

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ
ФЕДЕРАЦИИ

федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Национальный исследовательский Нижегородский
государственный университет им. Н.И. Лобачевского»

Физический факультет

Кафедра электроники твёрдого тела

**ИССЛЕДОВАНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК В
ГЕКСАГОНАЛЬНЫХ НАНОТРУБКАХ НА ОСНОВЕ INAS**

Выпускная квалификационная работа
студента 2 курса магистратуры группы
05152

Еремеев А.В.

Основная профессиональная
образовательная программа подготовки
магистров по
направлению 11.04.04 – Электроника и
наноэлектроника
(профиль программы: наноэлектроника)

_____ Еремеев А.В.
(подпись)

Научный руководитель:
к. ф.-м. н., доц. каф. ЭТТ

_____ Хазанова С.В.
(подпись)

Нижегород 2017

Содержание

1	Введение	4
2	Метод выращивания исследуемых структур.....	6
3	Цели работы	8
4	Теоретическая часть	9
4.1	Спектр носителей в низкоразмерных структурах.....	9
4.2	Численное решение уравнения Шрёдингера методом конечных разностей для одномерного потенциала.....	15
4.3	Численное решение уравнения Шрёдингера методом конечных разностей для двумерного потенциала	17
4.4	Итерационная схема решения двумерного уравнения Шрёдингера-Пуассона в квантовых структурах.....	18
4.5	Учёт влияния магнитного поля на уровни энергии и оценка величины расщепления Зеемана.....	21
4.6	Эффект Ааронова-Бома.....	22
5	Практическая часть.....	24
5.1	Исследование одномерных структур	24
5.2	Исследование структур с квадратным сечением	29
5.3	Исследование структур с прямоугольным сечением	30
5.4	Исследование влияния шага сетки на точность	33
5.5	Исследование влияния формы сетки на точность	35
5.6	Расчёт концентрации электронов в структуре с квадратным сечением	

5.7	Исследование структур с шестиугольным сечением	38
5.8	Исследование влияния магнитного поля на уровни энергии и проводимость	42
5.9	Исследование влияния затворного напряжения на уровни энергии ..	47
6	Результаты работы и выводы	49
7	Положения, выносимые на защиту	50
8	Список литературы	51

1 Введение

Классическая механика, хорошо описывающая системы макроскопических масштабов, не способна описать все явления на уровне молекул, атомов, электронов и фотонов. Квантовая механика адекватно описывает основные свойства и поведение атомов, ионов, молекул, конденсированных сред, и других систем с электронно-ядерным строением. Квантовая механика также способна описывать поведение электронов, фотонов, а также других элементарных частиц, однако более точное релятивистски инвариантное описание превращений элементарных частиц строится в рамках квантовой теории поля. Эксперименты подтверждают результаты, полученные с помощью квантовой механики.

Квантовая механика применяется при исследовании низкоразмерных структур: квантовых ям, квантовых нитей и квантовых точек, широко используемых в микро- и нанoeлектронике, при создании полупроводниковых (транзисторы, туннельные диоды) и оптических (лазеры) приборов.

Потенциальная яма – область пространства, где присутствует локальный минимум потенциальной энергии частицы.

Если в потенциальную яму попала частица, энергия которой ниже, чем необходимая для преодоления краёв ямы, то возникнут колебания частицы в яме. Амплитуда колебаний будет обусловлена собственной энергией частицы. Частица, находящаяся на дне потенциальной ямы, пребывает в состоянии устойчивого равновесия, то есть при отклонении частицы от точки минимума потенциальной энергии возникает сила, направленная в противоположную отклонению сторону. Если частица подчиняется квантовым законам, то даже несмотря на недостаток энергии она с определённой вероятностью может покинуть потенциальную яму (явление туннельного эффекта).

Потенциальный барьер — противоположное понятие. Это область пространства, где присутствует локальный максимум потенциальной энергии.

Особенность спектра низкоразмерных структур – дискретность в направлении квантования, т.е., в направлении, в котором линейные размеры структуры сопоставимы с длиной волны де-Бройля:

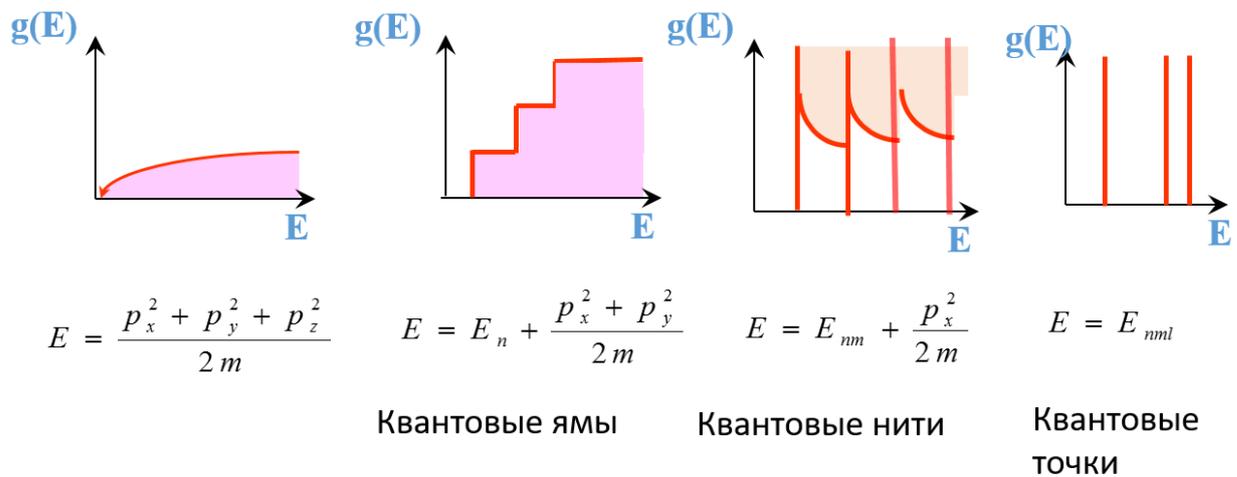


Рис. 1 Спектры низкоразмерных структур

В данной работе пойдёт речь про исследование движения частиц в потенциальных ямах: будут рассчитаны уровни энергии, на которых она может находиться, и будет получен вид функции, описывающей движение частицы в потенциальной яме. Вычисления будут производиться численно и аналитически.

Так как в общем случае потребуется решать задачу с неизвестной функцией потенциала, аналитическое решение невозможно, поэтому применяют численные методы, дискретизируя потенциал и решая уравнение Шрёдингера методом конечных разностей.

2 Метод выращивания исследуемых структур

Полупроводниковые нановискеры, или нитевидные кристаллы нанометрового диапазона (ННК), становятся в последнее время предметом повышенного интереса как с фундаментальной, так и с прикладной точек зрения. Их уникальные свойства определяются как геометрическими параметрами — обычно их поперечный размер составляет 10–100 нм, а высота на несколько порядков превосходит диаметр, так и возможностью выращивания бездефектных гетероструктур с разными (зачастую значительно) постоянными кристаллографической решетки. [1]

Это происходит потому, что релаксация напряжений, возникающих вследствие различия в постоянных решетки, происходит на боковых гранях ННК. Возможным оказывается также бездислокационный рост ННК на инородных подложках, например, АШВV ННК на кремниевой подложке. При росте ННК вначале на поверхности подложки формируют капли — катализаторы роста (обычно из золота) под которыми и происходит рост ННК, диаметр которых определяется размером капли. В общем случае при молекулярно-пучковой эпитаксии (МПЭ) ННК основным механизмом роста является диффузионный, когда атомы по боковым граням ННК поступают на границу раздела «капля–вершина ННК», где и происходит кристаллизация.

Варьируя элементный состав молекулярных потоков, направляемых на подложку, возможно формирование гетероструктурных ННК. При определенных условиях роста, помимо объектов типа КТ, образуется квантовая яма (КЯ) узкозонного материала вокруг тела ННК вследствие латерального роста. В ряде случаев данный эффект является нежелательным, так как излучение наблюдается как из области КТ, так и КЯ.

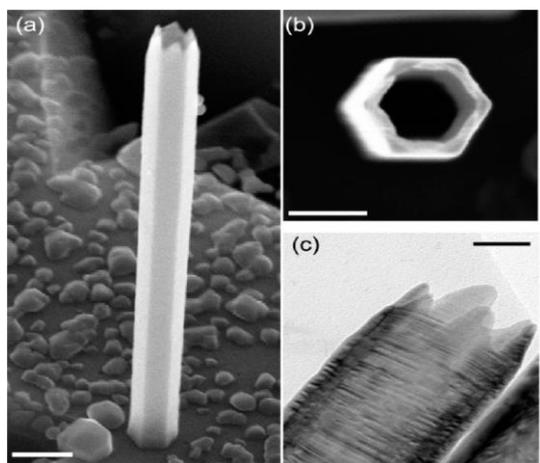


Рис. 2 Изображение выращенной квантовой нити

3 Цели работы

1. Расчёт спектра и огибающих волновых функций с помощью решения уравнения Шрёдингера для 1D- и 2D-структур
2. Исследование влияния шага сетки на точность расчётов
3. Сравнение результатов тестовых задач с аналитическими решениями
4. Учёт влияния распределения заряда на исследуемые характеристики с помощью нелинейного уравнения Пуассона
5. Расчёт концентрации носителей в нанопроволоке с квадратным и шестиугольным поперечным сечением
6. Исследование влияния магнитного поля на энергетические уровни в шестиугольных структурах с разным радиусом

4 Теоретическая часть

4.1 Спектр носителей в низкоразмерных структурах

Состояния квантовой системы можно определить с помощью волновой функции, интеграл от квадрата которой будет определять вероятность нахождения частицы в данной точке квантовой системы. [2]

Вид волнового уравнения физической системы определяется её гамильтонианом, приобретающим значение во всём аппарате квантовой механики. [3]

Вид гамильтониана свободной частицы устанавливается уже общими требованиями, связанными с периодичностью и изотропностью пространства и принципом относительности Галилея. В классической механике эти требования приводят к квадратичной зависимости энергии частицы от её импульса:

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad (1)$$

где постоянная m называется массой свободной частицы. В квантовой механике те же требования приводят к такому же соотношению для собственных значений энергий и импульса – одновременно измеримых сохраняющихся (для свободной частицы) величин.

Но для того, чтобы соотношение (1) имело место для всех собственных значений энергии и импульса, оно должно быть справедливым и для их операторов:

$$\hat{H} = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} \quad (2)$$

Подставив сюда оператор импульса, получим гамильтониан свободно движущейся частицы в виде:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \quad (3)$$

где $\Delta = \partial^2 / \partial x^2 + \partial^2 / \partial y^2 + \partial^2 / \partial z^2$ – оператор Лапласа.

Гамильтониан системы невзаимодействующих частиц равен сумме гамильтонианов каждой из них:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_a \frac{\Delta_a}{m_a} \quad (4)$$

где индекс a нумерует частицы, Δ_a – оператор Лапласа, в котором дифференцирование производится по координатам a -й частицы.

В классической (нерелятивистской) механике взаимодействие частиц описывается аддитивным членом в функции Гамильтона – потенциальной энергией взаимодействия U , являющейся функцией координат частиц.

Прибавлением такой же функции к гамильтониану системы описывается и взаимодействие частиц в квантовой механике:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_a \frac{\Delta_a}{m_a} + U(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots) \quad (5)$$

первый член можно рассматривать как оператор кинетической энергии, а второй — как оператор потенциальной энергии. В частности, гамильтониан для одной частицы, находящейся во внешнем поле,

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(x, y, z) \quad (6)$$

где $U(x, y, z)$ — потенциальная энергия частицы во внешнем поле.

Подстановка этих выражений в общее уравнение дает волновые уравнения для соответствующих систем. Выпишем здесь волновое уравнение для частицы во внешнем поле

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + U(x, y, z) \Psi \quad (7)$$

Уравнение, определяющее стационарные состояния, принимает вид

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + [E - U(x, y, z)] \psi = 0 \quad (8)$$

Уравнения (7), (8) были установлены Шредингером в 1926 г. и называются уравнениями Шредингера.

Для свободной частицы уравнение (8) имеет вид

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + E \psi = 0 \quad (9)$$

Это уравнение называется стационарным уравнением Шредингера и имеет конечные во всем пространстве решения при любом положительном значении энергии E . Для состояний с определенными направлениями движения этими решениями являются собственные функции оператора импульса, причем $E = p^2/2m$. Полные (зависящие от времени) волновые функции таких стационарных состояний имеют вид:

$$\Psi = \text{const} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - pt)} \quad (10)$$

Каждая такая функция – плоская волна – описывает состояние, в котором частица обладает определёнными энергией E и импульсом p .

В качестве простого примера одномерного движения рассмотрим движение в бесконечной прямоугольной потенциальной яме [2], т.е. в поле с функцией $U(x)$:

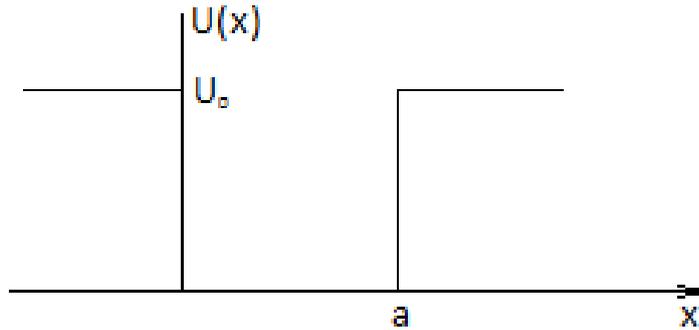


Рис. 3 Потенциальная яма

$$U(x) = 0 \text{ при } 0 < x < a$$

$$U(x) = U_0 \text{ при } x < 0, x > a$$

Заранее очевидно, что при $E < U_0$ спектр будет дискретным, а при $E > U_0$ имеется непрерывный спектр двукратно вырожденных уровней.

В области $0 < x < a$ имеем уравнение Шрёдингера:

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi = 0 \quad (11)$$

Штрих означает дифференцирование по x .

А в области вне ямы:

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0) \psi = 0 \quad (12)$$

При $x = 0$, решения этих уравнений должны переходить друг в друга непрерывно и с непрерывной производной, а при $x = \pm \infty$ решение уравнения (12) должно оставаться конечным (для дискретного спектра, $E < U_0$ – обращаться в нуль).

Разберём предельный случай, когда $U_0 = \infty$, т.е. случай бесконечно глубокой потенциальной ямы.

Движение происходит лишь на ограниченном точками $x = 0$, $x = a$ пространстве и граничное условие в этих точках:

$$\psi = 0 \quad (13)$$

Решения внутри ямы ищем в виде:

$$\psi = c \cdot \sin(kx + \delta) \quad (14)$$

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (15)$$

Условие $\psi = 0$ при $x = 0$ даёт $\delta = 0$, после чего то же условие при $x = a$ даёт $\sin(ka) = 0$, откуда $ka = \pi n$ (n – целые положительные числа, начиная с единицы) или

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2 \quad (16)$$

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

Этим определяются уровни энергии частицы в потенциальной яме.

Нормированные волновые функции стационарных состояний:

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi n}{a} x \quad (17)$$

На основании этих результатов можно непосредственно написать уровни энергии частицы в прямоугольном потенциальном ящике:

$$E_{n_1 n_2 n_3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} + \frac{n_3^2}{c^2} \right) \quad (18)$$

Где $n_1, n_2, n_3 = 1, 2, 3, \dots$ - номера уровней энергии,

a, b, c – длина, ширина и высота потенциального ящика

Соответствующие волновые функции:

$$\psi_{n_1 n_2 n_3} = \sqrt{\frac{8}{abc}} \sin \frac{\pi n_1}{a} x \cdot \sin \frac{\pi n_2}{b} y \cdot \sin \frac{\pi n_3}{c} z \quad (19)$$

Аналитическое решение существует для ряда задач, но для реальных материалов (ям конечной глубины) использование аналитического расчёта не представляется возможным. Отсюда следует необходимость проведения численных расчётов, позволяющих учитывать влияние формы геометрии структуры, технологических параметров выращивания, различные типы материалов, из которых состоят квантоворазмерные структуры, влияние как внешних, так и встроенных электрических и магнитных полей.

4.2 Численное решение уравнения Шрёдингера методом конечных разностей для одномерного потенциала

Так как решить уравнения Шрёдингера аналитически для случая сложных потенциалов не представляется возможным, можно использовать для решения метод конечных разностей. [4]

Суть метода заключается в дискретизации потенциала, в результате чего он превращается в сетку с постоянным шагом. Чем меньше шаг этой сетки – тем точнее будут рассчитаны уровни энергии и волновая функция, но тем более ресурсоёмкой будет задача. [5]

Представляя дифференциал в конечных разностях, получим следующую формулу:

$$\frac{\psi_{n+1} - 2\psi_n + \psi_{n-1}}{\Delta x^2} - \frac{2m}{h^2} U_n \psi_n = -E \frac{2m}{h^2} \psi_n \quad (20)$$

Стационарное уравнение Шрёдингера в этом случае примет вид: [2]

$$\sum_i H_{i,j} \psi_j = E \psi_j \quad (21)$$

где i – номер точки на координатной прямой.

Гамильтониан распишем через символы Кронекера: (6)

$$H_{i,j} = \delta_{i,j} \left(V_i + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{2}{\Delta x^2} \right) + (\delta_{i-1,j} + \delta_{i+1,j}) \frac{-\hbar^2}{2m \Delta x^2} \quad (22)$$

Перебирая последовательно i и j , получим трёхдиагональную матрицу коэффициентов:

$$\begin{pmatrix} R_1 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & R_2 & 1 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & R_3 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & R_N \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \dots \\ \psi_N \end{pmatrix} = \varepsilon \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \dots \\ \psi_N \end{pmatrix}$$

$$R_N = -2 - \frac{2m}{h^2} U_n \Delta x^2$$

$$\varepsilon = -E \frac{2m}{h^2} \Delta x^2 \quad (23)$$

Вычислив от матрицы (23) собственные значения, получим набор уровней энергии, в которых может находиться частица в квантовой яме. Получив набор собственных векторов, мы получим точки относительного соответствующего этому вектору уровня энергии, по которым частица будет двигаться в исследуемой низкоразмерной структуре.

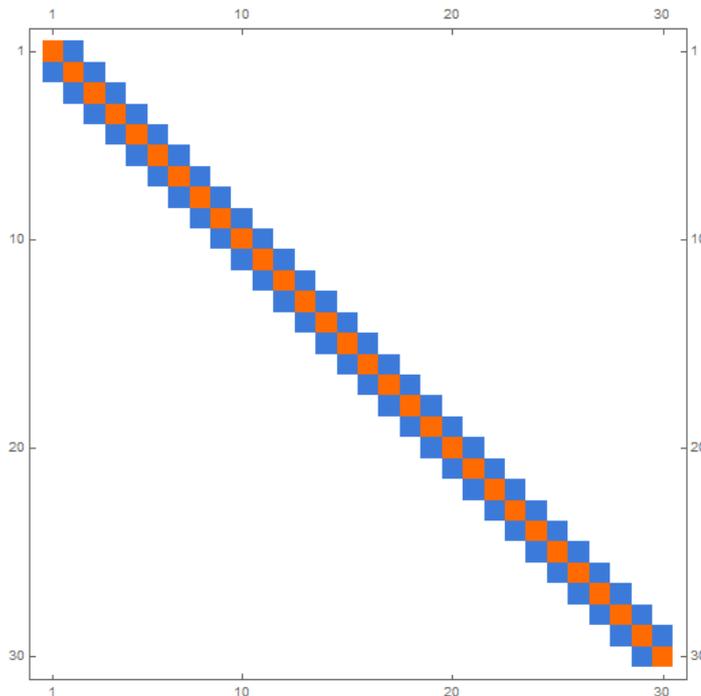


Рис. 4 Вид трёхдиагональной матрицы

4.3 Численное решение уравнения Шрёдингера методом конечных разностей для двумерного потенциала

Для двумерных структур решение выглядит аналогично: записываем дифференциал по трёхточечной формуле:

$$\frac{\psi_{i+1,j} - 2\psi_{i,j} + \psi_{i-1,j}}{\Delta x^2} + \frac{\psi_{i,j+1} - 2\psi_{i,j} + \psi_{i,j-1}}{\Delta y^2} - \frac{2m}{\hbar^2} U_{i,j} \psi_{i,j} = -E \frac{2m}{\hbar^2} \psi_{i,j} \quad (24)$$

Дискретизуя пространство, получаем матричный вид уравнения Шрёдингера: (6)

$$\sum_{k,l} H_{i,j,k,l} \psi_{k,l} = E \psi_{i,j} \quad (25)$$

В этом случае матрица примет пятидиагональный вид:

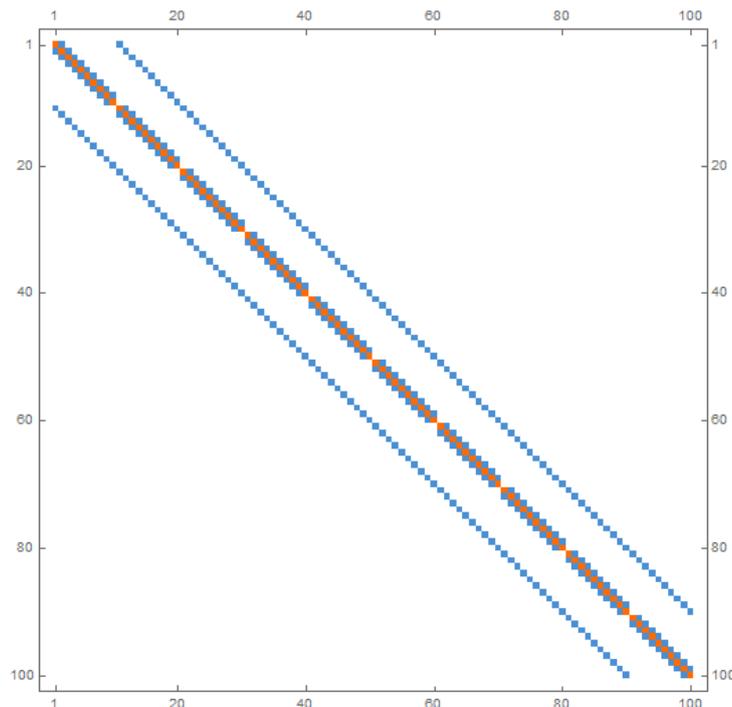


Рис. 5 Вид пятидиагональной матрицы

4.4 Итерационная схема решения двумерного уравнения Шрёдингера-Пуассона в квантовых структурах

Физическая модель, используемая для описания граничных состояний в квантовых проволоках, требует решения нелинейного уравнения Пуассона для электростатического потенциала ϕ : (7)

$$\nabla[\epsilon \nabla \phi] = -\rho[\phi] = -q[-n[\phi] + p[\phi] + N_D^+[\phi] - N_A^-[\phi]], \quad (26)$$

Связанного с решением уравнения Шрёдингера.

Для практического применения более интересен случай рассмотрения квантовой электронной плотности: (7)

$$n_q = \frac{1}{\pi} \left(\frac{2m^* k_B T}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \sum_n \psi_n^2 F_{-1/2} \left(\frac{E_F - E_n}{k_B T} \right), \quad (27)$$

где T – температура, E_F – уровень Ферми, k_B – постоянная Больцмана.

Система связанных нелинейных дифференциальных уравнений обычно решается итерационным методом:

Решаем нелинейное уравнение Пуассона, используя квантовую электронную плотность n_q из предыдущей итерации:

$$\nabla \in \nabla \phi^{(k+1)} = -\rho[n_q^{(k)}, \phi^{(k+1)}] \quad (28)$$

Решаем уравнение Шрёдингера, используя прошлую электронную плотность:

$$\hat{H}[\phi^{(k+1)}, V_{xc}[n_q^{(k)}] \phi_i^{(k+1)}] = E_i^{(k+1)} \psi_i^{(k+1)} \quad (29)$$

Рассчитываем промежуточную электронную плотность:

$$n_{q,int}^{(k+1)} = n_q[E_i^{(k+1)}, \psi_i^{(k+1)}] \quad (30)$$

Вводим релаксационный множитель для обеспечения сходимости:

$$n_q^{(k+1)} = \omega^{(k+1)} n_{q,int}^{(k+1)} + (1 - \omega^{(k+1)}) n_q^{(k)} \quad (31)$$

Повторяем итерации, пока n_q не станет стационарной:

$$\| n_q^{(k+1)} - n_q^{(k)} \|_2 \leq \varepsilon \quad (32)$$

Проблема этого метода заключается в нестабильности итераций, контролируемых только «подрелаксационной» процедурой. Необходимый релаксационный параметр $\omega(k)$ неизвестен и нуждается в подгонке во время вычислений. Если он слишком большой – заряд осциллирует без сходимости, если слишком маленький – требуется очень много итераций до полного схождения. (7)

Для решения этих проблем требуется модифицировать алгоритм, дабы уменьшить связь между уравнением Шрёдингера и уравнением Пуассона и уменьшить осцилляции заряда. Сделать это достаточно просто.

Если мы знаем зависимость электронной плотности от потенциала, мы можем решить нелинейное уравнение Пуассона:

$$\nabla \varepsilon \nabla \varphi = -\rho[n_q[\varphi], \varphi], \quad (33)$$

Которое относительно легко решается методом Ньютона без необходимости связи итераций с уравнением Шрёдингера.

Более практичное решение – найти аппроксимирующее выражение для квантовой электронной плотности как функции потенциала и использовать его в предиктор-корректорном методе. В этом случае процедура будет разъединять оба уравнения и переносить наиболее нелинейные части в нелинейное уравнение Пуассона следующего вида:

$$\nabla \varepsilon \nabla \varphi = -\rho[\tilde{n}_q[\varphi], \varphi] \quad (34)$$

Предсказанный результат для электронной плотности и потенциала будет скорректирован на следующей итерации уравнением Шрёдингера.

Проводимость можно рассчитать по следующей формуле:

$$G^\sigma = \frac{e^2}{h} \sum_n \int_{B_{n,\sigma}} -\frac{\partial f(E - E_f, T)}{\partial E} dE \quad (35)$$

Где df – распределение Ферми:

$$f(\varepsilon_{n,k,\sigma} - E_f, T) = \frac{1}{1 + e^{(\varepsilon_{n,k,\sigma} - E_f)/k_B T}} \quad (36)$$

4.5 Учёт влияния магнитного поля на уровни энергии и оценка величины расщепления Зеемана

Запишем уравнение Шрёдингера с учётом влияния магнитного поля:

$$-\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^2 \hat{p}_i \left((m^{-1})_{i,j}(x,y) \hat{p}_j \Psi(x,y) \right) + V(x,y) \Psi(x,y) = E \Psi(x,y) \quad (37)$$

где $\vec{\hat{p}}$:

$$\vec{\hat{p}} = -i\hbar \vec{\nabla} + e\vec{A} \quad (38)$$

$$\vec{A} = \frac{B}{2} \begin{pmatrix} -y \\ x \\ 0 \end{pmatrix} \quad (39)$$

Величину расщепления Зеемана несложно оценить по следующей формуле:

$$v_z^\sigma(r) = g^*(r) \mu_B B \eta_\sigma, \quad (40)$$

где g – g -фактор, μ – магнетон Бора, B – магнитное поле, n – орбитальное квантовое число.

Возьмём g -фактор равным 14, магнитное поле равным 5 Тл, получаем результат: величина расщепления Зеемана равна 4.05 мэВ.

Таким образом, если расстояние между уровнями меньше или равно этой величины, расщепление Зеемана вносит сильный вклад и физичность расчётов теряется. Это следует учитывать при выборе величины максимального магнитного поля. Для приведённых ниже расчётов физичность результатов сохраняется до величины магнитного поля, равной приблизительно 2.5 Тл.

4.6 Эффект Ааронова-Бома

Волновая природа электрона при квантовом рассмотрении имеет непосредственную аналогию с другими волновыми процессами (электромагнитными, акустическими и т.д.). Например, уравнения, описывающие электрон в двумерных наноструктурах в квантовом баллистическом режиме, эквивалентны уравнениям распространения электромагнитного ТМ-поля в плоскопараллельных волноводах.

Электроны, проходящие по внутреннему и внешнему периметру, приобретают разную фазу от магнитного поля, так как траектории захватывают разный магнитный поток. Соответственно, фундаментальный период ОАБ будет наблюдаться только в случае, если отношение площади дырки к площади рукавов будет существенно больше единицы.

В настоящее время этот эффект объясняется тем, что в области движения электрона не равен нулю векторный потенциал A , который входит в формулу для канонического импульса электрона:

$$\vec{\Pi} = \vec{P} + e\vec{A} \quad (41)$$

и, соответственно, в формулу для длины волны Де-Бройля:

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{\Pi} \quad (42)$$

Таким образом, векторный потенциал влияет на изменение фазы волн Де-Бройля, падающих на экран, меняя тем самым картину интерференции.

При решении задачи о транспорте электрона в магнитном поле через одномерное кольцо оказывается, что проводимость устройства периодична по магнитному полю. Причём период осцилляции проводимости равен магнитному полю, соответствующему одному кванту магнитного потока через площадь кольца.

$$\Phi_0 = \frac{2\pi\hbar c}{|e|} \quad (43)$$

Этот эффект осцилляции проводимости в магнитном поле известен как эффект Ааронова-Бома.

Известно, что в экспериментах по наблюдению осцилляции Ааронова-Бома (ОАБ) в двумерных нанокольцах наблюдаются нерегулярные осцилляции проводимости.

В трубчатых наноструктурах магнетосопротивление G периодически в магнитном поле с периодом Φ_0 / A . Где $\Phi_0 = h / e$ - квант магнитного потока, e – заряд электрона, h – постоянная планка, A – площадь, пронизываемая потоком. Эффект Ааронова-Бома можно трактовать как результат интерференции волн, Огибающих кольцо (кольцевую структуру) с разных сторон. При этом можно говорить о том, что период осцилляций зависит от размера структуры.

5 Практическая часть

5.1 Исследование одномерных структур

В работе исследуем образцы GaAs квадратного и прямоугольного сечения, а также InAs шестиугольного сечения с шестиугольным отверстием при температуре 30К, аналитические и численные значения рассчитываем в WolframMathematica 10 и в разработанной нами специализированной программе, графики строим в Origin 7 и Excel.

Результаты для бесконечной ямы:

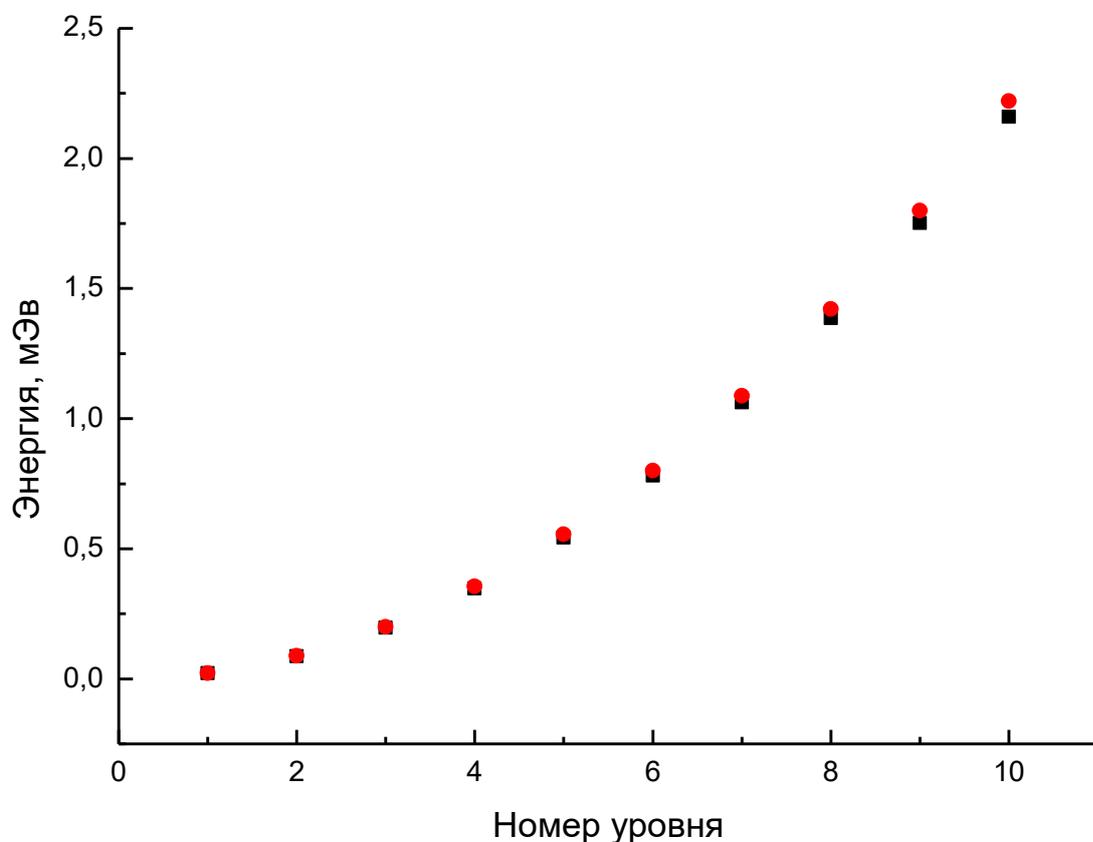


Рис. 6 Энергетические уровни в бесконечной потенциальной яме. Красные точки – теоретические значения. Чёрные точки – численно рассчитанные значения.

Как видно из графика, численные и аналитические результаты лежат близко друг к другу.

Построим огибающие волновых функций для первого и второго уровней:

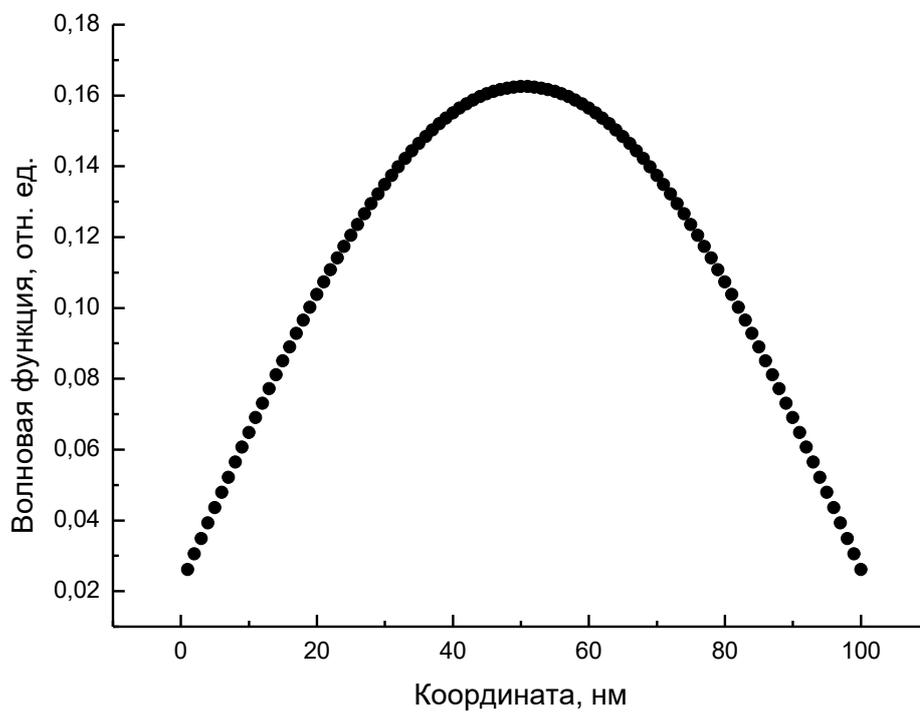


Рис. 7 Волновая функция для первого уровня

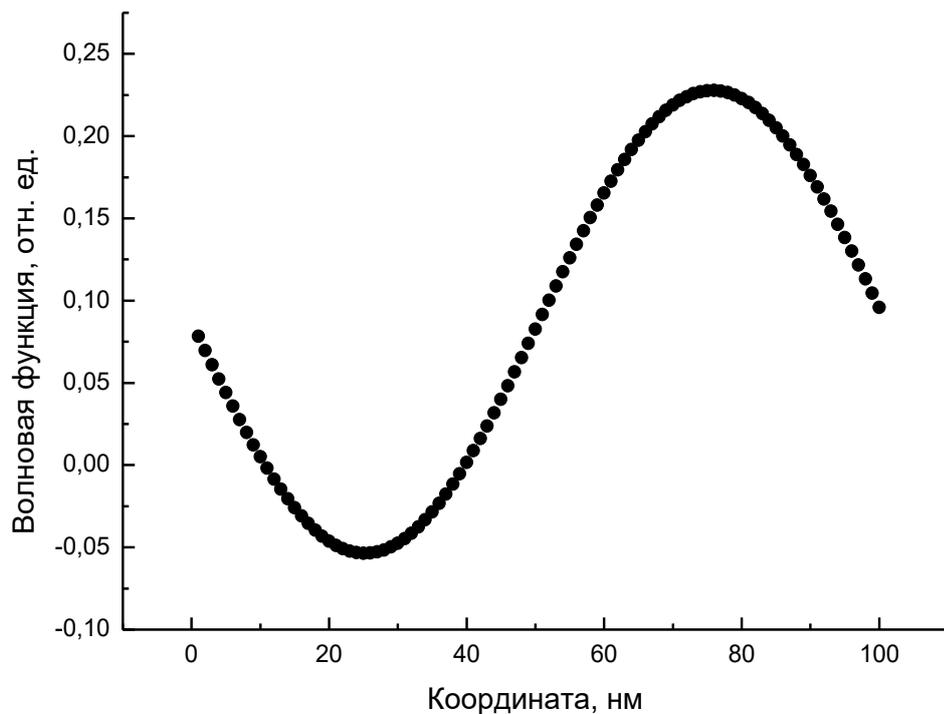


Рис. 8 Волновая функция для второго уровня

Теперь рассмотрим конечную потенциальную яму шириной 35 нм и глубиной 300 мэВ:

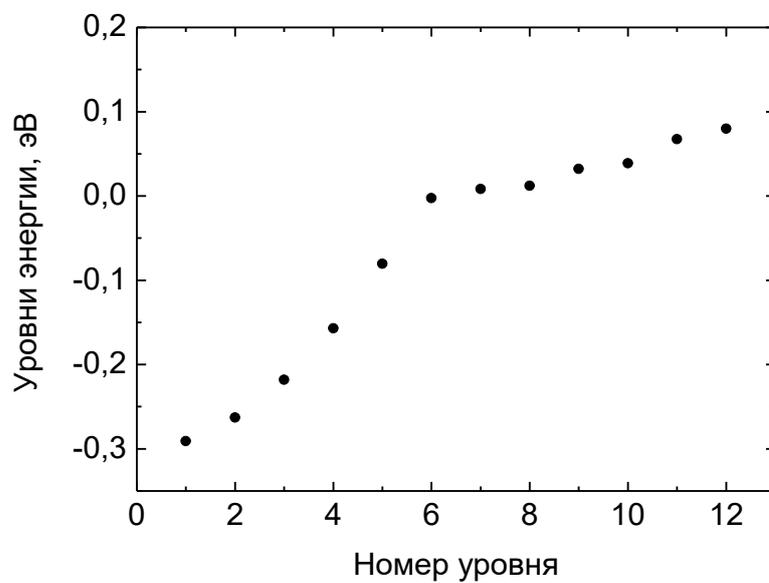


Рис. 9 Зависимость энергии уровня от его номера

Изгиб на графике уровней наблюдается из-за того, что седьмой и более высокие уровни лежат вне квантовой ямы.

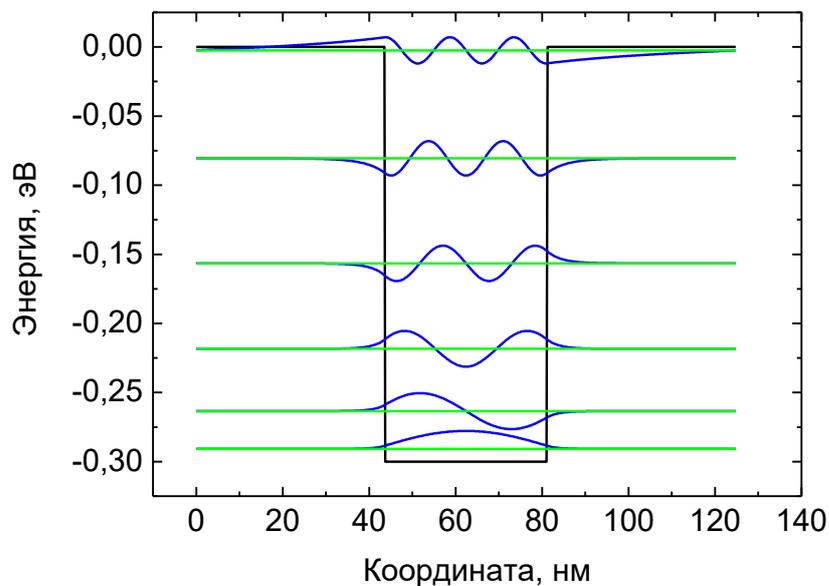


Рис. 10 Огибающие волновых функций на первых шести уровнях в конечной потенциальной яме

Построим зависимость уровней энергии от ширины потенциальной ямы:

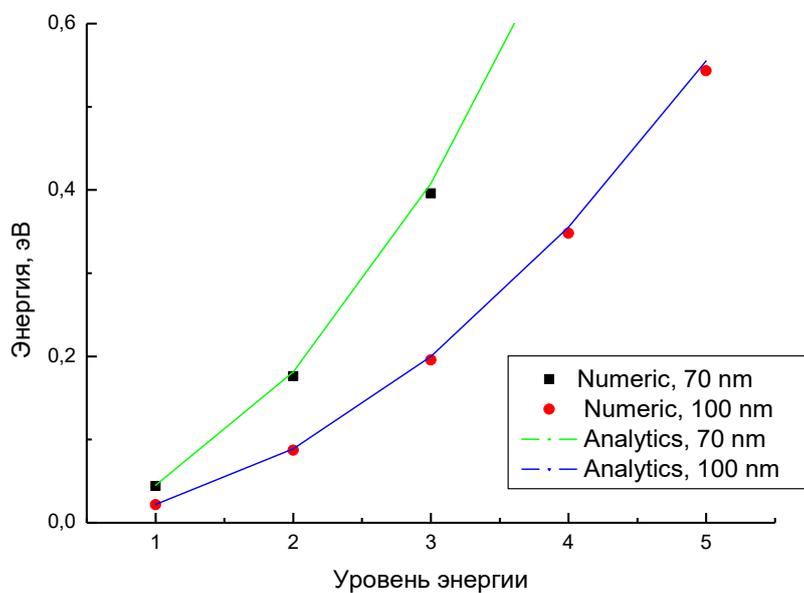


Рис. 11 Зависимость уровней энергии от ширины потенциальной ямы

Перейдём к рассмотрению двумерных структур. Построим двумерную сетку:

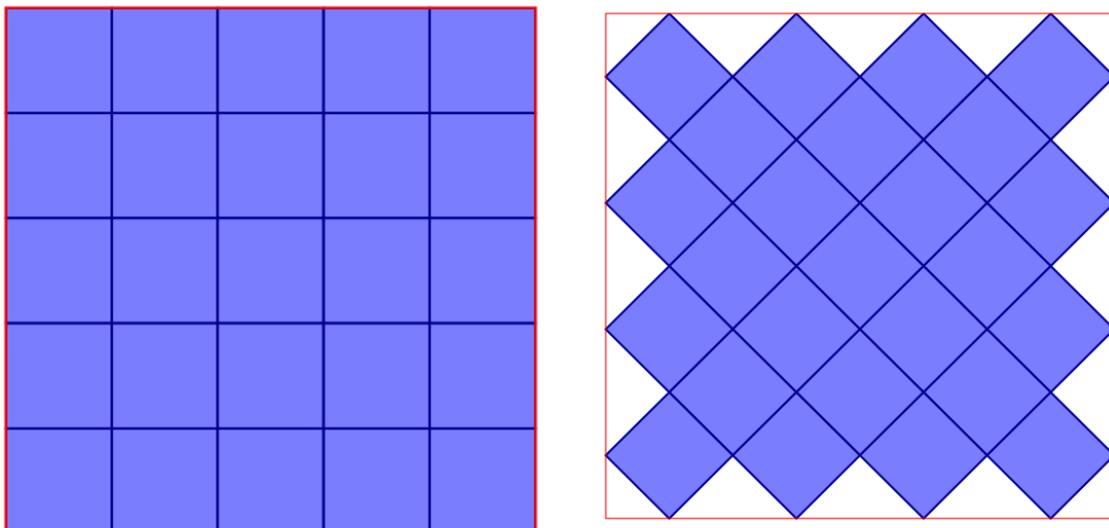


Рис. 12 Сетки с границами (100) – слева, и (110) – справа.

5.2 Исследование структур с квадратным сечением

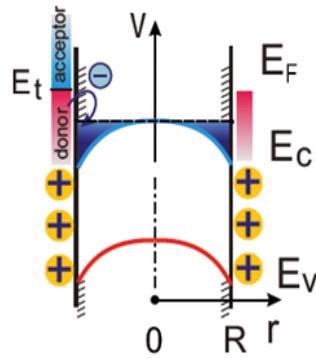


Рис. 13 Потенциал в нанопроволоке

Теперь рассмотрим вид волновой функции в 2D-квантовой проволоке:

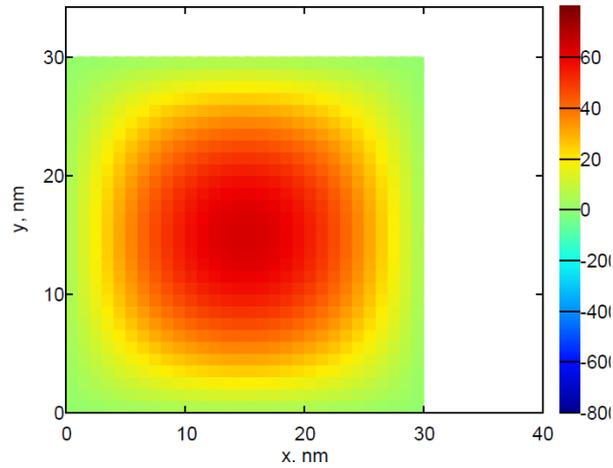


Рис. 14 Вид волновой функции на первом уровне

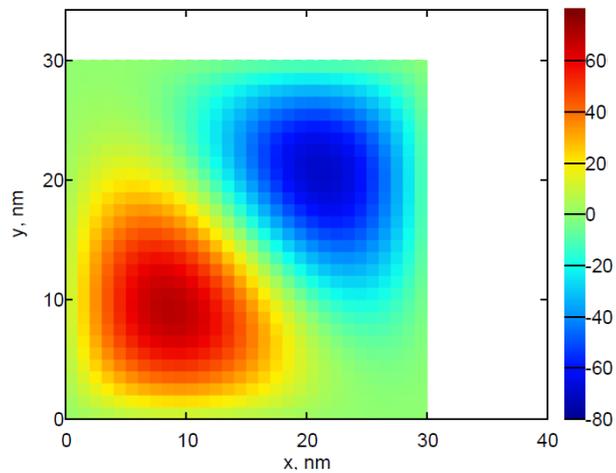
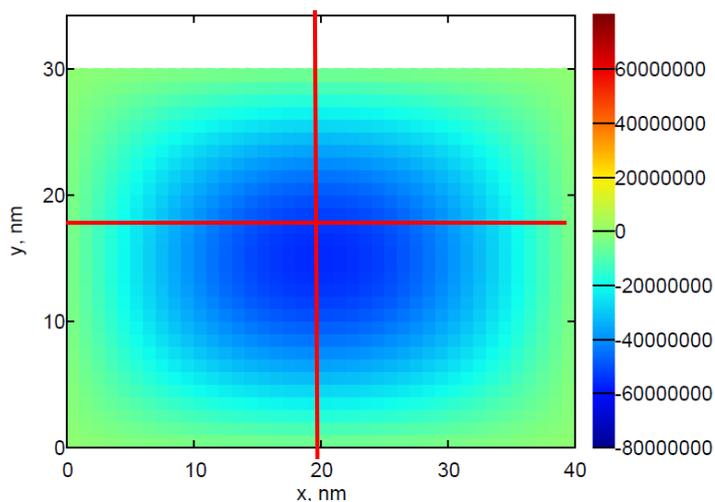


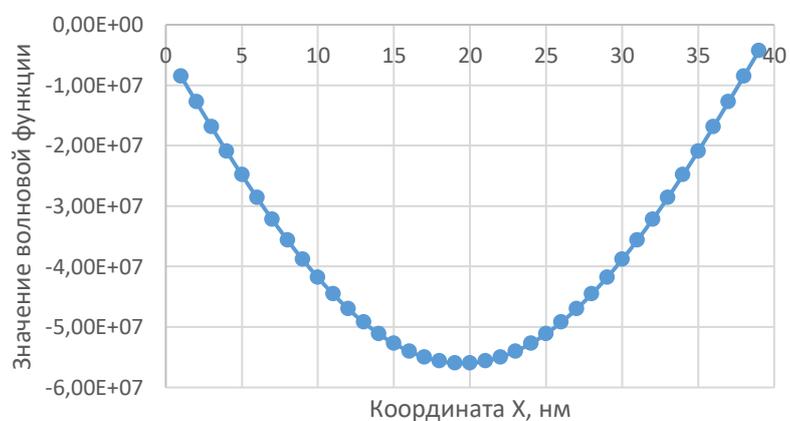
Рис. 15 Вид волновой функции на втором уровне

5.3 Исследование структур с прямоугольным сечением

Сделаем срезы волновых функций для первого, второго и третьего уровней:



Срез, параллельный X, 1й уровень



Срез, параллельный Y, 1й уровень

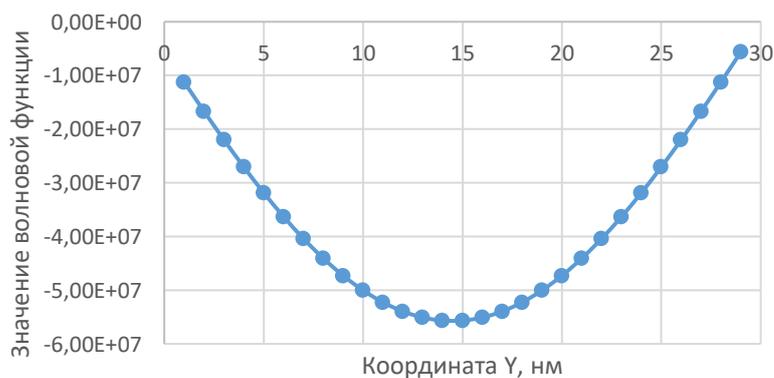


Рис. 16 Срезы волновой функции для 1го уровня

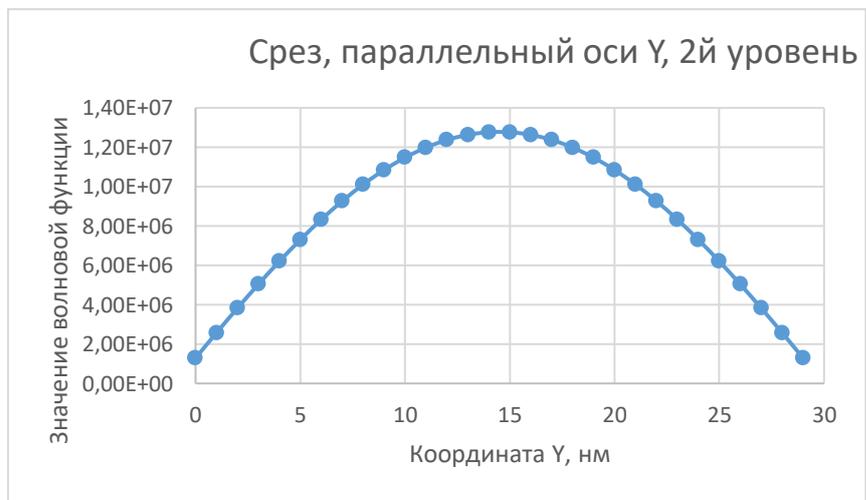
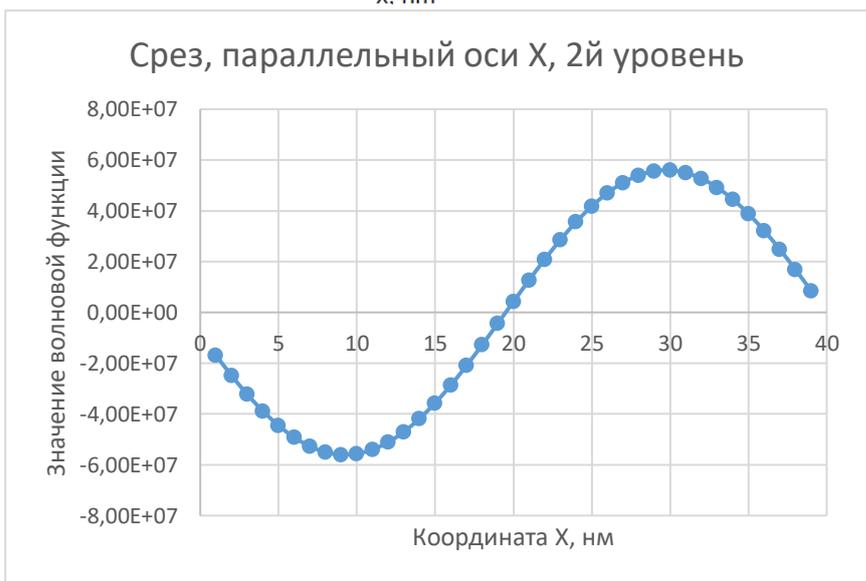
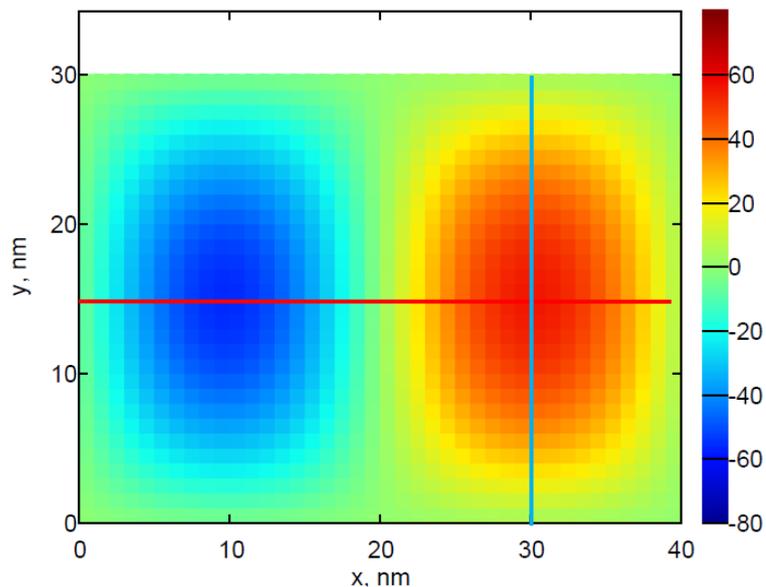


Рис. 17 Срезы волновой функции для 2го уровня

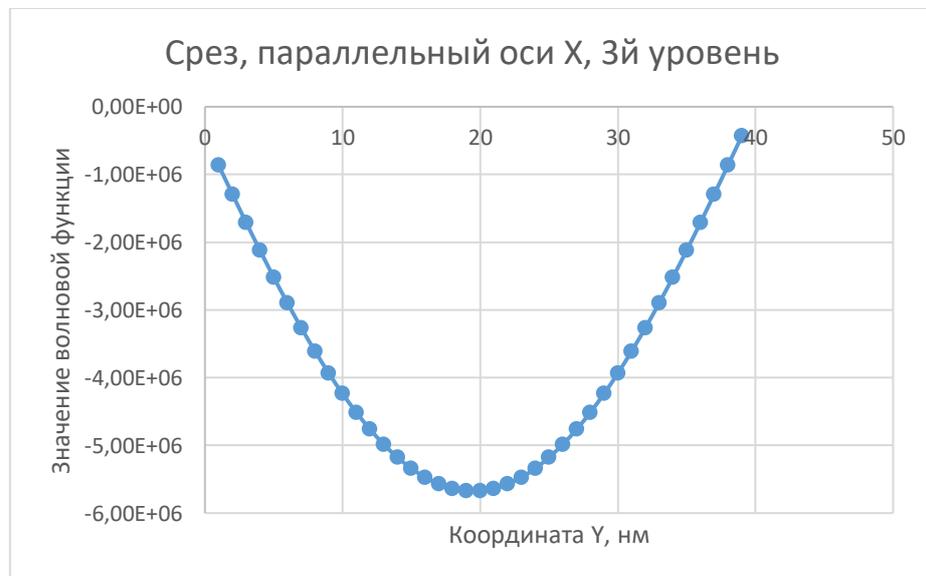
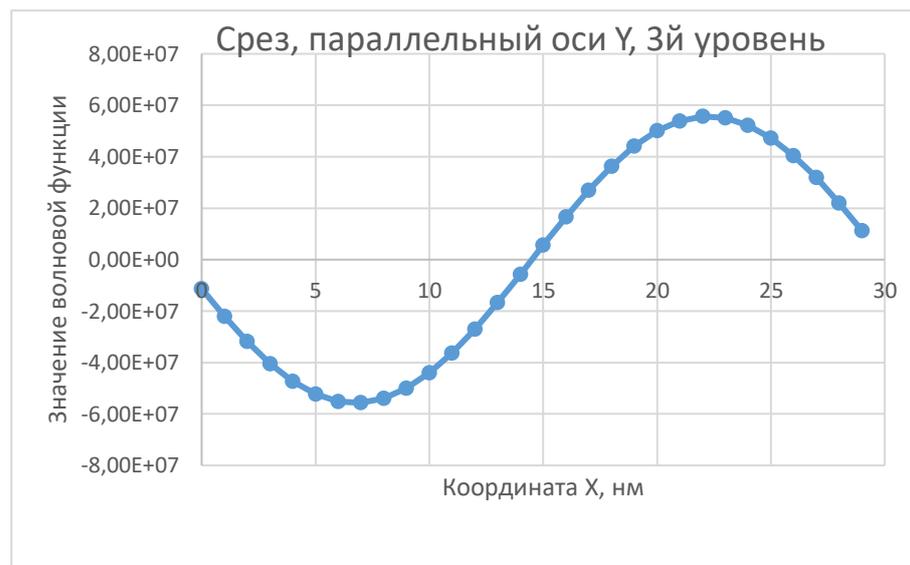
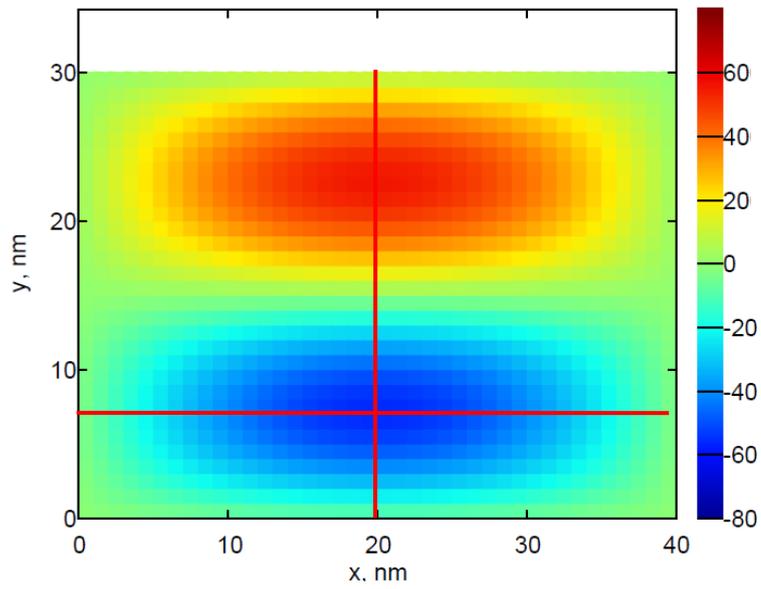


Рис. 18 Срезы волновой функции для 3го уровня

5.4 Исследование влияния шага сетки на точность

Рассмотрим влияние размера и формы сетки на точность расчётов. Для квадратных структур используем прямую сетку размером 0.5 нм, а также косоугольные сетки размерами 0.5 нм и 0.25 нм. Для прямоугольных структур используем 2 прямоугольных сетки с шагом 1 нм и 0.5 нм.

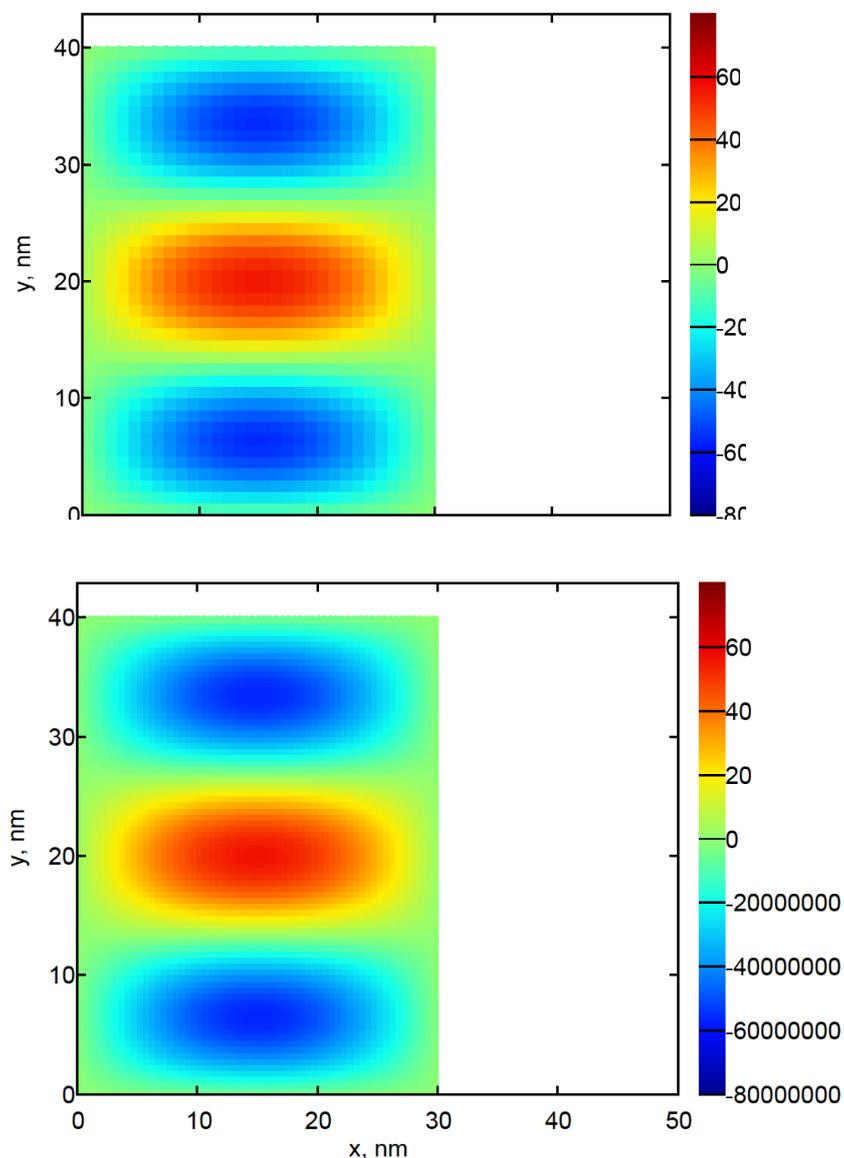


Рис. 19 Сравнение точности прямоугольных сеток в прямоугольных структурах (1 нм и 0.5 нм)

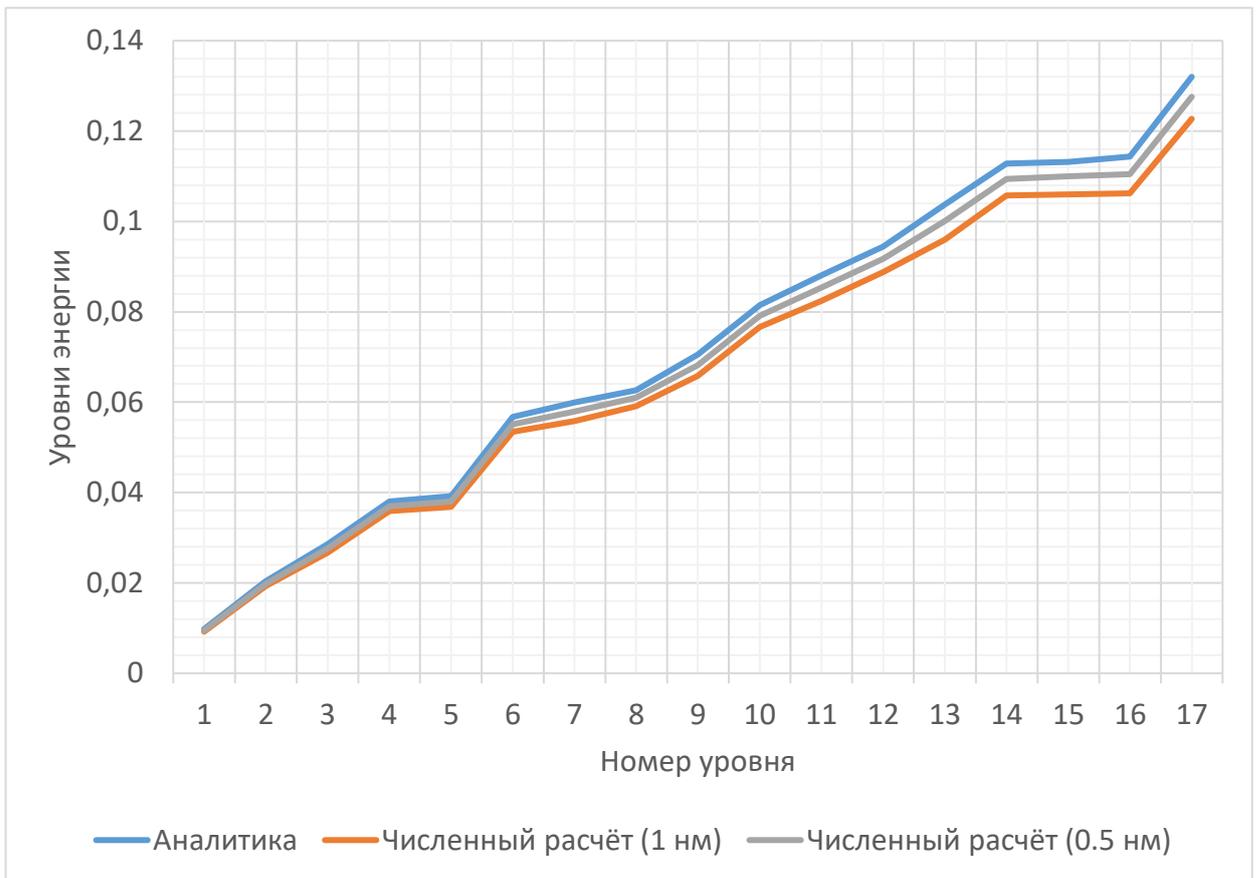


Рис. 20 Сравнение точности сеток с разным шагом с аналитическим расчётом

5.5 Исследование влияния формы сетки на точность

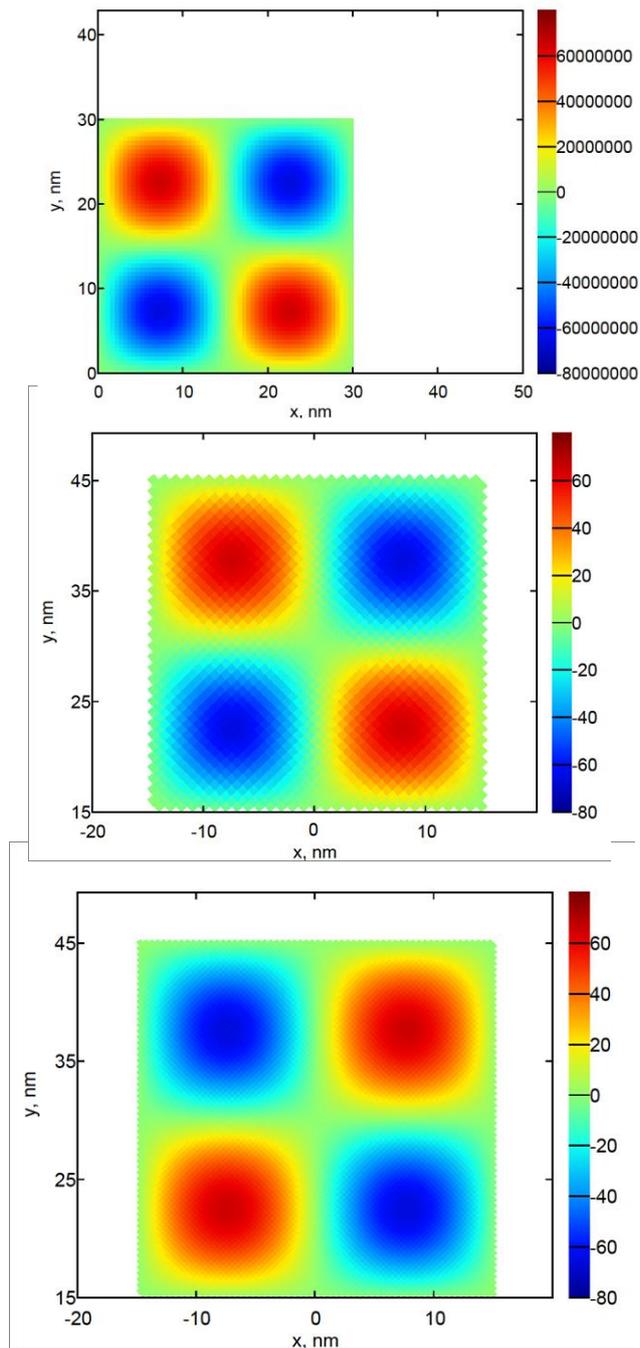


Рис. 21 Сравнение точности прямоугольных и косоугольных сеток разных размеров (прямоуг. 0.5 нм, косоуг. 0.2 нм и 0.25 нм)

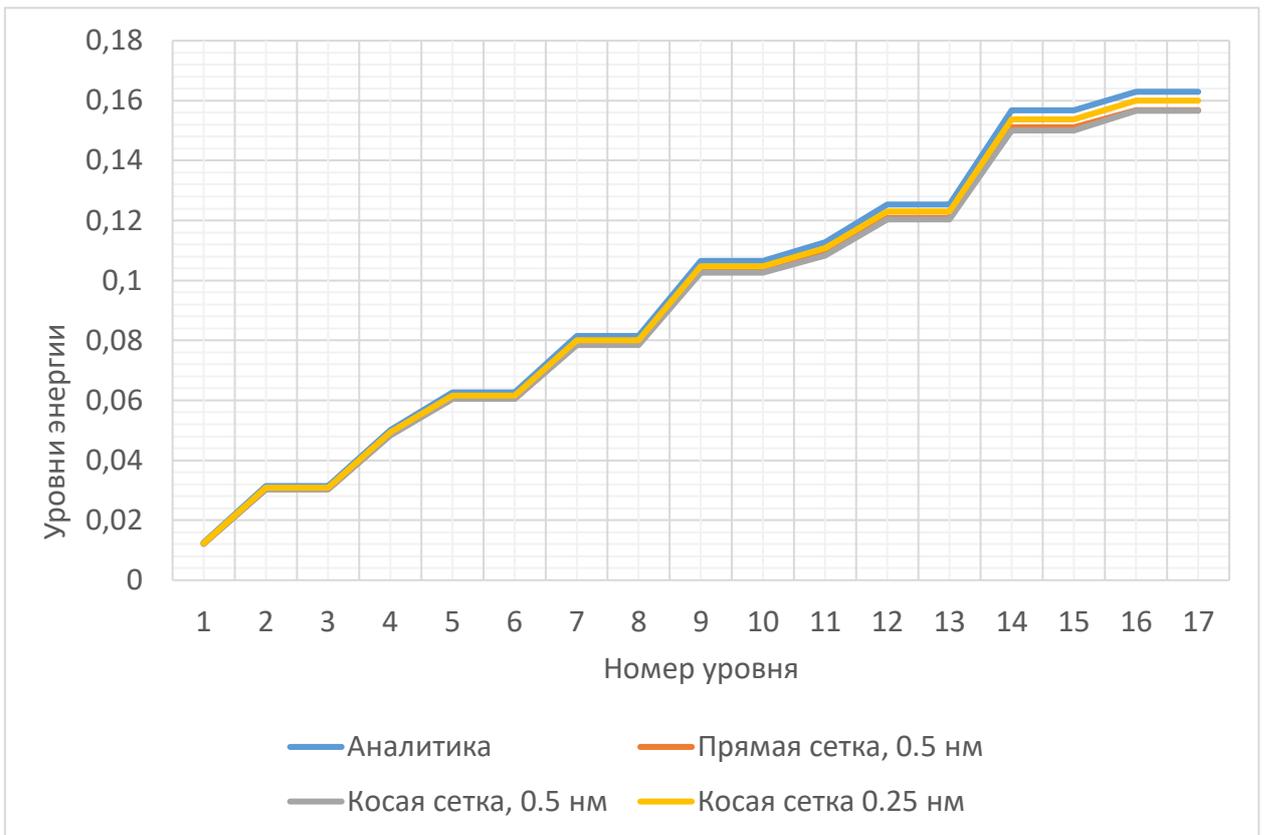


Рис. 22 Сравнение точности сеток разной формы и размеров с аналитическим расчётом

5.6 Расчёт концентрации электронов в структуре с квадратным сечением

Рассчитаем концентрацию носителей заряда, решая уравнение Шрёдингера в связке с уравнением Пуассона:

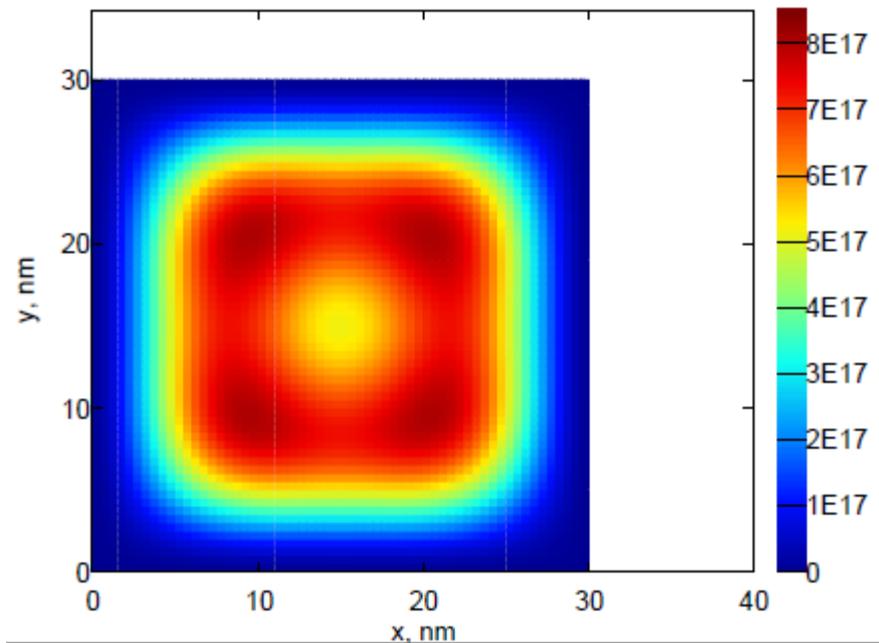


Рис. 23 Концентрация носителей заряда в квадратной структуре

5.7 Исследование структур с шестиугольным сечением

Вследствие распределения заряда по внутренней поверхности трубки наблюдается изгиб потенциала на обеих сторонах стенки структуры:

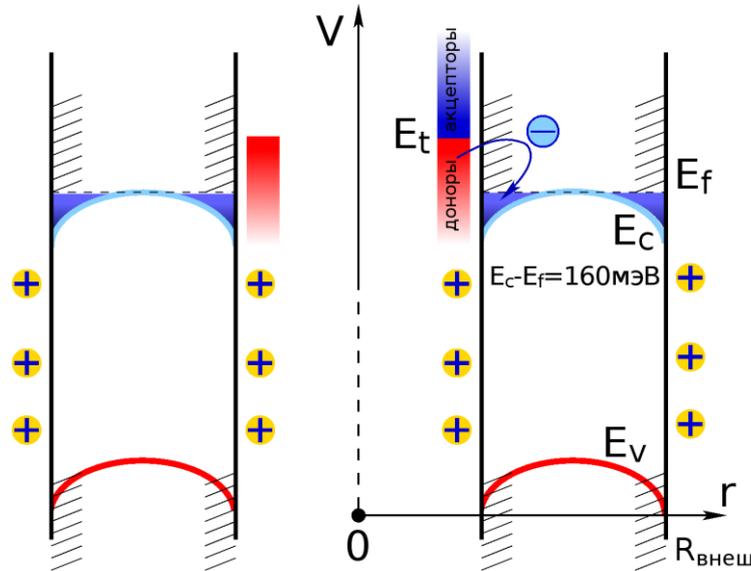


Рис. 24 Зонная диаграмма гексагональной нанотрубки

Рассмотрим спектр энергий в шестиугольных структурах InAs с шестиугольным отверстием:

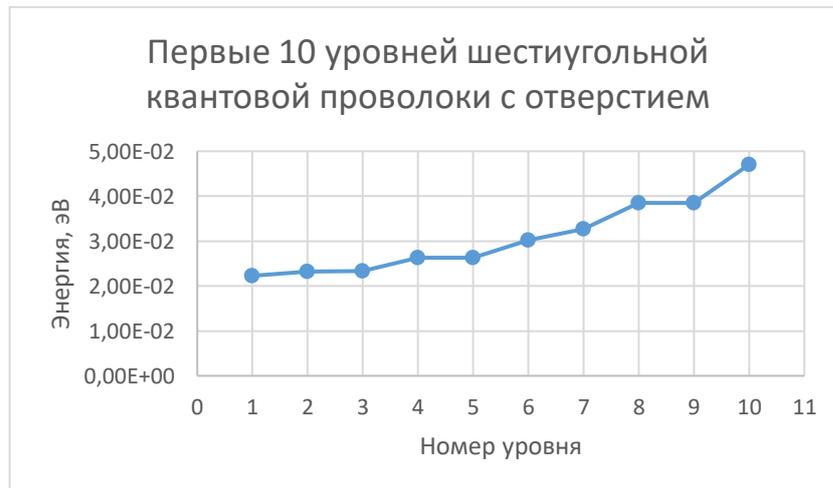


Рис. 25 Спектр энергий в шестиугольной структуре с шестиугольным отверстием

На спектре видно вырождение второго и третьего, четвёртого и пятого, а также восьмого и девятого уровней. Это связано с тем, что энергетические состояния в 2D-структурах описывается двумя квантовыми числами n_1 и n_2 . Если их значения

поменять местами, то энергия не изменится, но изменится вид огибающей волновой функции. В случае аналитического расчёта мы можем явно задавать эти числа, в случае же численных расчётов значения этих чисел мы не знаем и не можем их контролировать, чтобы избежать вырождения.

Построим вид волновых функций на первых пяти уровнях:

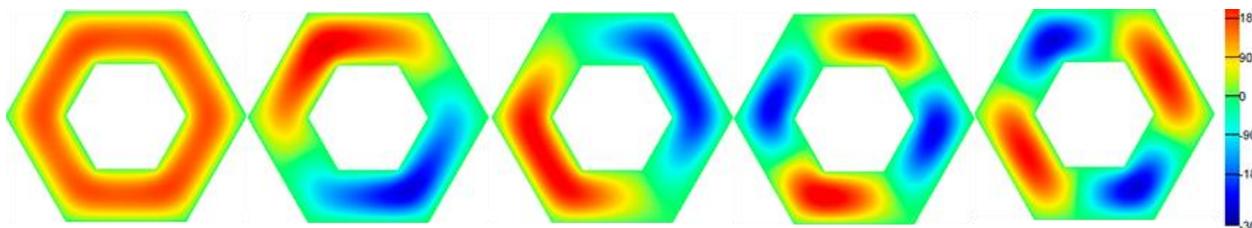


Рис. 26 Вид волновых функций на первых пяти уровнях

Построим линейные комбинации вырожденных уровней 4 и 5 (сумма и разность с весами 0.5 и $\frac{\sqrt{3}}{2}$):

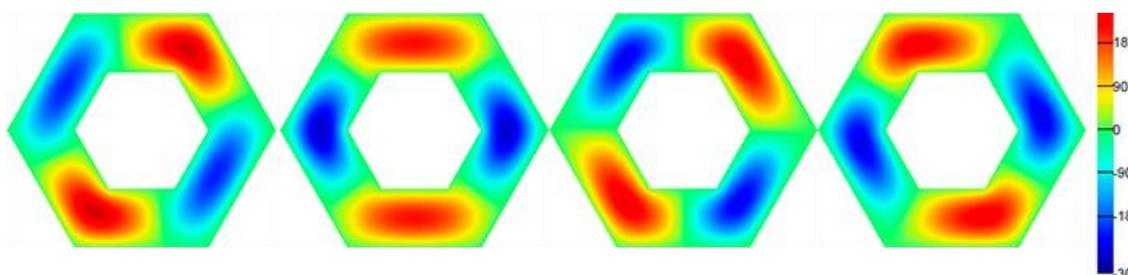


Рис. 27 Вид линейных комбинаций

Рассчитаем концентрацию носителей в шестиугольных структурах диаметром 100 нм с толщиной стенки равной 12, 20 и 30 нм:

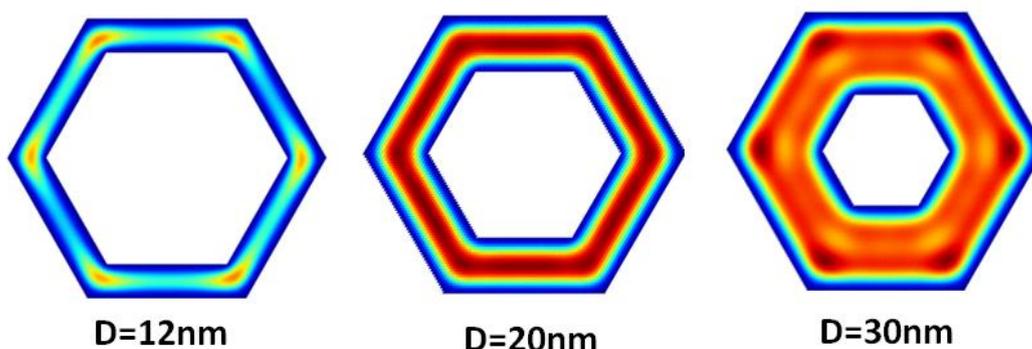


Рис. 28 Концентрация носителей в шестиугольных структурах диаметром 100 нм и толщиной стенок 10, 20 и 30 нм.

Рассмотрим локализацию носителей в диагональном (вдоль углов структуры) и в перпендикулярном сечениях (вдоль середины стенки структуры) – соотношение между концентрациями на срезах отразим на графике:

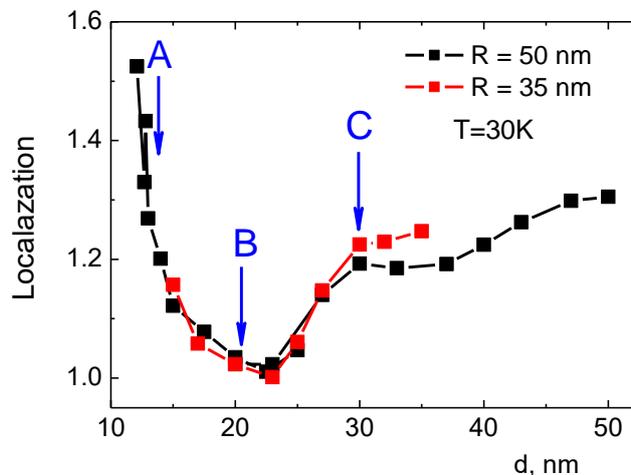


Рис. 29 Соотношение концентраций носителей в гексагональных структурах диаметром 100 нм и толщиной стенок 12, 20 и 30 нм.

Построим соответствующую интегрированную электронную плотность в зависимости от толщины структуры:

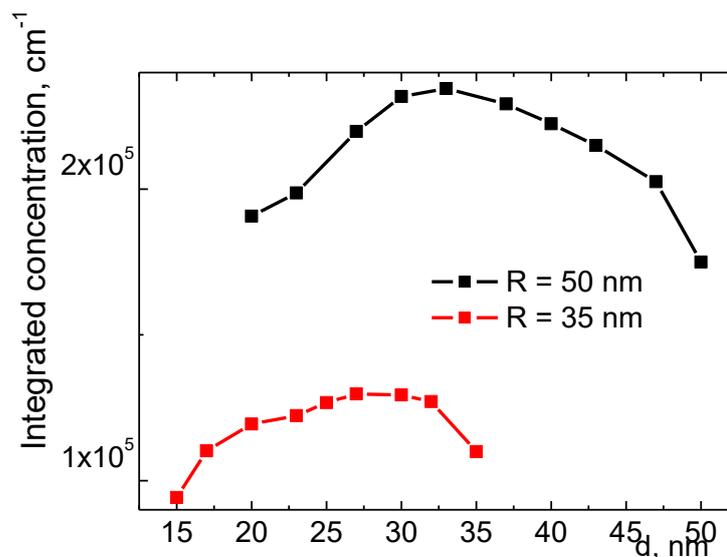


Рис. 30 Проинтегрированные электронные плотности в гексагональных структурах с разной толщиной стенки

5.8 Исследование влияния магнитного поля на уровни энергии и проводимость

Исследуем зависимость уровней энергии от диаметра структуры в магнитном поле. В этой модели изменяем магнитное поле от 0 до 5 Тл и исследуем сдвиги энергетических уровней в структурах с различным диаметром:

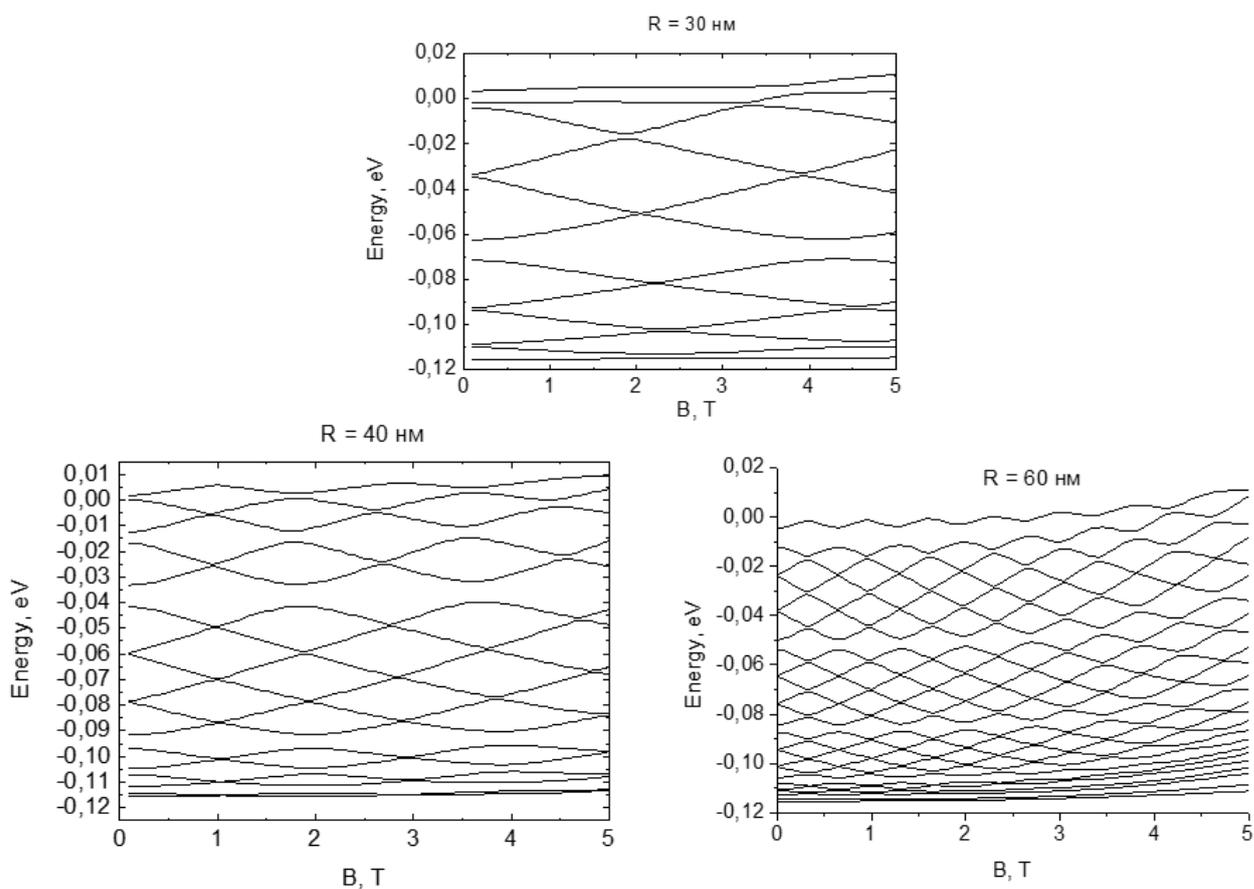


Рис. 31 Зависимость уровней энергии от диаметра структуры ($R = 30, 40, 60$ нм)

Мы наблюдаем осцилляции энергетических уровней. Это явление объясняется эффектом Ааронова-Бома – квантовым эффектом, в котором на частицу с электрическим зарядом или магнитным моментом действует электромагнитное поле даже в тех точках пространства, в которых напряжённость электрического и магнитного поля равна нулю, но не равен нулю электромагнитный потенциал.

Исследуем зависимость проводимости от диаметра структуры в магнитном

поле:

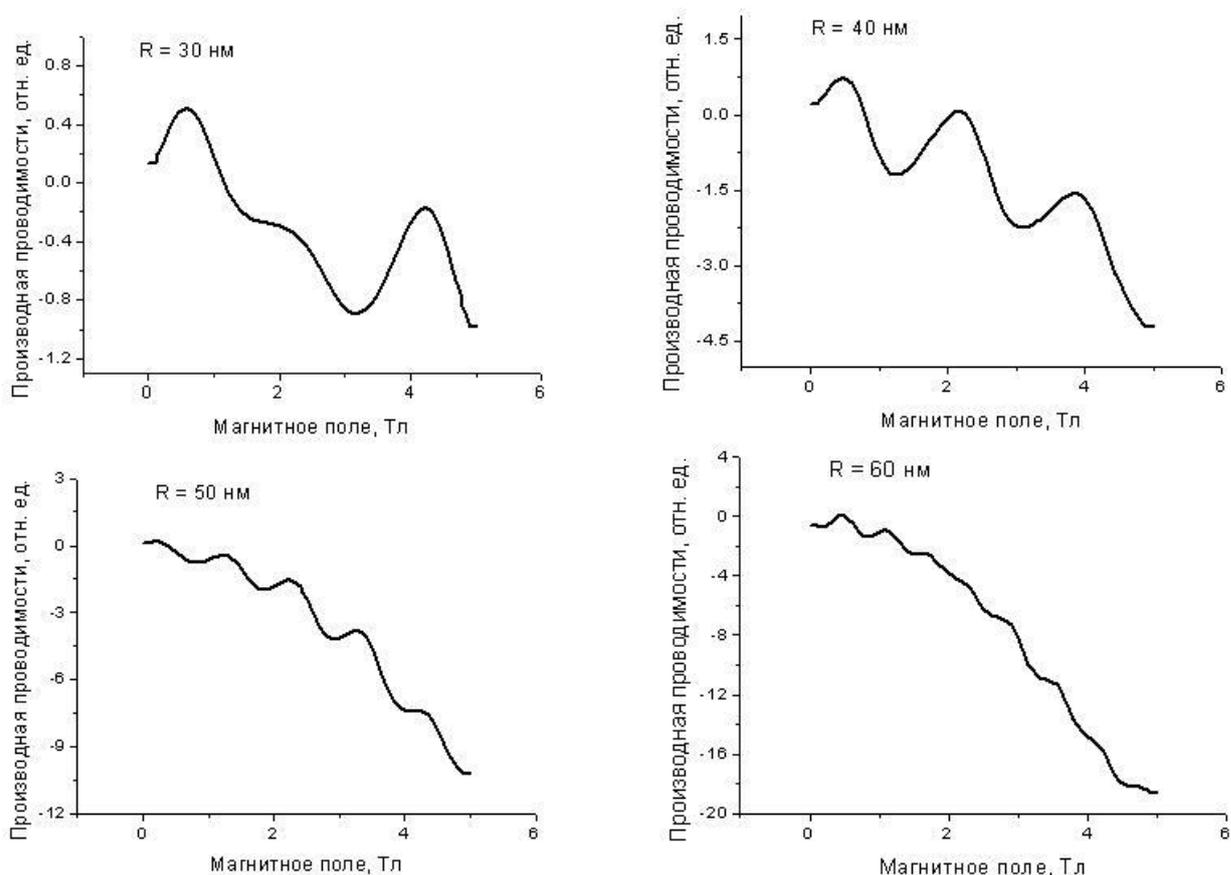


Рис. 32 Зависимость производной проводимости от диаметра структуры ($R = 30, 40, 50, 60$ нм)

Наблюдаются осцилляции и уровней энергии, и проводимости. Объяснение кроется в эффекте Ааронова-Бома: электроны, проходя по внутреннему и внешнему периметрам, получают определённый набег разности фаз, что создаёт осцилляции проводимости в структуре.

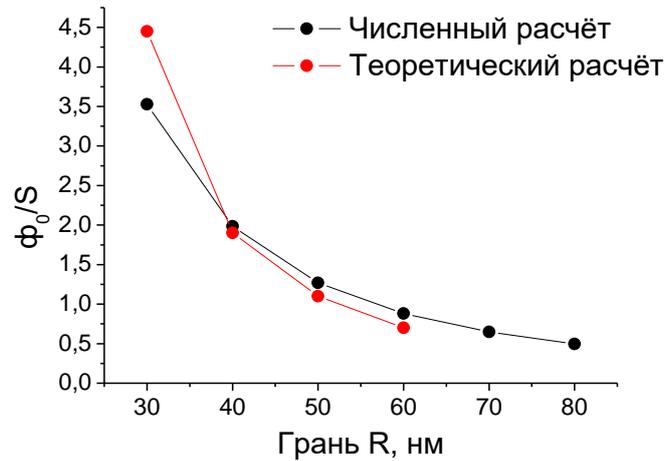


Рис. 33 Сравнение численного и аналитического расчёта осцилляций проводимости

Изучим влияние толщины стенки на осцилляции проводимости. Исследуем гексагональную структуру с толщинами стенок 25 и 17 нм при значении внешнего радиуса $R = 60$ нм:

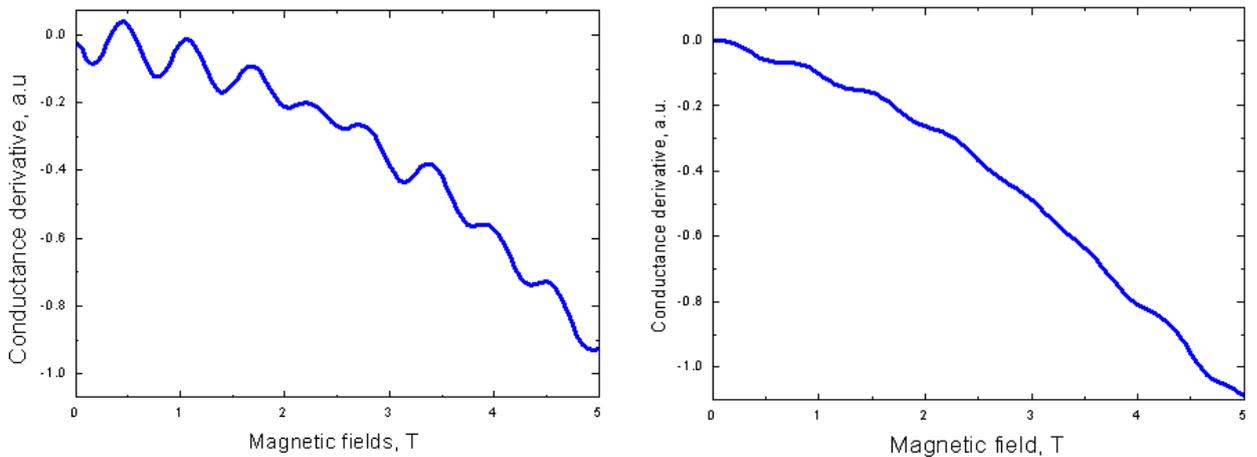


Рис. 34 Период осцилляций при разной толщине стенки (17нм слева, 25нм справа)

Мы наблюдаем гашение осцилляций при увеличении толщины стенки.

Рассмотрим влияние температуры и уровня Ферми на положение уровней. Варьируем значение E_f в пределах от -0.120 эВ до -0.200 эВ. Рассчитываем при температурах 30K и 77K , внешний радиус $R = 35$ нм, внутренний радиус $r = 15$ нм:

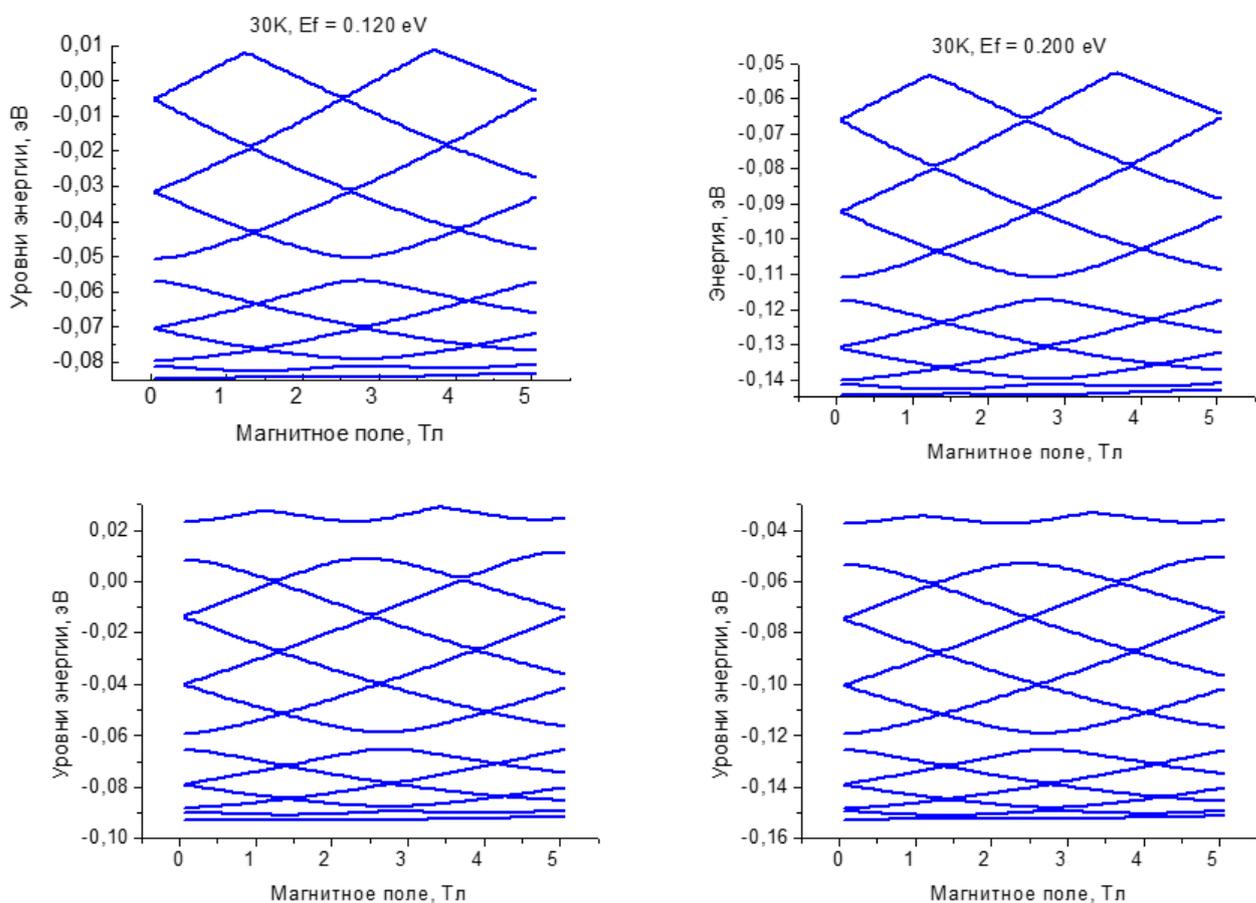


Рис. 35 Исследование влияния температуры и положения уровня Ферми на положение энергетических уровней

Изменения в периоде осцилляций отсутствуют, но есть сдвиг уровней по энергии.

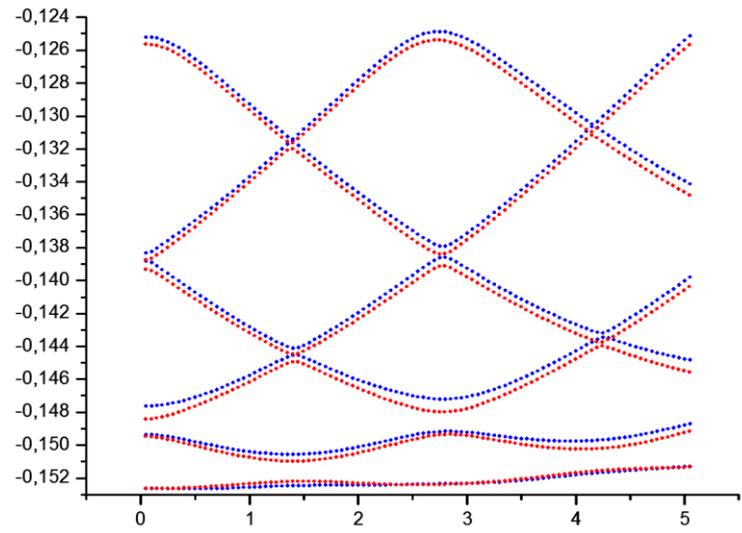


Рис. 36 Совмещённый график двух крайних случаев: $E_f = -0.120$ эВ ($T = 30\text{K}$)
и $E_f = -0.200$ эВ ($T = 77\text{K}$)

Рассмотрим расщепление уровней энергии при учёте энергии Зеемана (4.05 мэВ):

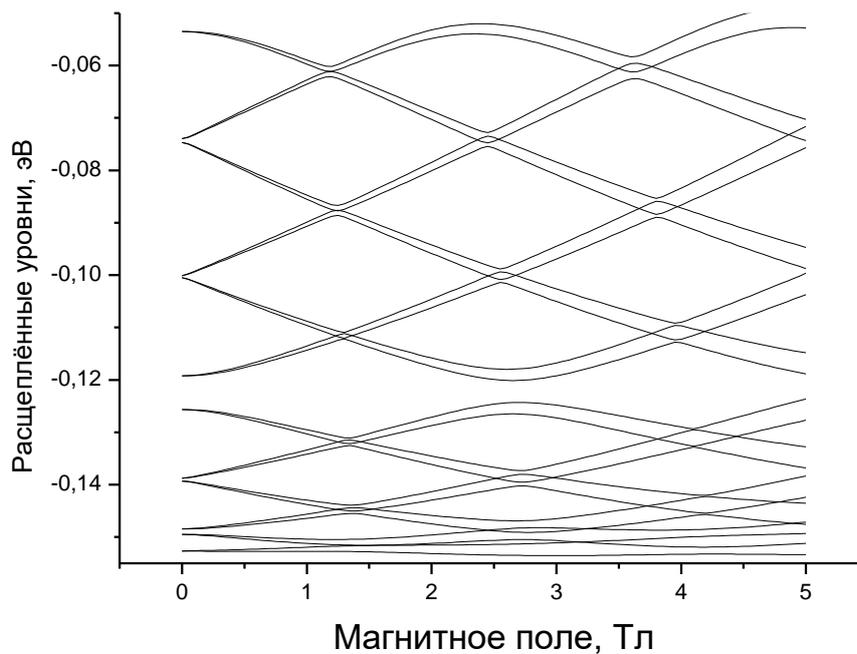


Рис. 37 Расщепление уровней энергии в магнитном поле (учёт зеемановского расщепления)

5.9 Исследование влияния затворного напряжения на уровни энергии

Прикладываем напряжение к одной из граней шестиугольной структуры и исследуем влияние значения напряжения (0 В, 0.2 В, 0.4 В) на уровни энергии:

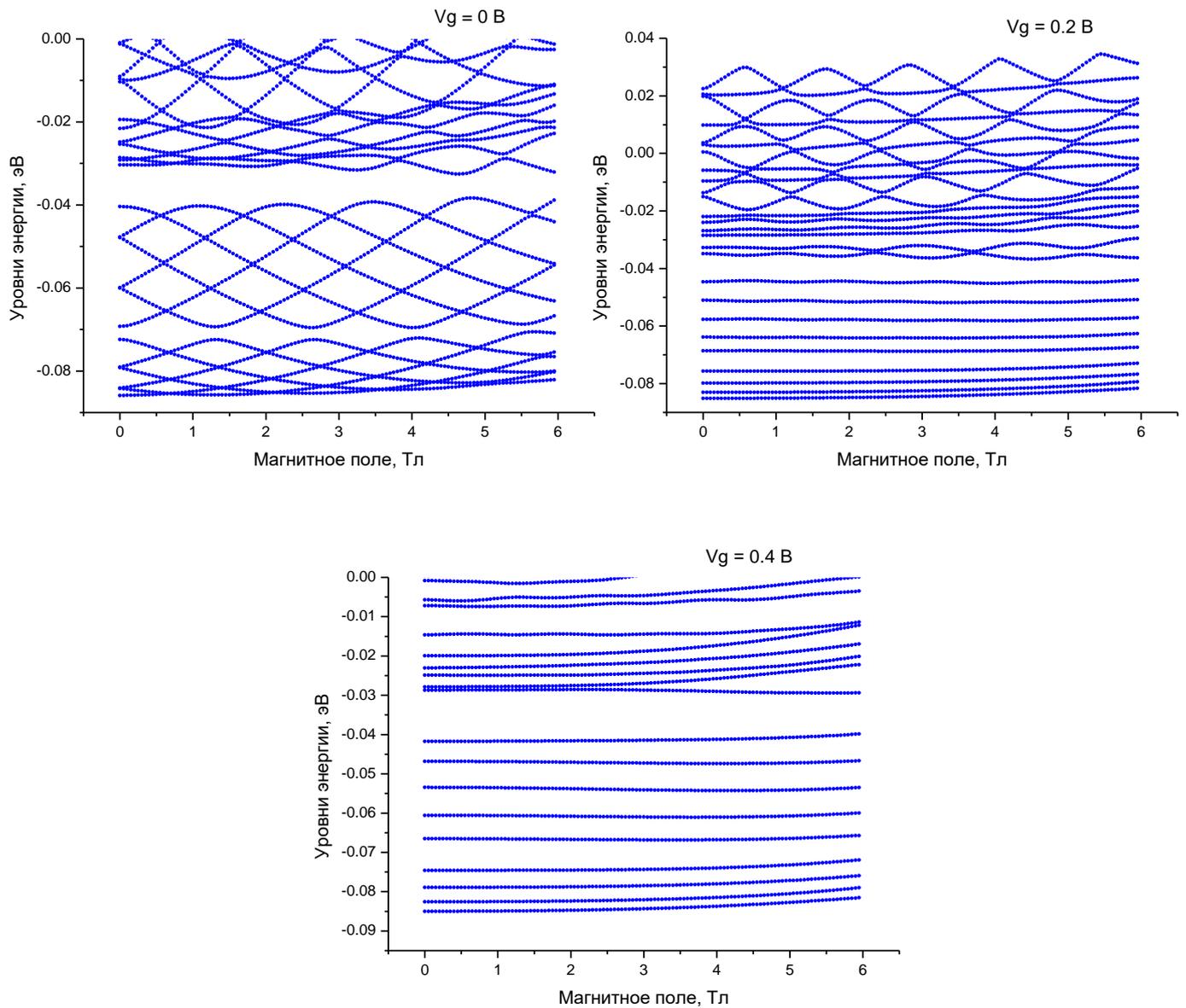


Рис. 38 Влияние затворного напряжения на уровни энергии

Таким образом, напряжение, прикладываемое к грани нанотрубки заметным образом влияет на характер осцилляций, приводя к постепенному их исчезновению. Затворное напряжение нарушает условия квантовой интерференции волн Де Бройля при обходе по контуру кольца нанотрубки, что обуславливает гашение осцилляций типа Ааронова Бома. Можно сделать вывод, что меняя величину приложенного напряжения, можно влиять на характер осцилляций проводимости в данных структурах.

6 Результаты работы и выводы

Проведены численные расчёты энергетического спектра и огибающих волновых функций для одномерных и двумерных квантовых структур с различным поперечным сечением.

Исследовано влияние формы и шага сетки на точность. Уменьшение размера сетки приводит к увеличению точности расчёта, но косоугольная сетка обеспечивает лучшую точность из-за более высокой плотности ячеек.

Исследован спектр и волновые функции в шестиугольных нанотрубках из InAs с внешним радиусом 60 нм и различной толщиной стенки: наблюдается двукратное вырождение части уровней, вызванное симметричной формой структуры.

Исследовано влияние магнитного поля, приложенного вдоль оси гексагональной нанотрубки. Исследовано влияние геометрии структуры на характер осцилляций энергетических уровней.

Произведена оценка величины расщепления спектра, вызванного эффектом Зеемана (порядка 4 мэВ): величина данного расщепления не вносит заметного вклада в положение уровней на малых магнитных полях (до 4 Тл).

7 Положения, выносимые на защиту

1. Разработан и реализован алгоритм расчёта энергетических характеристик квантовых нитей гексагонального поперечного сечения на двумерной сетке с различными геометрическими размерами.
2. В гексагональных нанотрубках возникает неоднородное распределение концентрации носителей с повышенной локализацией в углах поперечного сечения.
3. Показано, что с уменьшением толщины стенки растёт степень локализации электронов в углах структуры вследствие дополнительного квантового ограничения. В то же время, для толщины стенок менее 15 – 20 нм уменьшается степень вырождения электронного газа, что сопровождается резким падением суммарной концентрации носителей.
4. В магнитном поле, приложенном вдоль структуры, наблюдаются осцилляции энергетических уровней типа Ааронова-Бома с появлением запрещённых зон, обусловленных гексагональной геометрией нанотрубки.
5. Оценка проводимости показывает, что период и амплитуда осцилляций определяются геометрическими параметрами наноструктуры.
6. Увеличение затворного напряжения V_g , приложенного к одной из граней, приводит к перераспределению электронной плотности, а также к постепенному гашению осцилляций.

8 Список литературы

1. Г.Э. Цырлин "Влияние послеростовой термической обработки на структурные и оптические свойства $InP/InAsP/InP$ нитевидных нанокристаллов", *Физика и техника полупроводников*, 2012, том 46, вып. 2, стр.184.
2. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц «Квантовая механика: нерелятивистская теория поля», изд. 4, Москва «Наука», 1989.
3. А.Я. Шик, Л.Г. Бакуева, С.Ф. Мусихин, С.А. Рыков "Физика низкоразмерных систем", СПб.: Наука, 2001. - 160с.
4. М.А.Фаддеев, К.А.Марков "Численные методы", Нижний Новгород: Издательство Нижегородского государственного университета, 2005. -156с.
5. А.М.Сатанин "Численные методы в нанофизике", Нижний Новгород: Изд-во Нижегородского государственного университета, 2006. - 72с.
6. В.П.Драгунов, И.Г.Неизвестный, В.А.Гридин «Основы нанозлектроники», изд. НГТУ, 2000.
7. J.Piprek "Nitride Semiconductor Devices. Principles and Simulation.", Berlin: "Wiley-VCH", 2007. - 519с.
8. S. Subramanian, B.M. Arora, A.K. Srivastava, G. Fernandes, S. Banerjee "Measurement of band offset of a strained-layer single quantum well by a capacitance-voltage technique", *J. Appl. Phys.*, 74(12), 1993, 7618-7620с.
9. A.Korkin, F.Rosei "Nanoelectronics and Photonics", Springer Science, 2008.
10. A.Trellakis, T.Galick "Itartion scheme for the solution of the two-dimensional Schroedinger-Poisson equations in quantum structures", *J. Appl. Physics*, 1997.
11. J.R.Weber, A.Janotti, C.G.Van de Walle "Intrinsic and extrinsic causes of electron accumulation layers of $InAs$ surfaces", *J. Applied Physics Letters*, 2010.

12. C.Blomers, T.Rieger, P.Zellekens, F.Haas, M.I.Lepsa, H.Hardtdegen, O.Gul, N.Demarina, D.Grutzmacher, H.Luth, Th.Schapers "Realization of nanoscaled tabular conductors by means of GaAs/InAs core/shell nanowires", *Nanotechnology*, 2013.

13. С.В.Хазанова, В.Е.Дегтярёв, Н.В.Демарина "Труды XIX Международного симпозиума "Нанопизика и наноэлектроника"", Нижний Новгород, Издательство нижегородского госуниверситета, 2015, 693с.

14. C.Andrew, E.Chia, Ray R. LaPierre "Analytical model of surface depletion in GaAs nanowires", *Journal of Applied Physics*, 2013, pp063705-1-0603705-7.

15. O.Gul, N.Demarina, C.Blomers, T.Rieger, H.Luth, M.I.Lepsa, D.Grutzmacher, Th.Schapers, "Flux periodic magnetoconductance oscillations in GaAs/InAs core/shell nanowires", *Physical Review B* 89, 045417 (2014).

16. Miquel Royo, Carlos Segarra, Andrea Bertoni, Guido Goldoni, Josep Planelles, "Aharonov-Bohm oscillations and electron gas transitions in hexagonal core-shell nanowires with an axial magnetic", *CNR-NANO S3, University of Modena*, January 28, 2015.

17. C.Blomers, T.Rieger, P.Zellekens, F.Haas, M.I.Lepsa, H.Hardtdegen, O.Gul, N.Demarina, D.Grutzmacher, H.Luth and Th.Schapers "Realization of nanoscaled tubular conductors by means of GaAs/InAs core/shell nanowires", *Nanotechnology* 24 (2013), 035203.