

Исследование энергетического спектра в гексагональных нанотрубках на основе InAs

Магистрант каф. ЭТТ

Еремеев А.В.

Научный руководитель:

доц. каф. ЭТТ к.ф.-м.н. Хазанова С.В.

асп. каф. ЭТТ Дегтярёв В.Е.

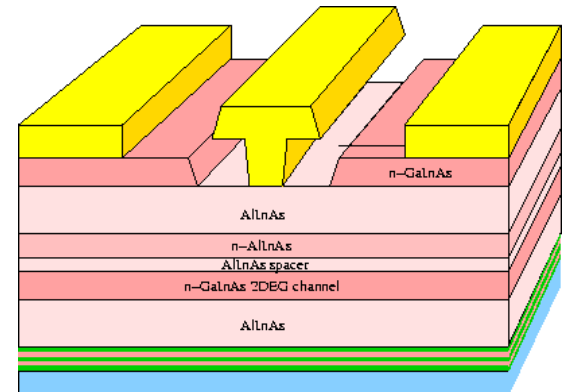
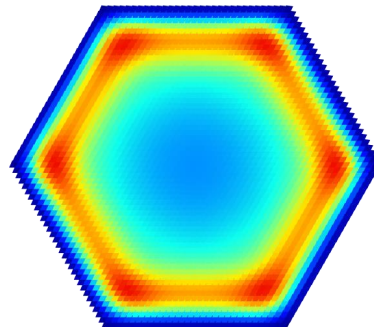
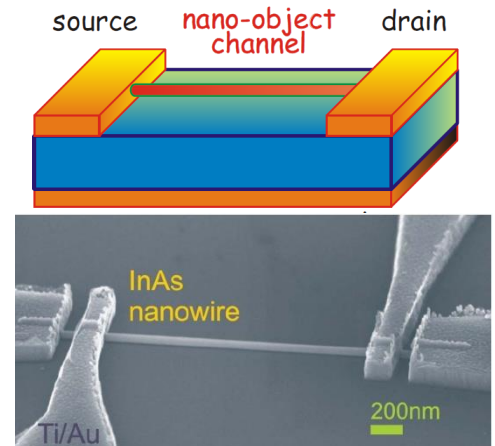
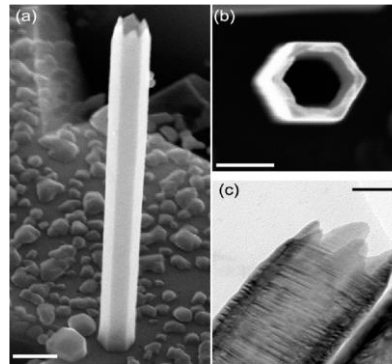
Введение

Низкоразмерные структуры:

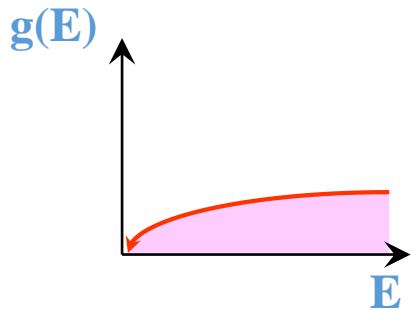
- КВАНТОВЫЕ ЯМЫ
- КВАНТОВЫЕ НИТИ
- КВАНТОВЫЕ ТОЧКИ

Применение:

- Полупроводниковая электроника
- Лазеры
- Оптоэлектроника
- Спинтроника
- Сенсоры

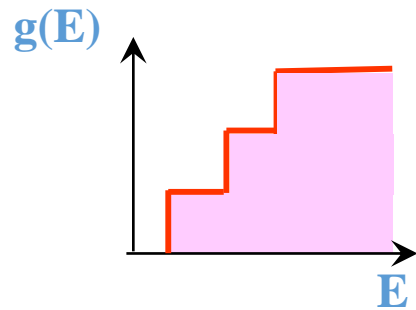


Спектр и плотность состояний в низкоразмерных структурах



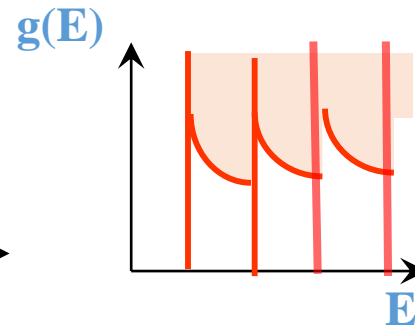
$$E = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m}$$

Объёмный
полупроводник



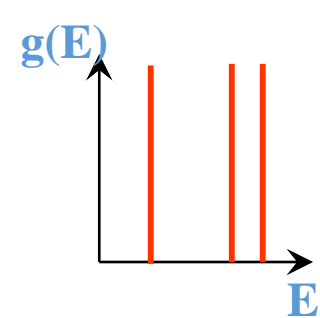
$$E = E_n + \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m}$$

Квантовые ямы



$$E = E_{nm} + \frac{p_x^2}{2m}$$

Квантовые нити



$$E = E_{nml}$$

Квантовые
точки

Особенность спектра низкоразмерных структур - дискретность в направлении квантования

Цели работы

- Расчёт спектра и огибающих волновых функций с помощью решения уравнения Шрёдингера для 1D- и 2D-структур разных форм и размеров
- Исследование влияния шага сетки на точность расчётов
- Учёт влияния распределения заряда на исследуемые характеристики с помощью нелинейного уравнения Пуассона
- Расчёт концентрации носителей в нанопроволоке с квадратным и гексагональным поперечным сечением
- Изучение влияния магнитного поля на энергетический спектр и проводимость в нанотрубках с гексагональным поперечным сечением.

Положения, выносимые на защиту

1. Разработан и реализован алгоритм расчёта энергетических характеристик квантовых нитей InAs 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. Приложенное затворное напряжение V_g заметно влияет на величину осцилляций уровней в магнитном поле и распределение носителей.

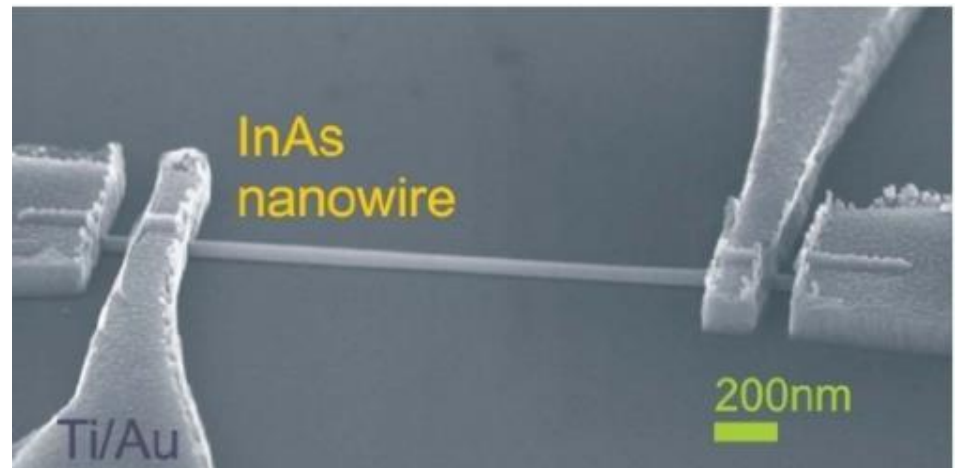
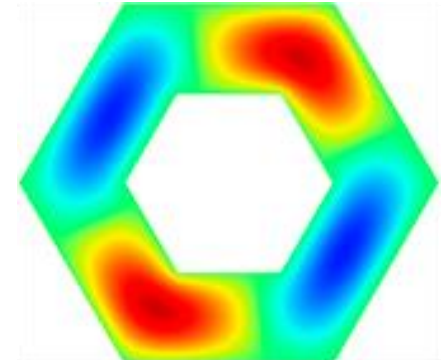
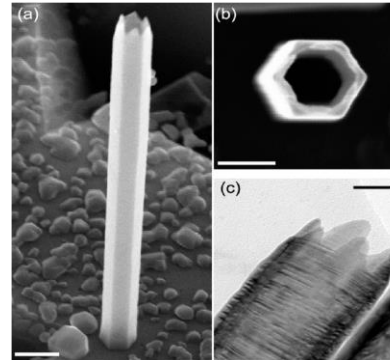
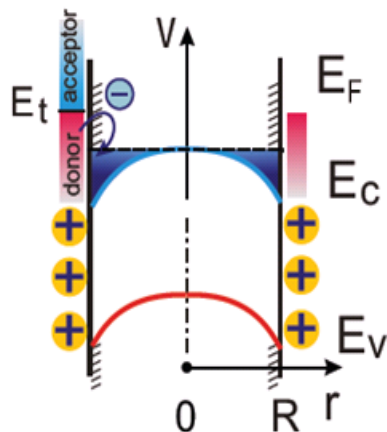
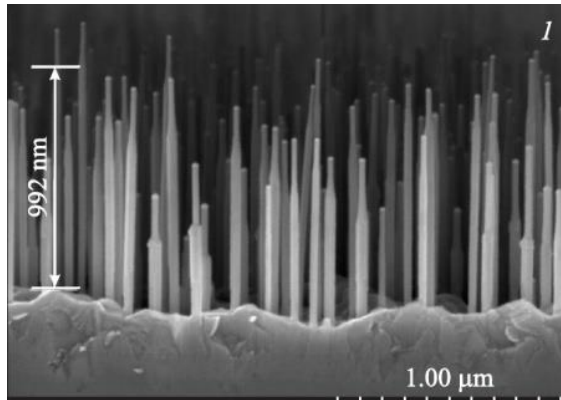
Исследуемые структуры

Двумерные квантовые проволоки и нанотрубки разных размеров и форм (InAs)

Параметры InAs:

$$\Delta E_g = 0.355 \text{ эВ}$$

$$m^* = 0.0256 m_0$$



Одномерное уравнение Шрёдингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}(\Delta\psi(\mathbf{r}))+U\psi(\mathbf{r})=E\psi(\mathbf{r})$$

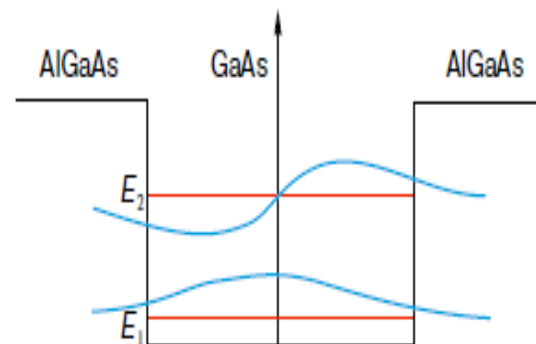
Решение уравнения Шрёдингера для бесконечно глубокой 1D-потенциальной ямы:

$$\psi = c \cdot \sin(kx + \delta) \quad \psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi n}{a} x$$

$$k = \frac{\sqrt{2m^*E}}{\hbar}$$

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m^* a^2} n^2$$

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



Решение уравнения Шрёдингера для бесконечно глубокой 2D-потенциальной ямы:

$$E_{n_1, n_2} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m^*} \left(\frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} \right)$$

$$\psi_{n_1, n_2} = \sqrt{\frac{4}{ab}} \sin \frac{\pi n_1}{a} x \cdot \sin \frac{\pi n_2}{b} y$$

Метод решения для одномерного потенциала

1) 1D-уравнение Шрёдингера

$$-\frac{1}{2}\hat{p}_z\left(\frac{1}{m^*(z)}\hat{p}_z\psi(z)\right)+U(z)\psi(z)=E\psi(z)$$

$$\hat{p}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}$$

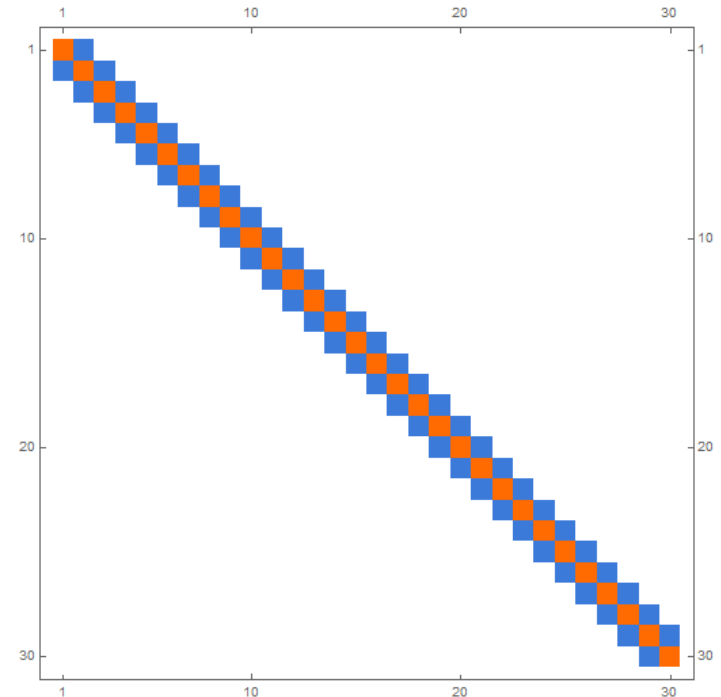
2) Вид уравнения в конечных разностях

$$\frac{\psi_{n+1} - 2\psi_n + \psi_{n-1}}{\Delta x^2} - \frac{2m}{\hbar^2} U_n \psi_n = -E \frac{2m}{\hbar^2} \psi_n$$

3) Матричный вид уравнения

$$\sum_j H_{i,j} \psi_j = E \psi_i$$

4) Матрица гамильтониана имеет трёхдиагональный вид



Метод решения для двумерного потенциала

1) 2D-уравнение Шрёдингера

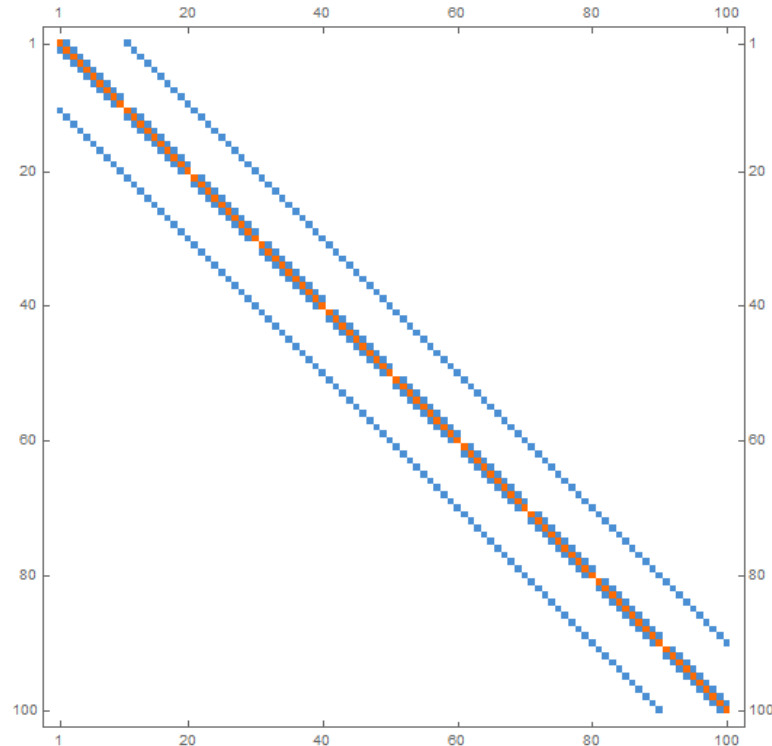
$$-\frac{1}{2} \sum_{i,j=2}^2 \hat{p}_i \left(\left(\frac{1}{m^*} \right)_{i,j} \hat{p}_j \psi(x, y) \right) + U(x, y) \psi(x, y) = E \psi(x, y)$$

2) 2D-уравнение Шрёдингера в конечных разностях

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

3) Матричный вид уравнения

$$\sum_{k,l} H_{i,j,k,l} \psi_{k,l} = E \psi_{i,j}$$



Самосогласованное решение уравнений Шрёдингера и Пуассона

Начальное приближение –
начальный профиль $U(r)$

Уравнение Шрёдингера

Уравнение Пуассона
для эффективной
концентрации

да

$$|E_{e1i} - E_{e1(i-1)}| < \Delta E$$

нет

Результат

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\psi''(\vec{r}) + (\Delta E_c(\vec{r}) - q\Phi(\vec{r}))\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

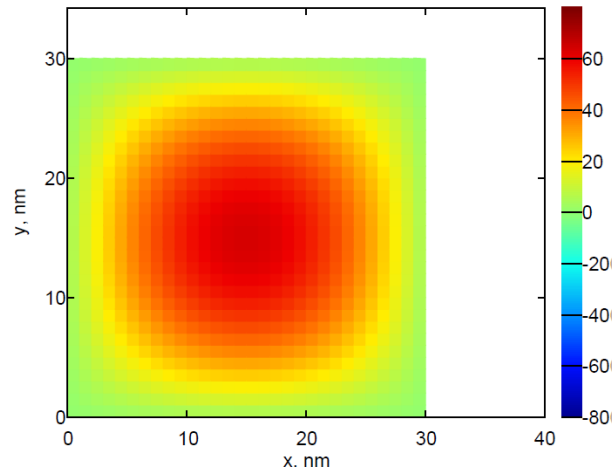
$$n(\vec{r}) = \sqrt{\frac{2m^*kT}{\pi\hbar^2}} \sum_i |\psi_i(r)|^2 F_{-1/2}\left(\frac{E_f - E_j}{kT}\right)$$

$$\varepsilon\varepsilon_0\Phi''(\vec{r}) = -q(N_d^+(\vec{r}) - n(\vec{r}))$$

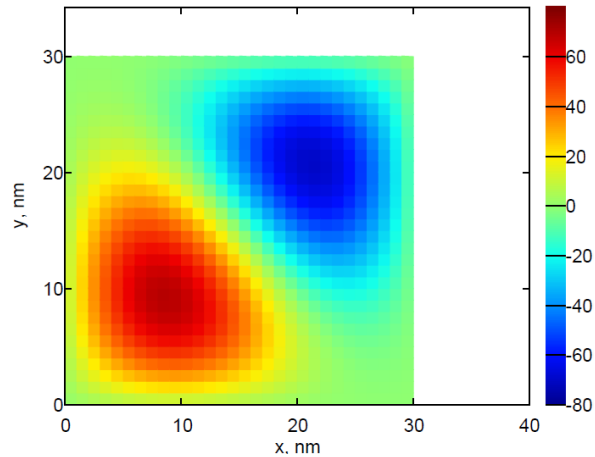
$$|E_{e1i} - E_{e1(i-1)}| < \Delta E$$

$$U = \Delta E_c - q\Phi$$

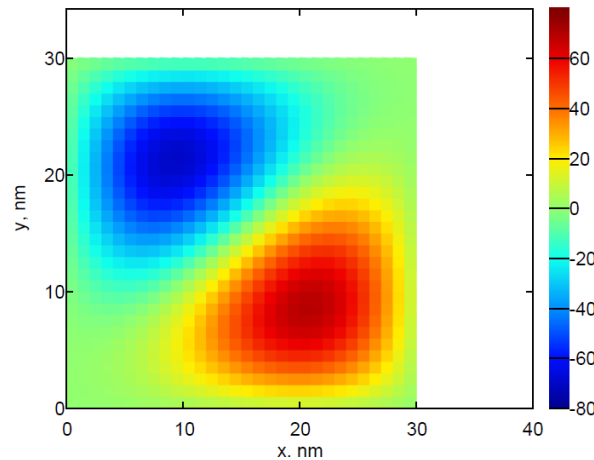
Огибающие волновых функций в квантовой нанопроволоке квадратного сечения



ψ_1

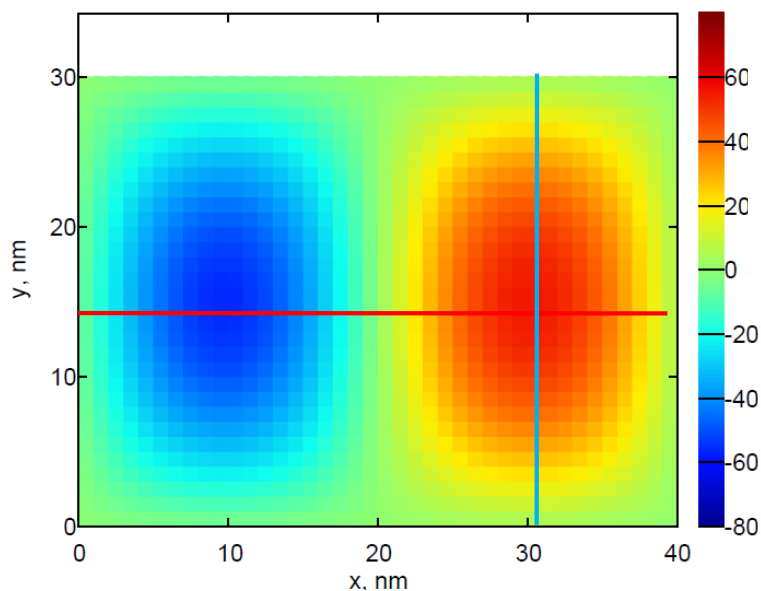


ψ_2

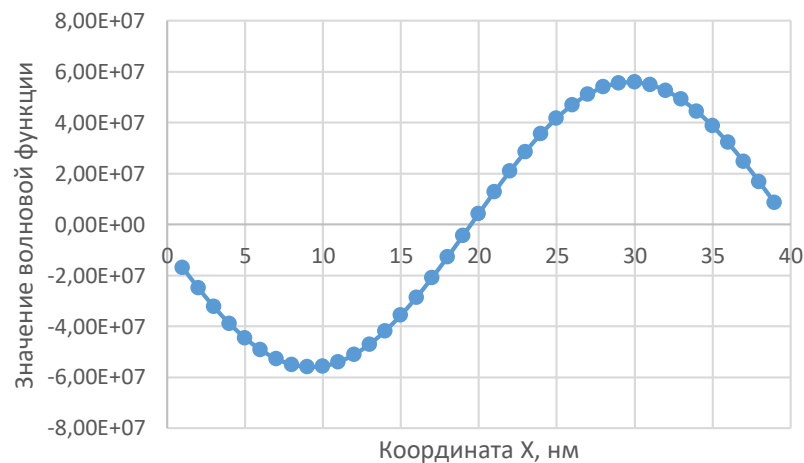


ψ_3

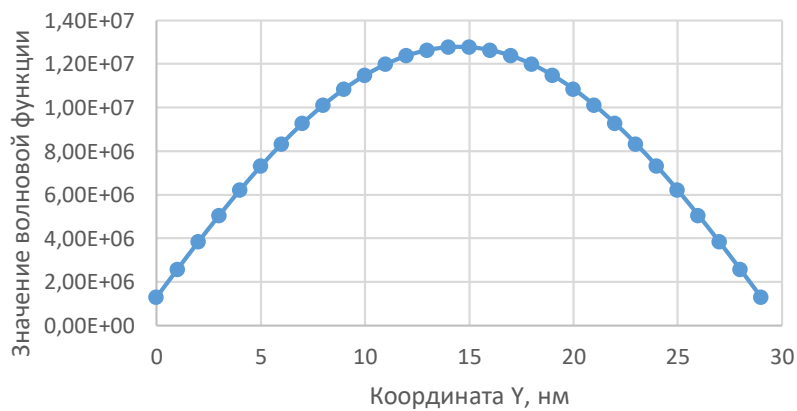
Волновая функция 2-го уровня



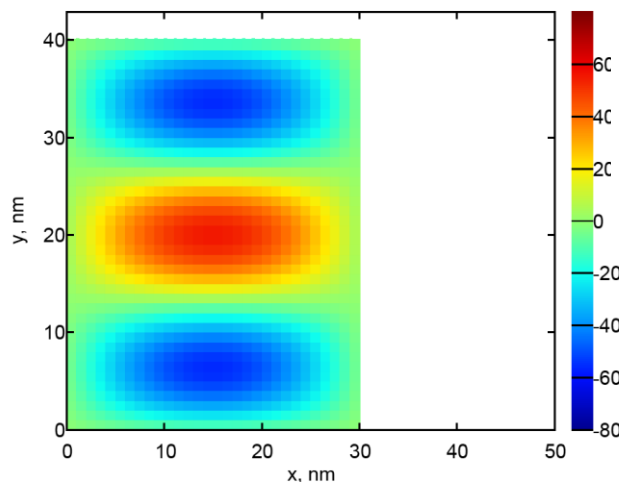
Срез, параллельный оси X, 2й уровень



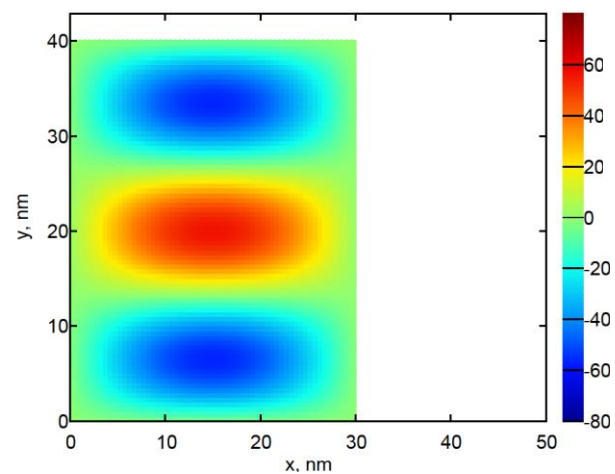
Срез, параллельный оси Y, 2й уровень



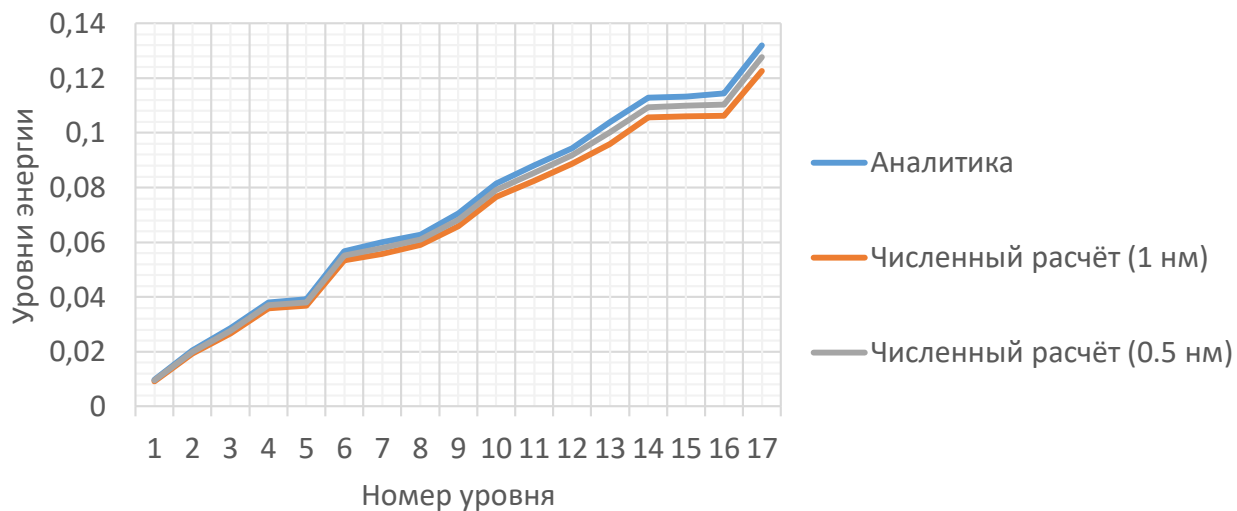
Уменьшение шага сетки



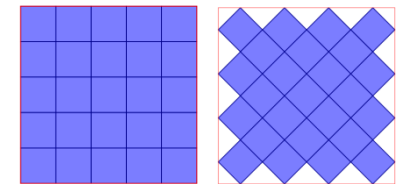
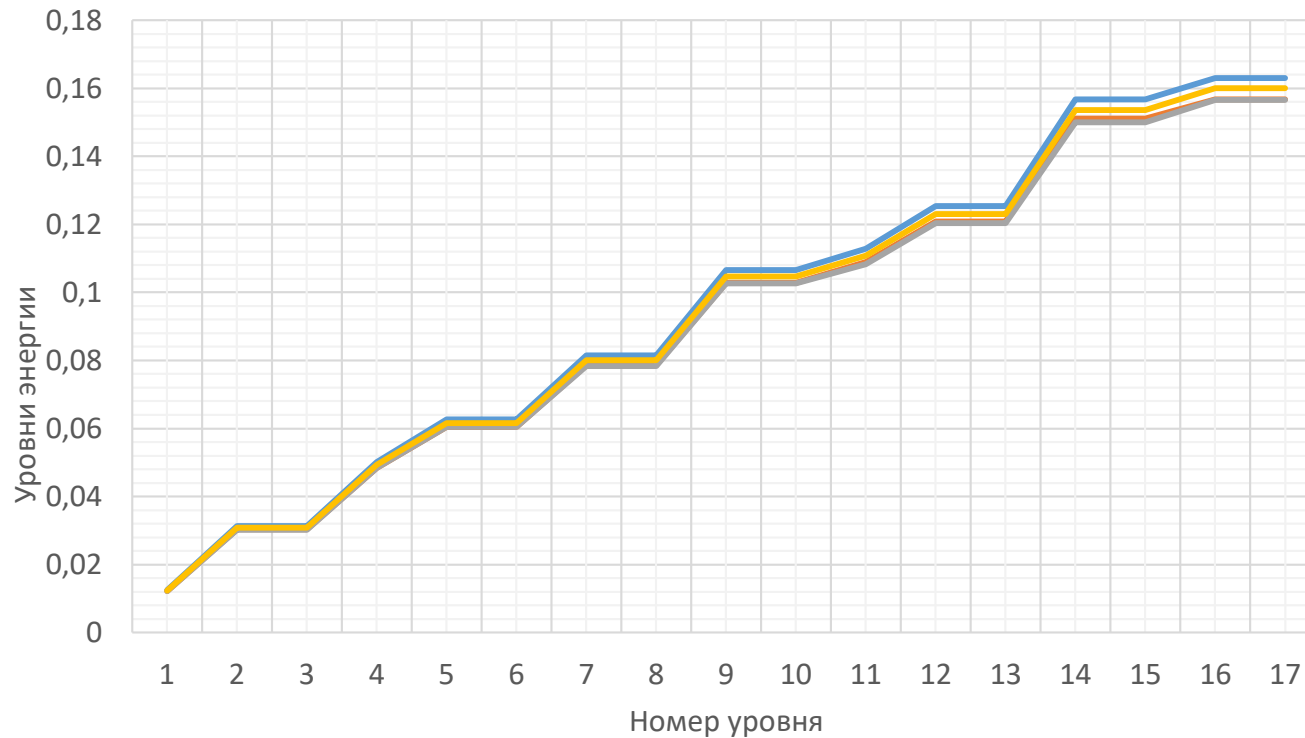
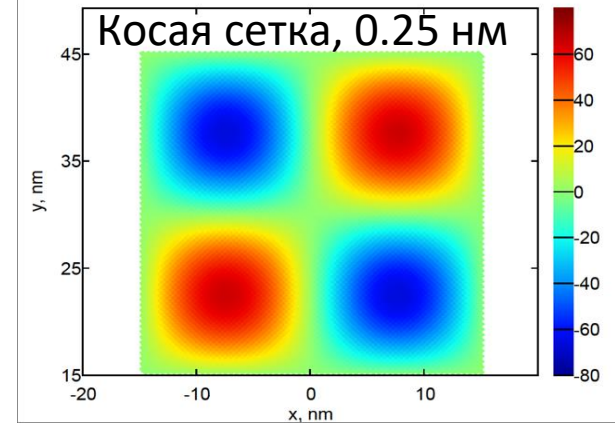
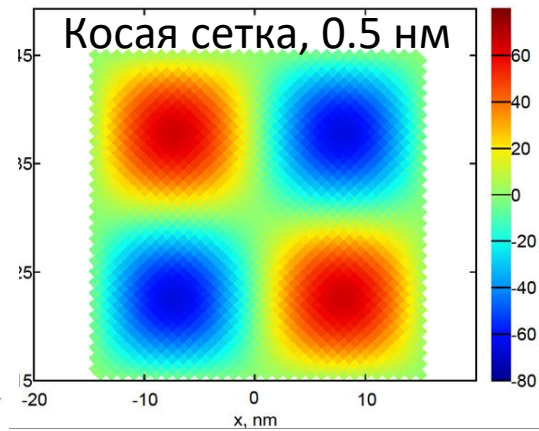
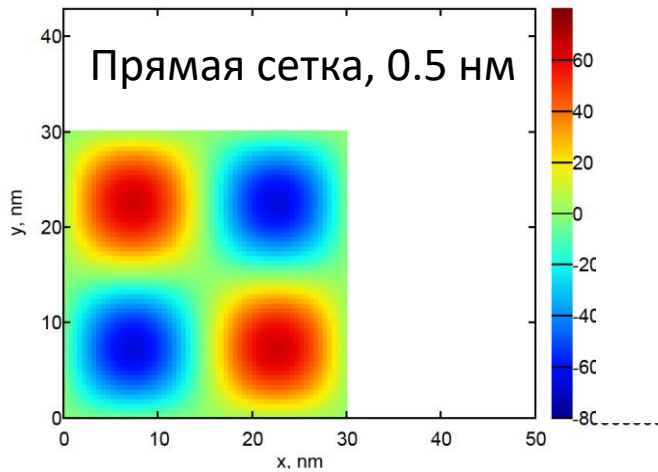
Шаг сетки = 1 нм



Шаг сетки = 0.5 нм

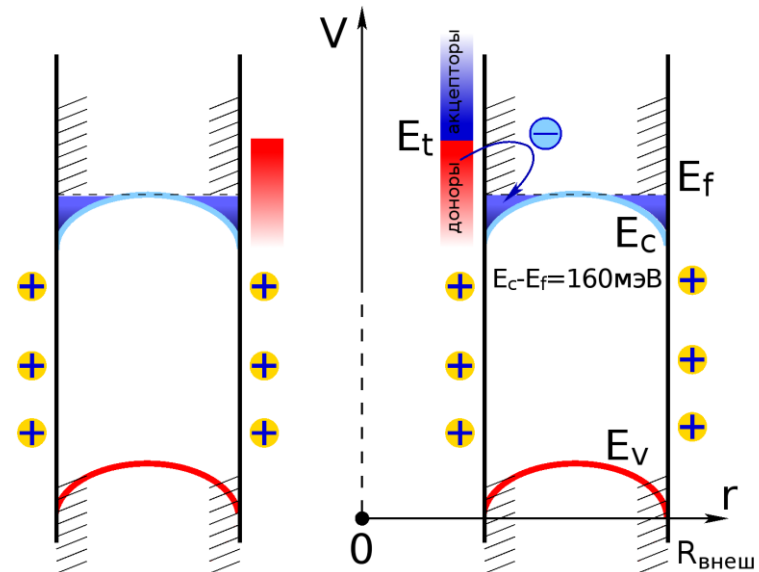
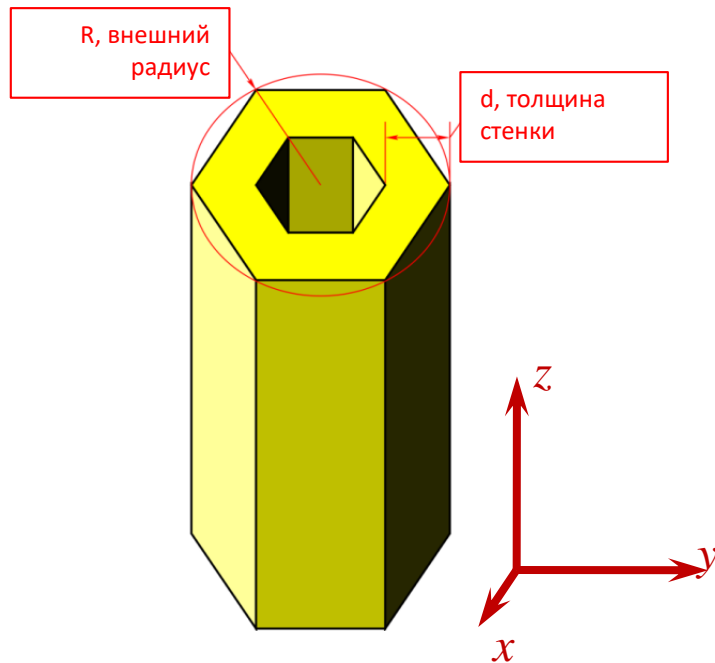


Изменение формы сетки



- Аналитика
- Прямая сетка, 0.5 нм
- Косая сетка, 0.5 нм
- Косая сетка 0.25 нм

Исследуемые структуры: нанотрубки



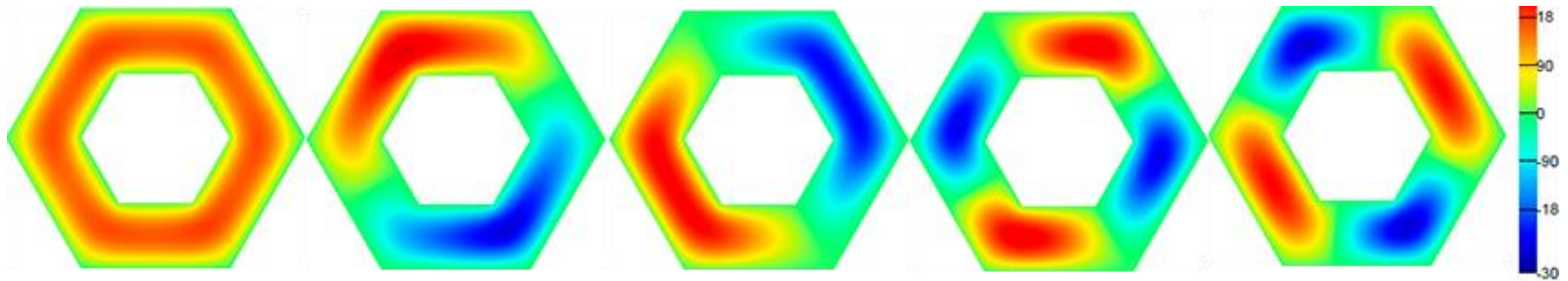
Наличие поверхностных состояний
приводит к изгибу зон на обеих
поверхностях нанотрубки

Спектр и волновые функции в гексагональных нанотрубках

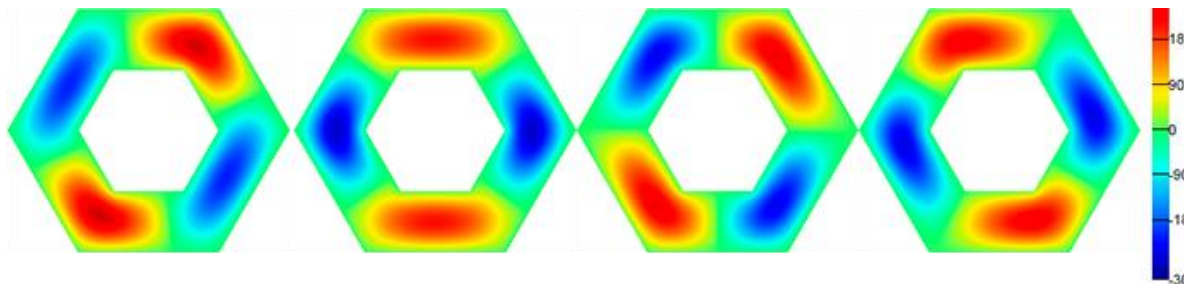
Первые 10 уровней шестиугольной квантовой проволоки с отверстием



Волновые функции на первых 5 уровнях:



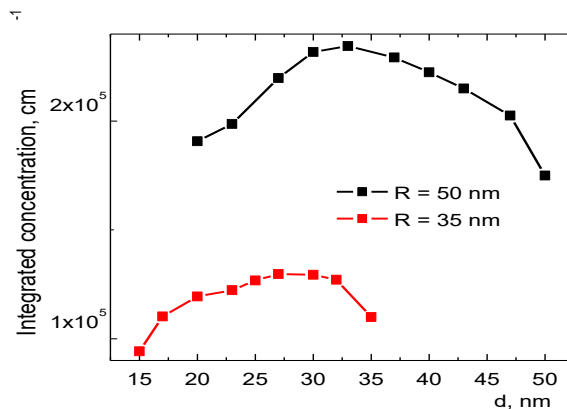
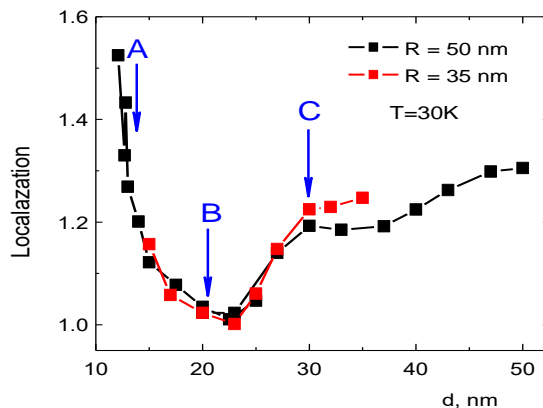
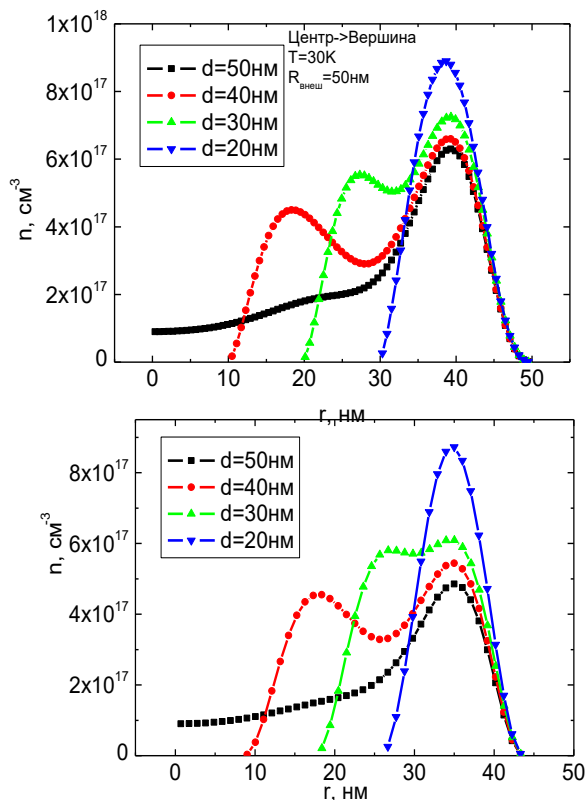
Линейные комбинации волновых функций вырожденных уровней 4 и 5:



Расчёт концентрации в шестиугольных структурах с внутренней полостью (R_{внеш} = 50 нм)

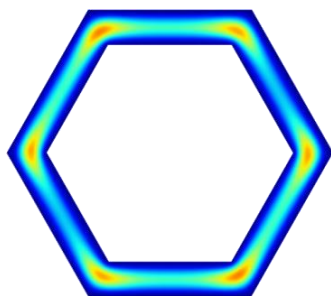
**Соотношения локализаций
носителей заряда у краёв и в
середине стенки**

**Интегрированная
электронная плотность**

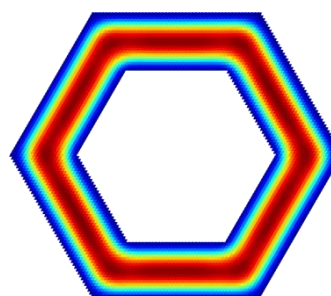


$$n(x, y) = \sqrt{\frac{2m^*kT}{\pi\hbar^2}} \sum_i |\Psi_i^2(x, y)| F_{-1/2} \left(\frac{E_f - E_i}{kT} \right)$$

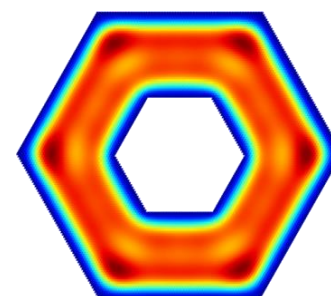
**R=50nm
T=10K**



D=12nm

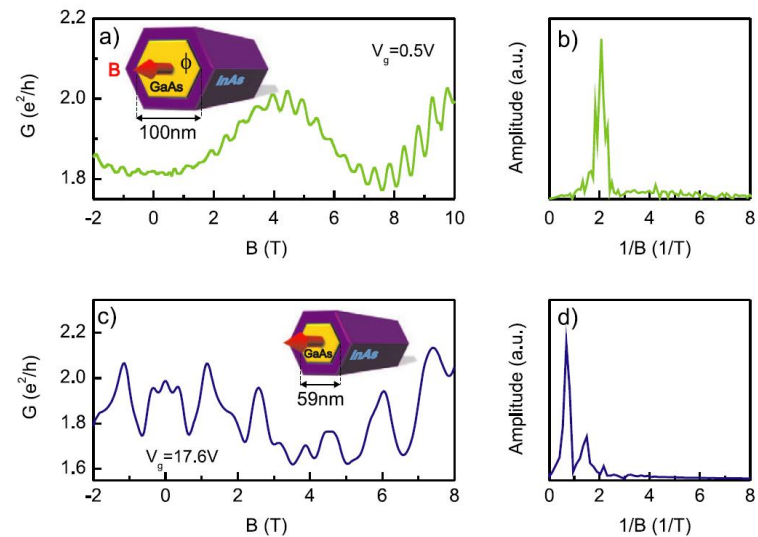
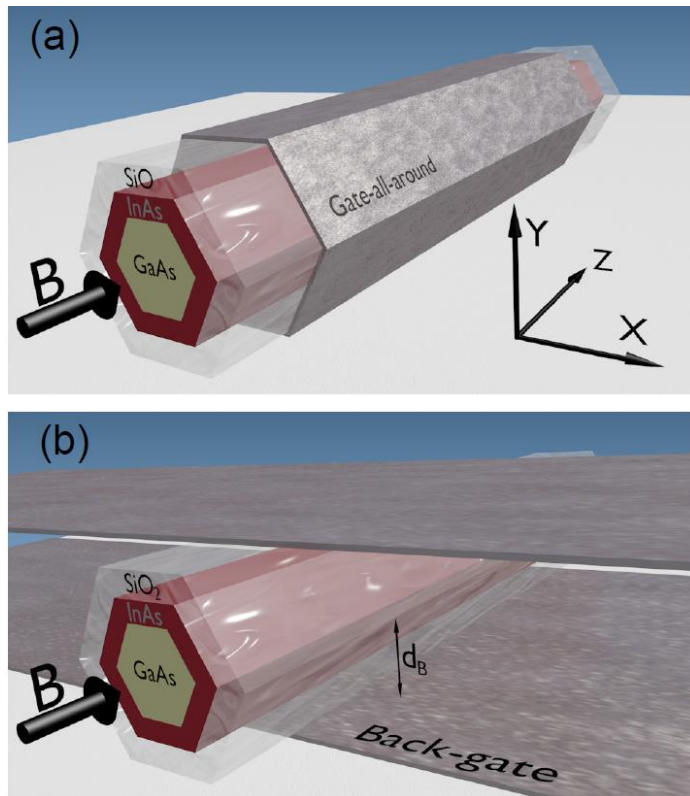


D=20nm



D=30nm

Влияние магнитного поля на уровни энергии и проводимость

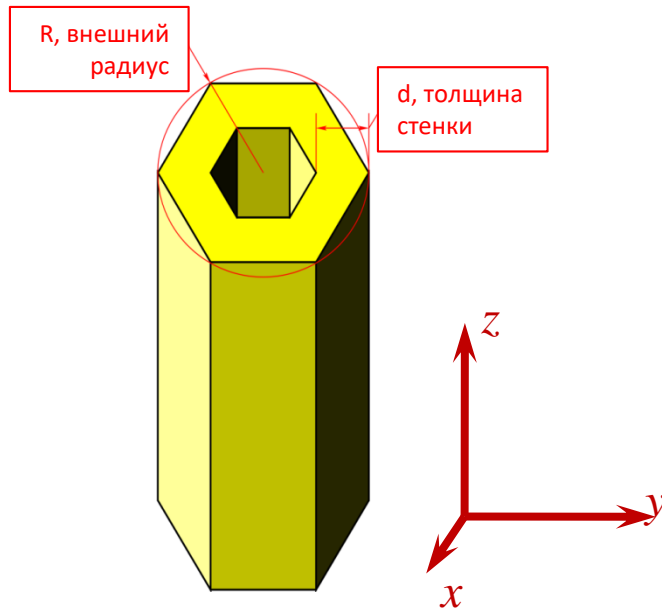


C.Blomers, T.Rieger, P.Zellekens, F.Haas, M.I.Lepsa, H.Hardtdegen, O.Gul, N.Demarina, D.Grutzmacher, H.Luth, Th.Schapers "Realization of nanoscaled tubular conductors by means of GaAs/InAs core/shell nanowires", Nanotechnology 24 (2013) 035203 (7pp)

Учёт влияния магнитного поля на уровни энергии

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

$$\hat{\vec{p}} = -i\hbar \vec{\nabla} + e\vec{A}$$



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

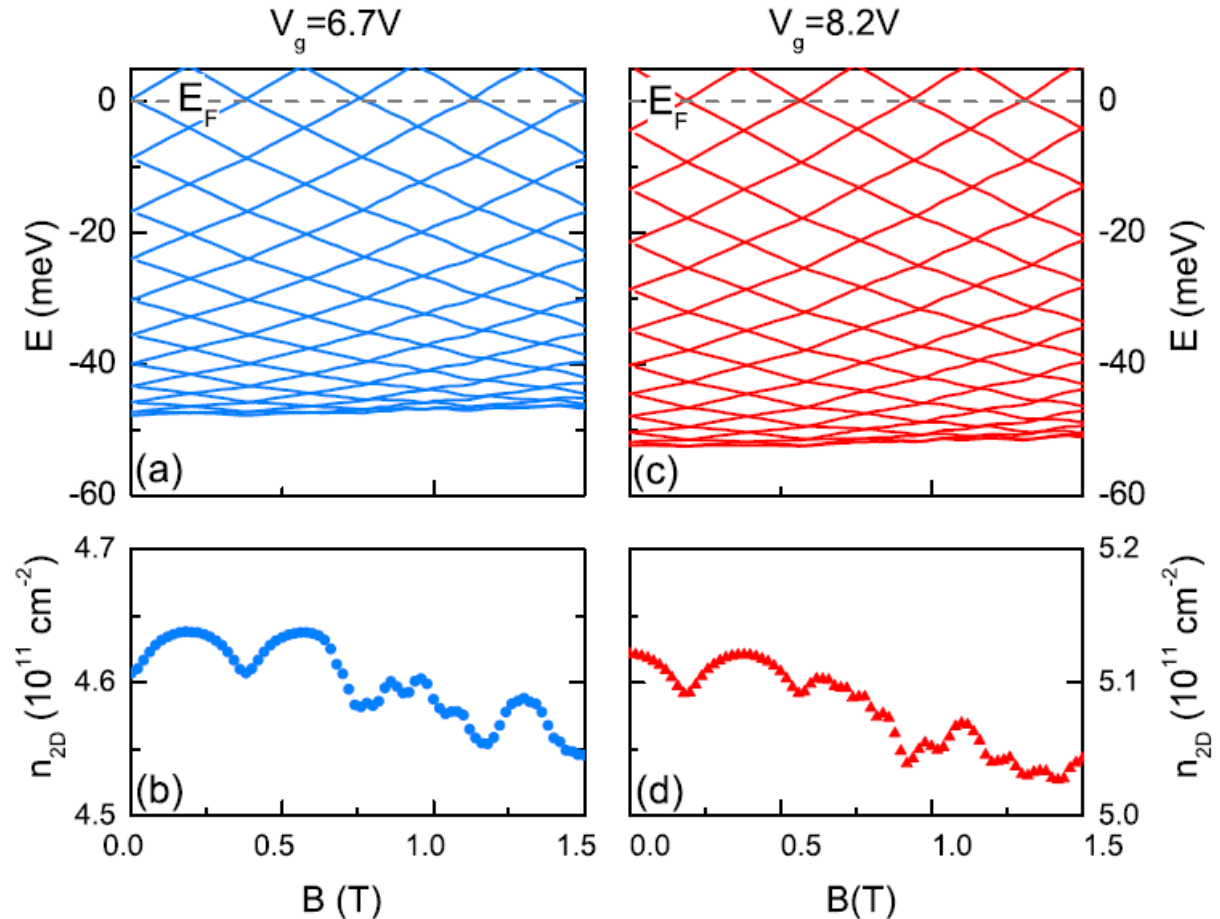
$$v_z^\sigma(r) = g^*(r) \mu_B B \eta_\sigma$$

Осцилляции уровней, полученные с помощью цилиндрической модели

$$\hat{\vec{\Pi}} = \hat{\vec{p}} + e\vec{A}$$

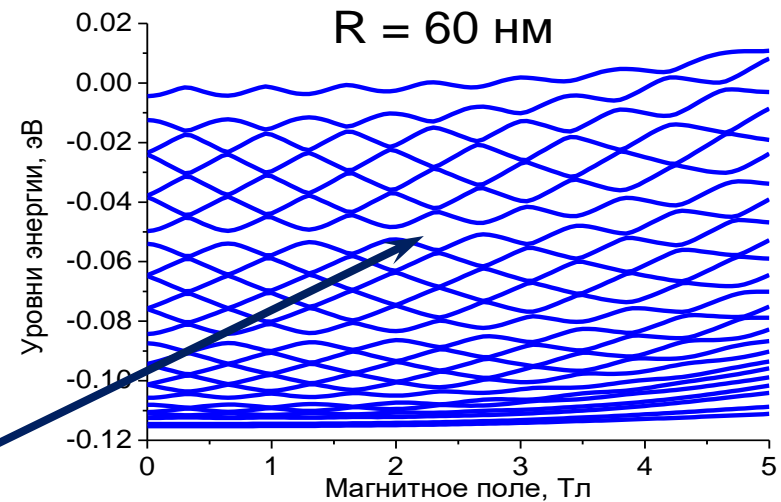
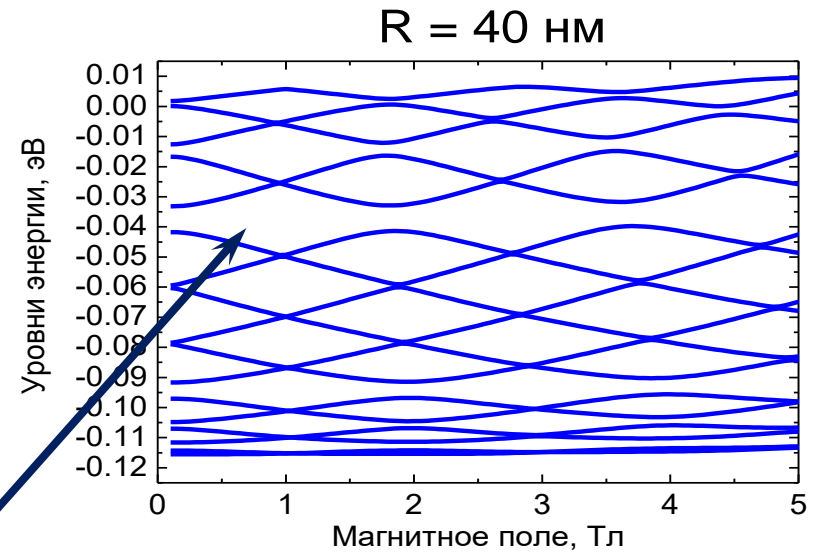
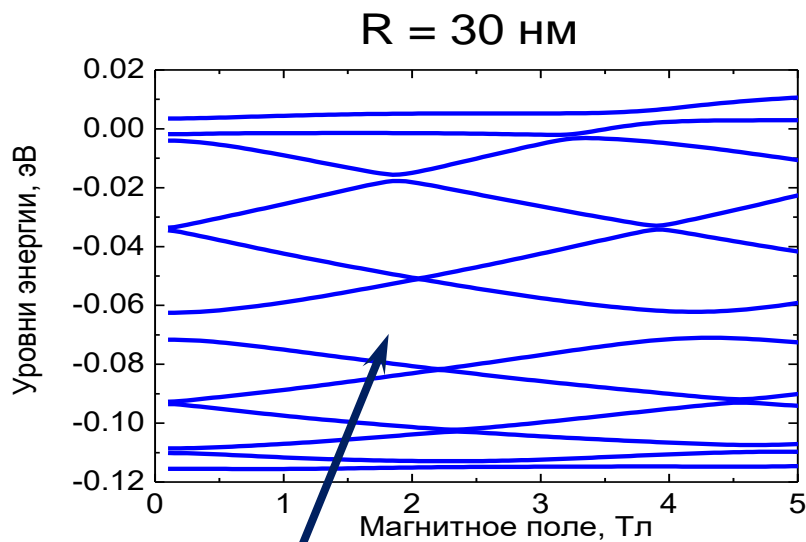
$$\vec{A} = \frac{B}{2} \begin{pmatrix} -y \\ x \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{\Pi}$$



O.Gul, N.Demarina, C.Blomers, T.Rieger, H.Luth, M.I.Lepsa, D.Grutzmacher, Th. Schapers "Flux periodic magnetoconductance oscillations", Physical review B 89, 045417 (2014)

Влияние внешнего радиуса структуры на уровни энергии (30К)



**«Запрещённые зоны» вследствие
гексагональной симметрии формы**

Расчёт проводимости

Проводимость:

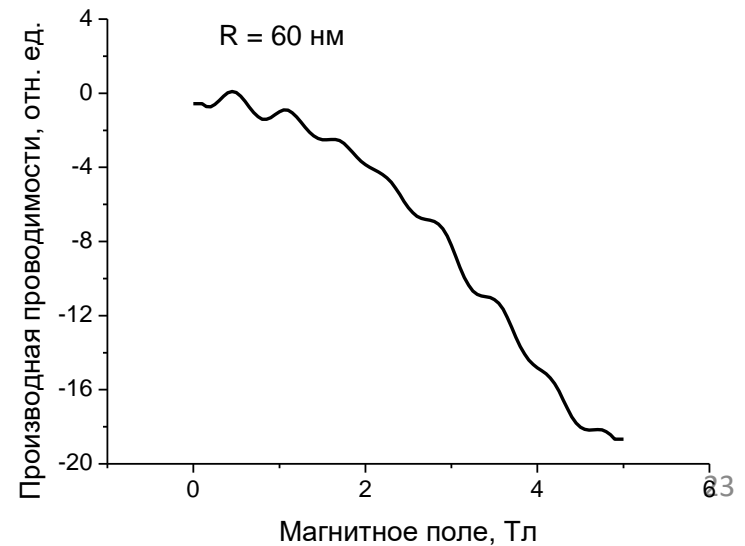
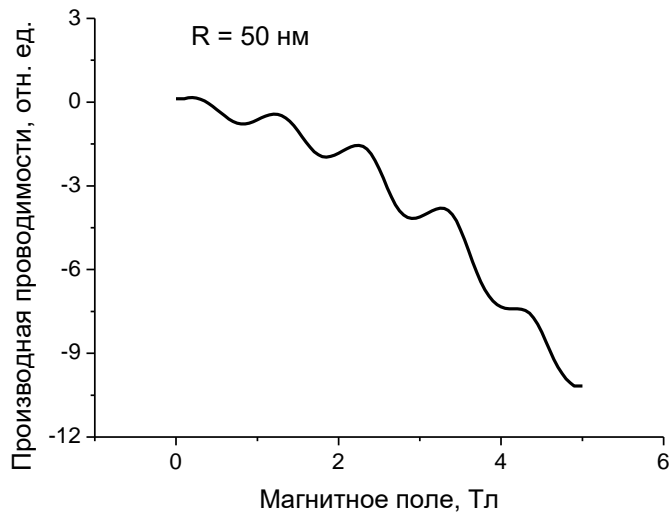
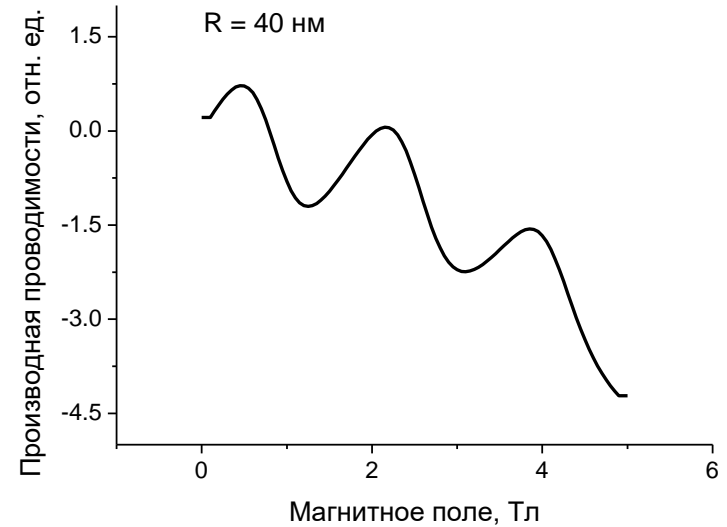
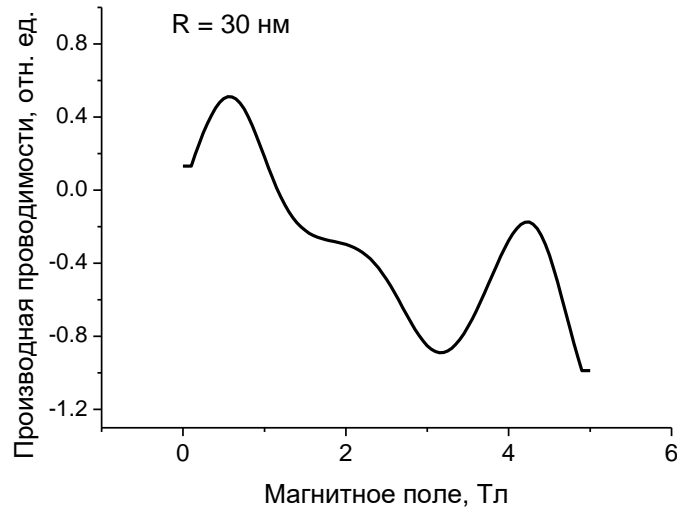
$$G^\sigma = \frac{e^2}{h} \sum_n \int_{B_{n,\sigma}} -\frac{\partial f(E - E_f, T)}{\partial E} dE$$

Распределение Ферми:

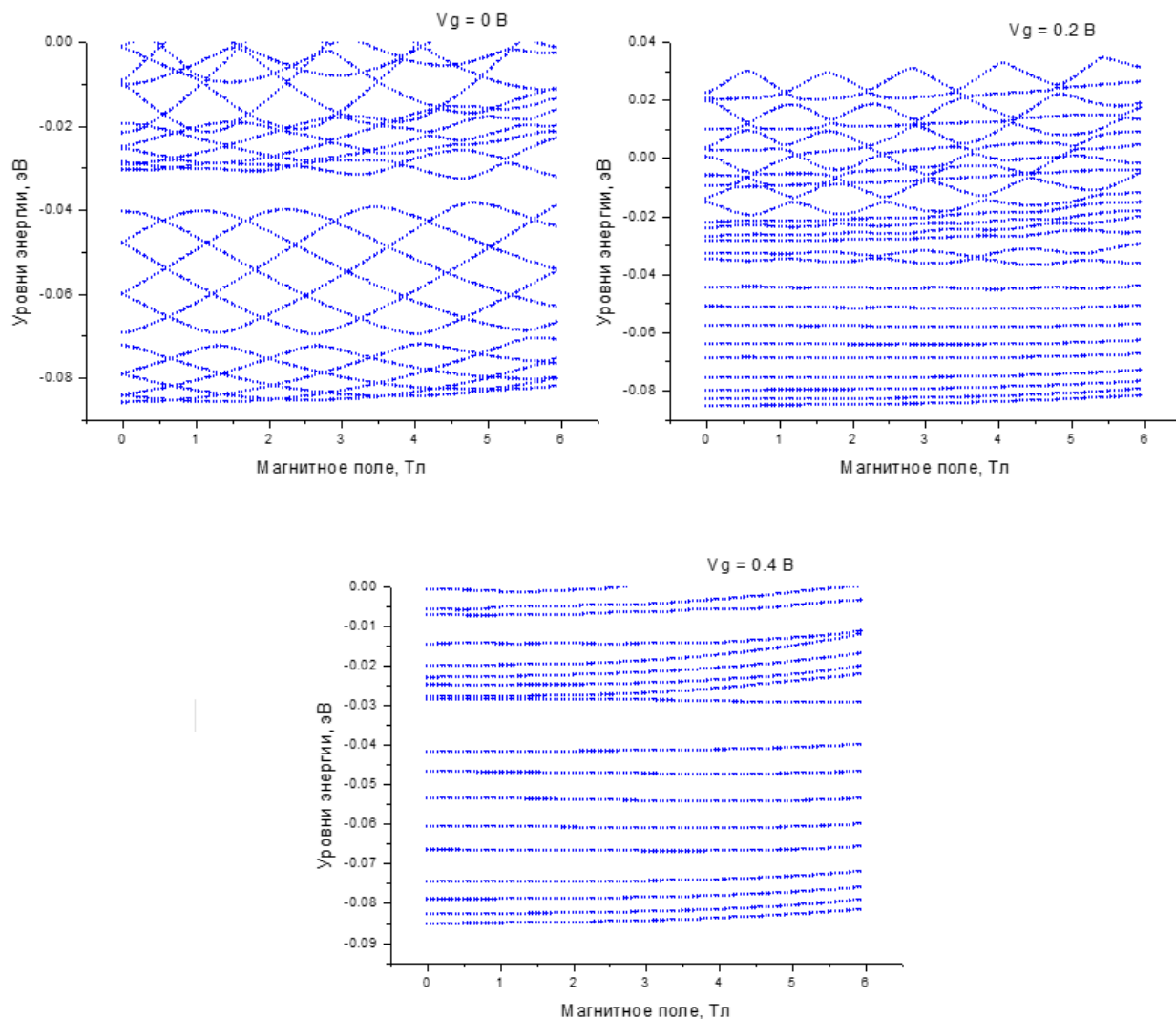
$$f(\varepsilon_{n,k,\sigma} - E_f, T) = \frac{1}{1 + e^{(\varepsilon_{n,k,\sigma} - E_f, T)/k_B T}}$$

Влияние радиуса структуры на проводимость (30К), наблюдение осцилляций Ааронова-Бома

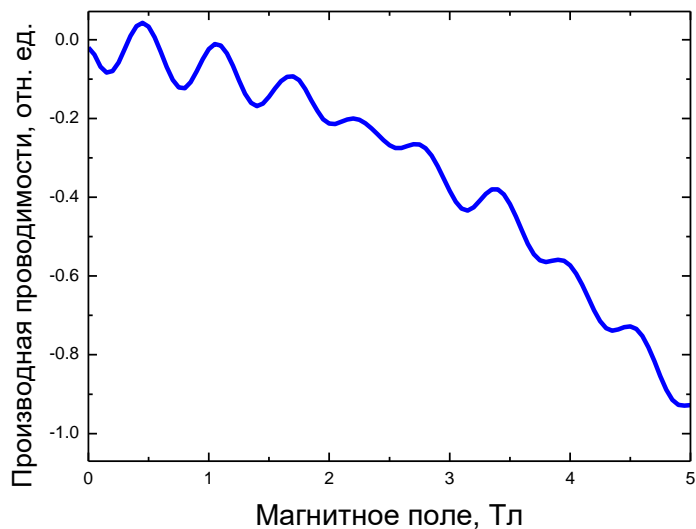
$$\frac{\partial G^\sigma}{\partial B} = \frac{\partial}{\partial B} \frac{e^2}{h} \sum_n \int_{B_{n,\sigma}} - \frac{\partial f(E - E_f, T)}{\partial E} dE$$



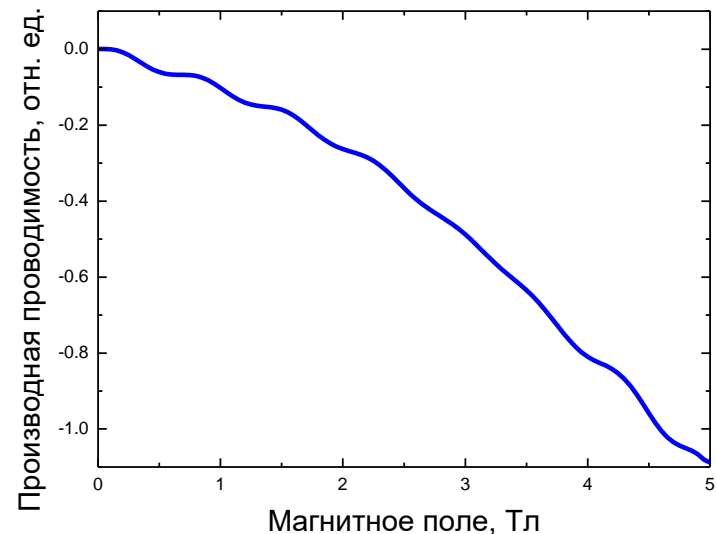
Влияние электрического поля на осцилляции энергетических уровней



Влияние толщины стенки на амплитуду осцилляций проводимости в нанотрубках



$d = 17 \text{ нм}$



$d = 25 \text{ нм}$

Производная проводимости Ландауэра по магнитному полю:

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

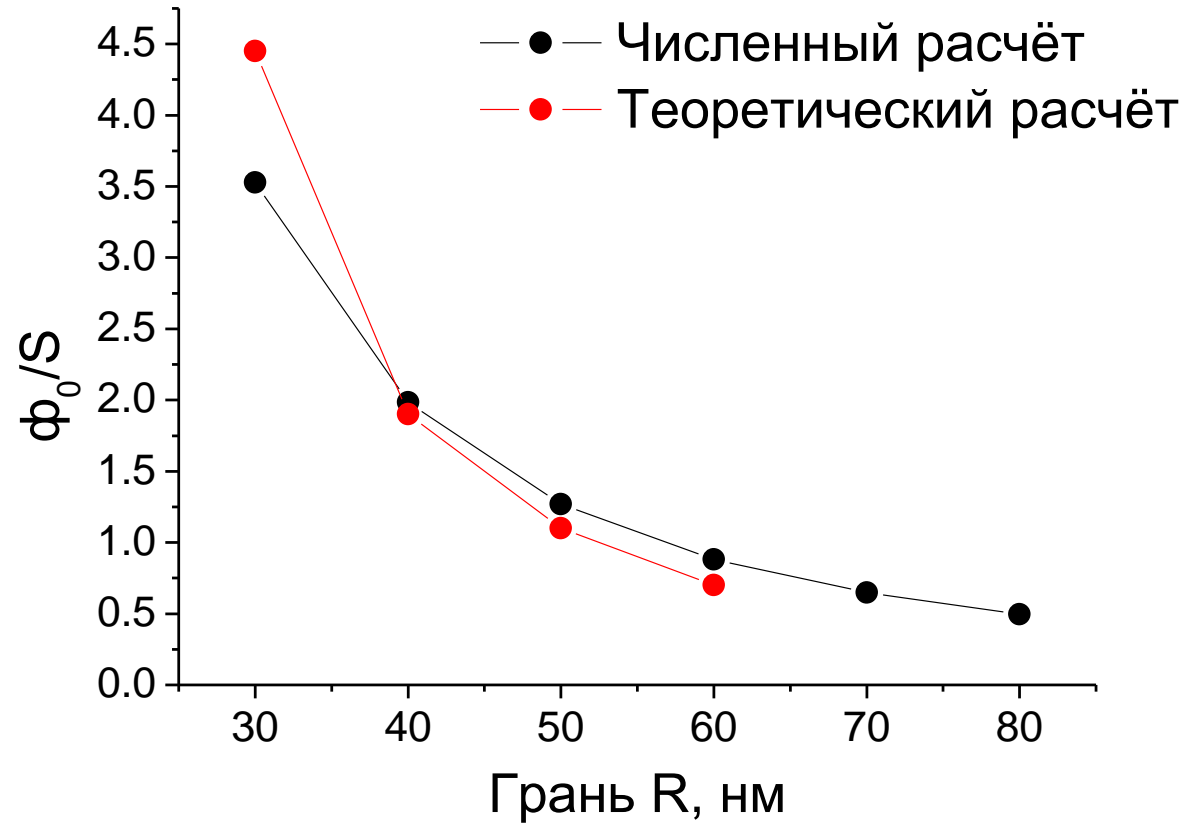
R=60nm
T=30K

Сравнение теоретического и экспериментального периодов осцилляций проводимости

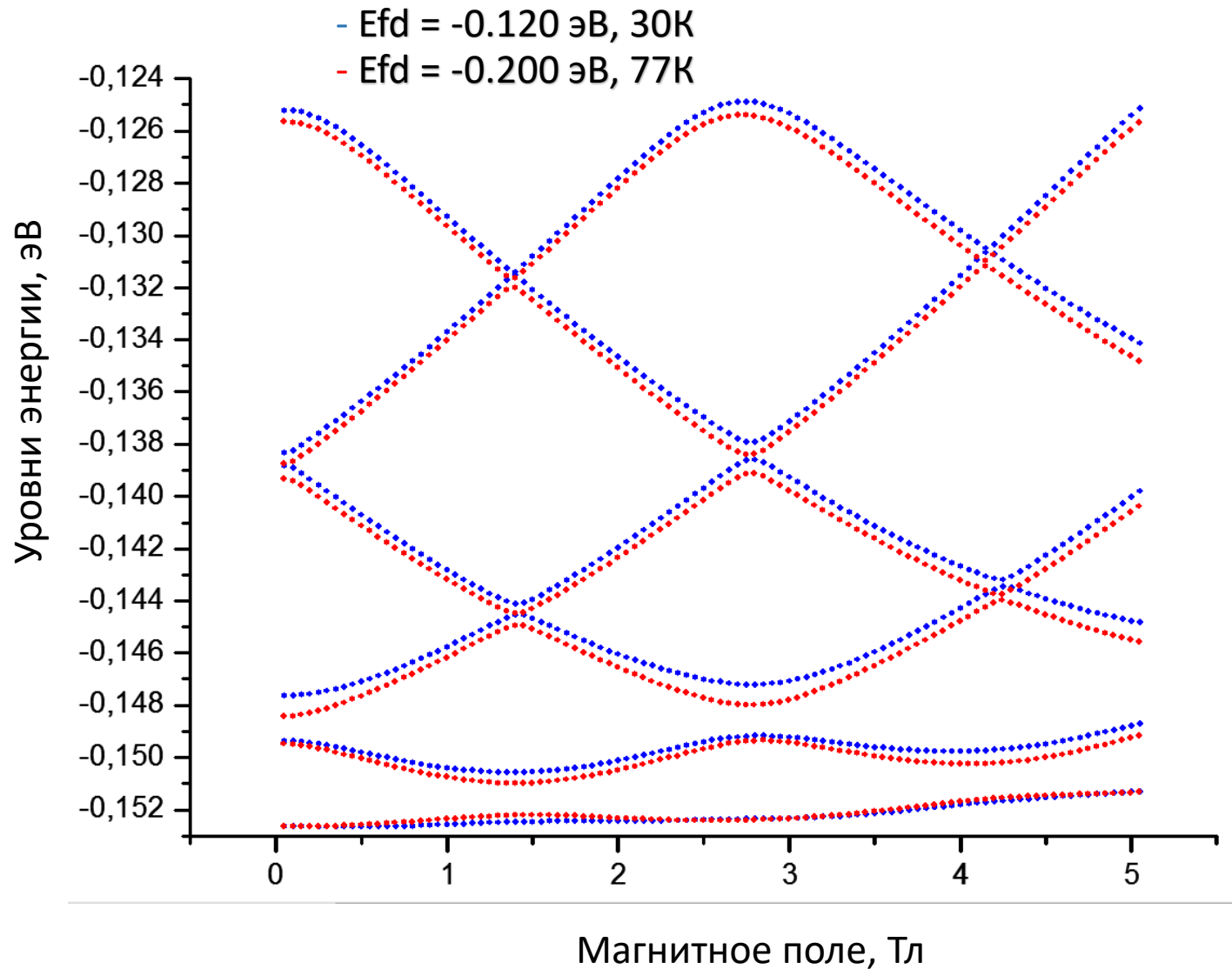
$$\Phi_0 = \frac{h}{e}$$

$$T = \frac{\Phi_0}{S}$$

$$S = \frac{3\sqrt{3}}{2} R^2$$



Различия в уровнях энергий при разных температурах и уровнях Ферми

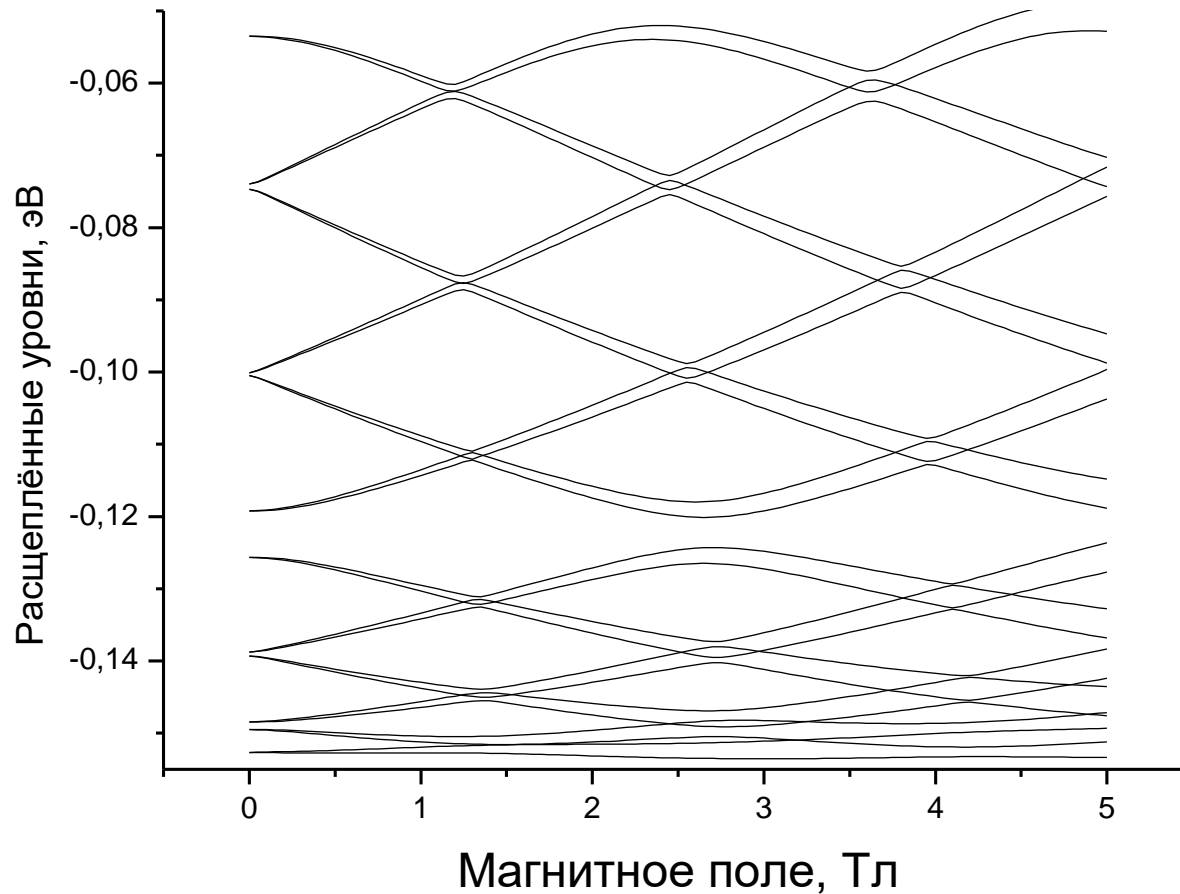


Оценка величины расщепления Зеемана для энергетических уровней

$$\nu_z^\sigma(r) = g^*(r)\mu_B B \eta_\sigma$$

При $g^*(r) = 14$ и $B = 5$ Тл:

$$\nu_z^\sigma = 4.05 \text{ мэВ}$$



Результаты работы

- Разработан и реализован алгоритм расчёта энергетических характеристик квантовых нитей гексагонального поперечного сечения на двумерной сетке с различными геометрическими размерами.
- Исследован спектр и волновые функции в шестиугольных нанотрубках из InAs с внешним радиусом 60 нм и различной толщиной стенки
- Исследовано влияние магнитного поля, приложенного вдоль оси гексагональной нанотрубки. Исследовано влияние геометрии структуры на характер осцилляций энергетических уровней.

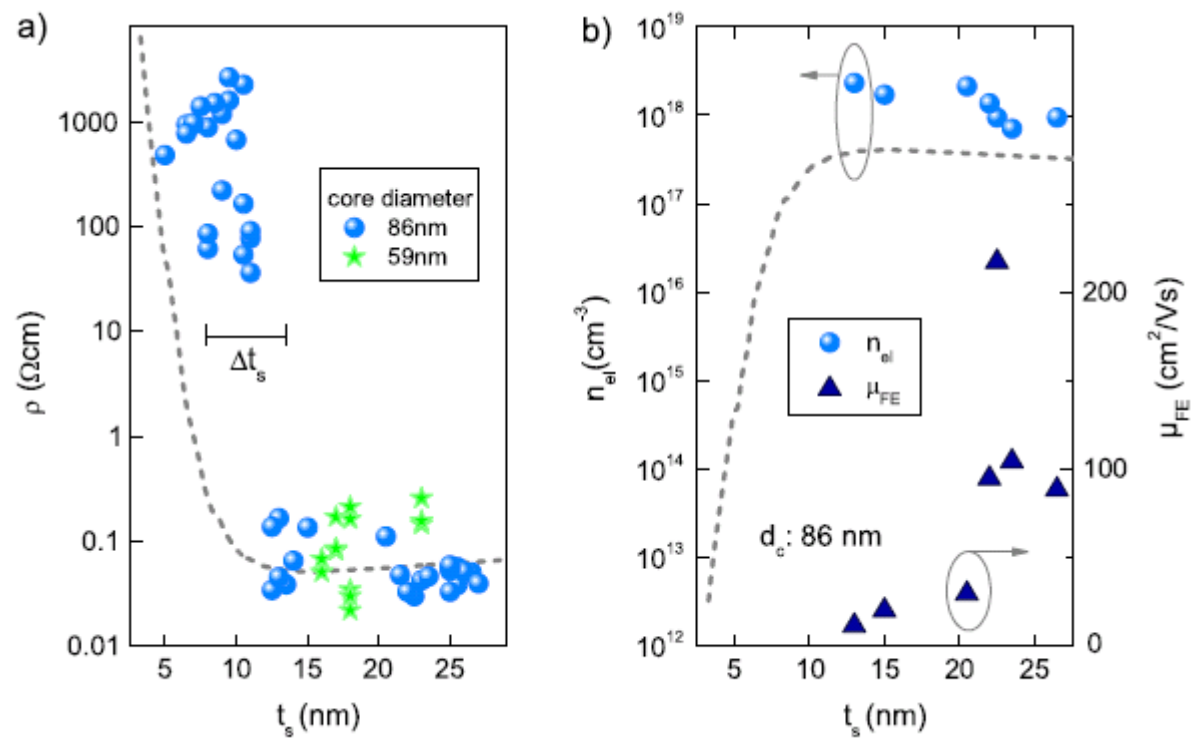
Список публикаций

1. В.Е. Дегтярёв, А.В. Еремеев, С.В. Хазанова, Н.В. Демарина «Особенности электронного газа в нанотрубках на основе InAs», Тезисы докладов XVII Всероссийской молодёжной конференции по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и наноэлектронике, стр. 94.
2. С.В. Хазанова, В.Е. Дегтярёв, Н.В. Демарина, А.В. Еремеев «Численный расчёт электронного спектра в нанотрубках на основе InAs», Труды XX международного симпозиума «Нанопизика и наноэлектроника», 14-17 марта 2016 г., стр. 764-765, Нижний Новгород .

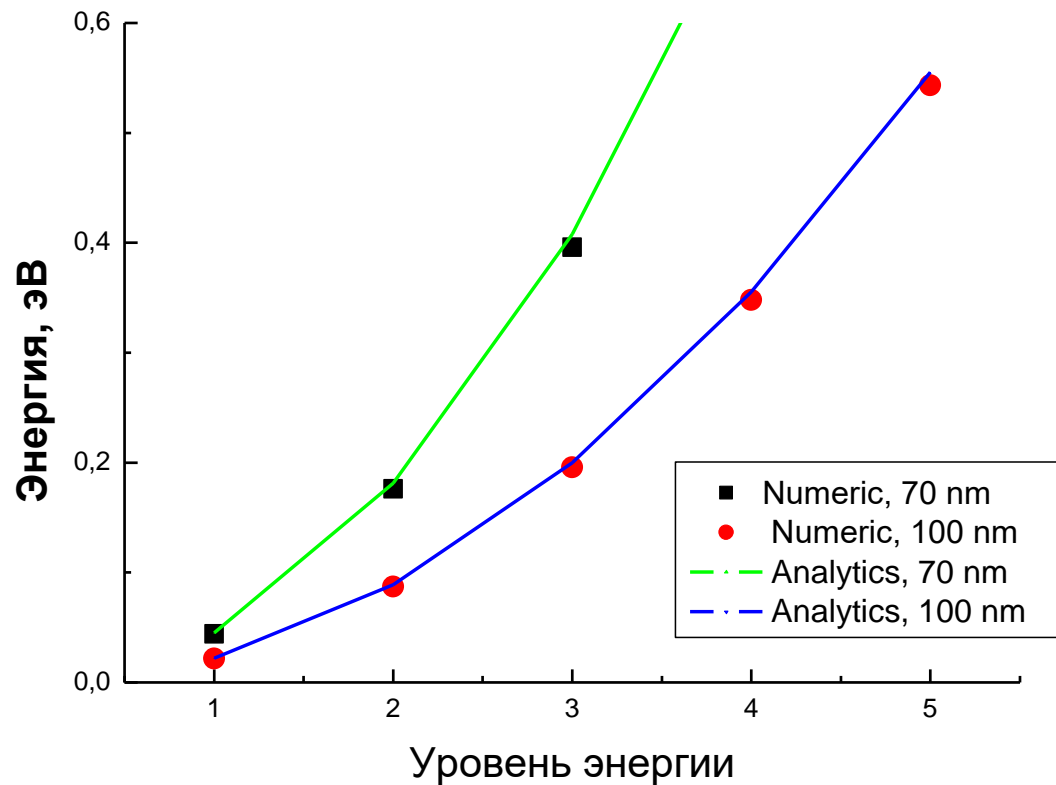
Спасибо за внимание

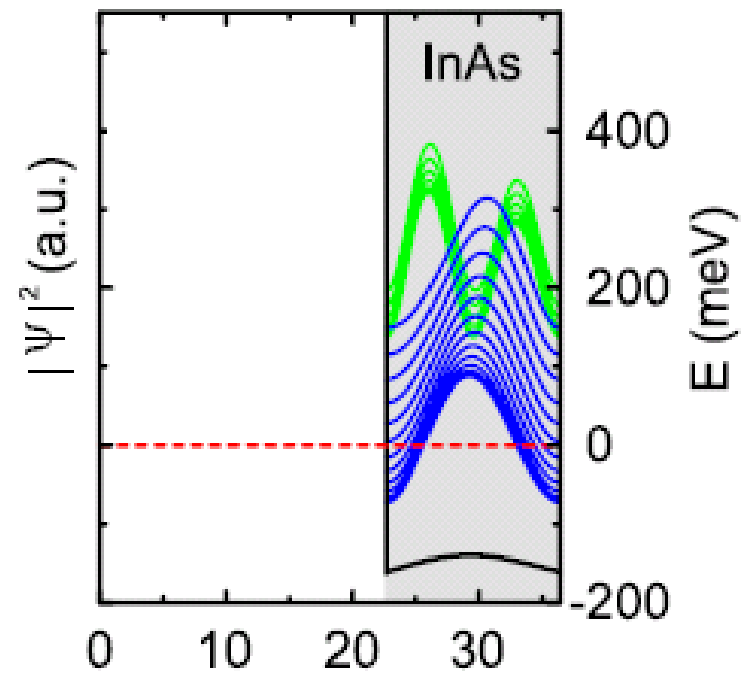
Оператор кинетической энергии

$$\begin{aligned}\hat{T} &= \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} - eA_{\alpha} \right) w(x, y) \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} - eA_{\alpha} \right) = \\ &= - \sum_{\alpha} \frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} w(x, y) \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} - \sum_{\alpha} \frac{e\hbar A_{\alpha}}{2i} \frac{\partial w(x, y)}{\partial x_{\alpha}} + \\ &+ \sum_{\alpha} \frac{e\hbar B w(x, y)}{2i} \left(y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right) + \sum_{\alpha} \frac{e^2 B^2 w(x, y)}{8} (x^2 + y^2)\end{aligned}$$

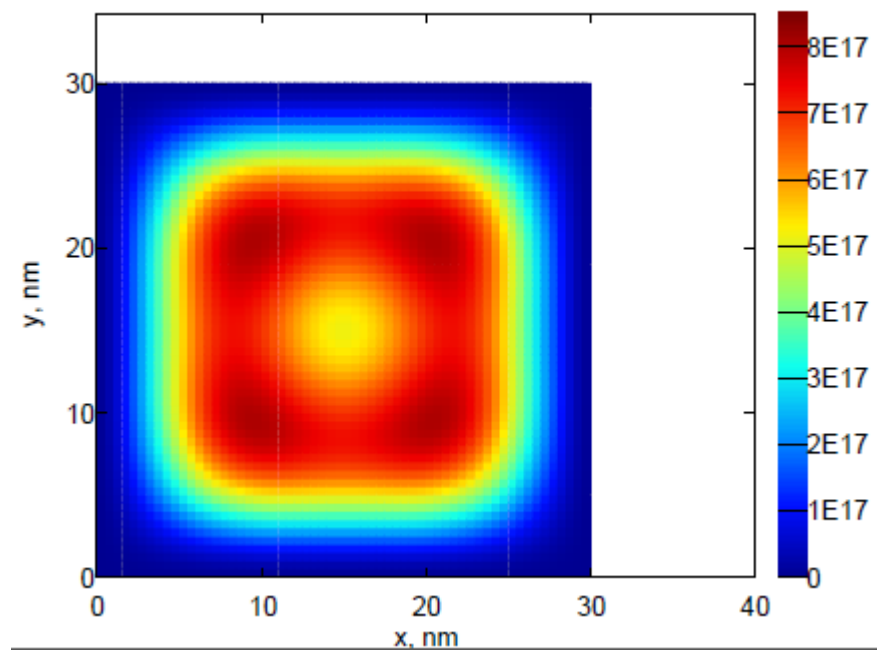
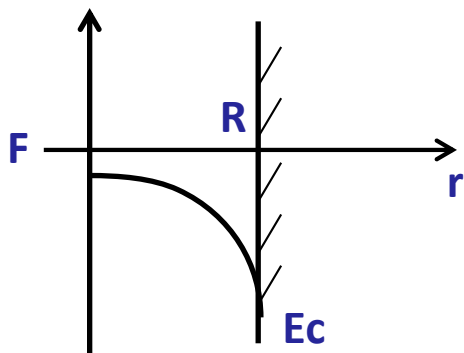
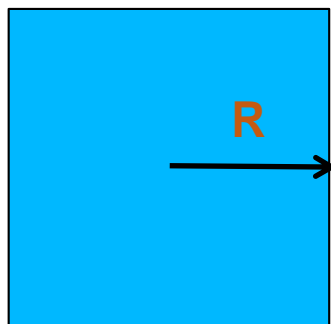


Зависимость положения уровней энергии от ширины квантовой ямы



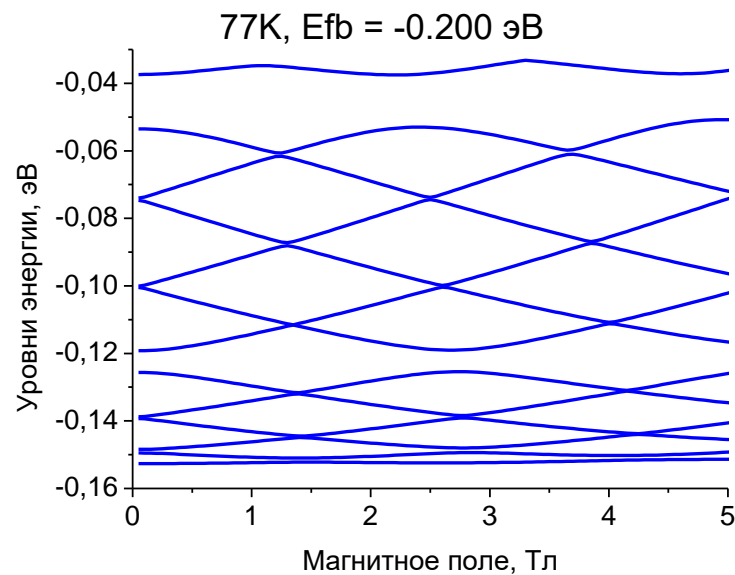
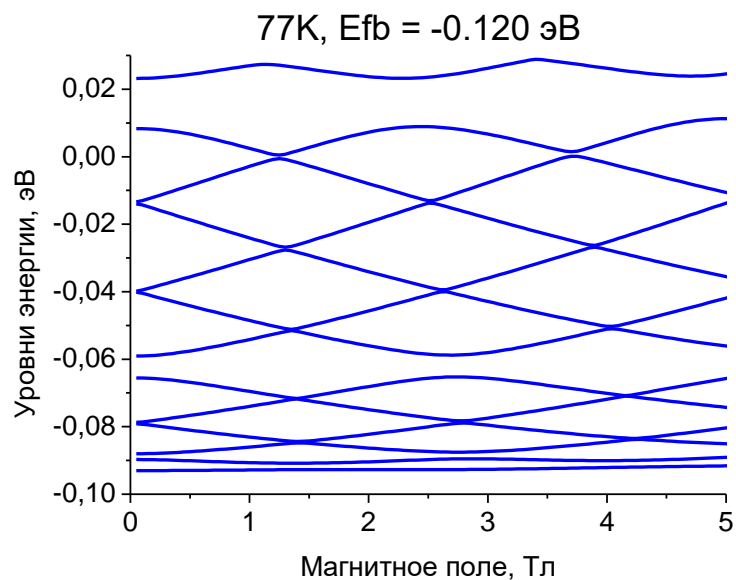
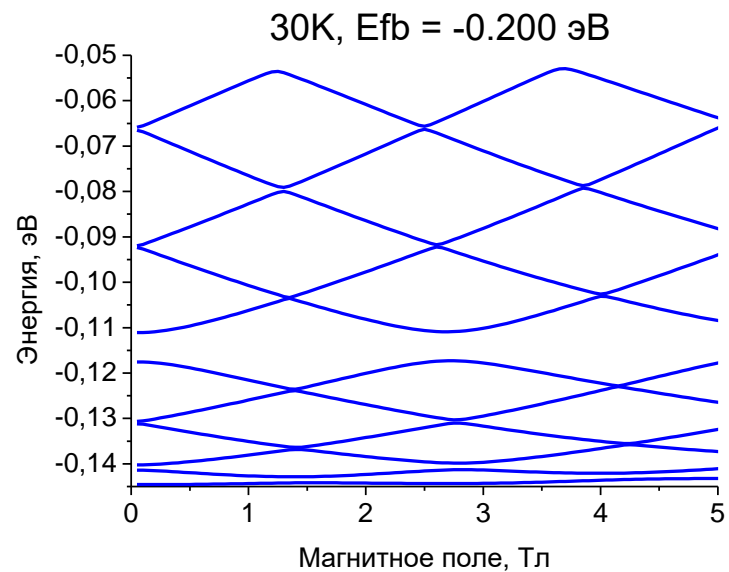
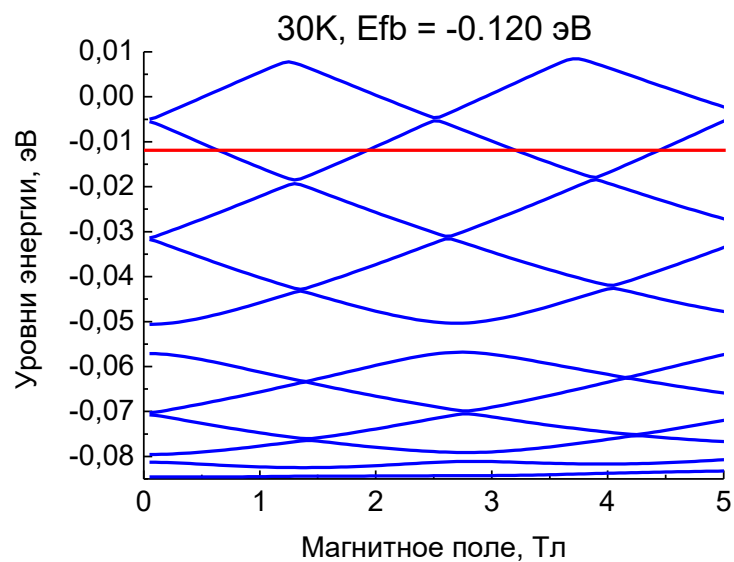


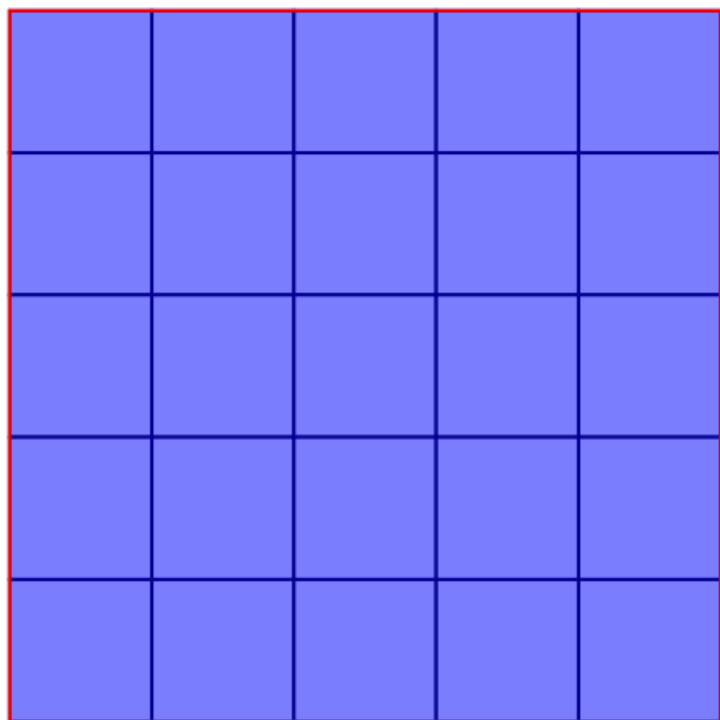
Расчёт концентрации электронов



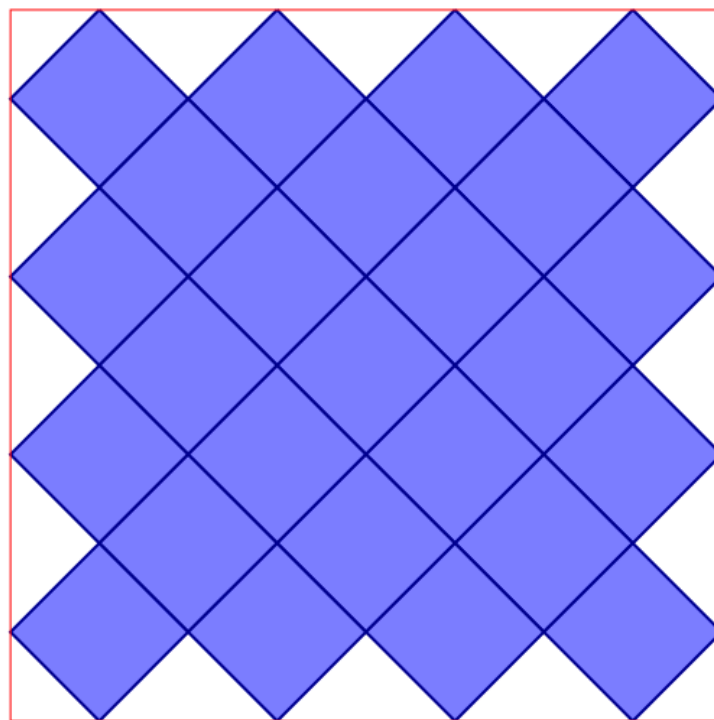
InAs, 30×30 нм, $T = 30\text{K}$

Влияние температуры и положения уровня Ферми на уровни энергии



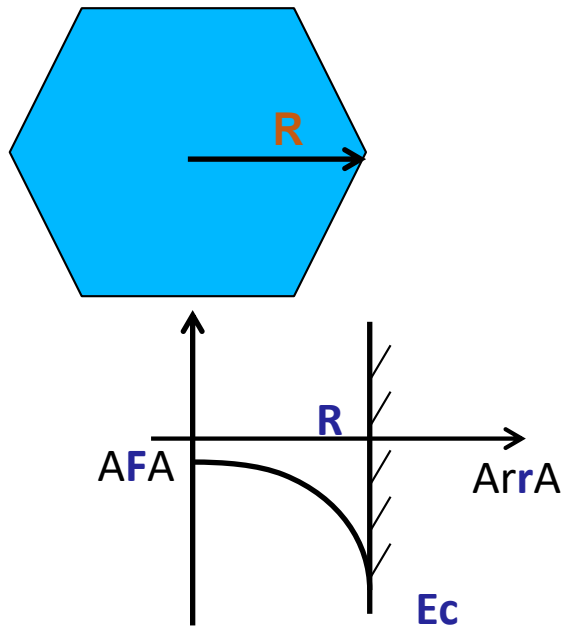


Сетка с границей (100)

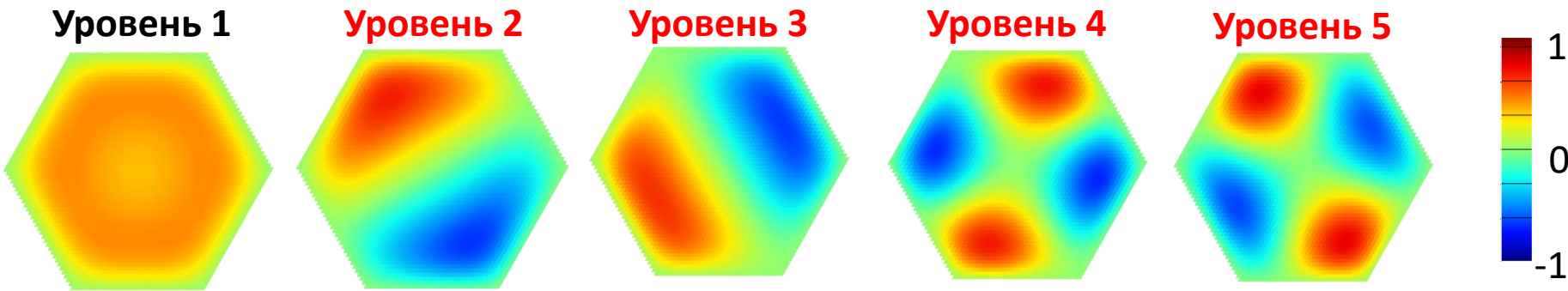
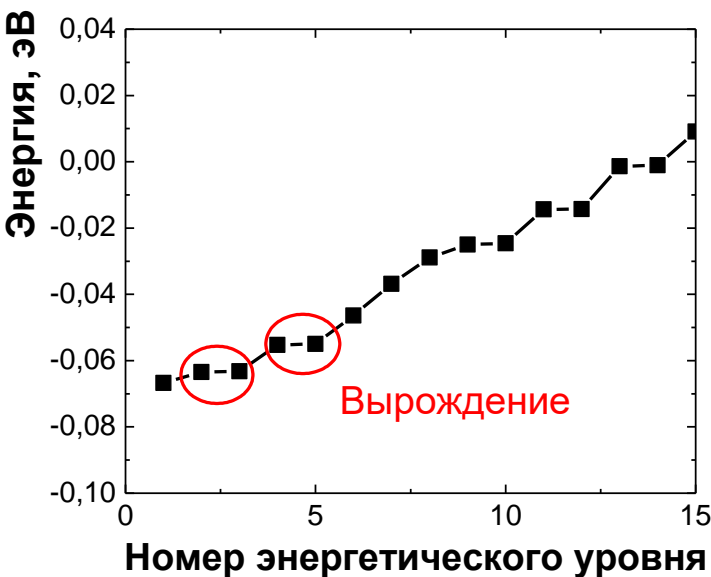


Сетка с границей (110)

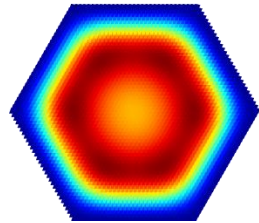
Энергетический спектр и волновые функции структур с гексагональным поперечным сечением



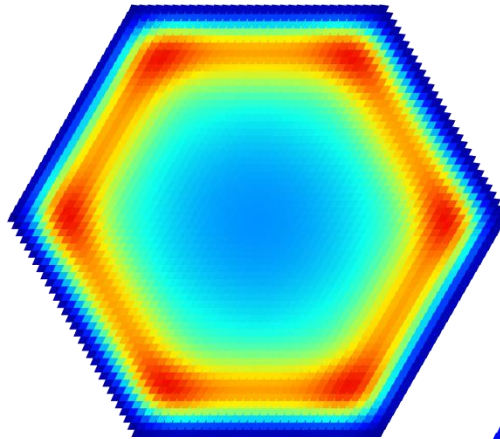
$R=40\text{нм}, T=300\text{К}$



Распределение концентрации электронов для гексагонального сечения в зависимости от размера

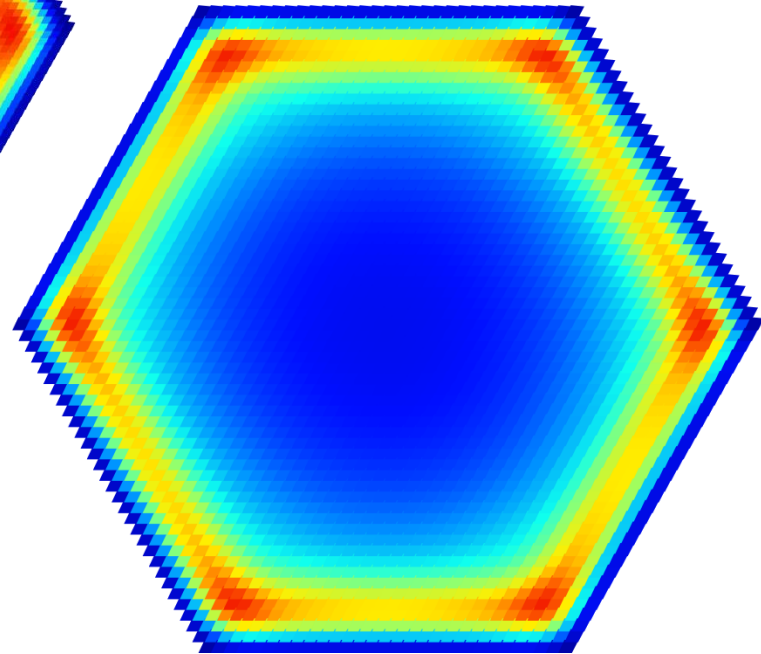


R=20nm

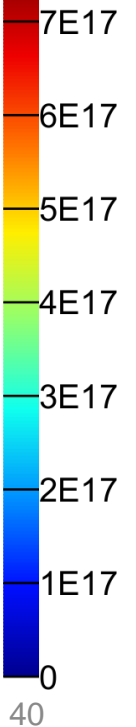


R=40nm

R=60nm



cm⁻³



Введение

Носители заряда в низкоразмерных структурах описываются одноэлектронным стационарным уравнением Шрёдингера:

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta + U(x))$$

Собственные значения E описывают уровни энергии размерного квантования:

$$\hat{E} = \frac{\hat{p}^2}{2m} \quad \hat{p} = \hbar \vec{k}$$