

Министерство высшего образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования
«Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

Выпускная квалификационная работа бакалавра / магистра

Название работы

Направление 11.04.04 «Электроника и нанoeлектроника»

Образовательная программа «Название образовательной программы»

Выпускник: Яшин Артемий Валерьевич

Подпись: _____

Научный руководитель:

к.ф.-м.н., доцент кафедры физики конденсированных сред
ИНТЭЛ НИЯУ МИФИ, Фамилия И.О.

Подпись: _____

И.о. заместителя заведующего кафедрой:

д.ф.-м.н., профессор кафедры физики конденсированных сред
ИНТЭЛ НИЯУ МИФИ, Никитенко В.Р.

Подпись: _____

Москва

2025 г.

Содержание

Введение	2
Цель и задачи	4
Глава 1. Обзор литературы	5
1.1. Раздел 1	5
Глава 2. Теория и основные уравнения	7
2.1. Раздел 1	7
2.2. Раздел 2	8
Глава 3. Численные методы и алгоритмы	9
3.1. Раздел 1	9
3.2. Раздел 2	9
Глава 4. Программная реализация	10
Глава 5. Результаты и обсуждение	12
Выводы	13
Заключение	13

Введение

Современные технологии нанoeлектроники и квантовых устройств требуют управления морфологией наноструктур, таких как квантовые кольца, которые обладают уникальными оптическими и электронными свойствами. Капельная эпитаксия, как один из методов молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ), позволяет формировать сложные наноструктуры за счет контролируемого осаждения элементов III–V групп на полупроводниковые подложки. Этот процесс включает образование металлических капель (например, Ga или In) с последующей их кристаллизацией под воздействием потока мышьяка, что приводит к созданию квантовых точек, колец или других морфологий [1].

Несмотря на достижения в области капельной эпитаксии, остаются нерешённые вопросы, связанные с детальным пониманием механизмов формирования квантовых колец и влияния условий роста на их морфологию. В частности, необходимо исследовать, как параметры процесса, такие как температура и потоки вещества, влияют на форму и размер наноструктур. Например, исследования показали, что селективно-позиционированные наноструктуры In/GaAs(001) могут быть получены методом капельной эпитаксии на структурированных поверхностях, причём параметры роста существенно влияют на селективность и локализацию капель [2].

В данной работе рассматривается моделирование процесса капельной эпитаксии квантовых колец и исследование влияния условий роста на их форму. Для этого используются методы компьютерного моделирования, позволяющие воспроизвести процессы диффузии и кристаллизации на атомарном уровне. Подобный подход позволяет предсказать оптимальные параметры роста для получения наноструктур с заданными характеристиками и способствует более глубокому пониманию физических процессов, происходящих при капельной эпитаксии.

Квантовые кольца, полученные методом капельной эпитаксии, обладают уникальными электронными и оптическими свойствами, что делает их перспективными для использования в различных оптоэлектронных устройствах. Оптимизация технологий их создания может привести к значительному улучшению характеристик таких приборов [3].

Фотосенсоры и детекторы. Благодаря способности квантовых колец поглощать и излучать свет в широком спектральном диапазоне, они могут быть использованы для разработки высокочувствительных фотодетекторов и сенсоров [4].

Лазеры и оптические антенны. Квантовые кольца представляют перспективную платформу для создания полупроводниковых лазеров нового поколения и нанофотонных устройств. Их уникальные оптические свойства, такие как возможность управления плотностью состояний и поляризационными характеристиками, позволяют улучшить пороговые параметры и эффективность лазерных систем. В частности, инновационные разработки в области оптических антенн на основе многослойных квантовых колец демонстрируют потенциал для генерации структурированного света с орбитальным угловым моментом (ОАМ). Например, была предложена гибридная структура из концентрических квантовых колец InGaAs/GaAs, способная формировать оптические вихри в ближнем инфракрасном диапазоне [5].

Квантовые вычисления и криптография. Благодаря дискретным энергетическим уровням и возможности контроля спиновых состояний, квантовые кольца перспективны для применения в квантовых вычислениях и криптографических системах [6].

Таким образом, результаты исследований в области моделирования процесса капельной эпитаксии квантовых колец и оптимизации условий их роста могут значительно повысить эффективность и функциональность различных

оптоэлектронных устройств, способствуя развитию современных технологий передачи и обработки информации.

Цель и задачи

Цель: Основная цель дипломной работы — разработка модели капельной эпитаксии квантовых колец и анализ влияния параметров роста на их морфологию, а также написание программы для визуализации и проверки этой модели. В рамках исследования были поставлены следующие задачи.

Задачи

1. Изучить механизмы формирования колец в зависимости от температуры и интенсивности потока мышьяка и описать физическую модель данного процесса.
2. Написать программу для получившейся физической модели.
3. Сравнить результаты работы программы с реально выращенными квантовыми кольцами.

Достаточно задач. Обзор литературы наверное в задачи включать не будем. Лучше написать конкретно, что мы делаем (разработка алгоритма, программная реализация, расчёт конкретных параметров при определённых условиях и т.д.)

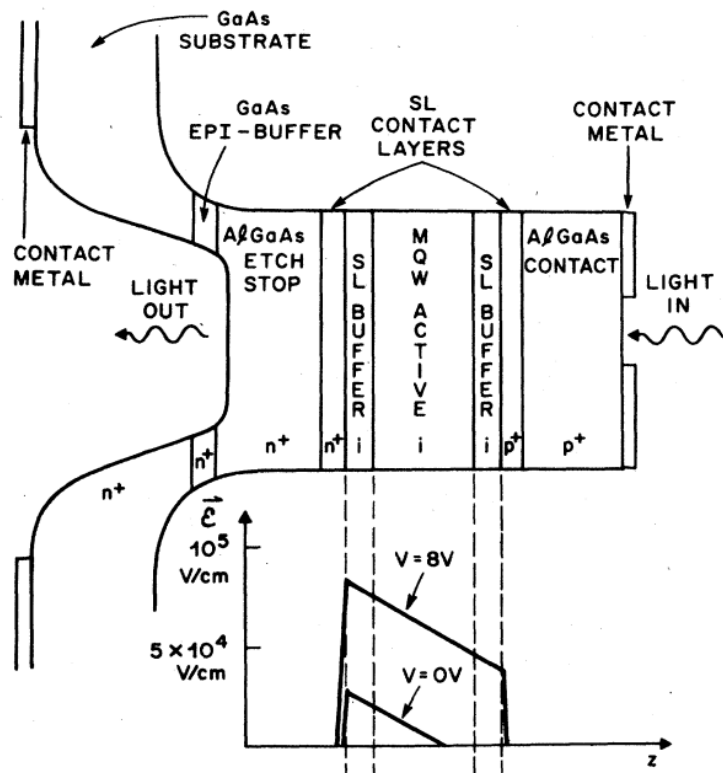


Рис. 1.1: Схема измерений спектров поглощения в поперечном поле из работы [9].

Глава 1. Обзор литературы

1.1 Раздел 1

В обзоре не нужно рассказывать теорию и методы, нужно просто провести обобщение и анализ исследований, которые были проведены до вас по данной теме.

Если вы будете пользоваться какими-то терминами и понятиями, которые требуют разъяснения, их нужно объяснить в следующих двух главах, а отсюда можно сослаться на эти определения.

Ссылка на книгу: [7]. Ссылка на книгу на русском: [8].

Если рисунок взят из какой-то статьи, книги или из интернета (из интернета нежелательно), то нужно обязательно в подписи сделать ссылку на соответствующий пункт в списке литературы.

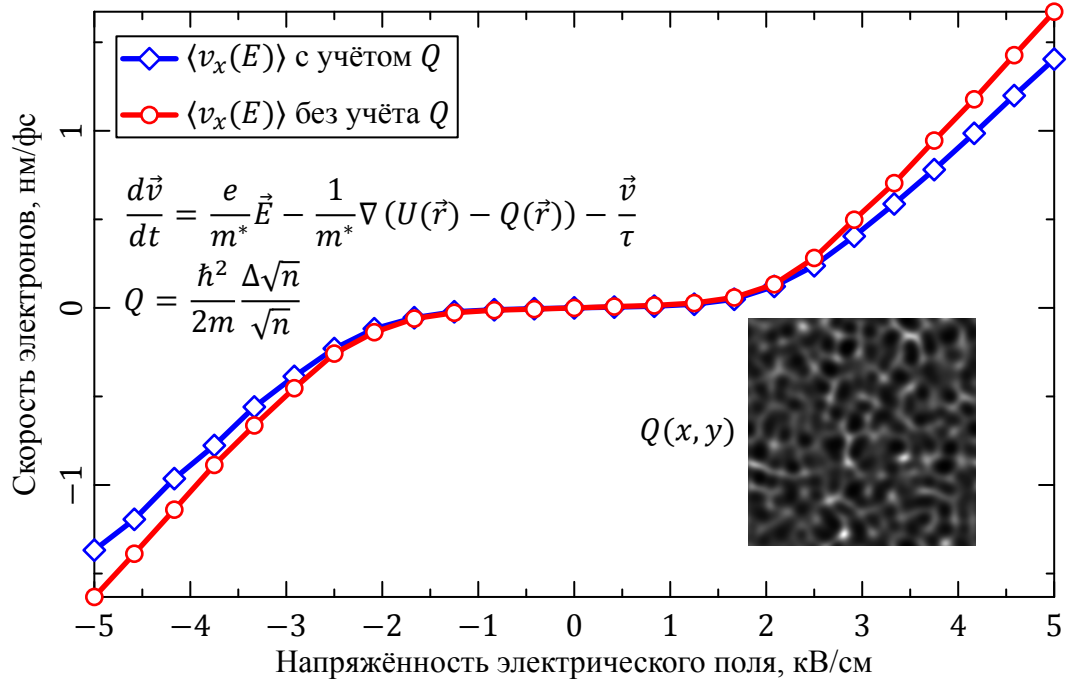


Рис. 1.2: Результаты моделирования траекторий электронов с помощью квантовых гидродинамических уравнений.

Ссылаемся на рисунок 1.1.

Рисунки в формате pdf:

Ссылки на статьи: [9], [10], [11].

Ссылка на российскую статью: [12].

Ссылка на диссертацию: [13]

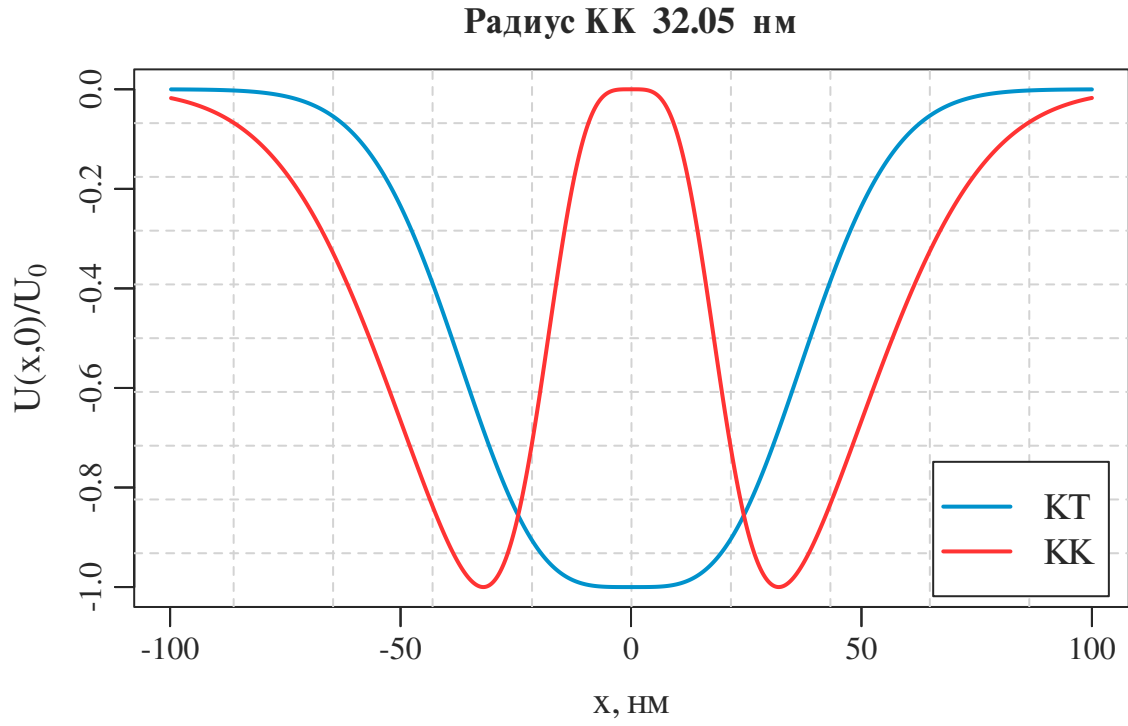


Рис. 1.3: Потенциалы для моделирования КТ и КК.

Глава 2. Теория и основные уравнения

2.1 Раздел 1

Ненумерованная формула:

$$\begin{pmatrix} \dot{\varphi} \\ \dot{\theta} \\ \dot{\psi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\theta) \cos(\psi) & -\sin(\psi) & 0 \\ \cos(\theta) \sin(\psi) & \cos(\psi) & 0 \\ -\sin(\theta) & 0 & 1 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \omega_x \\ \omega_y \\ \omega_z \end{pmatrix}.$$

$$E_y(z \geq L) = A_{12} e^{i\beta z} \cdot \begin{cases} e^{sw} \cos(kw) e^{s(x-a)}, & x < a - w \\ \cos(k(x-a)), & a - w \leq x \leq a + w \\ e^{sw} \cos(kw) e^{-s(x-a)}, & x > a + w \end{cases} \quad (2.1)$$

2.2 Раздел 2

Нумерованные формулы:

$$\dot{\theta} = \frac{P - p_1 \cos(\varphi_1 - \theta) - p_2 \cos(\varphi_2 - \theta)}{\mu + \sin^2(\varphi_1 - \theta) + \sin^2(\varphi_2 - \theta)} \quad (2.2)$$

$$\dot{\varphi}_1 = p_1 - \dot{\theta} \cos(\phi_1 - \theta) \quad (2.3)$$

$$\dot{\varphi}_2 = p_2 - \dot{\theta} \cos(\phi_2 - \theta) \quad (2.4)$$

Тест ссылки на формулу (2.2).

Глава 3. Численные методы и алгоритмы

3.1 Раздел 1

3.2 Раздел 2

Глава 4. Программная реализация

Листинг 1: Программная реализация метода Рунге-Кутты

```
// From the pendulum program
fn runge_kutta(
    vars: &MyVec,
    pars: &Vec<f64>,
    rhs: &dyn Fn(&MyVec, &Vec<f64>) -> MyVec,
    dt: f64,
) -> MyVec {
    let rk_1 = rhs(vars, pars);
    let rk_2 = rhs(&vars.add(&rk_1.scale(dt / 2.0)), pars);
    let rk_3 = rhs(&vars.add(&rk_2.scale(dt / 2.0)), pars);
    let rk_4 = rhs(&vars.add(&rk_3.scale(dt)), pars);

    let vars_new = vars
        .add(&rk_1.scale(dt / 6.0))
        .add(&rk_2.scale(dt / 3.0))
        .add(&rk_3.scale(dt / 3.0))
        .add(&rk_4.scale(dt / 6.0));
    vars_new
}
```

Листинг 2: Подпрограмма случайного блуждания на плоскости

```
std::random_device rd;
std::mt19937 mt(rd());
std::uniform_int_distribution<long> dist(1, 4);
std::vector<long> xn(n0, 0);
std::vector<long> yn(n0, 0);
for (long jt = 0; jt < M; jt++)
{
```

```
for (long jn = 0; jn < n0; jn++)
{
    switch (dist(mt))
    {
        case 1:
            xn[jn] ++;
            break;
        case 2:
            xn[jn] --;
            break;
        case 3:
            yn[jn] ++;
            break;
        case 4:
            yn[jn] --;
            break;
    }
}
```

Глава 5. Результаты и обсуждение

Таблицы в \LaTeX делать очень неудобно. Лучше воспользоваться сторонним редактором таблиц, которые умеет их экспортировать в \LaTeX , сделать там всю структуру, а потом вставить готовый код, и в нём уже добавлять содержимое ячеек.

Тем не менее, простые таблицы делать можно, наподобие 5.1. Но лучше таблицами вообще не злоупотреблять, а где можно заменять их графиками и диаграммами.

Таблица 5.1: Условия роста образцов с квантовыми кольцами

№	X_{In} , %	T_1 , °C	T_2 , °C	P_{As_4} , 10^{-5} Торр	Тип КК	Диаметры, нм	
A1	0	220	220	1,3	Одиночное	51	
A2	0	280	280	0,55	Двойное	120	42
B1	5	250	250	5,0	Одиночное	75	
B2	10	250	250	5,0	Одиночное	76	
B3	20	250	250	5,0	Одиночное	78	
B4	20	200	200	5,0	Одиночное	63	
B1	0	325	325	0,2	Одиночное	22	
B2	0	325	220	0,2	Двойное	79	31
B3	0	325	325	1,0	Двойное	69	27

Ссылаемся на Листинг 1 здесь.

Выводы

Структура файлов, которые можно редактировать:

- `diploma.tex` — содержит основной текст;
- `titlepage.tex` — содержит титульный лист;
- `literature.bib` — содержит источники для списка литературы;
- `code_highlight.tex` — форматирование листингов (фрагментов кода).

Файл `style.tex` очень важный, его трогать и особенно удалять не надо, там задаются различные стили документа. Редактировать в случае, если знаете, что делать.

Заключение

Нужны ли отдельно и выводы, и заключение — я не знаю. Разберёмся.

Список литературы ниже оформлен не совсем по ГОСТу, но это легко исправить. Главное, что он организован, и можно ссылаться на каждый пункт по фамилии первого автора.

Внимание!

Список литературы находится в отдельном файле `literature.bib`, в который можно добавлять новые источники в любом порядке. Они будут сами располагаться как нужно, в порядке упоминания в тексте.

Если какой-то источник не процитирован в тексте, он в список литературы добавлен не будет.

Поэтому один и тот же файл с источниками можно использовать для нескольких документов.

Список литературы

- [1] С. В. Балакирев и др. «Многостадийная капельная эпитаксия для формирования квантовых точек InAs/GaAs со сверхнизкой плотностью». *Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки* (2022) (цит. на с. 2).
- [2] С. В. Балакирев и др. «Капельная эпитаксия селективно-позиционированных наноструктур In/GaAs(001) с переменным дистанцированием: эксперимент и моделирование». *Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки* (2023) (цит. на с. 2).
- [3] Massimo Gurioli и др. «Droplet epitaxy of semiconductor nanostructures for quantum photonic devices». *Nature Materials* (2019), с. 799—810 (цит. на с. 3).
- [4] Vladimir P. Ponomarenko и др. «Photosensors based on colloidal quantum dots». *Russian Chemical Reviews* том 93, номер 4, (2024) (цит. на с. 3).
- [5] Ya Huang и др. «Orbital Angular Momentum Multiplexing via Concentric Quantum Ring Antennas.» *Advanced Optical Materials* том 10, номер 5, (2022) (цит. на с. 3).
- [6] Adam Alfieri и др. «Nanomaterials for Quantum Information Science and Engineering.» *Advance Materials* том 35, номер 27, (2023) (цит. на с. 3).
- [7] S. Datta. *Quantum Transport: Atom to Transistor*. Cambridge: Cambridge University Press, 2005, с. 404 (цит. на с. 5).
- [8] И.М. Федоткин. *Математическое моделирование технологических процессов: Учебное пособие*. Москва: Книжный дом «Либроком», 2015, с. 416 (цит. на с. 5).

- [9] D. Miller, J. Weiner и D. Chemla. «Electric-field dependence of linear optical properties in quantum well structures: Waveguide electroabsorption and sum rules». *IEEE Journal of Quantum Electronics* том 2, номер 9, (1986), с. 1816—1830 (цит. на с. 5, 6).
- [10] D.A.B. Miller, D. S. Chemla и Т. С. Damen. «Band-Edge Electroabsorption in Quantum Well Structures: The Quantum-Confined Stark Effect». *Physical Review Letters* том 53 (1984), с. 2173 (цит. на с. 6).
- [11] Н. Mohseni и др. «Enhanced Electro-Optic Effect in GaInAsP-InP Three-Step Quantum Wells». *Applied Physics Letters* том 84, номер 11, (2004), с. 1823—25 (цит. на с. 6).
- [12] А. Л. Скубачевский. «Уравнения Власова–Пуассона для двухкомпонентной плазмы в однородном магнитном поле». *Успехи математических наук* том 69, номер 2, (2014), с. 107—148 (цит. на с. 6).
- [13] И.А. Павличенко. «Поверхностные и объемные плазмоны, возбуждаемые в наноразмерных структурах лазерными импульсами и потоками заряженных частиц». Диссертация. Нижний Новгород: НГУ им. Лобачевского, 2015 (цит. на с. 6).