

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 МАГИСТЕРСКОЙ РАБОТЫ

студента 2 курса 202 группы  
направления 11.04.04 «Электроника и нанoeлектроника»  
факультета nano- и биомедицинских технологий

Калмыкова Антона Валерьевича

Научный руководитель

ОНИ НС и БС СГУ, к.ф.-м.н.

должность, ученая степень, ученое звание

\_\_\_\_\_

подпись, дата

А.А. Клецов

инициалы, фамилия

Консультант

д.ф.-м.н., профессор

должность, ученая степень, ученое звание

\_\_\_\_\_

подпись, дата

А.И. Михайлов

инициалы, фамилия

Зав. кафедрой

д.ф.-м.н., профессор

должность, ученая степень, ученое звание

\_\_\_\_\_

подпись, дата

А.И. Михайлов

инициалы, фамилия

Саратов 2018

## **ВВЕДЕНИЕ**

### **Общая характеристика работы.**

**Актуальность темы.** 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.

**Цель и задачи магистерской работы.** Целью данной работы является исследование изменения электронной структуры (в частности ширины запрещенной зоны) в полупроводниковом нанокластере типа A3B5 с целью расчета ее 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).

**Положение, выносимое на защиту.** Теоретически изучено влияние внешнего напряжения на проводимость нано-кластеров типа A3B5. Рассмотрено изменение ширины квази-запрещенной зоны нано-кластера при увеличении числа атомов в нем.

## 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 разделе 1** 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.

**В разделе 2** описывается экспериментальная часть работы, заключающаяся в моделировании и оптимизации нанокластеров типа  $A_3B_3$ , а именно GaAs и GaAs с медными контактами по краям. Этот раздел разбит 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 Хартри-Фока, и для описания волновой функции молекулы использовался базисный набор 6-311. Визуализация производилась с помощью программы GaussView.

На рисунках 1 (а) и 1 (б) изображен кластер GaAs с медными (Cu) контактами состоящий из 12 атомов до и после оптимизации.

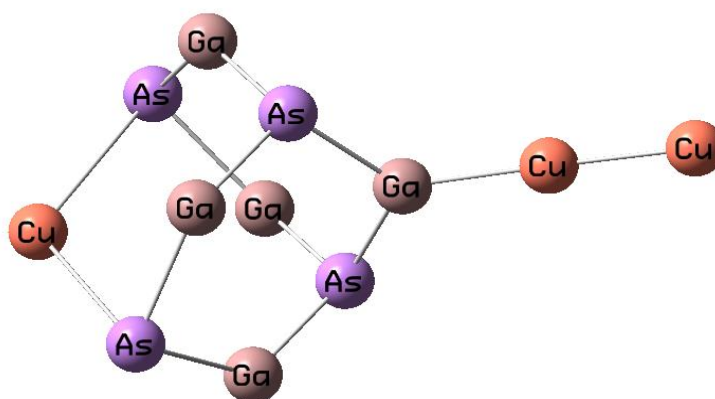


Рисунок 1 (а) – До оптимизации.

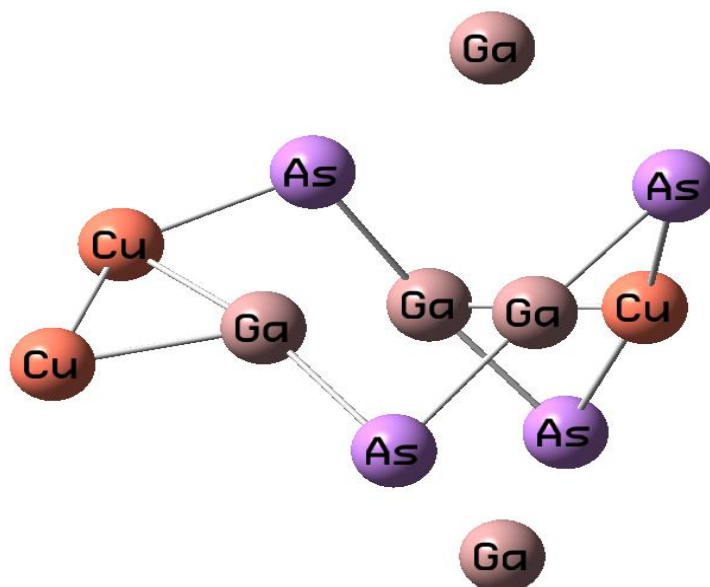


Рисунок 1 (б) – После оптимизации.

Сравнивая 2 рисунка видно, что расстояния между атомами и структура самого кластера сильно изменилась. Заметно, что 2 атома Ga

отделены от других атомов, которые связаны 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 2 (а) и 2 (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.

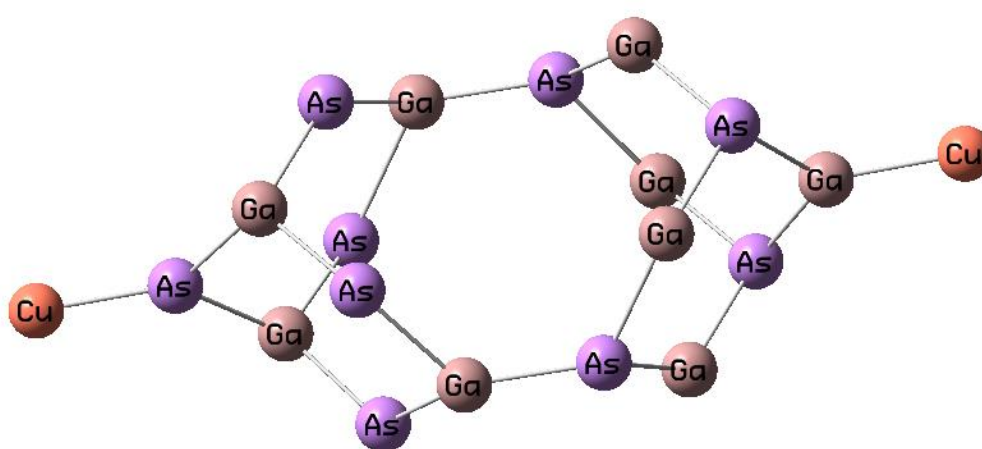


Рисунок 2 (а) – До оптимизации.

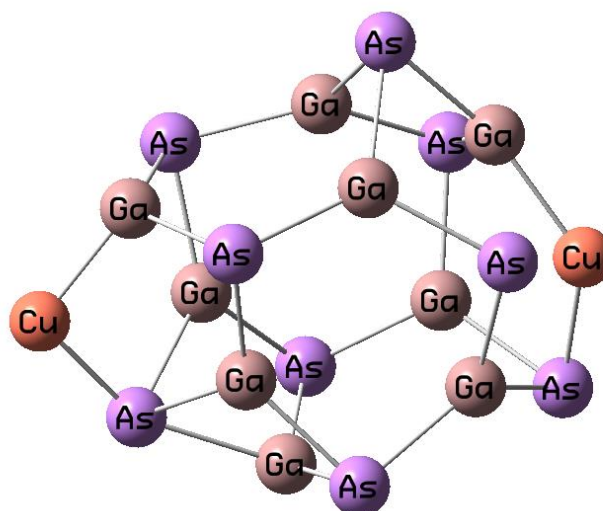


Рисунок 2 (б) – После оптимизации.

На рисунках 3(а) и 3(б) также изображен кластер GaAs с медными (Cu) контактами, состоящий из 20 атомов. Так как моделирование производилось на

рисунках 3 (а) и 3 (б) изображен кластер с зафиксированными в пространстве атомами меди (Cu), состоящий из 60 атомов.

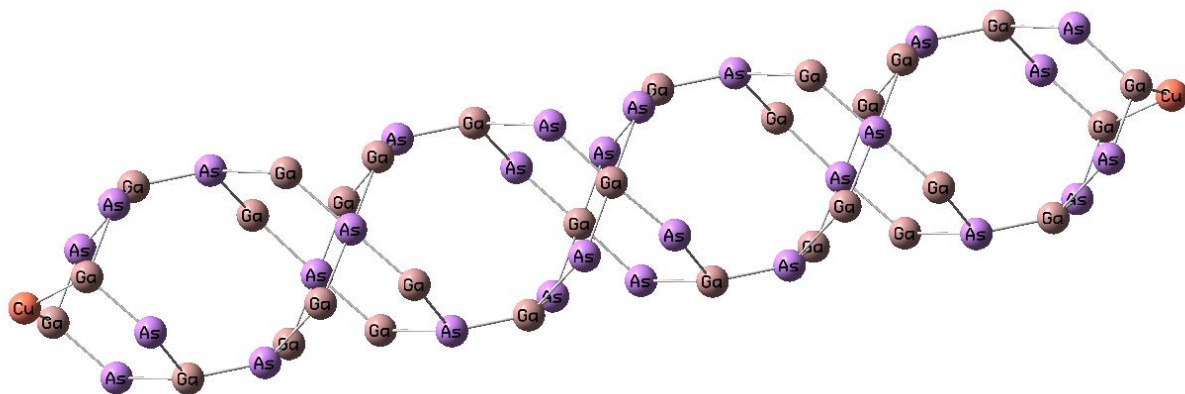


Рисунок 3 (а) – До оптимизации.

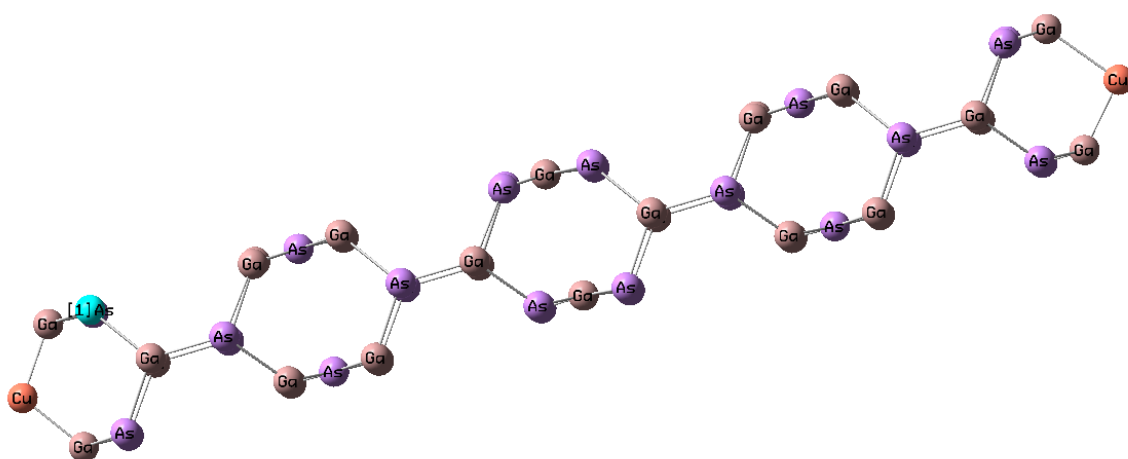


Рисунок 3 (б) – После оптимизации.

Из этих рисунков видно, что все атомы также стали ближе к центральной оси, соединяющей атомы меди (Cu). Все связи также не нарушены. Наблюдается симметричная геометрия в виде цепочки с явно оформленными шестиугольными ячейками.

На рисунках 4 (а) и 4 (б) изображен кластер с зафиксированными в пространстве атомами меди (Cu), состоящий из 91 атома.

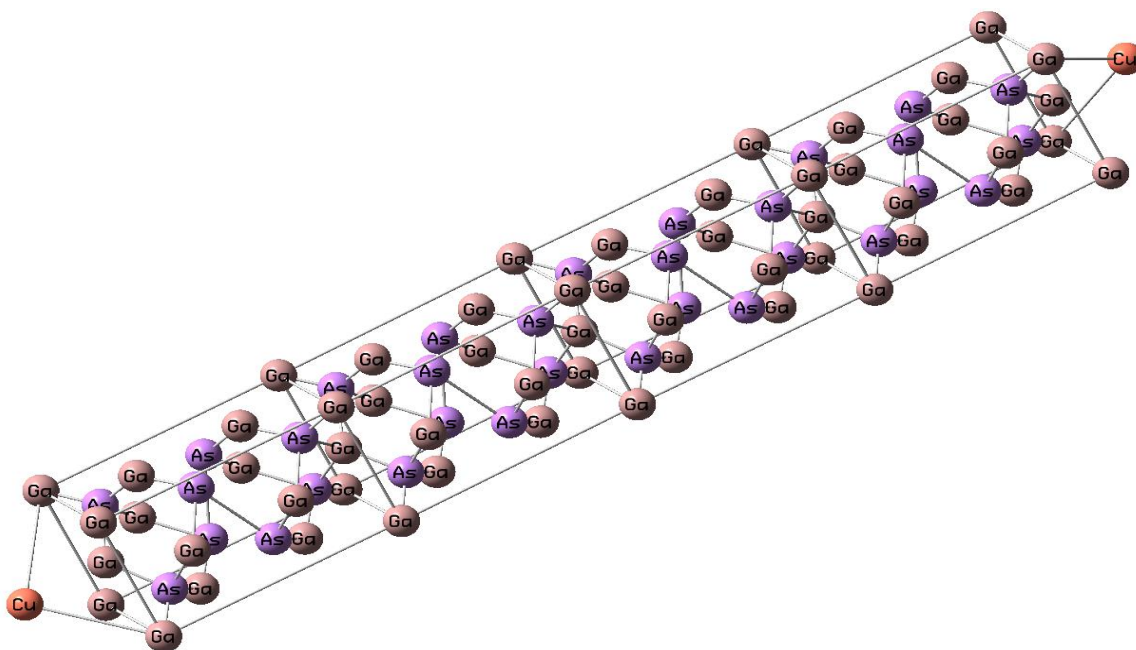


Рисунок 4 (а) – До оптимизации.

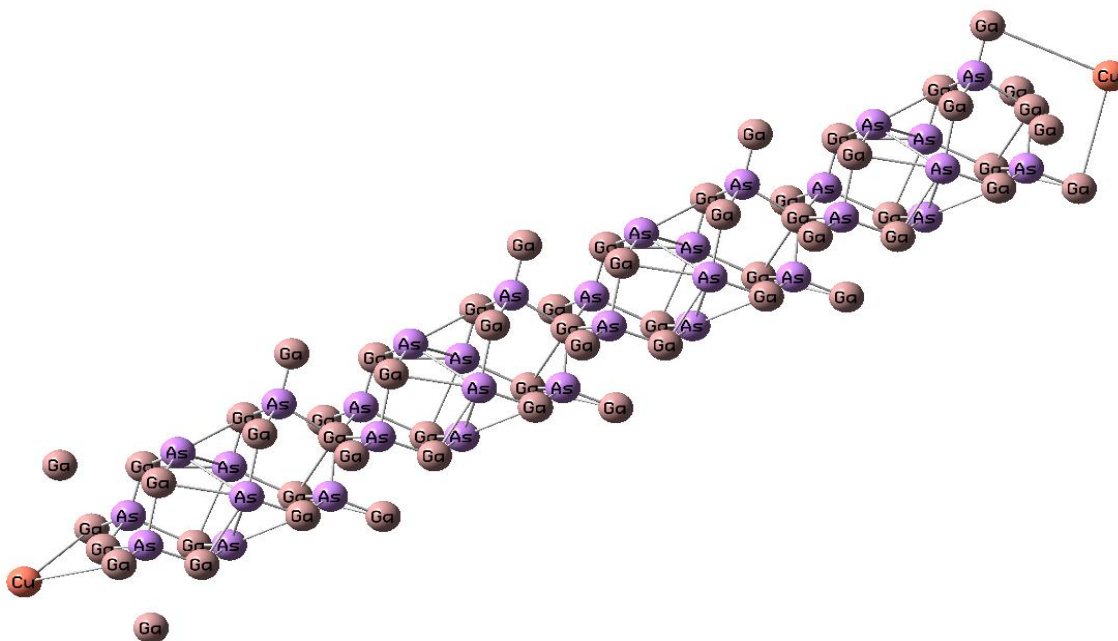


Рисунок 4 (б) – После оптимизации.

После оптимизации немного уменьшились расстояния между атомами, и были разорваны связи между атомами Ga, находящиеся по бокам кластера. Структура осталась той же.

### **Анализ полученных результатов**

На этом этапе работы была задача: построить зонную диаграмму по полученным результатам кластеров состоящих из 12, 20, 60 и 91 атома.

По полученным результатам была построена зависимость напряжения от энергии для двух кластеров. Эти графики можно считать зонной диаграммой кластера при изменении напряжения (рисунок 5 – кластер, состоящий из 12 атомов и рисунок 6 – кластер, состоящий из 20 атомов).

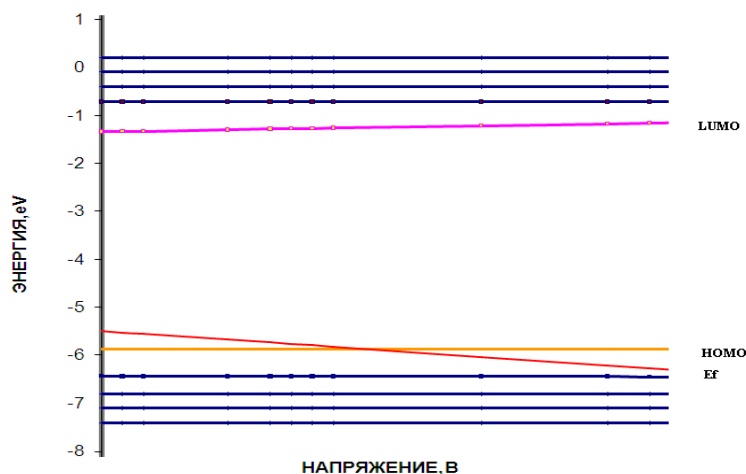


Рисунок 5 – Зонная диаграмма кластера (12 атомов).

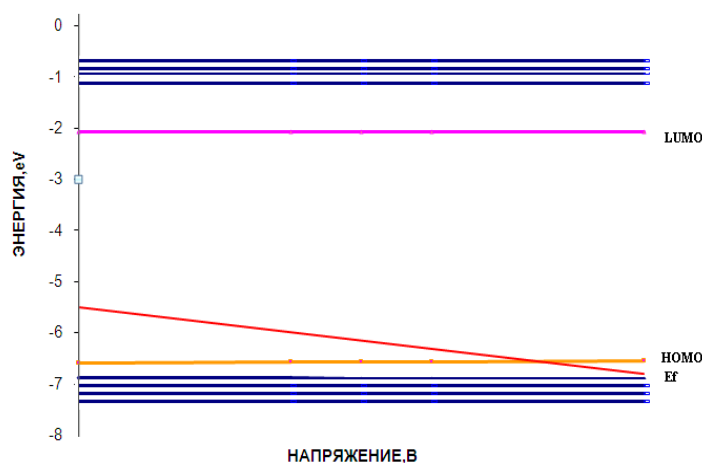


Рисунок 6 – Зонная диаграмма кластера (20 атомов).

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 изменилась.

Представлены зависимости тока от напряжения для двух кластеров (рисунок 7 – кластер, состоящий из 12 атомов и рисунок 8 – кластер, состоящий из 20 атомов).



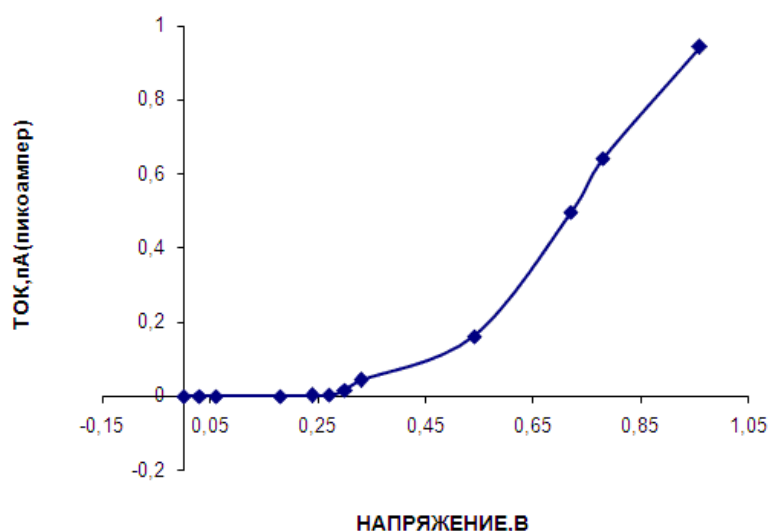


Рисунок 7 – ВАХ кластера, состоящего из 12 атомов.

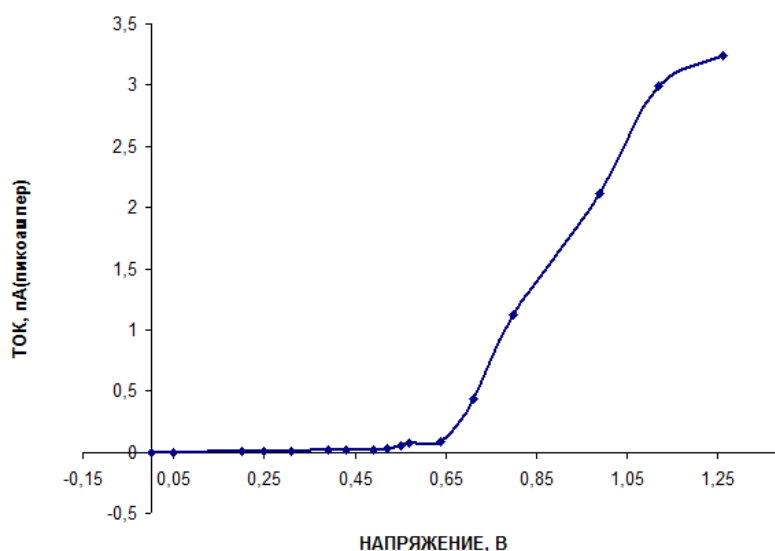


Рисунок 8 – ВАХ кластера, состоящего из 20 атомов.

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

Пока уровень Ферми не приблизится к НОМО, ток небольшой. При пересечении НОМО, ток заметно растет, поскольку получается возможность перехода электронов с НОМО на уровни меди.

По полученным результатам были построены зонные диаграммы двух кластеров (рисунок 9 – кластер, состоящий из 60 атомов и рисунок 10 – кластер, состоящий из 91 атома).

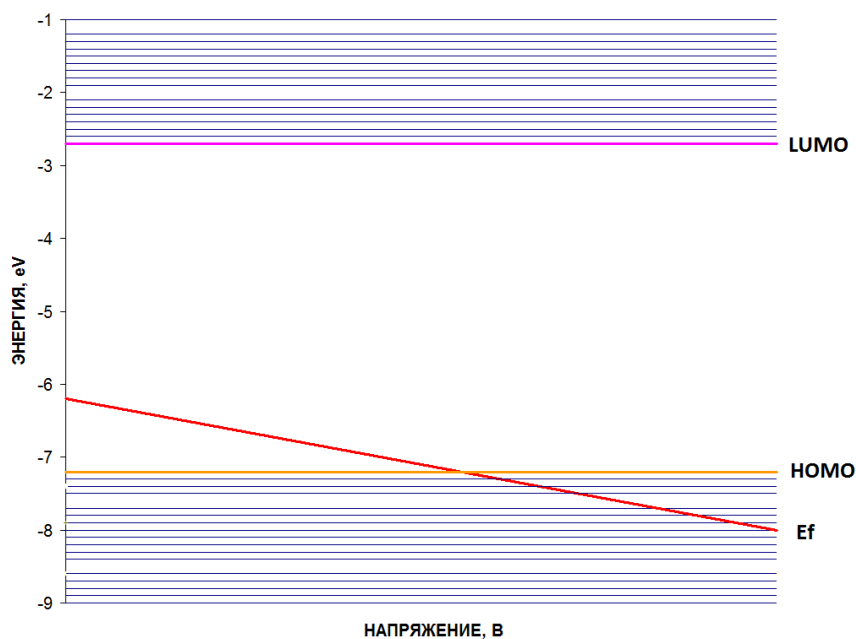


Рисунок 9 – Зонная диаграмма кластера (60 атомов).

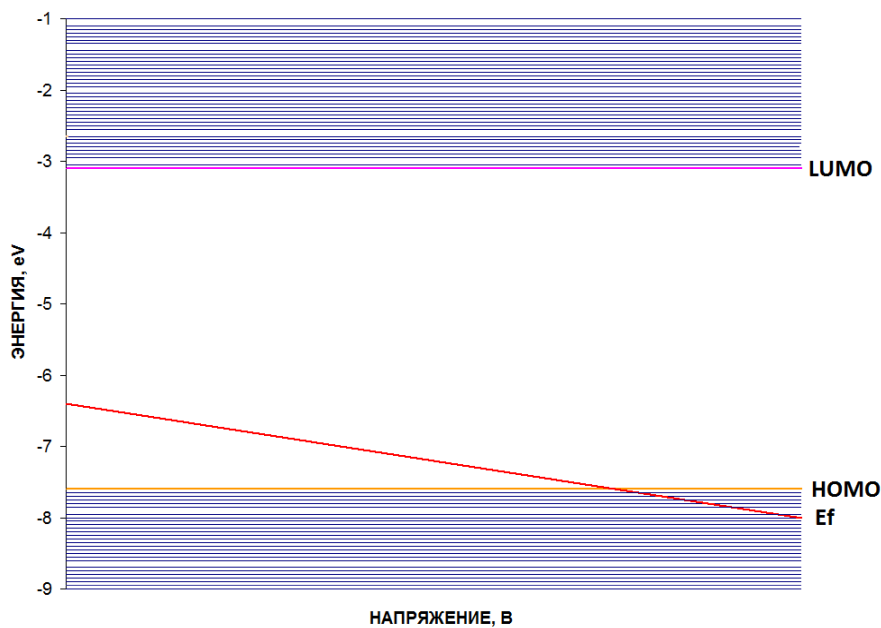


Рисунок 10 – Зонная диаграмма кластера (90 атом).

Сравнивая 2 графика также можно заметить увеличение плотностей уровней в валентной зоне и зоне проводимости с увеличением числа атомов

Представлены зависимости тока от напряжения для двух кластеров (рисунок 11 – кластер, состоящий из 60 атомов и рисунок 12 – кластер, состоящий из 91 атома).

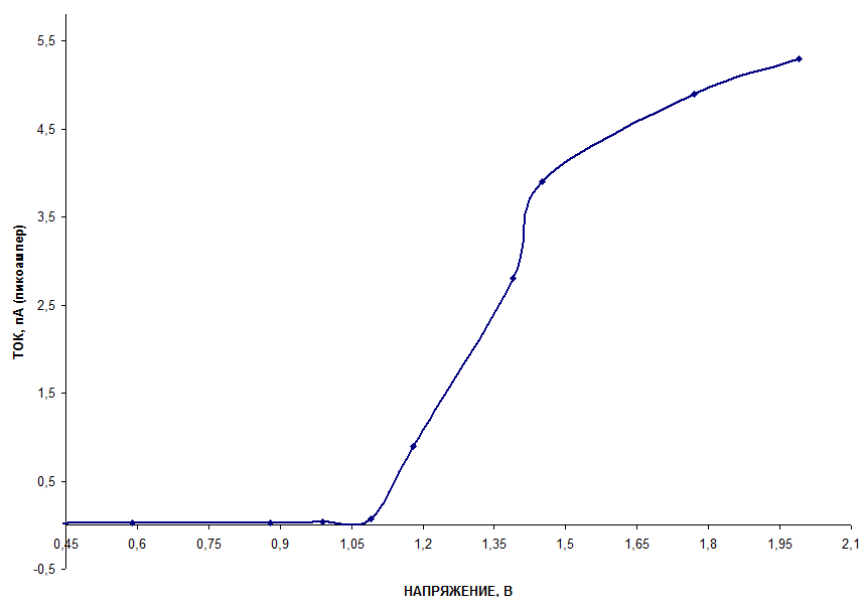


Рисунок 11 ВАХ кластера, состоящего из 60 атомов.

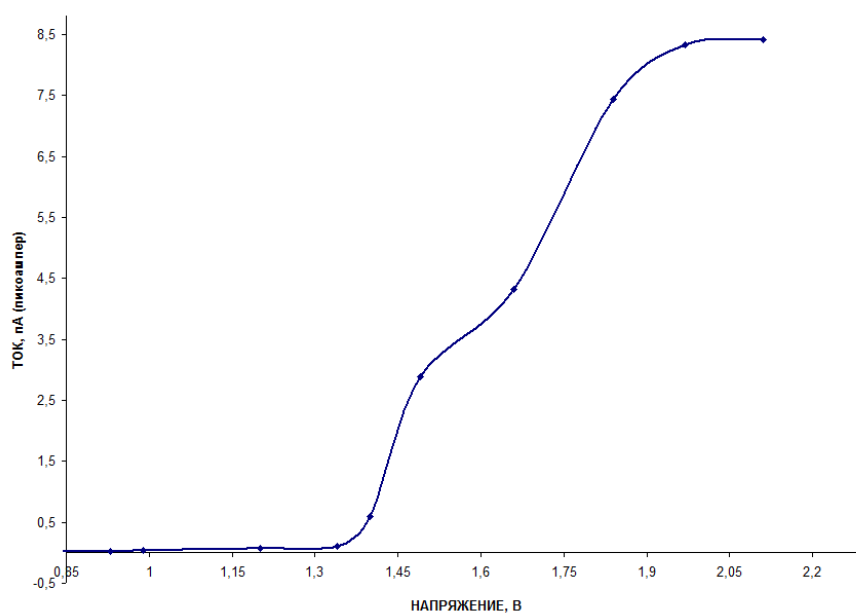


Рисунок 12 – ВАХ кластера, состоящего из 91 атома.

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

5. Получен опыт работы с квантово-химическим комплексом Gaussian.