Министерство образования и науки Российской Федерации
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ Н.Г. ЧЕРНЫШЕВСКОГО»

Кафедра физики полупроводников

Квантовомеханическое моделирование переноса заряда в одномерной цепочке химически связанных атомов на примере GaAs

АВТОРЕФЕРАТ БАКАЛАВРСКОЙ РАБОТЫ

Студента 4 курса 412 группы
направления 11.03.04 «Электроника и наноэлектроника»
факультета нано- и биомедицинских технологий

Калмыкова Антона Валерьевича

Научный руководитель
Доцент кафедры материаловедения и управления качеством СГУ,
с.н.с. ОНИ НС и БС СГУ, к.ф.-м.н. _____А.А. Клецов
должность, место работы, уч. степень, уч. звание подпись, дата инициалы, фамилия

Консультант
Заведующий кафедрой физики полупроводников СГУ,
д.ф.-м.н., профессор _____ А.И. Михайлов
должность, место работы, уч. степень, уч. звание подпись, дата инициалы, фамилия

Зав. кафедрой
Заведующий кафедрой физики полупроводников СГУ,
д.ф.-м.н., профессор _____ А.И. Михайлов
должность, место работы, уч. степень, уч. звание подпись, дата инициалы, фамилия

Саратов, 2016 год

Введение

Подход Ландауэра-Буттикера к транспортным явлениям в мезоскопических проводящих системах состоит в том, что процесс прохождения электронов через такие системы рассматривается как процесс рассеяния. Мезоскопическая система предполагается соединенной с макроскопическими контактами, которые выполняют роль электронных резервуаров и служат источником равновесных частиц. После рассеяния электроны возвращаются в тот же самый или уходят в другой контакт. Таким образом, задача вычисления таких макроскопических характеристик образца как, например, электропроводность или теплопроводность, сводится к решению квантовой задачи рассеяния.

Этот подход является существенно одночастичным. Поэтому, мы пренебрегаем взаимодействием электронов с электронами (и другими квазичастицами) и используем уравнение Шредингера для бесспиновых частиц, в качестве основного уравнения в тех случаях, когда требуется определить квантово-механические амплитуды рассеяния. В рамках рассматриваемого метода, взаимодействие может быть добавлено в приближении среднего поля.

Целью данной работы является исследование изменения электронной структуры (в частности ширины запрещенной зоны) в полупроводниковом нанокластере типа A3B5 с целью расчета их проводимости, то есть наноскопический анализ электронной проводимости полупроводниковой структуры A3B5, а одним из способов проведения данного анализа является формализм Ландауэра-Буттикера.

В данной работе рассмотрены такие структуры, как GaAs и Cu-GaAs-Cu (с медными контактами).

Основное содержание работы

Во введении описана актуальность темы исследования, а также сформулированы цель и задачи исследования. Описано, что именно подход Ландауэра-Буттикера является для нас наиболее значимым.

В первой главе произведен анализ литературы , посвященный способу анализа электронной проводимости, а именно формализм Ландауэра-Буттикера. Описаны и подробно изучены формулы Ландауэра для проводимости и для тока при ненулевом напряжении.

Далее описывается подробно теория электронного пропагатора, так как проводя анализ были использованы программные пакеты, основывающиеся на данной теории.

Изучен метод Хартри-Фока, так как именно он широко используется в квантовой химии, в частности, для проведения численного моделирования конфигурации некоторых молекул, в теории атома для расчетов свойств атомных конфигураций. Метод состоит из нескольких стадий, о которых все рассказывается.

Рассмотрена теория граничных орбиталей, понимание которой важно для построения зонной диаграммы нанокластера.

Рассмотрен квантово-химический комплекс Gaussian, а именно его способности, актуальность и применение.

Во второй главе описывается экспериментальная часть работы, заключающаяся в моделировании и оптимизации нанокластеров типа A3B3, а именно GaAs и GaAs с медными контактами по краям. Эта глава разбита на 2 части:

1) оптимизация и моделирование
2) анализ полученных результатов

Первая часть работы заключается в оптимизации геометрии кластера с помощью квантово-химической программы Gaussian. Этот программный пакет предназначен для расчета структуры и свойств молекулярных систем, как в газофазном, так и конденсированном состоянии. Программа решает уравнение Шредингера и находит оптимальное положение каждого атома решетки, которому соответствует минимальное значение потенциальной энергии. Работали с таким кластером, как GaAsCu.

Для оптимизации пользовались методом Хртри-Фока, и для описания волновой функции молекулы использовался базисный набор 6-311. Визуализация производилась с помощью программы GaussView.

На рисунке *1(а)* и *1(б)* изображен кластер GaAs, состоящий из 9 атомов до и после оптимизации.

Рис.1(а) До оптимизации:

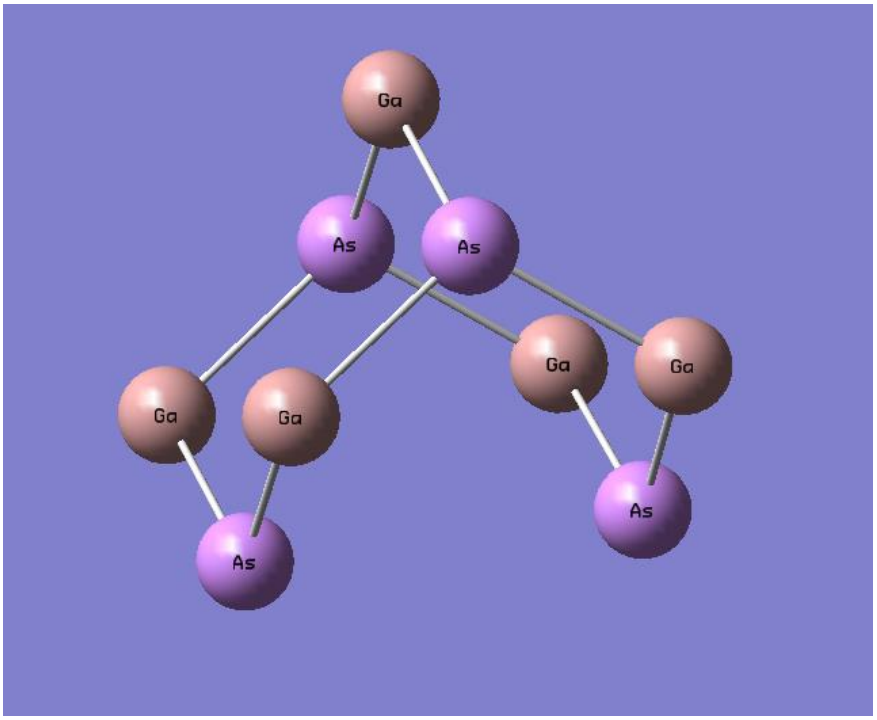
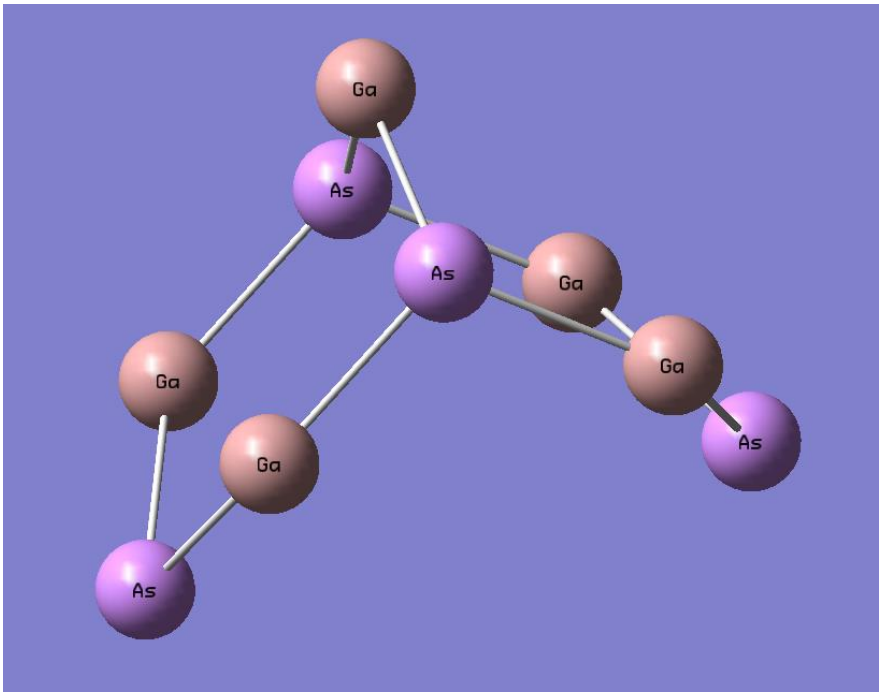


Рис.1.(б) После оптимизации:



Сравнивая 2 рисунка, видно, что расстояние между атомами кластера немного изменилось, но, в общем, структура осталась похожей.

На рисунках *2(а)* и 2(б) изображен кластер GaAs с медными (Cu) контактами состоящий из 12 атомов до и после оптимизации.

Рис.2(а) До оптимизации:

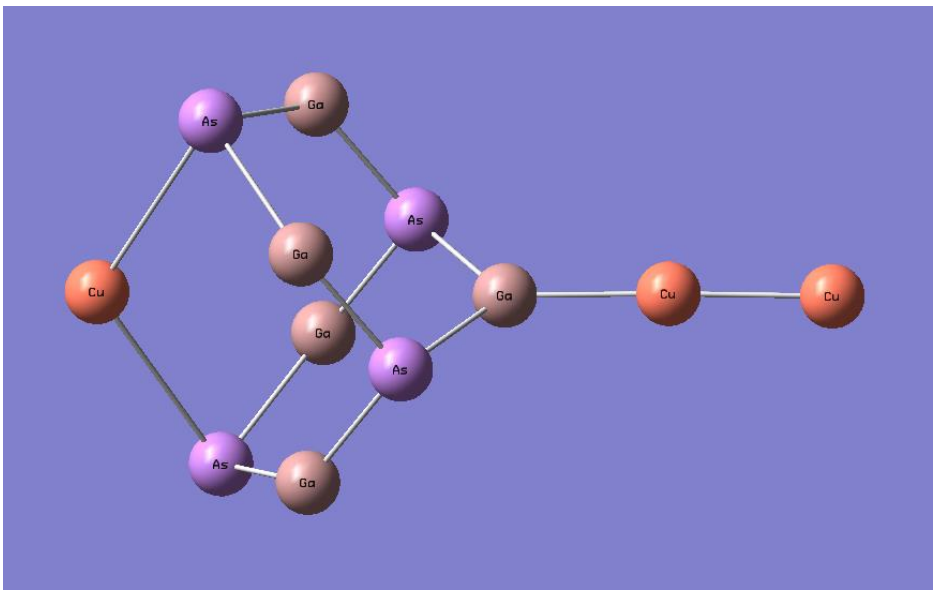
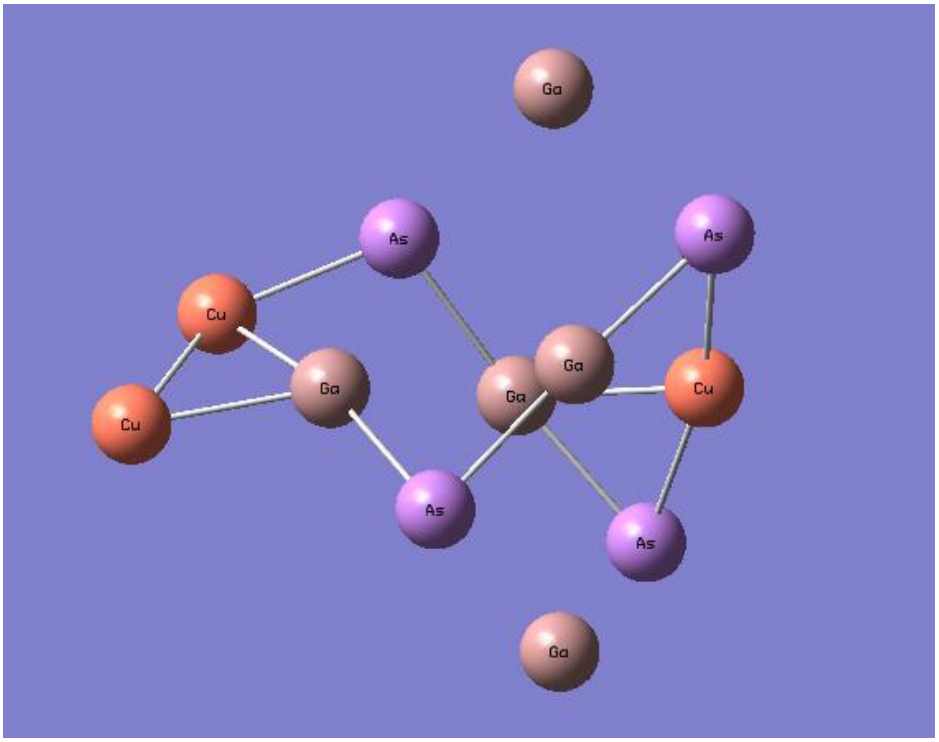


Рис.2(б) После оптимизации:



Сравнивая 2 рисунка видно, что расстояния между атомами и структура самого кластера сильно изменилась. Заметно, что 2 атома Ga отделены от других атомов, которые связанны между собой. Оказывается, что связь между этими атомами и основной массой кластера все же есть, но она слаба настолько, что программа просто ее не изображает.

На рисунках *3(а)* и *3(б)* также изображен кластер GaAs с медными (Cu) контактами, состоящий из 20 атомов. Так как моделирование производилось в программе, то эта структура есть соединение двух кластеров арсенида галлия по 9 атомов, соединенные между собой. Видно, что все связи после оптимизации не нарушены, но структура сильно изменилась.

Рис.3(а). До оптимизации

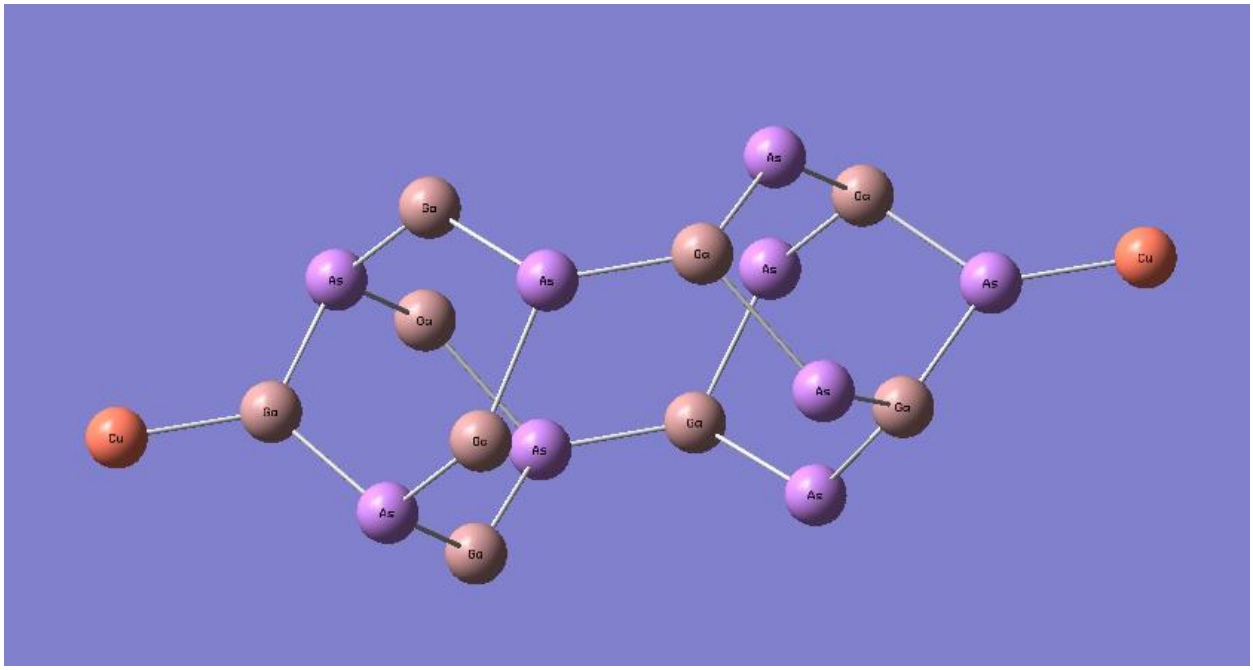
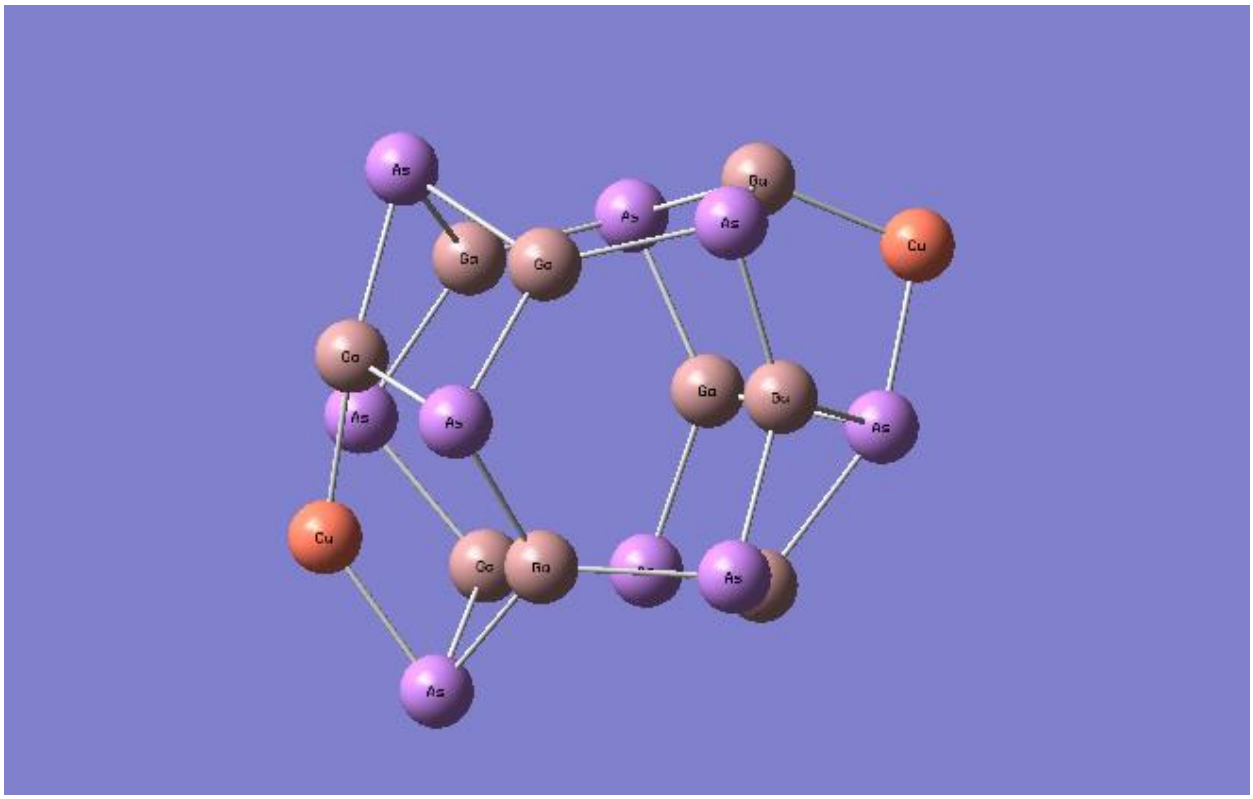


Рис. 3(б). После оптимизации

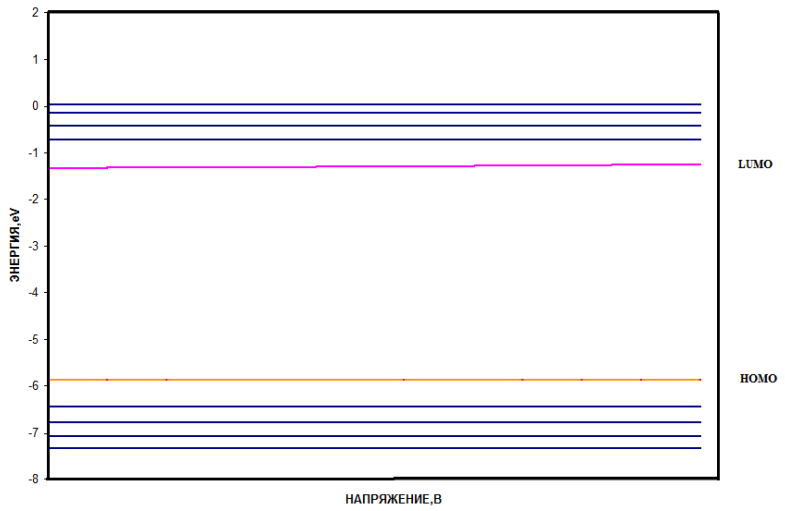


Анализ полученных результатов

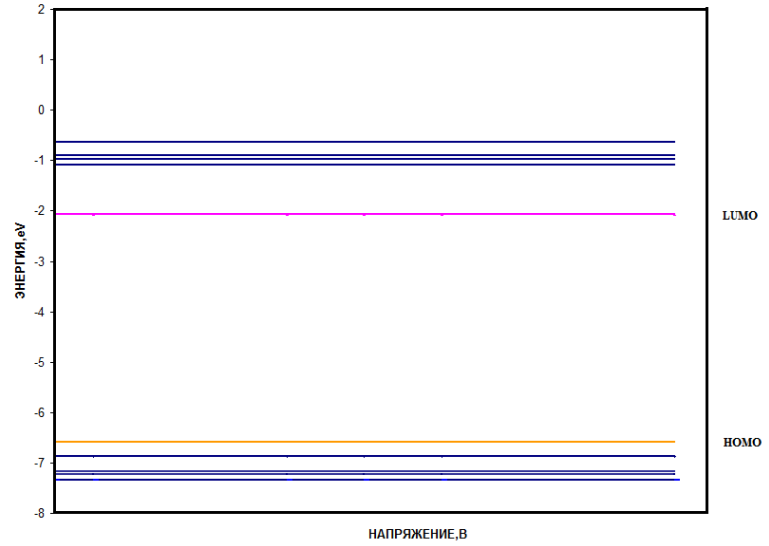
На этом этапе работы была задача: построить зонную диаграмму нашей структуры по полученным результатам. Получили таблицы со значениями для кластера с 12 и 20 атомами:

По полученным результатам была построена зависимость напряжения от энергии для двух кластеров. Эти графики можно считать зонной диаграммой кластера.

Зонная диаграмма кластера (12 атомов)



Зонная диаграмма кластера (20 атомов)

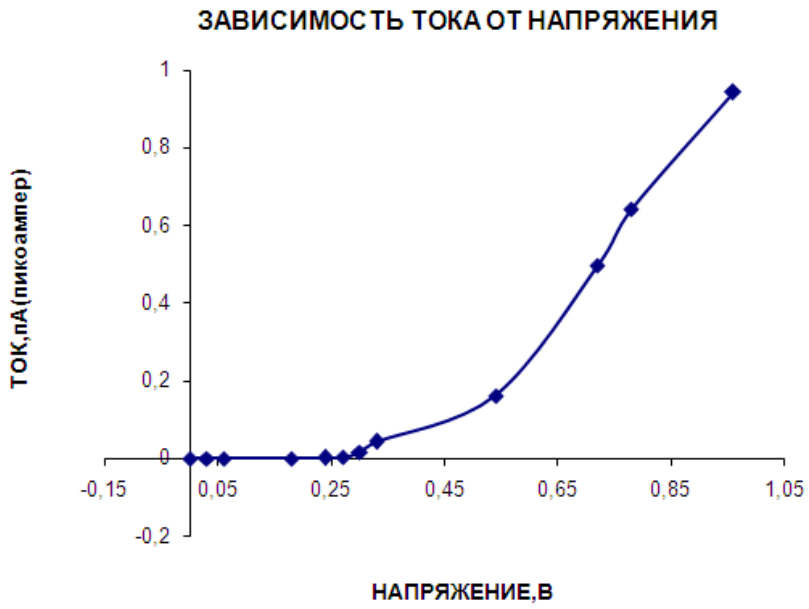


Сравнивая 2 графика (кластер из 12 атомов и кластер из 20 атомов), можно заметить, что при увеличении атомов нанокластера плотность уровней в валентной зоне и зоне проводимости увеличивается. Также видно, что

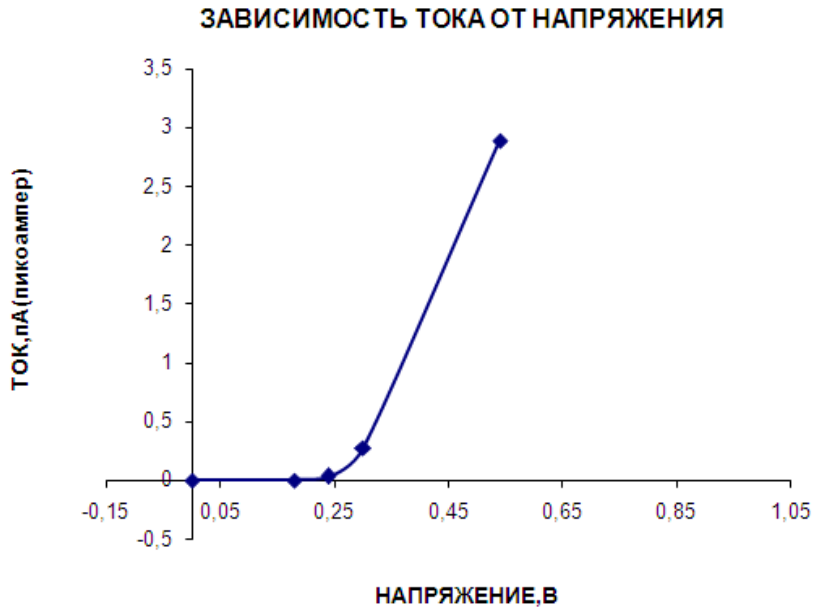
ширина запрещенной зоны с увеличением атомов нанокластера тоже увеличилась.

Так же были рассчитаны ток и проводимость, и построены зависимости тока от напряжения для двух кластеров (12 атомов и 20 атомов).

Кластер, состоящий из 12 атомов



Кластер, состоящий из 20 атомов



Сравнивая 2 характеристики, можно заметить, что с увеличением количества атомов нанокластера, ток только увеличивается. Графики примерно похожи, но ток увеличен.

Заключение

В результате анализа литературы были изучены подходы для наноскопического анализа электронной проводимости полупроводниковой структуры F3B5, а именно подход Ландауэра-Буттикера, а так же метод Хартри-Фока.

Проделав работу, были получены следующие результаты:

1. Был рассмотрен один из способов проведения наноскопического анализа проводимости и тока через наноразмерную структуру, а именно формализм Ландауэра-Буттикера для проводимости тока.

2. Были представлены результаты по моделированию и исследованию свойств кристалла GaAs с медными (Cu) контактами. Модельный эксперимент проводился с помощью квантово-химической программы Gaussian 09W, которая использовала теорию Хартри-Фока и теорию электронного пропагатора. Визуализация структур была выполнена с помощью программы GaussView.

3. Были рассчитаны и изображены зонные структуры исследуемых нанокластеров.

4. Рассчитана проводимость нанокластеров и выявлен порядок проводимости $\approx 10^{-22}$=0,001 аттоСименс (атто $Ом^{-1}$), что характерно для полупроводников.

5. Построена зависимость тока от напряжения из которых видно, что с увеличением атомов нанокластера ток растет.

6. Получен опыт работы с квантово-химическим комплексом Gaussian