

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

Paweł Rzońca

18 stycznia 2016

Wstęp

Ćwiczenie polegało na zamodelowaniu rozkładu potencjału wewnątrz nanourządzenia stanowiącego elektrostatyczną kropkę kwantową. Zagadnienie sprowadza się do rozwiązania równania Laplace’a (1) przy odpowiednich warunkach brzegowych.

$$\nabla^2 \varphi(x, y, z) = 0. \quad (1)$$

Warunki brzegowe zadajemy jako zerowanie się pochodnej na brzegach pudła obliczeniowego. We wnętrzu rozmieszczamy płaskie elektrody (Rys. 1) na których ustalamy stały potencjał. Dodatkowo uziemiamy dolną powierzchnię.

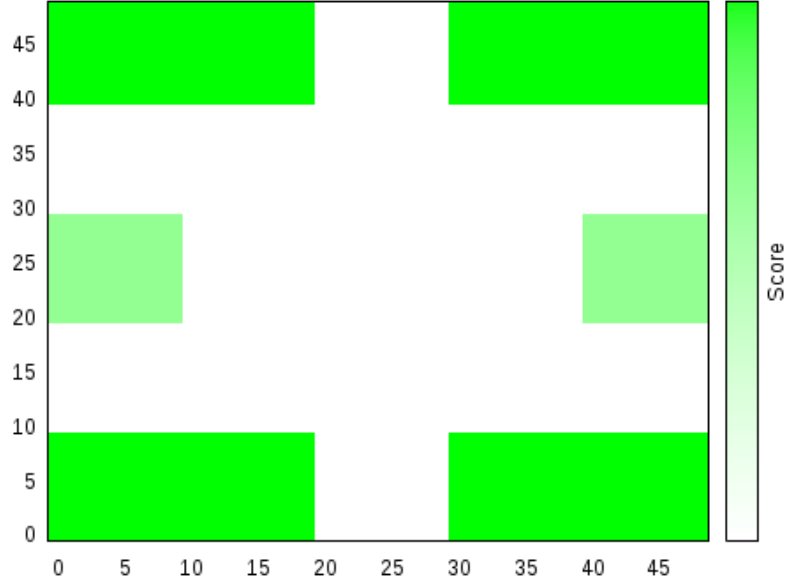
Metodyka

Równanie Laplace’a rozwiązujemy rozwiązać iteracyjnie osiągając tzw. samouzgodnienie. Wykorzystujemy wzór

$$\varphi_{n+1}(x, y, z) = \frac{1}{2/(\Delta x)^2 + 2/(\Delta y)^2 + 2/(\Delta z)^2} \left[\frac{\varphi_n(x + \Delta x, y, z) + \varphi_n(x - \Delta x, y, z)}{(\Delta x)^2} + \frac{\varphi_n(x, y + \Delta y, z) + \varphi_n(x, y - \Delta y, z)}{(\Delta y)^2} + \frac{\varphi_n(x, y, z + \Delta z) + \varphi_n(x, y, z - \Delta z)}{(\Delta z)^2} \right]. \quad (2)$$

Na powierzchni podłoża ustalamy wartość potencjału, przyjmujemy potencjał ujemny $V_0 = -350$ mV. Na czterech elektrodach narożnych przyjmujemy $V_1 = V_2 = V_5 = V_6 = 450$ mV, a na obu środkowych $V_3 = V_4 = 300$ mV. Na wszystkich pozostałych ścianach prostopadłościanu przyjmujemy zerowanie się pochodnej normalnej do powierzchni, tj. wartości na brzegach przyrównujemy do wartości tuż przed brzegiem. Warunki te są słuszne dla odpowiednio dużej odległości od elektrod (w idealnym przypadku nieskończonej). Z tego powodu sprawdzamy dla jakich nz (wysokości pudła) wysokość potencjału wewnątrz studni nie zmienia się przy dalszym zwiększaniu. Warto mieć tu na uwadze, że zwiększając zbyt szybko rozmiar wydłużamy czas obliczeń. Dla pozostałych brzegów zakładamy, że warunek jest spełniony. Założenie to jest słuszne, gdy rozważamy matrycę takich układów i modelujemy jeden z nich.

Iterację wykonujemy w dwóch pętlach. Wewnętrznej od 1 do 100, w której nic nie zapisujemy oraz zewnętrznej, w której zapisujemy wynik. Pozwala to zmniejszyć czas wykonania obliczeń. Ilość iteracji pętli zewnętrznej dobieramy tak, aby przy jej zwiększaniu nie zmieniał się wynik końcowy.



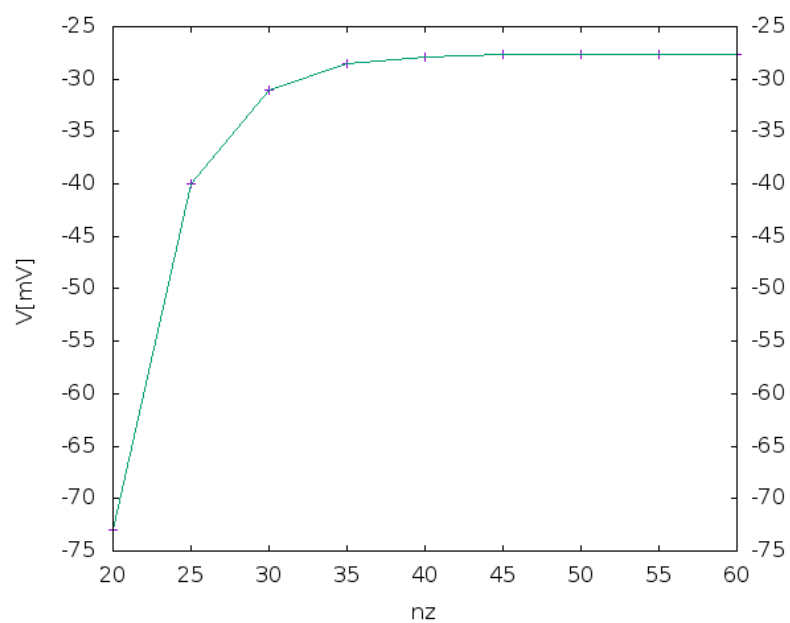
Rysunek 1: Rozkład potencjału na elektrodach na wysokości $nz_2 = 15$ pudła obliczeniowego.

Wyniki

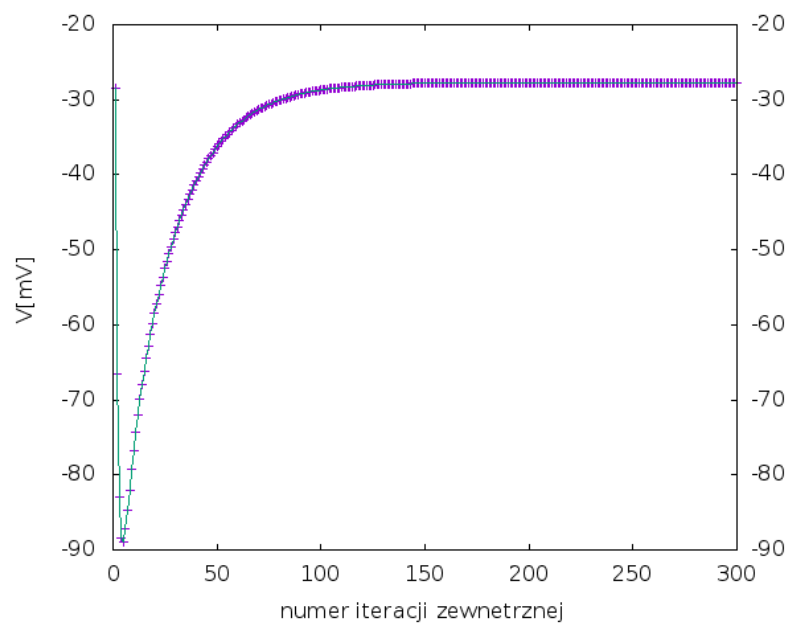
Kroki siatki przyjmujemy $dx = dy = dz = 10$ nm. Rozmiary pudła przyjmujemy $nx = ny = 50$. Położenie elektrod przedstawiono na rysunku 1 (wysokość $nz_1 = 15$). Nasza studnia kwantowa znajduje się na wysokości nz_2 . Obliczenia potencjału w środku studni wykonujemy dla kilku wartości nz aby ustalić optymalną wysokość pudła. Wyniki przedstawiamy na wykresie 2. Widzimy, że wartość potencjału nie zależy od rozmiarów pudła z dobrą dokładnością dla $nz = 45$. Taką właśnie wartość przyjmujemy w dalszych obliczeniach. Sprawdzamy następnie dla ilu iteracji zewnętrznych potencjał się stabilizuje (wykres 3). Widać, że dla 150 wartość się już praktycznie nie zmienia. Dla takiej wartości kroku sporządzamy wykresy potencjału wewnątrz studni (wykresy 5 i 4).

Podsumowanie

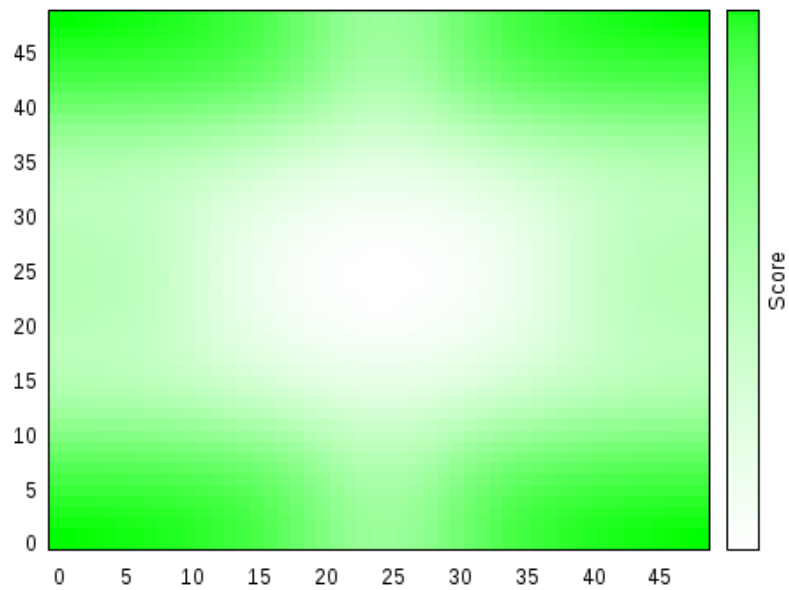
Przyjęte warunki brzegowe sprawiają, iż modelujemy pojedyncze urządzenie umieszczone w matrycy. Widzimy, że w zadanych warunkach (modelu urządzenia) powstaje studnia niskiego potencjału. Przy zadanych warunkach otrzymano studnię o głębokości rzędu 100 mV. To duża wartość biorąc pod uwagę, że elektrody naładowane były potencjałem poniżej 1V (względem podłoża).



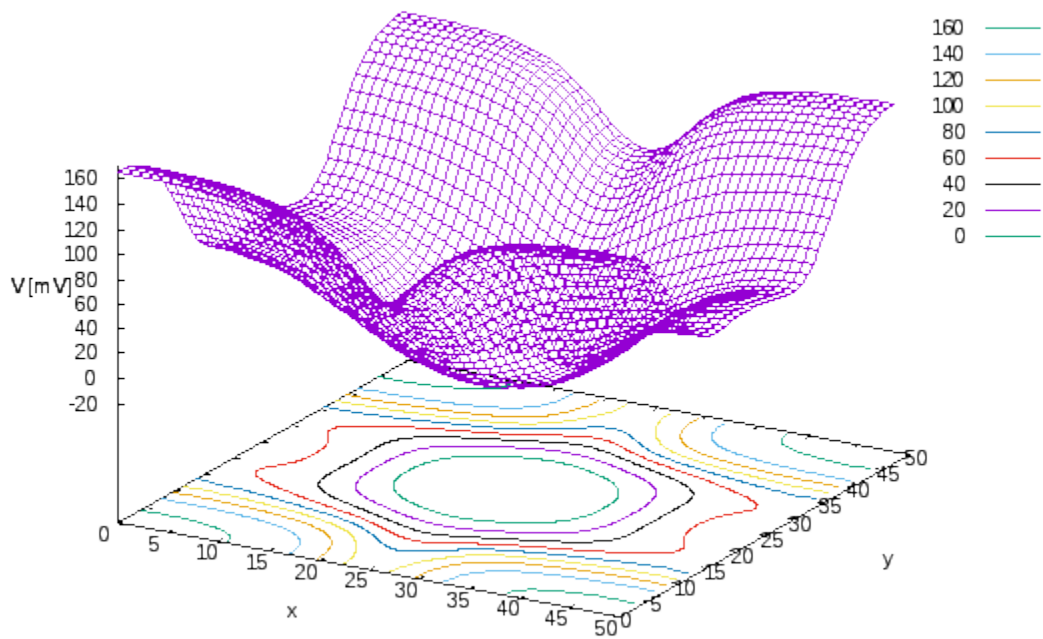
Rysunek 2: Potencjał w centrum studni kwantowej w funkcji wysokości pudła obliczeniowego.



Rysunek 3: Potencjał w centrum studni kwantowej a więc dla $n_x/2$, $n_y/2$, $n_{z1} = 10$ w funkcji iteracji zewnętrznej.



Rysunek 4: Rozkład potencjału w studni kwantowej wewnątrz nanourządzenia (wysokość nz_1).



Rysunek 5: Rozkład potencjału w studni kwantowej wewnątrz nanourządzenia na wykresie trójwymiarowym (wysokość nz_1).