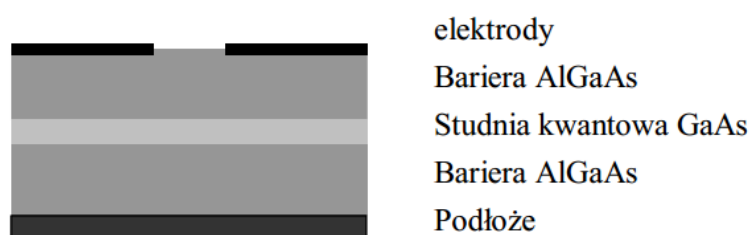


Sprawozdanie

Obliczanie rozkładu potencjału elektrostatycznego w nanostrukturze półprzewodnikowej wykorzystywanej przy budowie tzw. Elektrostatycznych kropek kwantowych.

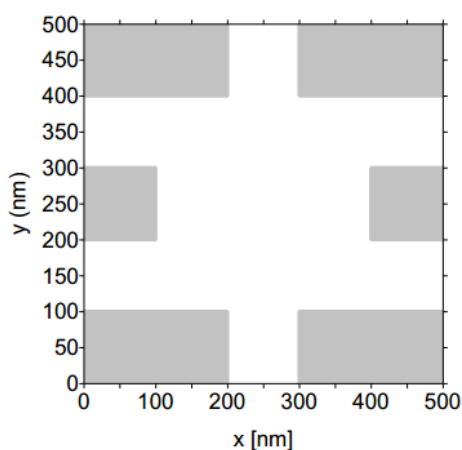
Celem ćwiczenia jest numeryczne wyznaczenie rozkładu potencjału wewnątrz nanostrukturze półprzewodnikowej z wykorzystaniem równania Laplace'a.

Rozpatrywane urządzenie zbudowane jest z planarnej heterostrukturze półprzewodnikowej z ułożonymi na jej powierzchni elektrodami. Przekrój poprzeczny urządzenia wygląda następująco :



Rys. 1 Przekrój poprzeczny rozpatrywanej nanostrukturze

Podłoże nanostrukturze stanowi silnie domieszkowana warstwa półprzewodnikowa, którą traktować można jako przewodnik. Do podłoża przyłożone jest napięcie -350 mV. Elektrody na górnej powierzchni rozłożone są w sposób następujący :



Rys. 2 Rozkład metalowych elektrod na powierzchni górnej

Do elektrod narożnych przyłożone jest napięcie równe 450 mV natomiast do obu środkowych elektrod napięcie 300 mV. Tak przyłożone napięcia tworzą studnię potencjału w centralnej części

nanourządzenia, tak aby możliwe było uwięzienie jednego lub kilku elektronów w tym obszarze. Nanostruktura ma wymiary 500 x 500 nm na płaszczyźnie oraz 160 nm wysokości.

Szukany potencjał wyznaczamy na podstawie równania Laplace'a :

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi(x, y, z) + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \phi(x, y, z) + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \phi(x, y, z) = 0$$

W celach numerycznych drugie pochodne przybliżamy za pomocą rozwinięcia w szereg Taylora. W rozwinięciu ograniczamy się do wyrazów drugiej potęgi i otrzymujemy wyrażenie na drugą pochodną :

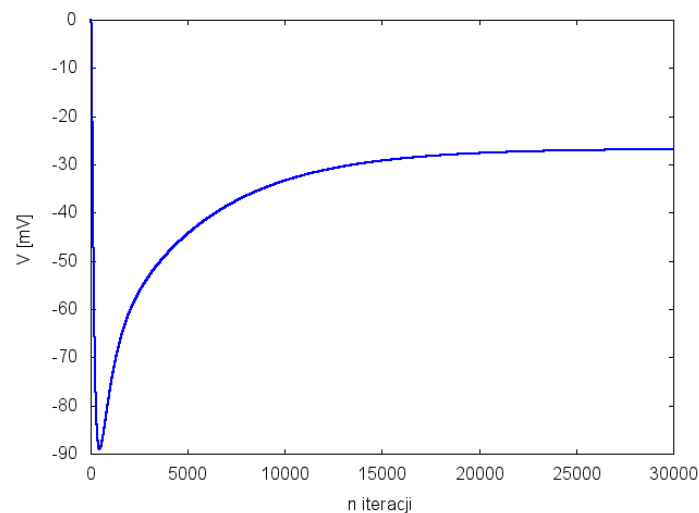
$$f''(x) = [f(x + dx) + f(x - dx) - 2f(x)]/dx^2$$

Różniczki zastępujemy skończonymi różnicami i przekształcamy równanie. Końcowe wyrażenie na potencjał jest postaci :

$$\phi^{n+1}(x, y, z) = \frac{1}{\frac{2}{(\Delta x)^2} + \frac{2}{(\Delta y)^2} + \frac{2}{(\Delta z)^2}} \left[\frac{\phi^n(x + \Delta x, y, z) + \phi^n(x - \Delta x, y, z)}{(\Delta x)^2} + \frac{\phi^n(x, y + \Delta y, z) + \phi^n(x, y - \Delta y, z)}{(\Delta y)^2} + \frac{\phi^n(x, y, z + \Delta z) + \phi^n(x, y, z - \Delta z)}{(\Delta z)^2} \right]$$

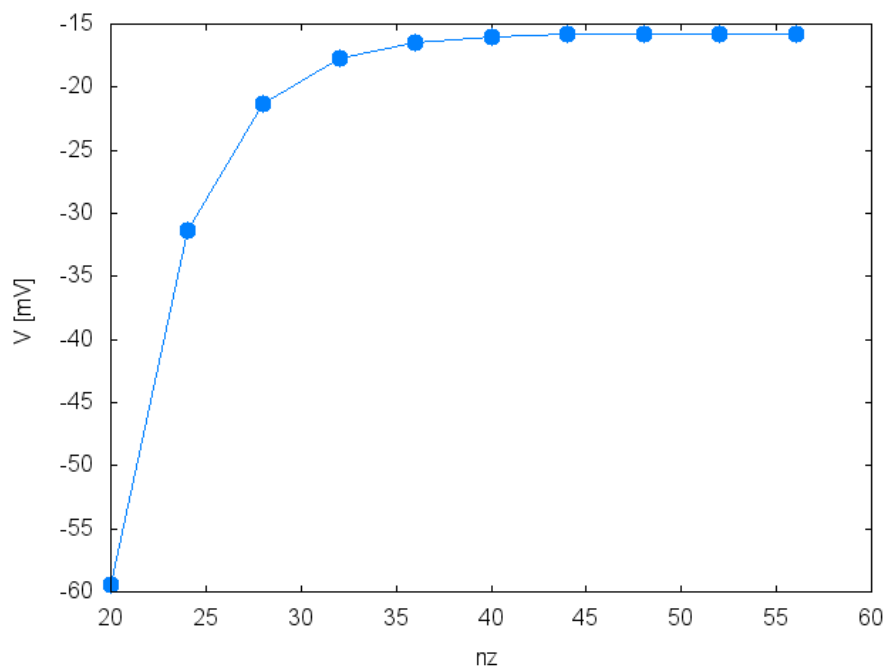
Równanie rozwiązujemy na trójwymiarowej siatce węzłów. Równanie rozwiązujemy w sposób iteracyjny gdzie n jest liczbą iteracji. Dla każdego punktu wyznaczamy wartość potencjału na podstawie starych wartości potencjału w punktach sąsiednich. Iterację powtarzamy aż potencjał w każdym punkcie przestanie się zmieniać. Obliczenia wykonujemy w pudle obliczeniowym zatem potencjału na brzegach pudła nie liczymy a wyznaczamy z warunków brzegowych. W warunkach brzegowych bierzemy pod uwagę potencjały elektrod. Pudło obliczeniowe powinno być skończone ale duże względem wymiarów urządzenia tak aby móc narzucić warunki brzegowe w nieskończoności. Na wszystkich pozostałych ścianach przyjmujemy zerowanie się pochodnej normalnej do tej powierzchni, uzyskujemy to podstawiając wartość wyliczoną na warstwie sąsiadującej ze ścianą. Aby zweryfikować trafność wymiarów pudła należy eksperymentalnie sprawdzić wpływ zmiany wymiarów pudła na potencjał w interesującej nas części nanourządzenia.

Obliczenia przeprowadziłem na siatce o krokach $\Delta x, \Delta y, \Delta z = 10 \text{ nm}$ i $n_x = 51, n_y = 51$ węzłach (uwzględniając węzeł zerowy). Odpowiednią ilość węzłów n_z wyznaczyłem doświadczalnie, za każdym razem zmieniając ilość iteracji, ponieważ minimalna ilość iteracji potrzebna do ustalenia się wyniku zależy od wielkości pudła obliczeniowego. Dla $n_z = 60$ rozwiązanie potencjału w centrum studni kwantowej w funkcji ilości iteracji wygląda następująco :



Wykres 1. Zbieżność rozwiązania w centrum studni w funkcji ilości iteracji pudła o szerokości 60 węzłów

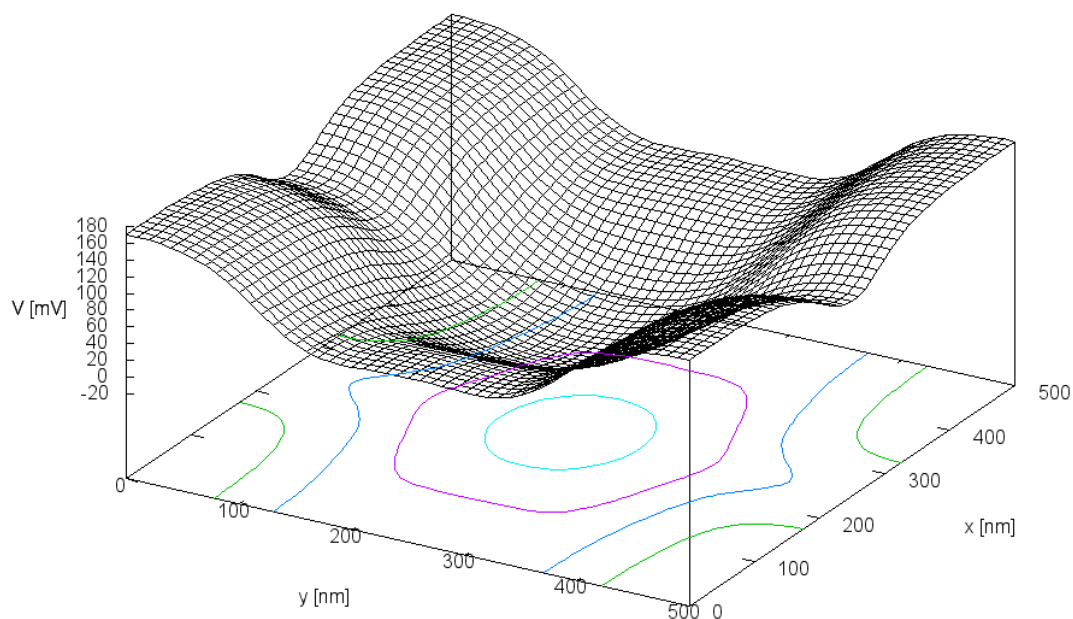
Na wykresie 1. widać, że wymagana ilość iteracji to co najmniej 25000 dla pudła o tej wielkości. Wynik potencjału w centrum obszaru studni kwantowej w zależności od wysokości pudła obliczeniowego wygląda następująco :



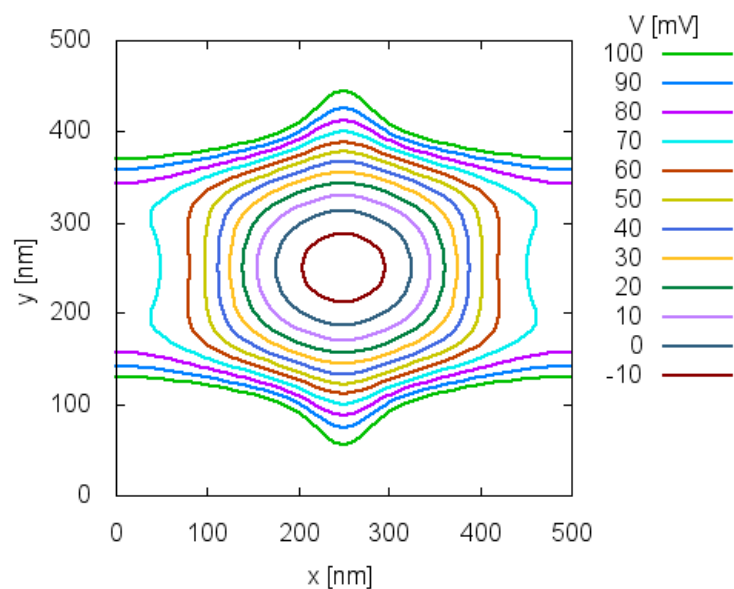
Wykres 2. Wpływ wysokości pudła obliczeniowego na rozwiązanie

Na wykresie 2. widać, że za optymalną wysokość pudła obliczeniowego można przyjąć $n_z = 40$. Od tego punktu zwiększanie wysokości pudła obliczeniowego zwiększa tylko ilość obliczeń, natomiast nie wpływa na wynik rozwiązania równania.

Wynikowy rozkład potencjału na poziomie studni kwantowej wygląda następująco :



Wykres 3. Rozkład potencjału na poziomie studni kwantowej z rzutem izolinii pod spodem



Wykres 4. Wynikowy rozkład potencjału na wykresie poziomicowym

Wynikowy rozkład potencjału jest studnią kwantową w kierunkach x,y. W centrum studni znajduje się obszar o potencjale ujemnym.