



Univerzitet u Beogradu
Elektrotehnički fakultet

Vladimir V. Arsoski

Ekscitonska struktura i optička svojstva
poluprovodničkih nanotačaka i nanoprstenova

doktorska disertacija

Beograd, 2013.

Komisija

Mentor disertacije:

Dr Milan Tadić, redovni profesor Elektrotehnički fakultet Univerziteta u Beogradu

Članovi komisije:

Dr Dejan Raković, redovni profesor Elektrotehnički fakultet Univerziteta u Beogradu

Dr Nebojša Romčević, naučni savetnik Institut za fiziku Univerziteta u Beogradu

Dr Jelena Radovanović, vanredni profesor Elektrotehnički fakultet Univerziteta u

Beogradu

Dr Petar Matavulj, vanredni profesor Elektrotehnički fakultet Univerziteta u Beogradu

Datum odbrane:

Zahvaljujem se Prof. dr Milanu Tadiću koji me je uveo u svet nanoelektronike i ukazao na čaroban svet nanostrukture na granici imaginacije i nauke. Svojim stručnim mentorskim pristupom usmerio me je da iz različitih uglova sagledam svet nanotačaka. Velika stručnost mentora na polju disertacije ispoljena kroz mnoštvo dragocenih saveta, poznavanje relevantne literature, korisnih sugestija, a često i lično angažovanje u realizaciji delova zadatih projekata, omogućila mi je da relativno lako savladam do tada nesagledive probleme nanosveta. Ovo je dovelo do efikasnog završetka izrade disertacije, i još važnije, produbilo mi je entuzijazam za budući rad u oblasti nanostrukture. Takođe se zahvaljujem Prof. dr Francois M. Peetersu za korisne sugestije, kao i na pomoći pri pisanju naučno-istraživačkih radova što je značajno doprinelo kvalitetu i čitljivosti publikovanih radova.

Želeo bih još da se zahvalim mojim roditeljima Zorici i Vukašinu, sestri Tini, kao i svim prijateljima i kolegama, koji su mi pružili moralnu podršku i preuzeli deo mojih obaveza. Posebno bih istakao pomoć kolege Nemanje Čukarića u vidu korisnih rasprava iz oblasti disertacije i kolege Gorana Anđelkovića koji je aktivno učestvovao u rešavanju raznih tehničkih problema u završnoj fazi izrade disertacije.

Na posletku, a suštinski najpre, zahvalio bi mojoj deci Ani i Vasiliju, i ženi Tanji koji su ponajviše i osetili posledice tokom izrade ove disertacije u vidu manjka zajednički provedenog vremena, pomoći u teškim trenucima, a možda i manjka pažnje i nedostatka malih stvari koje život čine lepim.

I am very grateful to Prof. Dr. Francois M. Peeters for constructive suggestions on the exciton states calculations in quantum dots. His help with writing all the research papers related to this thesis was invaluable. Thus, the text in the present form owes much to comments and advices of Prof. Peeters.

Ekscitonska struktura i optička svojstva poluprovodničkih nanotačaka i nanoprstenova

Rezime. Ova disertacija se bavi proračunom stanja neutralnog ekscitona u poluprovodničkim nanotačakama (kvantnim tačkama) i nanoprstenovima (kvantnim prstenovima) i modelovanjem njihovih optičkih osobina. Neutralni eksciton je kvazičestica koja predstavlja vezano stanje elektrona i šupljine između kojih postoji privlačna Coulombova sila. Iako je električno neutralan, polarizacija ekscitona je konačna usled različitog konfiniranja elektrona i šupljine u nanotačakama. Ovo dovodi do povoljnih uslova za manifestaciju efekata kvantne interferencije, kakav je *ekscitonski Aharonov-Bohmov (AB) efekat*. Ovaj istaknuti efekat, koji otvara mogućnosti primene nanotačaka i nanoprstenova u nanoelektronici i fotonici, uslovljen je sastavom i morfologijom nanostrukture koji suštinski zavise od tehnologije koja se koristi za izradu nanotačaka i nanoprstenova.

Stoga je u disertaciji dat sistematizovan prikaz novijih tehnika za formiranje nanotačaka i nanoprstenova. Prva prikazana tehnika je modifikovana kapljična epitaksija, koja se koristi za proizvodnju nenapregnutih GaAs/(Al,Ga)As nanotačaka, čiji se oblik može kontrolisati izborom određenih tehnoloških parametara. Druga tehnika je Stranski-Krastanow (SK) mod narastanja, koji se koristi za proizvodnju napregnutih nanotačaka, kao što su one od (In,Ga)As u matrici od GaAs. Dimenzije ovih nanotačaka su reda nanometra, i pažljivom kontrolom parametara rasta ove nanotačke se mogu pretvoriti u strukture slične prstenovima, koje se nazivaju nanoprstenovi. Međutim, po rastu nanoprstena zaostaje tanak sloj unutar njegovog nominalnog otvora, tako da topologija ove strukture nije dvostruko povezana. Dat je sumarni pregled III-V poluprovodničkih jedinjenja i njihovih legura koje se koriste za proizvodnju analiziranih nanotačaka i nanoprstenova. Prikazane su i diskutovane formule koje se koriste za računanje parametara zonske strukture za datu temperaturu, molnski udeo itd.

Detaljno su opisani teorijski modeli analiziranih nanostrukture. Razmatrane su osobenosti aksijalno simetričnih nanotačaka i nanoprstenova. Korišćena su dva modela naprežanja koji su zasnovani na mehanici kontinuuma: kontinualno mehanički-model

(CM) za slučaj kada je anizotropija elastičnih osobina prisutna u strukturi i jednostavni model izotropne elastičnosti (IE). Pokazano je da se rezultati dva modela malo međusobno razlikuju za analizirane aksijalno simetrične strukture. U slučaju idealizovane geometrije sa strmim granicama na mestu heterospoja postojeći IE model je sveden na numeričko rešavanje jednodimenzionih (1D) integrala.

Prikazana je teorija jednočestičnih stanja u električnom i magnetskom polju. Za računanje elektronskih stanja korišćena je jednozonska teorija efektivnih masa, dok su šupljinska stanja izračunata koristeći dva modela, jednozonsku aproksimaciju i višezonsku $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ teoriju. Aksijalna aproksimacija je primenjena i na kinetički deo 4-zonskog $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ hamiltonijana i na deo koji zavisi od naprežanja. U ovom novom pristupu, vandijagonalni elementi se zadržavaju u delu hamiltonijana koji zavisi od naprežanja, što predstavlja unapređenje u odnosu na ranije korišćene aksijalno simetrične $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ modele koji su koristili dijagonalnu aproksimaciju za ovaj deo šupljinskog hamiltonijana. Za proračun ekscitonskih stanja, formirani su modeli bazirani na pristupu egzaktno dijagonalizacije u realnom i inverznom prostoru. Takođe su definisani karakteristični dimenzioni parametri neutralnog ekscitona i uvedene su metode za procenu amplitude oscilacija energije osnovnog stanja ekscitona. Pored toga, izvedeni su jednostavni modeli ekscitonskih stanja bazirani na adijabatskoj aproksimaciji, koji su primenjeni na strukturu sačinjenu od lateralno spregnutih kvantnih prstenova. Nađena su: (1) analitička rešenja za slučaj kada se Coulombova interakcija zanemari i (2) numeričko rešenje 3D jednačine za ekscitonske energetske nivoe kada je Coulombova interakcija uključena u model. Nađeno je da Coulombova interakcija značajno smanjuje polarizaciju ekscitona u analiziranim lateralno spregnutim GaAs/(Al,Ga)As nanoprstenovima I tipa.

Metod egzaktno dijagonalizacije je korišćen za analizu uticaja nedostajućeg otvora u kvantnim tačkama sličnim prstenovima na zavisnost ekscitonskih nivoea od magnetskog polja. Analizirana su dva tipa ovakvih napregnutih (In,Ga)As/GaAs nanotačaka: (1) nanotačke oblika sličnog šoljici, koje su nazvane *nanošoljice* i (2) nanotačke koje se eksperimentalno realizuju, pri čemu je uvedena aproksimacija aksijalne simetrije ovih tačaka. Za oba slučaja, nađeno je da naprežanje i mešanje između zona dovode do povećanja polarizacije ekscitona, što dovodi do uvećanja amplitude ekscitonskih Aharonov-Bohmovih oscilacija. Zanimljivo je da smo našli da

zbog posebnog oblika, eksperimentalne kvantne tačke slične prstenovima pokazuju veće ekscitonske Aharonov-Bohmove oscilacije od nanošoljica. Međutim, za obe strukture smo došli do istog zaključka: odsustvo otvora u kvantnim tačkama sličnim prstenovima dovodi do uvećanja ekscitonskog Aharonov-Bohmovog efekta.

Poslednji deo disertacije je posvećen ispitivanju mogućnosti povećanja amplitude oscilacija primenom električnog polja. Da bi u potpunosti razmotrili na koji način električno polje utiče na ekscitonska stanja, razmotrili smo nenapregnute strukture koje imaju oblik nanoprstena na nanodisku, a mogu se napraviti pomoću modifikovane kapljične epitaksije. Ustanovljeno je da se pomoću primenjenog električnog polja mogu pojaviti višestruki preseki optički aktivnog i neaktivnog stanja u osnovnom stanju ekscitona. Prema tome, rezultati našeg proračuna pokazuju istaknutu pojavu optičke manifestacije ekscitonskog AB efekta (*optički ekscitonski Aharonov-Bohmov efekat*) u prisustvu električnog polja.

Sumarno, ova disertacija pokazuje da naprezanje, mešanje između zona i električno polje imaju povoljan uticaj na ekscitonski Aharonov-Bohmov efekat u realističnim nanotačkama sličnim prstenovima, ali koje nemaju formiran kompletan otvor. Dobijeni rezultati se kvalitativno dobro slažu sa rezultatima eksperimentalnih merenja. Pored toga, naši proračuni pružaju smernice za uvećanje ekscitonskog Aharonov-Bohmovog efekta izborom geometrije strukture i korišćenja različitih materijala za fabrikaciju ovih nanotačaka. Da bi se razvijeni model unapredio potrebno je razmotriti razne dodatne faktore, kao što su anizotropija elastičnih osobina i odstupanja geometrije strukture od aksijalno simetričnog oblika. Ove posebnosti bi još više približile teorijske rezultate eksperimentalnim. Međutim, čak i modeli prikazani u ovoj disertaciji se mogu uspešno koristiti za predikciju optičkih karakteristika struktura sličnih prstenovima, što može biti značajno za njihove potencijalne primene.

Ključne reči: nanotačka, nanoprsten, kvantna tačka, kvantni prsten, Aharonov-Bohmov efekat, eksciton, naprezanje, egzaktna dijagonalizacija, optička svojstva

Naučna oblast: Nanoelektronika

Uža naučna oblast: Nanostrukture–nanotačke

UDK: 621.3

The exciton structure and optical properties of semiconductor nanodots and nanorings

Abstract. The main objective of the presented thesis is the calculation of the neutral exciton states in semiconductor *nanodots* (quantum dots) and *nanorings* (quantum rings) and the modelling of their optical properties. The neutral exciton is a quasiparticle that represents a bound state of the electron and hole which mutually interact by the attractive Coulomb force. Although the exciton is an electrically neutral object, the different confinement of the electron and hole in the nanodot brings about a finite exciton polarization. This in turn establishes a favorable condition for the manifestation of quantum interference effects, such as the *excitonic Aharonov-Bohm (AB) effect*. This quantum effect, which opens up venues for practical applications of nanorings and nanodots in nanoelectronics and photonics, is influenced by the composition and the morphology of the specific nanostructure, which essentially depends on the technology employed for the fabrication of those nanodots and nanorings.

Therefore, recent techniques for the fabrication of nanodots and nanorings are systematically reviewed in the thesis. The first is the modified droplet epitaxy, which allows the fabrication of unstrained GaAs/(Al,Ga)As nanodots, whose shape could be easily controlled by varying certain technological parameters. The second technique is the Stranski-Krastanow (SK) mode of epitaxial growth, which is employed to produce strained nanodots, such as those made of (In,Ga)As in a matrix of GaAs. Their dimensions are of the order of a few nanometers, and by careful control of the growth parameters these nanodots can be turned into ring-like structures, which are called nanorings. However, after growth a thin layer remains inside the nominal ring opening, therefore they do not have double connected topology. The properties of III-V semiconductor compounds and their alloys which are employed to fabricate the analyzed nanodots and nanorings are reviewed. The formulas for computing various band structure parameters for a given temperature, mole fraction etc. are given and discussed.

The theoretical models of the analyzed nanodots are described in detail. Peculiarities of the axially symmetric nanodots and nanorings are considered. I used two

models of elasticity which are based on continuum mechanics: the continuum-mechanical model (CM) was applied to the case when anisotropic elasticity is present in the structure, and a simple model of isotropic elasticity (IE). I showed that the results of those two models negligibly deviate from each other for the analyzed axially symmetric structures. Furthermore, in the case of an idealized geometry with steep boundaries at the heterojunction the results of the IE model could be reduced to one-dimensional (1D) integrals that have to be calculated numerically.

The theory of the single-particle states in electric and magnetic fields was presented. The electron states were computed by the single-band effective-mass theory, whereas the hole states are computed by both the single-band approximation and the multiband $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ theory. The axial approximation was applied to both the kinetic and strain dependent parts of the 4-band $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ Hamiltonian. In this new approach, the off-diagonal terms are kept in the strain dependent part, which is a considerable improvement over the previously used axially symmetric $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ models which adopted the diagonal approximation to this part of the Hamiltonian. For the calculation of the exciton states, the exact diagonalization procedures in coordinate and momentum space were used. Also, the characteristic dimensional parameters of a neutral exciton were defined, and a few methods to assess the amplitude of the Aharonov-Bohm oscillations of the exciton ground energy level were introduced. Furthermore, the simplified models of the exciton states were derived in the adiabatic approximation and were applied to the case of laterally coupled nanorings. I found: (1) the analytical solutions for the case when the Coulomb interaction is neglected, and (2) the numerical solution of the 3D equation for the exciton energy levels when the Coulomb interaction is included in the model. The exciton polarization in the analyzed laterally coupled type-I GaAs/(Al,Ga)As nanorings was found to be significantly reduced by the Coulomb interaction.

The exact diagonalization was employed in order to analyze how the absence of the opening in the ring-like quantum dot affects the magnetic field dependence of the exciton energy levels. Two types of such strained (In,Ga)As/GaAs nanodots were analyzed: (1) the cup-like nanodots, which are called *nanocups* and (2) ring-like quantum dots that are similar to the experimental geometry, which was simplified by imposing axial symmetry of the structure. For both cases, strain and hole mixing were

found to increase the exciton polarization, which leads to an increase of the amplitude of the excitonic AB oscillations. Quite interestingly I found that, due to the peculiar shape, experimental ring-like quantum dots exhibit larger excitonic Aharonov-Bohm oscillations than the nanocups. However, for both these systems I found that: the absence of the opening in ring-like quantum dots leads to an increase of the excitonic Aharonov-Bohm effect.

In the last part of the thesis I examined the possibility of increasing the amplitude of the excitonic Aharonov-Bohm oscillations by means of an applied electric field. In order to fully resolve the influence of electric field on the exciton states, I considered an unstrained structure which has the form of a nanoring on a nanodisk and which can be made by the modified droplet epitaxy technique. It is shown that multiple crossings of the optically active and inactive exciton states in the exciton ground energy level can be induced by the applied electric field. Therefore, our calculations revealed a striking appearance of the optical manifestation of the excitonic Aharonov-Bohm effect (*the optical excitonic Aharonov-Bohm effect*) in the presence of an electric field.

To summarize, the presented thesis shows that strain, band mixing, and electric field can have a beneficial influence on the appearance of the excitonic Aharonov-Bohm effect in a ring-shaped realistic nanodot lacking a complete opening in its center (ring-like quantum dot). The obtained results are in qualitative agreement with the results of experimental measurements. Furthermore, our calculations provide guidelines for further enhancement of the excitonic Aharonov-Bohm effect by varying the structure geometry and the use of different materials for the fabrication of these nanodots. Few additional issues have to be considered when further improving the model, i.e. one should include the elastic anisotropy and deviations of the structure geometry from axial symmetry. Such subtleties could therefore bring our theoretical results closer to those of experimental measurements. However, even in the present form the developed models could be successfully employed to predict the optical characteristics of ring-like structures, which may be relevant for their possible applications.

Key words: nanodot, nanoring, quantum dot, quantum ring, Aharonov-Bohm effect, exciton, strain, exact diagonalization, optical properties

Scientific discipline: Nanoelectronics

Major in: Nanostructures–nanodots

UDC: 621.3

Экситонная структура и оптические
свойства полупроводниковых наноточек и
нанокольца

Sadržaj

| | |
|---|------------|
| Komisija..... | i |
| Izrazi zahvalnosti..... | ii |
| Rezime..... | iii |
| Abstract..... | vi |
| Glava 1 | |
| Uvod | 1 |
| 1.1. Nanoprsten | 2 |
| 1.2. Tehnologije proizvodnje nanotačaka i nanoprstenova..... | 6 |
| 1.2.1. Modifikovana kapljična epitaksija..... | 9 |
| 1.2.2. Narastanje nanoprstenova u prisustvu naprezanja..... | 18 |
| 1.3. Osobine III–V poluprovodničkih jedinjenja i njihovih legura za proizvodnju nanotačaka | 25 |
| 1.4. Predmet disertacije..... | 28 |
| Glava 2 | |
| Teorijski modeli mehaničkog naprezanja, elektronske i ekscitonske strukture | 32 |
| 2.1. Modeli mehaničkog naprezanja | 32 |
| 2.1.1. Osnovne jednačine kontinualno-mehaničkog modela..... | 33 |
| 2.1.2. Elastična svojstva kristala..... | 34 |
| 2.1.3. Teorija izotropne elastičnosti..... | 37 |
| 2.1.3.1. Primena modela izotropne elastičnosti na aksijalno simetrične nanostrukture tipa nanotačke ili nanoprstena | 40 |
| 2.1.3.2. Primena modela izotropne elastičnosti za proizvoljan oblik nanotačke | 48 |
| 2.1.4. Važnije komponente tenzora naprezanja i relevantnih veličina u Descartesovim i cilindričnim koordinatama..... | 49 |
| 2.2. Modeli jednočestičnih stanja | 51 |
| 2.2.1. Uticaj naprezanja na konfinirajuće potencijale | 52 |
| 2.2.2. Hamiltonijan za jednočestična stanja prema jednozonskom modelu u sfernoj aproksimaciji | 54 |
| 2.2.3. Luttinger-Kohnov višezonski model | 55 |
| 2.2.4. Svojstvene funkcije za aksijalno simetrične strukture..... | 58 |
| 2.3. Model ekscitonskih stanja u 3D prostoru | 60 |
| 2.3.1. Metod egzaktne dijagonalizacije za računanje ekscitonskih stanja u aksijalno simetričnim strukturama | 63 |
| 2.3.1.1. Teškošupljinski eksciton | 63 |
| 2.3.1.2. Višezonski eksciton..... | 64 |
| 2.3.1.3. Računanje Coulombovog matričnog elementa pomoću prelaska u inverzan prostor | 65 |
| 2.3.1.4. Računanje Coulombovog matričnog elementa u realnom prostoru .. | 73 |
| 2.3.2. Karakteristični pozicioni i dimenzioni parametri ekscitona | 79 |
| 2.3.3. Jačina oscilatora i optička aktivnost | 80 |
| 2.3.4. Procena amplitude oscilacija ekscitonskih stanja..... | 82 |

| | |
|--|------------|
| 2.4. Model ekscitona: adijabatska aproksimacija za dva lateralno spregnuta nanoprstena..... | 83 |
| 2.4.1. Analitički model jednočestičnih i ekscitonskih stanja..... | 85 |
| 2.4.2. Numerički model ekscitonske Schrödingerove jednačine..... | 88 |
| Glava 3 | |
| Ekscitoni u koncentričnim lateralno spregnutim nanoprstenovima | 92 |
| 3.1. Analitički model | 94 |
| 3.2. Numerički model sa uračunatom Coulombovom interakcijom..... | 100 |
| 3.3. Sažetak..... | 104 |
| Glava 4 | |
| Ekscitoni u napregnutim nanotačkama sličnim nanoprstenovima..... | 105 |
| 4.1. Uvod..... | 105 |
| 4.2. Ekscitonska stanja u nanošoljici | 109 |
| 4.3. Ekscitonska stanja u kvantnoj tački sličnoj prstenu..... | 115 |
| 4.4. Sažetak..... | 132 |
| Glava 5 | |
| Uticaj električnog polja na ekscitonske Aharonov-Bohmове oscilacije | 134 |
| 5.1. Uvod | 134 |
| 5.2. Model razmatrane strukture..... | 135 |
| 5.3. Numerički rezultati i diskusija..... | 136 |
| 5.4. Sažetak..... | 140 |
| Glava 6 | |
| Zaključak..... | 141 |
| Literatura | 148 |
| Dodatak A | |
| Aharonov-Bohmov efekat | 161 |
| Dodatak B | |
| Parametri zonske strukture III-IV jedinjenja i legura | 167 |
| Dodatak C | |
| Uticaj anizotropije elastičnosti na lokalizaciju elektrona i šupljina u realnim strukturama | 171 |

Glava 1

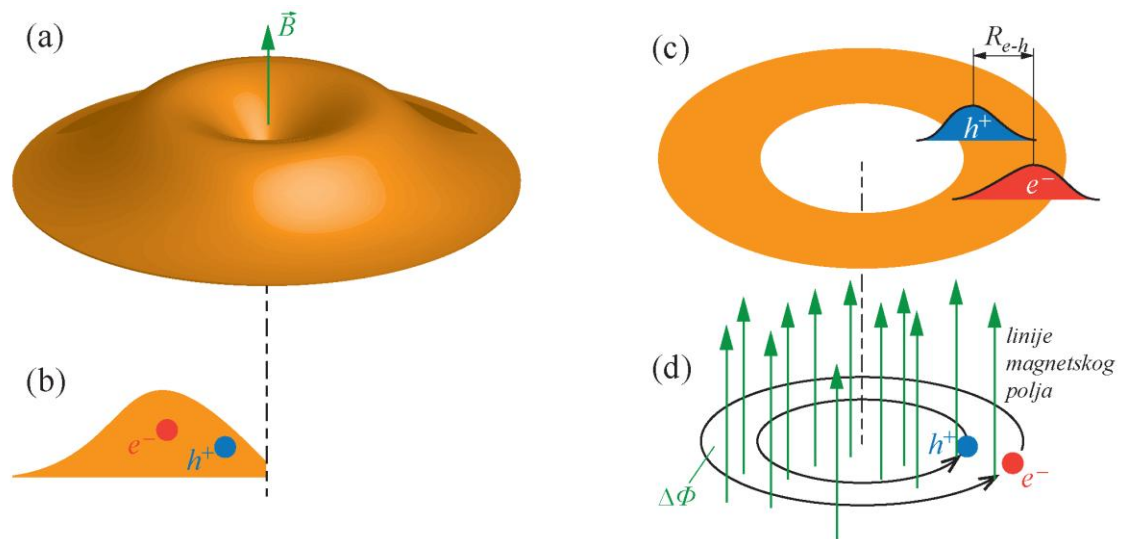
Uvod

Poluprovodničke nanostrukture tipa kvantne jame, kvantne žice i kvantne tačke intenzivno se istražuju već nekoliko decenija. One su našle veliki broj primena od kojih je značajno pomenuti svetleće diode (LED), lasere (Mano et al., 2006), detektore svetlosti (Wu et al., 2009) i tranzistore (Fuhrer et al., 2002). Kako je razvoj ovih struktura sve intenzivniji, raste i broj realizovanih i potencijalnih primena. Perspektiva današnjeg razvoja usmerena je ka konstrukciji kvantnog računara na bazi *nanotačaka* (*kvantnih tačaka*) i ka intenziviranju primene u nanoelektronici i fotonici. Posebna forma kvantnih tačaka su *nanoprstenovi* (*kvantni prstenovi*) (García et al., 1997).

U ovoj glavi dat je kratak pregled tehnika formiranja nanotačaka i nanoprstenova. Opisani su postupci proizvodnje nenapregnutih GaAs/(Al,Ga)As prstenastih struktura tehnikom kapljične epitaksije, kao i specifičnosti formiranja napregnutih samoasembliranih nanotačaka i nanoprstenova, baziranih na sistemima (In,Ga)As/GaAs, GaSb/GaAs, InAs/InP i (In,Ga)P/InP. Prema upotrebljenoj notaciji materijal koji je prvo naveden je materijal ostrva - tačka, a drugi je materijal koji okružuje tačku - matrica (engl.: matrix).

1.1. Nanoprsten

Od posebnog interesa za potencijalne primene je dobar kvalitativan i kvantitativan opis optičkih i elektronskih osobina nanostrukture. One su esencijalno definisane sastavom, veličinom i oblikom nanostrukture. Ukoliko je geometrija nanostrukture takva da je kretanje nosilaca naelektrisanja ograničeno u sva tri prostorna pravca, realizuje se nultodimenzioni (0D) elektronski gas, a formirane nanostrukture se nazivaju *nanotačke*.

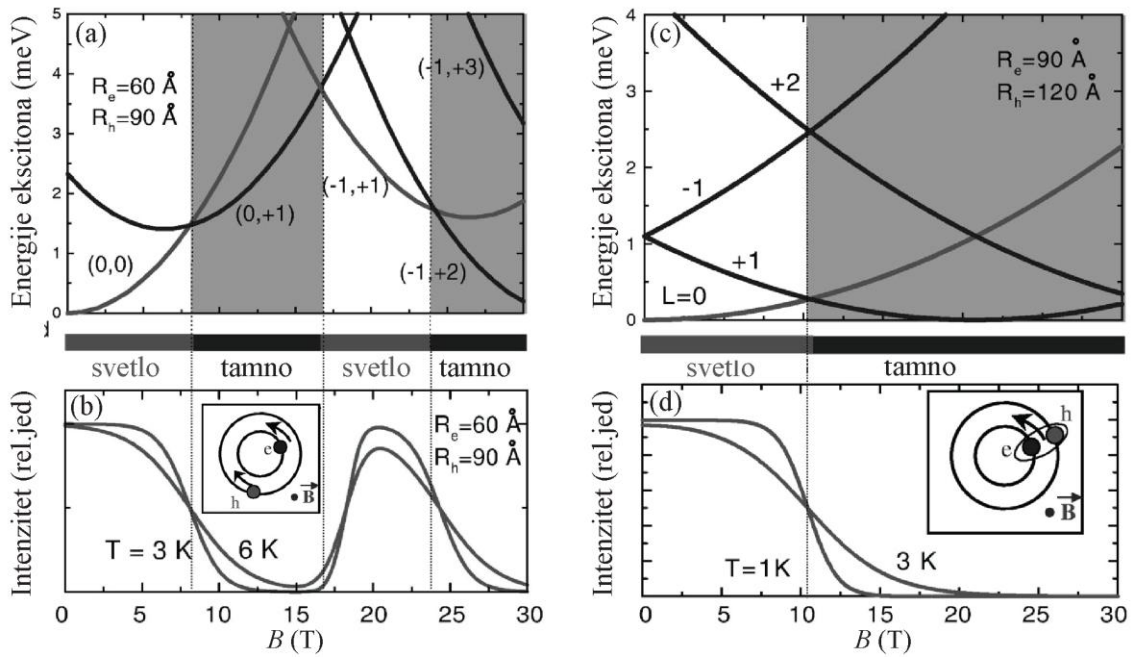


Slika 1.1. (a) Realistična predstava nanotačke u formi nanoprstena. (b) Šematski prikaz različite lokalizacije elektrona (e^- crvena) i šupljine (h^+ plava) u poprečnom preseku. (c) Skica talasne funkcije elektrona i šupljine u ravni strukture sa naznačenim efektivnim radijusom u ravni R_{e-h} . (d) Pojednostavljena predstava akumulacije faze polarizovanog ekscitona u normalnom magnetskom polju usled fluksa ($\Delta\Phi$ zelene strelice) polja kroz površinu između dve trajektorije.

Posebno interesantan oblik nanotačke je *nanoprsten*, koji poseduje dvostruko povezanu topologiju. Karakteristika struktura baziranih na nanoprstenovima su oscilacije energije osnovnog stanja pri promeni magnetskog polja. Do ovih oscilacija dolazi usled ukrštanja (preseka) stanja različitog orbitalnog momenta, koja se nazivaju *prelazi orbitalnih momenata*. Ustanovljeno je da kod jednostruko povezanih topologija

poput cilindrične ili piramidalne nanotačke ta ukrštanja ne postoje (Lee et al., 2004). Oscilacije energije osnovnog stanja su manifestacija Aharonov-Bohmovog (AB) efekta (Aharonov i Bohm, 1959) (videti Dodatak A), koji je za elektrone i šupljine teorijski i eksperimentalno ustanovljen kod velikog broja prstenastih mezoskopskih i nanoskopskih struktura. Postojanje ovog efekta je predviđeno i za par elektron-šupljina povezan Coulombovom interakcijom (*neutralni eksciton*) (Govorov et.al., 2002). Jednostavan teorijski model predviđa postojanje ovog efekta u strukturama gde su elektron i šupljina razdvojeni u radijalnom pravcu, kao na sl. 1.1. Tada kažemo da se elektron i šupljina “kreću po različitim putanjama”, koje se aproksimiraju koncentričnim jednodimenzionim (1D) prstenovima. Rastojanje između prstenova definiše polarizaciju ekscitona koja ima uticaj na amplitude oscilacija osnovnog stanja ekscitona, tzv. *ekscitonski Aharonov-Bohmov efekat* (Govorov et al., 2002). U određenim opsezima vrednosti primenjenog magnetskog polja moguće je da osnovno stanje ekscitona postane optički neaktivno, što predstavlja *optički ekscitonski Aharonov-Bohmov efekat* (Govorov et al., 2002). Slično kao jednočestični, ekscitonski AB efekat je posledica kvantne interferencije.

Prema predloženom 1D modelu, koji fenomenološki uvodi u razmatranje Coulombovu interakciju, postoje dva granična slučaja: A) kada su radijusi putanja elektrona i šupljine mali, što je režim slabe Coulombove interakcije i B) kada su radijusi putanja veliki, što je režim jake Coulombove interakcije. U režimu slabe interakcije jednostavni model predviđa višestruke prelaze orbitalnih momenata pri promeni magnetske indukcije B iz optički aktivnog (“svetlog”) u optički neaktivno (“tamno”) stanje, i obratno, što je prikazano na sl. 1.2(a). Na niskim temperaturama dolazi do velikih oscilacija intenziteta fotoluminiscencije, što je dato na sl. 1.2(b). Ove oscilacije predstavljaju optički ekscitonski AB efekat. Međutim, u režimu jake interakcije kada dođe do preseka svetlog i tamnog stanja, osnovno stanje ekscitona ostaje optički neaktivno pri daljem porastu B , kao na sl. 1.2(c). Iznad vrednosti B za koju dolazi do prelaza orbitalnih momenata intenzitet fotoluminiscencije se smanjuje, što se uočava na sl. 1.2(d). U ovom slučaju oscilacije fotoluminiscencije u funkciji magnetskog polja ne postoje, tj. ne postoji optički ekscitonski AB efekat.



Slika 1.2. (Levi panel) Slučaj slabe Coulombove interakcije, gde je radijus putanje elektrona $R_e=6$ nm, a šupljine $R_h=9$ nm: (a) nekoliko najnižih svojstvenih energija ekscitona i (b) intenzitet fotoluminiscencije u funkciji magnetskog polja. Umetak prikazuje slabo korelisani par elektron-šupljina u neutralnom ekscitonu. (Desni panel) Slučaj jake Coulombove interakcije, gde je $R_e=9$ nm, a $R_h=12$ nm: (c) nekoliko najnižih svojstvenih energija ekscitona i (d) intenzitet fotoluminiscencije u funkciji magnetskog polja. Umetak prikazuje jako korelisani par elektron-šupljina u neutralnom ekscitonu (Govorov et al., 2002).

Mogućnost podešavanja energije ekscitona pomoću spoljašnjeg magnetskog polja otvara mogućnosti praktične primene nanostrukture u nanoelektronici i fotonici. Ekscitonski AB efekat ima specifičan uticaj na energije međuzonskih prelaza koji se ogleda u ukrštanjima stanja različitog ugaonog momenta, dok kod optičkog ekscitonskog AB efekta mala promena intenziteta spoljašnjeg magnetskog polja može dovesti do velikih izmena intenziteta izlaznog zračenja. Dobar kvalitativni i kvantitativni proračun stanja ekscitona ima važnu ulogu za predviđanje optičkih osobina nanostrukture i daje smernice za razvoj mogućih fotonskih komponenta na bazi nanotačaka i nanoprstenova. Stoga je u teorijskoj analizi nanotačaka od izuzetnog

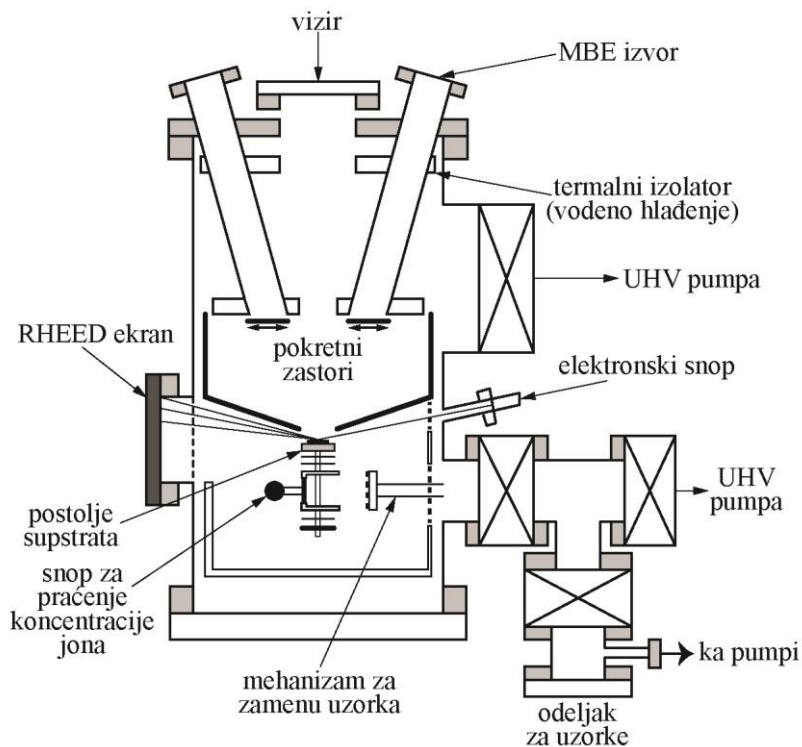
značaja modelovanje efekata koji utiču na elektronske i optičke osobine ovih struktura nanodimenzija, što je predmet ove disertacije.

Oblik i dimenzije nanotačaka zavise od primenjene tehnologije za njihovu izradu. Tako se relativno mali prstenovi i tačke (lateralnih dimenzija reda desetak nm) realizuju tehnikama samoasembliranja u Stranski-Krastanow modu (Stranski i Krastanow, 1938), uz prisutno naprezanje. S druge strane, primena novije tehnike kapljične epitaksije omogućava izradu nešto većih nanoprstenova, lateralnih dimenzija reda nekoliko desetina nm do reda 100 nm (Mano i Koguchi, 2005a; Mano et al., 2005b; Mano et al., 2005c). Tip konfiniranja značajno modifikuje elektronske i optičke osobine u magnetskom polju (Grochol et al., 2006). Na primer, nanotačke II tipa ispoljavaju intenzivan ekscitonski AB efekat u magnetskom polju. U trodimenzionim (3D) nenapregnutim nanoprstenovima I tipa ekscitonske AB oscilacije su vrlo male (Arsoski i Tadić, 2011). Razlog zanemarljivih oscilacija je značajno preklapanje talasnih funkcija osnovnog stanja elektrona i šupljine (slična lokalizacija), te se može reći da je eksciton slabo polarizovan. Skorašnji eksperimenti demonstrirali su postojanje optičkog ekscitonskog AB efekta u napregnutim prstenovima I tipa (Teodoro et al., 2010). Naime, naprezanje modifikuje efektivni potencijal što rezultuje u izmeni lokalizacije šupljina i dovodi do povećanja polarizacije ekscitona. Ovo su povoljni uslovi za pojavu efekata kvantne interferencije u ekscitonskom spektru.

Primeri sistema od kojih se formiraju nanoprstenovi su GaAs/(Al,Ga)As, (In,Ga)As/GaAs, GaSb/GaAs, itd. Nanotačke i nanoprstenovi mogu formirati vertikalne (naslagane) strukture, ili mogu biti lateralno spregnuti. Sistem vertikalno spregnutih nanotačaka ispoljava antiukrštanja energija ekscitonskih stanja u primenjenom električnom polju (Krenner et al., 2005). Poslednjih godina posebno interesantan tip sistema nanotačaka su koncentrični lateralno spregnuti nanoprstenovi, zbog potencijalne primene za višebojne fotodetektore (Mano et al., 2005c). Strukture spregnutih kvantnih tačaka se često nazivaju *molekuli kvantih tačaka* (engl. quantum dot molecules) ili *veštački molekuli* (engl. artificial molecules). Generalno, osobine ovih veštačkih molekula zavise od oblika i dimenzija nanotačaka, njihovog rasporeda i tipa konfiniranja.

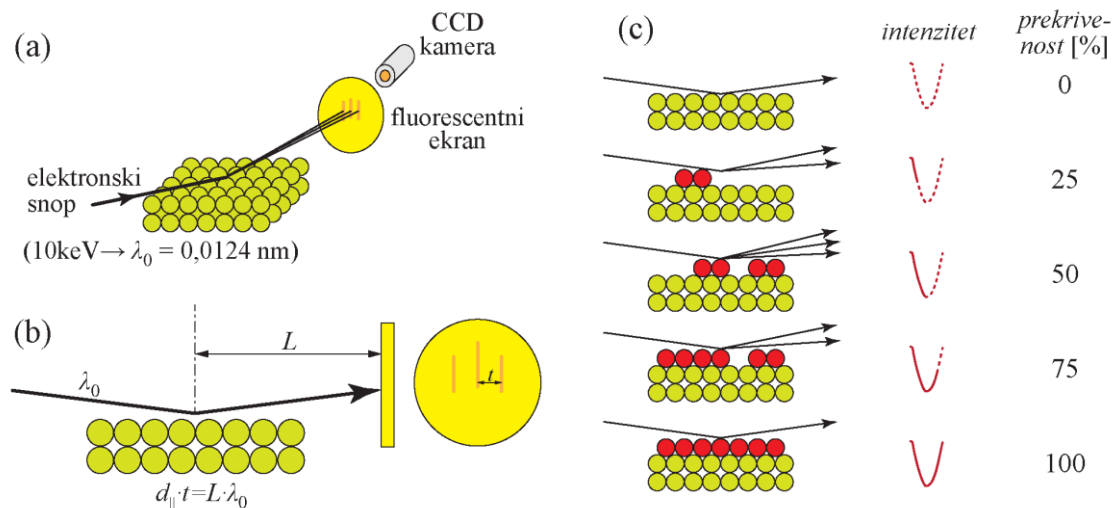
1.2. Tehnologije proizvodnje nanotačaka i nanoprstenova

Za proizvodnju nanotačaka i nanoprstenova koristi se više tehnika, od kojih je izvestan broj razvijen poslednjih nekoliko godina. Među njima su litografske tehnike (Keyser et al., 2003), samoorganizovani rast pri samoasembliranju (Granados i García, 2003; Hanke et al., 2007), kapljična epitaksija (engl. Droplet Epitaxy – DE) (Mano i Koguchi, 2005a; Mano et al., 2005c; Gong et al., 2005; Huang et al., 2006; Wang et al., 2005b; Lee et al., 2006) i mnoge druge (Yu et al., 2007; Robinson et al., 2007). Iako široko korišćene u mikroelektronici, litografske tehnike pokazuju izvesna tehnološka ograničenja u proizvodnji nanotačaka. U nanoelektronici litografija je praktično nezaobilazna faza u tehnologiji proizvodnje slobodno-stojećih kvantnih struktura (Schlesinger i Kuech, 1986). S druge strane, kapljična epitaksija predstavlja relevantnu tehniku za narastanje nenapregnutih nanotačaka (Mano i Koguchi, 2005a; Mano et al., 2005b; Mano et al., 2005c), dok samoorganizovani rast pri samoasembliranju predstavlja nezaobilaznu tehniku narastanja napregnutih struktura (Granados i García, 2003).



Slika 1.3. Šematski prikaz aparature za epitaksiju molekularnim snopom (Yu i Cardona, 1994).

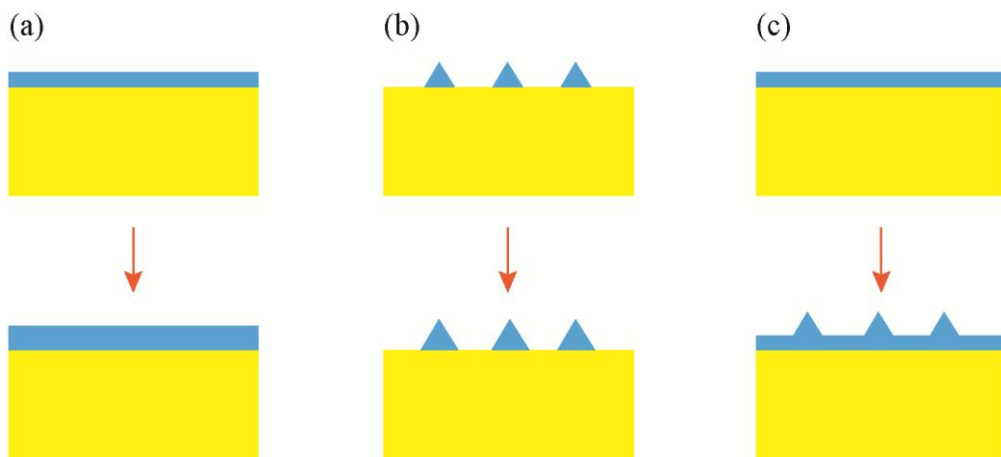
Sve navedene tehnike fabrikacije bile bi nezamislive bez *epitaksije molekularnim snopom* (engl. **M**olecular **B**eam **E**pitaxy–**MBE**) (Cho i Arthur, 1975). Šematski prikaz aparature za MBE dat je na sl. 1.3 (Yu i Cardona, 1994). Ovaj metod omogućava narastanje visokokvalitetnih slojeva sa izuzetnim električnim i optičkim svojstvima, kao što su velika pokretljivost elektrona i visoka kvantna efikasnost. Visoka čistoća naraslih slojeva posledica je niskog pritiska u reaktoru, reda 10^{-8} Pa. Iako su predložene modifikacije MBE postupka rasta nanotačaka (Watanabe et al., 2000) karakteristike dobijenih slojeva i struktura nisu idealne usled nesavršenosti na razdvojnoj površi i slučajnog rasporeda atoma u legurama. Takođe, veoma bitan metod narastanja slojeva za primenu u nanoelektronici je metalo-organska hemijska depozicija iz parne faze (engl. **M**etal-**o**rganic **C**hemical **V**apour **D**eposition–**MOCVD**) (Dapkus, 1982). Kod MOCVD hemijske reakcije koje se odvijaju na površini narastajućeg sloja utiču na proces narastanja. Ovo nije slučaj kod MBE koja je tehnika fizičke depozicije. Treba napomenuti da su kod MOCVD pritisci u reakcionoj komori značajno veći (od 2 kPa do atmosferskog), dok su izvori metaloorganska jedinjenja i hidridi, kao kod MBE sa gasnim izvorima.



Slika 1.4. Ilustracija RHEED opreme za karakterizaciju: (a) 3D prikaz i (b) poprečni presek. (c) Principna šema formiranja oscilacija u intenzitetu RHEED signala pri narastanju monosloja kristala.

Važnu ulogu u praćenju procesa narastanja pri MBE ima refleksiona difrakcija elektrona visoke energije (engl. Reflection High Energy Electron Diffraction – RHEED) (Atwater et al., 1997). U ovom metodu snop elektrona energije reda nekoliko desetina keV fokusira se na površ kristala pod velikim upadnim uglom i nakon rasejanja na periodičnom potencijalu površi kristala pada na ekran formirajući karakterističnu difrakcionu sliku (sl. 1.4(a) i (b)). Veliki ugao incidencije redukuje dubinu prodiranja elektrona na najviše par monoslojeva. Intenzitet difraktovanog snopa se posredstvom fluorescentnog ekrana prati CCD kamerom u realnom vremenu (sl. 1.4(a)). Praćenjem promene intenziteta signala na ekranu prati se proces narastanja strukture (sl. 1.4(c)). Ovaj metod se primenjuje u uslovima ultra visokog vakuma (engl. Ultra High Vacuum–UHV) kako bi se minimizirao efekat rasejanja na pozadinskom gasu.

Procesi narastanja heterostruktura mogu se razvrstati u tri karakteristična moda epitaksijalnog rasta: (a) Frank-van der Merwe (za narastanje slojeva, dvodimenzionih (2D) struktura), (b) Volmer-Weber (za narastanje ostrva, 3D struktura) i (c) Stranski-Krastanow (za narastanje slojeva i ostrva na sloju), prikazani su na sl. 1.5, redom. Dominantan mod narastanja zavisi od izbora materijala heterospoja. Kombinacija materijala za izradu nanostrukture se karakteriše energijom spoja, površinskom energijom nanostrukture i elastičnom energijom usled naprezanja.



Slika 1.5. Šematski prikaz mogućih modova rasta: (a) Frank-van der Merwe, (b) Volmer-Weber i (c) Stranski-Krastanow. Gornji panel prikazuje morfologiju sloja u početnoj, a donji u završnoj fazi narastanja.

U slučaju nenapregnutih nanostrukture rast je određen energijom spoja i površinskom energijom strukture. Ukoliko je zbir energije spoja i površinske energije narastajućeg epi-sloja manji od površinske energije supstrata, materijal će se deponovati na supstratu formirajući „vlažeći sloj“ (engl. wetting layer), a karakterističan mod rasta je Frank-van der Merwe. U suprotnom, doćiće do formiranja ostrva u Volmer-Weberovom modu narastanja, kao kod metoda kapljične epitaksije, koja je diskutovana u narednom poglavlju. U slučaju kada postoji neusaglašenost rešetki materijala supstrata i epi-sloja inicijalan rast obično je „sloj po sloj“. Sa povećanjem debljine epi-sloja raste energija usled naprezanja te energija spoja postaje manja od zbira elastične i površinske energije. Kako bi se smanjila energija strukture formiraju se ostrva u kojima dolazi do relaksacije naprezanja. Finalna forma strukture su ostrva na „vlažećem sloju“. Ovaj mod rasta se naziva Stranski-Krastanow (SK).

1.2.1. Modifikovana kapljična epitaksija

Kapljična epitaksija je intenzivno izučavan metod za narastanje nanotačaka, a uz izvesne modifikacije se već više od decenije primenjuje za proizvodnju sistema nenapregnutih nanotačaka, a najčešće sistema baziranih na GaAs/(Al,Ga)As (Somaschini et al., 2010). Kako u procesu narastanja ne postoji naprezanje materijala, javlja se tendencija formiranja slojevite 2D strukture. Redukcijom nekompenzovanih atoma As na površini supstrata dovođenjem Al i Ga, dobija se stabilizovana (Al,Ga)As podloga koja omogućava uslove za nukleaciju kapljica nakon depozicije Ga u narednoj fazi (Wang i Yang, 2005a). Eksperimentalno je ustanovljeno da je verovatnoća za nukleaciju metalnih kapljica veća ukoliko je temperatura supstrata relativno niska (~180°C) (Watanabe et al., 2000). Na ovako niskim temperaturama proces nukleacije se smatra za prilično nestacionaran, te su karakteristike formiranih kapljica veoma loše. Takođe, postoje velike varijacije morfologije formiranih kapljica, što dovodi do široke raspodele dimenzija GaAs nanotačaka dobijenih nakon procesa kristalizacije (Watanabe et al., 2000), odnosno velikog nehomogenog širenja spektralnih linija dobijenog ansambla. Nakon nukleacije kapljica, na istoj temperaturi od 180°C odvija se naredna

faza kristalizacije dovođenjem fluksa As, kao i formiranje tankog (~10 nm) pokrovnog sloja (engl. cap layer) (Al,Ga)As metodom epitaksije potpomognute migracijom (engl. **Migration Enhanced Epitaxy–MEE**). Razlog za održavanje niske temperature do trenutka formiranja pokrovnog sloja je onemogućavanje rekristalizacije GaAs u 2D strukturu, ali su karakteristike dobijene legure prilično loše (Sanguinetti et al., 2003). Potom sledi nanošenje debljeg (Al,Ga)As pokrovnog sloja na povišenoj temperaturi uz produženo (1 h na temperaturi 580°C) odgrevanje uzorka, čime se smanjuju površinske nepravilnosti i zapreminski defekti, koji su posledica niskotemperaturnog procesa (Sanguinetti et al., 2002). Pri odgrevanju dolazi i do difuzije atoma iz III grupe, što dovodi do pojave gradijenta molarnog udela u oblasti prvobitnih granica kvantne tačke. Merenjem spektra fotoluminiscencije (Watanabea et al., 2001) utvrđen je porast svojstvenih vrednosti energija ekscitonskih stanja (plavi pomak u spektru), što je ekvivalentno smanjenju efektivnih dimenzija kvantne tačke. Takođe je uočen i porast disperzije dimenzija kvantnih tačaka, odnosno širenje spektralne linije na niskim temperaturama. Međutim, finalne morfologije kvantnih tačaka su bolje, što se može uočiti na spektralnim karakteristikama za visoke vrednosti incidentnog zračenja (Sanguinetti et al., 2002). Pojedine varijante tehnološkog procesa podrazumevaju formiranje GaAs vlažećeg sloja u inicijalnoj fazi (Sanguinetti et al., 2003), čime se mogu ostvariti fina podešavanja emisionog spektra proizvedenih nanostrukture. Uticaj ovog sloja može biti značajno umanjen u fazi odgrevanja, što je posledica interdifuzije Al i Ga, koja dovodi do smanjenja efektivne debljine sloja. Ukoliko je vlažeći sloj prilično tanak (par monoslojeva), ili se temperatura odgrevanja poveća (veća od 700°C), ili ukoliko se proces odgrevanja produži (duže od 1 h), uticaj vlažećeg sloja može postati zanemarljiv (Watanabea et al., 2001). Ovaj fenomen je nazvan „ispiranje vlažećeg sloja“ (engl. wetting layer washout).

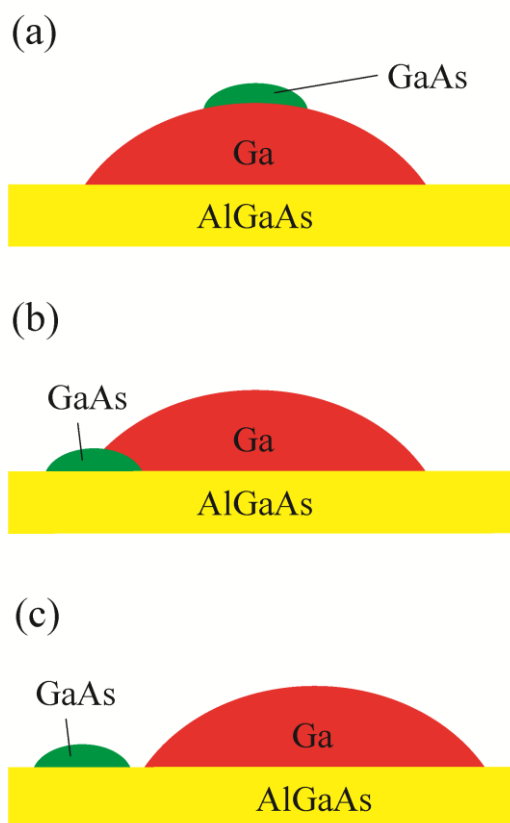
Glavni problem za širu primenu nenapregnutih GaAs/(Al,Ga)As nanotačaka je odsustvo hijerarhije u površinskoj raspodeli u realizovanom ansamblu. Razlog za to je odsustvo naprezanja inicijalnih Ga kapljica prema supstratu, što dovodi do njihove nasumične lokalizacije, te je i raspored fabrikovanih GaAs nanotačaka slučajan. U cilju mapiranja rasporeda tačaka primenjen je metod površinski selektivne metalorganske epitaksije iz parne faze (engl. **Selective Area Metal-Organic Vapor Phase Epitaxy, SA-MOVPE**), kojom se prave šabloni tipa užlebljenja oblika slova V (engl. V-groove) na

supstratu (Yang i Liu, 2000). Ovi šabloni se standardno koriste u proizvodnji GaAs kvantnih žica (Percival et al., 2000). Proračun Gibbsove slobodne energije pokazuje da je mnogo veća verovatnoća nukleacije kapljica u V-žlebovima nego na ravnoj površi, čime se postiže raspored kapljica definisan rasporedom udubljenja. Alternativni postupak formiranja šablona zasniva se na složenom metodu koji se odvija u nekoliko koraka (Rastelli et al., 2004). Najpre narasta uređena struktura napregnutih InAs nanotačaka na GaAs podlozi na čijem se mestu, nakon selektivnog nagrivanja, formiraju „nanorupe”. Karakteristični šablon žlebova ostaje na podlozi i nakon narastanja (Al,Ga)As barijernog sloja, čime se određuje dalji raspored kapljica i finalnih struktura.

Prethodno navedene modifikacije tehnike kapljične epitaksije dovode do daleko uniformnije raspodele dimenzija kapljica u ansamblima, kao i visok stepen aksijalne simetrije jedinki. Metodom mikroskopije atomskim silama (engl. **Atomic Force Microscopy–AFM**) u fazi pre nanošenja pokrovnog sloja ustanovljen je izvestan stepen asimetrije kod struktura lateralno spregnutih prstenova. Utvrđena je elongacija u ravni podloge od svega 3%, kao i neznatno odstupanje visine strukture duž cirkularne koordinate (Mano et al., 2005c). Iako mala, ova morfološka anizotropija može dovesti do spektralnog širenja usled fenomena *spektralne difuzije* (engl. spectral diffusion), koja je u skorije vreme eksperimentalno verifikovana i teorijski razjašnjena (Abbarchi et al., 2008). Pravilnim odabirom tehnoloških parametara mogu se proizvesti visokosimetrične nenapregnute strukture precizno definisanih dimenzija, što predstavlja glavnu prednost modifikovane kapljične epitaksije. Glavni nedostatak nenapregnutih nanotačaka formiranih ovim metodom je relativno velika minimalna lateralna dimenzija, koja kod eksperimentalno realizovanih struktura iznosi nekoliko desetina nm.

Poslednjih godina fokus istraživanja pomenutog metoda usmeren je na fabrikaciju strukture lateralno spregnutih nanotačaka i nanoprstenova na bazi GaAs/(Al,Ga)As (Mano i Koguchi, 2005a; Mano et al., 2005b), gde se izmenom fluksa As kontroliše balans kristalizacije unutar i po obodu kapljice. Na ovaj način mogu se formirati prstenaste strukture precizno definisanih dimenzija. Odvijanje procesa kapljične epitaksije za proizvodnju nanoprstenova može se podeliti u dve sukcesivne faze: najpre se formiraju tečne kapljice, a zatim sledi faza kristalizacije. U slučaju nanoprstenova na bazi GaAs/(Al,Ga)As u prvoj fazi dolazi do formiranja Ga kapljica depozicijom Ga na (Al,Ga)As supstrat. U drugoj fazi vrši se kristalizacija Ga u GaAs

dovođenjem atoma As, što predstavlja ključan korak tehnike kapljичne epitaksije. Iako je eksperimentalno ustanovljeno da do kristalizacije u većini slučajeva najpre dolazi na ivicama kapljice, ovaj fenomen je tek u skorije vreme teorijski razjašnjem (Li i Yang, 2008).



Slika 1.6. Šematski dijagrami oblasti nukleacije GaAs (zeleno) u odnosu na Ga-kapljicu (crveno) i AlGaAs supstrat (žuto): (a) na vrhu slobodne površi Ga kapljice, (b) u oblasti dodira slobodne površi kapljice sa supstratom i (c) na površini supstrata u neposrednoj blizini Ga kapljice.

Proces nukleacije željene strukture je veoma složen. Teorijski se najčešće analizira nekoliko oblasti gde može doći do kristalizacije: (a) po slobodnoj površi Ga kapljice, (b) u oblasti dodira slobodne površi kapljice sa supstratom i (c) na površi supstrata u neposrednoj blizini Ga kapljice (sl. 1.6). Sam proces kristalizacije ukazuje na to da se atomi Ga iz kapljice „troše“ u reakciji sa atomima As. Termodinamičkim

pristupom u analizi nukleacije (Yang i Liu, 2000) jednostavno se može pokazati da je izmena ukupne Gibbsove slobodne energije (površinske i zapreminske) minimalna u slučaju kristalizacije u oblasti dodira slobodne kapljice i supstrata (sl. 1.6(b)). Stoga je, u energetsom smislu, najveća verovatnoća kristalizacije na ivicama kapljice. Ovo ne znači da će do kristalizacije isključivo doći na obodu same kapljice (tj. dimenzije nastalog prstena nisu definisane samo inicijalnom dimenzijom Ga kapljice).

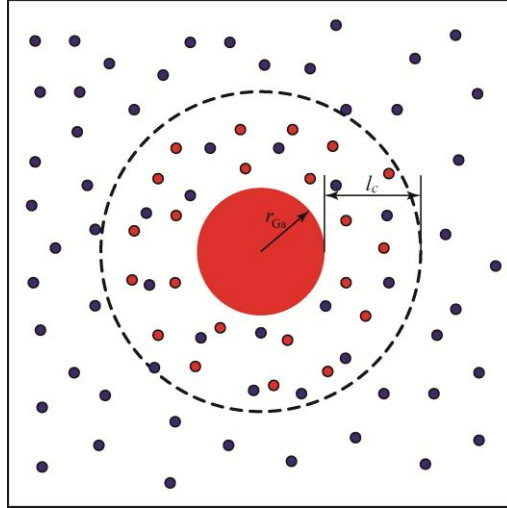
Za detaljnu analizu morfologije strukture neophodno je u razmatranje uzeti i kinetiku narastanja strukture. Atomi Ga mogu putem difuzije da napuste kapljicu. Rastojanje koje će oni preći ne zavisi samo od koeficijenta difuzije D_{Ga} već i od verovatnoće interakcije sa atomima As. U tom smislu, pri razmatranju kinetike procesa uvodi se pojam *difuzione oblasti*. Smatra se da je procenat atoma Ga koji napusti ovu oblast zanemarljivo mali (sl. 1.7). Koristeći Fickov zakon može se pokazati da je količina atoma u jedinici vremena, koja putem difuzije dolazi do granice difuzione oblasti (Li i Yang, 2008):

$$N_{\text{Ga}} = -2\pi h_0 D_{\text{Ga}} \frac{0 - C_0}{\ln \frac{r_{\text{Ga}} + l_C}{r_{\text{Ga}}}}, \quad (1.1)$$

gde je h_0 debljina jednog monosloja, D_{Ga} koeficijent difuzije atoma Ga, a C_0 se odnosi na koncentraciju atoma Ga na granici kapljice i pretpostavlja se da je konstanta tokom procesa difuzije. Pošto je koncentracija atoma Ga u oblasti difuzije relativno mala, pretpostavlja se da koeficijent difuzije ne zavisi od koncentracije i dat je empirijskom relacijom (Li i Yang, 2008):

$$D_{\text{Ga}}(T) = D_{\text{Ga}}^{\infty} e^{-\frac{E_{\text{Ga}}}{k_B T}}, \quad (1.2)$$

gde je T apsolutna temperatura na kojoj se odvija proces difuzije, k_B Boltzmanova konstanta, E_{Ga} *aktivaciona energija* (energija difuzione barijere), D_{Ga}^{∞} vrednost koeficijenta difuzije ekstrapolirana za teorijski beskonačno veliku vrednost temperature.



Slika 1.7. Šematski prikaz procesa difuzije atoma Ga (crveni kružići) i As (plavi kružići). Veliki krug (crvene boje) poluprečnika r_{Ga} predstavlja Ga-kapljicu, a isprekidana linija granicu oblasti difuzije atoma Ga.

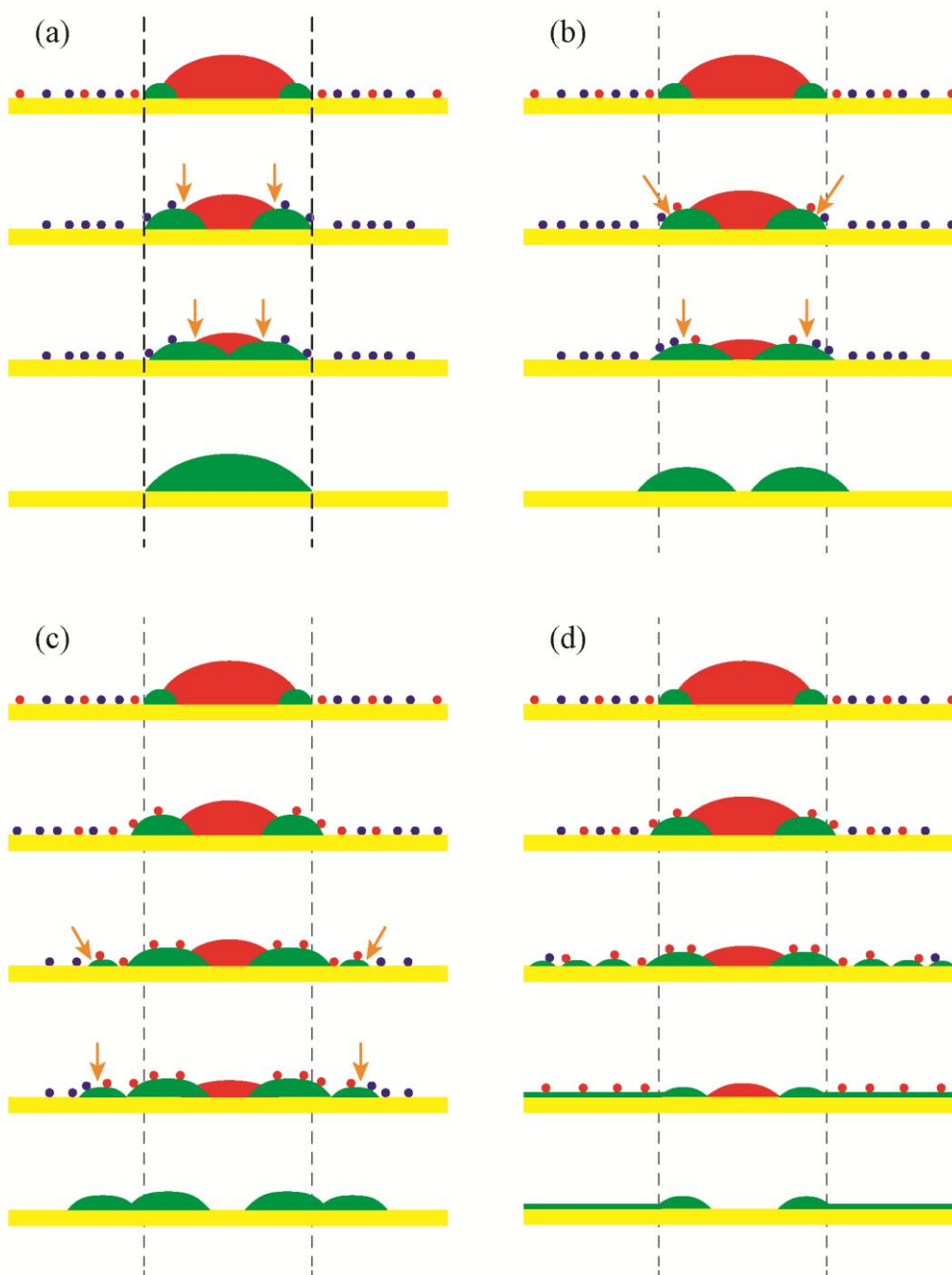
Pošto u sistemu nema naprezanja smatra se da su koeficijenti difuzije na površini supstrata i na površini strukture koja narasta isti. Količina atoma As koja biva „uhvaćena” u difuzionoj oblasti u jedinici vremena je (Li i Yang, 2008):

$$N_{As} = 2\pi(r_{Ga} + l_C)a_0R \frac{v_1}{v_0} e^{\frac{(E_a - E_d)}{k_B T}}, \quad (1.3)$$

gde je a_0 rastojanje između površinskih stanja, v_0 i v_1 frekvencije termalnih vibracija u normalnom i lateralnom pravcu, E_a adsorpciona energija, E_d energija barijere između susednih površinskih stanja i $R = P / \sqrt{2\pi m k_B T}$ količina atoma As koja u jedinici vremena pada na supstrat, gde se umesto fluksa atoma As uvodi P – ekvivalent pritiska snopa (engl. beam equivalent pressure), a m je masa jednog atoma As. U stacionarnom stanju količina atoma As „uhvaćenih“ u oblasti difuzije jednaka je količini atoma Ga ($N_{Ga} = N_{As}$), što uz uslov da van difuzione oblasti nema atoma Ga daje izraz za l_C :

$$(r_{Ga} + l_C) \ln \frac{r_{Ga} + l_C}{r_{Ga}} = \frac{h_0 D_{Ga}^\infty C_0 v_0}{a_0 v_1} \frac{\sqrt{2\pi m k_B T} e^{\frac{\Delta E}{k_B T}}}{P}, \quad (1.4)$$

gde je $\Delta E = -E_{Ga} - E_a + E_d$.

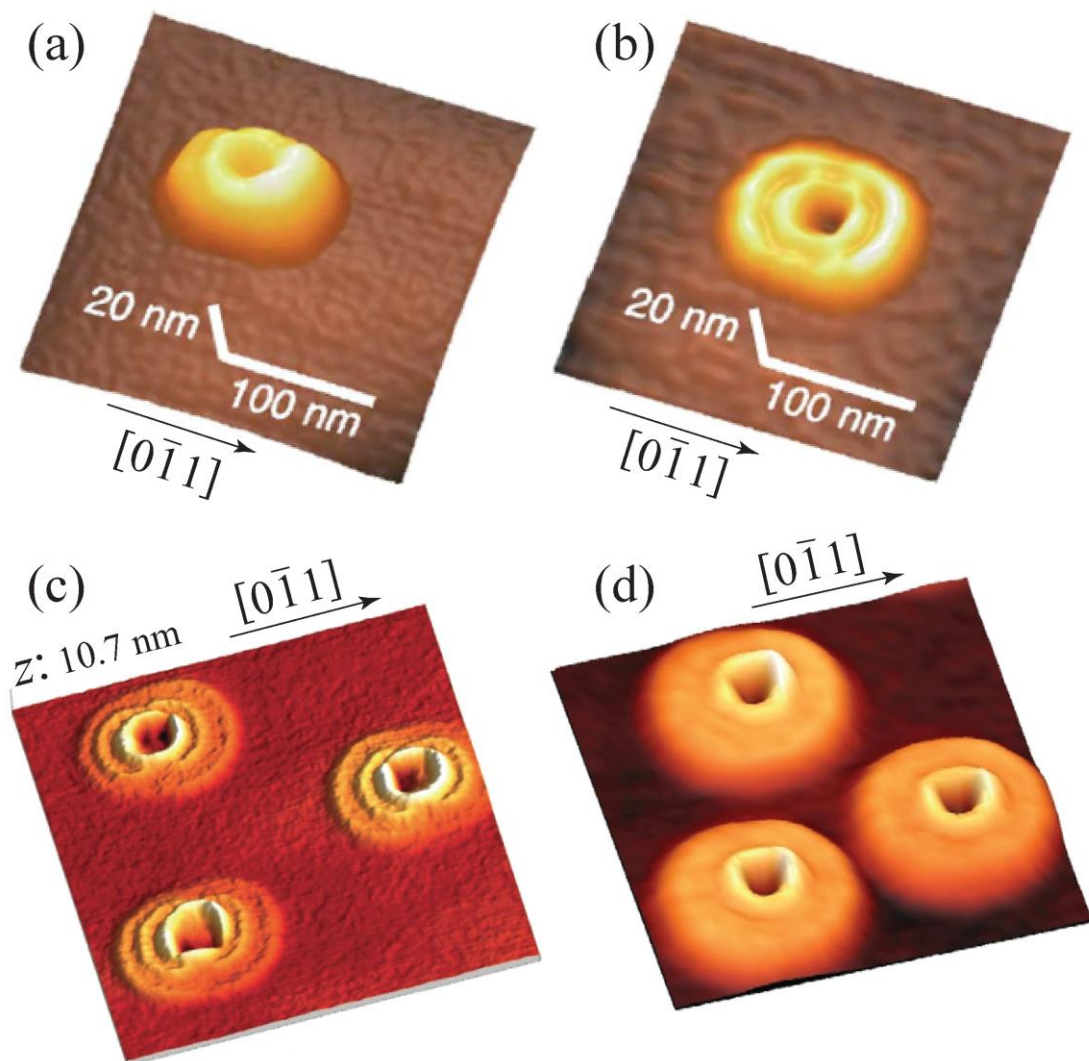


Slika 1.8. Šematski prikaz narastanja: (a) kvantne tačke, (b) jednog kvantnog prstena (SQR), (c) dva lateralno spregnuta kvantna prstena (DQR), (d) strukture nanoprstena na nanodisku (NON) u završnoj fazi ili višestrukih koncentričnih lateralno spregnutih prstenova (MQR) u međufazi.

Na sl. 1.8 prikazano je nekoliko primera evolucije nanostrukture u zavisnosti od dimenzija oblasti difuzije. U slučaju kada atomi Ga slabo difunduju van kapljice (dimenzije difuzione oblasti približno će biti jednake dimenziji kapljice, tj. l_C je malo) kristalizacija atoma Ga i As prati obod kapljice. Tada će se proces narastanja odvijati od oboda ka unutrašnjosti kapljice te će forma nanostrukture biti kvantna tačka približno iste (nešto veće) dimenzije kao početna kapljica (sl. 1.8(a)). Kada je oblast difuzije nešto veća od dimenzija kapljice ($l_C \sim r_{Ga}$) atomi Ga koji difuzijom napuštaju kapljicu kristalizovaće sa atomima As u neposrednoj blizini Ga kapljice. U početnom stadijumu doći će do kristalizacije van kapljice i narastanja strukture od inicijalne oblasti Ga kapljice. Kako se dimenzije kapljice tokom procesa nukleacije strukture smanjuju usled “trošenja” atoma Ga pri kristalizaciji, u kasnijoj fazi nukleacije rezultatni smer narastanja je prema centru strukture (sl. 1.8(b)). Narasla struktura tada je jedan kvantni prsten (engl. **single quantum ring–SQR**) (Mano i Koguchi, 2005a). U slučaju kada je l_C veće od početnog radijusa Ga kapljice, pored primarne nukleacije koja započinje na obodu kapljice, dolazi do sekundarne nukleacije na granicama difuzione oblasti. Primarna nukleacija rezultuje u narastanju unutrašnjeg prstena ka centru strukture i dominantna je do trenutka formiranja sekundarnog prstena koji zahvati većinu atoma As i usporava dalji rast unutrašnjeg prstena. Forma narasle strukture (sl. 1.8(c)) su dva koncentrična lateralno spregnuta kvantna prstena (engl. **double quantum ring–DQR**) (Mano et al., 2005c). Kada je l_C mnogo veće od početnog radijusa Ga kapljice, atomi Ga putem difuzije dospevaju na veliko rastojanje od kapljice što rezultuje u formiranju nanostrukture oblika višestrukih koncentričnih lateralno spregnutih prstenova (engl. **multiple quantum ring–MQR**) (Somaschini et al., 2009), nanodiska na koji naleže nanoprsten (engl. **nanodisk on nanoring–NON** ili **coupled ring disk–CRD**) (Somaschini et al., 2010), ili njima srodne strukture sa smanjenom debljinom sloja unutar prstena i obodom velikog radijusa (sl. 1.8(d)).

Elektronske i optičke osobine generalno zavise od veličine, oblika i sastava nanotačke. Tehnikom kapljične epitaksije moguće je realizovati nanotačke interesantnog oblika i visokog stepena aksijalne simetrije (Mano et al., 2005c; Kuroda et al., 2005; Abbarchi et al., 2008; Somaschini et al., 2009; Somaschini et al., 2010). AFM slike najčešće analiziranih struktura prstenova u fazi pre nanošenja pokrovnog sloja date su na sl. 1.9. Očigledno je da se izborom tehnoloških parametara mogu definisati

dimenzije i oblik finalne strukture (Li i Yang, 2008). Nanotačke oblika sličnog nanoprstenovima u suštini predstavljaju varijante višestrukih kvantnih prstenova (Lee et al., 2006) i približno su aksijalno simetrične, što se lako može uočiti sa sl. 1.9. Ovo će biti korišćeno u drugom delu disertacije u cilju postavljanja modela realističnog poprečnog preseka analiziranih struktura.



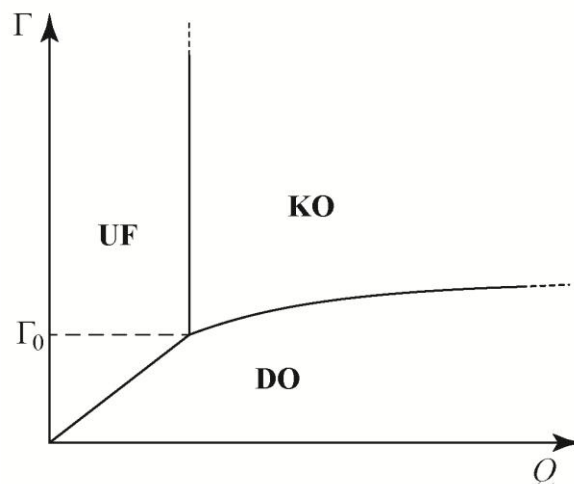
Slika 1.9. AFM slike u fazi pre nanošenja pokrovnog sloja: (a) kvantnog prstena–SQR (Kuroda et al., 2005), (b) dva lateralno spregnuta kvantna prstena–DQR (Kuroda et al., 2005), (c) tri lateralno spregnuta kvantna prstena–MQR (Somaschini et al., 2009) i (d) nanodiska na koji naleže nanoprsten–NON (Somaschini et al., 2010).

1.2.2. Narastanje nanoprstenova u prisustvu napreznja

Istaknuti mehanizam formiranja napregnutih nanostrukture je Stranski-Krastanow mod narastanja (Stranski i Krastanow, 1938). Najraniji teorijski modeli fizike SK rasta predviđali su nasumični raspored naraslih ostrva. Kasnija eksperimentalna istraživanja InAs/GaAs nanostrukture (Goldstein et al., 1985) pokazala su da su narasla 3D ostrva *koherentno* spregnuta napreznjem. Relaksacija elastične energije pri formiranju ostrva koherentno spregnutih napreznjem vezana je za Asaro-Tiller-Grinfield nestabilnost napregnutog sloja na naboranoj površini (Asaro i Tiller, 1972; Grinfield, 1986). Ovaj efekat je izražen kod jako nabranih površina i prvi put uočen kod nanotačaka (ostrva nano dimenzija) (Vanderbilt i Wickham, 1991). Ostrva male visine u odnosu na lateralnu dimenziju su praktično nerelaksirana, dok su ostrva velike visine u odnosu na lateralnu dimenziju skoro potpuno relaksirana. Stoga, elastična relaksacija u velikoj meri zavisi od oblika ostrva, a za dati oblik ostrva energija elastične deformacije je proporcionalna zapremini strukture.

Teorijskom analizom mehanizama elastične relaksacije u sistemima sa napreznjem dobijen je „fazni“ dijagram koji povezuje sve tri moguće morfologije naraslih struktura: *uniformni film–UF*, *dislocirana ostrva–DO* i *koherentna ostrva–KO* (sl. 1.10) (Vanderbilt i Wickham, 1991). Ustanovljeno je da morfologija strukture zavisi od količine deponovanog materijala Q , kao i od odnosa energije dislokacije razdvojne površi (interfejsa) pri formiranju ostrva $E_{\text{interf.}}^{\text{disl.}}$ i izmene površinske energije $\Delta E_{\text{povrs.}}$, i opisana je morfološkim parametrom $\Gamma = E_{\text{interf.}}^{\text{disl.}} / \Delta E_{\text{povrs.}}$.

Ukoliko je $\Delta E_{\text{povrs.}}$ pozitivno i ima veliku vrednost (slučaj formiranja velikih ostrva) ili kada je $E_{\text{interf.}}^{\text{disl.}}$ relativno malo (slučaj kada je visina strukture mnogo manja od lateralne dimenzije), parametar Γ ima manju vrednost od kritične Γ_0 . Tada u početnom stadijumu depozicije (male vrednosti Q) dolazi do formiranja uniformnog filma (oblast **UF** na sl. 1.10), dok sa povećanjem količine deponovanog materijala dolazi do formiranja dislociranih ostrva (oblast **DO** na sl. 1.10).



Slika 1.10. Fazni dijagram izmene morfologije narasle strukture u funkciji količine deponovanog materijala Q i faktora $\Gamma = E_{\text{interf.}}^{\text{disl.}} / \Delta E_{\text{povrs.}}$. Oznake **UF**, **DO** i **KO** označavaju *uniformni film*, *dislocirana ostrva* i *koherentna ostrva*, redom (Vanderbilt i Wickham, 1991).

Ukoliko je $\Delta E_{\text{povrs.}}$ pozitivno i ima malu vrednost (slučaj formiranja malih ostrva) ili kada je $E_{\text{interf.}}^{\text{disl.}}$ relativno veliko (slučaj kada je visina strukture mnogo veća od lateralne dimenzije), parametar Γ ima vrednost značajno veću od kritične Γ_0 . Tada, nakon početnog stadijuma depozicije (kada dolazi do formiranja uniformnog filma za male količine deponovanog materijala), dolazi do formiranja koherentnih ostrva. Na osnovu priraštaja krive koja razgraničava oblasti **KO** i **DO** očigledno je da će sa povećanjem količine deponovanog materijala u jednom trenutku doći do formiranja dislociranih ostrva (sl. 1.10). Moguće je proceniti kritičnu vrednost dimenzije koherentnih ostrva $L_{\text{krit.}}$ iznad koje dolazi do takozvanog Ostwaldovog *zrenja* (Ostwald, 1900) kako bi se smanjila ukupna vrednost površinske energije, a samim tim i ukupna energija naborane strukture. U procesu zrenja dolazi do narastanja velikih kapljica na račun malih koherentnih ostrva, a njihov raspored je u velikoj meri nasumičan (dobija se sistem velikih dislociranih ostrva).

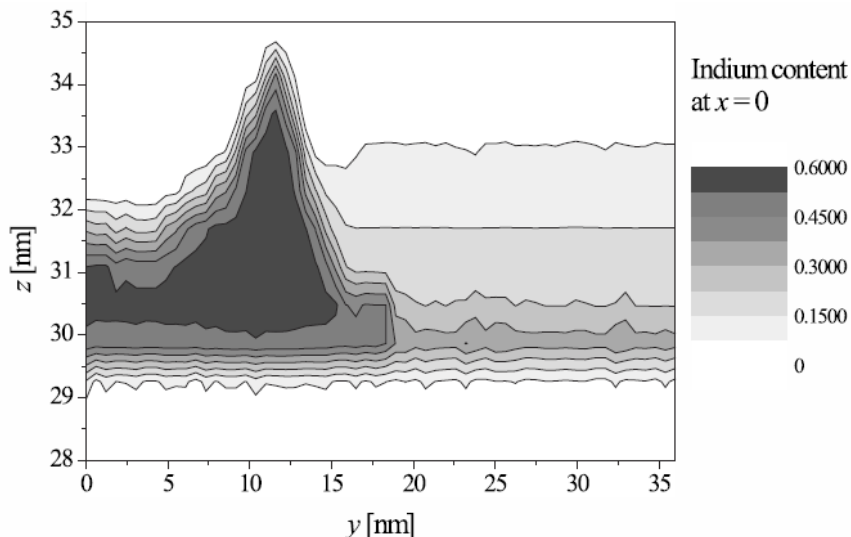
Kontrolom količine deponovanog materijala može se dobiti poželjna struktura koherentnih ostrva približno istih dimenzija i oblika. Esperimentalne studije koherentnih ostrva kod heterospojeva InGaAs/GaAs (narsalih u [001] pravcu) i InAs/GaAs (narsalih u [001] pravcu) (Leonard et al., 1993; Grundmann et al., 1995; Cirilin et al., 1995)

ukazuju na izuzetno usku raspodelu dimenzije ostrva oko najverovatnije vrednosti, što nije posledica SK moda rasta. Takođe je ustanovljeno da se koherentna ostrva InAs narasla na GaAs podlozi (u [001] pravcu) (Cirlin et al., 1995; Bimberg et al., 1995), pod određenim uslovima, vođena naprežanjem samoorganizuju u 2D strukturu kvaziperiodične kvadratne rešetke.

Ukoliko se matrica InAs ostrva prekrije relativno tankim slojem matričnog materijala (GaAs) i nastavi se sa odgrevanjem uzorka na temperaturi rasta pokrovnog sloja, od početne forme nanotačke dobijaju se nanostrukture različite morfologije (Granados i García, 2003): kvantni grebeni (zbog izduženog oblika kasnije su nazvani kvantne crte), spregnute nanotačke forme kamilinih grba i, za ovu disertaciju najinteresantnije nanotačke slične nanoprstenovima. Iako se ove strukture nazivaju nanoprstenovi, one nemaju potpuno formiran otvor. Optička svojstva i finalni oblik strukture ne zavise samo od početnog oblika i veličine tačke, već i od temperature legiranja, od debljine pokrovnog sloja, kao i od vrste molekula As u procesu nanošenja pokrovnog sloja (Dai et al., 2008). Primena fluksa As_2 pri narastanju pokrovnog sloja dovodi do formiranja nanoprstena, dok primena fluksa As_4 dovodi do formiranja ostalih morfologija.

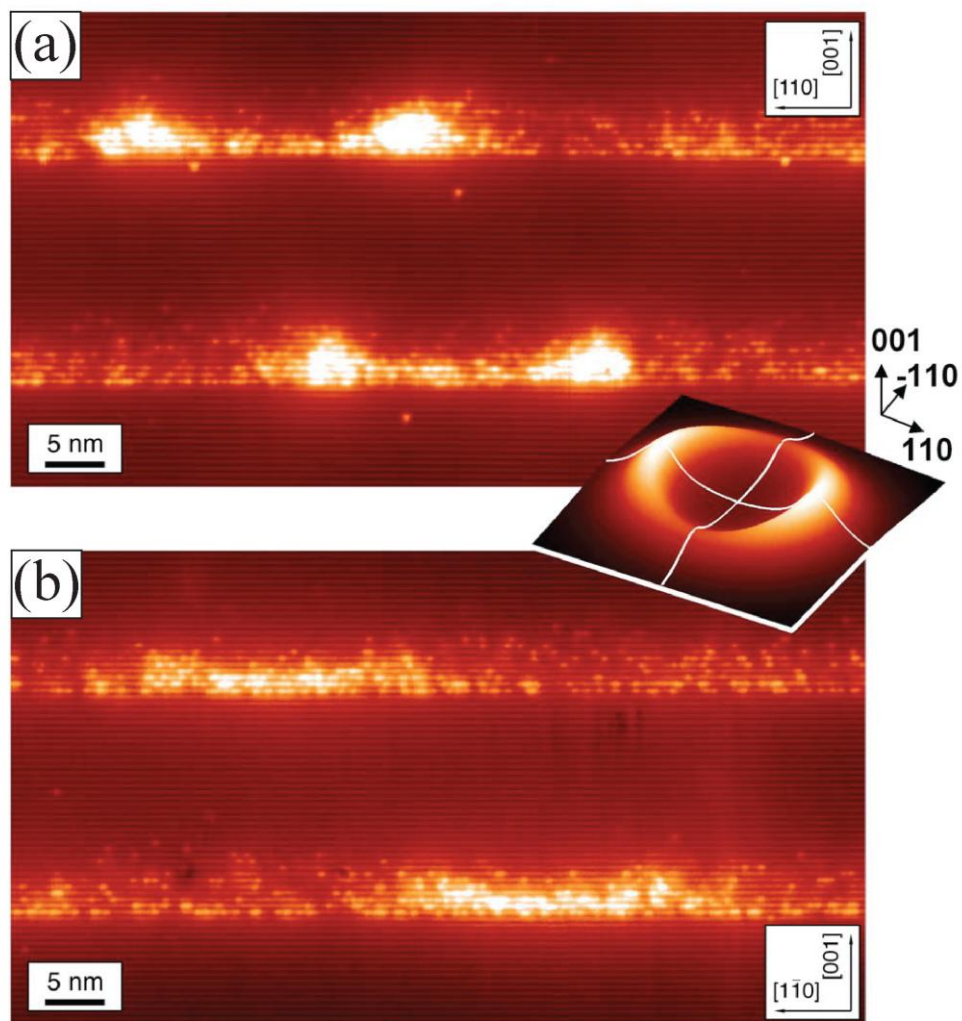
Proces transformacije nanotačke u nanoprsten odvija se posredstvom fenomena *redukcije vlažećeg sloja* (engl. dewetting). Fizika ovog složenog fenomena nije do kraja razjašnjena. Po jednoj teoriji (Lorke et al., 2002), promena ravnoteže površinske energije usled formiranja tankog pokrovnog sloja uzrok je nastanka resultantne sile usmerene od centra kvantne tačke. Ova sila dovodi do redistribucije materijala tačke od centra ka periferiji što dovodi do formiranja prstenaste strukture (Lorke et al., 2001). U razmatranom modelu polazi se od pretpostavke da je nanotačka u tečnoj fazi. Pojedini teorijski pristupi (Bottomley, 2002) impliciraju na prelazak InAs u tečnu fazu kao posledica naprežanja pri formiranju tankog pokrovnog sloja. Usled velikih očekivanih vrednosti biaksijalnog naprežanja u epitaksijalnom sloju minimum energije u stacionarnom stanju relaksirane strukture postiže se kada po površini tačke postoji InAs u tečnoj fazi (engl. „floating“ liquid phase). Ovaj efekat je eksperimentalno verifikovan i temperaturno nezavisan u širokom opsegu temperatura (Silveira et al., 2001). S druge strane, proces legiranja In–Ga, kojim se redukuje pokretljivost InAs, veoma je zavisano od temperature (Joyce et al., 1998), pa temperatura bitno utiče na molarni udeo u

legiranoj strukturi, a posredno i na njenu morfologiju. Stoga, granica nanostrukture nije eksplicitno definisana (strma), već postoji gradacija molarnog udela na granici tačka/matrica. Primer izmene molarnog udela kod (In,Ga)As/GaAs nanoprstenova rekonstruisan na osnovu rezultata merenja, dat je na sl. 1.11 (Fomin et al., 2007).



Slika 1.11. Konturni dijagram zavisnosti molarnog udela indijuma u yz ravni eksperimentalne nanotačke slične nanoprstenu (Fomin et al., 2007).

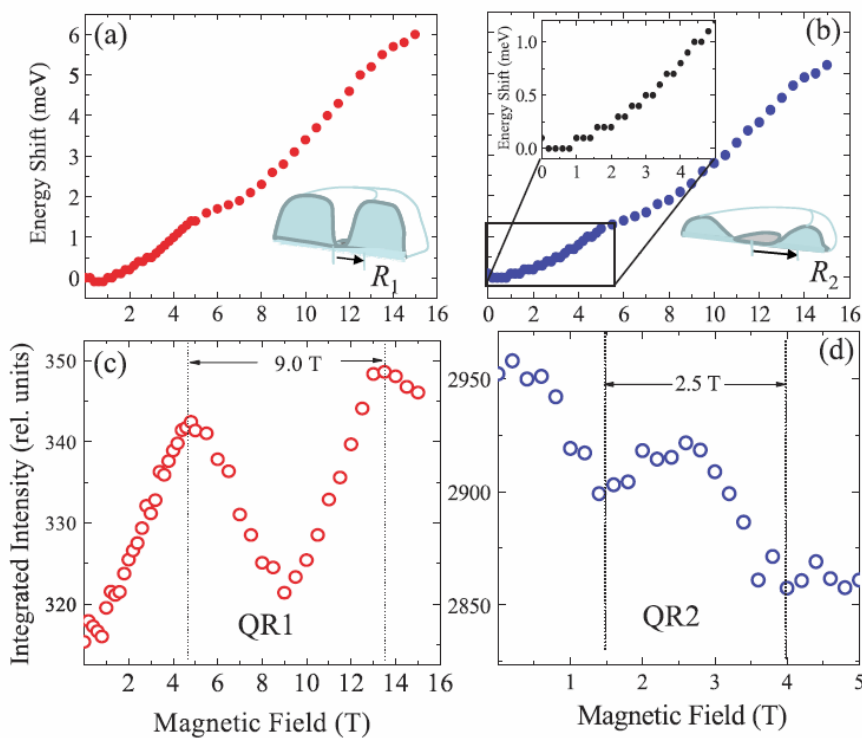
Sa stanovišta ove disertacije najinteresantnije su strukture (In,Ga)As/GaAs nanoprstenova. Eksperimentalni poprečni preseki (Offermans et al., 2005) ovih nanoprstenova u ravnima (110) i $(1\bar{1}0)$ dobijeni tehnikom poprečne skenirajuće tunelske mikroskopije (engl. cross-sectional scanning tunneling microscopy–X-STM) prikazane su na sl. 1.12(a) i (b), redom. Očigledno je da postoji primetna anizotropija u xy ravni kod ovih struktura. Na osnovu ovih eksperimentalnih podataka (Offermans et al., 2005) i dijagrama zavisnosti molarnog udela u strukturi formiran je aproksimativan model geometrije nanotačaka sličnih nanoprstenovima (Fomin et al., 2007). U ovom modelu pretpostavlja se da je donja granična površ tačka/matrica idealno ravna, visina nanotačke (gornja granica) je data analitičkom funkcijom (Offermans et al., 2005), dok molarni udeo nanotačke ima konstantnu vrednost koja je procenjena na osnovu eksperimentalnih rezultata (Fomin et al., 2007). U okviru disertacije ovaj model je upotrebljen za opis geometrije napregnutih (In,Ga)As/GaAs nanotačaka sličnih nanoprstenovima.



Slika 1.12. X-STM slike poprečnog preseka realistične (In,Ga)As/GaAs nanotačke slične nanoprstenu u ravni: (a) (110) i (b) (1 $\bar{1}$ 0). Umetak prikazuje 3D model oblika ove nanotačke (Offermans et al., 2005).

Skorašnji eksperimenti pokazali su da je moguće dobiti prstenove koji poseduju visok stepen aksijalne simetrije (Teodoro et al., 2010). U realizovanim ansamblima pojavljuju se dve istaknute morfologije: A) Manji prsten QR1 radijusa $R_1 = 11,6$ nm (sl. 1.13(a)) i B) veći prsten QR2 radijusa $R_2 = 22,5$ nm (sl. 1.13(b)). Međutim, nisu sve relevantne dimenzije ovih prstenova precizno određene, niti je u razmatranje uključen tanak sloj unutar nominalnog otvora prstena. Eksperimentalno je ustanovljeno da postoje oscilacije intenziteta fotoluminiscencije kod obe morfologije, kao što je prikazano na sl. 1.13 (c) i (d) za QR1 i QR2, redom (Teodoro et al., 2010). Ovaj rad je

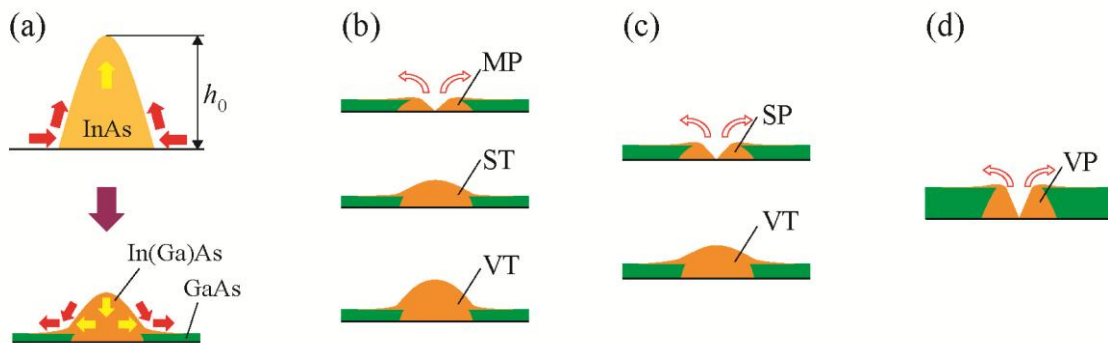
predstavljao prvu eksperimentalnu verifikaciju optičkih ekscitonskih AB oscilacija kod napregnutih nanoprstenova I tipa. Teorijska analiza (Tadić et al., 2011) nanoprstenova sličnih dimenzija verifikovala je postojanje oscilacija i pokazala je povoljan uticaj naprežanja na ekscitonski AB efekat kod potpuno otvorenih nanoprstenova. Kasnija teorijska analiza aksijalnosimetričnih nanotačaka sličnih nanoprstenu (Arsoski et al., 2012; Arsoški et al., 2013a) pokazala je da su amplitude ekscitonskih AB oscilacija veće kod nanoprstenova sa nepotpunim otvorom i ukazala na povoljan uticaj unutrašnjeg sloja na povećanje amplitude ekscitonskih AB oscilacija.



Slika 1.13. (Gornji panel) Zavisnost energije ekscitona od magnetske indukcije B za nanoprsten: (a) QR1 srednjeg radijusa $R_1 = 11,6$ nm i (b) QR2 srednjeg radijusa $R_1 = 22,5$ nm. Umeci prikazuju oblik nanoprstenova. (Donji panel) Zavisnost intenziteta fotoluminiscencije od B za nanoprsten: (c) QR1 i (d) QR2 (Teodoro et al., 2010).

Zavisnost oblika nanotačke od morfologije početnih ostrva i debljine pokrovnog sloja poslednjih godina se intenzivno izučava. Eksperimentalna istraživanja (Dai et al., 2008) ukazuju na široku raspodelu kvantnih tačaka u početnom uzorku, gde je većina tačaka malih dimenzija i prema tipu morfologije predstavljaju koherentna ostrva, dok je

manji broj tačaka većih dimenzija u formi dislociranih ostrva. Ustanovljeno je da za izuzetno male debljine pokrovnih slojeva dolazi isključivo do smanjenja visine i povećanja lateralne dimenzije ostrva (sl. 1.14(a)), dok za nešto veće debljine dolazi do pojave novih morfologija, tj. nanotačaka u formi nanoprstena. Pošto postoje razlike u visini ostrva u početnom uzorku, deo nižih ostrva prelazi u formu nanoprstena, dok veća ostrva ne podležu značajnoj morfološkoj transformaciji, te ostaju u formi nanotačke (sl. 1.14(b)). Sa povećanjem debljine pokrovnog sloja, deo manjih ostrva ostaje ukopan, ostrva srednje veličine se transformišu u nanoprsteneve, dok najveća ostaju nanotačke (sl. 1.14(c)). Za velike debljine slojeva sva koherentna ostrva su ukopana, dok se dislocirana ostrva transformišu u prstenaste strukture (sl. 1.14(d)), vrlo nepravilnog oblika sa izraženom elongacijom u [011] pravcu. Pod određenim uslovima, kontrolom temperature legiranja i debljine pokrovnog sloja, moguće je dobiti strukture kvadratnog oblika sa izraženim otvorom u centru (Boonpeng et al., 2010). Raznovrsnost morfoloških tipova u realizovanom ansamblu za posledicu ima pojavu bliskih linija u spektru fotoluminiscencije (Dai et al., 2008).



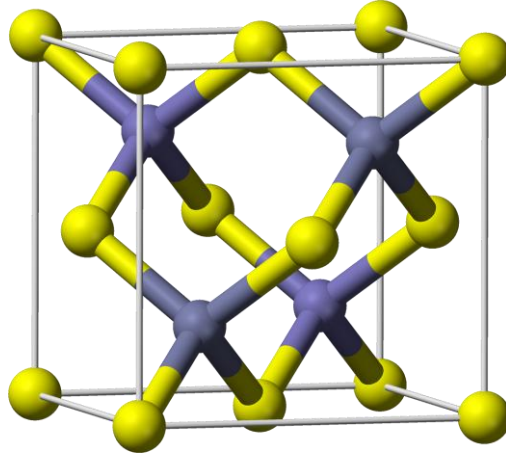
Slika 1.14. Šematski prikaz evolucije morfologije InAs nanotačke (■ – žuta) u procesu legiranja za različite debljine pokrovnih slojeva GaAs (■ – zelena): (a) veoma tanak sloj, (b) tanak sloj, (c) sloj srednje debljine i (d) debeo sloj. Različite dimenzije In(Ga)As strukture (■ – oker) posledica su različite debljine pokrovnog sloja i početne visine kvantne tačke h_0 . Prvo slovo u oznaci strukture označava veličinu (M–mali, S–srednji i V–veliki), a drugo morfološki tip (T–tačka, P–prsten).

Ukoliko se uređena matrica ostrva InAs prekrije relativno debelim slojem materijala supstrata–GaAs, tako da kvantne tačke budu u potpunosti ukopane, dolazi do naprezanja u materijalu koji ih okružuje. Treba napomenuti da pokrovni sloj ne sme da bude predebeo, jer bi u tom slučaju površina pokrovnog sloja bila skoro u potpunosti relaksirana. Novi rast sloja InAs na takvoj podlozi biće modulisan naprežanjem koje potiče od matrice ukopanih ostrva. Minimum hemijskog potencijala In atoma koji migriraju po pokrovnom sloju GaAs je na mestu maksimuma naprezanja, tj. direktno iznad ukopanih ostrva. Dovođenjem fluksa As dolazi do formiranja novih ostrva direktno iznad ukopanih. Na ovaj način se mogu realizovati višeslojne strukture vertikalno spregnutih InAs nanotačaka (Bimberg et al., 1999), vertikalno spregnutih nanoprstenova (Granados et al., 2005) i još neistraženih kombinovanih struktura vertikalno spregnutih nanotačaka i nanoprstenova. Eksperimentalno je ustanovljeno da kod vertikalno spregnutih struktura postoje antiukrštanja ekscitonskih stanja pri variranju eksternog električnog polja (Krenner et al., 2005; Krenner et al., 2006; Scheibner et al., 2007; Doty et al., 2009). Teorijski proračuni pokazuju da na položaj antiukrštanja može bitno uticati asimetrija nanotačaka u veštačkom molekulu (Climente et al., 2008). Pri velikim rastojanjima nanotačaka spomenuti efekti iščezavaju (Chwiej i Szafran, 2010). Iako efekat antiukrštanja ekscitonskih stanja u električnom polju ima potencijalno veliku primenu u nanoelektronici (Doty et al., 2009), ova problematika nije razmotrena u okviru disertacije i predmet je nastavka istraživačkog rada u ovoj oblasti.

1.3. Osobine III–V poluprovodničkih jedinjenja i njihovih legura za proizvodnju nanotačaka

U savremenoj nanoelektronici i optoelektronici značajno mesto zauzimaju jedinjenja elemenata III i V grupe periodnog sistema (III-V jedinjenja). Primer ovih jedinjenja su GaAs, InP, InAs, InSb, GaN, itd. III-V jedinjenja najčešće imaju kristalnu strukturu sfalerita, odnosno α -ZnS (engl. zinc blende), koji je glavni mineral cinka. Ova kristalna struktura se može shvatiti kao kombinacija dve ukrštene površinski centrirane kubne rešetke međusobno pomerene duž glavne dijagonale elementarne ćelije za

čtvrtinu njene dužine. Elementi III grupe zauzimaju mesta u jednoj, dok elementi V grupe zauzimaju mesta u drugoj površinski centriranoj kubnoj rešetki, kao na sl. 1.15. *



Slika 1.15. Šematski prikaz elementarne ćelije sfaleritne rešetke. Različite boje odgovaraju atomima iz različitih grupa (III i V).

Važan parametar zonske strukture III-V jedinjenja je vrednost energetskog procepa E_g . Vrednost bilo direktnog bilo indirektnog energetskog procepa na temperaturi T može se proceniti prema empirijskoj Varshnijevoj relaciji (Varshni, 1967):

$$E_g(T) = E_g(T = 0) - \frac{\alpha T^2}{\beta + T}, \quad (1.5)$$

gde su α i β Varshnijevi parametri.

Kombinacijom III-V jedinjenja moguće je formirati različite ternarne legure. Primeri ternarnih legura koje se najčešće koriste za izradu elektronskih naprava su $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$, $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, i druge. U ovim jedinjenjima atomi dva elementa III grupe zauzimaju jednu površinski centriranu kubnu rešetku, dok atomi elementa V grupe zauzimaju drugu površinski centriranu kubnu rešetku. Molski udeo x predstavlja učešće jednog od elemenata III grupe u leguri. Varijacija molskog udela u legurama III-V jedinjenja dovodi do promene vrednosti parametara elektronske

* Neka III-V jedinjenja imaju kristalnu strukturu β -ZnS, koju sačinjavaju dve ukrštene heksagonalne gusto pakovane rešetke pomerene za $5/8$ visine primitivne ćelije.

strukture i rešetke. Konstanta rešetke legure linearno zavisi od molskog udela u III-V jedinjenjima i za ternarne legure data je sa:

$$a(A_xB_{1-x}D) = (1 - x) \cdot a(BD) + x \cdot a(AD), \quad (1.6)$$

pri čemu se uzima u obzir da konstanta rešetke linearno zavisi od temperature T :

$$a(T) = a(T_{sob}) + \alpha_T (T - T_{sob}). \quad (1.7)$$

Ovde je $T_{sob} = 300$ K sobna temperatura, a α_T linearni koeficijent termalne ekspanzije.

Zavisnost energetskog procepa opisuje se paraboličnim Vegardovim pravilom:

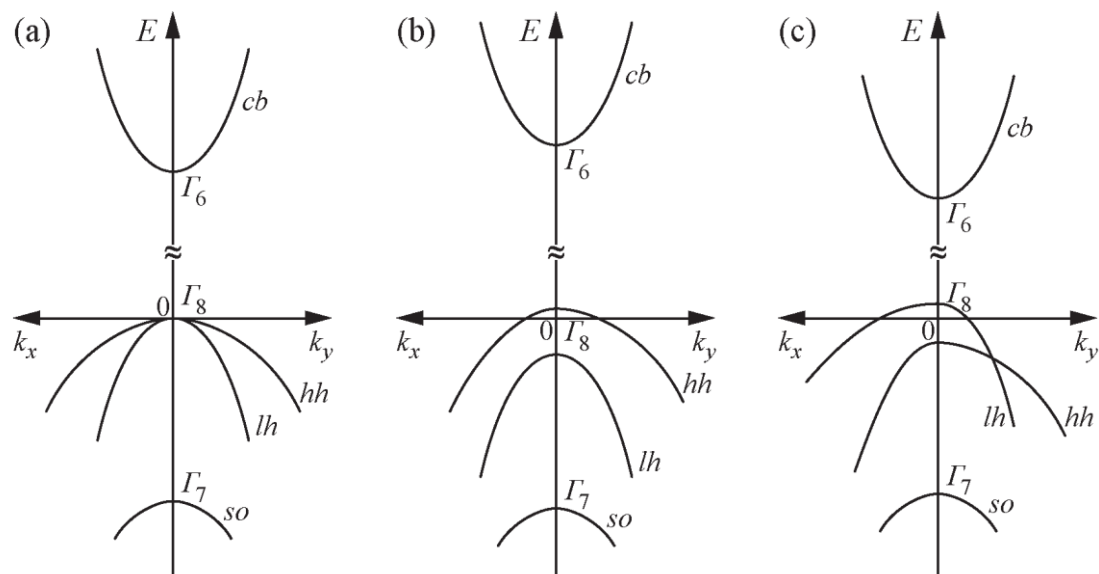
$$E_g(A_xB_{1-x}D) = (1 - x) \cdot E_g(BD) + x \cdot E_g(AD) - C \cdot x \cdot (1 - x), \quad (1.8)$$

gde je C parametar zakrivljenja (engl. bowing parameter) koji opisuje odstupanje od čisto linearne zavisnosti. Vrednosti parametara binarna jedinjenja relevantnih za numerički proračun, kao i odgovarajuće vrednosti parametara zakrivljenja za ternarne legure koje formiraju analizirane nanotačke date su u Dodatku B.

Zonska struktura III-V poluprovodnika sa sfaleritnom rešetkom ilustrovana je na sl. 1.16 (Ivchenko i Pikus, 1995). Zone su parabolične u okolini ekstremuma lociranog u Γ -tački. Blochove funkcije stanja u provodnoj zoni (engl. **conduction band**—*cb*) imaju simetriju s orbitala i degenerisane su po spinu. Valentna zona sastoji se od tri dvostruko degenerisane zone: zone teških šupljina (engl. **heavy-hole**—*hh*), zone lakih šupljina (engl. **light-hole**—*lh*) i otepljene zone usled spin-orbitne interakcije (engl. **spin-orbit split-off**—*so*). Blochove funkcije šupljinskih stanja u valentnoj zoni imaju simetriju p orbitala. Referentna reprezentacija spinora za *hh* i *lh* zonu označava se sa Γ_8 , za *so* zonu sa Γ_7 i za provodnu zonu sa Γ_6 . Projekcija ugaonog momenta Blochovih funkcija na z osu ima vrednost $J_z = \pm 3/2$ za *hh* i $J_z = \pm 1/2$ za *lh* i *so* stanja. Za konačne vrednosti talasnog vektora šupljine, energije šupljine u *hh* i *lh* zonama su različite, što znači da su efektivne mase teških i lakih šupljina različite. Pored toga, za velike vrednosti talasnog vektora šupljine, tj. daleko od Γ -tačke, disperzione relacije *hh* i *lh* zona su izrazito neparabolične usled mešanja stanja u ovim zonama.

Kod nenapregnutih struktura *hh* i *lh* zone su degenerisane u Γ -tački (sl. 1.16(a)). U slučaju kada je naprezanje kompresiono, hidrostatička deformacija razdvaja stanja u valentnoj i provodnoj zoni, dok je efekat suprotan ako je hidrostatičko naprezanje

tenziono. Pri tom, tetraedarska deformacija dovodi do razdvajanja *hh* i *lh* zona, gde je tipično „podizanje“ energije *hh* zone prema provodnoj zoni pri kompresiji materijala (sl. 1.16(b)), odnosno *lh* zone pri istezanju materijala (sl. 1.16(c)).



Slika 1.16. Skica disperzionih relacija za masivni materijal u okolini Γ -tačke u dva razmatrana pravca za slučaj: (a) bez naprezanja, (b) kompresije i (c) istezanja materijala. Ovde *cb* označava provodnu zonu, *hh* se odnosi na zonu teških šupljina, *lh* na zonu lakih šupljina, dok je *so* otcepljena zona.

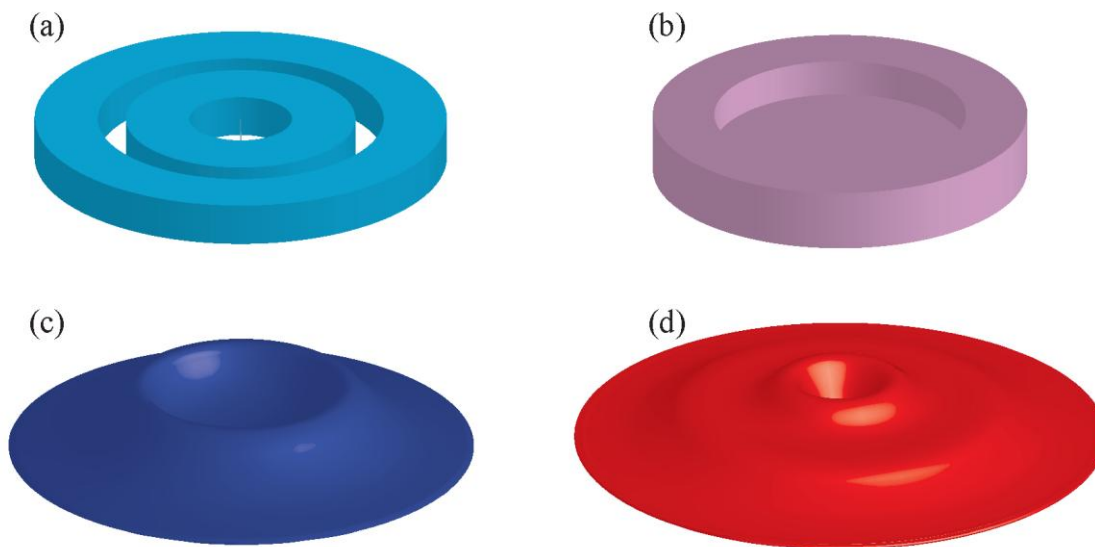
1.4. Predmet disertacije

U I delu disertacije dat je opis struktura, tehnologija, materijala i primenjenih teorijskih modela. U glavi 2 detaljno su opisani teorijski modeli neophodni za analizu nanostrukture sa posebnim osvrtom na aksijalno simetrične strukture u formi nanotačke. Korišćeni su modeli naprezanja zasnovani na klasičnoj mehanici. Analiziran je *kontinualno mehanički model* (CM) za slučaj anizotropije, kao i jednostavan *model izotropne elastičnosti* (IE), koji je u praksi pokazao dobre rezultate za aksijalno

simetrične strukture. U slučaju idealizovane geometrije sa strmim ivicama na mestu heterospoja, nalaženjem analitičkih rešenja po jednoj koordinati 2D integrala, postojeći IE model je sveden na numeričko rešavanje 1D integrala. Prikazana je teorija jednočestičnih stanja u električnom i magnetskom polju prema jednozonskom modelu, kao i višezonski model za šupljinska stanja. Detaljno je prikazan model stanja neutralnog ekscitona u okviru pristupa egzaktno dijagonalizacije u realnom i inverznom prostoru. Definisani su karakteristični dimenzioni parametri neutralnog ekscitona, kao i metode za procenu amplitude oscilacija energije osnovnog stanja ekscitona. Na kraju su dati pojednostavljeni modeli za opis optičkih osobina i ekscitonske strukture nanotačaka zasnovani na adijabatskoj aproksimaciji, gde je korišćen jednozonski model za opis stanja elektrona i šupljina. Modeli su primenjeni na dva lateralno spregnuta nanoprstena u magnetskom polju. Najpre je dat jednostavan analitički model elektronskih i šupljinskih stanja, gde je pri proračunu ekscitonskih stanja zanemarena Coulombova interakcija. Formirani model se može generalizovati za slučaj pojedinačnog prstena ili više lateralno spregnutih kvantnih prstenova i primenjuje se kada su potencijali na granici tačka/matrica strmi. Uključenje Coulombove interakcije zahteva numeričko rešavanje ekscitonske Schrödingerove jednačine, gde se prelazom u pogodan sistem koordinata problem svodi na tri dimenzije, što je i učinjeno u narednom aproksimativnom modelu. Napomenimo da su poznati modeli, implementirani za potrebe ove disertacije, koncizno predstavljeni, dok su formirani i unapređeni modeli detaljno opisani sa akcentom na ključne numeričke aspekte vezane za njihovu implementaciju.

U II delu su dati numerički rezultati za ekscitonska stanja i elektronsku strukturu nanotačaka i nanoprstenova u električnom i magnetskom polju. Analizirane su osobenosti različitih spojeva i raznih oblika, kao i značaj primene spoljašnjih polja za karakterizaciju analiziranih nanostrukture. U glavi 3 su dati numerički rezultati pojednostavljenog analitičkog i numeričkog modela koji su primenjeni u analizi dva lateralno spregnuta GaAs/(Al,Ga)As nanoprstena dobijena kapljičnom epitaksijom, čiji je šematski prikaz dat na sl. 1.17(a). U glavi 4 analizirane su napregnute (In,Ga)As/GaAs nanotačke u formi nanošoljice (sl. 1.17(b)) i realistični oblici nanotačaka u formi nanoprstena (sl. 1.17(c)). Dato je poređenje modela u kojima su šupljinska stanja računata u jednozonskoj i višezonskoj aproksimaciji. Dobijeni

numerički rezultati su upoređeni sa rezultatima dostupnih eksperimentalnih merenja objavljenih u referentnoj literaturi. Poseban deo istraživanja dat je u glavi 5 i odnosi se na ispitivanje mogućnosti povećanja amplitude oscilacija ekscitonskih energija u magnetskom polju primenom električnog polja u pravcu rasta strukture. Razmatrani su realistični oblici nanotačaka u formi nanoprstena na nanodisku (sl. 1.17(d)).



Slika 1.17. Šematski prikaz geometrija razmatranih u disertaciji: (a) dva lateralno spregnuta nanoprstena, (b) nanošoljica, (c) realistična nanotačka u formi nanoprstena i (d) nanoprsten na nanodisku.

Na posletku, dat je sumarni pregled rezultata disertacije sa akcentom na trenutne i potencijalne mogućnosti primene. Komentarisane su amplitude oscilacija najnižeg optički aktivnog ekscitonskog stanja kod nanotačaka koje se eksperimentalno mogu realizovati. Dati su zaključci o uticaju oblika tačke, kombinacije materijala heterostrukture i primene električnog polja na povećanje amplitude ovih oscilacija. Upoređeni su rezultati dobijeni za različite strukture, kao i rezultati dobijeni prema različitim modelima za istu strukturu.

Rezultati teze su dopunjeni sa tri priloga. U Dodatku A ukratko je objašnjen Aharonov-Bohmovog efekat. Dodatak B daje osnovne parametre zonske strukture razmatranih materijala. U Dodatku C je dato poređenje rezultata za efektivne

potencijale kod aksijalno nesimetričnih struktura prema anizotropnom modelu, sa rezultatima sličnih aksijalno simetričnih struktura prema modelu izotropne elastičnosti.

Na posletku napomenimo da su formirane diferencijalne jednačine i sistemi diferencijalnih jednačina rešeni pomoću programskog paketa COMSOL Script, koji je baziran na *metodu konačnih elemenata* (engl. **Finite Element Method–FEM**). Ovaj metod se pokazao kao robusan za rešavanje problematike razmatrane u disertaciji. FEM je primenjen za računanje naprezanja kod struktura sa realističnim krivolinijskim razdvojn timer površima tačka/matrica, kao i za računanje jednočestičnih stanja. Svi ostali kodovi koji se odnose na računanje specijalnih funkcija, Fourierove transformacije i vrednosti integrala napisani su u programskim paketima COMSOL Script i/ili MATLAB, gde su neophodne funkcije realizovane kao zasebne procedure kako bi se napisani kodovi, uz izvesne modifikacije, mogli prilagoditi za korišćenje u okviru drugih programskih jezika ili paketa.

Glava 2

Teorijski modeli mehaničkog naprezanja, elektronske i ekscitonske strukture

U ovoj glavi biće razmatrani modeli neophodni za računanje ekscitonskih stanja u strukturama tipa kvantne tačke. U tom smislu neophodno je opisati modele mehaničkog naprezanja, jednočestičnih stanja i ekscitonskih stanja. Ovde ćemo prikazati pregled implementiranih modela, pri čemu ćemo detaljno opisati formirane i unapređene modele sa posebnim osvrtom na područje njihove validnosti i neke specifičnosti numeričke implementacije.

2.1. Modeli mehaničkog naprezanja

Kod većine heterostruktura postoji razlika konstanti rešetke materijala koji formiraju heterospojeve, što dovodi do naprezanja koje može značajno da modifikuje lokalizaciju naelektrisanja. Stoga je u slučajevima značajnije razlike konstanti rešetke neophodno primeniti model pomoću koga bi se efekti naprezanja uključili u hamiltonijan.

Generalno, izračunavanje naprezanja u nanostrukturama je numerički složeno. Postoji više modela naprezanja koji se mogu klasifikovati kao *atomistički* i *kontinualno-mehanički*. Najčešće primenjivan atomistički model je *model polja valentnih sila* (engl. **valence force field–VFF**) (Keating, 1966; Martin, 1970), prema kojem je elastična energija opisana fenomenološkim izrazom koji zavisi od koordinata atoma i dva empirijska parametra čije se vrednosti određuju na osnovu eksperimentalnih rezultata za konstante elastičnosti. Intuitivniji i daleko jednostavniji kontinualno-mehanički pristup zasniva se na minimizaciji elastične energije u funkciji pomeraja (Jogai, 2000). Rezultat ove minimizacije je prostorna raspodela pomeraja, na osnovu koje se određuju komponente tenzora naprezanja u strukturi. Najjednostavniji kontinualno-mehanički model za slučaj izotropnog i homogenog medijuma je model *izotropne elastičnosti*, gde se pomeraj računa iz jednačine za ravnotežu izotropnih krutih tela (Davies, 1998). Ukoliko se u dobijene jednačine modela izotropne elastičnosti uvedu Lamèovi potencijali uz odgovarajuću kalibraciju, dobija se diferencijalna jednačina tipa Poissonove, pa se proračun svodi na rešavanje problema naprezanja po analogiji sa elektrostatikom.

Najčešće primenjivani modeli naprezanja zasnivaju se na klasičnoj mehanici, ali zbog svoje jednostavnosti i potvrđene validnosti često se primenjuju u analizi efekata naprezanja na poluprovodničke nanostrukture. U nastavku će biti izloženi najčešće primenjivani kontinualno-mehanički modeli naprezanja u nanostrukturama.

2.1.1. Osnovne jednačine kontinualno-mehaničkog modela

Pri deformaciji tela, uopšteno govoreći, dolazi do pomeraja svih njegovih tačaka. Uzrok deformacije kod heterostruktura predstavlja neusaglašenost konstanti rešetke materijala koji formiraju heterospoj. Relativna razlika konstanti rešetke materijala spoja je:

$$\varepsilon_0 = \frac{a_d - a_m}{a_m}, \quad (2.1.1)$$

gde su a_d i a_m konstante rešetke materijala tačke i materijala matrice, redom. Ukoliko je relativna razlika konstanti rešetke materijala spoja do nekoliko procenata, smatra se da je deformacija rešetke mala. Tada se u jednačinama modela mogu zanemariti veličine drugog reda, te su komponente tenzora naprezanja date jednostavnom relacijom (Landau i Lifšic, 2003):

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial r_j} + \frac{\partial u_j}{\partial r_i} \right). \quad (2.1.2)$$

Ovde indeksi i i j označavaju x, y i z koordinate, r_i predstavljaju komponente radijus vektora, a u_i su komponente vektora pomeraja $\vec{u} = (u_x, u_y, u_z)$. Ukoliko je nanotačka približno aksijalno simetrična, komponente tenzora naprezanja je pogodnije napisati u cilindričnim koordinatama (ρ, φ, z) (Landau i Lifšic, 2003):

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\rho\rho} &= \frac{\partial u_\rho}{\partial \rho}, & \varepsilon_{\varphi\varphi} &= \frac{1}{\rho} \frac{\partial u_\varphi}{\partial \varphi} + \frac{u_\rho}{\rho}, & \varepsilon_{zz} &= \frac{\partial u_z}{\partial z}, \\ \varepsilon_{\varphi z} &= \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial u_z}{\partial \varphi} + \frac{\partial u_\varphi}{\partial z} \right), & \varepsilon_{\rho z} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_\rho}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial \rho} \right), \\ \varepsilon_{\rho\varphi} &= \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial u_\rho}{\partial \varphi} + \frac{\partial u_\varphi}{\partial \rho} - \frac{u_\varphi}{\rho} \right). \end{aligned} \quad (2.1.3)$$

2.1.2. Elastična svojstva kristala

Promena slobodne energije pri izotermskoj kompresiji kristala data je kao suma proizvoda članova tenzora naprezanja. Za razliku od izotropnih tela, gde imamo dva koeficijenta, ova funkcija sadrži veći broj nezavisnih koeficijenata. Opšti oblik slobodne energije deformacije kristala u jedinici zapremine dat je relacijom (Landau i Lifšic, 2003):

$$F_{el} = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} C_{ijkl} \varepsilon_{ij} \varepsilon_{kl}, \quad (2.1.4)$$

gde su C_{ijkl} komponente tenzora konstanti elastičnosti (modula elastičnosti). Prema definiciji (2.1.2) tenzor naprezanja je simetričan, jer međusobna izmena indeksa i i j , k i

l ili parova ij i kl ne dovodi do promene vrednosti proizvoda $\varepsilon_{ij}\varepsilon_{kl}$. Stoga se i tenzor C_{ijkl} može postaviti u takvoj formi da zadovoljava navedena svojstva simetrije, pa je:

$$C_{ijkl} = C_{jikl} = C_{ijlk} = C_{jilk} = C_{klij} = C_{klji} = C_{lkij} = C_{lkji}, \quad (2.1.5)$$

što dovodi do zaključka da je maksimalan broj različitih komponenti ovog tenzora IV ranga 21. Ukoliko postoji veći stepen simetrije, broj nezavisnih komponenti je manji. Tako u slučaju kubne simetrije, kada je tenzor sveden na glavne ose, postoje samo tri nezavisne konstante: $C_{11} = C_{xxxx} = C_{yyyy} = C_{zzzz}$, $C_{12} = C_{xxyy} = C_{yyzz} = C_{zzxx}$ i $C_{44} = C_{xyxy} = C_{yzyz} = C_{zxzx}$ (Landau i Lifšic, 2003).

U slučaju izotropnog medijuma, jednačina (2.1.4) se može pojednostaviti:

$$F_{el} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \left(2\mu\varepsilon_{ij} + \lambda\delta_{ij} \sum_i \varepsilon_{ii} \right) \varepsilon_{ij}, \quad (2.1.6)$$

gde su λ i μ Lamèove konstante. Poređenjem jednačina (2.1.4) i (2.1.6) dobija se odnos konstanti elastičnosti:

$$C_{11} = 2\mu + \lambda, \quad C_{12} = \lambda, \quad C_{44} = \mu, \quad (2.1.7)$$

odakle sledi veza konstanti elastičnosti za izotropan medijum:

$$C_{11} - C_{12} - 2C_{44} = 0. \quad (2.1.8)$$

Koristeći Lamèove i konstante elastičnosti, Poissonov koeficijent je dat izrazom:

$$\nu = \frac{\lambda}{2(\mu + \lambda)} = \frac{C_{12}}{C_{11} + C_{12}}, \quad (2.1.9)$$

dok je Youngov moduo:

$$E_Y = \frac{\mu(2\mu + 3\lambda)}{\mu + \lambda} = \frac{(C_{11} - C_{12})(C_{11} + 2C_{12})}{(C_{11} + C_{12})}. \quad (2.1.10)$$

Razmotrimo slučaj nanotačke konstante rešetke a_d okružene poluprovodničkom matricom čija je konstante rešetke a_m ($a_d > a_m$). Usled razlike konstanti rešetke (2.1.1), pojavljuje se hidrostatički pritisak koji teži da smanji konstantu rešetke nanotačke. Pri tome, naprezanje možemo razložiti u dve komponente:

$$\varepsilon_{ij}^{tot}(\vec{r}) = -\delta_{ij}\varepsilon_0\Theta(\vec{r}) + \varepsilon_{ij}(\vec{r}), \quad (2.1.11)$$

gde prvi član predstavlja inicijalno naprezanje, drugi član je nepoznata deformacija pri relaksaciji i

$$\Theta(\vec{r}) = \begin{cases} 1, & \text{u tački} \\ 0, & \text{u matrici} \end{cases}.$$

Svi pomeraji se računaju u odnosu na nenapregnutu strukturu materijala matrice. Zamenom (2.1.11) u (2.1.4) i integracijom po čitavoj zapremini V dobija se izraz za elastičnu energiju usled deformacije u formi (Jogai, 2000):

$$E_{el} = \frac{1}{2} \int_V \sum_{i,j,k,l} C_{ijkl} \varepsilon_{ij} \varepsilon_{kl} dV. \quad (2.1.12)$$

Postoji više načina za izbor ravnotežne zapremine V u zavisnosti od međusobnog položaja nanotačaka u fabrikovanoj strukturi:

- 1) kada su nanotačke međusobno veoma udaljene, zapremina se bira tako da granice domena budu na dovoljno velikom rastojanju od nanotačke. Tada se može smatrati da je u oblasti granica domena materijal praktično nenapregnut. Na ovaj način smanjena je perturbacija elastičnog polja usled graničnih površina (Davies, 1998). Prednost ovakvog načina rešavanja je veća verodostojnost rezultata u slučaju velikog međusobnog rastojanja nanotačaka, a mana je značajno povećanje dimenzije sistema linearnih jednačina (a samim tim i potrebne memorije i vremena računanja);
- 2) kada su nanotačke bliske u ravni i/ili za slojeve nanotačaka (slojevite ili vertikalno spregnute nanotačke), za račun naprezanja definiše se *jedinična superćelija*. Uvode se periodični granični uslovi koji povezuju naspramne stranice domena, pri čemu je zapremina domena relativno mala;
- 3) kada postoji jedan sloj koji sadrži bliske nanotačke, koristi se kombinacija prethodna dva pristupa. Na granicama normalnim na pravac narastanja usvajaju se fiksni granični uslovi, dok se na ostalim usvajaju periodični.

Raspodela naprezanja se određuje za raspodelu pomeraja za koju je elastična energija u razmatranoj zapremini minimalna (Jogai, 2000):

$$\frac{dE_{el}}{du_x} = \frac{dE_{el}}{du_y} = \frac{dE_{el}}{du_z} = 0, \quad (2.1.13)$$

što daje sistem jednačina koji se može rešiti numerički (Tadić et al., 2002a; Tadić et al., 2002b).

2.1.3. Teorija izotropne elastičnosti

Česta pretpostavka pri razmatranju heterostruktura je da su elastična svojstva materijala izotropna. Na ovaj način se kod aksijalno simetričnih nanostrukture mogu dobiti poluanalitički modeli naprezanja koji daju dobre rezultate uprkos značajnom pojednostavljenju. Relevantan teorijski model koji ima široku primenu u analizi kvantnih tačaka i žica (Downes et al., 1995; Downes et al., 1997) postavio je Dawnes sa saradnicima, polazeći od Eshelbyjeve teorije uključenja (Eshelby, 1957). Dobijeni rezultati za deformaciju dati su u vidu površinskog integrala po graničnoj površi tačka/matrica.

Glavne pretpostavke modela izotropne elastičnosti su (Davies, 1998):

- 1) elastična svojstva materijala su linearna i izotropna;
- 2) nanotačka je okružena materijalom matrice beskonačnih dimenzija (ne postoje granične površine koje unose dodatnu perturbaciju elastičnog polja);
- 3) struktura je konformna;
- 4) svi pomeraji se računaju u odnosu na nenapregnutu strukturu materijala matrice.

U razmatranom modelu pri analizi naprezanja pretpostavlja se da je oblast matrice beskonačnih dimenzija. Zatim se u misaonom eksperimentu pretpostavi da je iz materijala matrice uklonjena oblast koja odgovara obliku i dimenzijama tačke. Zatim se pretpostavi da se u šupljinu ubaci materijal tačke na koju je primenjen hidrostatički pritisak koji smanji njenu zapreminu tako da je jednaka zapremini šupljine (deformacija pri kompresiji je $\delta^{com} = -3\varepsilon_0$). Pri relaksaciji strukture doći će do pomeraja u materijalima koji čine strukturu. Ravnotežno stanje se uspostavlja kada je elastična energija minimalna.

Izvođenje diferencijalne jednačine za pomeraj može se izvršiti posredno iz jednačine ravnoteže pri termalnoj ekspanziji (Landau i Lifšic, 2003), gde se član koji figuriše u izrazu za linearnu ekspanziju pri neuniformnoj raspodeli temperature $\alpha_T T$ zameni sa $3\varepsilon_0(\vec{r})$ što daje:

$$\text{grad}(\text{div } \vec{u}) - \frac{1-2\nu}{2(1-\nu)} \text{rot}(\text{rot } \vec{u}) = \frac{1+\nu}{1-\nu} \text{grad}(\varepsilon_0(\vec{r})). \quad (2.1.14)$$

Na ovaj način se uzrok deformacije kristala proporcionalan gradijentu temperature menja novim izvorom usled promene zapremine, odnosno neusaglašenosti konstanti rešetke. Uvođenjem Lamèovog potencijala pomeraja χ ,

$$\vec{u} = \text{grad } \chi, \quad (2.1.15)$$

u jednačinu (2.1.14), dobija se izraz ekvivalentan Poissonovoj jednačini (Davies, 1998):

$$\text{div } \vec{u} = \Delta \chi(\vec{r}) = \frac{1+\nu}{1-\nu} \varepsilon_0(\vec{r}). \quad (2.1.16)$$

Može se lako pokazati da je relativna deformacija u prvom redu aproksimacije:

$$\delta^{rel} = \text{trace}(\varepsilon) = \sum_i \varepsilon_{ii}^{rel} = \sum_i \frac{\partial u_i}{\partial r_i} = \text{div } \vec{u}, \quad (2.1.17)$$

a ukupna deformacija koja uključuje inicijalnu kompresiju je:

$$\delta^{tot} = \delta^{rel} + \delta^{com} = \sum_i \varepsilon_{ii}^{tot} = -3\varepsilon_0 \Theta(\vec{r}) + \text{div } \vec{u}, \quad (2.1.18)$$

gde su $r_i = \{x, y, z\}$ komponente vektora položaja.

Rešenje jednačine (2.1.16) dato je u formi Greenove funkcije:

$$\chi(\vec{r}) = -\frac{1+\nu}{1-\nu} \iiint_V \frac{\varepsilon_0(\vec{r}') d^3 \vec{r}'}{4\pi |\vec{r} - \vec{r}'|}, \quad (2.1.19)$$

gde je V zapremina tačke. Ukoliko se funkcija $1/|\vec{r} - \vec{r}'|$ predstavi u ekvivalentnoj formi $-1/2 \cdot \text{div}'(\vec{r} - \vec{r}')/|\vec{r} - \vec{r}'|$, tada zamenom u jednačinu (2.1.19) i iz teoreme Gauss-Ostrogradskog sledi (Davies, 1998):

$$\chi(\vec{r}) = \frac{\varepsilon_0}{8\pi} \frac{1+\nu}{1-\nu} \iint_{S'} \frac{(\vec{r} - \vec{r}') d\vec{S}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|}, \quad (2.1.20)$$

gde je $d\vec{S}'$ – vektor elementarne površi analizirane nanostrukture (sa jediničnim vektorom normale na površ usmerenim od materijala nanostrukture ka materijalu matrice). Zamenom (2.1.20) u (2.1.15) dobija se izraz za vektor pomeraja u proizvoljnoj tački prostora \vec{r} u jednostavnoj formi kao vektor proporcionalan integralu funkcije $1/|\vec{r} - \vec{r}'|$ po površini tačke S' (Davies, 1998):

$$\vec{u}(\vec{r}) = \frac{\varepsilon_0}{4\pi} \frac{1+\nu}{1-\nu} \iint_{S'} \frac{d\vec{S}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|}. \quad (2.1.21)$$

Primetimo da se pri izvođenju jednačine (2.1.21) pošlo od pretpostavke da je $\text{rot } \vec{u} = 0$. Na ovaj način je iz egzaktnog rešenja izostavljen član koji bi u jednačini (2.1.21) figurisao kao divergencija vrtložne (solenoidne) funkcije, čiji je integral po zatvorenoj površini nula. Stoga je vrednost komponenti vektora pomeraja, koji se dobijaju iz (2.1.21), identičan egzaktnom rešavanju jednačine (2.1.14). Iz izraza za relativnu deformaciju (2.1.2) direktno sledi izraz za komponente tenzora relativnog naprezanja:

$$\varepsilon_{ij}(\vec{r}) = -\frac{\varepsilon_0}{4\pi} \frac{1+\nu}{1-\nu} \iint_{S'} \frac{(r_i - r'_i) dS'_j}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3}. \quad (2.1.22)$$

Dijagonalne komponente tenzora treba dopuniti inicijalnim naprezanjem, pa je izraz za ukupnu vrednost komponente tenzora naprezanja:

$$\varepsilon_{ij}^{tot}(\vec{r}) = -\varepsilon_0 \cdot \delta_{i,j} \cdot \Theta(\vec{r}) - \frac{\varepsilon_0}{4\pi} \frac{1+\nu}{1-\nu} \iint_{S'} \frac{(r_i - r'_i)}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} dS'_j. \quad (2.1.23)$$

Dalje, zamenom (2.1.22) u (2.1.17) sledi:

$$\begin{aligned} \delta^{rel}(\vec{r}) &= \sum_i \varepsilon_{ii}^{rel} = \frac{\varepsilon_0}{4\pi} \frac{1+\nu}{1-\nu} \sum_i \iint_{S'} \frac{(r'_i - r_i) dS'_j}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} = \\ &= \frac{\varepsilon_0}{4\pi} \frac{1+\nu}{1-\nu} \iint_{S'} \frac{(\vec{r}'_i - \vec{r}_i) d\vec{S}'_i}{|\vec{r}' - \vec{r}|^3} = \frac{\varepsilon_0}{4\pi} \frac{1+\nu}{1-\nu} \Theta(\vec{r}) \iint_{S'} d\Omega \end{aligned} \quad (2.1.24)$$

Za zatvorenu površ S' je:

$$\iint_{S'} d\Omega = \begin{cases} 4\pi, & \text{u tački} \\ 0, & \text{u matrici} \end{cases}, \quad (2.1.25)$$

gde je $d\Omega$ elementarni prostorni ugao pod kojim se površ dS' , čiji je položaj određen vektorom \vec{r}' , vidi iz tačke čiji je položaj dat vektorom \vec{r} . Sledi (Davies, 1998):

$$\delta^{rel}(\vec{r}) = \varepsilon_0 \frac{1+\nu}{1-\nu} \Theta(\vec{r}), \quad (2.1.26)$$

$$\delta^{tot}(\vec{r}) = \delta^{rel} + \delta^{com} = -3\varepsilon_0 \Theta(\vec{r}) + \varepsilon_0 \frac{1+\nu}{1-\nu} \Theta(\vec{r}) = -2 \frac{1-2\nu}{1-\nu} \varepsilon_0 \Theta(\vec{r}). \quad (2.1.27)$$

Iz (2.1.17–18) i (2.1.26–27) očigledno je da je za proizvoljan oblik nanostrukture relaksacija materijala u okviru razmatranog modela isključivo hidrostatičkog tipa (Davies, 1998). Takođe je deformacija usled izotropnog dela naprezanja locirana unutar tačke (kada se pretpostave iste konstante elastičnosti za materijal i matricu).

U prethodnom izvođenju pošlo se od pretpostavke da su Poissonovi koeficijenti materijala matrice i strukture isti (uslov homogenosti), što generalno nije ispunjeno. Neka je Poissonov koeficijent materijala matrice ν_m , a nanostrukture ν_d . Tada iz jednačine (2.1.16) primenom Gaussove teoreme na graničnu oblast spoja slede granični uslovi za pomeraj:

$$u_m^t = u_d^t, \quad (2.1.28)$$

$$u_m^n \frac{1-\nu_m}{1+\nu_m} = u_d^n \frac{1-\nu_d}{1+\nu_d}, \quad (2.1.29)$$

gde gornji indeksi t i n označavaju tangencijalnu i normalnu komponentu, redom.

U nastavku ćemo razmotriti detalje predloženog modela kako bi se pojasnile specifičnosti primena i ključni problemi vezani za implementaciju.

2.1.3.1. Primena modela izotropne elastičnosti na aksijalno simetrične nanostrukture tipa nanotačke ili nanoprstena

U slučaju kada je struktura aksijalno simetrična, a približno se smatra da su parametri koji opisuju elastična svojstva materijala izotropni, pomeraji ne smeju zavisiti od cirkularne koordinate:

$$u_\varphi = 0, \quad \frac{\partial u_i}{\partial \varphi} = 0. \quad (2.1.30)$$

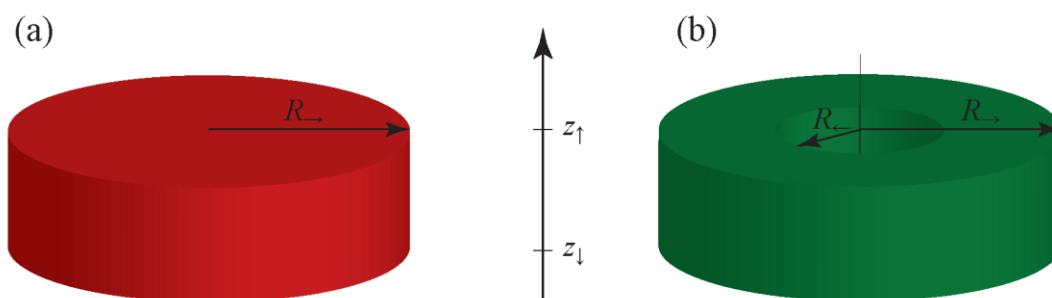
Tada se izrazi za komponente tenzora relativnog naprezanja (2.1.3) uprošćavaju:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\rho\rho} &= \frac{\partial u_\rho}{\partial \rho}, & \varepsilon_{\varphi\varphi} &= \frac{u_\rho}{\rho}, \\ \varepsilon_{zz} &= \frac{\partial u_z}{\partial z}, & \varepsilon_{\varphi z} &= \varepsilon_{\rho\varphi} = 0, \\ \varepsilon_{\rho z} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_\rho}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial \rho} \right). \end{aligned} \quad (2.1.31)$$

U zavisnosti od granica strukture i legiranja materijala tačke, oblik poprečnog preseka aksijalno simetrične nanostrukture se može opisati:

A1) pravolinijskim segmentima na granici između tačke i matrice,

A2) krivolinijskim segmentima na heterospoju tačka/matrica i/ili kada molarni udeo legure nanotačke varira tako da je očuvana aksijalna simetrija ($\varepsilon_0(\vec{r}) = \varepsilon_0(\rho, z)$) i smatra se da su konstante elastičnosti konstantne u tački i matrici.



Slika 2.1. Šematski prikaz: (a) cilindrične nanotačke, (b) cilindričnog nanoprstena pravougaonog poprečnog preseka. Ovde $z_{\uparrow}(z_{\downarrow})$ označava z koordinatu granične ravne površi oblika kružnice ili prstena sa normalom na površinu u smeru (suprotnom smeru) od smera z ose, a $R_{\rightarrow}(R_{\leftarrow})$ koordinatu granične cilindrične površi sa normalom na površinu u smeru (u suprotnom smeru) od radijalne ose.

Strukture sa pravolinijskim segmentima na granici između tačke i matrice.

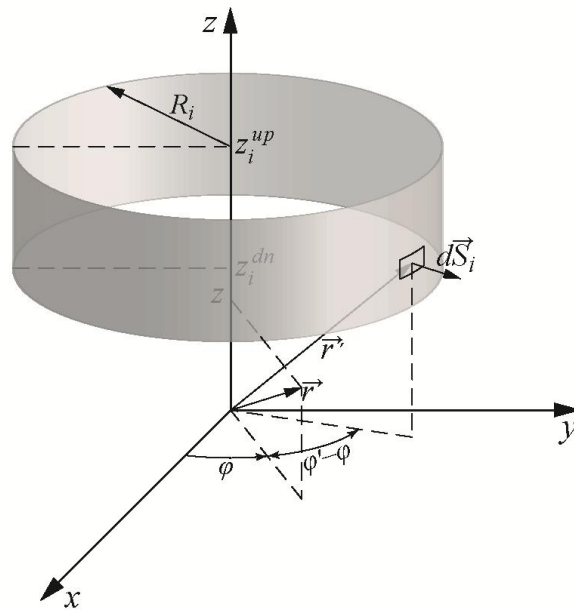
Karakteristični oblici nanotačaka u slučaju kada su granice strukture strme prikazani su na sl. 2.1. Poprečni presek diska prikazanog na sl. 2.1(a) ima oblik pravougaonika, a poprečni presek prstena na sl. 2.1(b) ima oblik dva pravougaonika. Razmatrani model se može primeniti i na kombinacije oblika predstavljenih na sl. 2.1. uz uslov očuvanja aksijalne simetrije. Time su obuhvaćeni često razmatrani slučajevi vertikalno ili/i lateralno spregnutih kvantnih tačaka i prstenova. Posebno interesantan slučaj predstavlja nanošoljica (Čukarić et al., 2012; Arsoški et al., 2012), kod koje je osnova disk na koji naleže prsten. Na ovaj način u model se unosi korekcija koja uračunava uticaj nepotpunog otvora kod napregnutih samoasembliраних prstenova dobijenih SK metodom narastanja. Pri tome, usled postojanja analitičkih rešenja po jednoj od

koordinata originalnog 2D integrala, dobija se 1D integral koji se jednostavno rešava numerički.

Polazeći od uslova (2.1.30), izraz za vektor pomeraja u cilindričnim koordinatama u slučaju strmih granica strukture je:

$$\vec{u}(\vec{r}) = u_\rho \vec{e}_\rho + u_z \vec{e}_z = \frac{\varepsilon_0}{4\pi} \frac{1+\nu}{1-\nu} \iint_{S'} \frac{\rho' \cos(\varphi - \varphi') dz' \vec{e}_\rho(\varphi) + \rho' d\rho' d\varphi' \vec{e}_z}{|\vec{r} - \vec{r}'|}, \quad (2.1.32)$$

gde je $\vec{r} = (\rho, \varphi, z)$ – vektor položaja tačke u kojoj se računa pomeraj, a $\vec{r}' = (\rho', \varphi', z')$ – vektor položaja tekuće elementarne površi na granici tačka/matrica (sl. 2.2). Normale na elementarnu površ imaju smer od tačke ka matrici. Pri integraciji po ravnoj površi oblika prstena (diska) $dz = 0$ ($z = \text{const} = z_i$), dok je za integraciju po površima cilindra $d\rho = 0$ ($\rho = \text{const} = R_i$).



Slika 2.2. Skica cilindrične granične površi tačka/matrica.

Komponenta pomeraja u radijalnom pravcu u_ρ je proporcionalna sumi integrala po cilindričnim površima:

$$u_\rho = \frac{\varepsilon_0}{4\pi} \frac{1+\nu}{1-\nu} \sum_i I_i^{cyl.}(\rho, z). \quad (2.1.33)$$

Integral po površini cilindra je:

$$\begin{aligned}
 I_i^{cyl.}(\rho, z) &= s_\rho(R_i) \int_{\varphi'=0}^{2\pi} \int_{z_i^{dn}}^{z_i^{up}} \frac{R_i \cos(\varphi - \varphi') d\varphi' dz'}{\sqrt{R_i^2 + \rho^2 - 2R_i\rho \cos(\varphi - \varphi') + (z - z')^2}} = \\
 &= s_\rho(R_i) \int_{\varphi}^{\varphi+2\pi} \int_{z_i^{dn}}^{z_i^{up}} \frac{R_i \cos \varphi^* d\varphi^* dz'}{\sqrt{R_i^2 + \rho^2 - 2R_i\rho \cos \varphi^* + (z - z')^2}} = \\
 &= s_\rho(R_i) \int_0^{2\pi} \int_{z_i^{dn}}^{z_i^{up}} \frac{R_i \cos \varphi^* d\varphi^* dz'}{\sqrt{R_i^2 + \rho^2 - 2R_i\rho \cos \varphi^* + (z - z')^2}},
 \end{aligned} \tag{2.1.34}$$

gde je i -indeks površi, R_i – poluprečnik, a $z_i^{up(dn)}$ – gornja (donja) granica i -te cilindrične površine (sl. 2.2.), a $s_\rho(R_i)$ – funkcija znaka integrala i zavisi od smera normale na površ cilindra:

$$s_\rho(R_i) = \text{sign}(R_i - \rho) \times \begin{cases} +1 & R_i = R_{i,\rightarrow} \\ -1, & R_i = R_{i,\leftarrow} \end{cases}. \tag{2.1.35}$$

Lako je ustanoviti da razmatrani integral ima analitičko rešenje po z (funkcija ln) ili po φ (eliptični integrali), pa se integracija može svesti na 1D problem:

$$\begin{aligned}
 I_i^{cyl.}(\rho, z) &= 2s_\rho(R_i) \int_0^\pi \left[R_i \cos \varphi^* \times \right. \\
 &\quad \left. \times \ln \frac{z - z_i^{up} + \sqrt{R_i^2 + \rho^2 - 2R_i\rho \cos \varphi^* + (z - z_i^{up})^2}}{z - z_i^{dn} + \sqrt{R_i^2 + \rho^2 - 2R_i\rho \cos \varphi^* + (z - z_i^{dn})^2}} \right] d\varphi^*,
 \end{aligned} \tag{2.1.36}$$

gde je podintegralna funkcija parna po φ^* , te je njen integral po simetričnom intervalu jednak dvostrukoj vrednosti integrala na polovini intervala.

Komponenta u_z proporcionalna je sumi integrala po ravnim površima:

$$u_z = \frac{\varepsilon_0}{4\pi} \frac{1+\nu}{1-\nu} \sum_i I_i^{plane}(\rho, z). \tag{2.1.37}$$

Integral po ravnoj površi forme prstena (kružnice) je:

$$\begin{aligned}
I_i^{plane}(\rho, z) &= s_z(z_i) \int_{\varphi'=0}^{2\pi} \int_{R_{i,\leftarrow}}^{R_{i,\rightarrow}} \frac{\rho' d\rho' d\varphi'}{\sqrt{\rho'^2 + \rho^2 - 2\rho'\rho \cos(\varphi - \varphi') + (z - z_i)^2}} = \\
&= s_z(z_i) \int_{\varphi}^{\varphi+2\pi} \int_{R_{i,\leftarrow}}^{R_{i,\rightarrow}} \frac{\rho' d\rho' d\varphi^*}{\sqrt{\rho'^2 + \rho^2 - 2\rho'\rho \cos \varphi^* + (z - z_i)^2}} = \\
&= s_z(z_i) \int_0^{2\pi} \int_{R_{i,\leftarrow}}^{R_{i,\rightarrow}} \frac{\rho' d\rho' d\varphi^*}{\sqrt{\rho'^2 + \rho^2 - 2\rho'\rho \cos \varphi^* + (z - z_i)^2}},
\end{aligned} \tag{2.1.38}$$

gde je i -indeks površi, z_i – koordinata z , a $R_{i,\leftarrow}$ ($R_{i,\rightarrow}$) – unutrašnji (spoljašnji) poluprečnik i -tog prstena (kružnice, gde je $R_{i,\leftarrow} = 0$), a $s_z(z_i)$ – funkcija znaka integrala i zavisi od smera normale na površ:

$$s_z(z_i) = \text{sign}(z_i - z) \times \begin{cases} +1 & z_i = z_{i,\uparrow} \\ -1 & z_i = z_{i,\downarrow} \end{cases}. \tag{2.1.39}$$

Zamenom analitičkog izraza za integral po radijalnoj koordinati i uzimanjem u obzir parnosti funkcije po φ^* dobija se:

$$\begin{aligned}
I_i^{plane}(\rho, z) &= 2s_z(z_i) \int_0^\pi \left\{ \sqrt{R_{i,\rightarrow}^2 + \rho^2 - 2\rho R_{i,\rightarrow} \cos \varphi^* + (z - z_i)^2} - \right. \\
&\quad \left. - \sqrt{R_{i,\leftarrow}^2 + \rho^2 - 2\rho R_{i,\leftarrow} \cos \varphi^* + (z - z_i)^2} \right\} d\varphi^* + \\
&\quad + 2s_z(z_i) \int_0^\pi \rho \cos \varphi^* \times \\
&\quad \times \ln \frac{R_{i,\rightarrow} - \rho \cos \varphi^* + \sqrt{R_{i,\rightarrow}^2 + \rho^2 - 2\rho R_{i,\rightarrow} \cos \varphi^* + (z - z_i)^2}}{R_{i,\leftarrow} - \rho \cos \varphi^* + \sqrt{R_{i,\leftarrow}^2 + \rho^2 - 2\rho R_{i,\leftarrow} \cos \varphi^* + (z - z_i)^2}} d\varphi^*.
\end{aligned} \tag{2.1.40}$$

Ovde je moduo funkcije pod logaritmom izostavljen, jer je:

$$\begin{aligned}
&\sqrt{R_i^2 + \rho^2 - 2\rho R_i \cos \varphi^* + (z - z_i)^2} = \\
&= \sqrt{(R_i - \rho \cos \varphi^*)^2 + (\rho \sin \varphi^*)^2 + (z - z_i)^2} \geq |R_i - \rho \cos \varphi^*|,
\end{aligned} \tag{2.1.41}$$

te je vrednost funkcije pod logaritmom uvek pozitivna.

Sličnim postupkom mogu se dobiti integralne jednačine za računanje naprezanja u strukturama sa kosim ivicama (npr. kupa, zarubljena kupa) (Čukarić et al., 2012), ali zbog kompleksnosti dobijenih izraza neće biti prezentovane u nastavku.

Zamenom (2.1.33–40) u definicije izraze (2.1.31) dobijaju se komponente tenzora relativnog naprezanja za aksijalno simetrične strukture u formi 1D integrala:

$$\varepsilon_{\rho\rho} = C_0 \sum_i R_i \cdot s_\rho(R_i) \int_0^\pi \cos \varphi^* \left\{ \frac{\frac{\rho - R_i \cos \varphi^*}{\sqrt{R_i^2 + \rho^2 - 2R_i \rho \cos \varphi^* + (z - z_i^{up})^2}}}{z - z_i^{up} + \sqrt{R_i^2 + \rho^2 - 2R_i \rho \cos \varphi^* + (z - z_i^{up})^2}} - \frac{\frac{\rho - R_i \cos \varphi^*}{\sqrt{R_i^2 + \rho^2 - 2R_i \rho \cos \varphi^* + (z - z_i^{dn})^2}}}{z - z_i^{dn} + \sqrt{R_i^2 + \rho^2 - 2R_i \rho \cos \varphi^* + (z - z_i^{dn})^2}} \right\} d\varphi^*, \quad (2.1.42)$$

$$\varepsilon_{\varphi\varphi} = C_0 \sum_i s_\rho(R_i) \int_0^\pi \frac{R_i \cos \varphi^*}{\rho} \times \ln \frac{z - z_i^{up} + \sqrt{R_i^2 + \rho^2 - 2R_i \rho \cos \varphi^* + (z - z_i^{up})^2}}{z - z_i^{dn} + \sqrt{R_i^2 + \rho^2 - 2R_i \rho \cos \varphi^* + (z - z_i^{dn})^2}} d\varphi^*, \quad (2.1.43)$$

$$\varepsilon_{zz} = C_0 \sum_i s_z(z_i) \int_0^\pi \left\{ \frac{z - z_i}{\sqrt{R_{i,\rightarrow}^2 + \rho^2 - 2\rho R_{i,\rightarrow} \cos \varphi^* + (z - z_i)^2}} - \frac{z - z_i}{\sqrt{R_{i,\leftarrow}^2 + \rho^2 - 2\rho R_{i,\leftarrow} \cos \varphi^* + (z - z_i)^2}} + \right. \\ \left. + \rho \cos \varphi^* \left[\frac{\frac{z - z_i}{\sqrt{R_{i,\rightarrow}^2 + \rho^2 - 2\rho R_{i,\rightarrow} \cos \varphi^* + (z - z_i)^2}}}{R_{i,\rightarrow} - \rho \cos \varphi^* + \sqrt{R_{i,\rightarrow}^2 + \rho^2 - 2\rho R_{i,\rightarrow} \cos \varphi^* + (z - z_i)^2}} - \frac{\frac{z - z_i}{\sqrt{R_{i,\leftarrow}^2 + \rho^2 - 2\rho R_{i,\leftarrow} \cos \varphi^* + (z - z_i)^2}}}{R_{i,\leftarrow} - \rho \cos \varphi^* + \sqrt{R_{i,\leftarrow}^2 + \rho^2 - 2\rho R_{i,\leftarrow} \cos \varphi^* + (z - z_i)^2}} \right] \right\} d\varphi^*, \quad (2.1.44)$$

$$\begin{aligned}
\varepsilon_{\rho z} = & \frac{C_0}{2} \sum_i s(R_i) \int_0^\pi R_i \cos \varphi^* \left[\frac{1 + \frac{z - z_i^{up}}{\sqrt{R_i^2 + \rho^2 - 2R_i \rho \cos \varphi^* + (z - z_i^{up})^2}}}{z - z_i^{up} + \sqrt{R_i^2 + \rho^2 - 2R_i \rho \cos \varphi^* + (z - z_i^{up})^2}} - \right. \\
& \left. - \frac{1 + \frac{z - z_i^{dn}}{\sqrt{R_i^2 + \rho^2 - 2R_i \rho \cos \varphi^* + (z - z_i^{dn})^2}}}{z - z_i^{dn} + \sqrt{R_i^2 + \rho^2 - 2R_i \rho \cos \varphi^* + (z - z_i^{dn})^2}} \right] d\varphi^* + \\
& + s_z(z_i) \int_0^\pi \left[\frac{\rho - R_{i,\rightarrow} \cos \varphi^*}{\sqrt{R_{i,\rightarrow}^2 + \rho^2 - 2\rho R_{i,\rightarrow} \cos \varphi^* + (z - z_i)^2}} - \right. \\
& \left. - \frac{\rho - R_{i,\leftarrow} \cos \varphi^*}{\sqrt{R_{i,\leftarrow}^2 + \rho^2 - 2\rho R_{i,\leftarrow} \cos \varphi^* + (z - z_i)^2}} \right] + \\
& + \cos \varphi^* \ln \frac{R_{i,\rightarrow} - \rho \cos \varphi^* + \sqrt{R_{i,\rightarrow}^2 + \rho^2 - 2\rho R_{i,\rightarrow} \cos \varphi^* + (z - z_i)^2}}{R_{i,\leftarrow} - \rho \cos \varphi^* + \sqrt{R_{i,\leftarrow}^2 + \rho^2 - 2\rho R_{i,\leftarrow} \cos \varphi^* + (z - z_i)^2}} + \\
& + \rho \cos \varphi^* \left[\frac{-\cos \varphi^* + \frac{\rho - R_{i,\rightarrow} \cos \varphi^*}{\sqrt{R_{i,\rightarrow}^2 + \rho^2 - 2\rho R_{i,\rightarrow} \cos \varphi^* + (z - z_i)^2}}}{R_{i,\rightarrow} - \rho \cos \varphi^* + \sqrt{R_{i,\rightarrow}^2 + \rho^2 - 2\rho R_{i,\rightarrow} \cos \varphi^* + (z - z_i)^2}} - \right. \\
& \left. - \frac{-\cos \varphi^* + \frac{\rho - R_{i,\leftarrow} \cos \varphi^*}{\sqrt{R_{i,\leftarrow}^2 + \rho^2 - 2\rho R_{i,\leftarrow} \cos \varphi^* + (z - z_i)^2}}}{R_{i,\leftarrow} - \rho \cos \varphi^* + \sqrt{R_{i,\leftarrow}^2 + \rho^2 - 2\rho R_{i,\leftarrow} \cos \varphi^* + (z - z_i)^2}} \right] d\varphi^*, \tag{2.1.45}
\end{aligned}$$

$$\varepsilon_{\varphi z} = \varepsilon_{\rho\varphi} = 0, \tag{2.1.46}$$

gde je konstanta proporcionalnosti $C_0 = \frac{\varepsilon_0}{2\pi} \frac{1+\nu}{1-\nu}$.

U slučaju kada sistem poseduje i refleksionu simetriju u odnosu na ravan $z=\text{const}$ (kao na sl. 2.1), važi $\varepsilon_{ij}(z) = \varepsilon_{ij}(2z_c - z)$, gde $i, j \in \{\rho, \varphi, z\}$, a z_c predstavlja z koordinatu centra aksijalno simetrične strukture, te je dimenzija mreže na kojoj se računa naprezanje dvostruko manji.

Strukture sa krivolinijskim segmentima na heterospoju tačka/matrica. U slučaju aksijalno simetrične strukture čiji je poprečni presek oivičen krivim linijama, nije moguće naći poluanalitičke izraze za integrale (2.1.34, 2.1.38). Tada je za veliki broj tačaka mreže koja se koristi za rešavanje u 3D prostoru neophodno rešiti 2D integrale numerički kako bi se došlo do tražene raspodele naprezanja. Kako je vreme računanja 2D integrala relativno dugo, sa numeričkog aspekta jednostavnije je naći potencijal pomeraja iz jednačine (2.1.16). Pošto u slučaju izotropnog homogenog materijala potencijal ne zavisi od koordinate φ ($\partial\chi/\partial\varphi = 0$), jednačina (2.1.16) se redukuje na 2D diferencijalnu jednačinu:

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial \chi}{\partial \rho} \right) + \frac{\partial^2 \chi}{\partial z^2} = \frac{1+\nu}{1-\nu} \varepsilon_0(\bar{r}). \quad (2.1.47)$$

Ova diferencijalna jednačina može se rešiti primenom FEM-a. Za granicu domena $\rho = 0$ (z je osa simetrije), kao i za preostale unutrašnje granice (granice poprečnog preseka razmatrane strukture) usvajaju se standardni von Neumannovi granični uslovi, dok se za granice domena (preostale tri granice $z=z_{boks}^{up}$ i $z=z_{boks}^{dn}$, i $\rho_{boks} = \text{const} \neq 0$) usvajaju standardni Dirichletovi granični uslovi. Granice domena se biraju tako da su dovoljno udaljene od granica strukture, kako bi se umanjili efekti perturbacije elastičnog polja usled ivičnih efekata. Ovakvim izborom rešenje je približnije slučaju strukture u matričnom materijalu beskonačnih dimenzija. Kako je na velikoj udaljenosti od strukture (nekoliko desetina puta većem od dimenzija tačke) vrednost potencijala pomeraja zanemarljiva (smatra se da je u značajnoj meri došlo do relaksacije materijala), mreža se postavlja tako da su van granica ovog domena dimenzije elemenata velike. Na taj način se redukuje broj jednačina modela baziranog na FEM-u, odnosno vreme neophodno za kalkulaciju.

Za dobijene vrednosti potencijala iz jednačine (2.1.15) slede izrazi za komponente vektora pomeraja:

$$u_\rho = \frac{\partial \chi}{\partial \rho}, \quad u_\varphi = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \chi}{\partial \varphi} = 0, \quad u_z = \frac{\partial \chi}{\partial z}. \quad (2.1.48)$$

Dalje, polazeći od izračunatih pomeraja i jednačina (2.1.31), dobijaju se komponente tenzora relativnog naprezanja.

Razmotrimo slučaj aksijalno simetrične strukture, kada molarni udeo legure nanotačke varira tako da je očuvana aksijalna simetrija, a može se smatrati da su konstante elastičnosti materijala strukture i matrice homogene. Polazeći od navedenih pretpostavki, zaključuje se da je relativna razlika konstanti rešetke materijala tačke u odnosu na materijal matrice prostorno zavisna u funkciji koordinata ρ i z . Tada se ne može izvršiti transformacija jednačine (2.1.19) u formu (2.1.20), pa je u cilju nalaženja komponenta tenzora naprezanja neophodno poći od jednačine (2.1.47).

2.1.3.2. Primena modela izotropne elastičnosti za proizvoljan oblik nanotačke

U slučaju kada razmatrana nanotačka nije aksijalno simetrična za računanje potencijala pomeraja neophodno je rešiti 3D diferencijalnu jednačinu (2.1.16). Mi smo jednačinu rešili koristeći FEM (rezultati su prikazani u Dodatku C). Pri tome smo usvojili domen za rešavanje mnogo većih dimenzija od tačke, sa granicama na velikoj udaljenosti od granice spoja tačka/matrica. Mreža se postavlja tako da je u tački i u njenoj neposrednoj blizini dimenzija elemenata mala, a na velikoj udaljenosti od strukture dimenzija elemenata velika. Na unutrašnjim granicama usvajaju se von Neumannovi granični uslovi, dok se na spoljašnjim granicama domena usvajaju Dirichletovi granični uslovi. Dalje se iz proračunatih potencijala i jednačine (2.1.15) dobijaju pomeraji, na osnovu kojih se prema jednačinama (2.1.3) računaju komponente tenzora naprezanja.

Ukoliko je anizotropija materijala relativno velika, u procesu samoasembliranja dobijaju se nanotačke koje primetno odstupaju od aksijalne simetrije. Tada se postavlja pitanje validnosti primene izotropnog modela, jer izračunate vrednosti mogu značajno odstupati od rezultata realističnijeg anizotropnog modela (Tadić et al., 2002a). Stoga je korišćenje modela izotropne elastičnosti za nanotačke koje nisu aksijalno simetrične značajno ograničeno.

2.1.4. Važnije komponente tenzora naprežanja i relevantnih veličina u Descartesovim i cilindričnim koordinatama

Radi lakšeg razmatranja uvešćemo neke veličine vezane za komponente tenzora naprežanja. U narednom poglavlju biće objašnjen uticaj ovih veličina na jednočestična stanja kroz perturbaciju potencijala usled deformacije kristala. Pri prelazu iz Descartesovih u cilindrične koordinate važi veza između pomeraja:

$$u_x = u_\rho \cdot \cos(\varphi) - u_\varphi \cdot \sin(\varphi), \quad (2.1.49a)$$

$$u_y = u_\rho \cdot \sin(\varphi) + u_\varphi \cdot \cos(\varphi), \quad (2.1.49b)$$

$$u_z = u_z, \quad (2.1.49c)$$

a veza između izvoda je:

$$\frac{\partial}{\partial x} = \cos(\varphi) \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{\sin(\varphi)}{\rho} \frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad (2.1.50a)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \sin(\varphi) \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\cos(\varphi)}{\rho} \frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad (2.1.50b)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z}. \quad (2.1.50c)$$

Polazeći od definicionog izraza za komponente tenzora naprežanja (2.1.2) u Descartesovim koordinatama i izraza (2.1.49–50) sledi:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{xx} = \frac{\partial u_x}{\partial x} &= \cos^2(\varphi) \cdot \frac{\partial u_\rho}{\partial \rho} - \sin(\varphi) \cos(\varphi) \cdot \frac{\partial u_\varphi}{\partial \rho} - \frac{\sin(\varphi) \cos(\varphi)}{\rho} \frac{\partial u_\rho}{\partial \varphi} + \\ &+ \frac{\sin^2(\varphi)}{\rho} u_\rho + \frac{\sin^2(\varphi)}{\rho} \frac{\partial u_\varphi}{\partial \varphi} + \frac{\sin(\varphi) \cdot \cos(\varphi)}{\rho} u_\varphi, \end{aligned} \quad (2.1.51)$$

$$\begin{aligned} \varepsilon_{yy} = \frac{\partial u_y}{\partial y} &= \sin^2(\varphi) \cdot \frac{\partial u_\rho}{\partial \rho} + \sin(\varphi) \cos(\varphi) \cdot \frac{\partial u_\varphi}{\partial \rho} + \frac{\sin(\varphi) \cos(\varphi)}{\rho} \frac{\partial u_\rho}{\partial \varphi} + \\ &+ \frac{\cos^2(\varphi)}{\rho} u_\rho + \frac{\cos^2(\varphi)}{\rho} \frac{\partial u_\varphi}{\partial \varphi} - \frac{\sin(\varphi) \cdot \cos(\varphi)}{\rho} u_\varphi, \end{aligned} \quad (2.1.52)$$

$$\begin{aligned} \varepsilon_{xy} = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right] &= \frac{1}{2} \left\{ \sin(2\varphi) \cdot \left[\frac{\partial u_\rho}{\partial \rho} - \frac{u_\rho}{\rho} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial u_\rho}{\partial \varphi} \right] + \right. \\ &\left. + \cos(2\varphi) \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial u_\rho}{\partial \varphi} + \frac{\partial u_\varphi}{\partial \rho} - \frac{u_\varphi}{\rho} \right] \right\}, \end{aligned} \quad (2.1.53)$$

$$\varepsilon_{xz} = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial u_x}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial x} \right] = \frac{1}{2} \left\{ \cos(\varphi) \cdot \left[\frac{\partial u_\rho}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial \rho} \right] - \sin(\varphi) \left[\frac{\partial u_\varphi}{\partial z} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial u_z}{\partial \varphi} \right] \right\}, \quad (2.1.54)$$

$$\varepsilon_{yz} = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial u_y}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial y} \right] = \frac{1}{2} \left\{ \sin(\varphi) \cdot \left[\frac{\partial u_\rho}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial \rho} \right] + \cos(\varphi) \left[\frac{\partial u_\varphi}{\partial z} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial u_z}{\partial \varphi} \right] \right\}. \quad (2.1.55)$$

Iz (2.1.51–55) i izraza za deformaciju u cilindričnim koordinatama (2.1.3) dobijaju se izrazi:

$$\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} = \varepsilon_{\rho\rho} + \varepsilon_{\varphi\varphi}, \quad (2.1.56)$$

$$\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy} = (\varepsilon_{\rho\rho} - \varepsilon_{\varphi\varphi}) \cos(2\varphi) - 2\varepsilon_{\rho\varphi} \sin(2\varphi), \quad (2.1.57)$$

$$\varepsilon_{xy} = \frac{\varepsilon_{\rho\rho} - \varepsilon_{\varphi\varphi}}{2} \sin(2\varphi) + \varepsilon_{\rho\varphi} \cdot \cos(2\varphi), \quad (2.1.58)$$

$$\varepsilon_{xz} - i\varepsilon_{yz} = e^{-i\varphi} (\varepsilon_{\rho z} - i\varepsilon_{\varphi z}). \quad (2.1.59)$$

Polazeći od (2.1.57–58) sledi:

$$\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy} \mp 2i\varepsilon_{xy} = (\varepsilon_{\rho\rho} - \varepsilon_{\varphi\varphi} \mp 2i\varepsilon_{\rho\varphi}) e^{\mp 2i\varphi}. \quad (2.1.60)$$

Dalje, iz (2.1.18) sledi izraz za *hidrostatičko naprezanje*:

$$\varepsilon_{hyd} = \delta^{tot} = \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz} = \varepsilon_{\rho\rho} + \varepsilon_{\varphi\varphi} + \varepsilon_{zz} = 2\varepsilon_{||} + \varepsilon_{zz}, \quad (2.1.61)$$

dok je *biaksijalno naprezanje* definisano sa:

$$\varepsilon_b = \varepsilon_{zz} - \frac{\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}}{2} = \varepsilon_{zz} - \frac{\varepsilon_{\rho\rho} + \varepsilon_{\varphi\varphi}}{2} = \varepsilon_{zz} - \varepsilon_{||} = \frac{3}{2} \varepsilon_{zz} - \frac{\varepsilon_{hyd}}{2}, \quad (2.1.62)$$

gde $\varepsilon_{||} = (\varepsilon_{\rho\rho} + \varepsilon_{\varphi\varphi})/2$ označava *naprezanje u ravni*. Može se pokazati da hidrostatičko i biaksijalno naprezanje imaju dominantan uticaj na lokalizaciju talasne funkcije (Tadić et al., 2002b).

U izotropnoj aproksimaciji, polazeći od izraza (2.1.27) i (2.1.61–62), sledi:

$$\varepsilon_{hyd} = -2 \frac{1-2\nu}{1-\nu} \varepsilon_0 \Theta(\vec{r}), \quad (2.1.63)$$

$$\varepsilon_b = \frac{3}{2} \varepsilon_{zz} - \frac{1-2\nu}{1-\nu} \varepsilon_0 \Theta(\vec{r}), \quad (2.1.64)$$

pa je za računanje navedenih veličina neophodno naći samo komponentu ε_{zz} . Za razmatrane materijale iz III-V grupe obično se pretpostavlja da je $\nu=1/3$, što je približno ispunjeno i dodatno pojednostavljuje gore navedene izraze.

2.2. Modeli jednočestičnih stanja

Odabir modela elektronskih i šupljinskih stanja zavisi od karakteristika materijala spoja i oblika nanostrukture. Energetski procepi razmatranih materijala su veliki, te su efekti sprezanja valentne i provodne zone zanemarljivi. Takođe, simetrija talasne funkcije elektrona u blizini dna provodne zone je tipa s -orbitala, pa je upotreba jednozonskog modela u sfernoj aproksimaciji adekvatna za provodnu zonu (Chuang, 1995). Većina struktura razmatranih u okviru disertacije imaju male dimenzije (odnosno visinu), a parametri materijala strukture i matrice su takvi da je u sfernoj aproksimaciji prema jednozonskom modelu efektivna masa teških šupljina značajno veća od lakih šupljina. Stoga stanja teškošupljinskog ekscitona imaju najniže energije, te imaju najveći udeo u spektru fotoluminiscencije, pa je dovoljno uzeti u razmatranje samo hh stanja, odnosno za valentnu zonu zadovoljavajuća je jednozonska aproksimacija (Tadić et al., 2002b). U razmatranim strukturama u slučaju kada postoji naprezanje dolazi do dodatnog razdvajanja hh i lh zona čime su efekti mešanja dodatno minimizirani, te je jednozonski model adekvatan za opis šupljinskih stanja (Ding et al., 2010). Takođe treba napomenuti da su materijali razmatranih struktura takvi da postoji veliki zonski ofset na spoju tačka/matrica, pa je u izvesnom broju slučajeva lokalizacija jednočestičnih stanja pretežno u oblasti jame. Tada se zadovoljavajuća rešenja mogu dobiti ukoliko se za računanje usvoje isti parametri za tačku i matricu.

U slučaju kompleksnih struktura, kao što su vertikalno spregnute (naslagane) tačke (veštački molekuli), neophodna je upotreba višezonskog modela. Naime, za određene debljine barijere između tačaka može se desiti da osnovno stanje ekscitona bude antivezujuće (Krenner et al., 2006; Climente et al., 2008), što nije slučaj kod prirodnih molekula. Ovo se ne može dobiti kao rezultat jednozonskog modela, gde je osnovno stanje uvek vezujuće. Ipak, razmatranje ove problematike prevazilazi okvire ove disertacije.

2.2.1. Uticaj naprezanja na konfinirajuće potencijale

Razmotrimo slučaj kristala koji je deformisan tako da je očuvana periodičnost strukture. U ovom slučaju očuvana je validnost Blochove teoreme, pri čemu je modulišući deo Blochove funkcije izmenjen tako da odgovara novoj periodi deformisane elementarne ćelije. Primenom teorije perturbacije može se uračunati uticaj naprezanja na jednočestična stanja, gde se u hamiltonijanu pojavljuju dodatni članovi (Bir i Pikus, 1972). U okolini centra Brillouinove zone uticaj perturbacije se svodi na dodatni član, koji, zajedno sa zonskim ofsetom, figuriše u disperzionoj relaciji kao *efektivni konfinirajući potencijal*.

Najjednostavniji izraz za efektivni potencijal dobija se za provodnu zonu u jednozonskoj aproksimaciji uz pretpostavku izotropije (Chuang, 1995):

$$V_{eff,e}(\vec{r}) = a_c(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) + V_{off,e}(\vec{r}) = a_c\varepsilon_{hyd} + V_{off,e}(\vec{r}), \quad (2.2.1)$$

gde je a_c hidrostatički deformacioni potencijal, a $V_{off,e}$ zonski ofset za provodnu zonu.

U slučaju valentne zone, kada postoji degeneracija, uticaj deformacije kristala dat je u formi *hamiltonijana naprezanja*. Kod nanostrukture na bazi III–V poluprovodničkih jedinjenja, *so* zona u okolini Γ -tačke ($k \cong 0$) je i do nekoliko 100 meV udaljena od *hh* i *lh* zona, pa nije neophodno uzeti je u razmatranje. Tada je hamiltonijan naprezanja (Bir i Pikus, 1972):

$$\hat{H}_\varepsilon = \begin{bmatrix} p+q & -s & r & 0 \\ -s^* & p-q & 0 & r \\ r^* & 0 & p-q & s \\ 0 & r^* & s^* & p+q \end{bmatrix}, \quad (2.2.2)$$

gde je energetska osa za šupljine usmerena od dna provodne zone ka vrhu valentne zone, a fazni faktor i oznake članova dati su u alternativnom obliku (Chuang, 1991).

Matrični elementi hamiltonijana (2.2.2) su:

$$p = -a_v(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}), \quad (2.2.3a)$$

$$q = -b\left(\frac{\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}}{2} - \varepsilon_{zz}\right), \quad (2.2.3b)$$

$$s = -d(\varepsilon_{xz} - i\varepsilon_{yz}), \quad (2.2.3c)$$

$$\begin{aligned}
r &= b \frac{\sqrt{3}}{2} (\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy}) - id \varepsilon_{xy} = \\
&= \frac{\sqrt{3}b+d}{4} (\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy} - 2i\varepsilon_{xy}) + \frac{\sqrt{3}b-d}{4} (\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy} + 2i\varepsilon_{xy}).
\end{aligned} \tag{2.2.3d}$$

Ovde su l , m i n parametri (Bir i Pikus, 1972) zamenjeni deformacionim potencijalima za valentnu zonu a_v , b i d . Na osnovu izraza (2.1.56–62) jednostavno je dobiti izraze (2.2.3) u cilindričnim koordinatama (Arsoski et al., 2013a):

$$p = -a_v (\varepsilon_{\rho\rho} + \varepsilon_{\varphi\varphi} + \varepsilon_{zz}) = -a_v \varepsilon_{hyd}, \tag{2.2.4a}$$

$$q = -b \left(\frac{\varepsilon_{\rho\rho} + \varepsilon_{\varphi\varphi}}{2} - \varepsilon_{zz} \right) = b \varepsilon_b, \tag{2.2.4b}$$

$$s = -e^{-i\varphi} \cdot d (\varepsilon_{\rho z} - i \varepsilon_{\varphi z}), \tag{2.2.4c}$$

$$r = e^{-2i\varphi} \frac{\sqrt{3}b+d}{4} (\varepsilon_{\rho\rho} - \varepsilon_{\varphi\varphi} - 2i\varepsilon_{\rho\varphi}) + e^{2i\varphi} \frac{\sqrt{3}b-d}{4} (\varepsilon_{\rho\rho} - \varepsilon_{\varphi\varphi} + 2i\varepsilon_{\rho\varphi}). \tag{2.2.4d}$$

Za materijale nanostrukture u ovoj disertaciji drugi član u izrazu (2.2.4d) se može zanemariti jer je $|\sqrt{3}b+d| \gg |\sqrt{3}b-d|$, čime je zadovoljen uslov za primenu hamiltonijana naprezanja u aksijalnoj aproksimaciji (Arsoski et al., 2013a).

Nalaženjem svojstvenih vrednosti samo hamiltonijana naprezanja \hat{H}_ε za vrednosti $k \geq 0$ i uračunavanjem zonskog ofseta na spoju tačka/matrica, dobijaju se pojednostavljeni izrazi za *efektivne potencijale ivica zona* (Tadić et al., 2002a; Arsoski et al., 2013a):

$$V_{vb,hh}(\vec{r}) = p + \text{sgn}(q) \sqrt{|q|^2 + |r|^2 + |s|^2} + V_{off,h}, \tag{2.2.5a}$$

$$V_{vb,lh}(\vec{r}) = p - \text{sgn}(q) \sqrt{|q|^2 + |r|^2 + |s|^2} + V_{off,h}, \tag{2.2.5b}$$

za hh i lh zonu, redom. Ovde $V_{off,h}$ predstavlja zonski ofset na spoju tačka/matrica za valentnu zonu.

Numerički proračuni kod cilindrične nanotačke pokazuju da se prilično dobri rezultati dobijaju kada se zanemare članovi koji zavise od φ (tj. $s=r=0$) (Tadić et al., 2002b). Tada je hamiltonijan naprezanja dat u dijagonalnoj formi (Tadić et al., 2002a; Chuang, 1995):

$$\hat{H}_\varepsilon = \text{diag}(p+q, p-q, p-q, p+q), \tag{2.2.6}$$

odakle se dobijaju izrazi za efektivne potencijale u *dijagonalnoj aproksimaciji* :

$$\begin{aligned}
V_{eff, hh}(\vec{r}) &= p + q + V_{off, h} = -a_v \varepsilon_{hyd} + b \varepsilon_b + V_{off, h} = \\
&= -a_v \varepsilon_{hyd} - \frac{b}{2} \varepsilon_{hyd} + \frac{3}{2} b \varepsilon_{zz} + V_{off, h},
\end{aligned} \tag{2.2.7a}$$

$$\begin{aligned}
V_{eff, lh}(\vec{r}) &= p - q + V_{off, h} = -a_v \varepsilon_{hyd} - b \varepsilon_b + V_{off, h} = \\
&= -a_v \varepsilon_{hyd} + \frac{b}{2} \varepsilon_{hyd} - \frac{3}{2} b \varepsilon_{zz} + V_{off, h}.
\end{aligned} \tag{2.2.7b}$$

Polazeći od (2.2.1) i (2.2.7) i izraza (2.1.63–64) sledi da je za proračun uticaja naprezanja prema teoriji izotropne elastičnosti u dijagonalnoj aproksimaciji neophodno izračunati samo komponentu ε_{zz} tenzora naprezanja (Arsoski et al., 2012; Arsoški et al., 2013a).

2.2.2. Hamiltonijan za jednočestična stanja prema jednozonskom modelu u sfernoj aproksimaciji

Na početku poglavlja navedeni su preduslovi za primenu jednozonskog modela na strukturu razmotrene u okviru ove disertacije. Sferna (izotropna) aproksimacija daje dobre rezultate za provodnu zonu, a često se sa zadovoljavajućom tačnošću može primeniti i na valentnu zonu. Tada se hamiltonijan razmatrane čestice može napisati u formi:

$$\hat{H}_\alpha = \left(\hat{p} - q_\alpha \vec{A}_\alpha \right) \frac{1}{2m_\alpha^*(\vec{r}_\alpha)} \left(\hat{p} - q_\alpha \vec{A}_\alpha \right) + V_{eff, \alpha}(\vec{r}) + q_\alpha \vec{r}_\alpha \vec{F} + \hat{H}_\alpha^z, \tag{2.2.8}$$

gde je $\hat{p} = -i\hbar \nabla$ kanonski moment čestice, m_α^* prostorno zavisna efektivna masa, indeks $\alpha \in \{e, hh, lh\}$ označava elektron, tešku šupljinu i laku šupljinu, redom, $\vec{A}_\alpha = \vec{B} \times \vec{r}_\alpha / 2$ je magnetski vektor potencijal dat u simetričnoj Coulombovoj kalibraciji, q_α je elementarno naelektrisanje čestice ($q_\alpha = -e$ za elektron i $q_\alpha = +e$ za teške i lake šupljine), $V_{eff, \alpha}$ je efektivni konfinirajući potencijal definisan u prethodnom poglavlju, \vec{F} je vektor električnog polja i

$$\hat{H}_\alpha^z = g_\alpha^* \mu_B \vec{B} \vec{\sigma}^\alpha \tag{2.2.9}$$

je Zeemanov član. Ovde je g_α^* efektivni g -faktor čestice, $\mu_B = e\hbar / 2m_0$ je Bohrov magneton, a $\vec{\sigma}^\alpha$ je vektor Paulijevih matrica.

U okviru disertacije razmatrani su slučajevi uniformnog magnetskog i električnog polja usmerenog duž pravca narastanja strukture (z -ose). Za usvojeno $\vec{F} = F\vec{e}_z$ i $\vec{B} = B\vec{e}_z$ dobija se $\vec{r}_\alpha\vec{F} = z_\alpha F$, $\vec{B}\vec{\sigma}^\alpha = B\sigma_z^\alpha$ i magnetski vektor potencijal je:

$$\vec{A}_\alpha = \frac{B}{2}(-y_\alpha\vec{e}_x + x_\alpha\vec{e}_y) = \frac{B\rho_\alpha}{2}\vec{e}_\varphi. \quad (2.2.10)$$

Polazeći od (2.2.8–10), hamiltonijan u cilindričnim koordinatama dobija oblik:

$$\begin{aligned} \hat{H}_\alpha = & -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{\rho_\alpha} \frac{\partial}{\partial \rho_\alpha} \left(\frac{\rho_\alpha}{m_\alpha^*} \frac{\partial}{\partial \rho_\alpha} \right) + \frac{1}{m_\alpha^* \rho_\alpha^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi_\alpha^2} + \frac{\partial}{\partial z_\alpha} \left(\frac{1}{m_\alpha^*} \frac{\partial}{\partial z_\alpha} \right) \right) + \\ & + \frac{i\hbar q_\alpha B}{2m_\alpha^*} \frac{\partial}{\partial \varphi_\alpha} + \frac{(q_\alpha B \rho_\alpha)^2}{8m_\alpha^*} + V_{\text{eff},\alpha}(\vec{r}_\alpha) + q_\alpha z_\alpha F + g_\alpha^* \mu_B B \sigma_z^\alpha. \end{aligned} \quad (2.2.11)$$

2.2.3. Luttinger-Kohnov višezonski model

U slučaju degenerisanih zona pojednostavljeni model predstavljen u prethodnom poglavlju često ne daje zadovoljavajuće rezultate pošto ne uzima u obzir mešanje. Egzaktniji pristup je primena $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ teorije, gde za slučajeve razmatrane u okviru ove disertacije zadovoljavajuće rezultate daje četvorozonski Luttinger-Kohnov (LK) model (Luttinger i Kohn, 1955), koji u razmatranje uključuje mešanje hh i lh zona. U slučaju masivnog materijala (engl. *bulk*) elektronska struktura u blizini centra zone se određuje koristeći bazis periodičnih delova Blochovih funkcija u centru Brillouinove zone $|3/2, j_z\rangle$:

$$u_{10}(\vec{r}) = \left| \frac{3}{2}, +\frac{3}{2} \right\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}} |(X+iY)\uparrow\rangle, \quad (2.2.12a)$$

$$u_{20}(\vec{r}) = \left| \frac{3}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle = -\frac{1}{\sqrt{6}} |(X+iY)\downarrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |Z\uparrow\rangle, \quad (2.2.12b)$$

$$u_{30}(\vec{r}) = \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} |(X-iY)\uparrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |Z\downarrow\rangle, \quad (2.2.12c)$$

$$u_{40}(\vec{r}) = \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |(X-iY)\uparrow\rangle. \quad (2.2.12d)$$

Ovde su $Y_{1,0} = |Z\rangle$ i $Y_{1,\pm 1} = \mp |X \pm iY\rangle / \sqrt{2}$ funkcije koje imaju istu simetriju kao sferni harmonici p -orbitala. U blizini vrha valentne zone talasna funkcija elektrona ima oblik tipa p -orbitala, pa je usvojeni bazis adekvatan. Na sličan način, stanja u provodnoj zoni mogu se predstaviti u bazisu $|iS, \uparrow(\downarrow)\rangle$, gde je $Y_{0,0} = |S\rangle$ funkcija koja ima oblik sfernog harmonika s -orbitale.

U formiranom bazisu hamiltonijan za elektron u valentnoj zoni ima oblik (Chao i Chuang, 1992; Pedersen i Chang, 1996):

$$\hat{H}_h = \begin{bmatrix} \hat{P} + \hat{Q} & -\hat{S} & \hat{R} & 0 \\ -\hat{S}^* & \hat{P} - \hat{Q} & 0 & \hat{R} \\ \hat{R}^* & 0 & \hat{P} - \hat{Q} & \hat{S} \\ 0 & \hat{R}^* & \hat{S}^* & \hat{P} + \hat{Q} \end{bmatrix} + \hat{H}_\varepsilon + I_{4 \times 4} \cdot V_{off,h} + \kappa J_z \hat{H}_z + e \vec{r} \vec{F}, \quad (2.2.13)$$

gde su operatori u matricnim elementima hamiltonijana napisani u simetrizovanoj formi:

$$\hat{P} = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[\frac{1}{2} (\hat{k}_+ \gamma_1 \hat{k}_- + \hat{k}_- \gamma_1 \hat{k}_+) + \hat{k}_z \gamma_1 \hat{k}_z \right], \quad (2.2.14a)$$

$$\hat{Q} = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[\frac{1}{2} (\hat{k}_+ \gamma_2 \hat{k}_- + \hat{k}_- \gamma_2 \hat{k}_+) - 2 \hat{k}_z \gamma_2 \hat{k}_z \right], \quad (2.2.14b)$$

$$\hat{S} = \frac{\hbar^2}{2m_0} \cdot \sqrt{3} (\hat{k}_- \gamma_3 \hat{k}_z + \hat{k}_z \gamma_3 \hat{k}_-), \quad (2.2.14c)$$

$$\hat{R} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \sqrt{3} [\hat{k}_- \cdot \vec{\gamma} \cdot \hat{k}_- - \hat{k}_+ \cdot \vec{\mu} \cdot \hat{k}_+], \quad (2.2.14d)$$

$$\hat{H}_z = j \frac{\hbar^2}{m_0} [\hat{k}_x, \hat{k}_y] = \hbar \omega_c. \quad (2.2.14e)$$

Ovde $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ i κ predstavljaju Luttingerove parametre, pri čemu je $\vec{\gamma} = (\gamma_2 + \gamma_3)/2$ i $\vec{\mu} = (\gamma_3 - \gamma_2)/2$. $\omega_c = qB/m_0$ je ciklotronska učestanost, \hat{H}_ε je hamiltonijan koji opisuje uticaj naprezanja i dat je matricom dimenzije 4×4 koja je definisana u poglavlju 2.2.1, $I_{4 \times 4}$ je jedinična matrica dimenzije 4×4 , $J_z = \text{diag}(+3/2, +1/2, -1/2, -3/2)$ je dijagonalna matrica projekcije ugaonog momenta \mathbf{J} ($J = 3/2$) Blochovih funkcija za elektrone u valentnoj zoni na z osu, a referentne projekcije kanonskog talasnog vektora na Descartesove ose su:

$$\hat{k}_x = -i \frac{\partial}{\partial x} - \frac{eBy}{2\hbar}, \quad (2.2.15a)$$

$$\hat{k}_y = -i \frac{\partial}{\partial x} + \frac{eBx}{2\hbar}, \quad (2.2.15b)$$

$$\hat{k}_z = -i \frac{\partial}{\partial z}, \quad (2.2.15c)$$

gde je izvedeni operator:

$$\hat{k}_{\mp} = \hat{k}_x \mp i\hat{k}_y. \quad (2.2.16)$$

Operatori analogni (2.2.15), ali u cilindričnim koordinatama, su:

$$\hat{k}_{\rho} = -i \frac{\partial}{\partial \rho}, \quad (2.2.17a)$$

$$\hat{k}_{\varphi} = -i \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{eB\rho}{2\hbar}, \quad (2.2.17b)$$

$$\hat{k}_z = -i \frac{\partial}{\partial z}, \quad (2.2.17c)$$

gde je:

$$\hat{k}_{\mp} = e^{\mp i\varphi} (\hat{k}_{\rho} \mp i\hat{k}_{\varphi}) = e^{\mp i\varphi} \left[-i \frac{\partial}{\partial \rho} \mp i \left(-i \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{eB\rho}{2\hbar} \right) \right]. \quad (2.2.18)$$

Ukoliko se u (2.2.14d) zanemari drugi član (tj. usvoji se da je $\bar{\mu} = 0$) dobija se aksijalno simetrični hamiltonijan. Ovakva aproksimacija ima široku primenu u analizi poluprovodničkih nanotačaka (Pedersen i Chang, 1996).

U slučaju kada naprežanje značajno razdvaja hh i lh zone, što je slučaj kod napregnutih In(Ga)As/GaAs nanotačaka, dijagonalna aproksimacija daje dobar kvalitativan uvid u jednočestična stanja (Tadić et al., 2011). Na ovaj način zanemaruje se mešanje zona, ali se računaju efekti koji potiču od razlike Luttingerovih parametara u ravni strukture u odnosu na pravac narastanja. Hamiltonijan u dijagonalnoj aproksimaciji u cilindričnim koordinatama tada ima formu sličnu (2.2.11) :

$$\hat{H}_{hh(lh)} = -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\frac{\rho}{m_{hh(lh),||}^*} \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{m_{hh(lh),||}^* \cdot \rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{m_{hh(lh),z}^*} \frac{\partial}{\partial z} \right) \right) + \frac{i\hbar q_a B}{2m_{hh(lh),||}^*} \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{(q_a B \rho)^2}{8m_{hh(lh),||}^*} + V_{eff,h}(\vec{r}) + ezF + 2j_z \kappa \mu_B B. \quad (2.2.19)$$

gde su

$$m_{hh(lh),||}^* = \frac{m_0}{\gamma_1 \pm \gamma_2}, \quad (2.2.20a)$$

$$m_{hh(lh),z}^* = \frac{m_0}{\gamma_1 \mp 2\gamma_2}. \quad (2.2.20b)$$

Dodatno pojednostavljenje modela predstavljenog jednačinama (2.2.19–20) podrazumeva usrednjenje parametara po svim pravcima, što dovodi do izotropne predstave elektronske strukture razmatranih materijala. Na ovaj način se uvodi *sferna aproksimacija*, koja odgovara jednozonskom modelu prezentovanom u prethodnom poglavlju. Treba napomenuti da jednozonski model daje dobar opis stanja elektrona u blizini dna provodne zone, ali u izvesnim slučajevima i dobar kvalitativan opis stanja elektrona u blizini vrha valentne zone.

2.2.4. Svojsvene funkcije za aksijalno simetrične strukture

U okviru disertacije razmatrane su nanotačke koje su praktično aksijalno simetrične, odnosno karakteriše ih visok stepen izotropije Luttingerovih parametara i konstanti elastičnosti u ravni strukture. Tada se primenom aksijalne i/ili sferne aproksimacije dolazi do aksijalno simetričnih rešenja za talasne funkcije, pa se dimenzija rešavanja problema svodi sa 3D na 2D. Pri tome je pogodno hamiltonijan i talasne funkcije predstaviti u cilindričnim koordinatama.

U slučaju jednozonskog modela ili dijagonalne aproksimacije zbog simetrije (videti (2.2.11) i (2.2.19)) lako je zaključiti da je anvelopna funkcija data sa:

$$\Psi_{n_{e(h)}, l_{e(h)}}^{e(h)}(\vec{r}_{e(h)}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{il_{e(h)}\varphi_{e(h)}} \psi_{n_{e(h)}, l_{e(h)}}(\rho_{e(h)}, z_{e(h)}), \quad (2.2.21)$$

gde je $n_{e(h)}$ glavni kvantni broj, a $l_{e(h)} \in \{0, \pm 1, \pm 2, \dots\}$ orbitalni kvantni broj koji predstavlja projekciju orbitalnog momenta \mathbf{L} čestice na z -osu.

U višezonskom modelu talasna funkcija šupljina data je u formi spinora anvelopnih funkcija:

$$\Psi_{n_h, f_{zh}}^h(\vec{r}_h) = [\Psi_{n_h, f_{zh}, +3/2}^h, \Psi_{n_h, f_{zh}, +1/2}^h, \Psi_{n_h, f_{zh}, -1/2}^h, \Psi_{n_h, f_{zh}, -3/2}^h]^T, \quad (2.2.22)$$

gde je $f_{zh} = l_h + j_z$ dobar kvantni broj koji predstavlja projekciju ukupnog ugaonog momenta $\mathbf{F} = \mathbf{L} + \mathbf{J}$ na z osu. Zbog aksijalne simetrije svaka od anvelopnih funkcija data je u formi:

$$\Psi_{n_h, f_{zh}, j_z}^h(\vec{r}_h) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i l_h \varphi_h} \psi_{n_h, l_h, j_z}(\rho_h, z_h). \quad (2.2.23)$$

Za dato f_{zh} skup orbitalnih kvantnih brojeva $(l'_h, l'_h + 1, l'_h + 2, l'_h + 3)$ odgovara spinoru koji je dat izrazom (2.2.22), gde je $l'_h = f_{zh} - 3/2$.

U slučaju kada nanotačka poseduje refleksionu simetriju u odnosu na ravan $z = \text{const}$ dijagonalni članovi kinetičkog dela LK hamiltonijana komutiraju sa operatorom vertikalne inverzione simetrije \hat{e}_z (Climente et al., 2008). Pojedinačne komponente spinora su strogo određene parnosti, tj. ili su simetrične ili antisimetrične (Tadić i Peeters, 2004). Komponente Luttingerovog spinora iste parnosti su prva i treća, odnosno druga i četvrta. Pri tome, prva i treća komponenta imaju suprotnu parnost od druge i četvrte (Tadić i Peeters, 2004; Climente et al., 2008). Kako operator \hat{e}_z ne komutira sa vandijagonalnim elementima LK hamiltonijana, uvodi se *operator hiralnosti* (Climente et al., 2008)

$$\hat{\sigma}_{ch} = \begin{bmatrix} \hat{e}_z & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\hat{e}_z & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \hat{e}_z & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\hat{e}_z \end{bmatrix}. \quad (2.2.24)$$

Ukoliko su prva i treća komponenta Luttingerovog spinora simetrične, a druga i četvrta antisimetrične, spinor odgovara šupljinskom stanju hiralnosti (+), koje se naziva *vezujuće stanje*. Kada je parnost komponenti spinora suprotna od parnosti vezujućeg stanja, spinor odgovara šupljinskom stanju hiralnosti (-), koje se naziva *antivezujuće stanje* (Climente et al., 2008).

2.3. Model ekscitonskih stanja u 3D prostoru

Hamiltonijan ekscitona je (Tadić i Peeters, 2004):

$$\hat{H}_x = \hat{H}_e + \hat{H}_h + V_C, \quad (2.3.1)$$

gde su \hat{H}_e i \hat{H}_h jednočestični hamiltonijani dati u prethodnom poglavlju, a V_C je energija koja potiče od Coulombove interakcije para elektron-šupljina:

$$V_C = -\frac{q^2}{4\pi \epsilon |\vec{r}_e - \vec{r}_h|}. \quad (2.3.2)$$

Ovde su \vec{r}_e i \vec{r}_h vektori položaja elektrona i šupljine, redom, a $\epsilon = \epsilon_0 \epsilon_r$. Pretpostavlja se da je relativna permitivnost ϵ_r ista u materijalima tačke i matrice.

Generalno, anvelopna funkcija ekscitona može se razviti u proizvode elektronskih i šupljinskih anvelopnih funkcija (Tadić i Peeters, 2004):

$$\Psi^x(\vec{r}_e, \vec{r}_h) = \sum_m \sum_n c_{mn} \Psi_m^e(\vec{r}_e) \Psi_n^h(\vec{r}_h), \quad (2.3.3)$$

gde su Ψ_m^e i Ψ_n^h svojstvene funkcije m -tog elektronskog i n -tog šupljinskog stanja, redom, a c_{mn} su koeficijenti ekspanzije. Svojstvene vrednosti se dobijaju iz ekscitonske Schrödingerove jednačine:

$$\hat{H}_x \Psi^x = E_x \Psi^x. \quad (2.3.4)$$

Množenjem jednačine (2.3.4) sa konjugovano-kompleksnom vrednošću ekscitonske talasne funkcije i integracijom po čitavom prostoru dobija se sekularna jednačina:

$$\sum_p \sum_q \sum_m \sum_n \left\{ c_{p,q}^* c_{m,n} \langle \Psi_p^e \Psi_q^h | V_C | \Psi_m^e \Psi_n^h \rangle - |c_{m,n}|^2 (E_x - E_m - E_n - E_g) \delta_{p,m} \delta_{q,n} \right\} = 0, \quad (2.3.5)$$

gde su E_m i E_n jednočestične energije elektrona i šupljina, redom, E_g energetski procep za matrični materijal, a δ Kroneckerov simbol. Coulombov matrični element je:

$$\begin{aligned} \langle \Psi_p^e \Psi_q^h | V_C | \Psi_m^e \Psi_n^h \rangle &= \iint_{\Omega_e, \Omega_h} f_{p,m}^e(\vec{r}_e) V_C(\vec{r}_e - \vec{r}_h) f_{q,n}^h(\vec{r}_h) d\vec{r}_e d\vec{r}_h = \\ &= \int_{\Omega_e} f_{p,m}^e(\vec{r}_e) \left\{ \int_{\Omega_h} V_C(\vec{r}_e - \vec{r}_h) f_{q,n}^h(\vec{r}_h) d\vec{r}_h \right\} d\vec{r}_e, \end{aligned} \quad (2.3.6)$$

gde je $f_{p,m}^e(\vec{r}_e) = \Psi_p^{e*} \Psi_m^e$ proizvod jednočestičnih talasnih funkcija m -tog i p -tog elektronskog stanja, a $f_{q,n}^h(\vec{r}_h) = \Psi_q^{h*} \Psi_n^h$ proizvod jednočestičnih talasnih funkcija n -tog i q -tog šupljinskog stanja. Nalaženje matičnih elemenata svodi se na računanje šestodimenzionih (6D) integrala datih izrazom (2.3.6) u realnom prostoru. Problem se značajno može uprostiti ukoliko se izvrši prelaz u inverzni prostor. Primenom konvolucione teoreme (Abramowitz i Stegun, 1972) na izraz u vitičastoj zagradi u (2.3.6):

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_h} V_C(\vec{r}_e - \vec{r}_h) f_{q,n}^h(\vec{r}_h) d\vec{r}_h &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\Omega_h} f_{q,n}^h(\vec{r}_h) \left\{ \int_{\Omega_{\vec{k}}} Q_C(\vec{k}) e^{i\vec{k}(\vec{r}_e - \vec{r}_h)} d\vec{k} \right\} d\vec{r}_h = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\Omega_{\vec{k}}} Q_C(\vec{k}) e^{i\vec{k}\vec{r}_e} \left\{ \int_{\Omega_h} f_{q,n}^h(\vec{r}_h) e^{-i\vec{k}\vec{r}_h} d\vec{r}_h \right\} d\vec{k} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\Omega_{\vec{k}}} Q_C(\vec{k}) F_{q,n}^h(\vec{k}) e^{i\vec{k}\vec{r}_e} d\vec{k}, \end{aligned} \quad (2.3.7)$$

gde je Q_C Fourierova transformacija izraza za Coulombov potencijal. Zamenom izraza (2.3.7) u (2.3.6) sledi:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_e} f_{p,m}^e(\vec{r}_e) \left\{ \int_{\Omega_h} V_C(\vec{r}_e - \vec{r}_h) f_{q,n}^h(\vec{r}_h) d\vec{r}_h \right\} d\vec{r}_e &= \\ = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\Omega_{\vec{k}}} Q_C(\vec{k}) F_{q,n}^h(\vec{k}) \left\{ \int_{\Omega_e} f_{p,m}^e(\vec{r}_e) e^{i\vec{k}\vec{r}_e} d\vec{r}_e \right\} d\vec{k} &= \\ = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\Omega_{\vec{k}}} F_{p,m}^e(-\vec{k}) Q_C(\vec{k}) F_{q,n}^h(\vec{k}) d\vec{k}. \end{aligned} \quad (2.3.8)$$

Konačno, izraz za Coulombov matični element, koji je inicijalno dat kao 6D integral u realnom prostoru, primenom Fourierove transformacije svodi se na 3D integral u inverznom prostoru (Tadić i Peeters, 2004):

$$\langle \Psi_p^e \Psi_q^h | V_C | \Psi_m^e \Psi_n^h \rangle = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\Omega_{\vec{k}}} F_{p,m}^e(-\vec{k}) Q_C(\vec{k}) F_{q,n}^h(\vec{k}) d\vec{k}. \quad (2.3.9)$$

Neka je k_{\parallel} projekcija vektora \vec{k} na (k_x, k_y) ravan, a φ_k je ugao koji \vec{k}_{\parallel} zaklapa sa k_x osom. Takođe, neka je ρ projekcija vektora položaja \vec{r} na (x,y) ravan, a φ_r polarni ugao. Fourierova transformacija Coulombovog potencijala u cilindričnim koordinatama je (Tadić i Peeters, 2004):

$$Q_C(\vec{k}) = \int_{\Omega_r} \frac{-q^2}{4\pi\epsilon|\vec{r}|} e^{i\vec{k}\vec{r}} d\vec{r} = \frac{-q^2}{4\pi\epsilon} \int_{z=-\infty}^{\infty} dz \cdot e^{ik_z z} \int_{\rho=0}^{\infty} d\rho \cdot \frac{\rho}{\sqrt{\rho^2 + z^2}} \int_{\varphi=0}^{2\pi} d\varphi \cdot e^{ik_{\parallel}\rho \cos\varphi}, \quad (2.3.10)$$

gde je $\varphi = \varphi_k - \varphi_r$, a integral:

$$\int_{\varphi=0}^{2\pi} d\varphi \cdot e^{ik_{\parallel}\rho \cos\varphi} = 2\pi J_0(k_{\parallel}\rho), \quad (2.3.11)$$

ima analitičko rešenje, kao i integral:

$$\int_{\rho=0}^{\infty} d\rho \cdot \frac{\rho}{\sqrt{\rho^2 + z^2}} J_0(k_{\parallel}\rho) = \frac{e^{-k_{\parallel}|z|}}{k_{\parallel}}. \quad (2.3.12)$$

Izraz za Fourierovu transformaciju Coulombovog potencijala je (Tadić i Peeters, 2004):

$$\begin{aligned} Q_C(\vec{k}) &= \frac{-q^2}{2\varepsilon} \int_{z=-\infty}^{\infty} \frac{e^{-k_{\parallel}|z|}}{k_{\parallel}} e^{ik_z z} dz = \frac{-q^2}{2\varepsilon} \left\{ \int_{z=-\infty}^0 \frac{e^{k_{\parallel}z}}{k_{\parallel}} e^{ik_z z} dz + \int_{z=0}^{\infty} \frac{e^{-k_{\parallel}z}}{k_{\parallel}} e^{ik_z z} dz \right\} = \\ &= \frac{-q^2}{2\varepsilon \cdot k_{\parallel}} \left\{ \frac{1}{k_{\parallel} + ik_z} + \frac{1}{k_{\parallel} - ik_z} \right\} = \frac{-q^2}{\varepsilon \cdot (k_{\parallel}^2 + k_z^2)}. \end{aligned} \quad (2.3.13)$$

Konačno, izraz za Fourierovu transformaciju Coulombovog potencijala je (Tadić i Peeters, 2004):

$$Q_C(\vec{k}) = -\frac{q^2}{\varepsilon k^2}. \quad (2.3.14)$$

U bazis treba uključiti što veći broj stanja najniže energije kako bi dobili kvantitativno bolje rezultate. Uzmimo da je broj elektronskih bazisnih funkcija M , a šupljinskih N . Izraz (2.3.5) daje sistem od $M \cdot N$ linearnih jednačina, pa se nalaženje svojstvenih vrednosti svodi na dijagonalizaciju matrice definisane izrazom (2.3.5) dimenzija $M \cdot N \times M \cdot N$. U slučaju kada postoji aksijalna simetrija strukture navedena matrica se može transformisati u blok-dijagonalnu formu, gde različiti blokovi odgovaraju različitim kvantnim brojevima ekscitona, što će biti pokazano u narednom poglavlju. Kako bi se smanjila numerička greška, najbolje je problem postaviti tako da se rešenja traže za određeni ekscitonski kvantni broj, pri čemu u (2.3.3) figurišu samo proizvodi određenih ugaonih kvantnih brojeva jednočestičnih stanja. Napomenimo da je kod aksijalno simetričnih struktura neophodno uzeti u bazis sva stanja koja su u odsustvu eksternog polja degenerisana (npr. ukoliko je u bazisu talasnih funkcija elektrona stanje orbitalnog broja $l_e = -5$, onda u bazis treba dodati i stanje $l_e = 5$). Na ovaj način u izračunatim svojstvenim vrednostima energija ekscitona postojaće orbitalna degeneracija, koja inherentno postoji u aksijalno simetričnim strukturama.

2.3.1. Metod egzaktne dijagonalizacije za računanje ekscitonskih stanja u aksijalno simetričnim strukturama

U ovom poglavlju ćemo detaljno opisati matematičke modele za računanje stanja ekscitona u aksijalno simetričnim strukturama. Pri tome ćemo za elektrone usvojiti jednozonsku aproksimaciju, dok će šupljinska stanja biti određena na dva načina: (1) pomoću jednozonskog i (2) pomoću višezonskog modela. Pošto je masa teških šupljina značajno veća od mase lakih šupljina, osnovno stanje ekscitona u jednozonskoj aproksimaciji je *teškošupljinski eksciton* (*hh eksciton*). U višezonskom modelu usled mešanja nije moguće razdvojiti stanja na teškošupljinska i lakošupljinska, pa ćemo eksciton čija su stanja određena uz korišćenje višezonskog modela zvati *višezonski eksciton*.

2.3.1.1. Teškošupljinski eksciton

S obzirom da spin-orbitna interakcija nije uzeta u obzir, kao ni sprezanje provodne i valentne zone, z projekcije spina elektrona s_z i ugaonog momenta Blochovih funkcija za elektrone u valentnoj zoni j_z su dobri kvantni brojevi ekscitona u jednozonskoj aproksimaciji. Takođe, z komponenta ukupnog orbitalnog momenta ekscitona $l_x = l_e + l_h$ je dobar kvantni broj. Za dato l_x ekscitonska anvelopna funkcija (2.3.3) se može predstaviti u formi:

$$\Psi_{l_x}^x(\vec{r}_e, \vec{r}_h) = \sum_{n_e, n_h} \sum_{l_e} c_{n_e, n_h, l_e} \Psi_{n_e, l_e}^e(\vec{r}_e) \Psi_{n_h, l_x - l_e}^h(\vec{r}_h). \quad (2.3.15)$$

Jednostavno je pokazati da Zeemanov član koji zavisi od spina daje doprinos energiji ekscitona od:

$$E_{s_z, j_z}^{spin} = g_{s_z, j_z}^* \mu_B B / 2, \quad (2.3.16)$$

gde je $g_{s_z, j_z}^* = -\text{sgn}(s_z - j_z)(g_h^* - (-1)^{|s_z - j_z|} g_e^*)$ efektivni ekscitonski g -faktor. S obzirom da je E_{s_z, j_z}^{spin} konstantno za datu vrednost magnetske indukcije, ovaj član se može izuzeti iz proračuna. Ukupna energija ekscitona naknadno se određuje sa

$E_x^{tot} = E_x + E_{s_z, j_z}^{spin}$, gde je E_x energija ekscitona bez uračunatog Zeemanovog cepanja. U odsustvu magnetskog polja postoji orbitalna degeneracija svih jednočestičnih stanja osim $l=0$. Takođe, stanja elektrona i šupljina su dvostruko degenerisana po spinu, te su stanja ekscitona uređena u degenerisane oktuplete (osim stanja $l_x=0$ koja su uređena u kvadruplete).

Na osnovu prethodnog i jednačine (2.3.5), sekularna jednačina za hh eksciton data je sa:

$$(E_g + E_{n_e, l_e} + E_{n_h, l_x - l_e} - E_x) \cdot \delta_{l_e, l'_e} \cdot \delta_{n_e, n'_e} \cdot \delta_{n_h, n'_h} + \sum_{n_h} \sum_{n_e} \sum_{l_e} \langle \Psi_{n'_e, l'_e}^e(\vec{r}_e) \Psi_{n'_h, l'_x - l'_e}^h(\vec{r}_h) | V_C | \Psi_{n_e, l_e}^e(\vec{r}_e) \Psi_{n_h, l_x - l_e}^h(\vec{r}_h) \rangle = 0. \quad (2.3.17)$$

2.3.1.2. Višezonski eksciton

S obzirom da provodna i valentna zona nisu spregnute u četvorozonskom modelu, Coulombova interakcija, slično kao u jednozonskom modelu, ne zavisi od spina elektrona, te je s_z dobar kvantni broj ekscitona. Prema poglavlju 2.2.3 može se zaključiti da su stanja šupljina u aksijalnoj aproksimaciji klasifikovana prema z -projekciji ukupnog ugaonog momenta šupljine f_{zh} , ali stanja različitih f_{zh} figurišu u ekscitonu kao posledica Coulombove interakcije (videti izraz (2.3.5)). Međutim, kretanje centra mase ekscitona je aksijalno simetrično te je projekcija ukupnog ugaonog momenta ekscitona na z osu $f_{zx} = s_z + l_e - f_{zh}$ takođe dobar kvantni broj ekscitona u višezonskoj predstavi. Za dato s_z i f_{zx} spinor anvelopnih funkcija ekscitona je (Tadić i Peeters, 2004):

$$\Psi_{f_{zx}, s_z}^x(\vec{r}_e, \vec{r}_h) = \sum_{n_e, n_h} \sum_{l_e} C_{l_e, n_e, n_h, s_z} \Psi_{n_e, l_e}^e(\vec{r}_e) \Psi_{n_h, s_z + l_e - f_{zx}}^h(\vec{r}_h). \quad (2.3.18)$$

Sekularna jednačina za višezonski eksciton je (Tadić i Peeters, 2004):

$$(E_g + E_{n_e, l_e, s_z} + E_{n_h, s_z + l_e - f_{zx}} - E_x) \cdot \delta_{l_e, l'_e} \cdot \delta_{n_e, n'_e} \cdot \delta_{n_h, n'_h} + \sum_{n_h} \sum_{n_e} \sum_{l_e} \langle \Psi_{n'_e, l'_e}^e(\vec{r}_e) \Psi_{n'_h, s_z + l'_e - f_{zx}}^h(\vec{r}_h) | V_C | \Psi_{n_e, l_e}^e(\vec{r}_e) \Psi_{n_h, s_z + l_e - f_{zx}}^h(\vec{r}_h) \rangle = 0. \quad (2.3.19)$$

U odsustvu magnetskog polja usled spinske degeneracije elektrona (primetimo da su sekularne jednačine za $|f_{zx}, n_x, \uparrow\rangle$ i $|f_{zx} - 1, n_x, \downarrow\rangle$ stanja ekscitona iste dok im se

energije razlikuju za $g_e^* \mu_B B$) i Kramersove degeneracije šupljinskih stanja, ekscitonska stanja su uređena u spinski degenerisane kvadruplete.

Na posletku istaknimo da se Coulombov matrični element u aksijalno simetričnim strukturama može računati na dva načina:

- A) u inverznom prostoru,
- B) u realnom prostoru.

2.3.1.3. Računanje Coulombovog matričnog elementa pomoću prelaska u inverzan prostor*

U slučaju aksijalne simetrije, jednočestične anvelopne funkcije date su izrazima (2.2.21–23). Zbog jednostavnosti, skup dobrih kvantnih brojeva ćemo označiti jednim indeksom. Na primer, indeks n u oznaci talasne funkcije će za elektrone označavati skup kvantnih brojeva n_e, l_e . Treba napomenuti da kod šupljina prema višezonskom modelu l_n predstavlja dobar kvantni broj f_{zh} . Na ovaj način se jednoznačno mogu formulisati izrazi za elektrone i šupljine, bilo u jednozonskom bilo u višezonskom modelu. Fourierova transformacija funkcije proizvoda jednočestičnih talasnih funkcija ima oblik:

$$F_{q,n}(\vec{k}) = \int_{z=-\infty}^{\infty} dz \int_{\rho=0}^{\infty} \rho d\rho \int_{\varphi_r=0}^{2\pi} D_{q,n}(\rho, z) \frac{e^{i(l_n - l_q)\varphi_r}}{2\pi} e^{i\vec{k}\vec{r}} d\varphi_r, \quad (2.3.20)$$

gde su:

$$D_{q,n}(\rho, z) = \psi_q^*(\rho, z) \psi_n(\rho, z) \quad (2.3.21a)$$

i

$$D_{q,n}^h(\rho_h, z_h) = \sum_{j_z} \left(\psi_{q,j_z}^h(\rho_h, z_h) \right)^* \psi_{n,j_z}^h(\rho_h, z_h), \quad (2.3.21b)$$

proizvodi jednočestičnih talasnih funkcija u jednozonskom i višezonskom modelu, redom. Izraz (2.3.20) može se transformisati u:

* Ovo izvođenje je bazirano na radovima (Tadić i Peeters, 2004; Tadić i Peeters, 2009; Tadić et al., 2011).

$$F_{q,n}(\vec{k}) = -\frac{1}{2\pi} \int_{z=-\infty}^{+\infty} dz \cdot e^{ik_z z} \int_{\rho=0}^{\infty} \rho \cdot D_{q,n}(\rho, z) d\rho \int_{\varphi_k}^{\varphi_k - 2\pi} e^{i(l_n - l_q)(\varphi_k - \varphi)} e^{ik_{\parallel} \rho \cos \varphi} d\varphi, \quad (2.3.22)$$

gde je $d\varphi = -d\varphi_r$. Rešenje poslednjeg integrala u izrazu (2.3.22) dato je u formi Besselovih funkcija:

$$\begin{aligned} & \int_{\varphi_k}^{\varphi_k - 2\pi} e^{i(l_n - l_q)(\varphi_k - \varphi)} e^{ik_{\parallel} \rho \cos \varphi} d\varphi = \\ & = -2\pi i^{(l_q - l_n)} e^{i(l_q - l_n)\varphi_k} \frac{1}{2\pi i^{(l_q - l_n)}} \int_0^{2\pi} e^{i(l_q - l_n)\varphi} e^{ik_{\parallel} \rho \cos \varphi} d\varphi \\ & = -2\pi i^{(l_q - l_n)} e^{i(l_q - l_n)\varphi_k} J_{(l_q - l_n)}(k_{\parallel} \rho), \end{aligned} \quad (2.3.23)$$

gde je $J_{(l_q - l_n)}$ Besselova funkcija reda $l_q - l_n$. Ukoliko je $l_q - l_n < 0$, na osnovu osobina Besselovih funkcija (Abramowitz i Stegun, 1972):

$$J_{(l_q - l_n)}(k_{\parallel} \rho) = (-1)^{l_n - l_q} J_{(l_n - l_q)}(k_{\parallel} \rho) = i^{2(l_n - l_q)} J_{(l_n - l_q)}(k_{\parallel} \rho), \quad (2.3.24)$$

pa se izraz (2.3.23) može pisati u formi:

$$-2\pi i^{(l_n - l_q)} e^{i(l_q - l_n)\varphi_k} J_{(l_n - l_q)}(k_{\parallel} \rho). \quad (2.3.25)$$

U opštem slučaju izraz (2.3.23) dat je sa:

$$-2\pi i^{|l_n - l_q|} e^{i(l_q - l_n)\varphi_k} J_{|l_n - l_q|}(k_{\parallel} \rho). \quad (2.3.26)$$

Konačno, izraz za Fourierovu transformaciju funkcije proizvoda jednočestičnih talasnih funkcija je:

$$F_{q,n}(\vec{k}) = i^{|l_n - l_q|} e^{i(l_q - l_n)\varphi_k} \mathcal{F}_{q,n}(k_{\parallel}, k_z), \quad (2.3.27)$$

gde je (Tadić i Peeters, 2004; Tadić i Peeters 2009; Tadić et al., 2011):

$$\mathcal{F}_{q,n}(k_{\parallel}, k_z) = \int_{z=-\infty}^{\infty} dz \cdot e^{ik_z z} \int_{\rho=0}^{\infty} \rho J_{|l_n - l_q|}(k_{\parallel} \rho) \cdot D_{q,n}(\rho, z) d\rho. \quad (2.3.28)$$

Zamenom (2.3.27–28) u (2.3.9) izraz za Fourierovu transformaciju u slučaju aksijalne simetrije svodi se na Fourierovu transformaciju duž z -ose i Hankelovu transformaciju duž radijalnog pravca reda $|l_n - l_q|$.

Kako je $F_{p,m}(-\vec{k}) = F_{p,m}(k_{\parallel}, -k_z, \varphi_k + \pi)$, zamenom (2.3.27) u (2.3.9) dobija se (Tadić i Peeters, 2004; Tadić i Peeters 2009; Tadić et al., 2011):

$$\begin{aligned}
\langle \Psi_p^e \Psi_q^h | V_C | \Psi_m^e \Psi_n^h \rangle &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\Omega_{\vec{k}}} F_{p,m}^e(-\vec{k}) Q_C(\vec{k}) F_{q,n}^h(\vec{k}) d\vec{k} = \\
&= -\frac{q^2}{\varepsilon} I_1 \cdot \int_0^\infty dk_{\parallel} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{F}_{p,m}^e(k_{\parallel}, -k_z) \mathcal{F}_{q,n}^h(k_{\parallel}, k_z) \frac{k_{\parallel}}{k_{\parallel}^2 + k_z^2} dk_z.
\end{aligned} \tag{2.3.29}$$

Ovde je integral I_1 :

$$\begin{aligned}
I_1 &= \frac{1}{(2\pi)^3} i^{|l_n-l_q|} i^{|l_m-l_p|} \int_0^{2\pi} e^{i(l_p-l_m)(\varphi_k+\pi)} e^{i(l_q-l_n)\varphi_k} d\varphi_k = \\
&= \frac{1}{(2\pi)^3} i^{|l_n-l_q|} i^{|l_m-l_p|} (-1)^{|l_m-l_p|} \int_0^{2\pi} e^{i(l_q+l_p-(l_m+l_n))\varphi_k} d\varphi_k,
\end{aligned} \tag{2.3.30}$$

gde je $e^{i(l_m-l_p)\pi} = (-1)^{|l_m-l_p|}$, a vrednost integrala u izrazu (2.3.30):

$$\begin{aligned}
\int_0^{2\pi} e^{i(l_q+l_p-(l_m+l_n))\varphi_k} d\varphi_k &= \frac{e^{i(l_q+l_p-(l_m+l_n))2\pi} - 1}{i(l_q+l_p-(l_m+l_n))} = \\
&= 2\pi e^{i(l_q+l_p-(l_m+l_n))\pi} \frac{e^{i(l_q+l_p-(l_m+l_n))\pi} - e^{-i(l_q+l_p-(l_m+l_n))\pi}}{2i(l_m+l_n-(l_p+l_q))\pi} = \\
&= 2\pi (-1)^{|l_p+l_q-(l_m+l_n)|} \frac{\sin((l_q+l_p-(l_m+l_n))\pi)}{(l_q+l_p-(l_m+l_n))\pi} = 2\pi \delta_{l_m+l_n=l_p+l_q},
\end{aligned} \tag{2.3.31}$$

te dati integral (2.3.31) ima nenultu vrednost ako je:

$$l_m + l_n = l_p + l_q. \tag{2.3.32}$$

Prethodno navedeni uslov svodi se na:

$$l'_e + l'_h = l_e + l_h = l_x, \tag{2.3.33a}$$

$$l'_e + s_z - f'_{zh} = l_e + s_z - f_{zh} = f_{zx}, \tag{2.3.33b}$$

za jednozonski i višezonski model ekscitona, redom. Ovde su uvedene oznake $l'_e = l_p$, $l_e = l_m$, za elektron, a $l'_h = l_q$, $l_h = l_n$ za jednozonski i $f'_{zh} = l_q$, $f_{zh} = l_n$ za višezonski model šupljine. Na osnovu izraza (2.3.33) može se zaključiti da se u slučaju aksijalne simetrije problem može rasčlaniti na nalaženje svojstvenih vrednosti za određeni dobar kvantni broj l_x (f_{zx}) za jednozonski (višezonski) model ekscitona. Kada je uslov (2.3.32) ispunjen, $i^{|l_n-l_q|} i^{|l_m-l_p|} = i^{|l_p-l_m|} i^{|l_m-l_p|} = i^{2|l_m-l_p|} = (i^2)^{|l_m-l_p|} = (-1)^{|l_m-l_p|}$, pa je vrednost integrala (Tadić i Peeters, 2004):

$$I_1 = \frac{1}{4\pi^2} \delta_{l_m+l_n=l_p+l_q}. \tag{2.3.34}$$

Izraz (2.3.29) se može dodatno uprostiti imajući u vidu da je izraz (2.3.8):

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}_{q,n}(k_{\parallel}, k_z) &= \int_{z=-\infty}^{\infty} dz \cdot \cos(k_z z) \int_{\rho=0}^{\infty} \rho J_{|l_n-l_q|}(k_{\parallel}\rho) \cdot D_{q,n}(\rho, z) d\rho + \\
&+ i \int_{z=-\infty}^{\infty} dz \cdot \sin(k_z z) \int_{\rho=0}^{\infty} \rho J_{|l_n-l_q|}(k_{\parallel}\rho) \cdot D_{q,n}(\rho, z) d\rho = \\
&= \operatorname{Re}\{\mathcal{F}_{q,n}(k_{\parallel}, k_z)\} + i \operatorname{Im}\{\mathcal{F}_{q,n}(k_{\parallel}, k_z)\},
\end{aligned} \tag{2.3.35}$$

gde je $\operatorname{Re}\{\mathcal{F}_{q,n}(k_{\parallel}, k_z)\}$ parna, a $\operatorname{Im}\{\mathcal{F}_{q,n}(k_{\parallel}, k_z)\}$ neparna funkcija po k_z .

Proizvod transformacija koji figuriše u (2.3.29) je:

$$\begin{aligned}
&\mathcal{F}_{p,m}^e(k_{\parallel}, -k_z) \mathcal{F}_{q,n}^h(k_{\parallel}, k_z) = \\
&= \operatorname{Re}\{\mathcal{F}_{p,m}^e(k_{\parallel}, -k_z)\} \operatorname{Re}\{\mathcal{F}_{q,n}^h(k_{\parallel}, k_z)\} - \operatorname{Im}\{\mathcal{F}_{p,m}^e(k_{\parallel}, -k_z)\} \operatorname{Im}\{\mathcal{F}_{q,n}^h(k_{\parallel}, k_z)\} + \\
&+ i \left\{ \operatorname{Re}\{\mathcal{F}_{p,m}^e(k_{\parallel}, -k_z)\} \operatorname{Im}\{\mathcal{F}_{q,n}^h(k_{\parallel}, k_z)\} + \operatorname{Im}\{\mathcal{F}_{p,m}^e(k_{\parallel}, -k_z)\} \operatorname{Re}\{\mathcal{F}_{q,n}^h(k_{\parallel}, k_z)\} \right\} = \\
&= \operatorname{Re}\{\mathcal{F}_{p,m}^e(k_{\parallel}, k_z)\} \operatorname{Re}\{\mathcal{F}_{q,n}^h(k_{\parallel}, k_z)\} + \operatorname{Im}\{\mathcal{F}_{p,m}^e(k_{\parallel}, k_z)\} \operatorname{Im}\{\mathcal{F}_{q,n}^h(k_{\parallel}, k_z)\} + \\
&+ i \left\{ \operatorname{Re}\{\mathcal{F}_{p,m}^e(k_{\parallel}, k_z)\} \operatorname{Im}\{\mathcal{F}_{q,n}^h(k_{\parallel}, k_z)\} - \operatorname{Im}\{\mathcal{F}_{p,m}^e(k_{\parallel}, k_z)\} \operatorname{Re}\{\mathcal{F}_{q,n}^h(k_{\parallel}, k_z)\} \right\},
\end{aligned} \tag{2.3.36}$$

gde je na osnovu osobine parnosti realnog i imaginarnog dela transformacije $\operatorname{Re}\{\mathcal{F}_{q,n}(k_{\parallel}, -k_z)\} = \operatorname{Re}\{\mathcal{F}_{q,n}(k_{\parallel}, k_z)\}$ i $\operatorname{Im}\{\mathcal{F}_{q,n}(k_{\parallel}, -k_z)\} = -\operatorname{Im}\{\mathcal{F}_{q,n}(k_{\parallel}, k_z)\}$. Može se uočiti da je realni deo proizvoda parna funkcija po k_z (proizvod funkcija iste parnosti daje parnu funkciju), dok je imaginarni deo neparna funkcija po k_z (proizvod funkcija različite parnosti daje neparnu funkciju). Podintegralna funkcija u izrazu (2.3.29)

$\frac{k_{\parallel}}{k_{\parallel}^2 + k_z^2}$ je parna funkcija po k_z , a integral po promenljivoj k_z u simetričnom intervalu u

odnosu na koordinatni početak $(-\infty, +\infty)$. Kako integral neparne funkcije u simetričnom intervalu ima vrednost 0, a parne funkcije dvostruku vrednost integrala na polovini intervala, može se zaključiti da vrednost izraza (2.3.29) mora biti realna i data je sa:

$$\begin{aligned}
\langle \Psi_p^e \Psi_q^h | V_C | \Psi_m^e \Psi_n^h \rangle &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\Omega_{\vec{k}}} F_{p,m}^e(-\vec{k}) Q_C(\vec{k}) F_{q,n}^h(\vec{k}) d\vec{k} = \\
&= \frac{-q^2}{4\pi^2 \varepsilon} \delta_{l_m+l_n=l_p+l_q} \cdot \int_0^{\infty} dk_{\parallel} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{F}_{p,m}^e(k_{\parallel}, -k_z) \mathcal{F}_{q,n}^h(k_{\parallel}, k_z) \frac{k_{\parallel}}{k_{\parallel}^2 + k_z^2} dk_z = \\
&= \frac{-q^2}{2\pi^2 \varepsilon} \delta_{l_m+l_n=l_p+l_q} \cdot \int_0^{\infty} dk_{\parallel} \int_0^{+\infty} \left\{ \operatorname{Re}\{\mathcal{F}_{p,m}^e(k_{\parallel}, k_z)\} \operatorname{Re}\{\mathcal{F}_{q,n}^h(k_{\parallel}, k_z)\} + \right. \\
&\quad \left. + \operatorname{Im}\{\mathcal{F}_{p,m}^e(k_{\parallel}, k_z)\} \operatorname{Im}\{\mathcal{F}_{q,n}^h(k_{\parallel}, k_z)\} \right\} \frac{k_{\parallel}}{k_{\parallel}^2 + k_z^2} dk_z.
\end{aligned} \tag{2.3.37}$$

Prethodni izraz se može dodatno pojednostaviti u slučaju kada struktura poseduje refleksionu simetriju u odnosu na ravan $z=\text{const}$ (primer je nanotačka oblika valjka ili nanoprstena konačne debljine). Tada su, za koordinatni početak postavljen u centru strukture, rešenja talasne funkcije simetrična ili antisimetrična u odnosu na (x,y) -ravan, pa se mogu klasifikovati kao parna i neparna. Proizvod talasnih funkcija $D_{q,n}(\rho, z)$ biće parna funkcija od z ukoliko su $\psi_n(\rho, z)$ i $\psi_q^*(\rho, z)$, odnosno odgovarajuće komponente spinora kod višezonskog modela, iste parnosti, a neparna funkcija ako su $\psi_n(\rho, z)$ i $\psi_q^*(\rho, z)$ različite parnosti. Na osnovu pravila integracije parne i neparne funkcije na simetričnom intervalu i na osnovu izraza (2.3.35) može se zaljučiti da je u slučaju kada je $D_{q,n}^{\text{parna}}(\rho, z)$ parna funkcija $\text{Im}\{\mathcal{F}_{q,n}^{\text{parna}}(k_{\parallel}, k_z)\} = 0$, a kada je $D_{q,n}^{\text{neparna}}(\rho, z)$ neparna funkcija $\text{Re}\{\mathcal{F}_{q,n}^{\text{neparna}}(k_{\parallel}, k_z)\} = 0$. Tada izraz za Coulombov matrični element (2.3.37) ima nenultu vrednost samo ako su proizvodi talasnih funkcija elektrona i šupljine iste parnosti. Izrazi za Coulombove matrične elemente dati su u redukovanoj formi:

$$\begin{aligned} & \langle \Psi_p^e \Psi_q^h | V_C | \Psi_m^e \Psi_n^h \rangle_{(D_{p,m}^{\text{parna}}, D_{q,n}^{\text{parna}})} = \\ & = \frac{-2q^2 \cdot \delta_{l_m+l_n=l_p+l_q}}{\pi^2 \varepsilon} \cdot \int_0^{\infty} dk_{\parallel} \int_0^{+\infty} \text{Re}\{\mathcal{F}_{p,m}^{1/2,e}(k_{\parallel}, k_z)\} \text{Re}\{\mathcal{F}_{q,n}^{1/2,h}(k_{\parallel}, k_z)\} \frac{k_{\parallel}}{k_{\parallel}^2 + k_z^2} dk_z, \end{aligned} \quad (2.3.38a)$$

$$\begin{aligned} & \langle \Psi_p^e \Psi_q^h | V_C | \Psi_m^e \Psi_n^h \rangle_{(D_{p,m}^{\text{neparna}}, D_{q,n}^{\text{neparna}})} = \\ & = \frac{-2q^2 \cdot \delta_{l_m+l_n=l_p+l_q}}{\pi^2 \varepsilon} \cdot \int_0^{\infty} dk_{\parallel} \int_0^{+\infty} \text{Im}\{\mathcal{F}_{p,m}^{1/2,e}(k_{\parallel}, k_z)\} \text{Im}\{\mathcal{F}_{q,n}^{1/2,h}(k_{\parallel}, k_z)\} \frac{k_{\parallel}}{k_{\parallel}^2 + k_z^2} dk_z, \end{aligned} \quad (2.3.38b)$$

za parne i neparne proizvode jednočestičnih talasnih funkcija, redom. Ovde je član koji figuriše u (2.3.38):

$${}^{1/2}\mathcal{F}_{q,n}(k_{\parallel}, k_z) = \int_{z=0}^{\infty} dz \cdot e^{ik_z z} \int_{\rho=0}^{\infty} \rho J_{|l_n-l_q|}(k_{\parallel}\rho) \cdot D_{q,n}(\rho, z) d\rho, \quad (2.3.39)$$

Fourier-Hankelova transformacija proizvoda jednočestičnih talasnih funkcija proračunata na polovini intervala duž z – ose. Iz jednačina (2.3.38–39) se može zaključiti da se problem numerički može dodatno pojednostaviti računanjem kosinusne/sinusne Fourierove transformacije za parne/neparne proizvode jednočestičnih talasnih funkcija. Takođe, pri rešavanju svojstvenog problema po jednozonskom

modelu datom jednačinom (2.3.17) i višezonskom modelu opisanom jednačinom (2.3.19), dobija se matrica koja se može svesti na blok-dijagonalnu formu. U jednom bloku figurišu integrali samo parnih proizvoda talasnih funkcija elektrona i šupljine, a u drugom samo neparnih. Očigledno je da se svojstvena stanja hh (višezonskog) ekscitona mogu klasifikovati kao parna (vezujuća) i neparna (antivezujuća).

U opštem slučaju, pri numeričkom računanju Coulombovog matričnog elementa datog izrazom (2.3.37) nailazi se na problem divergencije podintegralne funkcije u okolini tačke $(k_{||}, k_z) = (0, 0)$ (Tadić i Peeters, 2004). Ovde ćemo predložiti dva načina za rešavanje problema divergencije:

- A) delimični povratak u realan prostor,
- B) kvazianalička procena vrednosti integrala u okolini koordinatnog početka u inverznom prostoru.

Delimičan povratak u realan prostor. Zamenom izraza za Fourier-Hankelovu transformaciju funkcije proizvoda jednočestičnih talasnih funkcija (2.3.27–28) u izraz (2.3.37), Coulombov matrični element može se pisati u formi:

$$\begin{aligned}
 \langle \Psi_p^e \Psi_q^h | V_C | \Psi_m^e \Psi_n^h \rangle &= \frac{-q^2}{4\pi^2 \epsilon} \delta_{l_m + l_n = l_p + l_q} \cdot \int_0^{\infty} dk_{||} \cdot \\
 &\cdot \int_0^{+\infty} d\rho_e \cdot \rho_e \cdot J_{|l_m - l_p|}(k_{||} \rho_e) \cdot D_{p,m}(\rho_e, z_e) \\
 &\cdot \int_0^{+\infty} d\rho_h \cdot \rho_h \cdot J_{|l_n - l_q|}(k_{||} \rho_h) \cdot D_{q,n}(\rho_h, z_h) \cdot \\
 &\cdot \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ik_z(z_h - z_e)} \frac{k_{||}}{k_{||}^2 + k_z^2} dk_z.
 \end{aligned} \tag{2.3.40}$$

Na osnovu parnosti podintegralne funkcije lako se može pokazati da je:

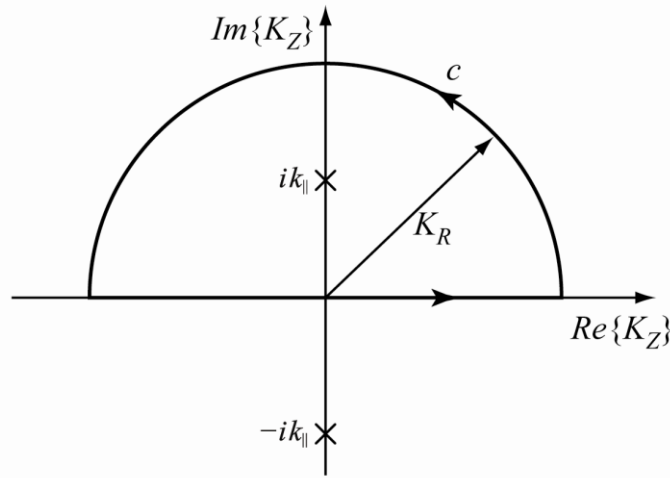
$$\begin{aligned}
 I_2 &= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ik_z(z_h - z_e)} \frac{k_{||}}{k_{||}^2 + k_z^2} dk_z = 2 \int_0^{+\infty} \cos(k_z(z_h - z_e)) \frac{k_{||}}{k_{||}^2 + k_z^2} dk_z = \\
 &= 2 \int_0^{+\infty} \cos(k_z |z_h - z_e|) \frac{k_{||}}{k_{||}^2 + k_z^2} dk_z = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ik_z |z_h - z_e|} \frac{k_{||}}{k_{||}^2 + k_z^2} dk_z.
 \end{aligned} \tag{2.3.41}$$

Rešenje razmatranog integrala I_2 moguće je naći analitički integracijom u kompleksnom domenu. Posmatrajmo zatvorenu konturu c , kao na sl. 2.3, i uvedimo kompleksnu promenljivu K_Z . Tada funkcija

$$f(K_Z) = e^{iK_Z|z_h - z_e|} \frac{k_{||}}{k_{||}^2 + K_Z^2} \quad (2.3.42)$$

ima polove u tačkama $K_Z = \pm i k_{||}$, a integral po zatvorenoj konturi c ima vrednost:

$$\oint_c f(K_Z) dK_Z = 2\pi i \cdot \text{Res}[f(K_Z); K_Z = ik_{||}]. \quad (2.3.43)$$



Slika 2.3. Skica konture c po kojoj se vrši integracija i polova funkcije $f(K_Z)$ u kompleksnoj ravni.

Uvođenjem smene $K_Z = K_R e^{i\phi}$ ($dK_Z = iK_R e^{i\phi} d\phi$) pri integraciji po kružnom delu konture dobija se:

$$\oint_c f(K_Z) dK_Z = I_2 + \lim_{K_R \rightarrow \infty} \left(\int_{\phi=0}^{\pi} e^{iK_R|z_h - z_e| \cos \phi} e^{-K_R|z_h - z_e| \sin \phi} \frac{ie^{-i\phi} k_{||} K_R}{e^{-2i\phi} k_{||}^2 + K_R^2} d\phi \right) = I_2, \quad (2.3.44)$$

jer je:

$$\begin{aligned} & \lim_{K_R \rightarrow \infty} \left(e^{iK_R|z_h - z_e| \cos \phi} e^{-K_R|z_h - z_e| \sin \phi} \frac{ie^{-i\phi} k_{||} K_R}{e^{-2i\phi} k_{||}^2 + K_R^2} \right) \leq \\ & \leq \lim_{K_R \rightarrow \infty} \left(e^{-K_R|z_h - z_e| \sin \phi} \frac{k_{||} K_R}{|e^{-2i\phi} k_{||}^2 + K_R^2|} \right) = 0. \end{aligned}$$

Vrednost integrala I_2 je:

$$I_2 = 2\pi i \cdot \text{Res}[f(K_Z); K_Z = ik_{\parallel}] = \pi e^{-k_{\parallel}|z_h - z_e|}. \quad (2.3.45)$$

Tada se izraz (2.3.40) može pisati u formi:

$$\begin{aligned} & \langle \Psi_p^e \Psi_q^h | V_C | \Psi_m^e \Psi_n^h \rangle = \\ & = \frac{-q^2}{4\pi\epsilon} \delta_{l_m + l_n = l_p + l_q} \cdot \int_0^{\infty} dk_{\parallel} \int_0^{+\infty} d\rho_e \cdot \rho_e \cdot J_{|l_m - l_p|}(k_{\parallel}\rho_e) \cdot \int_0^{+\infty} d\rho_h \cdot \rho_h \cdot J_{|l_n - l_q|}(k_{\parallel}\rho_h) \cdot \\ & \quad \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-k_{\parallel}|z_h - z_e|} \cdot D_{p,m}(\rho_e, z_e) \cdot D_{q,n}(\rho_h, z_h) dz_e dz_h. \end{aligned} \quad (2.3.46)$$

Na ovaj način rešen je problem konvergencije, ali je početni 6D integral, redukovan na petodimenzioni (5D), čime je računanje Coulombovog matricnog elementa neznatno pojednostavljeno.

Kvazianalička procena*. Fourier-Hankelove transformacije funkcija proizvoda jednočestičnih talasnih funkcija imaju konačne vrednosti u okolini tačke $(k_{\parallel}, k_z) = (0, 0)$.

Ukoliko se pri diskretizaciji funkcija proizvoda uzme dovoljno mali korak Δk_z i Δk_{\parallel} , tada se može pretpostaviti da je promena vrednosti Fourier-Hankelove transformacije funkcija proizvoda u okolini koordinatnog početka ($k_{\parallel} \in (0, \Delta k_{\parallel})$ i $k_z \in (0, \Delta k_z)$) relativno mala (sl. 2.4), te se može smatrati da je približno konstantna i jednaka srednjoj vrednosti funkcije u graničnim tačkama oblasti oblika pravougaonika:

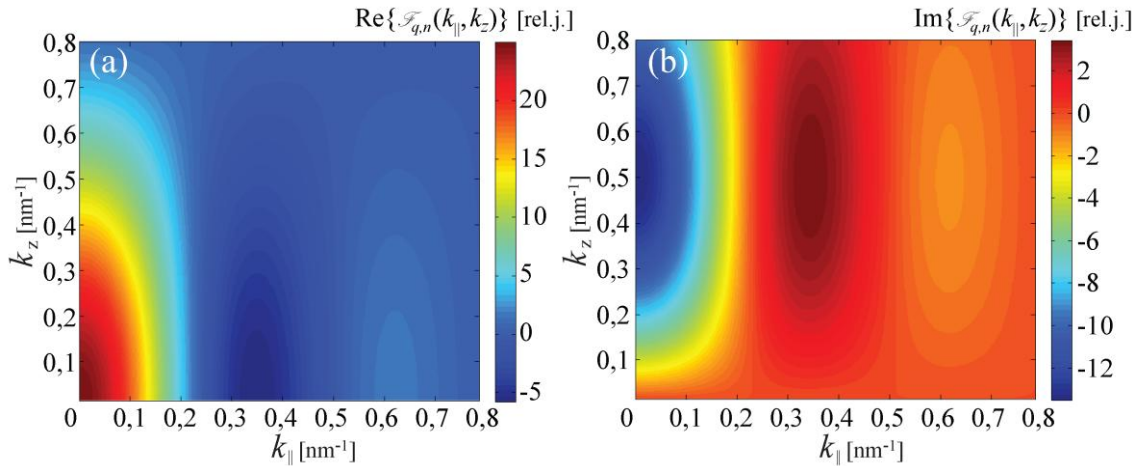
$$\mathcal{F}_{q,n}^0 = \frac{\mathcal{F}_{q,n}(0,0) + \mathcal{F}_{q,n}(0, \Delta k_z) + \mathcal{F}_{q,n}(\Delta k_{\parallel}, 0) + \mathcal{F}_{q,n}(\Delta k_{\parallel}, \Delta k_z)}{4}. \quad (2.3.47)$$

Tada se vrednost integrala (2.3.37) u okolini tačke divergencije može proceniti analitički:

$$\begin{aligned} & \int_0^{\Delta k_{\parallel}} dk_{\parallel} \int_{-\Delta k_z}^{+\Delta k_z} \mathcal{F}_{p,m}^e(k_{\parallel}, -k_z) \mathcal{F}_{q,n}^h(k_{\parallel}, k_z) \frac{k_{\parallel}}{k_{\parallel}^2 + k_z^2} dk_z \cong \\ & \cong 2 \mathcal{F}_{p,m}^{e,0} \cdot \mathcal{F}_{q,n}^{h,0} \cdot \int_0^{\Delta k_{\parallel}} dk_{\parallel} \int_0^{+\Delta k_z} \frac{k_{\parallel}}{k_{\parallel}^2 + k_z^2} dk_z = \\ & = \mathcal{F}_{p,m}^{e,0} \cdot \mathcal{F}_{q,n}^{h,0} \cdot \left[\pi \Delta k_{\parallel} - 2 \Delta k_{\parallel} \arctg \left(\frac{\Delta k_{\parallel}}{\Delta k_z} \right) + \Delta k_z \ln \left(1 + \left(\frac{\Delta k_{\parallel}}{\Delta k_z} \right)^2 \right) \right]. \end{aligned} \quad (2.3.48)$$

* Ovo izvođenje je bazirano na radovima (Tadić i Peeters, 2004; Tadić i Peeters, 2009; Tadić et al., 2011).

Na ovaj način uklanja se pol podintegralne funkcije u koordinatnom početku, te se računanje Coulombovog matričnog elementa svodi na računanje Fourier-Hankelovih transformacija funkcija proizvoda i rešavanje 2D integrala (2.3.37), što predstavlja značajno pojednostavljenje u odnosu na početni 6D integral.



Slika 2.4. Primer proračuna Fourier-Hankelove transformacije funkcije proizvoda jednočestičnih stanja elektrona $l_e = -5$ i $l'_e = 5$: (a) realni i (b) imaginarni deo. Analiziran je aksijalno simetričan GaAs/(Al,Ga)As nanoprsten pravougaonog poprečnog preseka, visine $h=4$ nm, unutrašnjeg radijusa $R_1=8$ nm i spoljašnjeg radijusa $R_2=15$ nm, redom. Molarni udeo je $x=0,3$, a eksterno polje nije uključeno u proračun.

U izabranom bazu prostorna varijacija talasnih funkcija i njihovih proizvoda je umereana, pa je Fourier-Hankelova transformacija proizvoda pretežno koncentrisana u okolini tačke divergencije $(k_{||}, k_z) = (0,0)$. Zbog toga je pri proračunu postavljena neuniformna mreža u k -prostoru, tako da je najveća gustina mreže u okolini tačke divergencije. Na ovaj način je sa relativno malim brojem tačaka na mreži postignuta velika tačnost.

2.3.1.4. Računanje Coulombovog matričnog elementa u realnom prostoru

U slučaju aksijalne simetrije Coulombov matrični element u realnom prostoru (2.3.6) svodi se na:

$$\begin{aligned} \langle \Psi_p^e \Psi_q^h | V_C | \Psi_m^e \Psi_n^h \rangle &= -\frac{q^2}{4\pi\epsilon(2\pi)^2} \times \\ &\times \int_{\Omega_{e,h}} e^{-il_p\varphi_e} e^{-il_q\varphi_h} \frac{D_{p,m}^e(\rho_e, z_e) D_{q,n}^h(\rho_h, z_h)}{\sqrt{\rho_e^2 + \rho_h^2 - 2\rho_e\rho_h \cos(\varphi_e - \varphi_h) + (z_e - z_h)^2}} e^{il_m\varphi_e} e^{il_n\varphi_h} d\vec{r}_e d\vec{r}_h, \end{aligned} \quad (2.3.49)$$

gde je za šupljine $D_{n_h, l'_h(f_h), n_h, l_h(f_h)}^h = D_{q,n}^h$ korišćena notacija skraćenog pisanja indeksa definisana u prethodnom poglavlju (videti izraz (2.3.21)), dok su elektronska stanja označena u originalnoj formulaciji, $D_{p,m}^e = D_{n'_e, l'_e, n_e, l_e}^e$.

Izraz (2.3.49) se može pisati u obliku:

$$\begin{aligned} \langle \Psi_p^e \Psi_q^h | V_C | \Psi_m^e \Psi_n^h \rangle &= \\ &= -\frac{q^2}{4\pi\epsilon(2\pi)^2} \iint_{(\rho_e, z_e)(\rho_h, z_h)} dz_e dz_h d\rho_e d\rho_h \cdot \rho_e \rho_h D_{n'_e, l'_e, n_e, l_e}^e(\rho_e, z_e) D_{q,n}^h(\rho_h, z_h) \times \\ &\times \int_{\varphi_h=0}^{2\pi} d\varphi_h \int_{\varphi_e=0}^{2\pi} \underbrace{\frac{e^{i(l_e - l'_e)\varphi_e} e^{i(l_n - l_q)\varphi_h}}{\sqrt{\rho_e^2 + \rho_h^2 - 2\rho_e\rho_h \cos(\varphi_e - \varphi_h) + (z_e - z_h)^2}}}_{I_1} d\varphi_e. \end{aligned} \quad (2.3.50)$$

Kako je $e^{i(l_e - l'_e)\varphi_e} e^{i(l_n - l_q)\varphi_h} = e^{i(l_e - l'_e)(\varphi_e - \varphi_h)} e^{i[(l_e - l'_e)\varphi_e + (l_n - l_q)\varphi_h]}$, zamenom u integral I_1 uz smenu promenljivih $\varphi = \varphi_e - \varphi_h$, sledi:

$$I_1 = \int_{\varphi_h=0}^{2\pi} d\varphi_h \cdot e^{i[(l_e - l'_e)\varphi_h + (l_n - l_q)\varphi_h]} \int_{\varphi_e=0+\varphi_h}^{\varphi_h+2\pi} \underbrace{\frac{e^{i(l_e - l'_e)\varphi}}{\sqrt{\rho_e^2 + \rho_h^2 - 2\rho_e\rho_h \cos \varphi + (z_e - z_h)^2}}}_{I_2} d\varphi, \quad (2.3.51)$$

gde je integracija u I_2 po čitavoj periodi, te ne zavisi od izbora početne (krajnje) tačke, pa vrednost integrala I_2 ne zavisi od φ_h :

$$\begin{aligned} I_2 &= \int_{\varphi=0+\varphi_h}^{\varphi_h+2\pi} \frac{e^{i(l_e - l'_e)\varphi}}{\sqrt{\rho_e^2 + \rho_h^2 - 2\rho_e\rho_h \cos \varphi + (z_e - z_h)^2}} d\varphi = \\ &= \int_{\varphi=0}^{2\pi} \frac{e^{i(l_e - l'_e)\varphi}}{\sqrt{\rho_e^2 + \rho_h^2 - 2\rho_e\rho_h \cos \varphi + (z_e - z_h)^2}} d\varphi = \\ &= \int_{\varphi=-\pi}^{\pi} \frac{e^{i(l_e - l'_e)\varphi}}{\sqrt{\rho_e^2 + \rho_h^2 - 2\rho_e\rho_h \cos \varphi + (z_e - z_h)^2}} d\varphi. \end{aligned} \quad (2.3.52)$$

Iz prethodnog izraza sledi:

$$I_1 = I_2 \cdot \int_{\varphi_h=0}^{2\pi} e^{i[l_e - l'_e + l_n - l_q]\varphi_h} d\varphi_h = \begin{cases} 2\pi I_2; & l_e - l'_e + l_n - l_q = 0 \\ 0; & l_e - l'_e + l_n - l_q \neq 0 \end{cases}. \quad (2.3.53)$$

Integral I_1 dat izrazom (2.3.53) ima nenultu vrednost za $l_e - l'_e + l_n - l_q = 0$. Ovo je uslov ekvivalentan (2.3.32), što dovodi do identičnog zaključka kao u prethodnom poglavlju, da je $l_x (f_{zx})$ dobar kvantni broj ekscitona prema jednozonskom (više-zonskom) modelu.

Integral I_2 može se napisati u formi:

$$I_2 = \int_{\varphi=0}^{2\pi} \frac{\cos[(l_e - l'_e)\varphi]}{\sqrt{\rho_e^2 + \rho_h^2 - 2\rho_e\rho_h \cos \varphi + (z_e - z_h)^2}} d\varphi + \quad (2.3.54)$$

$$+ i \int_{\varphi=0}^{2\pi} \frac{\sin[(l_e - l'_e)\varphi]}{\sqrt{\rho_e^2 + \rho_h^2 - 2\rho_e\rho_h \cos \varphi + (z_e - z_h)^2}} d\varphi,$$

gde je podintegralna funkcija u prvom integralu parna po φ , a podintegralna funkcija u drugom integralu neparna po φ . Na osnovu pravila o integraciji parnih i neparnih funkcija po simetričnom intervalu, sledi:

$$I_2 = 2 \int_{\varphi=0}^{\pi} \frac{\cos[(l_e - l'_e)\varphi]}{\sqrt{\rho_e^2 + \rho_h^2 - 2\rho_e\rho_h \cos \varphi + (z_e - z_h)^2}} d\varphi = \quad (2.3.55)$$

$$= 2 \int_{\varphi=-\pi}^0 \frac{\cos[(l_e - l'_e)\varphi]}{\sqrt{\rho_e^2 + \rho_h^2 - 2\rho_e\rho_h \cos \varphi + (z_e - z_h)^2}} d\varphi.$$

Ovde integral I_2 ima analitičko rešenje u formi generalisane konfluentne hipergeometrijske funkcije ${}_3F_2$:

$$I_2 = \frac{2\pi}{\sqrt{(\rho_e + \rho_h)^2 + (z_e - z_h)^2}} \times \quad (2.3.56)$$

$$\times \frac{{}_3F_2 \left[\left\{ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1 \right\}, \{1 - \Delta l_e, 1 + \Delta l_e\}, \frac{4\rho_e\rho_h}{(\rho_e + \rho_h)^2 + (z_e - z_h)^2} \right]}{\Gamma(1 - \Delta l_e) \cdot \Gamma(1 + \Delta l_e)},$$

gde je $\Delta l_e = l_e - l'_e$, a Γ gama funkcija. Zamenom (2.3.56) i (2.3.53) u (2.3.49), za konkretnu vrednost $l_x (f_{zx})$ dobija se izraz za matrični element Coulombovog potencijala:

$$\langle \Psi_p^e \Psi_q^h | V_C | \Psi_m^e \Psi_n^h \rangle = -\frac{q^2}{4\pi\epsilon} \iint_{(\rho_e, z_e)} \iint_{(\rho_h, z_h)} \{ dz_e dz_h d\rho_e d\rho_h \times \quad (2.3.57)$$

$$\times D_{n'_e, l'_e, n_e, l_e}^e(\rho_e, z_e) D_{n, q}^h(\rho_h, z_h) \frac{\rho_e \rho_h}{\sqrt{(\rho_e + \rho_h)^2 + (z_e - z_h)^2}} \times$$

$$\times \frac{{}_3F_2 \left[\left\{ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1 \right\}, \{1 - \Delta l_e, 1 + \Delta l_e\}, \frac{4\rho_e\rho_h}{(\rho_e + \rho_h)^2 + (z_e - z_h)^2} \right]}{\Gamma(1 - \Delta l_e) \cdot \Gamma(1 + \Delta l_e)} \}.$$

Dobijeni četvorodimenzioni (4D) integral (2.3.57) mora se računati numerički. Poteškoće pri integraciji su usled problema sa konvergencijom generalisane konfluentne hipergeometrijske funkcije u okolini skupa tačaka $\rho_e \cong \rho_h$ i $z_e \cong z_h$. Za vrednosti parametara kao u (2.3.57) funkcija ${}_3F_2$ može se razviti u red:

$$\begin{aligned} & \frac{{}_3F_2\left[\left\{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1\right\}, \{1 - \Delta l_e, 1 + \Delta l_e\}, \frac{4\rho_e\rho_h}{(\rho_e + \rho_h)^2 + (z_e - z_h)^2}\right]}{\Gamma(1 - \Delta l_e) \cdot \Gamma(1 + \Delta l_e)} = \\ & = \sum_{k_f=0}^{\infty} C_F(\Delta l_e, k_f) \left[\frac{4\rho_e\rho_h}{(\rho_e + \rho_h)^2 + (z_e - z_h)^2} \right]^{k_f}, \end{aligned} \quad (2.3.58a)$$

gde su koeficijenti u ekspanziji hipergeometrijske funkcije dati sa:

$$C_F(\Delta l_e, k_f) = \left(\frac{\Gamma(0.5 + k_f)}{\Gamma(0.5)} \right)^2 \frac{1}{\Gamma(1 - \Delta l_e + k_f) \cdot \Gamma(1 + \Delta l_e + k_f)}. \quad (2.3.58b)$$

U oblasti divergencije vrednost parametra $4\rho_e\rho_h / ((\rho_e + \rho_h)^2 + (z_e - z_h)^2) \rightarrow 1$, pa je neophodno uzeti veliki broj koeficijenata C_F u ekspanziji kako bi se postigla zadovoljavajuća tačnost. Tad je pogodnije koristiti logaritamski razvoj funkcije u okolini tačke $\zeta = 4\rho_e\rho_h / ((\rho_e + \rho_h)^2 + (z_e - z_h)^2) = 1$:

$$\begin{aligned} & \frac{{}_3F_2\left[\left\{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1\right\}, \{1 - \Delta l_e, 1 + \Delta l_e\}, \zeta\right]}{\Gamma(1 - \Delta l_e) \cdot \Gamma(1 + \Delta l_e)} = \frac{1}{(\Gamma(0.5))^2} \cdot \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(0.5)_j (0.5)_j}{j!^2} (1 - \zeta)^j \times \\ & \times \left(\sum_{k=0}^j \frac{(-j)_k (-\ln(1 - \zeta) + \psi(j+1) - 2\psi(j+0.5) + \psi(j-k+1))}{(0.5)_k (0.5)_k} \right) \times \\ & \times \varepsilon_k^{(2)} \left(\left\{ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1 \right\}, \{1 - \Delta l_e, 1 + \Delta l_e\} \right) + \\ & + (-1)^j j! \sum_{k=0}^j \frac{(k-j-1)!}{(0.5)_k (0.5)_k} \varepsilon_k^{(2)} \left(\left\{ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1 \right\}, \{1 - \Delta l_e, 1 + \Delta l_e\} \right) \Bigg) \end{aligned} \quad (2.3.59a)$$

gde je koeficijent u logaritamskoj ekspanziji:

$$\varepsilon_k^{(2)} \left(\left\{ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1 \right\}, \{1 - \Delta l_e, 1 + \Delta l_e\} \right) = \frac{(-\Delta l_e)_k (\Delta l_e)_k}{k!}, \quad (2.3.59b)$$

ψ – Psi funkcija:

$$\psi(\zeta) = \frac{\Gamma'(\zeta)}{\Gamma(\zeta)}, \quad (2.3.59c)$$

a $(n)_k$ – Pochhammerova funkcija:

$$(n)_k = \frac{\Gamma(n+k)}{\Gamma(n)}. \quad (2.3.59d)$$

Detalji numeričke implementacije. Neka je u (ρ, z) ravni postavljena mreža na kojoj se vrši evaluacija talasnih funkcija sa identičnim pravougaonim segmentima stranica dužine $\Delta\rho$ i Δz , i granicama kutije $\{0, R_{\text{box}}\}$ i $\{Z_{\text{base}}, Z_{\text{base}}+Z_{\text{box}}\}$, u radijalnom i z -pravcu, redom. U izabranom konačnom bazu jednočestičnih talasnih funkcija i za dovoljno veliki broj čvornih tačaka, varijacija proizvoda talasnih funkcija $D(\rho, z)$ na kvadratnim segmentima mreže je relativno mala. Tada se može smatrati da je $D(\rho, z)$ na posmatranom segmentu konstantan pa se problem integracije može svesti na nalaženje Reimannove centralne sume (Abramowitz i Stegun, 1972). Za konkretnu vrednost Δl_e potrebno je formirati matricu rezultata integracije na pravougaonim segmentima:*

$$IM_{i_{\rho e}+n_{t\rho}, i_{z e}, i_{\rho h}+n_{t\rho}, i_{z h}} = \int_{\rho_{i_{\rho e}}}^{\rho_{i_{\rho e}}+\Delta\rho} \int_{z_{i_{z e}}}^{z_{i_{z e}}+\Delta z} \int_{\rho_{i_{\rho h}}}^{\rho_{i_{\rho h}}+\Delta\rho} \int_{z_{i_{z h}}}^{z_{i_{z h}}+\Delta z} IF(\rho_e, \rho_h, z_e, z_h) dz_e dz_h d\rho_e d\rho_h, \quad (2.3.60a)$$

gde je podintegralna funkcija

$$IF(\rho_e, \rho_h, z_e, z_h) = -\frac{q^2}{4\pi\epsilon} \frac{\rho_e \rho_h}{\sqrt{(\rho_e + \rho_h)^2 + (z_e - z_h)^2}} \times \\ \times \frac{{}_3F_2\left[\left\{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1\right\}, \{1 - \Delta l_e, 1 + \Delta l_e\}, \frac{4\rho_e \rho_h}{(\rho_e + \rho_h)^2 + (z_e - z_h)^2}\right]}{\Gamma(1 - \Delta l_e) \cdot \Gamma(1 + \Delta l_e)}. \quad (2.3.60b)$$

Ovde je $n_{t\rho}$ i n_{tz} broj tačaka mreže u ρ i z pravcu, redom, a $i_{\rho, e(h)} < n_{t\rho}$ indeks segmenta duž radijalne ose, a $i_{z, e(h)} < n_{tz}$ indeks segmenta duž z ose za elektrone (šupljine). Rezultati proračuna talasne funkcije su smešteni u vektore tako da indeksiranje odgovara (2.3.60). Rezultat integracije tada je $Dm_e^T \times IM \times Dm_h$, gde su $Dm_{e(h)}$ vektori diskretizovanih vrednosti proizvoda jednočestičnih funkcija elektrona (šupljina). Od broja izračunatih matrica IM za konkretnu vrednost Δl_e zavisi koliki bazis možemo koristiti u proračunu. Veći opseg vrednosti Δl_e podrazumeva veći broj izračunatih matrica, ali omogućava proračun svojstvenih vrednosti ekscitona uzimanjem većeg bazisa jednočestičnih stanja, što dovodi do kvantitativno boljeg rezultata.

* Zbog preglednosti označavanja nećemo eksplicitno pisati da IM i IF zavise od Δl_e .

Ukoliko se postavi kvadratna kutija $X_{\text{box}} = R_{\text{box}} = Z_{\text{box}}$ i uzme isti broj tačaka duž svake ose $n_t = n_{t\rho} = n_{tz}$ (tj. $\Delta = \Delta\rho = \Delta z$) tada se promenljive u integralu (2.3.60) mogu skalirati tako da pripadaju opsegu [0,1]:

$$IM_{i_{\rho e}+n_t, i_{ze}, i_{\rho h}+n_t, i_{zh}} = \int_{i_{\rho e}/n_t}^{i_{\rho e}+1/n_t} \int_{i_{ze}/n_t}^{i_{ze}+1/n_t} \int_{i_{\rho h}/n_t}^{i_{\rho h}+1/n_t} \int_{i_{zh}/n_t}^{i_{zh}+1/n_t} IF(R_e, R_h, Z_e, Z_h) dZ_e dZ_h dR_e dR_h, \quad (2.3.61a)$$

$$IF(R_e, R_h, Z_e, Z_h) = -X_{\text{box}}^5 \frac{q^2}{4\pi\epsilon} \frac{R_e R_h}{\sqrt{(R_e + R_h)^2 + (Z_e - Z_h)^2}} \times \\ \times \frac{{}_3F_2 \left[\left\{ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1 \right\}, \{1 - \Delta l_e, 1 + \Delta l_e\}, \frac{4R_e R_h}{(R_e + R_h)^2 + (Z_e - Z_h)^2} \right]}{\Gamma(1 - \Delta l_e) \cdot \Gamma(1 + \Delta l_e)}, \quad (2.3.61b)$$

gde je $R_{e(h)} = \rho_{e(h)}/X_{\text{box}}$ i $Z_{e(h)} = z_{e(h)}/X_{\text{box}}$. Tada se može napraviti univerzalna kvadratna matrica koja bi se primenjivala pri dijagonalizaciji kod većine aksijalno simetričnih struktura tipa nanotačke. U slučaju pravougaonog domena za rešavanje razmatrana matrica se može iskoristiti, pri čemu se u odgovarajuće blokove upisuju vrednosti 0. Ukoliko se razmatra slučaj gde je neophodno uzeti veliku dimenziju kutije, ali je promena talasne funkcije značajna samo u delu (ρ, z) ravni, tada se taj deo prostora može pokriti malom kutijom dimenzija X_{box}/n_x , gde je $n_x = 2, 3, \dots$, dok se ceo prostor pokriva kutijom dimenzije X_{box} . Najpre se računa doprinos oblasti koju pokriva manja kutija, a zatim se pri računanju doprinosa oblasti koje pokriva velika kutija matrica popunjava nulama u delu koji odgovara $z \in (Z_{\text{base}} + X_{\text{box}}(1-1/n_x)/2, Z_{\text{base}} + X_{\text{box}}(1+1/n_x)/2)$ i $\rho \in (0, X_{\text{box}}/n_x)$.

U slučaju da talasna funkcija ima izrazitu varijaciju u okviru razmatrane kutije mnogo bolji rezultat bi se dobio kada bi se za talasne funkcije ψ ili njihove proizvode D na segmentu mreže primenila bilinearna interpolacija. Veza između interpolacione vrednosti funkcije i vrednosti u čvorovima je (Abramowitz i Stegun, 1972):

$$D(\rho, z) = \frac{1}{\Delta\rho\Delta z} [\rho_0 + \Delta\rho - \rho \quad \rho - \rho_0] \times \\ \times \begin{bmatrix} D(\rho_0, z_0) & D(\rho_0, z_0 + \Delta z) \\ D(\rho_0 + \Delta\rho, z_0) & D(\rho_0 + \Delta\rho, z_0 + \Delta z) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z_0 + \Delta z - z \\ z - z_0 \end{bmatrix}, \quad (2.3.62)$$

gde su koordinate čvornih tačaka segmenta mreže (ρ_0, z_0) , $(\rho_0, z_0 + \Delta z)$, $(\rho_0 + \Delta\rho, z_0)$ i $(\rho_0 + \Delta\rho, z_0 + \Delta z)$. Tada se u integralu (2.3.60a) pored IF , kao podintegralne funkcije

javljaju još i $\rho_{e(h)} \cdot IF$, $z_{e(h)} \cdot IF$, $\rho_{e(h)} \cdot z_{e(h)} \cdot IF$, $\rho_{h(e)} \cdot z_{e(h)} \cdot IF$, $\rho_{h(e)} \cdot \rho_{e(h)} \cdot z_{e(h)} \cdot IF$, $z_{h(e)} \cdot \rho_{e(h)} \cdot z_{e(h)} \cdot IF$, i $\rho_e \cdot z_e \cdot \rho_h \cdot z_h \cdot IF$, što bi zahtevalo proračun dodatnih matrica neophodnih za nalaženje Coulombovih matričnih elemenata.

2.3.2. Karakteristični pozicioni i dimenzioni parametri ekscitona

Radi boljeg uvida u prirodu ekscitonskih stanja u ovom poglavlju će biti definisani neki karakteristični parametri. Kao važnu veličinu za procenu polarizacije ekscitona definisaćemo *srednji ekscitonski radijus u ravni strukture* (Tadić et al., 2011):

$$\rho_{\parallel}^2 = \int_{\Omega_e} \int_{\Omega_h} \Psi^{x*}(\vec{r}_e, \vec{r}_h) \cdot (\rho_e^2 + \rho_h^2 - 2\rho_e\rho_h \cos(\varphi_e - \varphi_h)) \cdot \Psi^x(\vec{r}_e, \vec{r}_h) d\vec{r}_h d\vec{r}_e. \quad (2.3.63)$$

Ovde $\Psi^x(\vec{r}_e, \vec{r}_h)$ označava ili anvelopnu funkciju ekscitona prema jednozonskom modelu ili spinor anvelopnih funkcija ekscitona u višezonskom modelu. Izraz za ρ_{\parallel} u slučaju jednozonskog modela dobija se zamenom (2.2.21) u (2.3.63) (Tadić et al., 2011):

$$\begin{aligned} \rho_{\parallel}^2 = & \sum_{l_e} \sum_{n_e, n'_e} \sum_{n_h, n'_h} \left\{ C_{l_e, n_e, n_h} C_{l_e, n'_e, n'_h} \langle l_e, n'_e | \rho_e^2 | l_e, n_e \rangle \cdot \delta_{n_h, n'_h} \right. \\ & + C_{l_e, n_e, n_h} C_{l_e, n'_e, n'_h} \langle l_x - l_e, n'_h | \rho_h^2 | l_x - l_e, n_h \rangle \cdot \delta_{n_e, n'_e} \\ & - C_{l_e, n_e, n_h} C_{l_e - 1, n'_e, n'_h} \langle l_e - 1, n'_e | \rho_e | l_e, n_e \rangle \langle l_x - l_e + 1, n'_h | \rho_h | l_x - l_e, n_h \rangle \\ & \left. - C_{l_e, n_e, n_h} C_{l_e + 1, n'_e, n'_h} \langle l_e + 1, n'_e | \rho_e | l_e, n_e \rangle \langle l_x - l_e - 1, n'_h | \rho_h | l_x - l_e, n_h \rangle \right\}. \end{aligned} \quad (2.3.64)$$

Na sličan način, zamena (2.2.22–3) u (2.3.63) u višezonskom modelu dovodi do izraza (Arsoski et al., 2013a):

$$\begin{aligned} \rho_{\parallel}^2 = & \sum_{l_e} \sum_{n_e, n'_e} \sum_{n_h, n'_h} \left\{ C_{l_e, n_e, n_h, s_z} C_{l_e, n'_e, n'_h, s_z} \langle l_e, n'_e | \rho_e^2 | l_e, n_e \rangle \cdot \delta_{n_h, n'_h} \right. \\ & + C_{l_e, n_e, n_h, s_z} C_{l_e, n'_e, n'_h, s_z} \langle s_z + l_e - f_{zx}, n'_h | \rho_h^2 | s_z + l_e - f_{zx}, n_h \rangle \cdot \delta_{n_e, n'_e} \\ & - C_{l_e, n_e, n_h, s_z} C_{l_e - 1, n'_e, n'_h, s_z} \langle l_e - 1, n'_e | \rho_e | l_e, n_e \rangle \\ & \times \langle s_z + l_e - f_{zx} - 1, n'_h | \rho_h | s_z + l_e - f_{zx}, n_h \rangle \\ & - C_{l_e, n_e, n_h, s_z} C_{l_e + 1, n'_e, n'_h, s_z} \langle l_e + 1, n'_e | \rho_e | l_e, n_e \rangle \\ & \left. \times \langle s_z + l_e - f_{zx} + 1, n'_h | \rho_h | s_z + l_e - f_{zx}, n_h \rangle \right\}. \end{aligned} \quad (2.3.65)$$

Takođe, kao meru položaja elektrona (šupljine) u neutralnom ekscitonu definišimo *srednji jednočestični radijus* i *vertikalni položaj* za dato ekscitonsko stanje:

$$\langle \rho_{e(h)} \rangle = \iint_{V_e, V_h} \Psi^{x*}(\vec{r}_e, \vec{r}_h) \cdot \rho_{e(h)} \cdot \Psi^x(\vec{r}_e, \vec{r}_h) d\vec{r}_h d\vec{r}_e, \quad (2.3.66)$$

$$\langle z_{e(h)} \rangle = \iint_{V_e, V_h} \Psi^{x*}(\vec{r}_e, \vec{r}_h) \cdot z_{e(h)} \cdot \Psi^x(\vec{r}_e, \vec{r}_h) d\vec{r}_h d\vec{r}_e, \quad (2.3.67)$$

redom. Kada bi elektron i šupljina bili konfinirani u koncentričnim 1D prstenovima radijusa $\langle \rho_e \rangle$ i $\langle \rho_h \rangle$, redom, polarizacija ekscitona bi zavisila od razlike $\langle \rho_e \rangle - \langle \rho_h \rangle$ (Govorov et al., 2002).

U slučaju jednozonskog modela definiše se još i *efektivni radijus orbite ekscitona* (Ding et al., 2010), koji zavisi od $\langle \rho_e \rangle$ i $\langle \rho_h \rangle$

$$\lambda_x = \left[\frac{m_e + m_h}{m_e / \langle \rho_h \rangle^2 + m_h / \langle \rho_e \rangle^2} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (2.3.68)$$

Zajedno sa $\langle \rho_e \rangle - \langle \rho_h \rangle$, radijus λ_x određuje *efektivnu površinu* (sličnu onoj kao između dva 1D prstena) kroz koju penetrira fluks magnetskog polja. Pošto je efektivna masa elektrona manja od šupljine, λ_x uglavnom odslikava ponašanje $\langle \rho_e \rangle$ sa promenom magnetskog polja. Jednostavna teorijska analiza (Barticevic et al., 2006) pokazuje da je dijamagnetski koeficijent pomeraja (Ding et al., 2010) prema pojednostavljenom modelu proporcionalan λ_x^2 / μ_{eh} , gde je $\mu_{eh} = m_e m_h / (m_e + m_h)$. Varijacija λ_x oko srednje vrednosti sa promenom B opisuje deo varijacije energije ekscitona oko srednje parabolične zavisnosti.

2.3.3. Jačina oscilatora i optička aktivnost

Jačina oscilatora predstavlja bitan parametar za opis optičkih osobina nanotačaka i nanoprstenova i za slučajeve razmotrene u okviru disertacije ustanovljeno je da promene jačine oscilatora prate oscilacije odgovarajućeg optički aktivnog stanja. Jačina oscilatora i -tog ekscitonskog stanja je data sa (Efros et al., 1996):

$$f_{x,i} = \frac{2}{m_0 E_{x,i}} \left| \left\langle u_{c0} \left| \vec{\epsilon} \cdot \hat{p} \right| u_{v0} \right\rangle \right|^2 |M|^2. \quad (2.3.69)$$

Ovde $\vec{\epsilon}$ predstavlja jedinični vektor duž pravca polarizacije svetlosti, u_{c0} i u_{v0} označavaju periodični deo Blochovih funkcija elektrona u provodnoj i valentnoj zoni, redom, a M označava *matrični element prelaza* (Efros et al., 1996):

$$M = \iint_{\Omega_e, \Omega_h} \delta(\vec{r}_e - \vec{r}_h) \cdot \Psi^x(\vec{r}_e, \vec{r}_h) d\Omega_e d\Omega_h. \quad (2.3.70)$$

Pretpostavlja se da je $\vec{\epsilon}$ orijentisan u ravni strukture (xy ravni), pri čemu je kvadrat matričnog elementa za prelaz između Blochovih stanja u centru zone (Degani et al., 2008):

$$\left| \left\langle u_{c0} \left| \vec{\epsilon} \cdot \hat{p} \right| u_{v0} \right\rangle \right|^2 = m_0^2 P^2 / (2\hbar^2) \cdot \delta_{|s_z - J_z|, 1}, \quad (2.3.71)$$

gde P označava Kaneov međuzonski matrični element, a član $\delta_{|s_z - J_z|, 1}$ predstavlja spinsko selekciono pravilo za polarizaciju u ravni.

Rekombinacija ekscitona pokazuje jaku zavisnost od polarizacije. Posmatranjem spinskog dela Blochovih funkcija (2.2.12) za polarizaciju u xy ravni može se zaključiti da anvelopne funkcije $\Psi_{n_h, f_{zh}, +3/2}^h$ i $\Psi_{n_h, f_{zh}, -1/2}^h$ odgovaraju spinu gore i stoga se optički mogu sprezati sa stanjima spina gore u provodnoj zoni, dok se $\Psi_{n_h, f_{zh}, +1/2}^h$ i $\Psi_{n_h, f_{zh}, -3/2}^h$ optički mogu sprezati sa stanjima spina dole u provodnoj zoni. Zato je spinsko selekciono pravilo za rekombinaciju $|s_z - J_z| = 1$, kao u (2.3.71). Iz jednačine (2.3.70) zaključuje se da samo stanja elektrona sa istim orbitalnim momentom doprinose matričnom elementu prelaza M (orbitalno selekciono pravilo), što zajedno sa spinskim selekcionim pravilom daje uslov $|f_{zx}| = 1$ za optički aktivna (svetla) stanja ekscitona pri razmatranju polarizacije u ravni. Na sličan način, na osnovu prethodnog razmatranja, dolazi se do zaključka da su u jednozonskom modelu samo prelazi između stanja istog spina i ekscitonskog orbitalnog momenta $l_x = 0$ optički aktivna.

Za procenu oscilacija u intenzitetu fotoluminiscencije najvažnije je osnovno stanje ekscitona, koje predstavlja stanje najniže energije. Napomenimo da je za strukture razmatrane u ove okviru disertacije osnovno stanje uvek optički aktivno za male vrednosti primenjenog magnetskog polja. Radi pojednostavljenja izraza koji slede, optički aktivno stanje najniže energije obeležićemo sa $E_{x,1}$. Primena Boltzmannove

statistike u analizi raspodele ekscitonskih stanja ukazuje na dominantan uticaj najnižeg optički aktivnog stanja na intenzitet izlaznog zračenja. Na konačnoj temperaturi T postoji konačna verovatnoća naseljenosti viših optički neaktivnih (tamnih) stanja što može značajno prigušiti oscilacije $E_{x,1}$. Važna temperaturski zavisna merljiva veličina, koja predstavlja usrednjenu vrednost jačine oscilatora po svim stanjima ekscitona, je intenzitet fotoluminiscencije (Degani et al., 2008):

$$I_{PL} = \frac{\sum_i f_{x,i} \exp(-E_{x,i} / k_B T)}{\sum_i \exp(-E_{x,i} / k_B T)}. \quad (2.3.72)$$

Napomenimo da je I_{PL} prema prethodnoj relaciji definisan kao bezdimenziona veličina.

2.3.4. Procena amplitude oscilacija ekscitonskih stanja

Kako bi se procenile oscilacije osnovnog stanja ekscitona Grochol i drugi (Grochol et al., 2006) predložili su računanje drugog izvoda najnižeg optički aktivnog stanja $d^2 E_{x,1} / dB^2$ u funkciji B . Proračunom $d^2 E_{x,1} / dB^2$ se iz zavisnosti $E_{x,1}(B)$ uklanja uticaj dijamagnetskog pomeraja. Pokazano je da $d^2 E_{x,1} / dB^2$ osciluje u funkciji magnetskog polja i da je period ovih oscilacija približno srazmeran kvadratu fluksa. Ovde ćemo predložiti alternativni metod za procenu amplitude oscilacija $E_{x,1}$ u funkciji B . Najpre aproksimirajmo zavisnost energije najnižeg optički aktivnog stanja ekscitona od magnetskog polja polinomom četvrtog reda (Arsoski et al., 2013a):

$$\langle E_{x,1} \rangle = \sum_{i=0}^4 c_i B^i, \quad (2.3.73)$$

gde su c_i optimalni koeficijenti predložene funkcije. Polinom četvrtog reda predstavlja korekciju odstupanja zavisnosti energije ekscitona u funkciji B od parabolične zavisnosti koja je egzaktna u 1D modelu. Ovakav pristup se bazira na činjenici da je parabolična zavisnost $E_{x,1}(B)$ rezultat teorije perturbacija I reda, dok bi se prema teoriji perturbacija II reda dobila zavisnost proporcionalna četvrtom stepenu po B . Pošto se odredi funkcija $\langle E_{x,1} \rangle$ računa se:

$$\delta E_{x,1} = E_{x,1} - \langle E_{x,1} \rangle. \quad (2.3.74)$$

Ukoliko oscilacije postoje, one će biti uočljive u zavisnosti $\delta E_{x,1}(B)$, slično kao što se vide u zavisnosti $d^2 E_{x,1} / dB^2$. Napomenimo, međutim, da se ne može očekivati striktna saglasnost između ova dva metoda za ekstrakciju oscilacija, jer su oba *ad hoc* pristupi.

Kao dodatni parametar povezan sa oscilacijama definisaćemo *Coulombovu potencijalnu energiju u ravni* (Arsoski et al., 2013a):

$$V_{c||} = -\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon\rho_{||}}. \quad (2.3.75)$$

U slučajevima razmotrenim u okviru disertacije biće demonstrirano da $V_{c||}$ osciluje oko linearne zavisnosti:

$$\langle V_{c||} \rangle = d_0 + d_1 B, \quad (2.3.76)$$

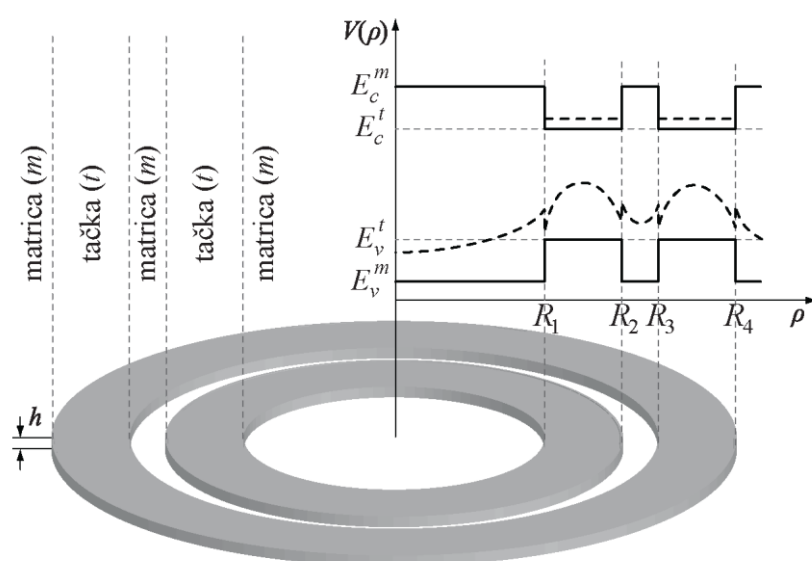
gde su d_i optimalni parametri linearnog fitovanja. Oscilatorni trend $V_{c||}$ može se bolje uočiti ukoliko se izračuna ostatak

$$\delta V_{c||} = V_{c||} - \langle V_{c||} \rangle. \quad (2.3.77)$$

2.4. Model ekscitona: adijabatska aproksimacija za dva lateralno spregnuta nanoprstena

U uvodnoj glavi dat je opis nanotačaka koje su analizirane u ovoj disertaciji. Dimenzije razmatranih nanotačaka su takve da je visina strukture značajno manja od lateralnih dimenzija, pa kinetički deo hamiltonijana koji opisuje kretanje u z pravcu daje značajno veću vrednost od dela koji opisuje kretanje u ravni. Ovo za posledicu ima slabu korelaciju aksijalne i lateralnih koordinata u talasnoj funkciji, te se u prvoj aproksimaciji talasna funkcija može predstaviti u faktorisanom obliku (razdvojene su koordinate u lateralnoj ravni od koordinata u pravcu narastanja, tj. z pravcu), odnosno smatra se da su ispunjeni uslovi za primenu *adijabatske aproksimacije*. Visina

eksperimentalnih struktura je dovoljno mala, pa su energije aksijalnih modova značajno razmaknute. Tada se u računu može uzeti u obzir samo jedna podzona određena prvim aksijalnim modom, što predstavlja *aproksimaciju jednom podzonom*. Takođe, eksperimentalne strukture koje se analiziraju u ovoj disertaciji su približno aksijalno simetrične, što omogućava primenu aksijalne aproksimacije. Kako bi model učinili jednostavnijim primenićemo jednozonsku aproksimaciju i za elektrone i za šupljine. Takođe, usvojićemo strmu varijaciju potencijala usled zonskog ofseta na razdvojnoj površi tačka/matrica.



Slika 2.5. Šematski prikaz strukture sačinjene od dva lateralno spregnuta nanoprstena. Na dijagramu je prikazana zavisnost efektivnih potencijala u provodnoj i valentnoj zoni u strukturi I tipa u slučaju kada naprezanje u strukturi ne postoji (puna linija) i kada je naprezanje uračunato u model (isprekidana linija).

U slučaju kada naprezanje materijala spoja ne postoji, rešenja za jednočestična stanja data su u formi analitičkih funkcija (Arsoski et al., 2010). Zanemarivanjem Coulombove interakcije dolazi se do jednostavnog *analitičkog modela* koji se može primeniti na analizu optičkih svojstava nanoprstenova, što će biti pokazano u narednom poglavlju. Uzimanje u obzir Coulombove interakcije i efekata naprezanja materijala spoja tačka/matrica zahteva numeričko rešavanje ekscitonske Schrödingerove jednačine, te je u nastavku opisan i jednostavan *numerički model*.

Navedeni modeli primenjeni su za analizu dva lateralno spregnuta nanoprstena u homogenom magnetskom polju primenjenom normalno na ravan strukture. Analizirana je struktura koja ima dispoziciju zona I tipa, čiji je šematski prikaz dat na sl. 2.5. Treba napomenuti da se formirani modeli (Arsoski et al., 2010; Arsoški i Tadić, 2011) mogu uspešno primeniti i na jedan nanoprsten, kao i na više lateralno spregnutih nanoprstenova. Takođe, mogu se primeniti i na strukture koje nemaju dispoziciju zona I tipa.

2.4.1. Analitički model jednočestičnih i ekscitonskih stanja

U slučaju kada su efekti naprezanja zanemarljivi, a pretpostavljaju se strmi potencijali na granici tačka/matrica, rešenja za jednočestična stanja su Besselove funkcije u slučaju kad magnetsko polje ne postoji (Culchac et al., 2007), odnosno konfluenente hipergeometrijske funkcije za konačne vrednosti spoljašnjeg magnetskog polja (Culchac et al., 2008; Arsoški et al., 2010). Pokazaćemo da se svojstvene vrednosti jednočestičnih stanja javljaju u parovima u zavisnosti od lokalizacije čestice, što je vezano za lokalizaciju čestice pretežno u unutrašnjem ili spoljašnjem prstenu. Stoga se pored oscilacija u osnovnom stanju sa promenom magnetskog polja na mestu preseka energija stanja različitog orbitalnog broja $l_{e(h)}$ javljaju i oscilacije na mestu antiukrštanja stanja niže i više energije istog $l_{e(h)}$. Period i amplituda ovih oscilacija određen je radijusima prstenova (Culchac et al., 2008; Arsoški et al., 2010).

Polazeći od (2.2.8) u odsustvu eksternog električnog polja i uzimajući u obzir adijabatsku aproksimaciju hamiltonijan prema jednozonskom modelu dat je izrazom (Arsoski et al., 2010):

$$\hat{H}_\alpha = \left(\hat{p} - q_\alpha \vec{A} \right) \frac{1}{2m_\alpha^*(\rho_\alpha)} \left(\hat{p} - q_\alpha \vec{A} \right) + V_{\alpha, k_z}(\rho_\alpha). \quad (2.4.1)$$

Ovde je $V_{\alpha, k_z}(\rho_\alpha)$ efektivni konfinirajući potencijal u radijalnom pravcu, a Zeemanov član nije uključen pošto se njegov uticaj može naknadno uračunati, kao što je to učinjeno u poglavlju 2.3.1. Za slučaj homogenog magnetskog polja usmerenog duž z ose iz (2.4.1) i (2.2.10) dobija se Schrödingerova jednačina u polarnim koordinatama (Arsoski et al., 2010):

$$\begin{aligned}
& -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{\rho_\alpha} \frac{\partial}{\partial \rho_\alpha} \left(\frac{\rho_\alpha}{m_\alpha^*} \frac{\partial \Psi}{\partial \rho_\alpha} \right) + \frac{1}{m_\alpha^* \rho_\alpha^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \rho_\alpha^2} \right) + \\
& + \frac{i\hbar q_\alpha B}{2m_\alpha^*} \frac{\partial \Psi}{\partial \varphi_\alpha} + \frac{(q_\alpha B \rho_\alpha)^2}{8m_\alpha^*} \Psi + [V_{\alpha, k_z}(\rho_\alpha) - E] \Psi = 0.
\end{aligned} \tag{2.4.2}$$

Aksijalna aproksimacija omogućava faktorizaciju talasne funkcije jednočestičnih stanja (Culchac et al., 2008; Arsoski et al., 2010):

$$\Psi_{n,l}(\rho_\alpha, \varphi_\alpha) = \frac{e^{il\varphi_\alpha}}{\sqrt{2\pi}} R_{n,l}(\rho_\alpha), \quad l_\alpha = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \tag{2.4.3}$$

odakle se dobija diferencijalna jednačina za radijalni deo talasne funkcije (Arsoski et al., 2010):

$$\begin{aligned}
& -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial \rho} \left(\frac{1}{m^*} \frac{\partial R_{n,l}}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{m^*} \frac{1}{\rho} \frac{\partial R_{n,l}}{\partial \rho} - \frac{l^2}{m^* \rho^2} R_{n,l} \right) \pm \\
& \pm \frac{\hbar l \omega_c}{2} R_{n,l} + \frac{m^* \omega_c^2 \rho^2}{8} R_{n,l} + [V(\rho) - E] R_{n,l} = 0,
\end{aligned} \tag{2.4.4}$$

gde je $\omega_c = eB/m^*$ prostorno zavisna ciklotronska učestanost, gornji (donji) znak u (2.4.4) odnosi se na elektrone (šupljine), a u nastavku teksta zbog jednostavnosti notacije izostavlja se oznaka za česticu α . Uvođenjem bezdimenzione promenljive $\xi = eB\rho^2/(2\hbar)$ diferencijalna jednačina postaje (Arsoski et al., 2010):

$$\xi R_{n,l}''(\xi) + R_{n,l}'(\xi) + \left(\frac{E - V^\beta(\xi)}{\omega_c^\beta} - \frac{l^2}{4\xi} \mp \frac{l}{2} - \frac{\xi}{4} \right) R_{n,l}(\xi) = 0, \tag{2.4.5}$$

gde je u prstenu-jami $\beta = \omega$, a u barijeri-matrici $\beta = \ell$.

Jednostavno je ustanoviti da je rešenje diferencijalne jednačine (2.4.5) dato u formi (Arsoski et al., 2010):

$$R_{n,l}(\xi) = e^{-\xi/2} \xi^{|l|/2} f_{n,l}(\xi). \tag{2.4.6}$$

Funkcija $f_{n,l}(\xi)$ zadovoljava jednačinu (Arsoski et al., 2010):

$$\xi f_{n,l}''(\xi) + (b - \xi) f_{n,l}'(\xi) - a_\beta f_{n,l}(\xi) = 0, \tag{2.4.7}$$

gde je $a_\beta = |l|/2 + 1/2 \pm l/2 + (V^\beta - E)/(\hbar\omega_c^\beta)$, i $b = |l| + 1$. Uopšteno rešenje jednačine (2.4.7) može se izraziti kao linearna kombinacija konfluentnih hipergeometrijskih funkcija prve i druge vrste, $M_{n,l}$ i $U_{n,l}$, redom:

$$f_{n,l}(\xi) = AM_{n,l}(a_\beta, b, \xi) + BU_{n,l}(a_\beta, b, \xi). \tag{2.4.8}$$

U slučaju dva lateralno spregnuta nanoprstena, imajući u vidu divergenciju funkcije $M_{n,l}$ za $\xi \rightarrow \infty$ i $U_{n,l}$ za $\xi \rightarrow 0$, rešenje je dato skupom jednačina (Arsoski et al., 2010):

$$f_{n,l}(\rho) = \begin{cases} A_{n,l}^1 M_{n,l}(a_\delta, b, c\rho^2), & 0 < \rho < R_1 \\ A_{n,l}^2 M_{n,l}(a_w, b, c\rho^2) + B_{n,l}^2 U_{n,l}(a_w, b, c\rho^2), & R_1 < \rho < R_2 \\ A_{n,l}^3 M_{n,l}(a_\delta, b, c\rho^2) + B_{n,l}^3 U_{n,l}(a_\delta, b, c\rho^2), & R_2 < \rho < R_3, \\ A_{n,l}^4 M_{n,l}(a_w, b, c\rho^2) + B_{n,l}^4 U_{n,l}(a_w, b, c\rho^2), & R_3 < \rho < R_4 \\ B_{n,l}^5 U_{n,l}(a_\delta, b, c\rho^2), & \rho > R_4 \end{cases} \quad (2.4.9)$$

gde je $c=eB/(2\hbar)$, a R_1 i R_2 unutrašnji i spoljašnji radijus manjeg, a R_3 i R_4 većeg prstena.

Primenom graničnih uslova na razdvojnoj površi prsten/matrica:

$$R_{n,l}(R_i^-) = R_{n,l}(R_i^+), \quad (2.4.10)$$

$$\frac{1}{m^*(\rho)} \frac{dR_{n,l}}{d\rho} \Big|_{\rho=R_i^-} = \frac{1}{m^*(\rho)} \frac{dR_{n,l}}{d\rho} \Big|_{\rho=R_i^+}, \quad (2.4.11)$$

dobija se skup od osam algebarskih jednačina. Sistem ima netrivialno rešenje ukoliko determinanta sistema ima vrednost nula, odakle se nalaze svojstvene vrednosti.

U slučaju kada $B \rightarrow 0$, zanemarenjem člana proporcionalnog B^2 dobija se diferencijalna jednačina u oblasti tačke:

$$\begin{aligned} \xi^2 R_{n,l}''(\xi) + \xi R_{n,l}'(\xi) + [\xi^2 - l^2] R_{n,l}(\xi) &= 0, \\ k &= \sqrt{\frac{2m_{\alpha,w}^*(E - V^w)}{\hbar^2} + \frac{q_\alpha B l}{\hbar}}, \quad \xi = k\rho, \end{aligned} \quad (2.4.12)$$

gde su rešenja Besselove funkcije J i Y , a u oblasti matrice:

$$\begin{aligned} \xi^2 R_{n,l}''(\xi) + \xi R_{n,l}'(\xi) - [\xi^2 + l^2] R_{n,l}(\xi) &= 0, \\ \kappa &= \sqrt{\frac{2m_{\alpha,\delta}^*(V^\delta - E)}{\hbar^2} - \frac{q_\alpha B l}{\hbar}}, \quad \xi = \kappa\rho, \end{aligned} \quad (2.4.13)$$

gde su rešenja Besselove funkcije I i K . Imajući u vidu divergenciju funkcije K u 0 i I u ∞ , rešenje se može pretpostaviti u obliku (Culchac et al., 2007):

$$R_{n,l}(\rho) = \begin{cases} A_{n,l}^1 I_l(\kappa\rho), & 0 < \rho < R_1 \\ A_{n,l}^2 J_l(k\rho) + B_{n,l}^2 Y_l(k\rho), & R_1 < \rho < R_2 \\ A_{n,l}^3 I_l(\kappa\rho) + B_{n,l}^3 K_l(\kappa\rho), & R_2 < \rho < R_3 \\ A_{n,l}^4 J_l(k\rho) + B_{n,l}^4 Y_l(k\rho), & R_3 < \rho < R_4 \\ B_{n,l}^5 K_l(\kappa\rho), & \rho > R_4 \end{cases} \quad (2.4.14)$$

Vežana stanja za $B = 0$ se nalaze iterativnim postupkom. Rešava se sistem jednačina koji se dobija primenom graničnih uslova (2.4.10–11) na (2.4.14) kad energija varira u oblasti $E \in (V^w, V^v)$. Rešenja su označena glavnim kvantnim brojem n prema rastućem redosledu.

Tipično je energija veze ekscitona višestruko manja od energije međuzonskih prelaza između osnovnih stanja elektrona u provodnoj i valentnoj zoni ($E_{c0} - E_{v0} \gg E_b$). Kako bi ostali u domenu analitike pri razmatranju ekscitonskih stanja u lateralno spregnutim nanoprstenovima primenili smo “nultu aproksimaciju”, čime smo zanemarili Coulombovu interakciju. Zbog zanemarenja Coulombove interakcije, stanja različitih orbitalnih brojeva nisu spregnuta u ekscitonu, tj. matrica za izabrano ekscitonsko stanje l_x će biti dijagonalna. Stoga su energije ekscitona date u vidu zbira energija jednočestičnih stanja, a matrični element za jačinu oscilatora za međuzonske prelaze dat izrazima (2.3.69–71), ima pojednostavljenu formu (Arsoski et al., 2010):

$$M_{cv} = \delta_{l_{cj}, -l_{vi}} \int_{\rho=0}^{\infty} \Psi_{cj} \Psi_{vi} \rho d\rho \int_{z=-\infty}^{+\infty} Z_{c0} Z_{v0} dz. \quad (2.4.15)$$

Ovde je $Z_{c0(v0)}$ komponenta jednočestične talasne funkcije osnovnog stanja za provodnu (valentnu) zonu dobijena iz Schrödingerove jednačine duž z -ose za strmi potencijal (1D kvantna jama). Aproksimacija jednom podzonom je opravdana pošto je lokalizacija jednočestičnih stanja pretežno u prstenovima, a visina prstenova je mala te su aksijalni modovi prilično razdvojeni po energijama.

2.4.2. Numerički model ekscitonske Schrödingerove jednačine

U nastavku će biti prikazan model ekscitonskih stanja za aksijalno simetrične 3D strukture male visine u homogenom magnetskom polju primenjenom normalno na ravan strukture uz uračunavanje interakcije čestica u ekscitonu. Uvođenje Coulombove interakcije u hamiltonijan zahteva primenu numeričkih metoda za rešenje problema. Usvojena aksijalna simetrija strukture dozvoljava mogućnost svodenja polazne 6D Schrödingerove jednačine za eksciton na 3D jednačinu, koja se relativno jednostavno može rešiti primenom metoda konačnih elemenata.

Treba napomenuti da je model, iako na prvi pogled prilično uprošćen, dobar za procenu postojanja oscilacija u najnižim stanjima ekscitona. Glavna prednost modela je što, za razliku od metoda dijagonalizacije u izabranom bazu jednočestičnih stanja (poglavlje 2.3), uzima u obzir sva moguća stanja. Na ovaj način izbegnuta je pojava “lažnih oscilacija” koje su posledica izbora bazisa. Naime, ukoliko se bazis sastoji samo od jednog od dva stanja koja se antiukrštaju (videti rezultate za jednočestične energije stanja u glavi 3.1), može doći do pojave oscilacije u oblasti antiukrštanja kao posledica zanemarivanja uticaja višeg stanja.

Osnova strukture je postavljena u $(\rho, \varphi, z=0)$ ravan, dok je primenjeno magnetsko polje u pravcu narastanja razmatrane strukture (duž z -ose). Koristimo jednozonsku aproksimaciju za šupljine, tj. računamo samo stanja hh ekscitona. Schrödingerova jednačina za eksciton u okviru aproksimacije efektivnih masa ima oblik

$$\hat{H}\Psi_x = E_x\Psi_x, \quad (2.4.16)$$

gde je \hat{H} hamiltonijan sistema, Ψ_x je anvelopna ekscitonska talasna funkcija, a E_x je svojstvena vrednost energije ekscitona. Hamiltonijan ekscitona je dat izrazom

$$\hat{H} = \sum_{\alpha=e,h} \left\{ \left[\hat{p}_\alpha - q_\alpha \vec{A}_\alpha(\vec{r}_\alpha) \right] \frac{1}{2m_\alpha^*} \left[\hat{p}_\alpha - q_\alpha \vec{A}_\alpha(\vec{r}_\alpha) \right] + V_\alpha(\vec{r}_\alpha) \right\} - \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r\sqrt{(\vec{r}_e - \vec{r}_h)^2}}, \quad (2.4.17)$$

gde α označava elektron (e) ili šupljinu (h), a $V_\alpha(\vec{r}_\alpha)$ je konfinirajući potencijal. Magnetsko polje $\vec{B} = B\vec{e}_z$ je homogeno, gde je magnetski vektor potencijal dat izrazom (2.2.10).

Pošto je zbog male visine nanostrukture usvojena adijabatska aproksimacija, talasna funkcija se može predstaviti u faktorisanom obliku kao proizvod dela talasne funkcije u lateralnoj ravni i dela talasne funkcije u normalnom pravcu (Grochol et al., 2006):

$$\Psi_x(\vec{r}_e, \vec{r}_h) = \Psi(\rho_e, \rho_h, \varphi_e, \varphi_h)u_e(z_e)u_h(z_h), \quad (2.4.18)$$

gde je $u_\alpha(z_\alpha)$ dobijeno iz Schrödingerove jednačine u z -pravcu u slučaju pravougaonog potencijala. Konfinirajući potencijal je aksijalno simetričan pa se hamiltonijan može pisati u formi (Grochol et al., 2006; Arsoški i Tadić, 2011):

$$\hat{H} = \sum_{\alpha=e,h} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{\rho_\alpha} \frac{\partial}{\partial \rho_\alpha} \left(\frac{\rho_\alpha}{m_\alpha^*} \frac{\partial}{\partial \rho_\alpha} \right) + \frac{1}{m_\alpha^* \rho_\alpha^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi_\alpha^2} \right) + \right. \\ \left. + \frac{i\hbar q_\alpha B}{2m_\alpha^*} \frac{\partial}{\partial \varphi_\alpha} + \frac{m_\alpha^* (q_\alpha B / m_\alpha^*)^2 \rho_\alpha^2}{8} + U_\alpha^z + V_\alpha(\rho_\alpha) \right\} + V_C(\rho_e, \rho_h, \phi_e - \phi_h), \quad (2.4.19)$$

gde je U_α^z deo energije ekscitona usled konfiniranja u z-pravcu, a $V_C(\rho_e, \rho_h, \phi_e - \phi_h)$ je Coulombov potencijal usrednjen duž pravca narastanja strukture (Grochol et al., 2006):

$$V_C(\rho_e, \rho_h, \phi_e - \phi_h) = -\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \iint_{z_e, z_h} \frac{u_e^2(z_e)u_h^2(z_h)dz_e dz_h}{\sqrt{\rho_e^2 + \rho_h^2 - 2\rho_e\rho_h \cos(\phi_e - \phi_h) + (z_e - z_h)^2}}. \quad (2.4.20)$$

Jednačina (2.4.20) se može pisati u pojednostavljenoj formi:

$$V_C(\rho_e, \rho_h, \phi_e - \phi_h) = -\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r \sqrt{\rho_e^2 + \rho_h^2 - 2\rho_e\rho_h \cos(\phi_e - \phi_h)}} \times \\ \times f_{Vcorr.}(\rho_e^2 + \rho_h^2 - 2\rho_e\rho_h \cos(\phi_e - \phi_h)), \quad (2.4.21)$$

gde je $f_{Vcorr.}$ korekcionni faktor usrednjavanja Coulombovog potencijala i za konkretnu vrednost visine prstenova se može proceniti numerički.

Aksijalna simetrija omogućava transformaciju u prostor sa novim ugaonim koordinatama (Grochol et al., 2006; Arsoški i Tadić, 2011):

$$\phi = \phi_e - \phi_h, \quad (2.4.22a)$$

$$\Phi = \frac{\phi_e + \phi_h}{2}, \quad (2.4.22b)$$

$$\frac{\partial}{\partial \phi_e} = \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \Phi}, \quad (2.4.22c)$$

$$\frac{\partial}{\partial \phi_h} = -\frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \Phi}, \quad (2.4.22d)$$

gde je ϕ relativna, a Φ srednja vrednost ugla. Lako se može pokazati da je $[\hat{H}, -i\hbar\partial/(\partial\Phi)] = 0$ u novom koordinatnom prostoru (Grochol et al., 2006), što omogućava dodatnu faktorizaciju ekscitonske talasne funkcije:

$$\Psi(\rho_e, \rho_h, \phi_e, \phi_h) = \frac{e^{i\phi_e\Phi}}{\sqrt{2\pi}} \psi(\rho_e, \rho_h, \phi), \quad (2.4.23)$$

gde je l_x celobrojna vrednost i predstavlja kvantni broj (ukupnog) orbitalnog momenta ekscitona. Zamenom (2.4.21–23) u (2.4.19) hamiltonijan postaje zavisan samo od tri koordinate (ρ_e, ρ_h, ϕ) (Arsoski i Tadić, 2011):

$$\begin{aligned} \hat{H} = \sum_{\alpha=e,h} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{\rho_\alpha} \frac{\partial}{\partial \rho_\alpha} \left(\frac{\rho_\alpha}{m_\alpha^*} \frac{\partial}{\partial \rho_\alpha} \right) + \frac{1}{m_\alpha^* \rho_\alpha^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) - \right. \\ \left. - \frac{i\hbar}{2m_\alpha^*} \left(\frac{\hbar l_x q_\alpha}{e \rho_\alpha^2} + eB \right) \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{m_\alpha^* (q_\alpha B / m_\alpha^*)^2 \rho_\alpha^2}{8} - \right. \\ \left. - \frac{\hbar l_x q_\alpha B}{4m_\alpha^*} + \frac{\hbar^2 l_x^2}{8m_\alpha^* \rho_\alpha^2} + U_\alpha^z + V_\alpha(\rho_\alpha) \right\} + V_C(\rho_e, \rho_h, \phi). \end{aligned} \quad (2.4.24)$$

Na ovaj način polazna 6D Schrödingerova jednačina se svodi na 3D jednačinu i lako se može rešiti numerički pomoću metoda konačnih elemenata.

Za jačinu oscilatora datu izrazima (2.3.69–71) i usvojenu adijabatsku aproksimaciju matrični element prelaza između stanja u provodnoj i valentnoj zoni dat je u redukovanoj formi izrazom

$$M = \int_{\Omega} \Psi(\vec{r}, \vec{r}) d\Omega = \sqrt{2\pi} \delta_{l_x, 0} \int_0^\infty \psi(\rho_e, \rho_e, 0) \rho_e d\rho_e \int_{-\infty}^{+\infty} u_e(z) u_h(z) dz, \quad (2.4.25)$$

gde su samo $l_x=0$ stanja optički aktivna.

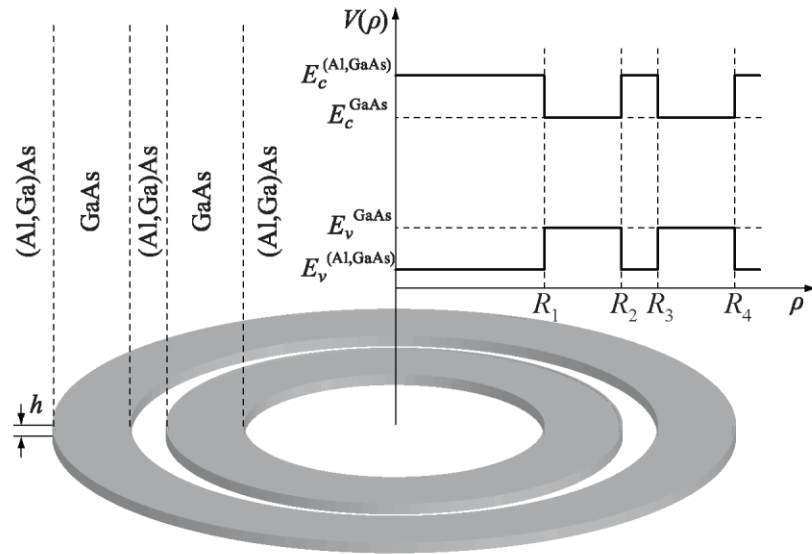
Glava 3

Ekscitoni u koncentričnim lateralno spregnutim nanoprstenovima

U prvoj glavi smo diskutovali razne načine za proizvodnju prstenova. Pri tome smo istakli da je jedna od korišćenih tehnika modifikovana kapljična epitaksija. Ove strukture imaju tanak sloj u otvoru, ali i oblik preklapljenih koncentričnih prstenova. Visina ovih prstenova je reda nekoliko nanometara, dok su lateralne dimenzije velike, tako da se u prvoj aproksimaciji može primeniti model lateralno postavljenih 2D prstenova.

Strukture dobijene pomoću modifikovane kapljične epitaksije su GaAs ostrva okružena (Al,Ga)As matricom (Sanguinetti et al., 2003; Mano et al., 2005b). Skorašnja teorijska analiza lateralno spregnutih GaAs/(Al,Ga)As nanoprstenova pokazala je da kod ovakvog tipa mezoskopske strukture širina barijere između prstenova bitno utiče na ukrštanja i antiukrštanja (Culchac et al., 2008). Mi smo izračunali ekscitonska stanja, elektronsku strukturu, kao i relevantne veličine za međuzonske prelaze u strukturi sačinjenoj od dva koncentrična GaAs/(Al,Ga)As nanoprstena (Arsoski et al., 2010; Arsoški i Tadić, 2011). Pretpostavljeno je da je pravac homogenog magnetskog polja normalan na ravan strukture. Šematski prikaz analizirane strukture dat je na sl. 3.1.

Unutrašnji radijusi prstenova označeni su sa R_1 i R_3 , dok su spoljašnji radijusi R_2 i R_4 . Usvojen je model strmih potencijala, kao na sl. 3.1. Ovo se razlikuje od prethodnih modela gde je pretpostavljena parabolična zavisnost potencijala (Szafran i Peeters, 2005).



Slika 3.1. Šematski prikaz dva lateralno spregnuta aksijalno simetrična nanoprstena na bazi GaAs/(Al,Ga)As i konfinirajućih potencijala u provodnoj i valentnoj zoni.

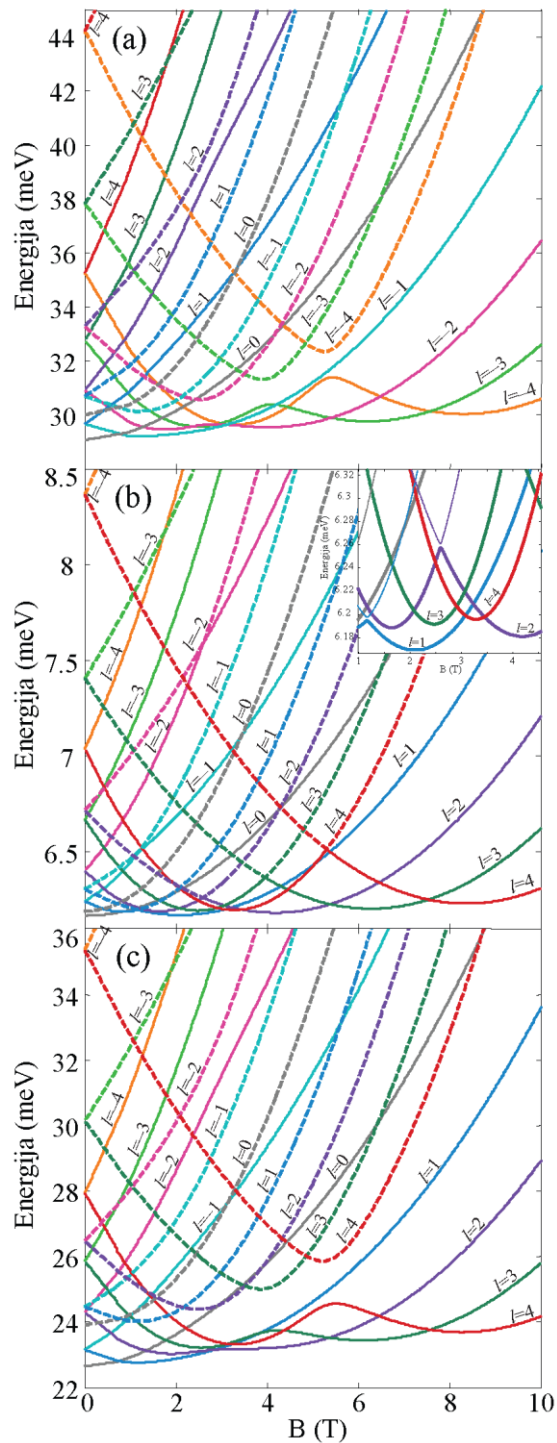
Efektivna masa elektrona u GaAs je $0,067m_0$, dok su efektivne mase teških i lakih šupljina $0,45 m_0$ i $0,082 m_0$, redom (Singh, 1993). Efektivne mase u $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ leguri su izračunate prema izrazima $(0,067+0,083x)m_0$, $(0,45+0,2x)m_0$, i $(0,082+0,068x)m_0$ za elektron, tešku i laku šupljinu, redom (Singh, 1993). Usvojena je vrednost molarnog udela $x= 0,3$. Obzirom da su konstante rešetke GaAs i (Al,Ga)As približno iste, efekti naprežanja se mogu zanemariti. Razmatrana struktura ima dispoziciju zona I tipa. Ekstremumi vrednosti energija u prstenovima usvojeni su kao referentni nivoi. Za vrednost energetskog procepa u GaAs na temperaturi 0 K uzeto je 1,519 eV (Vurgaftman et al., 2001). Ofset provodne zone određen je na osnovu relacije $0,7482x$ eV, a ofset valentne zone je opisan izrazom $0,4988x$ eV (Singh, 1993). Ostale vrednosti parametara date su u Dodatku B. Šematski prikaz konfinirajućih potencijala u provodnoj i valentnoj zoni dat je na sl. 3.1. Temperatura ambijenta je $T = 4,2$ K. U proračunu je usvojeno da centralni prsten ima unutrašnji i spoljašnji radijus $R_1=20$ nm i $R_2=30$ nm, redom, dok su radijusi perifernog prstena $R_3=35$ nm i $R_4=45$ nm (Arsoski et

al., 2010; Arsoski i Tadić, 2011). Dimenzije razmatrane strukture približno su jednake dimenzijama eksperimentalno realizovanih prstenova (Mano et al., 2005b; Kuroda et al., 2005). Pretpostavlja se da su prstenovi iste visine $h=4$ nm.

3.1. Analitički model

Razmatrana struktura zadovoljava uslove primene analitičkog modela opisanog u poglavlju 2.4.1. Pretpostavljeno je da se magnetsko polje menja u opsegu od 0 do 10 T. Oscilacije koje su posledica antiukrštanja stanja niže i više energije istog orbitalnog broja navode na mogućnost pojave ekscitonskih AB oscilacija (Arsoski et al., 2010).

Zavisnosti energija jednočestičnih stanja elektrona, teških i lakih šupljina za l u opsegu $[-4,+4]$ prikazane su na sl. 3.2(a)-(c). Sva stanja za $B=0$, osim stanja $l=0$, su dvostruko degenerisana, tj. $E(l) = E(-l)$. Takođe, za svaki orbitalni moment, osim $l=0$, talasne funkcije stanja najniže energije, prikazana punom linijom na sl. 3.2, su uglavnom lokalizovana u spoljašnjem prstenu za $B=0$. S druge strane, za svako l (osim $l=0$) talasna funkcija stanja više energije, čije su energije $E(B)$ prikazane isprekidanom linijom na sl. 3.2, je pretežno lokalizovana u unutrašnjem prstenu. Razdvajanje stanja najniže energije i prvog stanja više energije za $B=0$ raste sa $|l|$, što je jasno uočljivo na sl. 3.2. Takođe, očigledno je antiukrštanje ovih stanja u određenom opsegu B . Ova antiukrštanja manifestuju se na približno istim vrednostima magnetskog polja i u provodnoj i u valentnoj zoni. Stoga se može zaključiti da su položaji antiukrštanja određeni uglavnom topologijom (tj. dimenzijama, odnosno položajem prstenova), pre nego zonskom strukturom i parametrima poluprovodničkih materijala koji sačinjavaju nanostrukturu (efektivne mase, zonski ofset, itd.). Dalje je očigledno da se položaj antiukrštanja pomera ka većim vrednostima B sa porastom $|l|$. Sa sl. 3.2 se jasno uočava da u provodnoj zoni do antiukrštanja dolazi u širokom opsegu B , gde su energije lokalnih maksimuma stanja najniže energije i komplementarnih minimuma stanja više energije jasno razdvojeni, što ukazuje na značajno tunelovanje elektrona kroz barijeru. S druge strane, antiukrštanja teških šupljina su vrlo oštra, što ukazuje na pretežnu lokalizaciju teških šupljina u prstenovima i posledica su relativno velike efektivne mase teških šupljina.

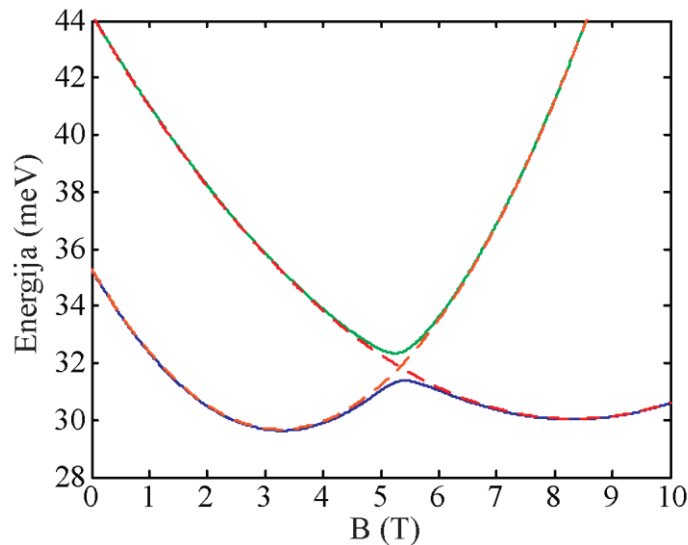


Slika 3.2. Jednočestične energije stanja u lateralno spregnutim 2D nanoprstenovima u: (a) provodnoj zoni, (b) zoni teških šupljina i (c) zoni lakih šupljina. Prikazana su stanja orbitalnih kvantnih brojeva u opsegu $l \in [-4,4]$ u funkciji normalnog magnetskog polja. Stanja niže energije ($n_r=1$) su prikazana punom linijom, a stanja više energije ($n_r=2$) isprekidanom linijom. Umetak na slici (b) prikazuje uveličani spektar teških šupljina u okolini antiukrštanja.

U uprošćenoj predstavi spektar energije prikazan na sl. 3.2 može biti povezan sa spektrom dva koncentrična 1D prstena razdvojenih beskonačnom barijerom. Prvi minimum stanja najniže energije za dato l odgovara celobrojnom umnošku magnetskog fluksa kroz 1D prsten, odakle je položaj minimuma energije dat sa

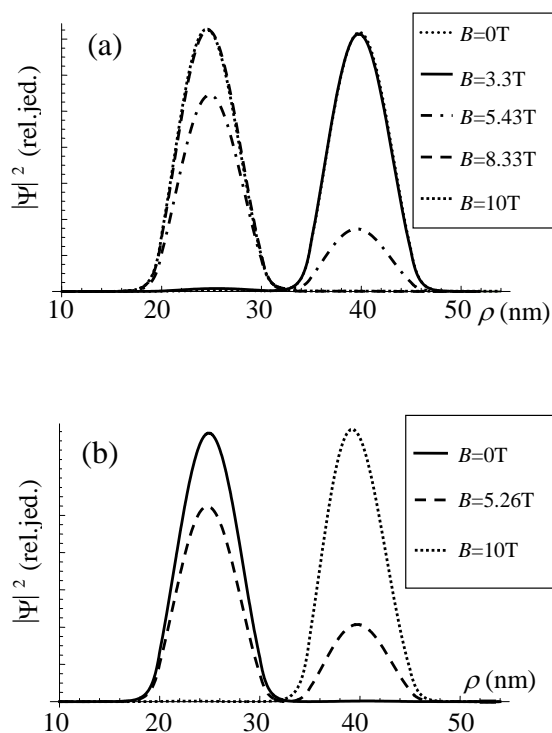
$$B_{\min} = \frac{2\hbar|l|}{qR_{1D}^2}. \quad (3.1)$$

Ovde je $R_{1D}^2 = (R_3^2 + R_3R_4 + R_4^2)/3$ Heronova srednja vrednost. Drugi minimum je takođe određen jednačinom (3.1), ali je $R_{1D} = \sqrt{(R_1^2 + R_1R_2 + R_2^2)/3}$. Osnovna stanja na sl. 3.2(a)-(c) ukazuju na postojanje AB oscilacija jednočestičnih stanja. Njihov period je prvenstveno određen dimenzijom spoljašnjeg prstena. Međutim, oscilacije kod koncentričnih prstenova su manje regularne (periodične) nego kod jednostrukog prstena (Mano i Koguchi, 2005a). Ovo je posledica relokalizacije naelektrisanja iz spoljašnjeg u unutrašnji prsten sa porastom magnetskog polja, što je demonstrirano i eksperimentalno (Mühle et al., 2007).



Slika 3.3. Energijski spektar elektrona u koncentričnim lateralno spregnutim 2D nanoprstenovima za $l = -4$; stanje niže energije je prikazano punom plavom linijom, dok je stanje više energije prikazano punom zelenom linijom. Ove energije su upoređene sa najnižim $l = -4$ stanjem većeg jednog nanoprstena (isprekidana narandžasta linija) unutrašnjeg i spoljašnjeg radijusa $R_1=35$ nm i $R_2=45$ nm, redom, i manjeg jednog nanoprstena (isprekidana crvena linija) radijusa $R_3=20$ nm i $R_4=30$ nm.

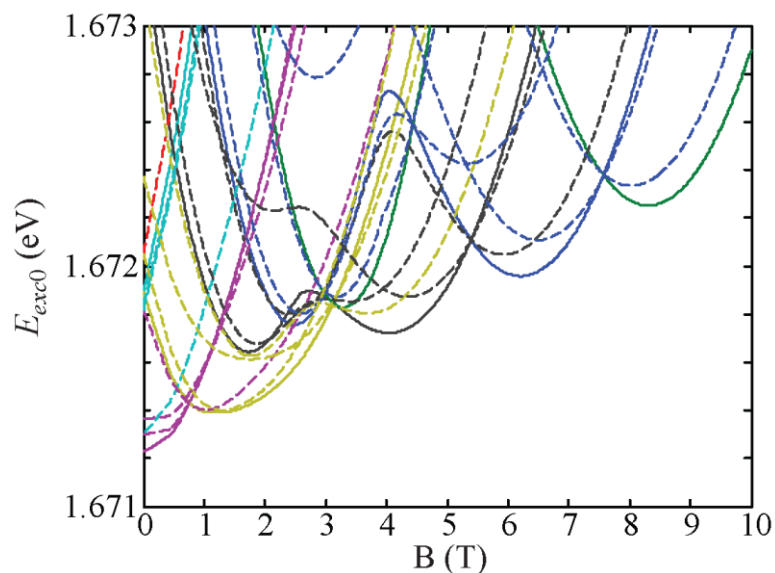
Kako bi se preciznije ustanovile osobenosti spektralne zavisnosti dva lateralno spregnuta nanoprstena, izračunate su svojstvene vrednosti za svaki od nanoprstena pojedinačno. Za orbitalni broj $l=-4$ na sl. 3.3 prikazane su energije dva stanja najniže energije dva lateralno spregnuta nanoprstena (pune linije) u poređenju sa $l=-4$ stanjem najniže energije svakog od prstena pojedinačno (isprekidane linije). Očigledno je da postoji dobro poklapanje stanja pojedinačnih prstena sa dva najniža stanja dva lateralno spregnuta nanoprstena daleko od tačke antiukrštanja, što ide u prilog pretpostavci o dominantnoj lokalizaciji u jednom od nanoprstena.



Slika 3.4. Gustina verovatnoće $l = -4$ stanja (a) najniže energije i (b) prvog stanja više energije u provodnoj zoni za nekoliko karakterističnih vrednosti magnetskog polja sa sl. 3.2(a).

Kako bi se detaljnije ustanovila izmena lokalizacije sa promenom B , gustina verovatnoće stanja elektrona najniže energije za $l = -4$ prikazana je na sl. 3.4, za par karakterističnih vrednosti sa sl. 3.2(a). Prikazane gustine verovatnoće odgovaraju vrednostima magnetskog polja 3,3 T i 8,33 T, na kojima energija $l = -4$ stanja najniže

energije ima minimum. Zatim, prikazane su $|\Psi|^2$ za B pri kome dolazi do antiukrštanja (5,43 T), kao i za vrednosti koje odgovaraju granicama analiziranog opsega B , 0 i 10 T. Za vrednosti magnetskog polja manje od 3,3 T, elektron je praktično u potpunosti lokalizovan u spoljašnjem prstenu. Sa porastom B raste gustina verovatnoće u unutrašnjem prstenu i verovatnoće da se elektron nađe u unutrašnjem i spoljašnjem prstenu su uporedive na 5,43 T. Za vrednosti B bliske drugom maksimumu i veće od ove vrednosti elektron u najnižem $l = -4$ stanju je praktično u potpunosti lokalizovan u unutrašnjem prstenu. Slika 3.4(b) prikazuje gustinu verovatnoće prvog stanja više energije za $l = -4$ za nekoliko karakterističnih vrednosti magnetskog polja sa sl. 3.2(a). Može se ustanoviti da je lokalizacija komplementarna u odnosu na $l = -4$ stanje najniže energije.

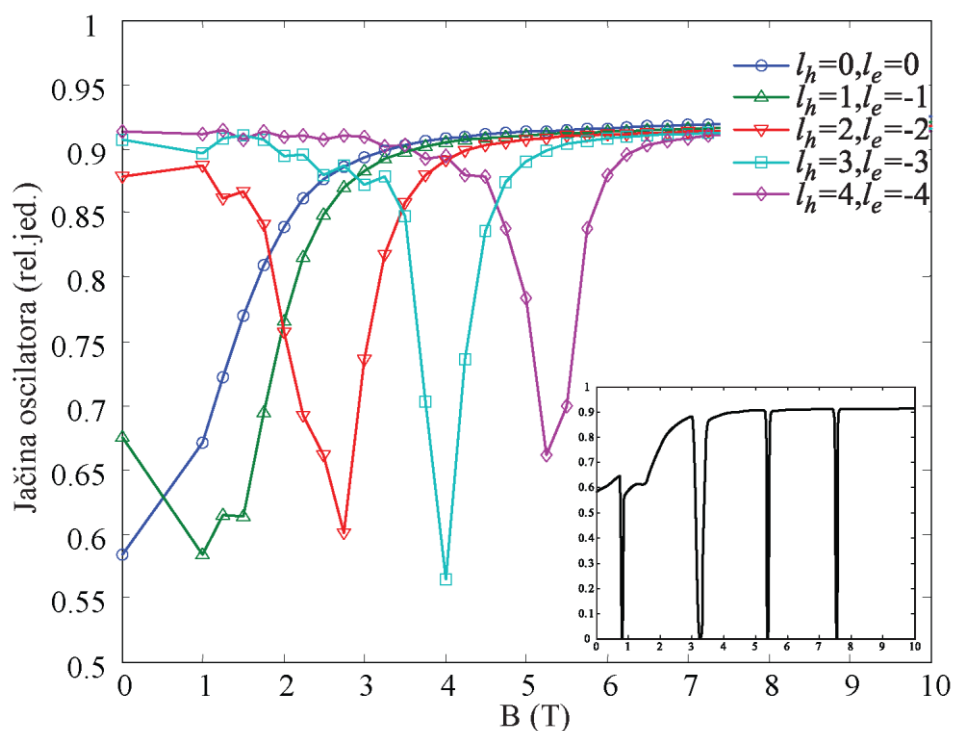


Slika 3.5. Energije međuzonskih prelaza nekoliko najnižih (a) optički aktivnih (pune linije) i (b) optički neaktivnih stanja (isprekidane linije) ekscitona.

Na sl. 3.5 prikazane su energije nekoliko najnižih ekscitonskih stanja, gde su optički aktivna stanja predstavljena punom, a neaktivna isprekidanom linijom. Može se uočiti da su zavisnosti energija od B pretežno određene energijama elektrona. Takođe, u uskim opsezima vrednosti magnetskog polja u okolini antiukrštanja jednočestičnih stanja može se desiti da osnovno stanje ekscitona bude optički neaktivno. Ovo ukazuje

na mogućnost optičke manifestacije oscilacija u vidu varijacija intenziteta emitovanog zračenja.

Na sl. 3.6 prikazana je jačina oscilatora za prelaze između stanja najniže energije u provodnoj i valentnoj zoni. Uočava se da jačina oscilatora ima lokalni minimum u okolini antiukrštanja. Ovi minimumi su posledica razlika u relokalizaciji elektrona i šupljine iz jednog u drugi nanoprsten za vrednosti B koje odgovaraju opsegu u kojem dolazi do antiukrštanja jednočestičnih stanja. Poređenjem sl. 3.2(a), 3.2(b), i 3.6 uočava se da jačina oscilatora osciluje oko prelaza stanja najniže energije.



Slika 3.6. Jačina oscilatora za međuzonske optičke ($l_h = -l_e$) prelaze između elektronskih i teškošupljinskih stanja najniže energije u funkciji magnetskog polja. Umetak prikazuje jačinu oscilatora za prelaze između osnovnih stanja elektrona i teške šupljine.

Jačina oscilatora za međuzonske prelaze između osnovnog stanja elektrona i teške šupljine prikazana je na umetku na sl. 3.6. Pojava lokalnih minimuma u prikazanoj zavisnosti ukazuje da u uskim opsezima B , koji se poklapaju sa antiukrštanjem jednočestičnih stanja, ekscitonska stanja mogu postati optički neaktivna, što se može uočiti i na sl. 3.5. Ovaj rezultat ostavlja mogućnost da postoji smenjivanje “svetlih” i

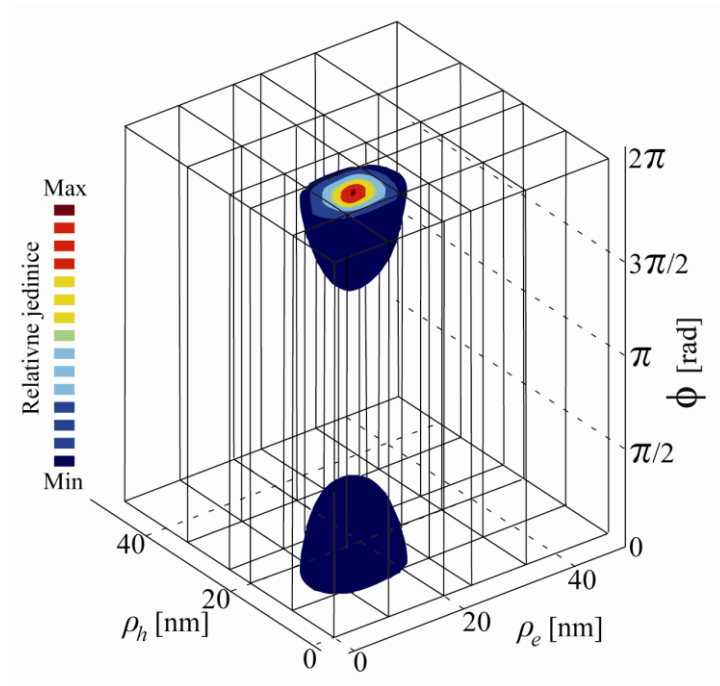
“tamnih” stanja osnovnog stanja ekscitona sa promenom B . Međutim, ovaj efekat će postojati samo ako je Coulombova interakcija između elektrona i teške šupljine mala. Jednostavnom analitičkom analizom može se pokazati da je u slučaju kada je dimenzija strukture veća od efektivnog Bohrovog radijusa eksciton jako vezan (Govorov et al., 2002). Pošto je efektivni Bohrov radijus u GaAs približno 12 nm, to se odnosi i na razmatranu strukturu. Uključenje Coulombove interakcije dovodi do značajnog prigušenja ekscitonskih AB oscilacija, što je pokazano čak i za nanoprstenove malih dimenzija, odnosno u režimu slabe interakcije u ekscitonu (Barticevic et al., 2006). Stoga je za donošenje nedvosmislenih zaključaka u razmatranje neophodno uključiti Coulombov član, što je i učinjeno u sledećem poglavlju.

3.2. Numerički model sa uračunatom Coulombovom interakcijom

U prethodnom poglavlju smo pretpostavili da uključenje Coulombovog potencijala može biti presudno za procenu postojanja i amplitude ekscitonskih AB oscilacija. Topološka složenost strukture i adekvatan odabir materijala omogućavaju pojavu AB efekta i u slučaju neutralnog ekscitona (Govorov et al., 2002), ali usled postojanja interakcije elektrona i šupljine oscilacije osnovnog stanja mogu biti značajno prigušene (Arsoski i Tadić, 2011). Iako je eksciton kao kvazičestica neutralan, ukoliko postoji razlika u lokalizaciji elektrona i šupljine u ekscitonu, on će biti polarizovan. Na ovaj način postojaće razlika u površinama koje naležu na zamišljene trajektorije elektrona i šupljine što, u slučaju kada magnetsko polje postoji, dovodi do pojave fazne razlike. U slučaju kada su varijacije energije ekscitona velike mogu se pojaviti preseki ekscitonskih stanja različitog orbitalnog momenta, što ima značajan uticaj na varijaciju spektra fotoluminiscencije. Ovakva optička manifestacija ekscitonskog AB efekta je ranije predviđena teorijski (Govorov et al., 2002), ali uz *a priori* pretpostavku da postoje razlike u konfiniranju elektrona i šupljine.

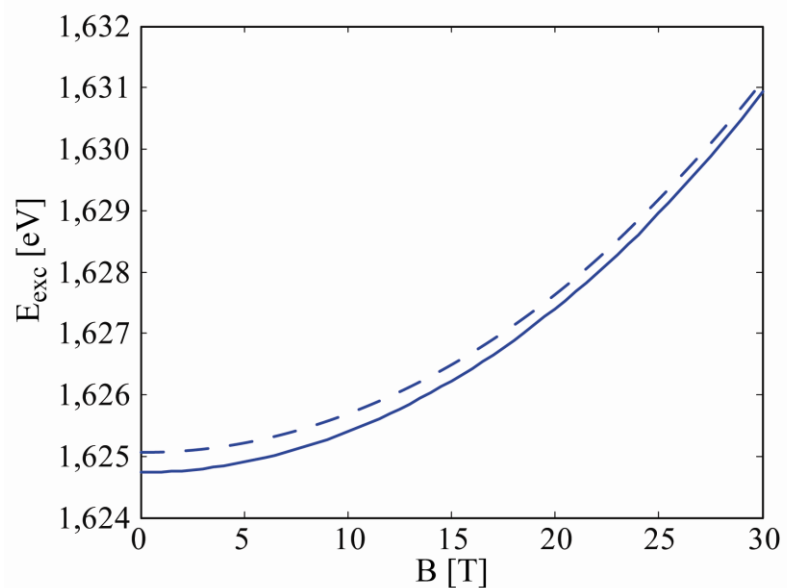
Formirani numerički model, opisan u poglavlju 2.4.2, primenjen je u analizi ekscitonskih stanja samoasembliраних koncentričnih GaAs/(Al,Ga)As nanoprstenova opisanih u prethodnom poglavlju. Prema predloženom modelu izvršen je proračun

ekscitonskih stanja za vrednosti magnetskog polja u opsegu $B \in (0, 30)$ T. Talasna funkcija osnovnog stanja u odsustvu magnetskog polja u novom sistemu koordinata prikazana je na sl. 3.7. Može se zaključiti da je u odsustvu magnetskog polja za osnovno stanje ekscitona karakteristična lokalizacija u unutrašnjem prstenu.

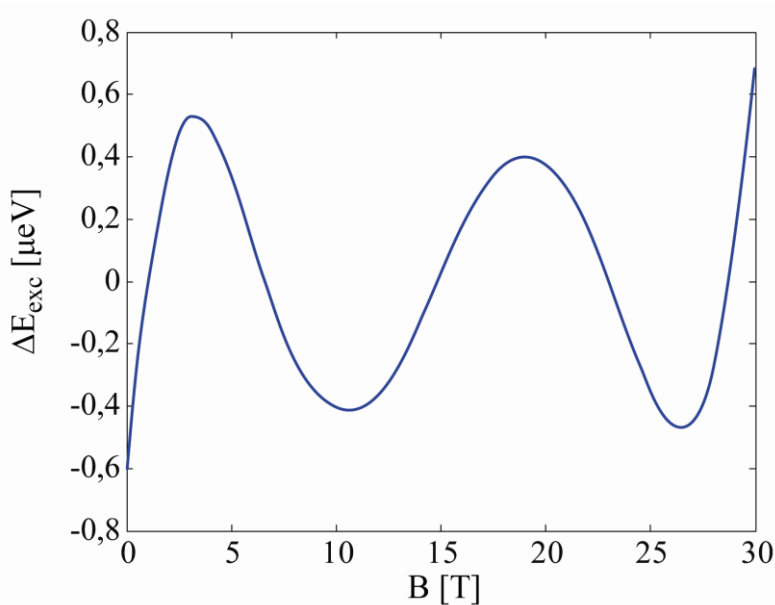


Slika 3.7. 3D ekscitonska talasna funkcija osnovnog stanja ekscitona za $B=0$ T.

Izmena vrednosti energije ekscitona sa promenom magnetskog polja data je na sl. 3.8. Izračunate vrednosti energija približne su eksperimentalnim (Mano et al., 2005c). Osnovno stanje je optički aktivno u celom opsegu razmotrenih vrednosti magnetskog polja. Kako oscilacije energije osnovnog stanja sa promenom magnetskog polja nisu uočljive na sl. 3.8, kao mera oscilacija energije osnovnog stanja ekscitona na sl. 3.9 prikazan je dijagram zavisnosti odstupanja energije ekscitona od parabolične funkcije od magnetskog polja, koja inače dobro opisuje dijamagnetski pomeraj energije ekscitona u jednostruko povezanim nanotačkama. Amplitude oscilacija su manje od μeV , te su eksperimentalno teško uočljive na konačnoj temperaturi, usled konačne širine linija u spektru fotoluminiscencije.

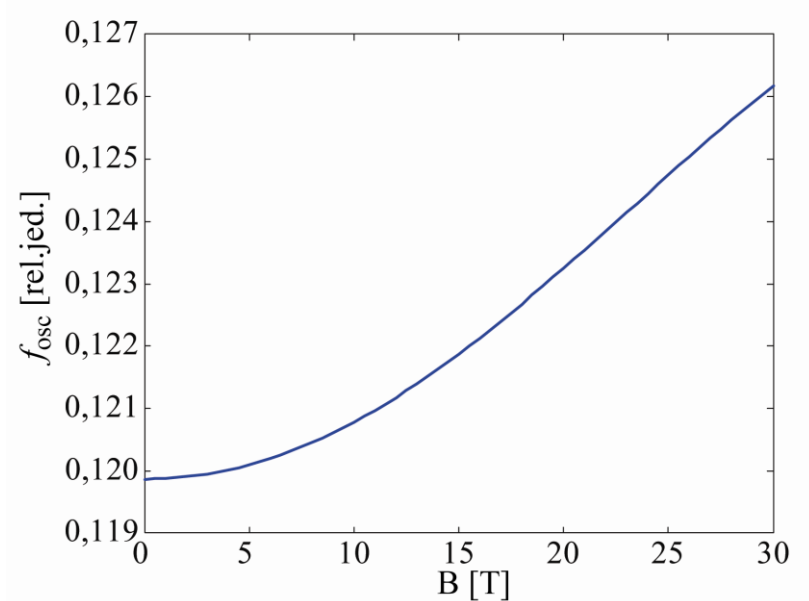


Slika 3.8. Zavisnost energije osnovnog optički aktivnog stanja eksitona ($l_x=0$; puna linija) i najnižeg optički neaktivnog stanja ($l_x=-1$; isprekidana linija).



Slika 3.9. Odstupanje energije osnovnog stanja od kvazi-parabolične zavisnosti.

Jačina oscilatora osnovnog stanja ima tendenciju blagog porasta bez приметnih oscilacija (sl. 3.10). Ovakva karakteristika je posledica nepostojanja preseka stanja različitih orbitalnih momenata, koja su inače razlog za postojanje optičkih eksitonskih AB oscilacija u sistemima koncentričnih 1D prstenova (Govorov et al., 2002).



Slika 3.10. Jačina oscilatora osnovnog (optički aktivnog) stanja u funkciji magnetskog polja.

Ustanovljene su oscilacije energije osnovnog stanja ekscitona sa promenom magnetskog polja reda μeV , što ukazuje da je ekcitonski AB efekat slabo prisutan u nenapregnutim 3D nanoprstenovima, a amplituda ekscitonskih AB oscilacija je izuzetno mala za eksperimentalnu verifikaciju. Mala amplituda ekscitonskih AB oscilacija u razmatranom sistemu je posledica slične lokalizacije elektrona i šupljine, uprkos složenoj topologiji sistema. Slično ponašanje može se očekivati kod većine nanostrukture I tipa bez naprezanja. Skorašnja teorijska (Tadić et al., 2011; Arsoški et al., 2013a) i eksperimentalna (Teodoro et al., 2010) istraživanja ukazuju na postojanje ekscitonskog AB efekta usled polarizacije ekscitona pomoću mehaničkog naprezanja. Amplitudu i periodičnost ovih oscilacija moguće je kontrolisati primenom električnog polja usmerenog u pravcu narastanja strukture (Ding et al., 2010). Pored toga, skorija teorijska istraživanja ukazuju na mogućnost razdvajanja elektrona i šupljine u realnim nanoprstenovima pomoću električnog polja velikog intenziteta. Na ovaj način se predviđa mogućnost pojave oscilacija i u nenapregnutim strukturama I tipa (Li i Peeters, 2011). Uticaj naprezanja, realne geometrije i električnog polja na ekscitonska stanja biće istraženi u glavi 4 i 5.

3.3. Sažetak

U ovoj glavi su prikazani jednostavani modeli elektronskih i ekscitonskih stanja u primenjenom normalnom magnetskom polju u strukturama sačinjenim od aksijalno simetričnih nanoprstenova male visine sa dispozicijom zona I tipa. Modeli su primenjeni u analizi sistema dva lateralno spregnuta koncentrična GaAs/(Al,Ga)As nanoprstena, gde su dimenzije strukture izabrane u skladu sa eksperimentalnim vrednostima (Mano et al., 2005c). Usvojena je aproksimacija efektivnih masa za jednočestična stanja i adijabatska aproksimacija kojom se razdajaju koordinate u lateralnoj ravni od vertikalnih.

U odsustvu magnetskog polja talasne funkcije jednočestičnih stanja najniže energije (osim za $l=0$) su pretežno lokalizovana u spoljašnjem prstenu. U primenjenom magnetskom polju dolazi do relokalizacije iz spoljašnjeg u unutrašnji prsten. Pojava antiukrštanja kod jednočestičnih stanja čini AB oscilacije manje regularnim, nego kod jednostrukog kvantnog prstena. Prosta analiza koja ne uključuje Coulombovu interakciju pokazuje da energije ekscitona i jačina oscilatora osnovnog stanja imaju oscilatorni karakter u primenjenom magnetskom polju. Izraženi minimumi jačine oscilatora posledica su pojave optički neaktivnih stanja u osnovnom stanju u opsezima polja gde dolazi do antiukrštanja. Za donošenje temeljnijih zaključaka o mogućnosti pojave ekscitonskih AB oscilacija kod dvostrukih prstenova, a generalno i u svim dvostruko povezanim nanostrukturama, neophodno je primeniti strožiji neanalitički model u cilju računanja međusobnih interakcija čestica u ekscitonu. Primenom numeričkog modela dobijene su amplitude oscilacija energije osnovnog stanja ekscitona reda μeV . Ovako male oscilacije se mogu objasniti nepostojanjem značajnije polarizacije ekscitona u strukturama I tipa pošto su konfinirajući potencijali slični za elektron i šupljinu. Međutim, rezultati nedavnih merenja predviđaju odsustvo eksperimentalne verifikacije ekscitonskog AB efekta (Kuroda et al., 2005), što je objašnjeno širenjem linija fotoluminiscentnih spektara na konačnoj temperaturi, koje je značajno veće od uočenih oscilacija energije ekscitona. Pored toga, kao posledica nepostojanja preseka ekscitonskih stanja različitog orbitalnog momenta, utvrđeno je da ne postoje intenzivne oscilacije jačine oscilatora za rekombinaciju ekscitona.

Glava 4

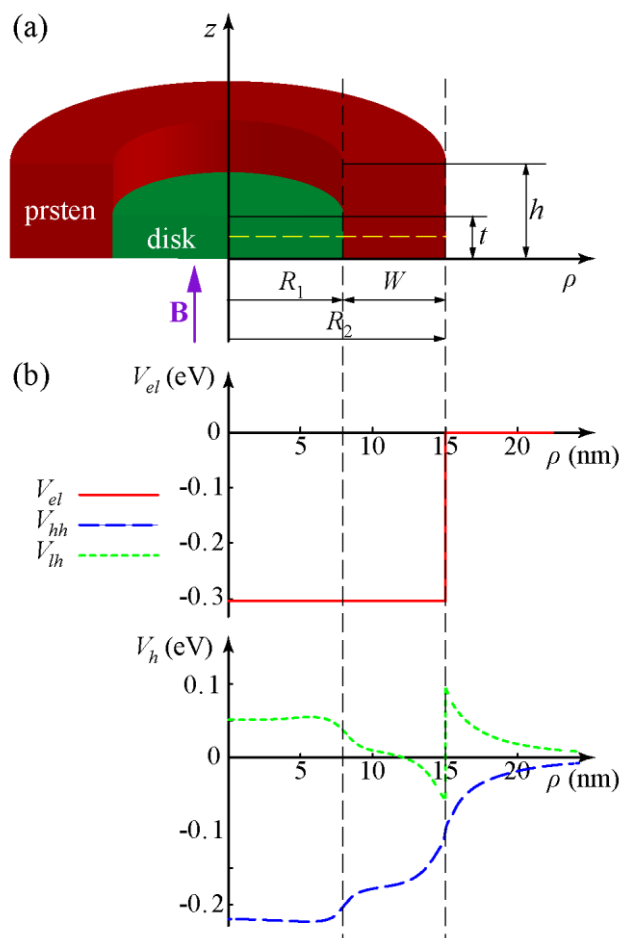
Ekscitoni u napregnutim nanotačkama sličnim nanoprstenovima

U prethodnoj glavi razmotrena je mogućnost nastanka ekscitonskih AB oscilacija u nenapregnutim strukturama sa dispozicijom zona I tipa. Ustanovljeno je da su amplitude oscilacija zanemarljive, što je posledica male polarizacije ekscitona, odnosno slične lokalizacije elektrona i šupljine. Naprezanje može dovesti do izmene lokalizacije, pretežno šupljina, što uzrokuje povećanje polarizacije ekscitona. Skorašnja teorijska (Tadić et al., 2010; Tadić et al., 2011; Arsoski et al., 2012; Arsoski et al., 2013a) i eksperimentalna (Teodoro et al., 2010; Ding et al., 2010) istraživanja ukazuju na postojanje ekscitonskih AB i optičkih ekscitonskih AB oscilacija u analiziranim strukturama. Posebno interesantan aspekt je postojanje sloja unutar nominalnog otvora prstena (Arsoski et al., 2012; Arsoski et al., 2013a), čiji će uticaj detaljno biti analiziran.

4.1. Uvod

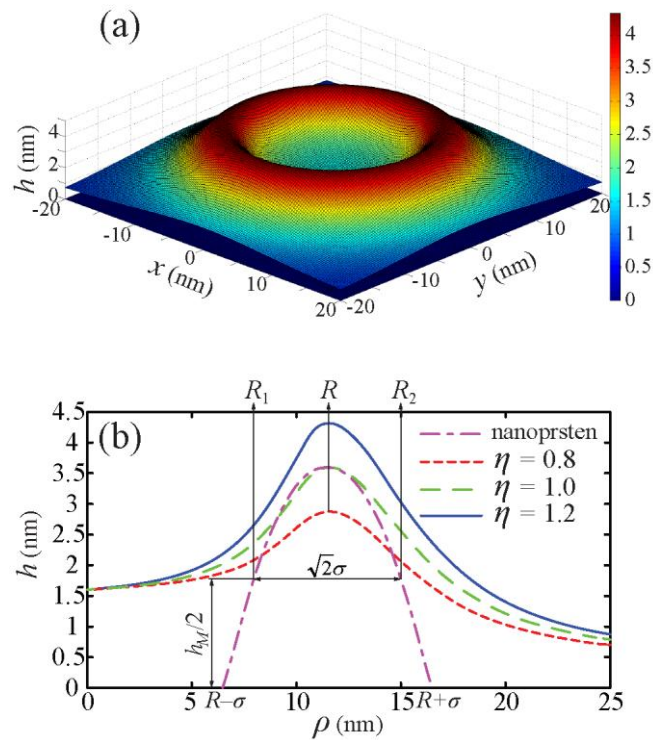
Pored metoda kapljične epitaksije kojom se formiraju nenapregnuti nanoprstenovi, značajnu ulogu ima Stranski-Krastanow (SK) tehnika koja se koristi za

samoasembliranje napregnutih nanostrukture. Kao što je detaljno opisano u poglavlju 1.2.2 tokom SK rasta usled naprezanja dolazi do redistribucije materijala iz početne kapljice u okolni materijal. Međutim, tanak sloj materijala obično ostaje unutar nominalnog otvora prstena, pa je finalna struktura jednostruko povezana. Finalni oblik nanotačke može se u idealizovanoj predstavi opisati kompozitnom strukturom koja se sastoji od *diska* na koji naleže *prsten*, kao na sl. 4.1(a). Efektivni potencijali za elektron i šupljinu dati su na sl. 4.1(b). S obzirom da oblik ove nanotačke podseća na šoljicu usvojićemo naziv *nanošoljica* (Čukaric et al., 2012; Arsoski et al., 2012).



Slika 4.1. (a) Skica poprečnog preseka nanošoljice sačinjene od diska (zelene boje) i prstena (boje rubina). Visina diska i šoljice su označene sa t i h , redom. (b) Grafik efektivnih potencijala u provodnoj zoni i zonama teških i lakih šupljina duž ρ pravca na visini $z = 1$ nm (žuta isprekidana linija na panelu (a)) u nanošoljici visine $h=4$ nm sa dnom debljine $t=2$ nm.

Kako bi se još detaljnije opisala morfologija nanotačke često se usvaja oblik nanostrukture u formi vulkana (Ding et al., 2010). U skorašnjim eksperimentalnim istraživanjima korišćene su analitičke funkcije za opis morfologije pojedinih nanoprstenova (Fomin et al., 2007). Primer kvantne tačke sa realističnim poprečnim presekom sličnim prstenu (engl. ringlike quantum dot–RLQD) dat je na sl. 4.2(a). Najviše izučavan i relevantan primer napregnutih nanotačaka prstenastog oblika su strukture na bazi (In,Ga)As/GaAs.



Slika 4.2. (a) Skica analizirane kvantne tačke slične prstenu (RLQD). (b) Visina RLQD h u funkciji radijusa ρ za tri vrednosti parametra η definisana jednačinom (4.1). Poprečni presek potpuno otvorenog kvantnog prstena poprečnog preseka definisanog izrazom (4.2) prikazan je isprekidanom crta-tačka linijom.

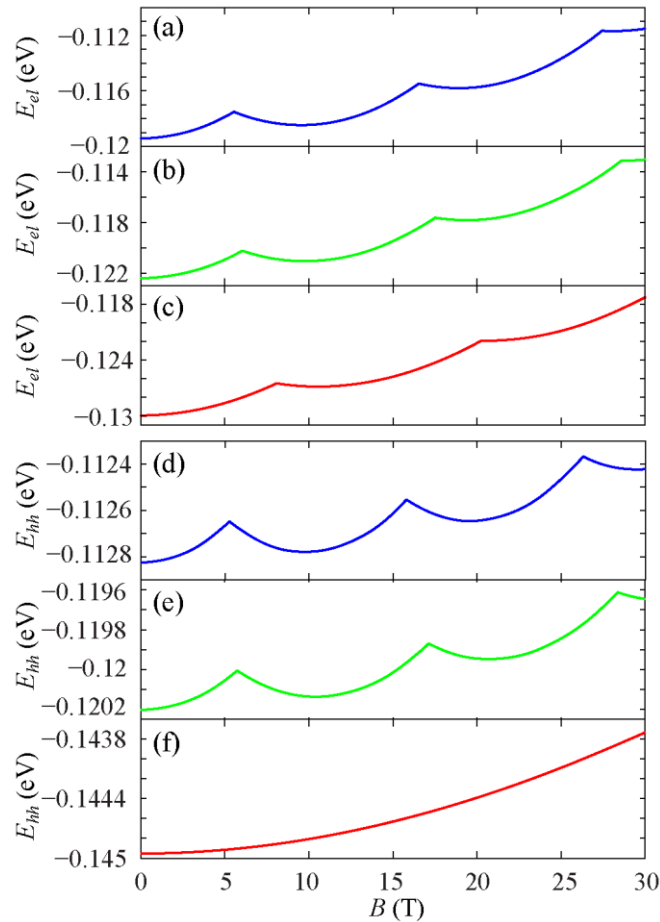
Osnovna karakteristika dvostruko povezanih sistema, kao što su nanoprstenovi, je AB efekat koji se manifestuje postojanjem preseka energija jednočestičnih stanja različitog orbitalnog momenta sa porastom magnetskog polja. Ovaj efekat ne postoji kod jednostruko povezanih nanotačaka (Lee et al., 2004). Kako su strukture dobijene SK metodom epitaksijalnog rasta u suštini jednostruko povezane, nije nedvosmisleno jasno da li je AB efekat prisutan u ovom slučaju. AB efekat se može pojaviti i u

stanjima neutralnog ekscitona u nanotačkama II tipa (Ribeiro et al., 2004). Međutim, ovaj efekat je tek u skorije vreme ustanovljen kod prstenova I tipa zbog slabog razdvajanja elektrona i šupljine u ekscitonu (Teodoro et al., 2010; Ding et al., 2010). U ovim radovima su nađene oscilacije osnovnog stanja neutralnog ekscitona reda dela meV, što odgovara skorijim teorijskim rezultatima (Tadić et al., 2011) za idealne prstenove bez unutrašnjeg sloja, tzv. *potpuno otvoreni prstenovi*. Ustanovljeno je da naprezanje presudno utiče na pojavu ekscitonskog AB efekta u nanoprstenovima I tipa, kao i da amplituda uočenih oscilacija umnogome zavisi od širine prstena. Prethodno analizirani nanoprstenovi su potpuno otvoreni, pa je za sveobuhvatnu analizu neophodno razmotriti kako unutrašnji sloj utiče na amplitudu AB oscilacija kod nanotačaka oblika šoljice i realističnih nanoprstenova. Skorašnja eksperimentalna i teorijska istraživanja pokazala su da kod realističnih nanoprstenova (Kleemans et al., 2007) dolazi do izmene lokalizacije elektrona i šupljine usled postojanja unutrašnjeg sloja. Ovo dovodi do pomeranja preseka jednočestičnih stanja, što utiče i na oscilacije ekscitonskih stanja (Kleemans et al., 2009a).

U ovoj glavi predstavljen je model ekscitonskih stanja samoasembliranih (In,Ga)As/GaAs nanotačaka u formi nanoprstena sa nepotpunim otvorom. Razmatrana je idealizovana geometrija tipa nanošoljice, prikazana na sl. 4.1(a), kao i realistična geometrija RLQD ilustrovana na sl. 4.2(a) za par karakterističnih poprečnih preseka datih na sl. 4.2(b). Takođe, rezultate dobijene za RLQD ćemo uporediti sa kvantnim prstenom sa potpunim otvorom, čiji je poprečni presek prikazan isprekidanom crtačkom linijom na sl. 4.2(b). U nastavku teksta oblast RLQD koja kvalitativno odgovara nanoprstenu sa potpunim otvorom nazivaćemo *greben*, dok ćemo centralni sloj, zbog kojeg su RLQD-ovi jednostruko povezane strukture, nazivati *krater*. Prostorna raspodela naprezanja opisana je kontinualno-mehaničkim modelom u aproksimaciji izotropne elastičnosti. Stanja elektrona su opisana jednozonskim modelom u sfernoj aproksimaciji. U slučaju nanošoljice šupljinska stanja su računata prema jednozonskom modelu, dok su za realne geometrije upoređeni rezultati prema jednozonskom i višezonskom modelu šupljinskih stanja. Ekscitonska stanja su dobijena metodom egzaktno dijagonalizacije u realnom i inverznom prostoru za nanošoljicu i realistične geometrije, redom, kao što je opisano u glavi 2.

4.2. Ekscitonska stanja u nanošoljici

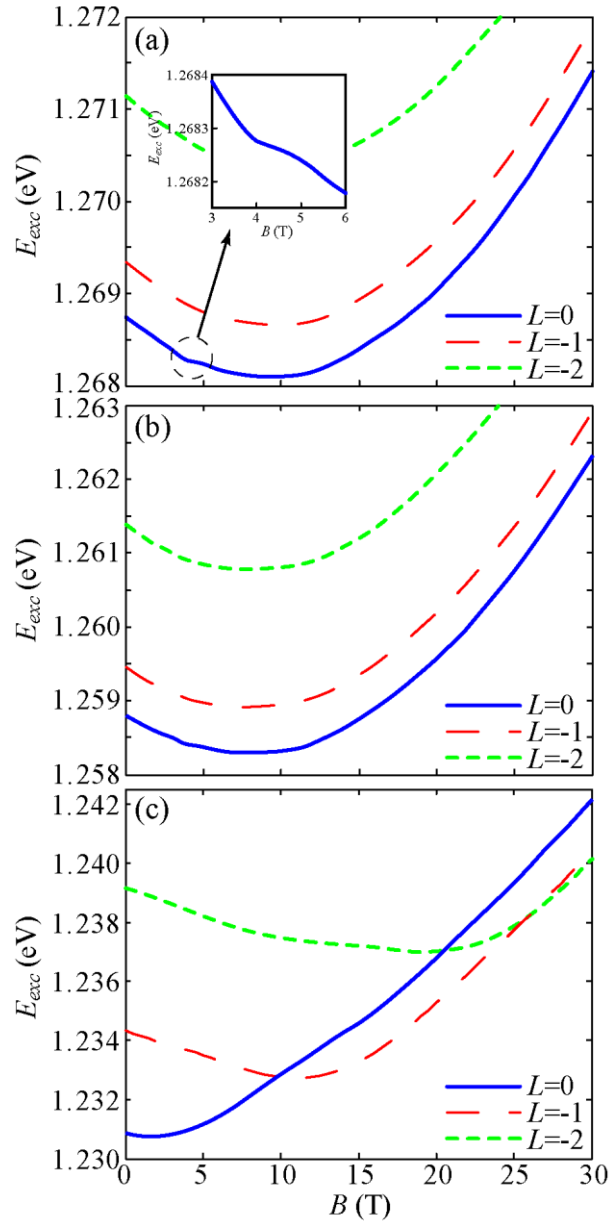
Razmatrana nanotačka je od $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$ okružena matricom od GaAs, što je približno sastav eksperimentalnih struktura (Teodoro et al., 2010). Geometrija analizirane nanošoljice data je na sl. 4.1(a). Ovde je $R_1=8$ nm radijus diska, t predstavlja debljinu diska, $R_2 = 15$ nm je spoljni radijus šoljice (prstena), i pretpostavljeno je da je visina šoljice (prstena) $h=4$ nm. Ekscitonska stanja su izračunata za tri vrednosti debljine diska, $t=0$ nm, 1 nm i 2 nm. Pretpostavlja se da je temperatura ambijenta $T=4,2$ K, što u većini prethodno citiranih radova odgovara standardnim eksperimentalnim uslovima. Referentne vrednosti konstanti rešetke, deformacionih potencijala, energetskih procepa i efektivnih masa elektrona u GaAs i InAs, kao i parametara zakrivljenja u (In,Ga)As leguri preuzete su iz rada (Vurgaftman et al., 2001). Sumarni prikaz ovih vrednosti dat je u Dodatku B. Vrednosti parametara ternarnih legura su računane prema izrazima datim u poglavlju 1.3. U sfernoj aproksimaciji šupljinskih stanja vrednost efektivne mase teške šupljine je usvojena kao u referenci (Ding et al., 2010). Usvojena je vrednost efektivnog Landéovog g -faktor $g_e^* = -0.44$, a Luttingerov parametar κ ima vrednost $\kappa = 1.72$ (Lawaetz, 1971), što odgovara masivnom GaAs. Pokazano je da se teorijske vrednosti Zeemanovog cepanja u (In,Ga)As nanotačkama dobijene za ovakve vrednosti parametara g_e^* i κ dobro poklapaju sa eksperimentom (Bayer et al., 1999). Smatramo da je relativna permitivnost ista u tački i matrici i ima vrednost kao u (In,Ga)As koja se dobija interpolacijom $\epsilon_r(x) = 15.1 - 2.87 \cdot x + 0.67 \cdot x^2$ (Ding et al., 2010). Pretpostavlja se da je razlika energetskih procepa kod (In,Ga)As/GaAs sistema raspodeljena između provodne i valentne zone u odnosu 82:18 (Arsoski et al., 2012). Referentni nivoi za efektivne potencijale su ekstremumi zona u materijalu matrice daleko od granica nanotačke, gde se smatra da je u potpunosti došlo do relaksacije. Rezultati su dati u opsegu B od 0 do 30 T.



Slika 4.3. Energije osnovnog stanja elektrona u provodnoj zoni nanošoljice u funkciji magnetskog polja za: (a) $t = 0$ nm, (b) $t = 1$ nm i (c) $t = 2$ nm. Energije osnovnog stanja teške šupljine za: (d) $t = 0$ nm, (e) $t = 1$ nm i (f) $t = 2$ nm.

Efektivni potencijali u provodnoj zoni, zoni teških i zoni lakih šupljina za nanošoljicu sa dnom debljine $t = 2$ nm prikazani su na sl. 4.1(b) u funkciji ρ u ravni na visini $z = 1$ nm (Arsoski et al., 2012). Prema modelu izotropne elastičnosti hidrostatski naprezanje je konstantno u nanotački, a ima nultu vrednost u matrici, te je i efektivni potencijal u provodnoj zoni tipa Heavisideove funkcije istog oblika kao bez naprezanja. Međutim, efektivna potencijalna jama za tešku šupljinu je dublja u disku nego u prstenu, što može dovesti do razdvajanja elektrona i teške šupljine u ekscitonu. Ovakva situacija je povoljna za pojavu AB oscilacija (Arsoski et al., 2012). Suprotno teškim, lake šupljine mogu biti lokalizovane van šoljice neposredno uz spoljnu radijalnu granicu, što je nađeno u teorijskoj analizi cilindričnih kvantnih tačaka (Tadić et al., 2002a). Različita prostorna lokalizacija teških i lakih šupljina smanjuje mešanje između

njih, što opravdava upotrebu jednozonskog modela elektronske strukture za šupljine (Ding et al., 2010). Prema obliku efektivnih potencijala na sl. 4.1(b) lako je zaključiti da je osnovno stanje teškošupljinski eksciton (Arsoski et al., 2012).



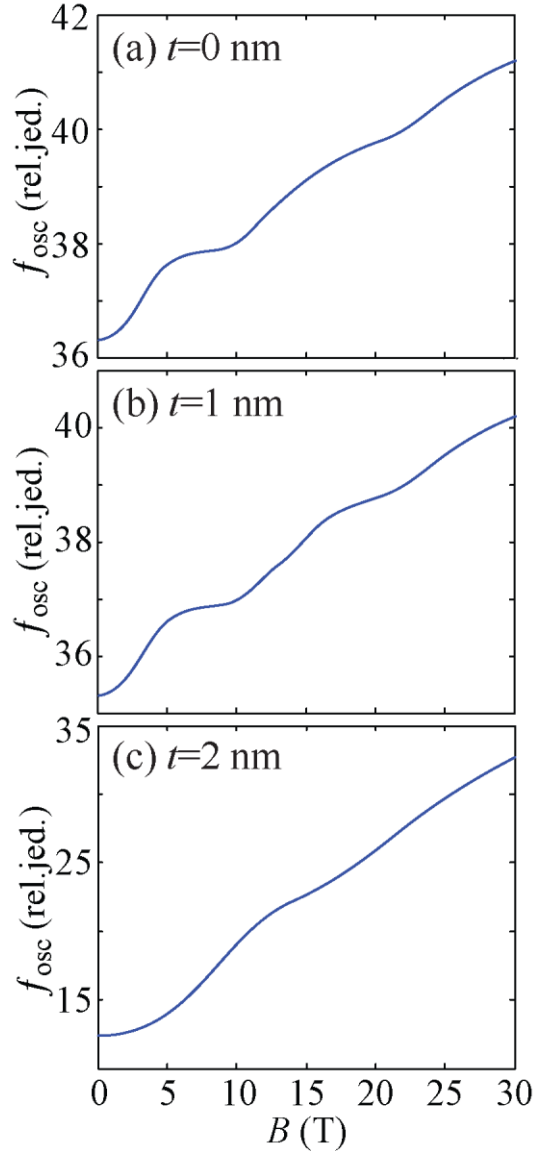
Slika 4.4. Zavisnosti energija najnižih ekscitonskih stanja $L=0$ (puna plava linija), $L=-1$ (isprekidana crvena linija) i $L=-2$ (tačkasta zelena linija) u nanošoljici za debljine dna: (a) $t = 0$ nm, (b) $t = 1$ nm i (c) $t = 2$ nm. Umetak na panelu (a) detaljno prikazuje osnovno stanje ekscitona oko 5 T.

Promena osnovnih stanja elektrona i teške šupljine sa porastom B prikazana su na gornjem i donjem panelu slike 4.3, redom. Porast debljine diska t od 0 nm do 2 nm uzrokuje mali pomak preseka stanja elektrona različitih orbitalnih momenata ka većim B , što se jasno vidi na sl. 4.3(a)-(c). Ipak, elektron ostaje pretežno lokalizovan u oblasti prstena, čak i za vrednost $t=2$ nm, što rezultuje u postojanju preseka orbitalnih momenata (čak i za ovako velike debljine unutrašnjeg sloja). Sa druge strane, pošto je efektivni potencijal za tešku šupljinu dublji u disku nego u prstenu, pomeraj preseka orbitalnih momenata je veliki (uporediti sl. 4.3(d)-(f)). Za $t=2$ nm, u posmatranom opsegu B teška šupljina je skoro u potpunosti lokalizovana u disku, te nema preseka orbitalnih momenata u osnovnom stanju na sl. 4.3(f) (Arsoski et al., 2012).

Razlike energija jednočestičnih stanja elektrona i šupljine, prikazanih na sl. 4.3, utiču na varijaciju ekscitonskih stanja $L=0$, -1 i -2 najniže energije, koje su prikazane na sl. 4.4(a), (b) i (c) za debljine $t=0$ nm, 1 nm, i 2 nm, redom. Za male debljine diska, tj. za $t=0$ nm i 1 nm, $L=0$ je orbitalni moment osnovnog stanja ekscitona u čitavom opsegu B . Stoga nisu ustanovljeni prelazi iz svetlih ($L=0$) u tamna ($L\neq 0$) stanja u osnovnom stanju ekscitona na sl. 4.4(a) i (b). Iako se pri povećanju debljine diska t sa 0 nm na 1 nm energija ekscitona za $B=0$ smanji za oko 10 meV, zavisnosti energija osnovnih stanja ekscitona u nanošoljici za $t=0$ nm i $t=1$ nm od magnetskog polja, prikazane na sl. 4.4 (a) i (b), redom, su kvalitativno iste. Slabo uočljiva oscilacija na sl. 4.4(a) i (b) na oko 5 T, posledica je antiukrštanja $1S$ i $2S$ stanja ekscitona (Tadić et al., 2011). Slična varijacija u energiji eksperimentalno je ustanovljena kod nanoprstenova slične veličine i sastava (Teodoro et al., 2010; Ding et al., 2010). Uočeno antiukrštanje je locirano na B koje je približno jednako vrednosti koja odgovara polovini fluksa kroz 1D prsten radijusa jednakog srednjem radijusu analiziranih 3D prstenova.

Za debljinu dna $t=2$ nm eksciton je značajno polarizovan, što je slučaj sličan nanotačkama II tipa. Za ovu vrednost debljine diska uočavaju se preseki ekscitonskih stanja različitih orbitalnih momenata na sl. 4.4(c). Prelaz u osnovnom stanju ekscitona sa $L=0$ na $L=-1$ uočava se na oko 10 T i pretežno je posledica preseka elektronskih $l=0$ i $l=-1$ stanja, dok se prelaz na $B=25$ T javlja u okolini preseka $l=-1$ i $l=-2$ stanja elektrona (videti sl. 4.3(c)). Za ekscitonsko stanje $L=0$ najniže energije oscilacije za $t=2$ nm nisu jasno uočljive (vidi sl. 4.4(c)), što je posledica velikog dijamagnetskog pomaka.

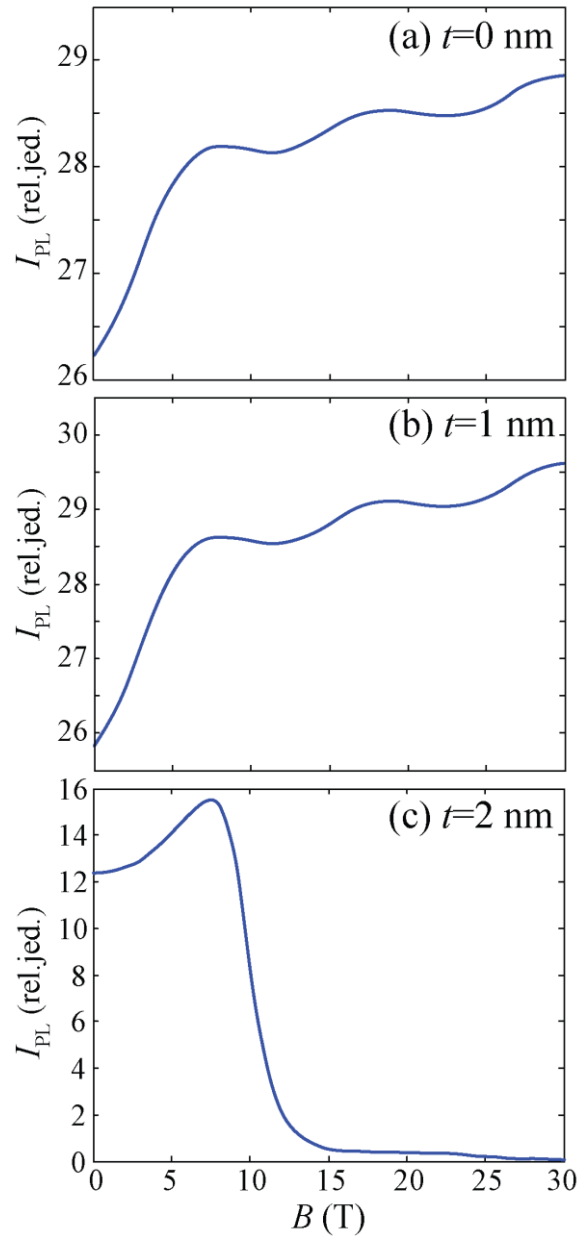
Ipak, jasno se uočava promena nagiba energije $L=0$ stanja sa porastom B što ukazuje na postojanje oscilacija čak i za ovako velike debljine dna nanošoljice.



Slika 4.5. Zavisnost jačine oscilatora najnižeg optički aktivnog ($L=0$) ekscitonskog stanja u funkciji B za debljine dna: (a) $t = 0$ nm, (b) $t = 1$ nm i (c) $t = 2$ nm.

Jačina oscilatora za radijativnu rekombinaciju ekscitona osciluje oko kvazi-linearne zavisnosti u funkciji magnetskog polja, što se jasno vidi na sl. 4.5. Slično oscilatorno ponašanje jačine oscilatora uočeno je i kod potpuno otvorenih kvantnih prstenova (Tadić et al., 2010). Postojanje oscilacija za $t=2$ nm ukazuje da čak i za ovako veliki odnos t/h , ekscitonske AB oscilacije postoje, mada je njihov efekat mali. Naime,

oscilacije su zapravo izazvane prisustvom neuniformnog naprezanja, koje dovodi do povećanja polarizacije ekscitona u nanošoljici.



Slika 4.6. Intenzitet fotoluminiscencije u funkciji magnetskog polja za debljine dna nanošoljice: (a) $t = 0$ nm, (b) $t = 1$ nm i (c) $t = 2$ nm.

Intenzitet fotoluminiscencije u funkciji magnetskog polja dat je na sl. 4.6 za razne vrednosti debljine dna nanošoljice. Fotoluminiscentni spektri nanoprstena ($t=0$ nm) i nanošoljice za $t=1$ nm su vrlo slični, kao što je prikazano na sl. 4.6(a) i (b). Za ove vrednosti t uočava se rast intenziteta fotoluminiscencije sa porastom magnetskog polja

uz umerene oscilacije. Međutim, pri debljini dna od $t=2$ nm dolazi do izraženog pada intenziteta sa porastom magnetskog polja iznad 10 T kada osnovno stanje ekscitona prikazano na sl. 4.6(c) postaje optički neaktivno.

4.3. Ekscitonska stanja u kvantnoj tački sličnoj prstenu

U prethodnom poglavlju analiziran je uticaj debljine centralnog sloja na energije najnižih ekscitonskih stanja. Međutim, razmatrani odnosi debljine unutrašnjeg sloja i visine prstena ne odgovaraju u potpunosti eksperimentalno dobijenim vrednostima (Offermans et al., 2005). Neki od eksperimentalno realizovanih ansambala nanoprstenova poseduju visok stepen aksijalne simetrije (Teodoro et al., 2010), što odgovara kompleksnosti našeg modela. Za tipične debljine pokrovnog sloja u dobijenom uzorku uočavaju se dve morfologije. Jedna odgovara koherentnim ostrvima, koja su predmet našeg izučavanja, dok druga predstavlja izolovana ostrva. Takođe, precizne dimenzije aksijalno simetričnih nanotačaka nisu poznate (Teodoro et al., 2010). Stoga ćemo u našoj analizi da koristimo poprečne preseke nanotačaka sličnih nanoprstenovima (RLQD) koje nemaju strogo aksijalnu simetriju, i to u ravnima $(1\bar{1}0)$, (100) , i (110) , kako je detaljno određeno u nedavnom eksperimentalnom radu (Fomin et al., 2007). Rotacijom ovih preseka oko pravca $[001]$ dobijaju se aksijalno simetrične nanotačke prikazane na sl. 4.2(a). Poprečni presek ovakve RLQD opisan je funkcijom (Offermans et al, 2005):

$$h(\rho) = \begin{cases} h_0 + \frac{[\eta \cdot h_M - h_0][1 - (\rho/R - 1)^2]}{[(\rho - R)/\gamma_0]^2 + 1}; & \rho \leq R \\ h_\infty + \frac{[\eta \cdot h_M - h_\infty]}{[(\rho - R)/\gamma_\infty]^2 + 1}; & \rho > R \end{cases} \quad (4.1)$$

Ovde je R radijalna koordinata vrha (*grebena*) nanotačke, h_0 je visina RLQD za $\rho=0$ (debljina unutrašnjeg sloja u centru tačke), h_∞ je debljina vlažećeg sloja, h_M je referentna vrednost visine grebena nanotačke, dok parametri γ_0 i γ_∞ definišu zakrivljenost unutrašnje i spoljne površi grebena, redom. Bezdimenzioni parametar η predstavlja odnos visine grebena i referentnog parametra visine h_M . Za vrednosti $\eta=0,8$, $\eta=1,0$, i

$\eta=1,2$ zavisnost $h(\rho)$ odgovara poprečnim presecima $(1\bar{1}0)$, (100) i (110) RLQD bez aksijalne simetrije (Offermans et al., 2005), redom. Vodeći se eksperimentalno dobijenim podacima (Fomin et al., 2007), usvojene vrednosti parametara za generisanje krivih na sl. 4.2(b) su: $R = 11,5$ nm, $h_0 = 1,6$ nm, $h_\infty = 0,4$ nm, $h_M = 3,6$ nm, $\gamma_0 = 3$ nm i $\gamma_\infty = 5$ nm.

Elektronska struktura realističnih jednostruko povezanih RLQD-ova upoređena je sa elektronskom strukturom potpuno otvorenih kvantnih prstenova čiji je poprečni presek sličan poprečnom preseku u (100) ravni (videti crta-tačka krivu na sl. 4.2(b)):

$$h(\rho) = \begin{cases} 0, & \rho < R - \sigma \\ h_M \left[1 - \left(\frac{\rho - R}{\sigma} \right)^2 \right], & R - \sigma \leq \rho \leq R + \sigma \\ 0, & R + \sigma < \rho \end{cases} \quad (4.2)$$

Parametar σ je proporcionalan širini na polovini visine. Da bismo približno prikazali (100) poprečni presek usvojena je vrednost $\sigma = 4,95$ nm, što daje z koordinate na polovini visine za $R_1 = 8$ nm i $R_2 = 15$ nm na unutrašnjoj i spoljašnjoj površi, redom. Ove dimenzije odgovaraju izboru unutrašnjeg i spoljašnjeg poluprečnika nanoprstena u radu (Tadić et al., 2011).

Za razliku od prethodnog poglavlja gde su vrednosti efektivnog g faktora za šupljinu izračunati na osnovu vrednosti κ (Tadić et al., 2011; Arsoski et al., 2012), usvojena je vrednost $g_h^* = -3,56$ (Arsoski et al., 2013a), koja daje efektivni g faktor ekscitona $g_{exc}^* = -4$. Negativne vrednosti efektivnog g faktora šupljine i ekscitona su saglasni sa eksperimentalno dobijenim vrednostima za $(\text{In,Ga})\text{As}/\text{GaAs}$ nanotačke (Nakaoka et al., 2004). Ova merenja su izvršena za nanotačke znatno veće visine (reda 7 nm) gde su dobijene vrednosti $g_{exc}^* = -2,53$ (Nakaoka et al., 2004). Međutim, skorija eksperimentalna studija InAs tačka u InP matrici (Kleemans et al., 2009b), što je nanostruktura sličnih karakteristika kao razmatrani sistem, pokazala je da g_{exc}^* i g_h^* imaju negativnije vrednosti ukoliko je nanotačka manje visine. Za InAs/InP nanotačke uporedive visine i lateralnih dimenzija kao $(\text{In,Ga})\text{As}/\text{GaAs}$ tačka koja je analizirana u ovom poglavlju dobijene su vrednosti oko -2 . U razmotrenom radu (Kleemans et al., 2009b) razdvajanje energija ekscitonskih stanja usled Zeemanovog efekta ima dvostruko veću

vrednost ($\Delta E_{exc} = 2g_{exc}^* \mu_B B$) od one koja je ovde usvojena. Stoga, njihova vrednost g faktora ekscitona -2 odgovara $g_{exc}^* = -4$ u našem modelu. Kako za razmatrani sistem ne postoje eksperimentalni podaci, ova vrednost g_{exc}^* usvojena je kao dobra procena g faktora ekscitona za nanotačke analizirane u ovom poglavlju. Napomenimo da su negativne vrednosti za InAs tačke u GaAs matrici dobijene teorijski kada se mešanje u valentnoj zoni uključi u model (Pryor i Flatté, 2006). Vrednosti parametara zakrivljenja (Vurgaftman et al., 2001) za Luttingerove parametre se dobro slažu sa onim koje se ekstrahuju iz rezultata eksperimentalnih merenja masa šupljine (Tanaka et al., 1999). Stoga su u višezonskom modelu Luttingerovi parametri računati prema izvedenim nelinearnim interpolacionim relacijama koje uračunavaju zakrivljenje zona:

$$\begin{aligned} \gamma_1^{(\text{In,Ga})\text{As}} = & \frac{1}{2} \left(\frac{1-x}{\gamma_1^{\text{GaAs}} - 2\gamma_2^{\text{GaAs}}} + \frac{x}{\gamma_1^{\text{InAs}} - 2\gamma_2^{\text{InAs}}} + 0.145x(1-x) \right)^{-1} \\ & + \frac{1}{2} \left(\frac{1-x}{\gamma_1^{\text{GaAs}} + 2\gamma_2^{\text{GaAs}}} + \frac{x}{\gamma_1^{\text{InAs}} + 2\gamma_2^{\text{InAs}}} - 0.0202x(1-x) \right)^{-1}, \end{aligned} \quad (4.3a)$$

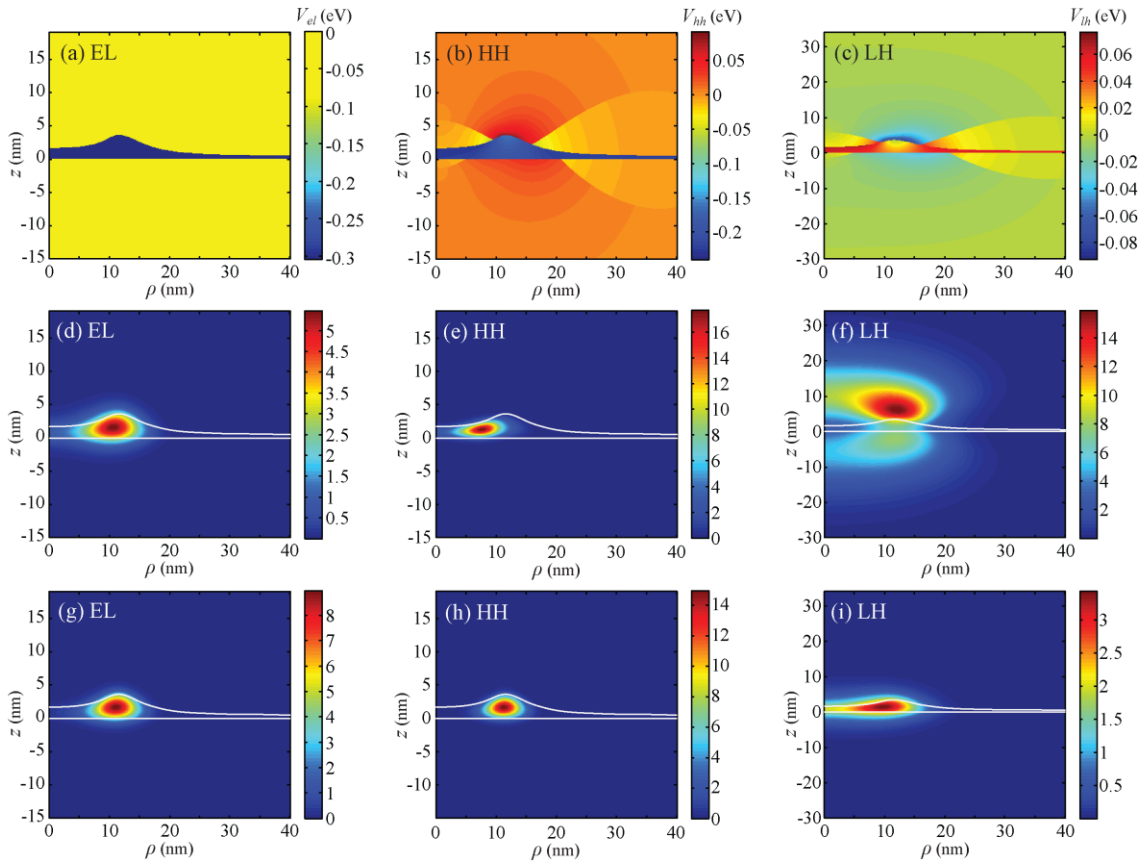
$$\begin{aligned} \gamma_2^{(\text{In,Ga})\text{As}} = & -\frac{1}{4} \left(\frac{1-x}{\gamma_1^{\text{GaAs}} - 2\gamma_2^{\text{GaAs}}} + \frac{x}{\gamma_1^{\text{InAs}} - 2\gamma_2^{\text{InAs}}} + 0.145x(1-x) \right)^{-1} \\ & + \frac{1}{4} \left(\frac{1-x}{\gamma_1^{\text{GaAs}} + 2\gamma_2^{\text{GaAs}}} + \frac{x}{\gamma_1^{\text{InAs}} + 2\gamma_2^{\text{InAs}}} - 0.0202x(1-x) \right)^{-1}, \end{aligned} \quad (4.3b)$$

$$\begin{aligned} \gamma_3^{(\text{In,Ga})\text{As}} = & \gamma_2^{(\text{In,Ga})\text{As}} + (\gamma_3^{\text{GaAs}} - \gamma_2^{\text{GaAs}})(1-x) \\ & + (\gamma_3^{\text{InAs}} - \gamma_2^{\text{InAs}})x - 0.481x(1-x). \end{aligned} \quad (4.3c)$$

Vrednosti za $\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}$ dobijene na osnovu ovih interpolacionih formula se poklapaju sa rezultatima dobijenim na osnovu eksperimenta (Alavi et al., 1980). Sve ostale vrednosti parametara uzete su kao i u prethodnom poglavlju u kome su prikazani rezultati za nanošoljicu.

Efektivni potencijali ivica zona u provodnoj zoni, hh i lh zonama analizirane In(Ga)As/GaAs RLQD za $\eta = 1$ prikazani su na sl. 4.7(a)-(c). Ovi dijagrami su generisani korišćenjem jednačina (2.2.1) i (2.2.5) i rezultata za raspodelu naprezanja. Kvalitativna analiza primene modela izotropne elastičnosti na RLQD-ove data je u Dodatku C. U usvojenom modelu hidrostatičko naprezanje je konstantno u tački i nula u matrici, pa je efektivni potencijal za elektrone prema jednačini (2.2.1) konstantan u oba

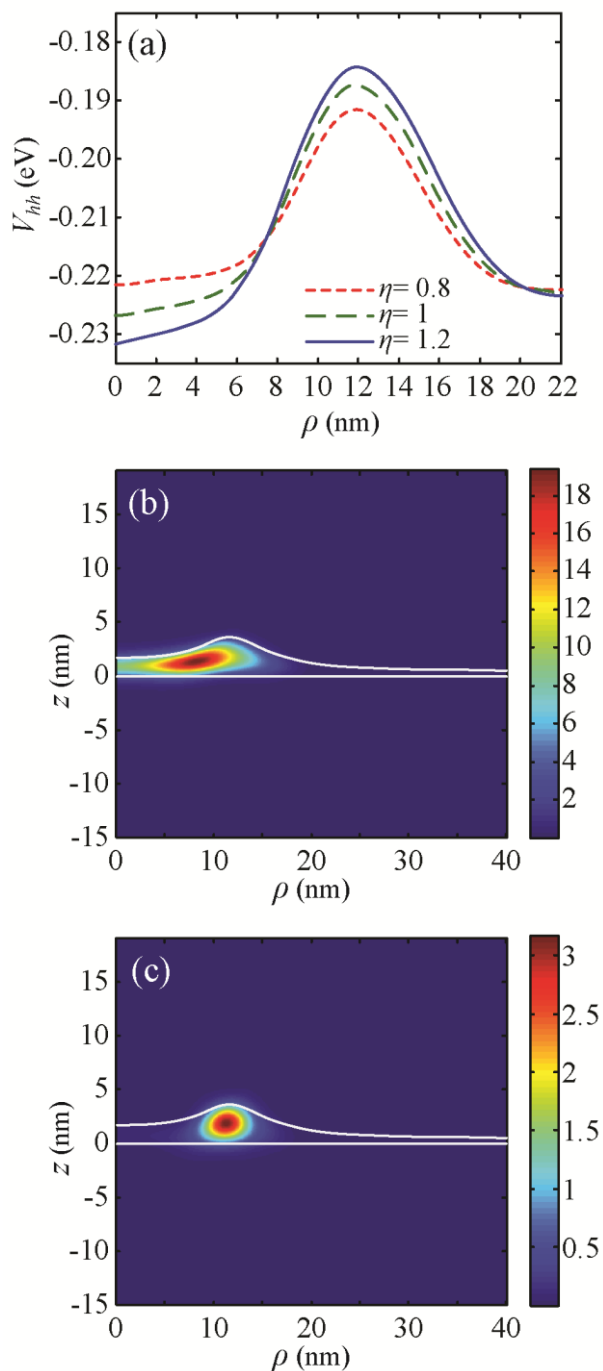
domena, što se može uočiti na sl. 4.7(a). Blizu vrha grebena tačke lateralna dimenzija je značajno manja od vertikalne. Stoga je relaksacija rešetke pretežno u lateralnoj ravni, dok blizu dna RLQD ne postoji favorizovan pravac relaksacije. Posledica je da je konfinirajući efektivni potencijal ivica zona za teške šupljine plići na vrhu grebena nego na dnu RLQD (videti sl. 4.7(b)). Sa druge strane, usled naprezanja visina barijere za lake šupljine u tački se povećava, dok se jama za lake šupljine formira van RLQD (videti sl. 4.7(c)) (Arsoski et al., 2013a). Kako je konfiniranje različito za teške i lake šupljine, može se pretpostaviti da su lokalizovani u različitim oblastima RLQD. Ovo ide u prilog pretpostavci da su efekti mešanja mali, što je preduslov za primenu jednozonske aproksimacije pri proračunu jednočestičnih stanja (Ding et al., 2010).



Slika 4.7. (Gornji panel) Konturni dijagrami potencijala ivica zona u In(Ga)As/GaAs RLQD-u za $\eta=1$: (a) $V_{eff,el}$, (b) $V_{vb,hh}$ i (c) $V_{vb,lh}$. (Srednji panel) Gustine verovatnoće osnovnog stanja čestice koje odgovaraju potencijalima ivica zona datim na panelu gore za $B=0$: (d) elektron, (e) tešku šupljinu i (f) laku šupljinu. (Donji panel) Gustine verovatnoće osnovnog stanja čestice za $B=0$, ali kada se naprezanje zanemari za: (g) elektron, (h) tešku šupljinu i (i) laku šupljinu.

Pored prikaza efektivnih potencijala ivica zona, na sl. 4.7 prikazane su gustine verovatnoće osnovnog stanja elektrona, teške šupljine i lake šupljine za $\eta=1$ i $B=0$. Srednji panel (sl. 4.7(d-f)) prikazuje stanja elektrona i šupljina u napregnutoj RLQD, dok su na panelu dole (sl. 4.7(g-i)) data stanja kada je naprezanje zanemareno. Prisustvo naprezanja ne utiče kvalitativno na lokalizaciju elektrona, što se može zaključiti poređenjem sl. 4.7(d) i (g). Elektron je pretežno konfiniran u grebenu prstenastog oblika, što je posledica razlike u visini grebena i kratera RLQD. Sa druge strane, naprezanje dovodi do formiranja dublje potencijalne jame za teške šupljine u krateru u odnosu na greben, te su stanja teške šupljine konfinirana bliže krateru od stanja elektrona (uporedi sl. 4.7 (d) i (e)). Drugim rečima, gustina verovatnoće teške šupljine je delokalizovana ka centru napregnute RLQD. Bez naprezanja, teška šupljina je, slično elektronu, pretežno lokalizovana u grebenu (uporedi sl. 4.7(g) i (h)). Efektivni potencijal ivice zone lakih šupljina, dat na sl. 4.7(c), favorizuje lokalizaciju neposredno iznad i ispod tačke, što se može uočiti na sl. 4.7(f). Da ne postoji naprezanje, laka šupljina bi pretežno bila lokalizovana u oblasti tačke, što je prikazano na sl. 4.7(i). Drastična razlika u lokalizaciji lake šupljine kod napregnutih i nenapregnutih RLQD-ova ukazuje na mogućnost postojanja razlike u proračunu stanja kada se mešanje uključi u model.

Promena efektivnog potencijala ivica zona za teške šupljine sa promenom visine grebena tačke je ilustrovana na sl. 4.8(a) za $\eta=0,8$, $\eta=1,0$ i $\eta=1,2$. Ovde je prikazana zavisnost V_{hh} od ρ na visini $z=0,8$ nm, što predstavlja polovinu visine centralnog sloja (kratera). Očigledno je da je jama za teške šupljine dublja u blizini centra tačke nego u grebenu. Takođe, evidentno je da sa smanjenjem visine grebena potencijalna jama u krateru postaje plića, a barijera u grebenu postaje niža. Slike 4.8(b) i (c) prikazuju gustine verovatnoće za osnovno stanje šupljine ($f_z = 3/2$) za slučaj $\eta=1,0$ kada je naprezanje uračunato i kada se zanemari. Očigledno je da naprezanje ima ključnu ulogu u relokalizaciji šupljine prema centru tačke.



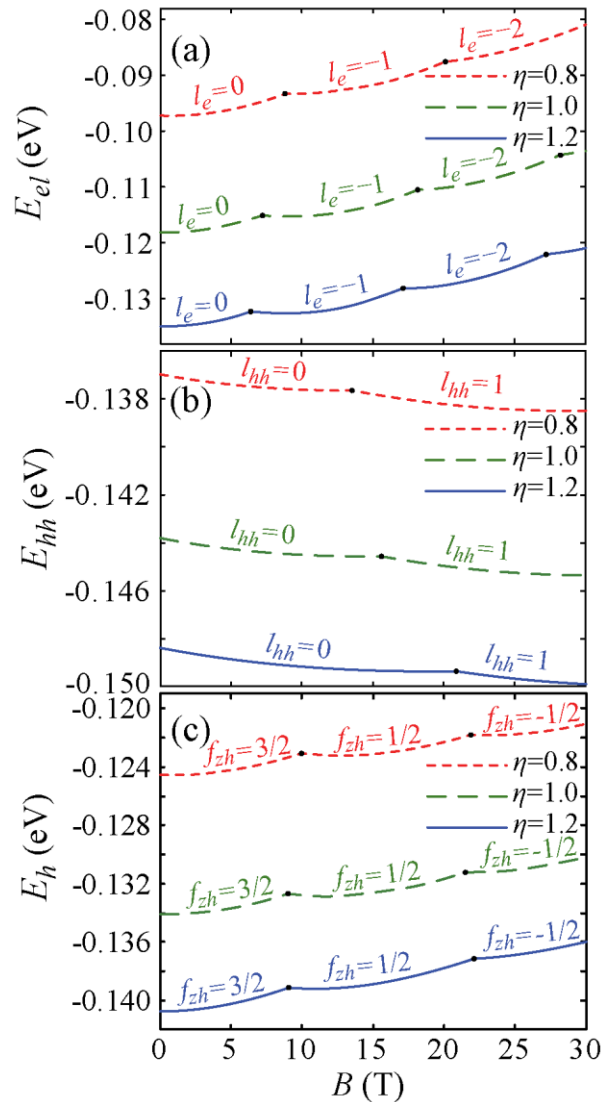
Slika 4.8. (a) Dijagram zavisnosti V_{hh} od ρ na visini $z=0,8$ nm, (b) gustina verovatnoće osnovnog stanja šupljine kada se uračuna mešanje i (c) gustina verovatnoće osnovnog stanja šupljine kada se uračuna mešanje, ali se zanemare efekti naprezanja.

Na osnovu prikaza efektivnih potencijala ivica zona i gustina verovatnoće, datih na sl. 4.7 i sl. 4.8, mogu se doneti zaključci o izmeni lokalizacije elektrona i šupljine sa promenom visine grebena. Smanjenje visine grebena dovodi do malog pomeraja

lokalizacije elektrona prema centru tačke, što je posledica smanjenja zapremine grebena. Ovaj efekat je prisutan i kod šupljine, ali je njegov uticaj znatno manji od efekta koji daje promena potencijala sa smanjenjem visine grebena usled specifične preraspodele naprezanja u sistemu, što je i prikazano na sl. 4.8(a). Naime, pri smanjenju visine grebena dolazi do smanjenja dubine jame u krateru i visine barijere na dnu jame u oblasti grebena što favorizuje relokalizaciju šupljine prema grebenu (Arsoski et al., 2013a). Možemo zaključiti da kod RLQD-ova eksperimentalnih dimenzija povećanje visine grebena dovodi do razdvajanja elektrona i šupljine, što stvara povoljne preduslove za povećanje ekscitonskih AB oscilacija (Arsoski et al., 2013a). Kod nanošoljice, razmotrene u glavi 4.2, uočena je nešto drugačija lokalizacija (Arsoski et al., 2012). Naime, greben (prsten) ima konstantnu širinu koja je značajno veća od visine. Što je visina grebena manja to je favorizovaniji pravac relaksacije z pravac, a efektivni potencijal oko sredine prstena postaje dublji. Ipak, najdublji efektivni potencijal je u disku gde je relaksacija skoro u potpunosti u z pravcu (videti sl. 4.1(b)). Na osnovu ovoga može se pretpostaviti da će se dobiti sličan efekat. U glavi 4.2 analizirano je kako povećanje debljine dna šoljice utiče na lokalizaciju šupljine. Ustanovljeno je da pri određenoj debljini dna nanošoljice dolazi do relokalizacije šupljine u oblast dubljeg potencijala, tj. diska (Arsoski et al., 2012). Za visine nanošoljice (prstena) jednake visinama grebena RLQD-ova debljina dna nanošoljice jednaka h_0 bi bila dovoljna da raspodela naprezanja u nanošoljici bude takva da je šupljina, skoro u potpunosti, lokalizovana u oblasti dna nanošoljice. Ovo je značajno različita lokalizacija šupljine od one koja je izračunata za RLQD-ove (vidi sl. 4.7), te možemo zaključiti da je razmatranje realističnih oblika neophodno pri analizi optičkih efekata u napregnutim nanotačkama I tipa.

Energije jednočestičnih stanja elektrona i šupljine u funkciji magnetskog polja za $\eta=0,8$, $\eta=1,0$, i $\eta=1,2$ date su na sl. 4.9. Za $\eta=1,2$ greben je dovoljno visok tako da su elektroni pretežno lokalizovani u grebenu. U ovom slučaju energije stanja različitih orbitalnih momenata se ukrštaju na $B_1=6,44$ T, $B_2=17,2$ T i $B_3=27,3$ T. Prelazi između elektronskih stanja različitog l u osnovnom stanju 1D prstena dešavaju se za vrednosti magnetske indukcije koje odgovaraju neparnom umnošku polovine kvanta fluksa kroz prsten. Stoga je položaj preseka dat sa $B_i/B_1=(2i-1)$, $i=2,3,\dots$, gde je B_1 vrednost polja za koju dolazi do prvog prelaza. Uočava se da je ovo približno ispunjeno za $\eta=1,2$, dok

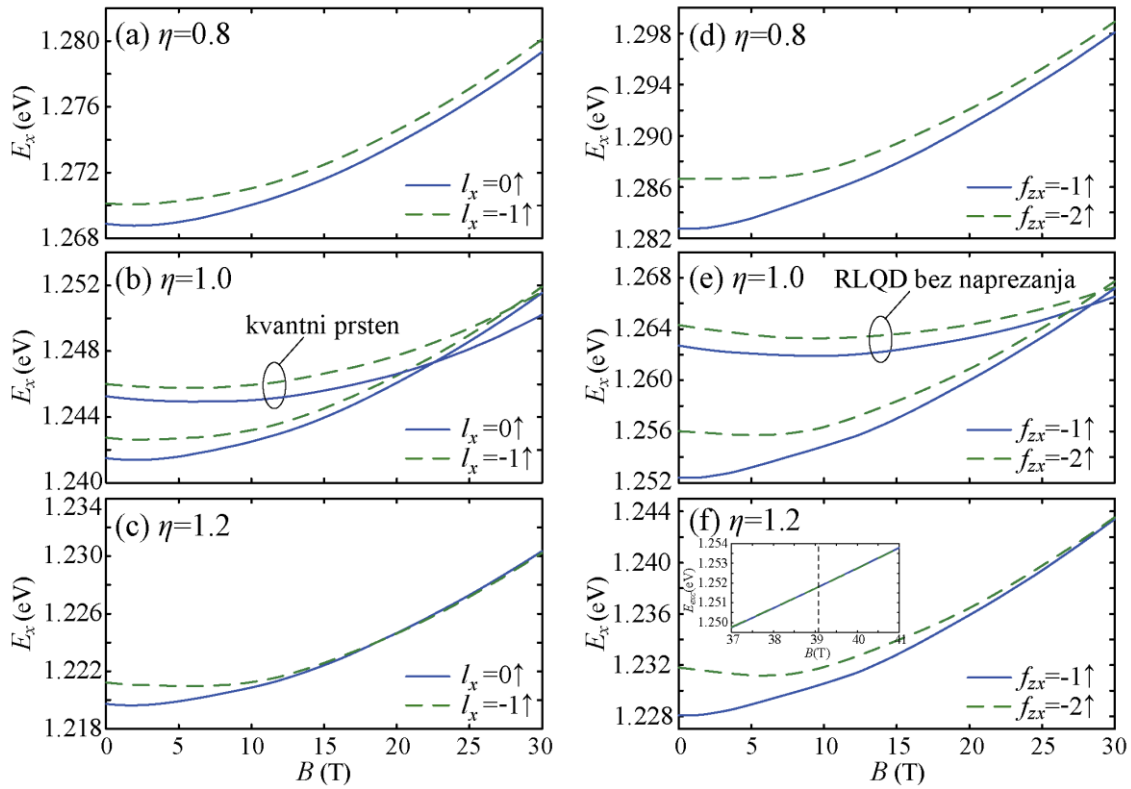
za manje vrednosti η dolazi do većeg odstupanja u odnosu na slučaj 1D prstena. Ovo je posledica porasta lokalizacije u krateru usled smanjenja visine grebena. Pored toga, dolazi do pomaka prelaza orbitalnih momenata elektrona ka većim vrednostima B sa smanjenjem visine grebena (Arsoski et al., 2013a).



Slika 4.9. Energija osnovnog stanja: (a) elektrona, (b) teške šupljine u jednozonskoj aproksimaciji i (c) šupljine kada je uračunato mešanje zona prema Luttinger-Kohn-ovom modelu. Tačkasta crvena linija označava slučaj $\eta=0,8$, isprekidanom zelenom linijom su prikazana stanja za $\eta=1,0$ i puna plava linija opisuje slučaj $\eta=1,2$. Prelazi između stanja različitog orbitalnog momenta su označeni crnim tačkama, a ugaoni (orbitalni) moment svakog stanja je eksplicitno naznačen na krivolinijskim isečcima.

Efektivni potencijal ivica zona za hh stanja je dublji u krateru nego u grebenu (vidi sl. 4.8(a)) pa je šupljina lokalizovana bliže centru nanotačke od elektrona, što se vidi sa sl. 4.7(e). Stoga, do prvog prelaza orbitalnog momenta za $\eta = 1,2$ dolazi na značajno većoj vrednosti B u poređenju sa elektronom (uporediti slike sl. 4.9(a) i (b)). Za niže grebene, što su slučajevi $\eta=0,8$ i $\eta=1,0$, šupljina je konfinirana u manjoj zapremini. Pored toga, efektivni potencijal barijere u grebenu se smanjuje sa smanjenjem visine grebena, što dovodi do povećanja srednjeg radijusa šupljine i konačno do pomaka prelaza orbitalnih momenata ka manjim vrednostima B sa smanjenjem η .

Može se primetiti da se energija osnovnog stanja šupljine smanjuje u odnosu na vrednost za $B=0$, što je posledica velikog efektivnog g faktora za šupljinu u jednozonskom modelu. Mešanje šupljinskih stanja usled vandijagonalnih elemenata u kinetičkom delu hamiltonijana i delu hamiltonijana naprezanja deluje na različite načine na jednočestična stanja. Najpre, kinetički deo hamiltonijana deluje suprotno od Zeemanovog efekta. Za veće vrednosti B ova zavisnost je približno linearna i posledica je dominantnog uticaja \hat{S} člana. Ovaj efekat je toliko intenzivan da je osnovno stanje šupljine za male vrednosti B $f_{zh}=3/2$ stanje, što je u suprotnosti sa rezultatom jednozonskog modela u kojem bi efektivni g faktor šupljine bio pozitivan i jednak $g_h^* = 6\kappa$. Kvalitativno poklapanje jednozonskog i višezonskog modela može se postići usvajanjem negativne vrednosti efektivnog g faktora šupljine, čime se postiže saglasnost sa eksperimentalno dobijenim vrednostima g faktora ekscitona (Nakaoka et al., 2004). U hamiltonijanu naprezanja dominantan je \hat{R} član koji ima uticaj na dijamagnetski koeficijent, što se može zaključiti na osnovu prelaza orbitalnih momenata osnovnog stanja prikazanih na sl. 4.9(c). Ovaj trend je sličan kao i za stanja elektrona, tako da su dijagrami na sl. 4.9(a) i (c) kvalitativno slični. S druge strane, poređenje sl. 4.9(b) i (c) ukazuje na kvalitativne razlike zavisnosti energija jednočestičnih stanja od magnetskog polja prema jednozonskom i višezonskom modelu. Očigledno je da mešanje pojačava efekat AB oscilacija osnovnog stanja šupljine. Takođe, zbog prisutnog mešanja, ne može se uočiti jednostavna veza izmene lokalizacije šupljine usled efektivnih potencijala ivica zona datih na sl. 4.8(a) i energija jednočestičnih stanja šupljine sa povećanjem visine RLQD.



Slika 4.10. Ekscitonska stanja najniže energije za date vrednosti orbitalnih momenata spin gore elektrona u funkciji magnetskog polja. Optički aktivna stanja $l_x=0$ ($f_{zx} = -1$) prikazana su punom **plavom** linijom, dok su optički neaktivna stanja $l_x=-1$ ($f_{zx} = -2$) prikazana isprekidanom **zelenom** linijom. (Levi panel) Energije hh ekscitona za: (a) $\eta=0,8$, (b) $\eta=1,0$ (stanja najniže energije za potpuno otvoreni prsten umanjena za 45 meV su takođe prikazana) i (c) $\eta=1,2$. (Desni panel) Energije ekscitona prema višezonskom modelu za: (d) $\eta=0,8$, (e) $\eta=1,0$ (stanja najniže energije za RLQD bez uračunatog napreznja uvećana za 125 meV su takođe prikazana) i (f) $\eta=1,2$ (umetak prikazuje opseg B u kojem dolazi do preseka stanja najniže energije).

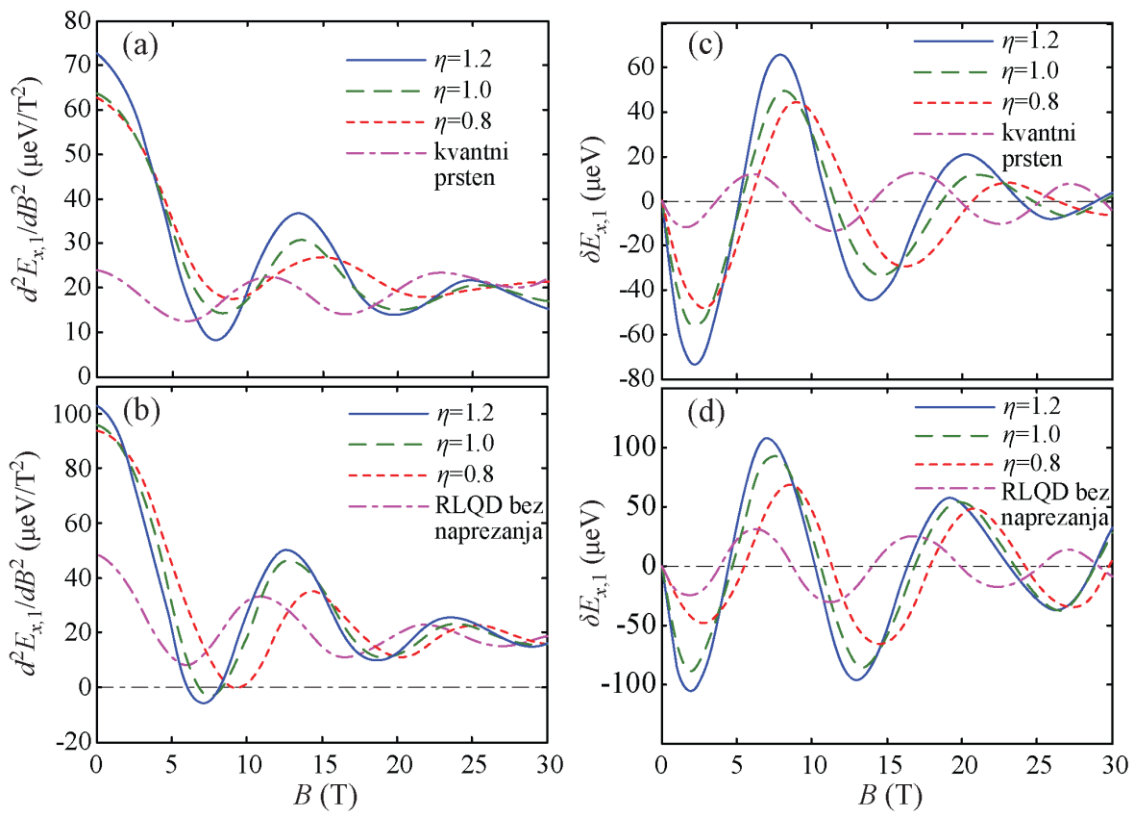
Slika 4.10 prikazuje energije najnižih stanja ekscitona u funkciji magnetskog polja. Energije hh ekscitona dobijene pomoću jednozonske aproksimacije date su na levom panelu, dok su rezultati prema višezonskom modelu prikazani na desnom panelu. Primetne su male oscilacije oko kvaziparabolične zavisnosti od B , koje postaju uočljivije sa porastom visine grebena. Ovo je u saglasnosti sa eksperimentalno dobijenim rezultatima (Ding et al., 2010; Teodoro et al., 2010) i teorijskim proračunima za potpuno otvorene kvantne prstenove (Arsoski et al., 2012; Tadić et al., 2011). Za

vrednosti $\eta=0,8$ i $\eta=1,0$, osnovno stanje ekscitona, bilo hh ekscitona ili višezonskog, je optički aktivno u celom opsegu B od 0 do 30 T. Sa druge strane, za $\eta=1,2$ optički aktivno $l_x=0$ stanje i optički neaktivno $l_x=-1$ stanje hh ekscitona se ukrštaju na 19,1 T, kao što je prikazano na sl. 4.10(c). Ovo ukrštanje je posledica smanjenja Coulombove interakcije između elektrona i šupljine u ekscitonu usled povećanja polarizacije. Porast polarizacije ekscitona sa porastom visine grebena je prethodno objašnjen na sl. 4.7 i sl. 4.8. Međutim, kod višezonskog ekscitona do ovog ukrštanja ne dolazi u razmatranom opsegu, što je posledica uključenja mešanja u model. Naime, kod jednozonskog modela postoje očigledne razlike prelaza orbitalnih momenata elektrona i šupljine (uporedi sl. 4.9(a) i (b)), a kako je $l_x=l_e+l_h$, postoji mogućnost prelaza orbitalnih momenata ekscitona sa porastom B .^{*} Sa druge strane, u osnovnom stanju prelazi orbitalnih momenata šupljine prema višezonskom modelu su slični prelazima orbitalnih momenata elektrona (uporedi sl. 4.9(a) i (c)). Stoga se u razmatranom opsegu B na sl. 4.10(f) ne uočava prelaz orbitalnih momenata. Ipak, u razmatranom opsegu B postoji očigledno smanjenje razlike u energijama najnižeg optički aktivnog i neaktivnog stanja, te do ukrštanja stanja različitog orbitalnog momenta dolazi na $B=39,1$ T. Međutim, ova stanja imaju vrlo bliske energije (skoro kao dubleti), što je prikazano na umetku na sl. 4.10(f). Proračunom je ustanovljeno da razlika u energiji ova dva stanja ne prelazi vrednost 0,16 meV u opsegu od 30 do 50 T.

Razmatrani RLQD za $\eta=1$ je upoređen sa kvantnim prstenom sa potpunim otvorom, čiji je poprečni presek dat na sl. 4.2(b) isprekidanom crta-tačka linijom. Radi boljeg poređenja na sl. 4.10(b) prikazane su energije $l_x=0$ i $l_x=-1$ stanja hh ekscitona, čija je energija umanjena za 45 meV. Uočava se da je u celom razmatranom opsegu B osnovno stanje ekscitona optički aktivno ($l_x=0$), što je u saglasnosti sa prethodnim teorijskim rezultatima dobijenim za nanoprstenove sa potpunim otvorom pravougaonog poprečnog preseka (Tadić et al., 2011). Očigledno je da razlika energija najnižeg optički neaktivnog i optički aktivnog stanja raste sa porastom B pa, za razliku od RLQD, do prelaza orbitalnih momenata neće doći čak ni za mnogo veće vrednosti magnetskog polja. Takođe smo na sl. 4.10(e) uporedili stanja ekscitona prema višezonskom modelu za RLQD u slučaju kada se zanemare efekti naprezanja, sa slučajem kada je naprezanje

^{*} Ukoliko ne bi uzeli u obzir Coulombovu interakciju orbitalni moment osnovnog stanja ekscitona bi se menjao pri promeni orbitalnog momenta bilo samo elektrona bilo samo šupljine.

uzeto u obzir. Pri tome su prikazane energije stanja $f_{zx} = -1$ i $f_{zx} = -2$ povećane za 125 meV, kako bi se promene energija ovih stanja za slučaj napregnutog i nenapregnutog RLQD našle u približno istom opsegu energija. Očigledno je da, kao i u slučaju kvantnog prstena sa potpunim otvorom, u slučaju RLQD kada naprezanje nije uračunato postoje značajno manje oscilacije osnovnog stanja ekscitona nego kod napregnutog RLQD. Takođe je kod nenapregnutog RLQD uočen znatno manji dijamagnetski pomak nego kod napregnutog, što je posledica manje srednje kvadratne vrednosti rastojanja elektrona i šupljine u ravni strukture (Godoy et al., 2006).



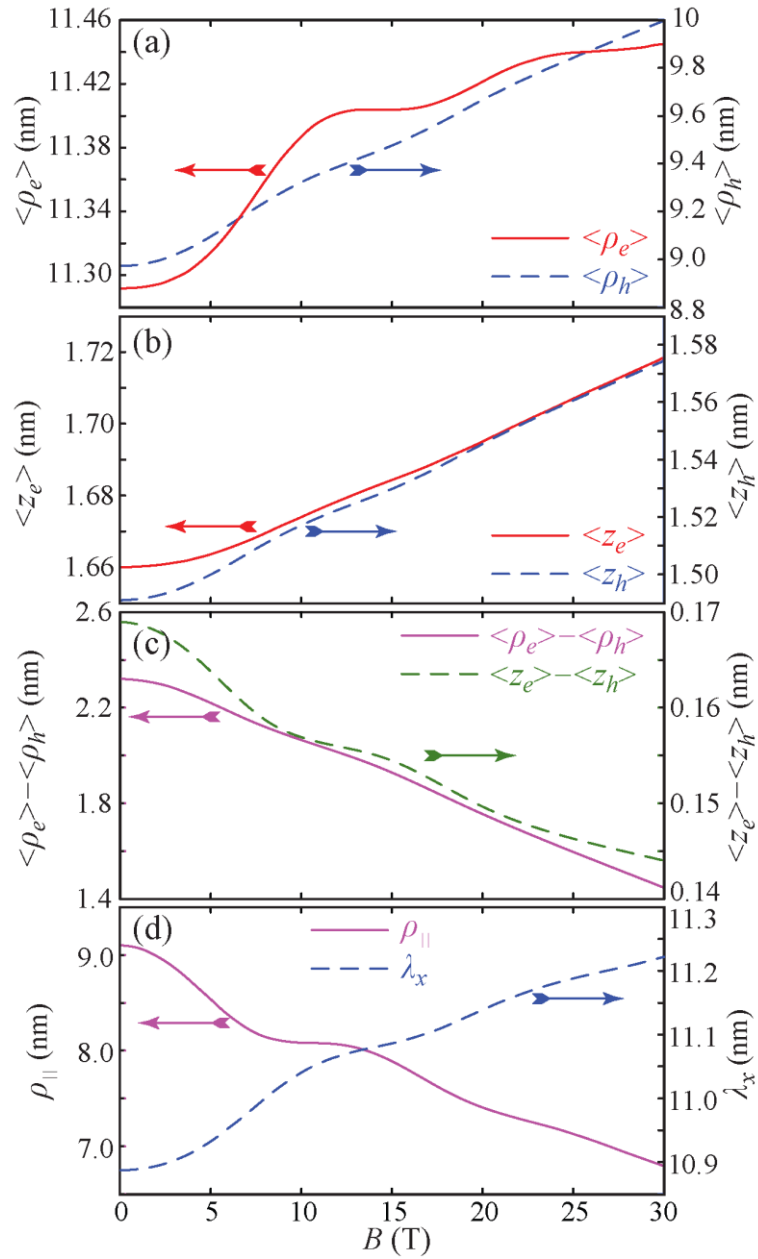
Slika 4.11. (Levi panel) Grafik $d^2E_{x,1}/dB^2$ u funkciji B za: (a) hh eksciton (crta-tačka ljubičasta linija prikazuje rezultate za kvantni prsten sa potpunim otvorom); (b) eksciton prema višezonskom modelu (crta-tačka ljubičasta linija prikazuje rezultate za RLQD bez uračunatog naprezanja). (Desni panel) Varijacija reziduuma (ostatka) pri fitovanju energije ekscitona $\delta E_{x,1}$ sa B za: (c) hh eksciton (crta-tačka ljubičasta linija prikazuje rezultate za kvantni prsten sa potpunim otvorom) i (d) eksciton prema višezonskom modelu (crta-tačka ljubičasta linija prikazuje rezultate za RLQD bez uračunatog naprezanja).

Oscilacije najnižeg optički aktivnog ekscitonskog stanja sa promenom B , prikazane na sl. 4.10, procenjene su proračunom $d^2E_{x,1}/dB^2$ u funkciji B , što je dato na sl. 4.11(a) i (b) za hh eksciton i višezonski eksciton, redom. Kao alternativni metod za procenu oscilacija, na sl. 4.10(c) i (d) prikazani su reziduumi $\delta E_{x,1}$, definisani jednačinom (2.3.74), za hh eksciton i višezonski eksciton, redom. Može se uočiti da i $d^2E_{x,1}/dB^2$ i $\delta E_{x,1}$ pokazuju oscilacije opadajuće amplitude i povećane periode sa smanjenjem parametra η . Ovo je posledica specifične raspodele napreznjanja koja dovodi do smanjenja barijere u grebenu i izdizanja dna jame u krateru sa smanjenjem η , što dovodi do smanjenja polarizacije ekscitona, kao što je ilustrovano na sl. 4.8(a).

Ustanovljeno je da su kod ekscitona računatog prema višezonskom modelu oscilacije veće, što se može uočiti i poređenjem sl. 4.10(a-c) i (d-f). U ranijoj teorijskoj analizi (Tadić et al., 2011) ustanovili smo da su oscilacije prisutne u oblasti B gde dolazi do antiukrštanja ekscitonskih stanja istog orbitalnog momenta. Ova antiukrštanja očigledno su efektnija kada se efekti mešanja uključe u model. Amplitude ekscitona prema hh i višezonskom modelu imaju vrednosti reda 0,1 meV, što je u saglasnosti sa rezultatima nedavnih merenja (Ding et al., 2010). Dobijene oscilacije su veće nego kod nanošoljice razmotrene u prethodnom poglavlju (Arsoski et al., 2012). Takođe, amplitude i period oscilacija za različite vrednosti η su bliske, a kako sve tri vrednosti η daju tri poprečna preseka realistične strukture, može se reći da odstupanje od aksijalne simetrije ima mali uticaj na ekscitonske AB oscilacije. Ako struktura poseduje anizotropiju u ravni, što je slučaj strukture eksperimentalno istražene u referenci (Fomin et al., 2007), promene $d^2E_{x,1}/dB^2$ i $\delta E_{x,1}$ u funkciji B bi trebalo da budu bliske slučaju $\eta=1$, tj. srednjoj visini prstena. Računanje stanja ekscitona u anizotropnim strukturama prevazilazi okvire ovog rada.

Na sl. 4.11(a) i (c) crta-tačka linijama prikazane su i krive za nanoprsten, čiji je presek dat na sl. 4.2(b). Uočava se da su oscilacije manje nego u slučaju RLQD. Veće oscilacije kod nanotačaka sa nepotpunim otvorom su posledica veće polarizacije, koja nastaje usled specifične raspodele napreznjanja. Takođe, za $\eta = 1$ ustanovljena je dvostruko manja amplituda oscilacija kod nenapregnutog RLQD nego kod napregnutog,

što se jasno uočava sa sl. 4.11(b) i (d). Možemo zaključiti da naprezanje nije presudno za ekscitonski AB efekat, ali da dovodi do dvostruko većeg efekta.

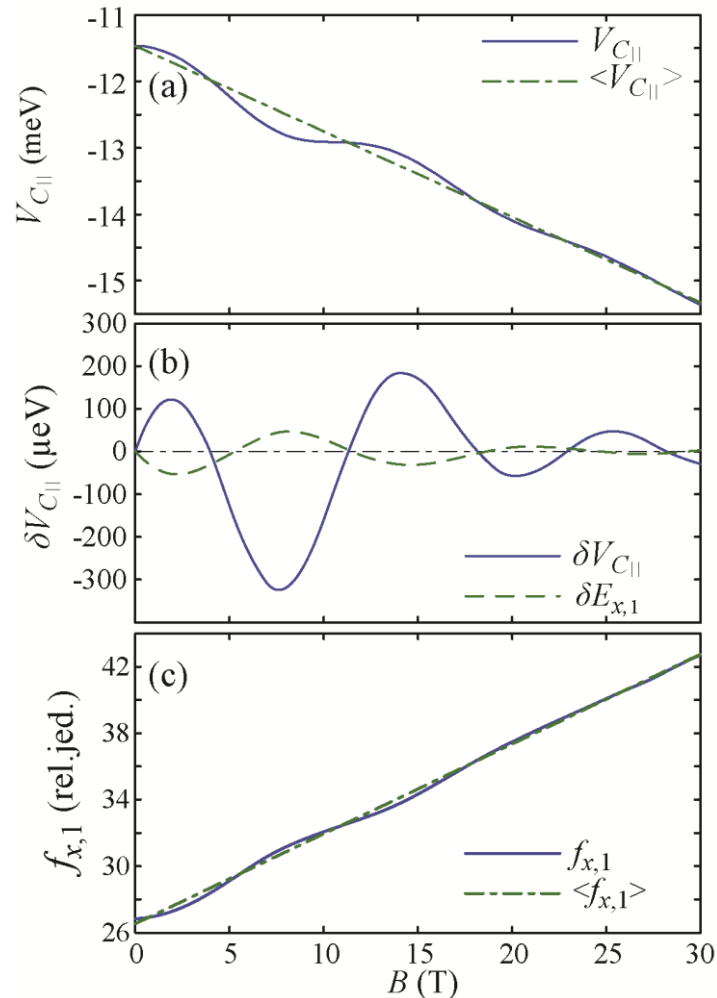


Slika 4.12. Varijacija karakterističnih parametara hh ekscitona sa promenom B za $\eta=1,0$: (a) $\langle \rho_e \rangle$ (puna crvena linija) i $\langle \rho_h \rangle$ (isprekidana plava linija), (b) $\langle z_e \rangle$ (puna crvena linija) i $\langle z_h \rangle$ (isprekidana plava linija), (c) $\langle \rho_e \rangle - \langle \rho_h \rangle$ (puna ljubičasta linija) i $\langle z_e \rangle - \langle z_h \rangle$ (isprekidana zelena linija) i (d) $\langle \rho_{||} \rangle$ (puna ljubičasta linija) i λ_x (isprekidana plava linija).

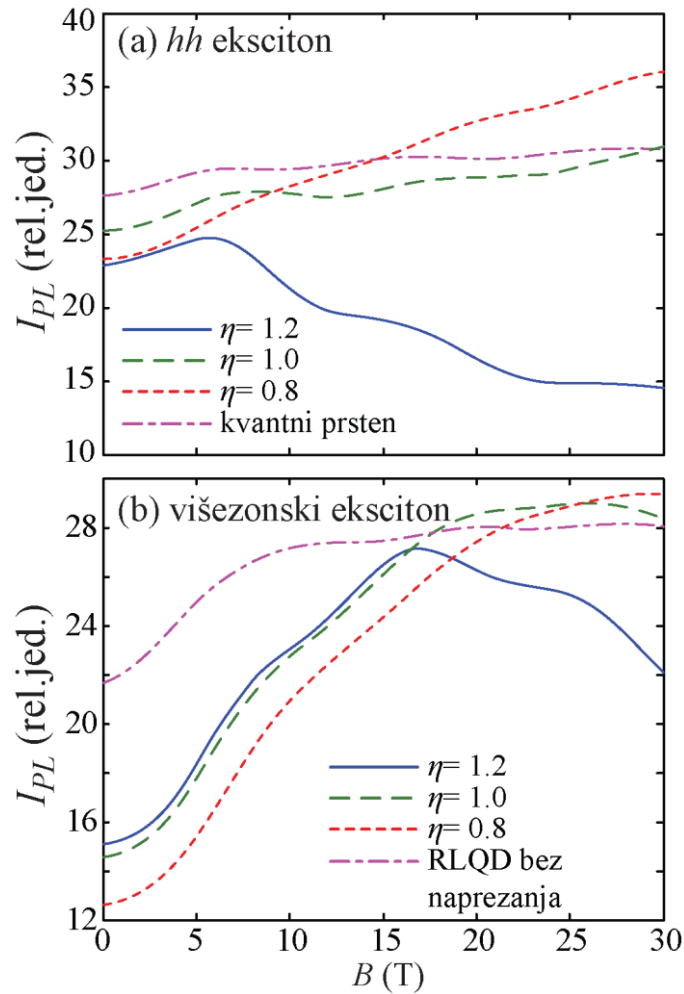
Kako bi preciznije utvrdili i objasnili oblik i poreklo oscilacija energije osnovnog stanja ekscitona sa promenom magnetskog polja, karakteristični radijusi za najniže optički aktivno stanje hh ekscitona u funkciji B za $\eta=1$ prikazani su na sl. 4.12. Može se primetiti da je srednji radijus elektrona $\langle\rho_e\rangle$, dat na sl. 4.12(a), veći od srednjeg radijusa šupljine $\langle\rho_h\rangle$, što se može objasniti razlikama u konfiniranju i efektivnoj masi. Varijacije vertikalnog položaja elektrona i šupljine u funkciji B , date na sl. 4.12(b), su praktično zanemarljive i približno imaju iste vrednosti. Međutim, razlika $\langle\rho_e\rangle-\langle\rho_h\rangle$ i $\langle z_e\rangle-\langle z_h\rangle$ značajno opada sa porastom B , što je prikazano na sl. 4.12(c). Ovo smanjenje je posledica porasta Coulombove interakcije pri porastu magnetskog polja. Stoga dolazi do smanjenja polarizacije ekscitona i konačno do prigušenja ekscitonskih AB oscilacija, što se može uočiti i na sl. 4.10 i sl. 4.11. Slično kao kod $\langle\rho_e\rangle-\langle\rho_h\rangle$, srednji radijus ekscitona u ravni $\rho_{||}$ osciluje oko linearno opadajuće zavisnosti od B , kao na sl. 4.12(d). Međutim, usled porasta $\langle\rho_e\rangle$ sa B i male efektivne mase elektrona, efektivni radijus λ_x je rastuća funkcija od B . Takođe, on osciluje na sličan način kao $\rho_{||}$, ali sa značajno manjom amplitudom, od svega 0,3 nm za B u opsegu od 0 do 30 T. U ovom opsegu magnetskog polja porast λ_x je manji od smanjenja $\langle\rho_e\rangle-\langle\rho_h\rangle$, što ukazuje na smanjenje efektivne površine koju opisuju putanje elektrona i šupljine (Arsoski et al., 2013a).

Sa porastom vrednosti B elektronska i šupljinska stanja kod RLQD su bolje konfinirana, što dovodi do porasta vrednosti integrala preklapanja. Posledica je opadanje $\rho_{||}$ u funkcija B , pa je i srednja Coulombova potencijalna energija u ravni $V_{C||}$, definisana izrazom (2.3.75), opadajuća funkcija B , kao što je prikazano na sl. 4.13(a). Pažljivom analizom sl. 4.13 jasno se može uočiti da su oscilacije $V_{C||}$ u fazi sa oscilacijama $\rho_{||}$. Oscilacije $\delta V_{C||}(B)$ su prikazane na sl. 4.13(b) zajedno sa reziduomom osnovnog stanja ekscitona $\delta E_{x1}(B)$. Period oscilacija energije ekscitona je očigledno povezan sa oscilacijama Coulombovog potencijala. Može se zaključiti da Coulombova interakcija značajno prigušuje ekscitonske AB oscilacije. Porast konfiniranja sa povećanjem B ima suprotan uticaj na varijaciju jačine oscilatora najnižeg optički

aktivnog stanja $f_{x,1}$ od uticaja na $V_{C||}$, što se jasno vidi na sl. 4.13(c). Takođe, uočava se da su oscilacije $f_{x,1}$ oko linearne funkcije od B suprotnog znaka od oscilacija $V_{C||}$. Ove oscilacije su korelisane sa oscilacijama $\rho_{||}$ na sl. 4.12(d): kada $\rho_{||}$ ima vrednosti iznad linearne funkcije od B , $f_{x,1}$ pada ispod vrednosti slične linearne funkcije.



Slika 4.13. (a) Srednji Coulombov potencijal u ravni $V_{C||}$ (puna plava linija) osciluje oko $\langle V_{C||} \rangle$, koje je modelovano linearno opadajućom funkcijom od B (isprekidana zelena linija). (b) Varijacija reziduuma Coulombovog potencijala $\delta V_{C||}$ (puna plava linija) i energije ekscitona $\delta E_{x,1}$ (isprekidana zelena linija) sa porastom magnetskog polja. (c) Jačina oscilatora za rekombinaciju najnižeg optički aktivnog stanja ekscitona (puna plava linija) osciluje oko kvazi-linearne rastuće funkcije od B (isprekidana zelena linija). Prikazan je slučaj hh ekscitona za $\eta=1,0$.



Slika 4.14. (a) Intenzitet fotoluminiscencije I_{PL} za rekombinaciju hh ekscitona u funkciji B (rezultat za nanoprsten sa potpunim otvorom prikazan je crta-tačka ljubičastom linijom). (b) I_{PL} za radijativnu rekombinaciju višezonskog ekscitona (rezultat za RLQD bez uračunatog naprezanja prikazan je crta-tačka ljubičastom linijom).

Na sl. 4.14 (a) i (b) prikazane su varijacije intenziteta fotoluminiscencije za ekscitonsku rekombinaciju prema jednozonskom i višezonskom modelu, redom. Veličina I_{PL} menja zakrivljenost u funkciji B , što je kvalitativno slično potpuno otvorenim nanoprstenovima (Tadić et al., 2011). Kako je za male vrednosti B eksciton pretežno lokalizovan u optički aktivnom osnovnom stanju, zavisnost I_{PL} od B je slična zavisnosti $f_{x,1}$, prikazanoj na sl. 4.13(c). Međutim, u slučaju $\eta=1,2$, na mestima prelaza osnovnog stanja ekscitona iz optički aktivnog u neaktivno, dolazi do značajnog smanjenja I_{PL} . Zbog konačne verovatnoće naseljenosti optički aktivnih stanja ekscitona

na nenulnoj temperaturi, I_{PL} kontinualno opada kada B uzima vrednosti veće od B_1 , što je prikazano na sl. 4.14(a). Takođe, nađene su oscilacije u slučaju potpuno otvorenog kvantnog prstena, kao i u slučaju kada se naprezanje RLQD zanemari. Međutim, amplitude ovih oscilacija su značajno manje od onih u napregnutim RLQD-ovima.

4.4. Sažetak

U ovom poglavlju je razmotren uticaj varijacije dimenzija strukture na stanja neutralnih ekscitona u nanotačkama u formi nanošoljice i realističnih napregnutih nanoprstenova u primenjenom magnetskom polju. Razmatrane geometrije dobro opisuju kvantne tačke prstenastog oblika narasle metodom Stranski-Krastanova. U oba slučaja ustanovljeno je da centralni sloj bitno utiče na stanja neutralnog ekscitona u (In,Ga)As/GaAs sistemima. U slučaju nanošoljice, kada je disk na dnu tanak, nema prelaza između orbitalnih momenata ekscitona u osnovnom stanju. Tada je stanje nultog ekscitonskog orbitalnog momenta osnovno stanje ekscitona, bez obzira na vrednost magnetskog polja, što je slučaj sličan kvantnom prstenu sa potpunim otvorom. Međutim, pri porastu debljine diska, kao posledica naprezanja, dolazi do relokalizacije teškošupljinskih stanja iz prstena u disk, dok elektroni ostaju lokalizovani u oblasti prstena. To dovodi do povećanja polarizacije ekscitona, što rezultuje prelazima orbitalnih momenata u osnovnom stanju, tj. osnovno stanje može postati optički neaktivno.

U slučaju realističnih geometrija razmatran je uticaj visine grebena na povećanje ekscitonskih AB oscilacija. Ustanovljeno je da naprezanje ima specifičan uticaj na lokalizaciju šupljine, što je posledica karakteristične raspodele naprezanja kod RLQD-ova. Rezultati višezonskog modela sa prostorno zavisnim parametrima za šupljine ukazuju na to da vandijagonalni elementi hamiltonijana naprezanja imaju značajan uticaj na položaj preseka stanja različitog orbitalnog momenta, tako da se položaji preseka značajno razlikuju od onih koji se dobijaju u jednozonskoj aproksimaciji. Takođe, za napregnute strukture razmatranih (uslovno malih) dimenzija vandijagonalni elementi kinetičkog dela hamiltonijana imaju efekat suprotan Zeemanovom, te dominantna komponenta spinora u osnovnom šupljinskom stanju odgovara teškoj

šupljini spina gore. Radi pravilne interpretacije u jednozonskoj aproksimaciji neophodno je usvojiti negativne vrednosti efektivnog g faktora šupljine, što je u saglasnosti sa rezultatima merenja (Nakaoka et al., 2004; Kleemans et al., 2009b). Ustanovljeno je da povećanje visine grebena dovodi do smanjenja razlike u energijama najnižeg optički aktivnog i optički neaktivnog stanja, što će dovesti do pomeranja položaja preseka orbitalnih momenata osnovnog stanja ekscitona ka manjim vrednostima B . Čak i mala promena u visini grebena dovodi do značajnog pomeraja vrednosti magnetskog polja pri kojoj dolazi do prelaza orbitalnog momenta osnovnog stanja ekscitona. U slučaju potpuno otvorenih nanoprstenova dobijene su manje oscilacije osnovnog stanja ekscitona nego kod RLQD-ova. Takođe, analiza RLQD bez uračunatog naprezanja ukazuje na to da ekscitonske AB oscilacije postoje, pa se može zaključiti da unutrašnji sloj ima povoljan uticaj na pojavu ekscitonskih AB oscilacija. Međutim, kada se naprezanje uključi u model dobijaju se dvostruko veće amplitude oscilacija, što ide u prilog činjenici da naprezanje ima povoljan uticaj na povećanje amplitude ekscitonskih AB oscilacija. Iako postoje značajne razlike šupljinskih stanja računatih prema jednozonskom i višezonskom modelu, dobijene su slične vrednosti ekscitonskih AB oscilacija, osim razlike u amplitudi, koja je veća u slučaju kada je mešanje zona uključeno u proračun. Ustanovljeno je da postoje male razlike u periodu i amplitudi oscilacija osnovnog stanja ekscitona za analizirane različite poprečne preseke, što ukazuje na opravdanost aksijalne aproksimacije. Teorijski izračunate amplitude AB oscilacija osnovnog stanja ekscitona (Arsoski et al., 2013a) pokazuju dobro kvantitativno slaganje sa eksperimentalno dobijenim vrednostima (Teodoro et al., 2010).

Glava 5

Uticaj električnog polja na ekscitonske Aharonov-Bohmove oscilacije

U glavi 3 analizirane su nenapregnute strukture sa dispozicijom zona I tipa, pri čemu su nađene zanemarljive amplitude ekscitonskih AB oscilacija, što je posledica male polarizacije ekscitona (Arsoski i Tadić, 2011). U prethodnoj glavi je ustanovljeno da naprezanje može značajno da poveća polarizaciju ekscitona, što dovodi do porasta amplitude oscilacija (Arsoski et al., 2012; Arsoški et al., 2013a). U ovoj glavi razmotriće se uticaj električnog polja primenjenog normalno na ravan strukture na povećanje ekscitonskih AB oscilacija (Arsoski et al., 2013b).

5.1. Uvod

Sa stanovišta analize uticaja električnog polja na poluprovodničku nanotačku posebno interesantna varijanta strukture višestruko-preklopljenih nanoprstenova javlja se u formi nanoprstena na nanodisku (engl. nanoring on nanodisk–NON) (Somaschini et al., 2010). Oblik razmatrane aksijalno simetrične strukture prikazan je na sl. 5.1 (a), čiji

je poprečni presek dat na sl. 5.1(b). Tipična vrednost spoljne radijalne granice eksperimentalno realizovanih struktura je reda 100 nm, dok je unutrašnji radijus grebena na polovini širine reda nekoliko desetina nm (Somaschini et al., 2010). Primetimo da na sl. 5.1 postoji udubljenje u centru diska, ali je struktura ipak jednostruko povezana. Kako u strukturi tipa nanodiska AB oscilacije jednočestičnih i ekscitonskih stanja nisu prisutne, nije *a priori* jasno da li u razmatranoj strukturi postoji ekscitonski AB efekat.

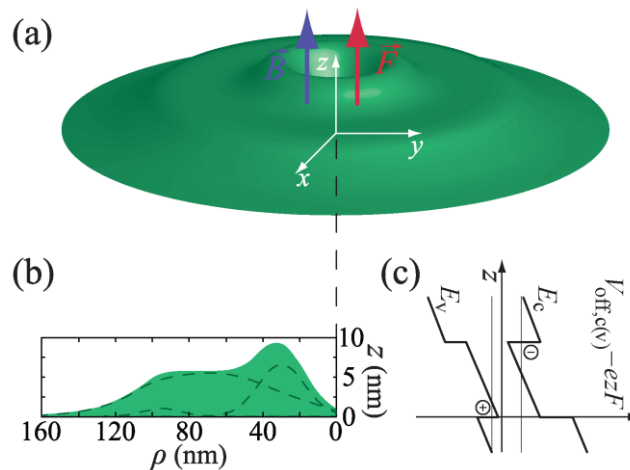
U ovoj glavi razmatraće se postojanje ekscitonskih i optičkih ekscitonskih AB oscilacija u realističnim nenapregnutim nanoprstenovima I tipa. Takođe ćemo analizirati uticaj spoljašnjeg električnog polja na ove oscilacije. Nedavno je pokazano da se polarizacija neutralnog ekscitona može povećati primenom električnog polja bilo normalnog (Li i Peeters, 2011; Ding et al., 2010), bilo u ravni osnove (Maslov et al., 2003). Nanostruktura je napravljena od GaAs/(Al,Ga)As, te su efekti naprezanja na elektronsku strukturu zanemarljivi. Oblik analizirane strukture na sl. 5.1(a) verno oslikava eksperimentalno dobijenu strukturu NON-a (Somaschini et al., 2010). Osnova nanotačke je u xy ravni, kao na sl. 5.1(a), dok su magnetsko i električno polje usmereni u pravcu z ose. Poprečni presek kroz centar NON-a i karakteristične dimenzije date su na sl. 5.1(b). Efekat električnog polja primenjenog u smeru narastanja strukture ($F > 0$) na stanja u provodnoj i valentnoj zoni ilustrovan je na sl. 5.1(c). Jednočestična stanja su izračunata pomoću jednozonskog modela, gde je Schrödingerova jednačina rešena numerički primenom metoda konačnih elemenata. Energije neutralnog ekscitona izračunate su metodom egzaktne dijagonalizacije, kao što je objašnjeno u glavi 2. Pokazaćemo da se pomoću električnog polja može menjati amplituda i period ekscitonskih AB oscilacija u prstenastim strukturama formiranim tehnikom kapljične epitaksije.

5.2. Model razmatrane strukture

Analizirana struktura modelovaće se višestrukim prstenovima, koji nisu razdvojeni već međusobno preklapljeni, što predstavlja dobar model nanostrukture proizvedenih tehnikom kapljične epitaksije. Visina nanotačke modeluje se sumom Gaussovih funkcija (Arsoski et al., 2013b):

$$h(\rho, \varphi) = h(\rho) = \sum_k h_k e^{-\frac{(\rho - \rho_k)^2}{c_k^2}}, \quad (5.1)$$

gde su ρ i φ polarne koordinate. Ovde, h_k , ρ_k i c_k predstavljaju parametre fitovanja koji odgovaraju visini, srednjem poluprečniku i širini pojedinačnih prstenova, redom.

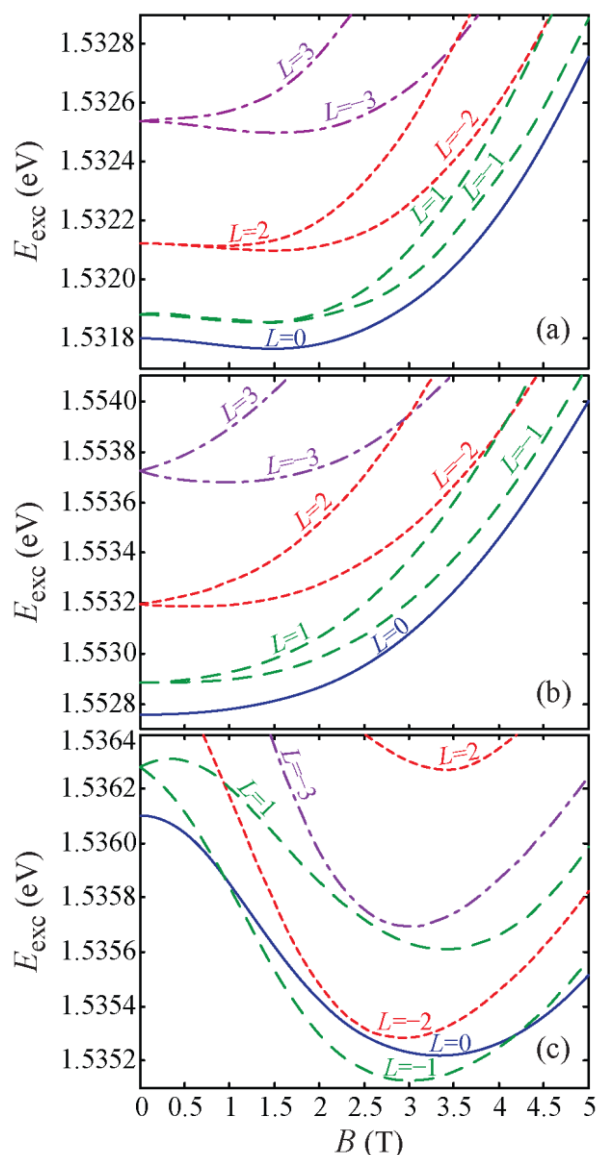


Slika 5.1. (a) Šematski 3D prikaz analizirane strukture preklapljenih koncentričnih nanoprstenova u formi nanoprstena na nanodisku (NON). (b) Vertikalni poprečni presek NON-a duž radijalne i z ose. Isprekidane linije prikazuju pojedinačne prstenove koji formiraju NON. (c) Ilustrovani prikaz efekta električnog polja primenjenog u smeru narastanja strukture ($F > 0$) na lokalizaciju elektrona i šupljine.

5.3. Numerički rezultati i diskusija

Usvojene su sledeće vrednosti parametara nanoprstenova koji formiraju NON: $h_1=6,5$ nm, $\rho_1=30$ nm, $c_1=18$ nm, $h_2=6$ nm, $\rho_2=70$ nm, $c_2=50$ nm, $h_3=1$ nm, $\rho_3=95$ nm, i $c_3=15$ nm. Na ovaj način prilično dobro je opisan oblik nedavno proizvedenih prstenastih struktura (Somaschini et al., 2010), čiji je poprečni presek dat na sl. 5.1 (b). Molarni udeo AlAs u leguri (Al,Ga)As je $x=0,3$. Efektivne mase elektrona i teške šupljine u GaAs su $0,067m_0$ and $0,45m_0$, redom, dok se u (Al,Ga)As računaju iz interpolacionih formula $(0,067+0,083x)m_0$ i $(0,45+0,2x)m_0$ za elektron i tešku šupljinu,

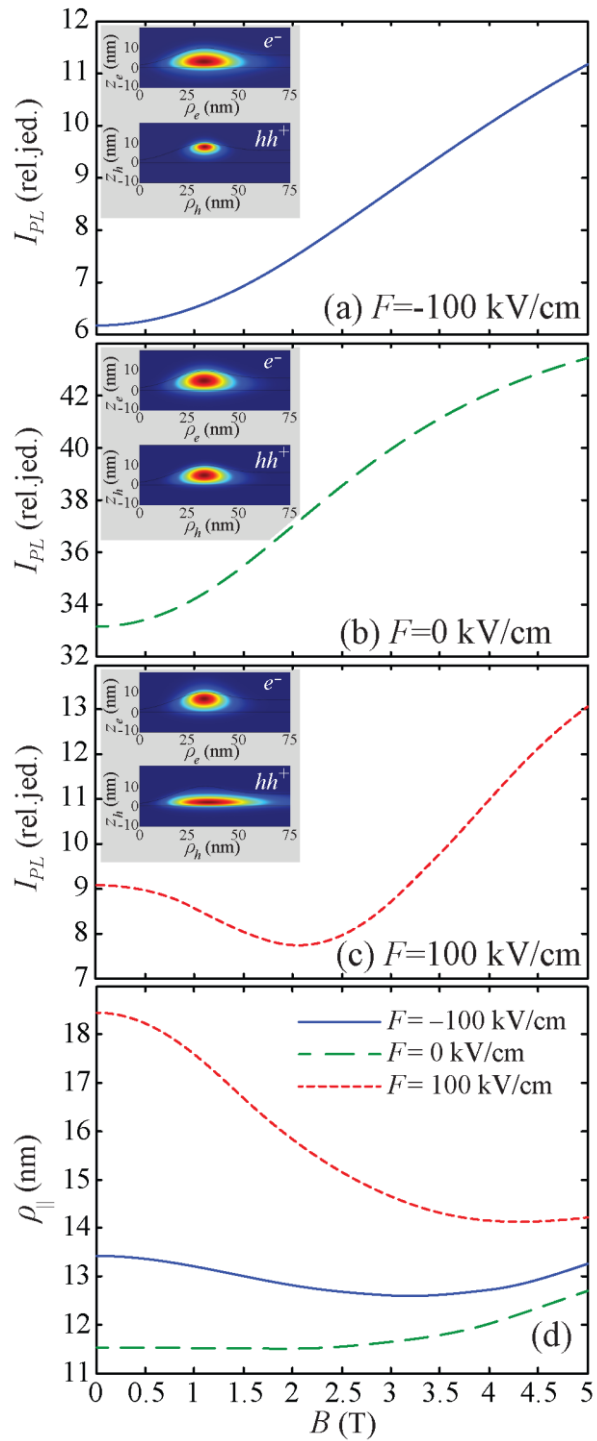
redom (Singh, 1993). Temperatura ambijenta je $T=4,2$ K, što je vrednost u većini skorašnjih eksperimenata vezanih za nanotačke. Vrednosti energetskih procepa su uzete iz rada (Vurgaftman et al., 2001), dok je za ofset provodne zone uzeto da iznosi 60% razlike energetskih procepa (Arsoski et al., 2010). Kao što je već ranije naznačeno, pretpostavlja se da je permitivnost prostorno nezavisna i jednaka vrednosti u GaAs, $\varepsilon=12,5\varepsilon_0$. Vrednosti ostalih parametra su dati u Dodatku B. Ekscitonska stanja su izračunata za tri karakteristične vrednosti električnog polja, $F= -100$ kV/cm, 0 i 100 kV/cm.



Slika 5.2. Stanje ekscitona $L=0$ (puna plava linija), $L= \pm 1$ (isprekidana zelena linija), $L= \pm 2$ (tačkasta crvena linija) i $L= \pm 3$ (crta tačka ljubičasta linija) najniže energije u NON-u, za vrednosti električnog polja: (a) -100 kV/cm, (b) 0 i (c) 100 kV/cm.

Najniža energetska stanja ekscitona u NON-u u funkciji magnetskog polja za vrednosti orbitalnog momenta od -3 do $+3$ i vrednosti električnog polja $F = -100$ kV/cm, $F=0$ i $F=100$ kV/cm prikazana su na sl. 5.2. Za velike vrednosti električnog polja usmerenog suprotno od smera narastanja strukture (z ose), tj. $F = -100$ kV/cm, osnovno stanje ekscitona je $L=0$. Međutim, male oscilacije oko kvaziparabolične zavisnosti sa promenom magnetskog polja evidentne su na sl. 5.2 (a) i nastaju usled antiukrštanja sa višim stanjima ekscitona istog orbitalnog momenta. Bez električnog polja elektron i šupljina su slično lokalizovani, te su oscilacije prigušene Coulombovom interakcijom. Stoga, ekscitonske AB oscilacije nisu prisutne, što je očigledno na sl. 5.2 (b). Slično kao i za $F = -100$ kV/cm, osnovno stanje ekscitona ima orbitalni moment $L=0$ u razmatranom opsegu B . Međutim, za $F=100$ kV/cm, u osnovnom stanju ekscitona javljaju se dva prelaza orbitalnih momenata: prvi na oko 1 T, gde imamo prelaz sa svetlog na tamno stanje $L=0 \rightarrow -1$ i drugi na 4 T, gde dolazi do povratka na optički aktivno stanje $L=-1 \rightarrow 0$ (Arsoski et al., 2013b). Ovo je poželjan preduslov za pojavu optičkog ekscitonskog AB efekta (Govorov et al., 2002).

Zbog velikih lateralnih dimenzija nanotačke, energije ekscitonskih stanja su bliske. Stoga nekoliko stanja značajno doprinose intenzitetu fotoluminiscencije, čija je zavisnost od magnetskog polja data na sl. 5.3(a)-(c), za vrednosti električnog polja kao na sl. 5.2. Za $F = -100$ kV/cm i $F=0$ (sl. 5.3(a) i (b), redom), intenzitet fotoluminiscencije je rastuća funkcija B , što je slično rezultatima za napregnute samoasemblirane nanoprstenove (Tadić et al., 2011; Arsoški et al., 2012; Arsoški et al., 2013a). Međutim, prelazi orbitalnih momenata $L=0$ i $L=-1$ u osnovnom stanju, prikazani na sl. 5.2 (c), doprinose velikoj oscilaciji u intenzitetu fotoluminiscencije za $F=100$ kV/cm. Stoga, optički ekscitonski AB efekat može biti uočen u analiziranim nanotačkama ukoliko se primeni adekvatna vrednost električnog polja u smeru narastanja strukture (Arsoski et al., 2013b). Razlike u oscilacijama za električno polje u smeru z ose i suprotnom smeru mogu se objasniti razlikama u efektivnom konfiniranju elektrona i šupljine.



Slika 5.3. Intenzitet fotoluminiscencije za vrednosti električnog polja: (a) -100 kV/cm, (b) 0 i (c) 100 kV/cm, i (d) srednji radijus ekscitona u ravni $\rho_{||}$ za $F = -100$ kV/cm (puna plava linija), $F=0$ (isprekidana zelena linija) i $F=100$ kV/cm (tačkasta crvena linija). Umeći prikazuju talasne funkcije jednočestičnih stanja najniže energije ($l_{e(h)}=0$) za $B=0$.

Umeci na sl. 5.3 prikazuju talasne funkcije najnižeg stanja elektrona i šupljine za $B = 0$. Pošto elektron ima manju efektivnu masu, njegovo konfiniranje je slabije, te električno polje ima slabiji uticaj na elektronske nego na teškošupljinske talasne funkcije. Kada je električno polje u smeru z ose, teška šupljina je potisnuta u plato u okolini centra, dok elektronska talasna funkcija ostaje lokalizovana u oblasti prstena (uporedi umetke na sl. 5.3(b) i (c)). Posledica je veća razdvojenost elektrona i teške šupljine, ne samo vertikalno već i u ravni, tj. dolazi do povećanja polarizacije ekscitona (Arsoski et al., 2013b). Ovo pogoduje pojavi ekscitonskog AB efekta. Povećanje polarizacije primenom električnog polja očigledno je na sl. 5.3 (d), gde je predstavljena varijacija ρ_{\parallel} u funkciji B za tri vrednosti električnog polja.

5.4. Sažetak

U ovoj glavi razmotran je uticaj električnog i magnetskog polja na stanja neutralnog ekscitona u nanotačkama koje su modelovane koncentričnim aksijalno simetričnim preklapljenim prstenovima, što približno predstavlja formu nedavno proizvedenih nanotačaka metodom modifikovane kapljične epitaksije. Električno polje dovodi do povećanja vertikalne polarizacije, ali i do polarizacije u ravni, što povoljno utiče na pojavu ekscitonskih AB oscilacija. Proračun ukazuje da usled primene električnog polja sa porastom magnetskog polja može doći do višestrukih prelaza osnovnog stanja ekscitona iz optički aktivnog u optički neaktivno i obratno. Posledica ovoga je mogućnost pojave intenzivnih oscilacija u intenzitetu fotoluminiscencije, što predstavlja osnovnu odliku optičke manifestacije ekscitonskog AB efekta. Ovo je u suprotnosti sa predviđanjima za jednostruko povezane strukture, što se može pripisati specifičnom obliku nanotačke koji omogućava uslove za povećanje polarizacije primenom električnog polja normalno na ravan strukture (Arsoski et al., 2013b).

Glava 6

Zaključak

U ovoj disertaciji razmotreni su uticaji električnog i magnetskog polja na elektronsku strukturu, ekscitonska stanja i optičke osobine nanoprstenova i nanotačaka sličnih nanoprstenovima. Posebna pažnja posvećena je ekscitonskom Aharonov-Bohmovom (AB) efektu i njegovoj optičkoj manifestaciji (optičkom ekscitonskom AB efektu), zbog potencijalne primene u nanoelektronici i fotonici. Razmotrene su strukture sa dispozicijom zona I tipa, kod kojih je tek u skorije vreme ovaj efekat eksperimentalno verifikovan (Teodoro et al., 2010; Ding et al., 2010).

Karakterizacija tehnoloških procesa i njihovih modifikacija je od velikog značaja za kvalitativno i kvantitativno dobar opis morfologije strukture. Stoga je na osnovu pregleda obimne literature skorijeg datuma najpre dat sistematizovani pregled tehnika modifikovane kapljične epitaksije i Stranski-Krastanow (SK) moda rasta. Takođe su date karakteristike III-V jedinjenja i legura, osnovni parametri zonske strukture ovih poluprovodnika i formule za njihov proračun.

Zatim su detaljno opisani razvijeni modeli za računanje mehaničkog naprezanja. U slučaju anizotropne elastičnosti primenjen je kontinualno-mehanički model za proračun raspodele naprezanja, koja se određuje na osnovu raspodele pomeraja za koju je elastična energija u razmatranoj zapremini (kutiji) minimalna. Na ovaj način dobijen

je sistem jednačina koji se može rešiti numerički ali zbog svoje kompleksnosti zahteva velike računarske resurse.

Strukture razmotrene u ovoj disertaciji poseduju aksijalnu simetriju, pa se dobri rezultati za raspodelu naprezanja mogu dobiti pomoću jednostavnog modela izotropne elastičnosti. Uvođenjem Lamèovog potencijala u diferencijalnu jednačinu za pomeraj, ovaj problem se svodi na rešavanje 2D diferencijalne jednačine. Za pravolinijske granice poprečnog preseka aksijalno simetrične strukture, izračunavanje raspodele naprezanja u prostoru svodi se na numeričko rešavanje 1D integrala. Ovaj model može biti izuzetno koristan kada se koristi metod ekspanzije u bazis analitičkih funkcija za računanje jednočestična stanja u napregnutoj strukturi (Čukarić et al., 2012). Iako ovaj metod za računanje jednočestična stanja nije korišćen u ovoj disertaciji, napomenimo da su matični elementi potencijala zapreminski integrali unutar izabranog domena za rešavanje, koji se mogu značajno pojednostaviti i izračunati sa malom numeričkom greškom (Čukarić et al., 2012). Ukoliko bi se potencijal računao nezavisno od programa za računanje vrednosti matičnih elemenata, neophodno bi bilo postaviti neuniformnu mrežu kako bi se sa većim brojem tačaka pokrila oblast u kojoj je izmena efektivnih potencijala velika.

Proračun naprezanja ima veliki uticaj na računanje jednočestičnih stanja. Nanotačke koje su razmatrane su aksijalno simetrične, pa je posebna pažnja posvećena aksijalnim modelima uticaja naprezanja na jednočestična stanja. Uveden je hamiltonijan naprezanja u višezonskom modelu u aksijalnoj aproksimaciji koji uključuje vandijagonalne elemente (efekte smicanja). Polazeći od izraza za elemente hamiltonijana naprezanja u višezonskom modelu u Descartesovim koordinatama izvršena je transformacija u cilindrične koordinate, gde su vandijagonalni elementi transformisani u pogodnu formu u vidu zbira člana koji dovodi do sprezanja komponenti spinora istog ukupnog ugaonog momenta šupljine i člana koji dovodi do sprezanja sa komponentom susednog ugaonog momenta. Dimenzionom analizom za parametre materijala razmatranih u okviru disertacije uočeno je da član koji dovodi do sprezanja različitih ugaonih momenata šupljine ima značajno manju vrednost od člana koji spreže različite komponente spinora, pa se u tom smislu u prvoj aproksimaciji može zanemariti. Ovo dovodi do aksijalne aproksimacije hamiltonijana naprezanja (Arsoski et al., 2013a), što predstavlja unapređenje postojećeg aksijalno simetričnog modela

baziranog na dijagonalnoj aproksimaciji, tj. zanemarivanju vandijagonalnih članova u delu hamiltonijana zavisnom od naprežanja (Tadić et al. 2002a).

Za kvalitetan opis optičkih osobina nanotačaka neophodno je precizno izračunati energije ekscitonskih stanja, čemu je posvećena posebna pažnja u ovoj disertaciji. Formirani su modeli zasnovani na pristupu egzaktno dijagonalizacije pomoću bazisa formiranog od proizvoda jednočestičnih stanja elektrona i šupljine u *realnom* i *inverznom prostoru*. Svaki od prikazanih modela ima svoje prednosti i mane. Model proračuna u realnom prostoru ograničen je na slučaj aksijalno simetričnih struktura i zahteva računanje matrica velikih dimenzija, čiji se elementi dobijaju pomoću 4D integracije. Međutim, kada se matrice jednom izračunaju, nalaženje elemenata matrice za rešavanje svojstvenog problema svodi se na množenje vektora proizvoda jednočestičnih stanja elektrona i šupljine izračunatom matricom. Ovaj metod se pokazao kao prilično brz i robustan (Arsoski et al., 2012), ali zahteva da se posebna pažnja obrati na postavljanje mreže za konkretan poprečni presek aksijalno simetrične nanotačke. S druge strane, egzaktna dijagonalizacija u inverznom prostoru (Tadić i Peeters, 2004; Tadić et al., 2011; Arsoški et al., 2013a) zahteva proračun velikog broja Fourierovih transformacija i određenih integrala, što se mora ponoviti za svaku novu vrednost eksternog polja i za svaku strukturu. Međutim, problem nalaženja vrednosti integrala značajno se može pojednostaviti postavljanjem neuniformne mreže, koja bi sa većim brojem tačaka pokrio relevantan deo k -prostora. Takođe, ovaj metod se može efikasno primeniti i na aksijalno nesimetrične strukture, što je jedna od tema budućeg rada u ovoj oblasti.

Kako bi se stekao bolji uvid u poreklo ekscitonskog i optičkog ekscitonskog AB efekta u disertaciji su uvedeni dimenzioni parametri ekscitona i model za procenu amplitude oscilacija. Za razliku od ranije definisanih parametara koji praktično razmatraju radijus orbite elektrona, šupljine i ekscitona oko ose nanoprstena, uveden je *srednji ekscitonski radijus u ravni* (Tadić et al., 2011; Arsoški et al., 2013a), koji daje podatak o polarizaciji ekscitona. Zajedno, ovi parametri daju kompletan uvid u poreklo i amplitudu oscilacija osnovnog stanja ekscitona. Pored standardnog metoda za procenu amplitude oscilacija koji se zasniva na analizi drugog izvoda osnovnog stanja ekscitona (Grochol et al., 2006) uveden je model koji je zasnovan na fitovanju energije osnovnog stanja polinomom četvrtog stepena (Arsoski et al., 2013a). Kod 1D prstenova ova

zavisnost je parabola, a polinom četvrtog stepena unosi korekciju odstupanja od parabolične zavisnosti, čime su uračunati efekti koji potiču od konačne širine prstena. Dobijene vrednosti za amplitude oscilacija su u saglasnosti sa eksperimentalnim merenjima (Teodoro et al., 2010; Ding et al., 2010) i daju bolji kvalitativni uvid u amplitudu i period oscilacija od metode zasnovane na nalaženju drugog izvoda (Arsoski et al., 2013a).

Pored egzaktnih modela formirani su i aproksimativni analitički i numerički model za proračun stanja neutralnog ekscitona u aksijalno simetričnim strukturama male visine u adijabatskoj aproksimaciji prema jednozonskim modelima elektronskih i šupljinskih stanja. U postavljenom analitičkom modelu rešenja za talasne funkcije su konfluentne hipergeometrijske funkcije (Arsoski et al., 2010). Model je prilično jednostavan, ali se može primeniti isključivo na aksijalno simetrične strukture pravougaonog poprečnog preseka, male visine i u slučaju kada naprezanje nije uračunato u model. Takođe, ovaj model ne uračunava Coulombovu interakciju. S druge strane, numerički model polazi od ekscitonske Schrödingerove jednačine, gde se prelaskom u povoljan sistem koordinata postojeći 6D problem svodi na 3D (Grochol et al., 2006; Arsoški i Tadić, 2011). Coulombov potencijal je eksplicitno uračunat, a efektivni potencijali koji su posledica naprezanja mogu se jednostavno uključiti u model. Iako je ovaj model zasnovan na adijabatskoj i jednozonskoj aproksimaciji, on daje dobar uvid u mogućnost postojanja ekscitonskih AB oscilacija.

Formirani aproksimativni modeli primenjeni su na dva koncentrična lateralno spregnuta nanoprstena u magnetskom polju. Analizirani su GaAs/(Al,Ga)As nanoprstenovi dobijeni metodom modifikovane kapljične epitaksije. U analiziranoj strukturi ne postoji naprezanje, a minimalna lateralna dimenzija strukture je reda 100 nm i ograničena je tehnološkim postupkom. Odsustvo naprezanja dovodi do slične lokalizacije elektrona i šupljine što zajedno sa relativno velikim lateralnim dimenzijama strukture dovodi neutralni eksciton u režim jake Coulombove interakcije. Stoga je polarizacija ekscitona mala, odnosno zanemarljivo mala je efektivna površ kroz koju penetrira fluks magnetskog polja. Takođe, stanje najniže energije ekscitona uvek je optički aktivno u razmatranom opsegu magnetskog polja. Zbog velikih lateralnih dimenzija strukture stanja najniže energije, od kojih je većina optički neaktivna, su bliska. Stoga je verovatnoća radijativne rekombinacije umanjena, a samim tim i

intenzitet izlaznog zračenja, što značajno otežava eksperimentalnu verifikaciju oscilacija na konačnoj temperaturi. Rezultati pojednostavljenog analitičkog modela (Arsoski et al., 2010) ukazuju na mogućnost postojanja oscilacija u najnižem stanju ekscitona. Međutim, u analiziranom modelu Coulombova interakcija nije uključena. Složeniji numerički model (Arsoski et al., 2011) pokazuje da je eksciton u režimu jake Coulombove interakcije, odnosno da ima malu polarizaciju, a dobijene vrednosti amplitude oscilacija osnovnog stanja ekscitona su reda μeV . Takođe, oscilacije jačine oscilatora za radijativnu rekombinaciju su zanemarljive, pa se može zaključiti da se ekscitonski AB efekat u nenapregnutim strukturama I tipa dobijenih kapljičnom epitaksijom praktično vrlo teško može uočiti, kao i da je za kvalitativno i kvantitativno dobar proračun stanja ekscitona neophodno uračunati Coulombovu interakciju.

Skorašnje eksperimentalne studije pokazale su da se ekscitonski AB efekat (za neutralni eksciton) može uočiti kod struktura sa dispozicijom zona I tipa (Teodoro et al., 2010; Ding et al., 2010) u slučaju kada je sastav materijala nanostrukture takav da postoji naprezanje, što je slučaj kod nanotačaka samoasembliranih SK tehnikom rasta. Nanoprstenovi dobijeni ovom tehnikom imaju relativno male dimenzije (režim slabe Coulombove interakcije) što je povoljno za nastanak ekscitonskih AB oscilacija. Takođe, strukture samoasemblirane ovom tehnikom su jednostruko povezane, odnosno postoji tanak sloj unutar nominalnog otvora prstena. U ovoj disertaciji je izvršena analiza oblika strukture, uticaja unutrašnjeg sloja i naprezanja na ekscitonske AB oscilacije. Razmotrena su dva oblika aksijalno simetričnih nanotačaka: 1) idealizovana struktura nanošoljice (Arsoski et al., 2012) i 2) realistična (eksperimentalna) struktura nanotačke slične nanoprstenu (Arsoski et al., 2013a). Jednočestična stanja su izračunata pomoću jednozonskog modela elektronskih stanja i jednozonskog ili višezonskog modela šupljinskih stanja. Kod nanošoljice je ustanovljen relevantan uticaj unutrašnjeg sloja. Pri određenim debljinama dna nanošoljice dolazi do značajnog povećanja polarizacije ekscitona usled relokalizacije šupljine u oblast dubokog efektivnog potencijala koji se javlja u centralnom sloju, što je posledica prisutnog naprezanja. Čak i ovako idealizovan model ukazao je na mogućnost postojanja oscilacija najnižeg stanja ekscitona, odnosno njihove optičke manifestacije. Za određene debljine dna, najniže stanje ekscitona može postati optički neaktivno, što dovodi do značajnog pada u intenzitetu fotoluminiscencije. Nešto bolji uvid u poreklo oscilacija dobijen je prema

realističnom modelu poprečnog preseka strukture. Ustanovljeno je da kod realističnih oblika nanotačke dolazi do karakteristične raspodele naprezanja, što ima specifičan uticaj na razdvajanje elektrona i šupljine. Stoga je za računanje ekscitonskih stanja poželjno koristiti realistične modele geometrije. Ustanovljeno je da samo prisustvo unutrašnjeg sloja povoljno utiče na pojavu ekscitonskih AB oscilacija. Međutim, kada se naprezanje uključi u model, amplitude oscilacija su dvostruko veće. Takođe, višezonski model je dao veće amplitude oscilacija od jednozonskog. Naime, usled mešanja zona šupljina energije susednih stanja su manje razdvojene nego energije teških šupljina računata prema jednozonskom modelu, pa su i antiukrštanja ekscitonskih stanja istog orbitalnog momenta efektivnija. Analizom aksijalno simetričnih nanotačaka čije su dimenzije slične eksperimentalnim utvrđeno je da su amplitude oscilacija reda veličine izmerenih (Teodoro et al., 2010; Ding et al., 2010) i da ne zavise mnogo od razmatranog poprečnog preseka. Može se zaključiti da iako u realnim strukturama postoji mala ali uočljiva anizotropija (razmatrani poprečni preseki se ne razlikuju značajno) primena aksijalne aproksimacije za geometriju, naprezanje i kinetički deo hamiltonijana daju dobru procenu ekscitonskih AB oscilacija (Arsoski et al., 2013a).

U disertaciji je, takođe, analiziran uticaj električnog polja na ekscitonska stanja u magnetskom polju nenapregnutih nanotačaka prstenastog oblika sa dispozicijom zona I tipa. Ustanovljeno je da u realističnim geometrijama sa nepotpunim otvorom električno polje primenjeno u pravcu narastanja strukture može dovesti do razdvajanja elektrona i šupljine, ne samo u vertikalnom pravcu, nego i u ravni strukture (Arsoski et al., 2013b). Povećanje lateralne polarizacije utiče na pojavu AB oscilacija najnižeg stanja ekscitona. Pri tome, osnovno stanje u određenim opsezima može postati optički neaktivno, što dovodi do intenzivnih oscilacija u intenzitetu fotoluminiscencije (Arsoski et al., 2013b). Ovo je posledica specifične geometrije strukture, pri čemu amplituda oscilacija intenziteta fotoluminiscencije zavisi od smera primenjenog električnog polja, što se može objasniti razlikom u efektivnim masama elektrona i šupljine. Treba napomenuti da ovi efekti nisu još razmatrani ekperimentalno. Pri velikim intenzitetima primenjenog električnog polja dolazi do značajnog povećanja vertikalne polarizacije, što dovodi do smanjenog preklapanja jednočestičnih talasnih funkcija. Na ovaj način u velikoj meri je smanjena verovatnoća rekombinacije, a kao posledica istog biće smanjen i intenzitet

fotoluminiscencije. U eksperimentalnim okolnostima ovo može da oteža verifikaciju analiziranog efekta.

Generalno, na osnovu rezultata disertacije može se doneti nekoliko važnih zaključaka. U nenapregnutim strukturama sa dipozicijom zona I tipa dobijenih kapljičnom epitaksijom ekscitonski AB efekat je zanemarljiv. Strukture su relativno velikih lateralnih dimenzija, pa je polarizacija neutralnog ekscitona mala usled jake Coulombove interakcije. Kod nenapregnutih struktura sa nepotpunim otvorom, kao što je nanošoljica na nanodisku, polarizacija se može povećati pomoću električnog polja primenjenog normalno na ravan strukture, što dovodi do optičke manifestacije AB oscilacija. Sa druge strane, prstenovi samoasemblirani SK tehnikom su jednostruko povezane napregnute strukture malih lateralnih dimenzija. Kod relativno malih nanoprstenova uticaj Coulombove interakcije je manji nego kod velikih. Takođe, prisustvo unutrašnjeg sloja i naprezanja dovodi do povećanja polarizacije ekscitona, što povoljno utiče na pojavu ekscitonskih AB oscilacija. Raspodela naprezanja je bitno određena oblikom strukture. Efekti naprezanja imaju veliki uticaj na jednočestična stanja, te je primena odgovarajućeg modela geometrije pri proračunu naprezanja važna za analizu optičkih efekata. Može se zaključiti da su ekscitonski i optički ekscitonski AB efekti prisutni u napregnutim nanotačkama I tipa oblika sličnog prstenu, ali bez postojanja otvora. Takođe, treba napomenuti da se i kod ovih struktura amplitude oscilacija mogu kontrolisati primenom normalnog električnog polja, što je u skorije vreme eksperimentalno i teorijski verifikovano (Ding et al., 2010).

Rezultati disertacije ukazuju da elektronska struktura jednočestičnih stanja i ekscitona (ekscitonska struktura) i optičke osobine nanotačaka i nanoprstenova značajno zavise od oblika i sastava nanostrukture, kao i od naprezanja, eksternog magnetskog i električnog polja. Pored toga, elektronska struktura značajno zavisi i od mešanja između stanja valentne zone. Modelovanje elektronske strukture mora uzeti u obzir navedene faktore kako bi se adekvatno opisale optičke osobine razmatranih nanostrukture. Dalji rad bi mogao da obuhvati niz interesantnih tema, kao što su: razmatranje uticaja anizotropije na AB oscilacije, ekscitonski AB efekat u naslaganim strukturama diskova i prstenova, razmatranje uticaja članova koji uklanjaju aksijalnu simetriju u višezonskom modelu na ekscitonska stanja, modelovanje ekscitonskog AB efekta u prstenovima i tačkama II tipa, računanje stanja naelektrisanog ekscitona itd.

Literatura

- Abbarchi M., F. Troiani, C. Mastrandrea, G. Goldoni, T. Kuroda, T. Mano, K. Sakoda, N. Koguchi, S. Sanguinetti, A. Vinattieri, and M. Gurioli (2008), „*Spectral diffusion and line broadening in single self-assembled GaAs/AlGaAs quantum dot photoluminescence*“, Applied Physics Letters **93**, 162101.
- Abramowitz M., I. A. Stegun (1972), *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs and Mathematical Tables* (10 izd.), Washington, D. C.: United States Government Printing Office.
- Aharonov Y., and D. Bohm (1959), „*Significance of Electromagnetic Potentials in the Quantum Theory*“, Physical Review **115**(3), 485.
- Alavi K., R. L. Aggarwal, and S. H. Groves (1980), „*Interband magnetoabsorption of $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$* “, Physical Review B **21**(3), 1311.
- Arsoski V. i M. Tadić (2011), „*Model ekscitonskih stanja u koncentričnim lateralno spregnutim GaAs/(Al,Ga)As nanoprstenovima u magnetskom polju*“, Zbornik radova 55. Konferencije ETRAN, Banja Vrućica, MO2.7 1-4.
- Arsoski V., M. Tadić, and F. M. Peeters (2010), „*Interband Optical Properties of Concentric Type-I Nanorings in a Normal Magnetic Field*“, Acta Physica Polonica A **117**(5), 733.
- Arsoski V., M. Tadić, and F. M. Peeters (2013a), „*Strain and band-mixing effects on the excitonic Aharonov-Bohm effect in In(Ga)As/GaAs ringlike quantum dots*“, Physical Review B **87**(8), 085314.
- Arsoski V., M. Tadić, and F. M. Peeters (2013b), „*Electric field tuning of the optical excitonic Aharonov-Bohm effect in nanodots grown by droplet epitaxy*“, Physica Scripta, prihvaćeno za publikovanje.
- Arsoski V., N. Čukarić, M. Tadić, and F. M. Peeters (2012), „*Exciton states in a nanocup in the presence of a perpendicular magnetic field*“, Physica Scripta **T149**, 014054.

- Asaro R. J., and W. A. Tiller (1972), „*Interface morphology development during stress corrosion cracking: Part I. Via surface diffusion*“, Metallurgical and Materials Transactions B **3**(7), 1789.
- Atwater H. A., C. C. Ahn, S. S. Wong, G. He, H. Yoshino, and S. Nikzad (1997), „*Energy-Filtered Rheed And Reels For In Situ Real Time Analysis During Film Growth*“, Surface Review and Letters **4**(3), 525.
- Barticevic Z., M. Pacheco, J. Simonin, and C. R. Proetto (2006), „*Coulomb-interaction effects on the electronic structure of radially polarized excitons in nanorings*“, Physical Review B **73**(16), 165311.
- Bayer M., A. Kuther, A. Forchel, A. Gorbunov, V. B. Timofeev, F. Schäfer, J. P. Reithmaier, T. L. Reinecke, and S. N. Walck (1999), „*Electron and Hole g Factors and Exchange Interaction from Studies of the Exciton Fine Structure in In_{0.60}Ga_{0.40}As Quantum Dots*“, Physical Review Letters **82**(8), 1748.
- Bimberg D., M. Grundmann, and N. N. Ledentsov (1999), *Quantum Dot Heterostructures*, Chichester, West Sussex, England: John Wiley & Sons.
- Bimberg D., M. Grundmann, N. N. Ledentsov, S. S. Ruvimov, P. Werner, U. Richter, J. Heydenreich, V. M. Ustinov, P. S. Kopev, and Zh. I. Alferov (1995), „*Self-organization processes in MBE-grown quantum dot structures*“, Thin Solid Films **267**, 32.
- Bir G. L., G. E. Pikus (1972), *Simetrija i deformacionie efekti v poluprovodnikah*, Moskva: Nauka.*
- Boonpeng P., J. Jevasuwan, S. Panyakeow, and S. Ratanathamphan (2010), „*Fabrication of Self-Assembled InGaAs Squarelike Nanoholes on GaAs(001) by Droplet Epitaxy*“, Japanese Journal of Applied Physics **49**(4), 04DH09.
- Bottomley D. J. (2002), „*Thermo-piezochemistry of InAs on GaAs (001)*“, Applied Physics Letters **80**(25), 4747.

* Бир Г. Л., Г. Е. Пикус (1972), *Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках*, Москва: Наука.

- Chao C. Y.-P., and S. L. Chuang (1992), „*Spin-orbit-coupling effects on the valence-band structure of strained semiconductor quantum wells*“, *Physical Review B* **46**(7), 4110.
- Cho A.Y., and J.R. Arthur (1975), „*Molecular Beam Epitaxy*“, *Progress in Solid State Chemistry* **10**(3), 157.
- Chuang S. L. (1991), „*Efficient band-structure calculations of strained quantum wells*“, *Physical Review B* **43**(12), 9649.
- Chuang S. L. (1995), *Physics of Optoelectronic Devices*, New York: John Wiley & Sons, Inc.
- Chwiej T., and B. Szafran (2010), „*Signatures of antibonding hole ground states in exciton spectra of vertically coupled quantum dots in an electric field*“, *Physical Review B* **81**, 075302.
- Cirlin G. E., G. M. Guryanov, A. O. Golubok, S. Ya. Tipsishev, N. N. Ledentsov, P. S. Kop'ev, M. Grundmann, and D. Bimberg (1995), „*Ordering phenomena in InAs strained layer morphological transformation on GaAs (100) surface*“, *Applied Physics Letters*, **67**(1), 97.
- Climente J. I., M. Korkusinski, G. Goldoni, and P. Hawrylak (2008), „*Theory of valence-band holes as Luttinger spinors in vertically coupled quantum dots*“, *Physical Review B* **78**, 115323.
- Culchac F. J., J. C. Granada, and N. Porras-Montenegro (2007), „*Electron ground state in concentric GaAs-(Ga,Al)As single and double quantum rings*“, *Physica Status Solidi (c)* **4**(11), 4139.
- Culchac F. J., N. Porras-Montenegro, and A. Latgé (2008), „*GaAs-(Ga,Al)As double quantum rings: confinement and magnetic field effects*“, *Journal of Physics: Condensed Matter* **20**(28), 285215.
- Čukarić N., V. Arsoški, M. Tadić, and F. M. Peeters (2012), „*Hole states in nanocups in a magnetic field*“, *Physical Review B* **85**, 235425.

- Dai J. H., J. H. Lee, and S. C. Lee (2008), „*Transition Mechanism of InAs Quantum Dot to Quantum Ring Revealed by Photoluminescence Spectra*“, IEEE Photonics Technology Letters **20**(16), 1372.
- Dapkus P. D. (1982), „*Metalorganic Chemical Vapor Deposition*“, Annual Review of Materials Science **12**, 243.
- Davies J. H. (1998), „*Elastic and Piesoelectric Fields Around a Buried Quantum Dot: A Simple Picture*“, Journal of Applied Physics **84**(3), 1358.
- Degani M. H., M. Z. Maialle, G. Medeiros-Ribeiro, and E. Ribeiro (2008), „*Two-dimensional magnetoexcitons in type-II semiconductor quantum dots*“, Physical Review B **78**(7), 075322.
- Ding F., N. Akopian, B. Li, U. Perinetti, A. Govorov, F. M. Peeters, C. C. Bof Bufon, C. Deneke, Y. H. Chen, A. Rastelli, O. G. Schmidt, and V. Zwiller (2010), „*Gate controlled Aharonov-Bohm-type oscillations from single neutral excitons in quantum rings*“, Physical Review B **82**(7), 075309.
- Doty M. F., J. I. Climente, M. Korkusinski, M. Scheibner, A. S. Bracker, P. Hawrylak, and D. Gammon (2009), „*Antibonding Ground States in InAs Quantum-Dot Molecules*“, Physical Review Letters **102**, 047401.
- Downes J. R., D. A. Faux, and E. P. O'Reilly (1997), „*A simple method for calculating strain distributions in quantum dot structures*“, Journal of Applied Physics **81**(10), 6700.
- Downes J. R., D. A. Faux, and E. P. O'Reilly (1995), „*Influence of strain relaxation on the electronic properties of buried quantum wells and wires*“, Materials Science and Engineering: B **35**(1-3), 357.
- Efros Al. L., M. Rosen, M. Kuno, M. Nirmal, D. J. Norris, and M. Bawendi (1996), „*Band-edge exciton in quantum dots of semiconductors with a degenerate valence band: Dark and bright exciton states*“, Physical Review B **54**(7), 4843.
- Eshelby J. D. (1957), „*The Determination of the Elastic Field of an Ellipsoidal Inclusion, and Related Problems*“, Proceedings of the Royal Society A **241**(1226), 376.

- Fomin V. M., V. N. Gladilin, S. N. Klimin, and J. T. Devreese (2007), „*Theory of electron energy spectrum and Aharonov-Bohm effect in self-assembled In_xGa_{1-x}As quantum rings in GaAs*“, Physical Review B **76**(23), 235320.
- Fuhrer A., S. Luscher, T. Ihn, T. Heinzel, K. Ensslin, W. Wegscheider (2002), „*Energy spectra of quantum rings*“, Microelectronic Engineering **63**, 47.
- García J. M., G. Medeiros-Ribeiro, K. Schmidt, T. Ngo, J. L. Feng, A. Lorke, J. Kotthaus, and P. M. Petroff (1997), „*Intermixing and shape changes during the formation of InAs self-assembled quantum dots*“, Applied Physics Letters **71**(14), 2014.
- Godoy M. P. F. de, P. F. Gomes, M. K. K. Nakaema, F. Iikawa, M. J. S. P. Brasil, R. A. Caetano, J. R. Madureira, J. R. R. Bortoleto, M. A. Cotta, E. Ribeiro, G. E. Marques, and A. C. R. Bittencourt (2006), „*Exciton g factor of type-II InP/GaAs single quantum dots*“, Physical Review B **73**(3), 033309.
- Goldstein L., F. Glas, J. Y. Marzin, M. N. Charasse, and G. Le Roux (1985), „*Growth by molecular beam epitaxy and characterization of InAs/GaAs strained-layer superlattices*“, Applied Physics Letters **47**(10), 1099.
- Gong Z., Z. C. Niu, S. S. Huang, Z. D. Fang, B. Q. Sun, and J. B. Xia (2005), „*Formation of GaAs/AlGaAs and InGaAs/GaAs nanorings by droplet molecular-beam epitaxy*“, Applied Physics Letters **87**(9), 093116.
- Govorov A. O., S. E. Ulloa, K. Karrai, and R. J. Warburton (2002), „*Polarized excitons in nanorings and optical Aharonov-Bohm effect*“, Physical Review B **66**(8), 081309.
- Granados D., and J. M. García (2003), „*In(Ga)As self-assembled quantum ring formation by molecular beam epitaxy*“, Applied Physics Letters **82**(15), 2401.
- Granados D., J. M. Garcia, T. Ben, and S. I. Molina (2005), „*Vertical order in stacked layers of self-assembled In(Ga)As quantum rings on GaAs (001)*“, Applied Physics Letters **86**(7), 071918.
- Grinfield M. A. (1986), „*Instability on crack surfaces*“, Doklady Akademii Nauk SSSR **290**, 1358.

- Grochol M., F. Grosse, and R. Zimmermann (2006), „*Optical exciton Aharonov-Bohm effect, persistent current, and magnetization in semiconductor nanorings of type I and II*“, *Physical Review B* **74**(11), 115416.
- Grundmann M., N. N. Ledentsov, R. Heitz, L. Eckey, J. Christen, J. Böhrer, D. Bimberg, S. S. Ruvimov, P. Werner, U. Richter, J. Heydenreich, V. M. Ustinov, A. Yu. Egorov, A. E. Zhukov, P. S. Kopev, and Zh. I. Alferov (1995), „*InAs/GaAs quantum dots radiative recombination from zero-dimensional states*“, *Physica Status Solidi (b)* **188**(1), 249.
- Hanke M., Y. I. Mazur, E. Marega, Z. Y. Jr. AbuWaar, G. J. Salamo, P. Schäfer, M. Schmidbauer (2007), „*Shape transformation during overgrowth of InGaAs/GaAs(001) quantum rings*“, *Applied Physics Letters* **91**(4), 043103.
- Huang S. S., Z. C. Niu, Z. D. Fang, H. Q. Ni, Z. Gong, J. B. Xia (2006), „*Complex quantum ring structures formed by droplet epitaxy*“, *Applied Physics Letters* **89**(3), 031921.
- Ihn T. (2010), *Semiconductor nanostructures*, New York: Oxford University Press, Inc.
- Ivchenko E. L., and G. E. Pikus (1995), *Superlattice and Other Heterostructures*, Berlin: Springer.
- Jogai B. (2000), „*Three-dimensional Strain Field Calculation in Coupled InAs/GaAs Quantum Dots*“, *Journal of Applied Physics* **88**(9), 5050.
- Joyce P. B., T. J. Krzyzewski, G. R. Bell, B. A. Joyce, and T. S. Jones (1998), „*Composition of InAs quantum dots on GaAs(001): Direct evidence for (In,Ga)As alloying*“, *Physical Review B* **58**(24), R15981.
- Keating P. N. (1966), „*Effect of Invariance Requirements on the Elastic Strain Energy of Crystals with Application to the Diamond Structure*“, *Physical Review* **145**(2), 637.
- Keyser U. F., C. Fühner, S. Borck, R. J. Haug, M. Bichler, G. Abstreiter, and W. Wegscheider (2003), „*Kondo Effect in a Few-Electron Quantum Ring*“, *Physical Review Letters* **90**(19), 196601.

- Kleemans N. A. J. M., I. M. A. Bominaar-Silkens, V. M. Fomin, V. N. Gladilin, D. Granados, A. G. Taboada, J. M. Garcia, P. Offermans, U. Zeitler, P. C. M. Christianen, C. J. Maan, J. T. Devreese, and P. M. Koenraad (2007), „*Oscillatory Persistent Currents in Self-Assembled Quantum Rings*“, Physical Review Letters **99**(14), 146808.
- Kleemans N. A. J. M., J. H. Blokland, A. G. Taboada, H. C. M. van Genuchten, M. Bozkurt, V. M. Fomin, V. N. Gladilin, D. Granados, J. M. García, P. C. M. Christianen, J. C. Maan, J. T. Devreese, and P. M. Koenraad (2009a), „*Excitonic behavior in self-assembled InAs/GaAs quantum rings in high magnetic fields*“, Physical Review B **80**(15), 155318.
- Kleemans N. A. J. M., J. van Bree, M. Bozkurt, P. J. van Veldhoven, P. A. Nouwens, R. Nötzel, A. Yu. Silov, P. M. Koenraad, and M. E. Flatté (2009b), „*Size-dependent exciton g factor in self-assembled InAs/InP quantum dots*“, Physical Review B **79**(4), 045311.
- Krenner H. J., E. C. Clark, T. Nakaoka, M. Bichler, C. Scheurer, G. Abstreiter, and J. J. Finley (2006), „*Optically Probing Spin and Charge Interactions in a Tunable Artificial Molecule*“, Physical Review Letters **97**, 076403.
- Krenner H. J., M. Sabathil, E. C. Clark, A. Kress, D. Schuh, M. Bichler, G. Abstreiter, and J. J. Finley (2005), „*Direct Observation of Controlled Coupling in an Individual Quantum Dot Molecule*“, Physical Review Letters **94**(5), 057402.
- Kuroda T., T. Mano, T. Ochiai, S. Sanguinetti, K. Sakoda, G. Kido, and N. Koguchi (2005), „*Optical transitions in quantum ring complexes*“, Physical Review B **72**(20), 205301.
- Landau L. D., E. M. Lifšic (2003), *Teorija uprugosti*, Moskva: Fizmatlit.*
- Lawaetz P. (1971), „*Valence-Band Parameters in Cubic Semiconductors*“, Physical Review B **4**(10), 3460.
- Lee B. C., O. Voskoboynikov, and C. P. Lee (2004), „*III–V Semiconductor nano-rings*“, Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures **24**(1-2), 87.

* Ландау Л. Д., Е. М. Лифшиц (2003), *Теория упругости*, Москва: Физматлит.

- Lee J. H., Zh. M. Wang, Z. Y. Abuwaar, N. W. Strom, and G. J. Salamo (2006), „*Evolution between self-assembled single and double ring-like nanostructures*“, *Nanotechnology* **17**(15), 3973.
- Leonard D., M. Krishnamuthy, C. M. Reaves, S. P. DenBaars, and P. M. Petroff (1993), „*Direct formation of quantum-sized dots from uniform coherent islands of InGaAs on GaAs surfaces*“, *Applied Physics Letters* **63**(23), 3203.
- Li B., and F. M. Peeters (2011), „*Tunable optical Aharonov-Bohm effect in a semiconductor quantum ring*“, *Physical Review B* **83**(11), 115448.
- Li X. L., and G. W. Yang (2008), „*Growth Mechanisms of Quantum Ring Self-Assembly upon Droplet Epitaxy*“, *Journal of Physical Chemistry C* **112**(20), 7693.
- Lorke A., R. Blossey, J. M. García, M. Bichler, and G. Abstreiter (2002), „*Morphological transformation of In(Ga)As islands, fabricated by Stranski-Krastanov growth*“, *Material Science and Engineering: B* **88**(2), 225.
- Lorke A., R. J. Luyken, J. M. Garcia, and P. M. Petroff (2001), „*Growth and electronic properties of self-organized quantum rings*“, *Japanese Journal of Applied Physics* **40**, 1857.
- Luttinger J. M., and W. Kohn (1955), „*Motion of Electrons and Holes in Perturbed Periodic Fields*“, *Physical Review Letters* **97**(4), 869.
- Mano T., and N. Koguchi. (2005a), „*Nanometer-scale GaAs ring structure grown by droplet epitaxy*“, *Journal of Crystal Growth* **278**, 108.
- Mano T., R. Nötzel, D. Zhou, G. J. Hamhuis, T. J. Eijkemans, and J. H. Wolter. (2005b), „*Complex quantum dot arrays formed by combination of self-organized anisotropic strain engineering and step engineering on shallow patterned substrates*“, *Journal of Applied Physics* **97**(1), 014304.
- Mano T., T. Kuroda, M. Yamagiwa, G. Kido, K. Sakoda, and N. Koguchi (2006), „*Lasing in GaAs/AlGaAs self-assembled quantum dots*“, *Applied Physics Letters* **89**(18), 183102.

- Mano T., T. Kuroda, S. Sanuginetti, T. Ochiai, T. Tateno, J. S. Kim, T. Noda, M. Kawabe, K. Sakoda, G. Kido, and N. Koguchi (2005c), „*Self-assembly of concentric quantum double rings*“, *Nano Letters* **5**(3), 425.
- Martin R. M. (1970), „*Elastic Properties of ZnS Structure Semiconductors*“, *Physical Review B* **1**(10), 4005.
- Maslov A. V., and D. S. Citrin (2003), „*Enhancement of the Aharonov-Bohm effect of neutral excitons in semiconductor nanorings with an electric field*“, *Physical Review B* **67**(12), 121304.
- Mühle A., W. Wegscheider, and R. J. Haug (2007), „*Coupling in concentric double quantum rings*“, *Applied Physics Letters* **91**(13), 133116.
- Nakaoka T., T. Saito, J. Tatebayashi, and Y. Arakawa (2004), „*Size, shape, and strain dependence of the g factor in self-assembled In(Ga)As quantum dots*“, *Physical Review B* **70**(23), 235337.
- Offermans P., P. M. Koenraad, J. H. Wolter, D. Granados, J. M. Garcia, V. M. Fomin, N. Gladilin, and J. T. Devreese (2005), „*Atomic-scale structure of self-assembled In(Ga)As quantum rings in GaAs*“, *Applied Physics Letters* **87**(13), 131902.
- Ostwald W. (1900), „*Über die vermeintliche Isomerie des roten und gelben Quecksilberoxyds*“, *Zeitschrift für physikalische Chemie* **34**, 495.
- Pedersen F. B., and Y.-C. Chang (1996), „*Energy levels of one and two holes in parabolic quantum dots*“, *Physical Review B* **53**(3), 1507.
- Percival C., P. A. Houston, J. Woodhead, M. Al-Khafaji, G. Hill, J. S. Roberts, and A. P. Knights (2000), „*GaAs quantum wire lasers grown on V-grooved substrates isolated by self-aligned ion implantation*“, *IEEE Transactions on Electron Devices* **47**(9), 1769.
- Pryor C. E., and M. E. Flatté (2006), „*Landé g Factors and Orbital Momentum Quenching in Semiconductor Quantum Dots*“, *Physical Review Letters* **96**,**99E**(2), 026804,179901(E).

- Rastelli A., S. Stufler, A. Schliwa, R. Songmuang, C. Manzano, G. Costantini, K. Kern, A. Zrenner, D. Bimberg, and O. G. Schmidt (2004), „*Hierarchical Self-Assembly of GaAs/AlGaAs Quantum Dots*“, Physical Review Letters **92**(16), 166104.
- Ribeiro E., A. O. Govorov, W. Carvalho, Jr., and G. Medeiros-Ribeiro (2004), „*Aharonov-Bohm Signature for Neutral Polarized Excitons in Type-II Quantum Dot Ensembles*“, Physical Review Letters **92**(12), 126402.
- Robinson J. T., P. G. Evans, J. A. Liddle, and O. D. Dubon (2007), „*Chemical Nanomachining of Silicon by Gold-Catalyzed Oxidation*“, Nano Letters **7**(7), 2009.
- Sanguinetti S., K. Watanabe, T. Kuroda, F. Minami, Y. Gotoh, and N. Koguchi (2002), „*Effects of post-growth annealing on the optical properties of self-assembled GaAs/AlGaAs quantum dots*“, Journal of Crystal Growth **242**, 321.
- Sanguinetti S., K. Watanabe, T. Tateno, M. Gurioli, P. Werner, M. Wakaki, and N. Koguchi (2003), „*Modified droplet epitaxy GaAs/AlGaAs quantum dots grown on a variable thickness wetting layer*“, Journal of Crystal Growth **253**, 71.
- Scheibner M., M. F. Doty, I. V. Ponomarev, A. S. Bracker, E. A. Stinaff, V. L. Korenev, T. L. Reinecke, and D. Gammon (2007), „*Spin Fine Structure of Optically Excited Quantum Dot Molecules*“, Physical Review B **75**, 245318.
- Schlesinger T. E., and T. Kuech (1986), „*Determination of the interdiffusion of Al and Ga in undoped (Al,Ga)As/GaAs quantum wells*“, Applied Physics Letters **49**(9), 519.
- Silveira J., J. M. García, and F. Briones (2001), „*Surface stress effects during MBE growth of III–V semiconductor nanostructures*“, Journal of Crystal Growth **227–228**, 995.
- Singh J. (1993), *Physics of Semiconductors and Their Heterostructures*, New York: Mc Graw Hill.
- Somaschini C., S. Bietti, N. Koguchi, and S. Sanguinetti (2009), „*Fabrication of Multiple Concentric Nanoring Structures*“, Nano Letters **9**(10), 3419.

- Somaschini C., S. Bietti, S. Sanguinetti, N. Koguchi, and A. Fedorov (2010), „*Self-assembled GaAs/AlGaAs coupled quantum ring-disk structures by droplet epitaxy*“, *Nanotechnology* **21**(12), 125601.
- Stranski I. N., and L. Krastanow (1938), „*Zur Theorie der orientierten Ausscheidung von Ionenkristallen aufeinander*“, *Sitzungsberichte der Akademie der Wissenschaften in Wien, Abhandlungen der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Klasse IIb* **146**, 797-810.
- Szafran B., and F.M. Peeters (2005), „*Few-electron eigenstates of concentric double quantum rings*“, *Physical Review B* **72**(15), 155316.
- Tadić M., and F. M. Peeters (2004), „*Binding of electrons, holes, and excitons in symmetric strained InP/In_{0.49}Ga_{0.51}P triple quantum-dot molecules*“, *Physical Review B* **70**(19), 195302.
- Tadić M., and F. M. Peeters (2009), „*Excitonic properties of strained triple quantum-ring molecules*“, *Physical Review B* **79**(15), 153305.
- Tadić M., F. M. Peeters, K. L. Janssens, M. Korkusiński, and P. Hawrylak (2002a), „*Strain and band edges in single and coupled cylindrical InAs/GaAs and InP/InGaP self-assembled quantum dots*“, *Journal of Applied Physics* **92**(10), 5819.
- Tadić M., F. M. Peeters, and K. L. Janssens (2002b), „*Effect of isotropic versus anisotropic elasticity on the electronic structure of cylindrical InP/In_{0.49}Ga_{0.51}P self-assembled quantum dots*“, *Physical Review B* **65**(16), 165333.
- Tadić M., N. Čukarić, V. Arsoski, and F. M. Peeters (2011), „*Excitonic Aharonov-Bohm effect: Unstrained versus strained type-I semiconductor nanorings*“, *Physical Review B* **84**(12), 125307.
- Tadić M., V. Arsoski, N. Čukarić, and F. M. Peeters (2010), „*The Optical Excitonic Aharonov–Bohm Effect in a Few Nanometer Wide Type-I Nanorings*“, *Acta Physica Polonica A* **117**(6), 974.
- Tanaka K., N. Kotera, and H. Nakamura (1999), „*Photocurrent spectroscopy and study of subband parameters for heavy-holes in nanoscale In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As multiquantum well structures*“, *Journal of Applied Physics* **85**(8), 4071.

- Teodoro M. D., V. L. Campo, Jr., V. Lopez-Richard, E. Marega, Jr., G. E. Marques, Y. Galvão Gobato, F. Iikawa, M. J. S. P. Brasil, Z. Y. AbuWaar, V. G. Dorogan, Yu. I. Mazur, M. Benamara, and G. J. Salamo (2010), „*Aharonov-Bohm Interference in Neutral Excitons: Effects of Built-In Electric Fields*“, Physical Review Letters **104**(8), 086401.
- Vanderbilt D., and L. K. Wickham (1991), „*Elastic Energies of Coherent Germanium Islands on Silicon*“, Material Research Society Proceedings **202**, 555.
- Varshni Y. P. (1967), „*Temperature dependence of the energy gap in semiconductors*“, Physica **34**(1), 149.
- Vurgaftman I., J. R. Meyer, and L. R. Ram-Mohan (2001), „*Band parameters for III–V compound semiconductors and their alloys*“, Journal of Applied Physics **89**(11), 5815.
- Wang C. X., and G. W. Yang (2005a), „*Thermodynamics of metastable phase nucleation*“, Materials Science and Engineering **R49**, 157.
- Wang Z. M., K. Holmes, J. L. Skultz, and G. J. Salamo (2005b), „*Self-assembly of GaAs holed nanostructures by droplet epitaxy*“, Physica Status Solidi A **202**(8), R85.
- Watanabe K., N. Koguchi, and Y. Gotoh (2000), „*Fabrication of GaAs Quantum Dots by Modified Droplet Epitaxy*“, Japanese Journal of Applied Physics **39**, L79.
- Watanabe K., S. Tsukamoto, Y. Gotoh, and N. Koguchi (2001), „*Photoluminescence studies of GaAs quantum dots grown by droplet epitaxy*“, Journal of Crystal Growth **227-228**, 1073.
- Wu J., Z. Li, D. Shao, M. O. Manasreh, V. P. Kunets, Z. M. Wang, G. J. Salamo, and B. D. Weaver (2009), „*Multicolor photodetector based on GaAs quantum rings grown by droplet epitaxy*“, Applied Physics Letters **94**(17), 171102.
- Yang G. W., and B. X. Liu (2000), „*Nucleation thermodynamics of quantum-dot formation in V-groove structures*“, Physical Review B **61**(7), 4500.

Yu L. W., K. J. Chen, J. Song, J. Xu, W. Li, X. F. Li, J. M. Wang, and X. F. Huang
(2007), „*New Self-Limiting Assembly Model for Si Quantum Rings on Si(100)*“,
Physical Review Letters **98**(16), 166102.

Yu Y.P., M. Cardona (1994), *Fundamentals of Semiconductors*, Heidelberg: Springer.

Dodatak A

Aharonov-Bohmov efekat

U klasičnoj elektrodinamici električni skalar potencijal φ i magnetski vektor potencijal \vec{A} nisu neposredno merljive fizičke veličine, tako da u Maxwellovim jednačinama eksplicitno figurišu električno i magnetsko polje, a ne pridruženi im potencijali. Ovi potencijali, uz određene kalibracije, se mogu koristiti za dobijanje ekvivalentnih kanonskih izraza za klasične jednačine. Međutim, u kvantnoj mehanici fundamentalni izrazi su u kanonskoj formi, pa se potencijali ne mogu eliminisati iz jednačina.

Značaj ovih potencijala demonstrirali su Aharonov i Bohm u misaonom eksperimentu (Aharonov i Bohm, 1959). Oni su pokazali da magnetski vektor potencijal može da utiče na ponašanje naelektrisane čestice, čak i ako se ona kreće u oblasti u kojoj je polje nula. Posmatrajmo interferencionu šemu prikazanu na sl. A.1. Neka se posmatra interferencija u tački P na ekranu. Postoje dve alternativne putanje γ_1 i γ_2 koje zatvaraju površ kroz koju penetrira fluks Φ magnetskog polja opisanog vektor potencijalom $\vec{A}(\vec{r})$. Tada je promena faze duž i -te putanje koja je posledica postojanja vektor potencijala u oblasti kretanja čestice naelektrisanja $-q$ (Aharonov i Bohm, 1959):

$$\theta_i(\Phi) = \theta_i(0) - \frac{q}{\hbar} \int_{\gamma_i} \vec{A} d\vec{l}, \quad (\text{A.1})$$

dok je fazna razlika između dve putanje:

$$\delta(\Phi) = \delta(0) - \frac{q}{\hbar} \int_{\gamma_1 - \gamma_2} \vec{A} d\vec{l} = \delta(0) - 2\pi \frac{\Phi}{\Phi_0}, \quad (\text{A.2})$$

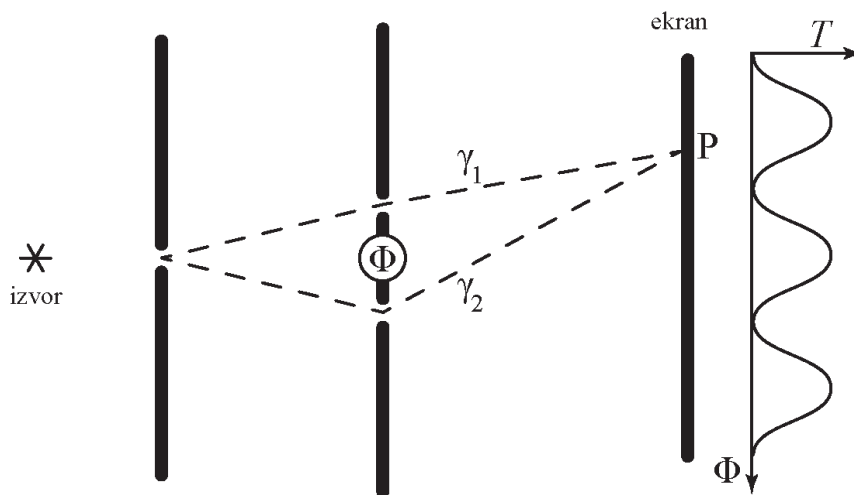
gde je $\Phi_0 = h/q$ kvant fluksa magnetskog polja. Tada je, u posmatranoj tački P na ekranu, verovatnoća transmisije zavisna od fluksa (Ihn, 2010):

$$T(\Phi) = T_1(0) + T_2(0) + 2\sqrt{T_1(0)T_2(0)} \cos\left[\delta(0) - 2\pi \frac{\Phi}{\Phi_0}\right], \quad (\text{A.3})$$

gde je $T_i(0)$ verovatnoća transmisije kroz i -ti otvor do tačke P na ekranu, a dodatni član $2\pi \cdot \Phi / \Phi_0$, koji je posledica fluksa magnetskog polja, naziva se *Aharonov-Bohmova faza*. Očigledno je da je transmitansa u posmatranoj tački periodična funkcija od fluksa:

$$T(\Phi) = T(\Phi + n\Phi_0), \quad (\text{A.4})$$

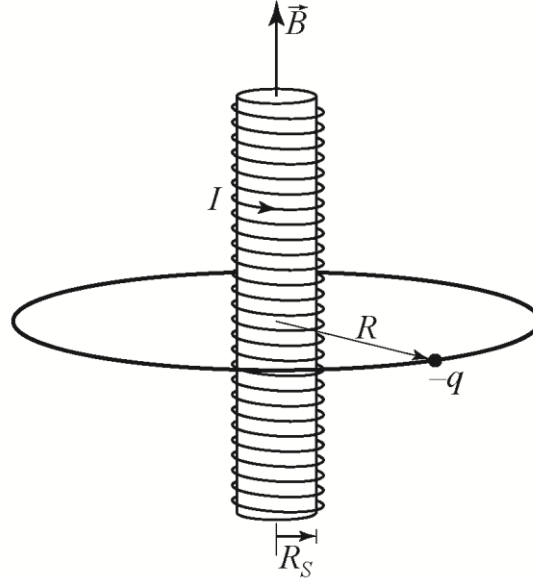
gde je n – celobrojna vrednost.



Slika A.1. Prikaz interferencione šeme za demonstraciju Aharonov-Bohmovog efekta.

Analizirani slučaj je prilično uopšten. Kako bi razmotrili uticaj AB efekta na strukture tipa nanoprstena, razmotrimo slučaj naelektrisane čestice koja se kreće po kružnoj putanji poluprečnika R unutar koje je postavljen idealan solenoid teorijski beskonačne dužine i poluprečnika R_S ($R_S < R$), kao na sl. A.2. Ukoliko kroz navoje solenoida protiče struja I unutar solenoida postojaće uniformno magnetsko polje indukcije $\vec{B} = B\vec{e}_z$, dok će van solenoida polje biti jednako nuli. Fluks polja kroz površ koju ograničava trajektorija c naelektrisane čestice je:

$$\Phi = \oint_c \vec{A} d\vec{l} = \oint_c A(\rho) \cdot \vec{e}_\varphi dl \cdot \vec{e}_\varphi = \oint_c A(\rho) dl = 2\pi R A(R). \quad (\text{A.5})$$



Slika A.2. Skica naelektrisane čestice $-q$ koja se kreće po kružnoj putanji poluprečnika R unutar koje je postavljen idealan solenoid teorijski beskonačne dužine i poluprečnika R_S , gde je $R_S < R$.

Schrödingerova jednačina za slučaj jednodimenzionone kružne putanje poluprečnika R je:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{1}{2m} \left(\hat{\vec{p}} + q\vec{A} \right)^2 + V(\vec{r}) = \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \frac{1}{R} \vec{e}_\varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} + qA(R) \cdot \vec{e}_\varphi \right)^2 + V(R) = \\ &= \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \frac{1}{R} \vec{e}_\varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} + q \frac{\Phi}{2\pi R} \cdot \vec{e}_\varphi \right)^2 + V(R) = \frac{\hbar^2}{2mR^2} \left(-i \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{\Phi}{\Phi_0} \right)^2 + V(R), \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

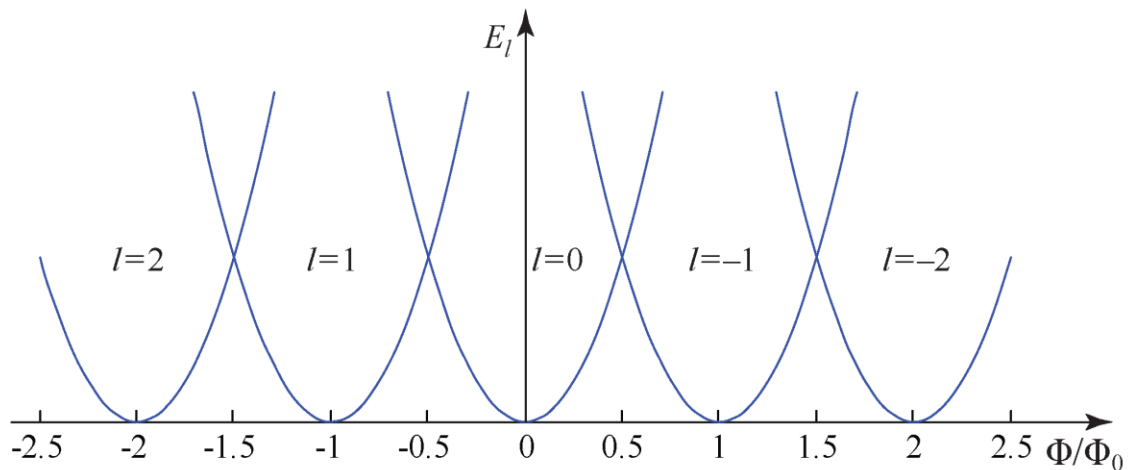
gde je m masa naelektrisane čestice, a potencijal V je aksijalno simetričan i konfinira česticu na putanju poluprečnika R . Zbog aksijalne simetrije talasna funkcija je data sa:

$$\psi(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{il\varphi}, \quad (\text{A.7})$$

gde je l orbitalni kvantni broj, a svojstvene vrednosti energije su:

$$E_l = \frac{\hbar^2}{2mR^2} \left(l + \frac{\Phi}{\Phi_0} \right)^2, \quad (\text{A.8})$$

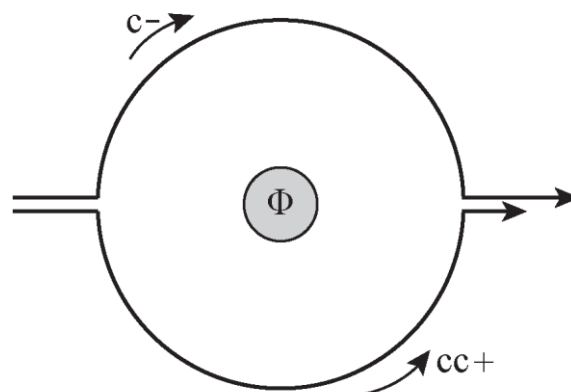
gde je $V(R)$ usvojeno za referentnu vrednost energije. Skica disperzionih relacija za različite vrednosti orbitalnog kvantnog broja l data je na sl. A.3.



Slika A.3. Skica svojstvenih vrednosti za eksperiment sa sl. A.2 za vrednosti orbitalnog kvantnog broja u opsegu $l \in [-2, 2]$ u funkciji Φ/Φ_0 .

U originalno predloženom eksperimentu (Aharonov i Bohm, 1959) snop elektrona se pocepa na dva identična snopa koji prolaze sa različitih strana pored dugačkog solenoida nakon čega se spajaju na ekranu gde se posmatra interferentna slika. Šema razmatranog eksperimenta je data na sl. A.4, gde je usvojeno da se nakon cepanja snopovi kreću po polukružnim putanjama radijusa R . Faza koju akumuliraju snopovi biće:

$$\theta_{\pm}(\Phi) = \theta_i(0) - \frac{q}{\hbar} \int_{\gamma_{\pm}} \vec{A} d\vec{l} = \mp \pi \frac{\Phi}{\Phi_0}, \quad (\text{A.9})$$



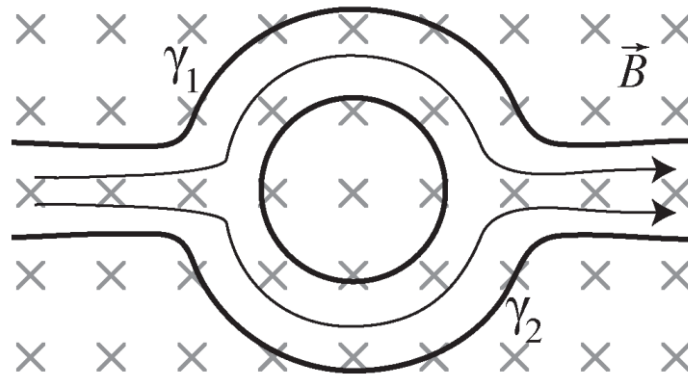
Slika A.4. Šematski prikaz putanja oko prstena u smeru kazaljke na satu “c-” i u suprotnom smeru “cc+”.

pa je ukupna fazna razlika nakon spajanja:

$$\delta(\Phi) = -2\pi \frac{\Phi}{\Phi_0}. \quad (\text{A.10})$$

Merenjem izmene intenziteta pri interferenciji u funkciji promene fluksa Φ kroz solenoid može se eksperimentalno verifikovati AB efekat.

Na osnovu misaonog eksperimenta prikazanog na sl. A.4 može se konstruisati interferometar kao na sl. A.5. U ovom interferometru snop elektrona koji ulazi u interferometar (levo) deli se na dva talasa jednakih amplituda, pri čemu svaki talas obilazi po jedan krak polukružne petlje. Na drugom kraju interferometra (desno) talasi se superponiraju i posmatra se interferentna slika. U standardnoj realizaciji u kojoj bi incidentni talas padao na dva jednaka otvora, nakon difrakcije na otvorima veliki deo zračenja bi se rasejao daleko od oblasti u kojoj postoji magnetsko polje i ne bi se mogao fokusirati u posmatranu tačku na ekranu. Stoga se za realizaciju ovog ekperimenta koristi struktura kvantnog prstena sa kontaktima (npr. može se koristiti struktura slična jednoelektronskom tranzistoru), kao na sl. A.5.

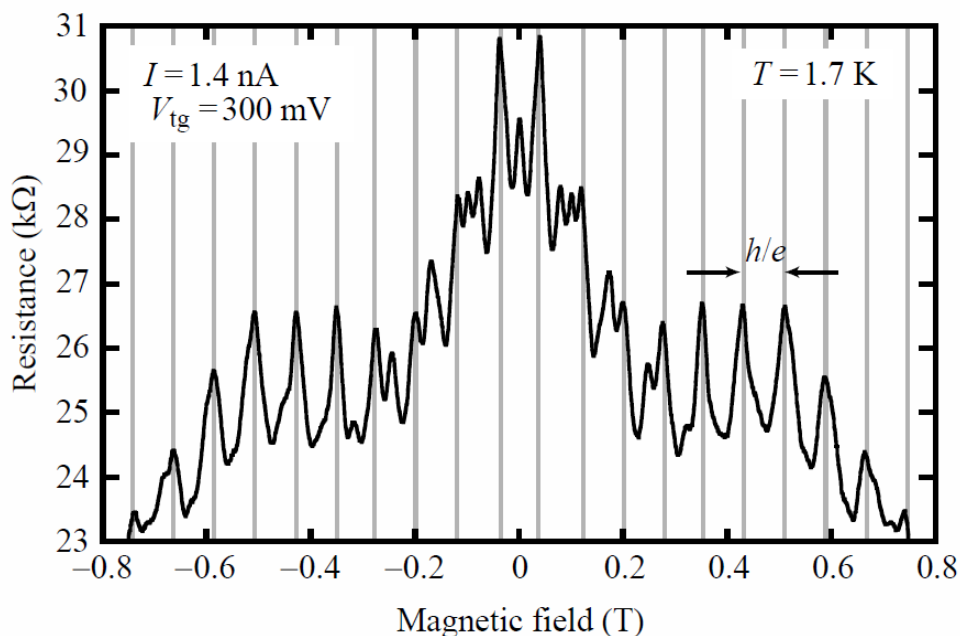


Slika A.5. Šematski prikaz kvantnog prstena korišćenog za realizaciju Aharonov-Bohmovog eksperimenta.

Za razliku od originalno predloženog eksperimenta, gde su se elektroni kretali u oblasti gde ne postoji magnetsko polje, ovde to nije moguće praktično realizovati. Stoga će na elektrone koji prolaze kroz prsten delovati i Lorentzova sila, koja bi prouzrokovala ciklotronsko kretanje elektrona ukoliko bi on bio slobodan. Kako je elektron konfiniran u oblasti prstena ovo se neće desiti. Može se reći da su efekti

Lorenzove sile zanemarljivi ukoliko je ciklotronski radijus mnogo manji od radijusa prstena, što je u ovom eksperimentu i ispunjeno.

Kao rezultat interferencije dobija se karakteristična slika (videti sl. A.6). Ovde je prikazana zavisnost otpornosti strukture (magnetootpornost) u funkciji primenjene magnetske indukcije B . Uočava se jasna periodičnost smene maksimuma i minimuma u snimljenoj zavisnosti, gde je period oscilacija Φ_0 . Interferencija je konstruktivna kada ceo broj kvanta fluksa prolazi kroz prsten, što odgovara minimumima na slici A.6. Kako je prsten konačne širine dobijena zavisnost nije idealna. Ukoliko bi prsten bio beskonačno tanak, što je idealizovana predstava, za vrednosti fluksa koje odgovaraju neparnom broju polovina kvanta fluksa otpornost bi bila beskonačno velika. Pored uočene preiodičnosti na sl. A.6 mogu se uočiti i oscilacije dvostruko veće učestanosti. One su posledica refleksije dela talasa na drugom kraju prstena. Reflektovani talasi se kreću prema ulaznoj grani istom putanjom kojom su i došli. Čak i kada bi se u potpunosti mogli zanemariti efekti vezani za interakciju elektrona sa materijalom prstena, kao posledica refleksije postojala bi konačna efektivna otpornost analiziranog sistema ($R_{eff} > 0$), tj. na izlazu bi se registrovao uvek intenzitet manji od incidentnog.



Slika A.6. Eksperimentalni rezultati merenja otpornosti pri prostiranju snopa kroz strukturu kvantnog prstena šematski prikazanog na sl. A.5 (Ihn, 2010).

Dodatak B

Parametri zonske strukture III-IV jedinjenja i legura

Tabela B.1. Parametri zonske strukture GaAs (Vurgaftman et al., 2001).

| Parametar | Naziv | Preporučena vrednost |
|----------------------------|--|----------------------|
| E_g^Γ (eV) | Energetski procep u Γ tački | 1,519 |
| α^Γ (meV/K) | Varshnijev parametar α u Γ tački | 0,5405 |
| β^Γ (K) | Varshnijev parametar β u Γ tački | 204 |
| $m_{e,\Gamma}^*$ (m_0) | efektivna masa elektrona na 0 K u Γ tački | 0,067 |
| γ_1 | Luttingerov parametar γ_1 | 6,98 |
| γ_2 | Luttingerov parametar γ_2 | 2,06 |
| γ_3 | Luttingerov parametar γ_3 | 2,93 |
| E_p (eV) | Kaneov parametar | 28,8 |
| a_c (eV) | deformacioni potencijal u provodnoj zoni | -7,17 |
| a_v (eV) | deformacioni potencijal u valentnoj zoni | 1,16 |
| b (eV) | deformacioni potencijal b | -2 |
| d (eV) | deformacioni potencijal d | -4,8 |
| c_{11} (GPa) | konstanta (moduo) elastičnosti $C_{x_i x_i x_i x_i}$ | 1221 |
| c_{12} (GPa) | konstanta (moduo) elastičnosti $C_{x_i x_i x_j x_j}$ | 566 |
| c_{44} (GPa) | konstanta (moduo) elastičnosti $C_{x_i x_j x_i x_j}$ | 600 |

Tabela B.2. Parametri zonske strukture AIAs (Vurgaftman et al., 2001).

| Parametar | Naziv | Preporučena vrednost |
|----------------------------|--|----------------------|
| E_g^Γ (eV) | Energetski procep u Γ tački | 3,099 |
| α^Γ (meV/K) | Varshnijev parametar α u Γ tački | 0,885 |
| β^Γ (K) | Varshnijev parametar β u Γ tački | 530 |
| E_g^X (eV) | Energetski procep u X tački | 2,24 |
| α^X (meV/K) | Varshnijev parametar α u X tački | 0,870 |
| β^X (K) | Varshnijev parametar β u X tački | 530 |
| $m_{e,\Gamma}^*$ (m_0) | efektivna masa elektrona na 0 K u Γ tački | 0,15 |
| γ_1 | Luttingerov parametar γ_1 | 3,76 |
| γ_2 | Luttingerov parametar γ_2 | 0,82 |
| γ_3 | Luttingerov parametar γ_3 | 1,42 |
| E_p (eV) | Kaneov parametar | 21,1 |
| a_c (eV) | deformacioni potencijal u provodnoj zoni | -5,64 |
| a_v (eV) | deformacioni potencijal u valentnoj zoni | 2,47 |
| b (eV) | deformacioni potencijal b | -2,3 |
| d (eV) | deformacioni potencijal d | -3,4 |
| c_{11} (GPa) | konstanta (moduo) elastičnosti $C_{x_i x_i x_i x_i}$ | 1250 |
| c_{12} (GPa) | konstanta (moduo) elastičnosti $C_{x_i x_i x_j x_j}$ | 534 |
| c_{44} (GPa) | konstanta (moduo) elastičnosti $C_{x_i x_j x_i x_j}$ | 542 |

Tabela B.3. Parametri zonske strukture InAs (Vurgaftman et al., 2001).

| Parametar | Naziv | Preporučena vrednost |
|----------------------------|--|----------------------|
| E_g^Γ (eV) | Energetski procep u Γ tački | 0,417 |
| α^Γ (meV/K) | Varshnijev parametar α u Γ tački | 0,276 |
| β^Γ (K) | Varshnijev parametar β u Γ tački | 93 |
| $m_{e,\Gamma}^*$ (m_0) | efektivna masa elektrona na 0 K u Γ tački | 0,026 |
| γ_1 | Luttingerov parametar γ_1 | 20 |
| γ_2 | Luttingerov parametar γ_2 | 8,5 |
| γ_3 | Luttingerov parametar γ_3 | 9,2 |
| E_p (eV) | Kaneov parametar | 21,5 |
| a_c (eV) | deformacioni potencijal u provodnoj zoni | -5,08 |
| a_v (eV) | deformacioni potencijal u valentnoj zoni | 1 |
| b (eV) | deformacioni potencijal b | -1,8 |
| d (eV) | deformacioni potencijal d | -3,6 |
| c_{11} (GPa) | konstanta (moduo) elastičnosti $C_{x_i x_i x_i x_i}$ | 832,9 |
| c_{12} (GPa) | konstanta (moduo) elastičnosti $C_{x_i x_i x_j x_j}$ | 452,6 |
| c_{44} (GPa) | konstanta (moduo) elastičnosti $C_{x_i x_j x_i x_j}$ | 395,9 |

Tabela B.4. Parametri zakrivljenja za (Al,Ga)As (Vurgaftman et al., 2001).

| Parametar | Naziv | Preporučena vrednost |
|-------------------|---------------------------------------|----------------------|
| E_g^Γ (eV) | za energetski procep u Γ tački | $-0,127+1,310x$ |
| E_g^X (eV) | za energetski procep u X tački | 0,055 |

Tabela B.5. Parametri zakrivljenja za (In,Ga)As (Vurgaftman et al., 2001).

| Parametar | Naziv | Preporučena vrednost |
|----------------------------|--|----------------------|
| E_g^Γ (eV) | za energetski procep u Γ tački | 0,477 |
| $m_{e,\Gamma}^*$ (m_0) | za efektivnu masu elektrona na 0 K u Γ tački | 0,0091 |
| $m_{hh,[001]}^*$ (m_0) | za efektivnu masu teške šupljine na 0 K u Γ tački u kristalografskom pravcu [001] | -0,145 |
| $m_{lh,[001]}^*$ (m_0) | za efektivnu masu lake šupljine na 0 K u Γ tački u kristalografskom pravcu [001] | 0,0202 |
| $\gamma_3 - \gamma_2$ | za razliku Luttingerovih parametara γ_3 i γ_2 | 0,481 |
| E_p (eV) | za Kaneov parametar | -1,48 |
| a_c (eV) | za deformacioni potencijal u provodnoj zoni | 2,61 |

Za podatke date u tabeli B.5 veza Luttingerovih parametara i vrednosti efektivnih masa šupljine u kristalografskom pravcu [001] data je relacijom (2.2.20).

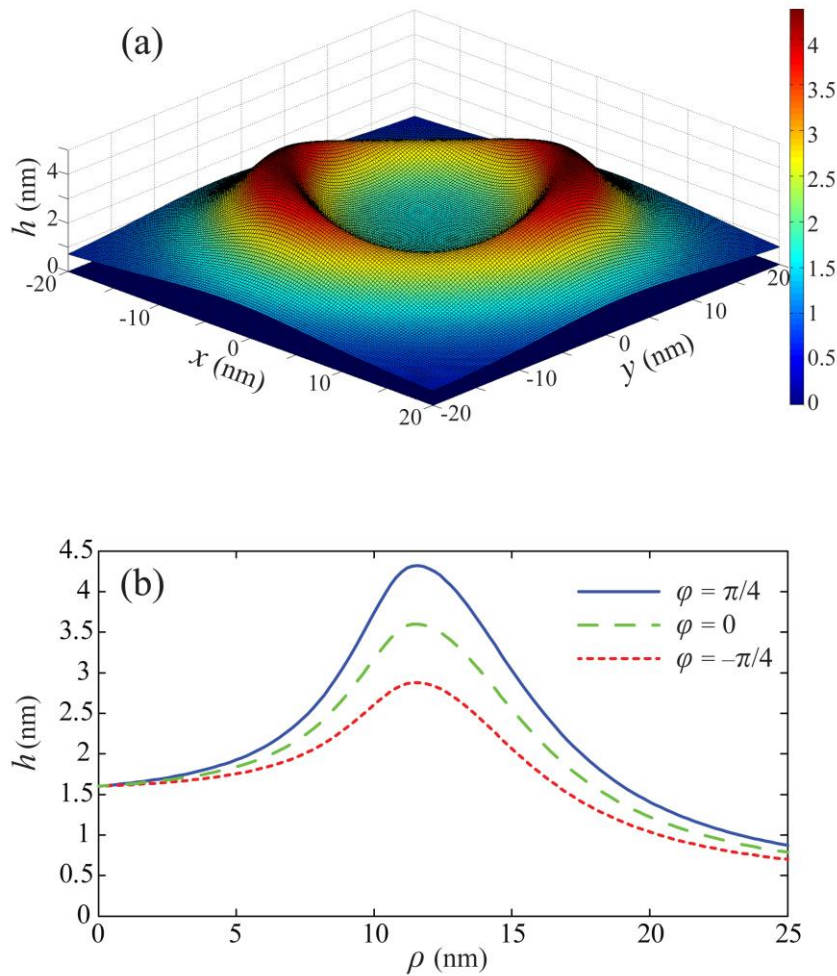
Dodatak C

Uticaj anizotropije elastičnosti na lokalizaciju elektrona i šupljina u realnim strukturama

Eksperimentalno je utvrđeno da oblik realnih RLQD-ova odstupa od aksijalno simetričnog (Offermans et al., 2005; Fomin et al., 2007). Dobar opis granične površi In(Ga)As tačke i GaAs matrice pokazao je model u kojem je usvojeno da je donja granična površ idealno ravna i paralelna (x,y) ravni, dok se debljina sloja In(Ga)As (tj. visina tačke) menja u funkciji položaja u (x,y) ravni. Funkcija visine tačke u cilindričnim koordinatama glasi (Offermans et al., 2005; Fomin et al., 2007):

$$h(\rho, \varphi) = \begin{cases} h_0 + \frac{[h_M(1 + \xi \sin(2\varphi)) - h_0][1 - (\rho/R - 1)^2]}{[(\rho - R)/\gamma_0]^2 + 1}, & \rho \leq R \\ h_\infty + \frac{[h_M(1 + \xi \sin(2\varphi)) - h_\infty]}{[(\rho - R)/\gamma_\infty]^2 + 1} & \rho > R \end{cases}. \quad (\text{C.1})$$

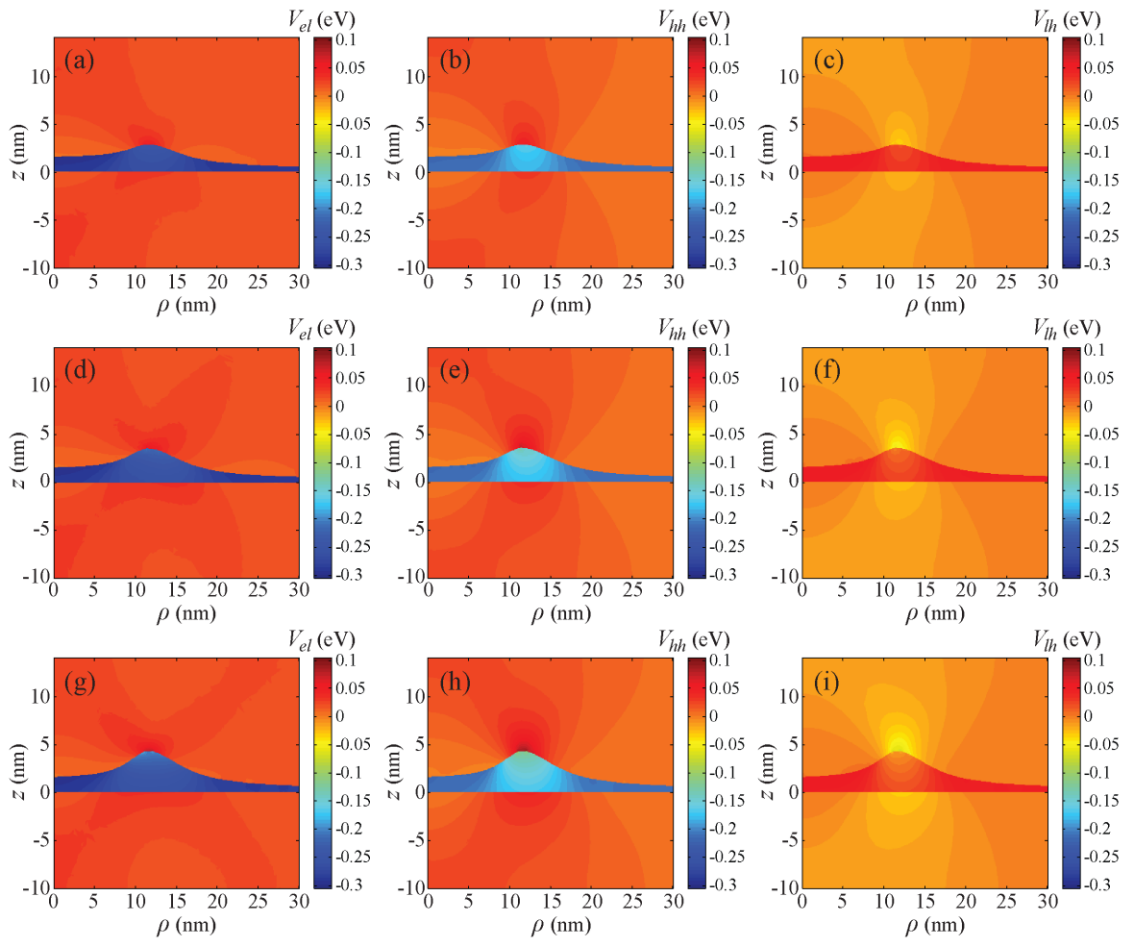
Parametri koji figurišu u jednačini definisani su u poglavlju 4.3, φ predstavlja polarni ugao (cirkularnu koordinatu), a familiji kristalografskih pravaca $\langle 100 \rangle$ odgovaraju ose referentnog Descartesovog koordinatnog sistema. Slika realne strukture RLQD za konkretne vrednosti parametara data je na sl. C.1(a). Relevantni poprečni preseki u (ρ, z) ravni za vrednost polarnog ugla: $\varphi = \pi/4 \rightarrow (110)$ -presek (puna plava linija), $\varphi = 0 \rightarrow (100)$ -presek (isprekidana zelena linija) i $\varphi = -\pi/4 \rightarrow (1\bar{1}0)$ -presek (tačkasta crvena linija), dati su na sl. C.1(b).



Slika C.1. (a) Konturni 3D prikaz graničnih površi između In(Ga)As i GaAs u kvantnoj tački realistične geometrije definisane jednačinom (C.1) za $R= 11,5\text{ nm}$, $h_0 = 1,6\text{ nm}$, $h_M= 3,6\text{ nm}$, $h_\infty = 0,4\text{ nm}$, $\gamma_0 = 3\text{ nm}$, $\gamma_\infty = 5\text{ nm}$ i $\xi=0.2$; (b) Poprečni preseki tačke u ravnima: $\varphi=\pi/4 \rightarrow (110)$ presek (puna plava linija), $\varphi=0 \rightarrow (100)$ presek (isprekidana zelena linija) i $\varphi=-\pi/4 \rightarrow (1\bar{1}0)$ presek (tačkasta crvena linija).

Pored nepostojanja aksijalne simetrije, realne nanotačke slične nanoprstenovima imaju anizotropne elastične osobine koje su posledica anizotropije elastičnosti masivnih materijala od kojih su ove strukture sačinjene. Da bi se pravilno opisala ova anizotropija, potrebno je koristiti odgovarajući model, na primer, onaj opisan u poglavlju 2.1.2. Koristeći ovaj model izračunali smo raspodelu naprezanja u strukturi

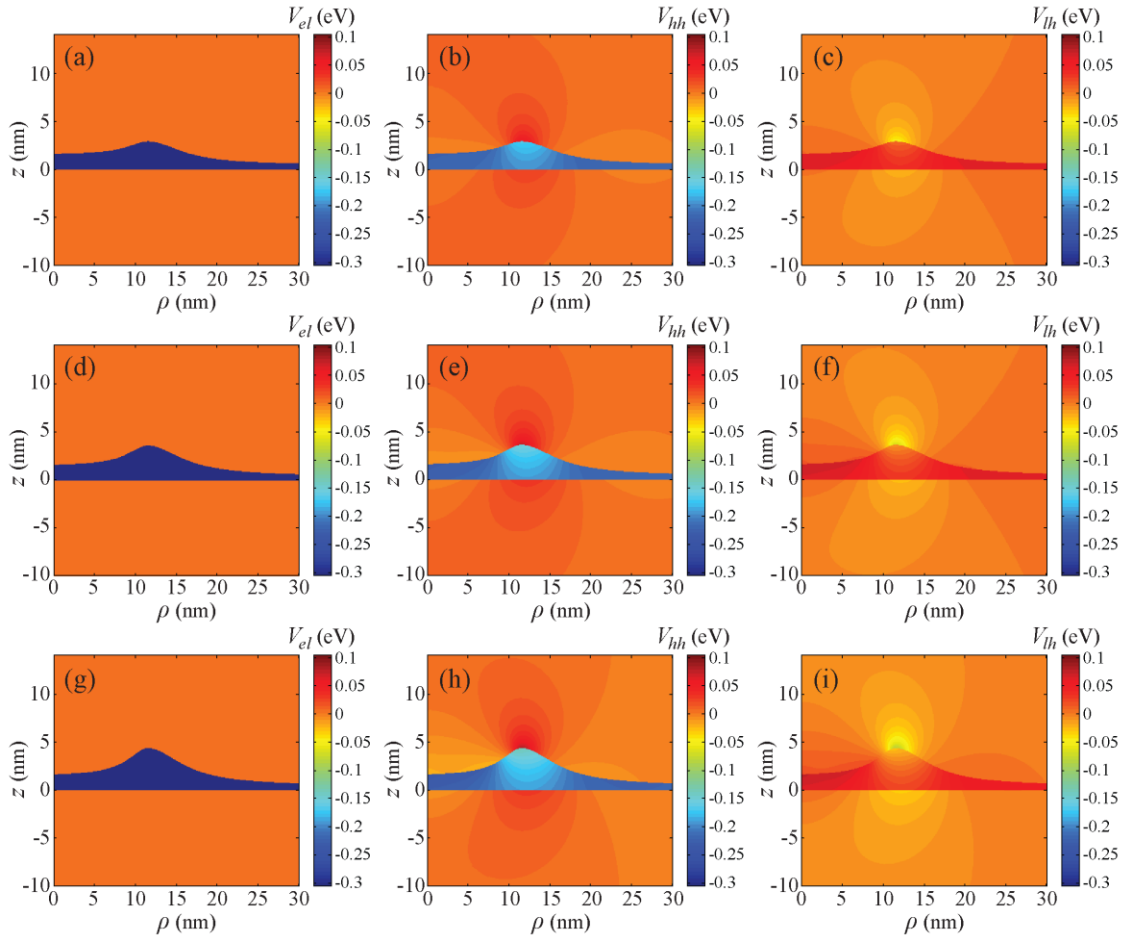
prikazanoj na slici C.1(a). Na osnovu dobijene raspodele naprezanja generisani su dijagrami na slici C.2. Gornji panel na ovoj slici prikazuje raspodelu efektivnih potencijala u $(1\bar{1}0)$ preseku, srednji panel u (100) preseku, dok donji panel prikazuje efektivne potencijale u (110) ravni. Može se zaključiti da će i elektron i teška šupljina biti konfinirani u tački, dok će laka šupljina biti konfinirana van tačke. Uočava se slaba zavisnost raspodele potencijala od položaja preseka, bez obzira na nepostojanje aksijalne simetrije i postojanje anizotropije elastičnosti.



Slika C.2. Efektivni potencijali elektrona, lake šupljine i teške šupljine u različitim poprečnim presecima anizotropnog RLQD: (gornji panel) $(1\bar{1}0)$ presek: (a) V_{el} , (b) V_{hh} , (c) V_{lh} ; (srednji panel) (100) presek: (d) V_{el} , (e) V_{hh} , (f) V_{lh} i (donji panel) (110) presek: (g) V_{el} , (h) V_{hh} i (i) V_{lh} .

Potencijali prikazani na slici C.2 su upoređeni sa rezultatima modela izotropne elastičnosti primenjenog na aksijalno simetrične strukture. Efektivni potencijali

elektrona i šupljine izračunati na osnovu rezultata primene modela izotropne elastičnosti prikazani su na slici C.3. Ovde je ugaono zavisni član u jednačini (C.1) ($1 + \xi \sin(2\varphi)$) zamenjen parametrom η , tako da je dobijena nanotačka aksijalno simetrična. Raspored na slici C.3 je isti kao na slici C.2, samo sada za $\eta = 0,8$, $\eta = 1,0$ i $\eta = 1,2$, koji definišu aksijalno simetrične strukture poprečnog preseka koji odgovara $(1\bar{1}0)$, (100) i (110) preseku kvantne tačke date na slici C.1. Uočava se kvalitativna i kvantitativna sličnost dobijenih dijagrama na slikama C.2 i C.3. Ovi rezultati ukazuju da ukoliko se zanemare vandijagonalni elementi hamiltonijana naprezanja: (1) izabrana aksijalna aproksimacija oblika strukture je opravdana i (2) elastične osobine strukture su približno izotropne.



Slika C.3. Efektivni potencijali elektrona, lake šupljine i teške šupljine u RLQD-u čiji je poprečni presek definisan jednačinom (4.1). Rezultati su dati za $\eta = 0,8$: (a) V_{el} , (b) V_{hh} , (c) V_{lh} ; $\eta = 1,0$: (d) V_{el} , (e) V_{hh} , (f) V_{lh} i $\eta = 1,2$: (g) V_{el} , (h) V_{hh} i (i) V_{lh} .

Treba imati u vidu da je anizotropni 3D model numerički daleko prohtevniji, tj. broj jednačina sistema koji se mora rešiti je daleko veći nego u modelu izotropne elastičnosti, koji se za aksijalno simetrične strukture svodi na 2D model. Kako bi smanjili neophodne memorijske resurse i vreme računanja pomoću anizotropnog modela, granice domena za rešavanje (kutije) na kojima se smatra da je došlo do potpune relaksacije strukture potrebno je postaviti na mnogo manju udaljenost od tačke u odnosu na izotropni model, što predstavlja izvesnu aproksimaciju. Na ovaj način se mogu dobiti značajna odstupanja raspodele naprezanja od rezultata proračuna kada se usvoje dimenzije domena za rešavanje mnogo veće od dimenzija tačke, pri čemu se najveća odstupanja dobijaju u blizini heterospoja tačka/matrica (Davies, 1998).

Empirijski smo utvrdili da se kvantitativno dobri rezultati za razmatrane In(Ga)As/GaAs nanotačke u (teorijski) beskonačnoj matrici po anizotropnom 3D modelu dobijaju za kutije dimenzija oko $200\text{ nm} \times 200\text{ nm} \times 200\text{ nm}$, što dovodi do memorijski zahtevnog i dugotrajnog proračuna raspodele naprezanja. Kod primene izotropnog modela naprezanja ne postoje ova ograničenja, tako da rezultati primene složenijeg anizotropnog modela mogu u praksi biti lošiji od rezultata aproksimativnog 2D modela izotropne elastičnosti.

Биографија Владимира Арсоког

Владимир Арсоки је рођен 1975. у Обреновцу. Године 1994/95. уписао се на Електротехнички факултет у Београду, остваривши максималан број поена из физике на пријемном испиту. Дипломирао је из области ласерске технике на Смеру за оптоелектронику и ласерску технику Одсека за физичку електронику са темом “Интеракција високоенергетског ласерског зрачења са полумагнетским материјалима”. Постдипломске студије је уписао 2002. године, положио све испите и 2005. године пријавио магистарску тезу “Примена ласера у анализи система микрочестица”, коју је одбранио 2007. Служи се енглеским и руским језиком. До сада је објавио 29 радова: 8 радова у међународним часописима, 10 радова на међународним конференцијама, 1 рад у домаћем часопису и 12 радова на домаћим конференцијама.

Од 2003. године запослен је на Електротехничком факултету при Катедри за микроелектронику и техничку физику. До сада је сарађивао на предметима: Физика 1, Физика 2, Лабораторијске вежбе из Физике, Практикум из Физике 2, Квантна електроника, Микроелектроника, Микроелектроника и наноелектроника, Ласерска техника, Микроелектронска кола, Микроелектромеханички системи, Примена ласера у медицини, Анализа и моделовање полупроводничких направа, Моделовање микроелектронских направа и Полупроводничке квантне наноструктуре. Тренутно је ангажован на пројекту Министарства просвете, науке и технолошког развоја “Оптоелектронски нанодимензиони системи–пут ка примени”.

У ужој области тезе Владимир Арсоки је био аутор или коаутор седам радова у међународним часописима (са импакт фактором) и то три рада у категорији M21 (ИФ: 3,691), два рада у категорији M22 (ИФ: 1,204) и два рада у категорији M23 (ИФ: 0,467). Такође је аутор или коаутор пет радова презентованих на међународним конференцијама и аутор једног рада презентованог на домаћој конференцији.

Прилог 1.

Изјава о ауторству

Потписани-а ВЛАДИМИР АРСОСКИ

број индекса _____

Изјављујем

да је докторска дисертација под насловом

ЕКСЦИТОНСКА СТРУКТУРА И ОПТИЧКА СВОЈСТВА
ПОЛУПРОВОДНИЧКИХ НАНОТАЧАКА И НАНОПРСТЕНОВА

- резултат сопственог истраживачког рада,
- да предложена дисертација у целини ни у деловима није била предложена за добијање било које дипломе према студијским програмима других високошколских установа,
- да су резултати коректно наведени и
- да нисам кршио/ла ауторска права и користио интелектуалну својину других лица.

Потпис докторанда

У Београду, 11.02.2013.

Арсоски Владимир

Прилог 2.

Изјава о истоветности штампане и електронске верзије докторског рада

Име и презиме аутора ВЛАДИМИР АРСОСКИ

Број индекса _____

Студијски програм _____

Наслов рада ЕКЦИТОНСКА СТРУКТУРА И ОПТИЧКА СВОЈСТВА ПОЛУПРОВОДНИЧКИХ НАНОТАЧАКА И НАНОПРСТЕНОВА

Ментор ДР МИЉАН ТАДИЋ, РЕДОВНИ ПРОФЕСОР

Потписани/а ВЛАДИМИР АРСОСКИ

Изјављујем да је штампана верзија мог докторског рада истоветна електронској верзији коју сам предао/ла за објављивање на порталу **Дигиталног репозиторијума Универзитета у Београду**.

Дозвољавам да се објаве моји лични подаци везани за добијање академског звања доктора наука, као што су име и презиме, година и место рођења и датум одбране рада.

Ови лични подаци могу се објавити на мрежним страницама дигиталне библиотеке, у електронском каталогу и у публикацијама Универзитета у Београду.

Потпис докторанда

У Београду, 11.02.2013.

Арсоски Владимир

Прилог 3.

Изјава о коришћењу

Овлашћујем Универзитетску библиотеку „Светозар Марковић“ да у Дигитални репозиторијум Универзитета у Београду унесе моју докторску дисертацију под насловом:

ЕКСЦИТОНСКА СТРУКТУРА И ОПТИЧКА СВОЈСТВА
ПОЛУПРОВОДНИЧКИХ НАНОТАЧАКА И НАНОПРСТЕНОВА

која је моје ауторско дело.

Дисертацију са свим прилозима предао/ла сам у електронском формату погодном за трајно архивирање.

Моју докторску дисертацију похрањену у Дигитални репозиторијум Универзитета у Београду могу да користе сви који поштују одредбе садржане у одабраном типу лиценце Креативне заједнице (Creative Commons) за коју сам се одлучио/ла.

1. Ауторство

2. Ауторство - некомерцијално

3. Ауторство – некомерцијално – без прераде

4. Ауторство – некомерцијално – делити под истим условима

5. Ауторство – без прераде

6. Ауторство – делити под истим условима

(Молимо да заокружите само једну од шест понуђених лиценци, кратак опис лиценци дат је на полеђини листа).

Потпис докторанда

У Београду, 11.02.2013.

Тресеки Владимир

1. Ауторство - Дозвољавање умножавања, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце, чак и у комерцијалне сврхе. Ово је најслободнија од свих лиценци.

2. Ауторство – некомерцијално. Дозвољавање умножавања, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце. Ова лиценца не дозвољава комерцијалну употребу дела.

3. Ауторство - некомерцијално – без прераде. Дозвољавање умножавања, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, без промена, преобликовања или употребе дела у свом делу, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце. Ова лиценца не дозвољава комерцијалну употребу дела. У односу на све остале лиценце, овом лиценцом се ограничава највећи обим права коришћења дела.

4. Ауторство - некомерцијално – делити под истим условима. Дозвољавање умножавања, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце и ако се прерада дистрибуира под истом или сличном лиценцом. Ова лиценца не дозвољава комерцијалну употребу дела и прерада.

5. Ауторство – без прераде. Дозвољавање умножавања, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, без промена, преобликовања или употребе дела у свом делу, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце. Ова лиценца дозвољава комерцијалну употребу дела.

6. Ауторство - делити под истим условима. Дозвољавање умножавања, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце и ако се прерада дистрибуира под истом или сличном лиценцом. Ова лиценца дозвољава комерцијалну употребу дела и прерада. Слична је софтверским лиценцама, односно лиценцама отвореног кода.