовых проводов InP

В.В. Курилюк, О.А. Коротченков, А.А. Подолян

*Киевский национальный университет имени Тараса Шевченко, физический факультет,  
ул. Владимирская, 64/13, 01601 Киев, Украина*

В работе описываются особенности зонной структуры деформированных нанопроводов InP разного диаметра. Показано, что изгиб квантовых проволок способен создать удаленные от поверхностей цилиндрического провода локальные минимумы в зоне проводимости и валентной зоне. Этот результат открывает новые возможности управления временем жизни фотовозбужденных носителей заряда путем их удержания на этих минимумах, а также величиной фотонапряжения в устройствах преобразования солнечной энергии на квантовых проводах. Работа преследует общую цель разработать новые методы функционализации наноструктурированных поверхностей с использованием механической деформации.

**Ключевые слова:** Квантовый провод, Механическая деформация, Носители заряда.

## Band Structure Modifications in Deformed InP Quantum Wires

V.V. Kuryliuk, O.A. Korotchenkov, A.A. Podolian

*Taras Shevchenko National University of Kyiv, 64/13, Volodymyrska Str., 01601 Kyiv, Ukraine*

The work describes the features of the band structure of deformed InP nanowires with different diameters. It is shown that the bending of quantum wires is capable of creating local minima in the conduction and valence bands which are separated from the surface of the cylindrical wire. This result opens up new possibilities for controlling both the lifetime of photoexcited carriers by keeping them at these minima and the magnitude of the photovoltage in solar energy conversion devices based on quantum wires. The work lies within a common goal aiming to develop new methods of functionalization of nanostructured surfaces using mechanical deformations.

**Keywords:** Quantum wire, Mechanical deformation, Charge carriers.

## СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. W. Lu, C.M. Lieber, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **39**, R387 (2006).
2. Y. Wu, Y. Cui, L. Hynh, C.J. Barrelet, D.C. Bell, C.M. Lieber, *Nano Lett.* **4**, 433 (2004).
3. H. Yongjie, J. Xiang, G. Liang, Y. Han, C.M. Lieber, *Nano Lett.* **8**, 925 (2008).
4. S.A. Dayeh, *Semicond. Sci. Technol.* **25**, 024004 (2010).
5. K.T. Tsen, G. Halama, O.F. Sankey, S.-C.Y. Tsen, H. Morkoç, *Phys. Rev. B* **40**, 8103 (1989).
6. K. Tai, R. Hayes, S.L. McCall, W.T. Tsang, *Appl. Phys. Lett.* **53**, 302 (1988).
7. E. Yablonovitch, R. Bhat, C.E. Zah, T.J. Gmitter, M.A. Koza, *Appl. Phys. Lett.* **60**, 371 (1992).
8. C. Tang, Y. Bando, Z. Liu, D. Golberg, *Chem. Phys. Lett.* **376**, 676 (2003).
9. J. Grenzer, U. Zeimer, S.A. Grigorian, S. Feranchuk, U. Pietsch, J. Fricke, H. Kissel, A. Knauer, M. Weyers, *Phys. Rev. B* **69**, 125316 (2004).
10. C.K. Yong, K. Noori, Q. Gao, H.J. Joyce, H.H. Tan, C. Jagadish, F. Giustino, M.B. Johnston, L.M. Herz, *Nano Lett.* **12**, 6293 (2012).