

NEMANJA A. ČUKARIĆ
MILAN Ž. TADIĆ

Elektrotehnički fakultet, Univerzitet
u Beogradu, Beograd

NAUČNI RAD

UDK 621.3:517.923

DOI: 10.2298/HEMIND091221028C

VIŠEZONSKI MODEL ELEKTRONSKE STRUKTURE VALENTNE ZONE CILINDRIČNIH GaAs NANOŽICA*

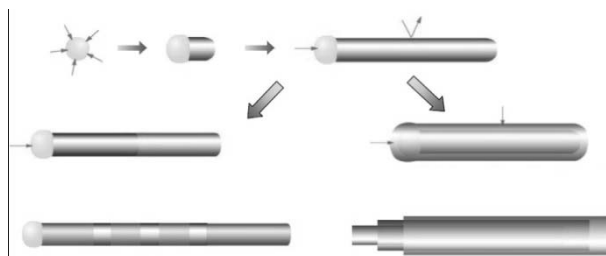
U ovom radu se posmatraju šupljinska stanja u GaAs slobodnostojećim nanožicama i GaAs/(Al,Ga)As jezgro-omotač nanožicama tipa I-s, narastanih u pravcu [100]. Šupljinska stanja su opisana četvorozonskim Latindžer-Konovim hamiltonijanom, tako da je u obzir uzeto mešanje zona teških i lakih šupljina. Usvojena je aksijalna aproksimacija i stanja su klasifikovana po vrednosti totalnog ugaonog momenta (opisanog brojem f_z). Za numeričko rešavanje svojstvenog problema korišćen je metod ekspanzije talasne funkcije u bazi, koji čine Beselove funkcije I vrste. Kao rezultat dobijeni su disperzioni dijagrami $E(k_z)$ koji vidno odstupaju od paraboličnih zavisnosti, karakterističnih za provodnu zonu. U slobodnostojećoj nanožici postoji ukrštanje u kome učestvuje osnovno stanje ($f_z = 1/2$). Nađeno je da se niža stanja iste simetrije (f_z) u jezgro-omotač nanožicama antiukrštaju, ali se antiukrštanje stanja simetrije $f_z = 1/2$ transformiše u ukrštanje pri određenom odnosu poluprečnika jezgra i omotača. Pored toga, utvrđen je uticaj geometrijskih parametara na izgled dispezionih relacija.

Nanožice su strukture kod kojih su nosioci konfinirani u dva pravca, dok je kretanje po jednom pravcu slobodno. Potencijalne primene nanožica su brojne, od realizacije jednostavnih poluprovodničkih komponenti za integrisanu elektroniku, optiku i senzore, do primene u biološkim sistemima [1,2]. Pre nekoliko godina formirana je dioda na bazi nanožica ukrštanjem InP žica n- i p-tipa [3]. Pokazano je da se ZnO nanožice mogu koristiti kao laseri koji emituju UV svetlost, i to na sobnoj temperaturi [4]. Za ovu primenu moguće je koristiti i In₂O₃ nanožice [5]. Na bazi višeslojne Si/Ge jezgro-omotač nanožice moguće je realizovati koaksijalni FET [6].

Usled napretka tehnologije izrade poluprovodničkih nanostrukture, moguće je realizovati veliki broj nanožica, različitog oblika i sastava. Materijali koji se koriste za realizaciju nanožica su Ge, Si [7], C, III-V jedinjenja, njihove smeše i metalni oksidi. Tehnike koje se koriste za realizaciju nanožica su brojne, pa će ovde biti navedene osnovne i najčešće korišćene. Nanožice se mogu dobiti korišćenjem planarnih tehnologija, dobro poznatih u mikroelektronici, kao što su litografija i nagrizanje [8]. Korišćenjem litografije mogu se dobiti nanožice raznovrsnog oblika. Pošto se radi o nanometarskim dimenzijama, potrebno je koristiti litografiju visoke rezolucije, kao što je litografija X-zracima (za izradu struktura dimenzija 10 do 100 nm), elektronskim snopom i jonskim snopom (izrada struktura dimenzija manjih od 10 nm) [8].

Dominantan metod realizacije nanožica u poslednje vreme je VLS metod (vapor-liquid-solid) [9-11]. Korišćenjem ove tehnike moguće je formirati širok spektar

nanožica, i to variranjem dužine procesa, temperature, koncentracije, vrste čestica koje čine gas, i ostalih parametara. Tipovi nanožica dobijenih ovim metodom dati su na slici 1 [12]. Ako jedan materijal čini gas, onda se dobija slobodnostojeća nanožica uniformnog sastava (gore na slici 1). Promenom materijala gasa, koji se ugrađuje preferentno aksijalno, može se dobiti aksijalni heterospoj i aksijalna superrešetka (dole levo na slici 1). Ako se ugradnja materijala vrši preferentno radijalno, dobijaju se nanožice jezgro-omotač (core-shell), koje su prikazane dole desno na slici 1 [12]. Pošto VLS postupak ne zahteva korišćenje dodatnih hemijskih supstanci, mogućnost postojanja nečistoća u strukturi je mnogo manja nego kod žica dobijenih planarnim tehnikama.



Slika 1. Šematski prikaz rasta nanožica i nanožičanih heterostruktura pomoću VLS metode: materijal se nanosi preferentno aksijalno u prisustvu katalizatora (gore), ali promena materijala pri aksijalnom nanošenju, dovodi do aksijalnih heterostruktura, kao što su heterospoj (levo dole), dok ako se materijal nanosi preferentno radijalno, formira se nanožica jezgro-omotač, koja može imati više slojeva u omotaču (desno dole). Figure 1. Schematic views of nanowire and nanowire heterostructures growth: nanowire is synthesised through catalyst mediated axial growth (top), but switching of the source material results in axial heterojunctions and superlattices (bottom left), while for the preferential radial deposition core-shell and core-multishell nanowires are produced (bottom right).

*Rad saopšten na skupu „Osmo konferencija mladih istraživača“, Beograd, 21-23. decembar 2009.

Autor za prepisku: N.A. Čukarić, Elektrotehnički fakultet, Bulevar kralja Aleksandra 72, 11120 Beograd, Srbija.

E-pošta: cukaric@etf.rs

Rad primljen: 21. decembar 2009.

Rad prihvaćen: 30. januar 2010.

U poslednje vreme sve veće interesovanje postoji za samoasembliране nanožice. Usled neuniformnog na-

preznanja koje se javlja zbog različitih konstanti rešetke materijala žice i matrice, dolazi do spontanog formiranja nanožica. Primer ovakvog rasta je narastanje InAs na supstratu od InP [13].

Posmatraćemo stanja u valentnoj zoni slobodnostojeće nanožice od GaAs i nanožice jezgro-omotač, čije je jezgro od AlGaAs, a omotač od GaAs (tip I-s). Žice su narastane po pravcu [100]. Ovakve nanožice mogu se realizovati VLS metodom. Elektronska struktura valentne zone modeluje se višezonskim modelom efektivnih masa. Razmatraćemo oblik disperzionih dijagrama. U provodnoj zoni zavisnost energija od longitudinalnog talasnog vektora je parabolična, pa provodna zona neće biti posmatrana.

TEORIJSKI MODEL

Poznato je da se stanja elektrona mogu klasifikovati po zonama (npr. stanja u valentnoj i stanja u provodnoj zoni). Međutim, između stanja različitih zona postoji mešanje. Zanimljivo je uticaja ostalih zona za stanja elektrona u provodnoj zoni je dobra aproksimacija za GaAs, međutim isto ne važi za valentnu zonu. Pošto je valentna zona masivnog materijala degenerisana u centru Brillouinove zone potrebno je koristiti višezonske modele efektivnih masa. Smatramo da je energijski procep dovoljno veliki da ne postoji mešanje stanja provodne i valentne zone. Takođe, pretpostavljamo da su parametri elektronske strukture materijala konstantni u strukturi. Primereni model elektronske strukture valentne zone je 4-zonalni Latindžer-Konov hamiltonijan [14]. U ovom modelu se eksplicitno uzima u obzir mešanje zone lakih i zone teških šupljina. Hamiltonijan se može pisati u obliku:

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2}{2m_0} \begin{bmatrix} \hat{H}_h & \hat{R} & \hat{S} & 0 \\ \hat{R}^+ & \hat{H}_l & 0 & \hat{S} \\ \hat{S}^+ & 0 & \hat{H}_l & -\hat{R} \\ 0 & \hat{S}^+ & -\hat{R}^+ & \hat{H}_h \end{bmatrix} + V_v(\rho) I_{4 \times 4} \quad (1)$$

gde prvi sabirak predstavlja operator kinetičke energije, a drugi konfinirajući potencijal u valentnoj zoni dat sledećom relacijom:

$$V_v(\rho, z) = \begin{cases} V_0^v, & \rho < R_1 \\ 0, & R_1 \leq \rho \leq R_2 \\ \infty, & \rho > R_2 \end{cases} \quad (2)$$

gde je R_1 poluprečnik jezgra, a R_2 spoljašnji poluprečnik omotača. U slučaju slobodnostojeće žice uzima se da je $R_1 = 0$. V_0^v je ofset vrha valentne zone GaAs i AlGaAs.

Matrični elementi u relaciji (1) jesu:

$$\hat{H}_h = (\gamma_1 + \gamma_2)(\hat{k}_x^2 + \hat{k}_y^2) + (\gamma_1 - 2\gamma_2)\hat{k}_z^2 \quad (3a)$$

$$\hat{H}_l = (\gamma_1 - \gamma_2)(\hat{k}_x^2 + \hat{k}_y^2) + (\gamma_1 + 2\gamma_2)\hat{k}_z^2 \quad (3b)$$

$$\hat{R} = 2\sqrt{3}\gamma_3\hat{k}_z\hat{k}_-, \quad \hat{S} = -\sqrt{3}\left(\frac{\gamma_2 + \gamma_3}{2}\right)\hat{k}_-^2 \quad (3c)$$

Ovde su γ_1 , γ_2 i γ_3 , Latindžerovi parametri, a \hat{k}_x , \hat{k}_y i \hat{k}_z operatori projekcija (mehaničkog) talasnog vektora duž pojedinih osa Dekartovog sistema.

Kretanje po z pravcu je slobodno, tako da je \hat{k}_z dobar kvantni broj. Uvedena je aksijalna aproksimacija ($\gamma_3 - \gamma_2 \approx 0$), što se može videti iz izraza (3c). Uvodi se operator ukupnog ugaonog momenta $\hat{F} = \hat{L} + \hat{J}$, gde je \hat{L} operator ugaonog momenta anvelopne funkcije, a \hat{J} operator ugaonog momenta periodičnog dela Blohove funkcije u centru Brillouinove zone. Može se pokazati da projekcija operatora ukupnog ugaonog momenta na z osu \hat{F}_z komutira sa hamiltonijanom [5]. Stanja se mogu klasifikovati prema broju f_z datom sledećom relacijom:

$$\hat{F}_z \psi_{f_z} = f_z \hbar \psi_{f_z} \quad (4)$$

gde je ψ_{f_z} kompletna talasna funkcija. Na osnovu oblika strukture i uvedene aproksimacije talasna funkcija glasi:

$$\psi_{f_z}(\rho, \varphi, z) = A_z e^{ik_z z} \sum_{j_z} \frac{e^{i(j_z - j_z)}}{\sqrt{2\pi}} F^{f_z - j_z}(\rho) \quad (5)$$

gde je $|3/2, j_z\rangle$ periodični deo Blohove funkcije u centru Brillouinove zone, $j_z = \pm 1/2, \pm 3/2$ (lake i teške šupljine), a A_z konstanta normiranja obrnuto srazmerna kvadratnom korenu dužine žice. Zbog periodičnih graničnih uslova anvelopne talasne funkcije po φ , dobija se da je $f_z = (2n+1)/2$, $n \in Z$. Potrebno je naći deo talasne funkcije koji zavisi od potega $F^{l_z}(\rho)$, gde je $l_z = f_z - j_z$. Za rešavanje ovog problema korišćemo metod ekspanzije. $F^{l_z}(\rho)$ ćemo razviti u red koji čine Beselove funkcije I vrste odgovarajućeg reda:

$$F^{l_z}(\rho) = \sum_n a_n^{l_z} A_n^{l_z} J_{l_z}(\mu_n^{l_z} \rho / R_2) \quad (6)$$

gde $A_n^{l_z}$ konstanta normiranja odgovarajuće Beselove funkcije, $\mu_n^{l_z}$ n -ta funkcija Beselove funkcije l_z -og reda i $a_n^{l_z}$ odgovarajući koeficijent razvoja. Dalje računamo matrične elemente i formirano Hamiltonovu matricu. Na ovaj način smo sistem od četiri diferencijalne jednačine sveli na nalaženje svojstvenih vrednosti (energije) i svojstvenih vektora (koeficijenti razvoja) Hamiltonove matrice. Sva stanja su dvostruko degenerisana, tj.:

$$E_n(f_z, k_z) = E_n(-f_z, k_z) \quad (7)$$

pa ćemo posmatrati samo stanja čije je f_z pozitivno. Svi integrali koji čine matrične elemente mogu se izračunati analitički, na osnovu relacija iz literature [15], što

smanjuje dužinu procesa računanja i daje veću tačnost u odnosu na situaciju gde se integrali računaju numerički.

NUMERIČKI REZULTATI I DISKUSIJA

Posmatramo slobodnostojeću žicu od GaAs i žicu jezgro–omotač čije je jezgro od $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, a omotač od GaAs, gde je $x = 0,3$ molski udeo AlAs u AlGaAs. Pretpostavljeno je da 35% razlike energijskih procepa pripada valentnoj zoni, što znači da je ofset vrha valentne zone, $V_0^v = 0.131\text{ eV}$. Ovde je razlika energijskih procepa izračunata prema $\Delta E_g = 1.247x\text{ eV}$ [16]. Latindžerovi parametri za GaAs su preuzeti iz [17] i iznose $\gamma_1 = 6,98$, $\gamma_2 = 2,06$ i $\gamma_3 = 2,93$.

Posmatramo šupljinska stanja u slobodnostojećoj nanožici. Cilj analize je nalaženje disperzionih zavisnosti $E(k_z)$. Energije elektrona u provodnoj zoni kao funkcije longitudinalnog talasnog broja su parabolične. Svojeviti problem elektrona u provodnoj zoni ove strukture može se rešiti i analitički. Zavisnost talasne funkcije od potega opisuju Beselove funkcije I vrste. Provodna zona neće biti posmatrana.

Osnovno stanje šupljina, kao i prvih nekoliko stanja, za $k_z = 0$ dominantno su LH (lake šupljine). Do ovakvog zaključka može se doći primenom dijagonalne aproksimacije na LK hamiltonijan. U ovom slučaju zanemarujemo mešanje zona i stanja su čisto lakošupljinska ili teškošupljinska. Može se primetiti da je efektivna masa lakih šupljina veća od efektivne mase teških šupljina, pa je samim tim osnovno stanje lakošupljinsko. Vratimo se na LK hamiltonijan koji uključuje vandijagonalne članove. Vandijagonalni članovi LK hamiltonijana daju mešanje zona lakih i teških šupljina, pa se stanja ne mogu klasifikovati na navedeni način. Svako stanje ima lakošupljinsku i teškošupljinsku komponentu. Međutim, stanje može biti dominantno lakošupljinsko ili teškošupljinsko. Kriterijum na osnovu koga se određuje priroda stanja je udeo lakih (teških) šupljina $P_{L(H)}$ u stanju. Udeo određene vrste šupljina u šupljinskom stanju određuje se na osnovu sledeće relacije:

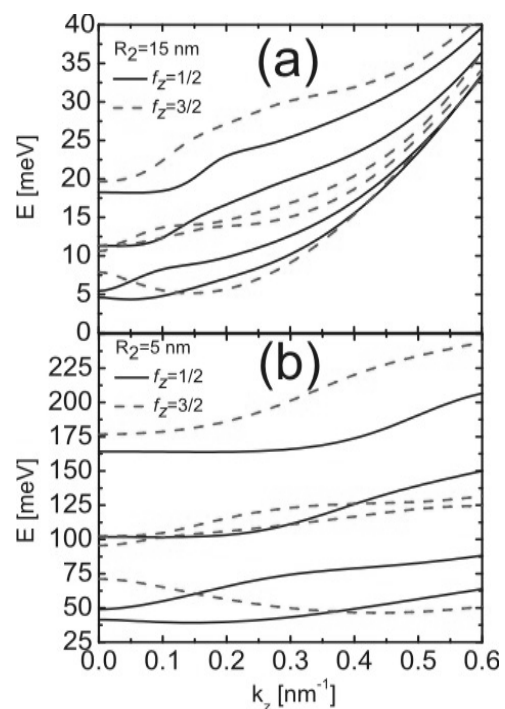
$$P_{L(H)} = \int_V |\psi_{L(H)}|^2 dV \quad (8)$$

gde je $\psi_{L(H)}$ lakošupljinska (teškošupljinska) komponenta talasne funkcije datog stanja.

Mešanje zona pokazuje još jednu bitnu razliku stanja u valentnoj i provodnoj zoni. Poznato je da su stanja u provodnoj zoni, u odsustvu magnetskog polja, četverostruko degenerisana (zanemarena SO interakcija, što je u ovom slučaju opravdano). Za razliku od elektrona u provodnoj zoni, šupljinska /stanja su dvostruko degenerisana usled mešanja zona (zanemareni Drezelhausovi članovi).

Posmatramo stanja simetrije $f_z = \pm 1/2, \pm 3/2$. Usled mešanja zona dolazi do ukrštanja energija, pa

osnovno stanje skokovito menja svoju prirodu pri određenoj vrednosti longitudinalnog talasnog broja (slika 2). U daljem tekstu korišćiće se sledeća notacija: LH(l_z) označava stanje lakih šupljina, a HH(l_z) stanje teških šupljina, gde je l_z orbitalni kvantni broj anvelopne talasne funkcije. Do ukrštanja dolazi između stanja koja su dominantno LH(0) i LH(1) pri $k_z = 0$, što se može videti sa slike 2. Dominantni deo navedenih stanja je okarakterisan brojem $f_z = 1/2$ i Blohovom funkcijom $|3/2, -1/2\rangle$ (LH(0)) i $f_z = 3/2$ i Blohovom funkcijom $|3/2, -1/2\rangle$ (LH(1)). Između dva navedena stanja dolazi do ukrštanja pri nekoliko vrednosti k_z , s tim što se sva ukrštanja, sem prvog dešavaju pri dosta visokim vrednostima k_z , i ta stanja obično nisu populisana šupljinama.

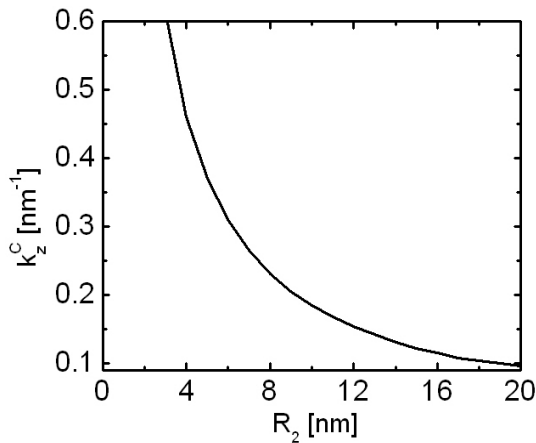


Slika 2. Disperzioni dijagrami šupljina u slobodnostojećoj GaAs nanožici radijusa: (a) 5 i (b) 15 nm.

Figure 2. The dispersion diagrams of the valence-band electronic structure in the freestanding GaAs nanowire of radius: (a) 5 and (b) 15 nm.

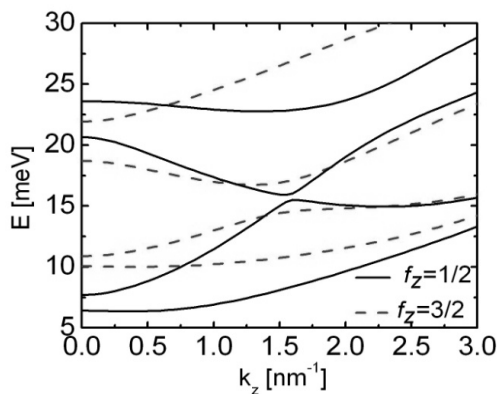
Analiziraćemo i oblik disperzionih dijagrama u zavisnosti od poluprečnika žice. Poluprečnik variramo u opsegu 5–20 nm. Vrednost poluprečnika žice utiče na više karakteristika elektronske strukture valentne zone. Što je poluprečnik veći, energija osnovnog stanja je manja, pošto šupljina ima više „prostora“ u žici. Zavisnost vrednosti k_z pri kojoj dolazi do prvog ukrštanja od poluprečnika žice data je na slici 3. Može se videti da je nagib ove krive veći u opsegu manjih poluprečnika, što znači da mala promena radijusa tanke žice (oko 5 nm) veoma utiče na položaj prvog ukrštanja, što nije slučaj sa debljim žicama (oko 20 nm i više). Možemo zaklju-

čiti da disperzione relacije uže žice više odstupaju od paraboličnih, tj mešanje zona daje veće efekte. Razlog je to što talasne funkcije lakih i teških šupljina zauzimaju isti deo prostora (dobro se „preklapaju”), pa je i mešanje zona izraženije. Kod širih žica talasne funkcije lakih šupljina se koncentrišu oko centra žice, dok se talasne funkcije teških šupljina koncentrišu na periferiji žice, pa je mešanje manje izraženo.

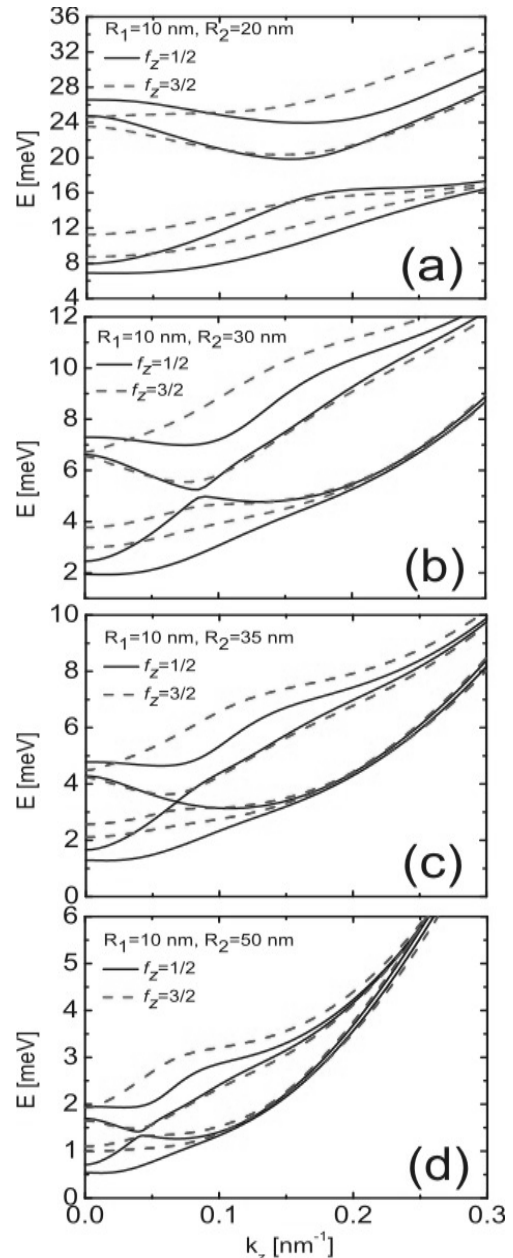


Slika 3. Zavisnost longitudinalnog talasnog broja ukrštanja od radijusa slobodnostojeće nanožice.
Figure 3. The crossing wave number as it varies with radius of the freestanding nanowire.

Posmatramo nanožicu jezgro–omotač. Kao i kod slobodnostojeće nanožice, osnovno stanje, kao i prvo pobuđeno stanje su dominantno stanja lakih šupljina pri $k_z = 0$ (slika 4). Za razliku od slobodnostojeće žice, u nanožici jezgro–omotač ne postoji ukrštanje u kome učestvuje osnovno stanje (slika 4). Osnovno stanje je opisano brojem $f_z = 1/2$ i dominantno je LH(0) pri $k_z = 0$. Iako na prvi pogled navedeno ukrštanje ne postoji, za veliki odnos spoljašnjeg i unutrašnjeg poluprečnika (npr. 5:1), do ukrštanja dolazi pri dosta velikim vred-



Slika 4. Disperzioni dijagram šupljina u jezgro–omotač nanožici radijusa $R_1 = 5$ nm i $R_2 = 15$ nm.
Figure 4. The hole subbands in the core-shell nanowires with 5 nm inner and 15 nm outer radius.



Slika 5. Disperzioni dijagrami šupljina u jezgro–omotač nanožici poluprečnika jezgra 10 nm i poluprečnika omotača: a) 20, b) 30, c) 35 i d) 50 nm.
Figure 5. The subband dispersions relations of holes in the core-shell nanowires whose inner radius equals 10 nm, while the outer radius amounts to: a) 20, b) 30, c) 35 and d) 50 nm.

nostima k_z , pa ovo ukrštanje nije relevantno, jer obično ta stanja nisu populisana. Zavisnost energije osnovnog stanja od k_z je konstanta u određenom opsegu k_z , što se može videti sa slike 4. Navedeni efekat je direktna posledica mešanja zona. Naime, s rastom k_z matricni elementi vandijagonalog člana LK hamiltonijana linearno rastu, što se može videti iz relacije (3c). Ovaj član daje teškošupljinsku komponentu osnovnog stanja, pa se s porastom k_z povećava i udeo te komponente. Povećanje udela teškošupljinske komponente za posledicu ima to

da zavisnost energije osnovnog stanja od k_z drastično odstupa od parabolične, štaviše konstantna je u određenom opsegu. Efekat je izraženiji kod žica manjih poprečnih dimenzija. U slučaju žice poluprečnika jezgra od 5 nm (slika 4), energija je konstantna za $k_z \in [0, 0.05] \text{ nm}^{-1}$.

Interesantno je posmatrati antiukrštanje, odnosno ukrštanje između dva stanja simetrije $f_z = 1/2$ u kojima, pri $k_z = 0$, dominantno učestvuju: 1) LH(1) i 2) HH(-1). U zavisnosti od geometrijskih parametara, odnos između ova dva stanja menjaće se od antiukrštanja do ukrštanja i nazad (slika 5). Posmatraćemo situaciju u kojoj je unutrašnji poluprečnik fiksiran, a spoljašnji se povećava. Situacija je prikazana na slici 5, gde je unutrašnji poluprečnik 10 nm, a spoljašnji se menja u opsegu od 20 do 50 nm. Može se primetiti blago antiukrštanje na 0.17 nm^{-1} . S povećanjem poluprečnika antiukrštanje se pomera ka manjim vrednostima k_z . Kada je vrednost spoljašnjeg poluprečnika 35 nm antiukrštanje postaje ukrštanje do koga dolazi za $k_z = 0.07 \text{ nm}^{-1}$ (slika 5c). Daljim povećanjem spoljašnjeg poluprečnika, ukrštanje opet postaje antiukrštanje i pomera se ka manjim vrednostima k_z kao što se može videti na slici 5d. Na osnovu variranja geometrijskih parametara u određenom opsegu (unutrašnji poluprečnik biće variran u opsegu 5–15 nm, a spoljašnji u opsegu 10–65 nm) došli smo do zaključka da antiukrštanje postaje ukrštanje kada je odnos $R_2 / R_1 \approx 3,5$. Ovo antiukrštanje (ukrštanje) prati još jedno antiukrštanje u kome učestvuju stanja simetrije $f_z = 3/2$.

Za dovoljno veliko k_z disperzioni dijagrami obe strukture (slobodnostojeća i jezgro–omotač nanožica) pokazuju kvalitativno isto ponašanje. S porastom longitudinalnog talasnog broja $E(k_z)$ prilaze paraboličnim, kakve odlikuju provodnu zonu. Međutim, s porastom k_z stanja teže višestrukoj degeneraciji, što nije slučaj u provodnoj zoni.

ZAKLJUČAK

Izračunata je elektronska struktura valentne zone slobodnostojeće i jezgro–omotač nanožice na bazi GaAs/(Al,Ga)As korišćenjem Latindžer–Konovog hamiltonijana. Usvojena je aksijalna aproksimacija, pa su stanja klasifikovana po simetriji u odnosu na z komponentu ukupnog ugaonog momenta, F_z . Pokazano je da disperzione relacije nanožica znatno odstupaju od parabolične zavisnosti. Tako za slobodnostojeću nanožicu postoji ukrštanje između stanja simetrije $f_z = 1/2$. U žici jezgro–omotač, antiukrštanje između stanja simetrije $f_z = 1/2$ prelazi u ukrštanje, pri tačno određenom odnosu poluprečnika jezgra i omotača. Pokazali smo da je tretiranje problema valentne zone višezonskim modelom, u ovim strukturama dalo efekte, koji ne bi bili vidljivi pri tretmanu koji ne uključuje mešanje zona.

Zahvalnica

Autori se zahvaljuju na finansijskoj podršci Ministarstvu za nauku i tehnološki razvoj Republike Srbije u okviru projekta „Fotonske komunikacije”, evb. 160001.

LITERATURA

- [1] D. Appel, Wired for success, Nature (London) **419** (2002) 553–555.
- [2] L.J. Lauhon, M.S. Gudiksen, C.M. Lieber, Semiconductor nanowire heterostructures, Philos. Trans. R. Soc. London **362** (2004) 1247–1260.
- [3] H. Cao, X. Qui, Y. Liang, Q. Zhu, M. Zhao, Single-crystalline gallium-doped indium oxide nanowires, Appl. Phys. Lett. **83** (2003) 761–763.
- [4] L.J. Lauhon, M.S. Gudiksen, D. Wang, C.M. Lieber, Epitaxial core–shell and core–multishell nanowire heterostructures, Nature (London) **420** (2002) 57–61.
- [5] J.-W. Lee, M.-H. Ham, J.-M. Myoung, Gate-controlled transport in GaN nanowire devices with high-k Si₃N₄ gate dielectrics, Sol. Stat. Comm. **145** (2008) 327–331.
- [6] M.-E. Pistol, C.E. Pryor, Band structure of core–shell semiconductor nanowires, Phys. Rev. B **78** (2008) 115319–115331.
- [7] R.N. Musin, X.-Q. Wang, Structural and electronic properties of epitaxial core-shell nanowire heterostructures, Phys. Rev. B **71** (2005) 155318–155321.
- [8] M. Zgirski, K.-P. Riikonen, V. Tuboltsev, P. Jalkanen, T.T. Hogisto, K.Y. Arutyunov, Ion beam shaping and downsizing of nanostructures, Nanotechnology **19** (2008) 055301–055306.
- [9] C.C. Chen, C.C. Yeh, C.H. Chen, M.Y. Yu, H.L. Liu, J.J. Wu, K. H. Chen, L.C. Chen, J.Y. Peng, Catalytic Growth and Characterization of Gallium Nitride Nanowires, J. Am. Chem. Soc. **123** (2001) 2791–2798.
- [10] J. Zhang, X.S. Peng, X.F. Wang, Y.W. Wang, L.D. Zhang, Micro-Raman investigation of GaN nanowires prepared by direct reaction Ga with NH₃, Chem. Phys. Lett. **345** (2001) 372–376.
- [11] R.S. Wagner, W.C. Ellis, Vapor–liquid–solid mechanism of single crystal growth, Appl. Phys. Lett. **4** (1964) 89–90.
- [12] O. Hayden, R. Agarwal, W. Luc, Semiconductor nanowire devices, Nano Today **3** (5–6) (2008) 12–22.
- [13] D. Fuster, B. Alen, L. Gonzalez, Y. Gonzalez, J. Martinez-Pastor, M.U. Gonzalez, J.M. Garcia, Isolated self-assembled InAs/InP(001) quantum wires obtained by controlling front evolution, Nanotechnology **18** (2007) 035604–035609.
- [14] J.M. Luttinger, W. Kohn, Motion of electrons and holes in perturbed periodic fields, Phys. Rev. **97** (1955) 869–883.
- [15] M. Abramowitz, I.A. Stegun, Handbook of Mathematical Functions, Dover, New York, 1972.
- [16] F.B. Pedersen, Y.-C. Chang, Energy levels of one and two holes in parabolic quantum dots, Phys. Rev. B **53** (1996) 1507–1516.
- [17] I. Vurgaftman, J.R. Meyer, L.R. Ram-Mohan, Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys, J. Appl. Phys. **89** (2001) 5815–5875.

SUMMARY**MULTIBAND MODEL OF THE VALENCE-BAND ELECTRONIC STRUCTURE IN CYLINDRICAL GaAs NANOWIRES**

Nemanja A. Čukarić, Milan Ž. Tadić

Faculty of Electrical Engineering, University of Belgrade, Belgrade, Serbia

(Scientific paper)

We compute the hole states in the GaAs free-standing nanowires, and in the GaAs/(Al,Ga)As core-shell nanowires of type I-s, which are grown along the [100] direction. The hole states are extracted from the 4-band Luttinger-Kohn Hamiltonian, which explicitly takes into account mixing between the light and heavy holes. The axial approximation is adopted, which allowed classification of states according to the total angular momentum (f_z when expressed in units of the Planck constant). The envelope functions are expanded in Bessel functions of the first kind. The dispersion relations of the subbands $E(k_z)$ obtained by the devised method do not resemble parabolas, which is otherwise a feature of the dispersion relations of the conduction subbands. Furthermore, the energy levels of holes whose total orbital momentum is $f_z = 1/2$ are shown to cross for a free-standing wire. The low energy $f_z = 1/2$ states are found to anticross, but these anticrossings turn into crossings when the ratio of the inner and outer radius of the core-shell wire takes a certain value. The influence of the geometric parameters on the dispersion relations is considered for both free standing and core-shell nanowires.

Ključne reči: Elektronska struktura • Višezonski modeli • Nanožica • Kvantna žica • Jezgro-omotač
Key words: Electronic structure • Multiband models • Nanowire • Quantum wire • Core-shell