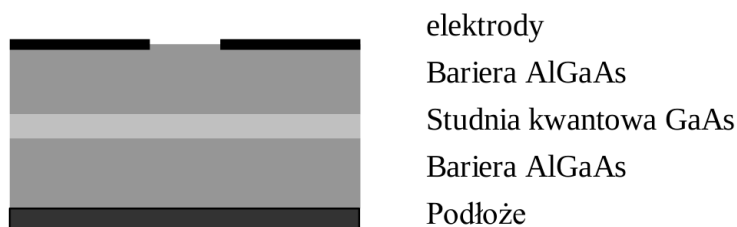


Wydział: WFiIS	Imię i nazwisko: 1. Bartłomiej Rzeszotarski	Rok: III (2014/2015)	Grupa: 1 LAB	Zespół: —	
PODSTAWY FIZYKI TEORETYCZNEJ	Temat: Obliczanie rozkładu potencjału elektrostatycznego w nanostrukturze półprzewodnikowej wykorzystywanej przy budowie tzw. elektrostatycznych kropek kwantowych			Nr ćwic. 4	
Data wykonania: 20.01.2015	Data oddania: 2x.01.2015	Zwrot do popr.	Data oddania	Data zalicz.	OCENA

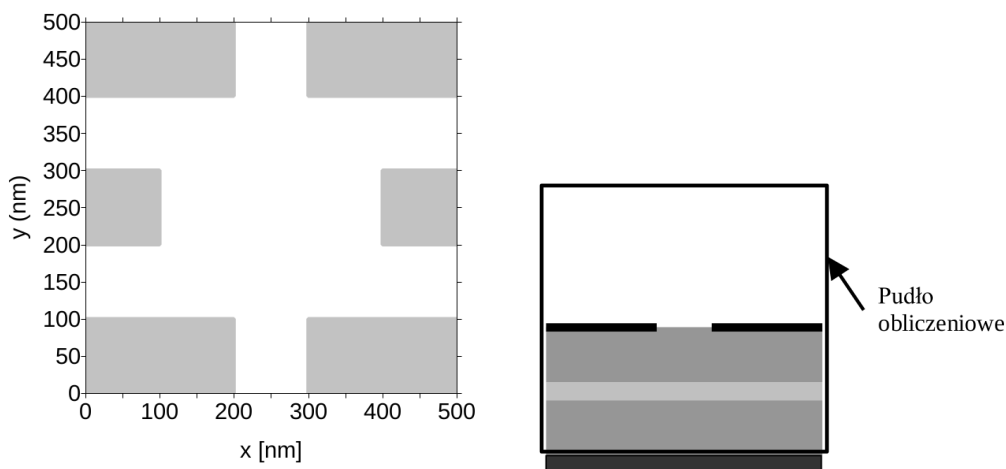
1 Wstęp

Celem ćwiczenia była próba znalezienia rozkładu potencjału wewnątrz nanourządzenia stanowiącego elektrostatyczną kropkę kwantową zbudowanego z planarnej heterostruktury półprzewodnikowej z ułożonymi na jej powierzchni metalowymi elektrodami (Rys 1.).



Rysunek 1: Przekrój poprzeczny heterostruktury półprzewodnikowej.

Heterostruktura półprzewodnikowa składa się z silnie domieszkowanej warstwy podłożowej (możemy ją traktować jako przewodnik), na niej ułożona jest warstwa barierowa AlGaAs o szerokości 100 nm, następnie studnia kwantowa GaAs o szerokości 10nm i następna warstwa barierowa AlGaAs o szerokości 50nm. Na powierzchni tej warstwy ułożone są metalowe elektrody. Pomiędzy elektrody i podłoże przyłożone zostaną takie napięcia, żeby w studni kwantowej w centralnym obszarze nanourządzenia pojawiło się napięcie pozwalające uwięzić jeden lub kilka elektronów. Aby obliczyć rozkład potencjału należy znaleźć rozwiązanie



Rysunek 2: Mapa elektrod (po lewej) i pudło obliczeniowe (po prawej)

Równania Laplace'a (odpowiednik równania Poissona przy braku swobodnych ładunków) na siatce punktów w przestrzeni 3D gdzie Oś z jest w kierunku wzrostu warstw (prostopadle do powierzchni). Krok siatki $\Delta z=10\text{nm}$. W ten sposób na studnię kwantową przypada jeden krok siatki, na warstwy barierowe odpowiednio 10 i 5 kroków.

Podłoże, traktowane jako metal umieszczono w $nz0=0$, studnię w $nz1=10$, elektrody w $nz2=15$ a całkowitą liczbę kroków $nz=25$. Kroki siatki w kierunku Δx i Δy przyjęto również równe 10nm .

Rozkład elektrod przedstawia mapa z lewej strony Rys 2.

Równanie Laplace'a jest równaniem drugiego stopnia na pochodne cząstkowe w trójwymiarowej przestrzeni, które udaje się rozwiązać iteracyjnie osiągając tzw. samozgodnienie.

W równaniu Poissona:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Phi_{tot}(x, y, z) + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\Phi_{tot}(x, y, z) + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\Phi_{tot}(x, y, z) = 0 \quad (1)$$

korzystając z definicji ilorazu różnicowego i rozwinięcia w szereg potęgowy oraz zastępując różniczki dx , dy , dz małymi ale skończonymi różnicami Δx , Δy , Δz otrzymujemy równanie na potencjał dający się policzyć iteracyjnie:

$$\begin{aligned} \Phi_{tot}^{n+1}(i, j, k) = \xi \cdot & \left(\frac{\Phi_{tot}^n(i+1, j, k) + \Phi_{tot}^n(i-1, j, k)}{(\Delta x)^2} + \right. \\ & \frac{\Phi_{tot}^n(i, j+1, k) + \Phi_{tot}^n(i, j-1, k)}{(\Delta y)^2} + \\ & \left. \frac{\Phi_{tot}^n(i, j, k+1) + \Phi_{tot}^n(i, j, k-1)}{(\Delta z)^2} \right) \end{aligned} \quad (2)$$

gdzie

$$\xi = \frac{1}{\frac{2}{\Delta x^2} + \frac{2}{\Delta y^2} + \frac{2}{\Delta z^2}} \quad (3)$$

Rozwiązanie równania Laplace'a wymaga ustalenia warunków brzegowych na powierzchni zamkniętej otaczającej obszar obliczeń, które ustawione zostało na ściankach pudła obliczeniowego i przyjmujemy w postaci prostopadłościanu otaczającego nanourządzenie. (Rys 2. - prawy)

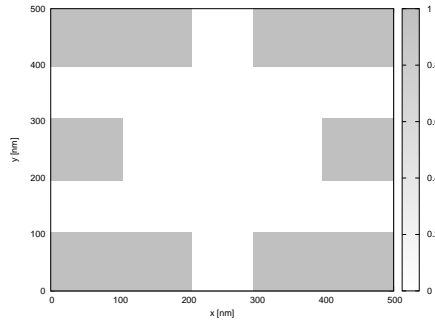
Na powierzchni podłoża, które traktujemy jako przewodnik ustalamy wartość potencjału, gdzie potencjał ujemny $V0=-350\text{mV}$, a na czterech elektrodach narożnych $V1=V2=V5=V6=450\text{mV}$ oraz na obu środkowych $V3=V4=300\text{mV}$.

Na wszystkich pozostałych ścianach prostopadłościanu przyjęto zerowanie się pochodnej normalnej do powierzchni. Zerowanie pochodnej normalnej uzyskano podstawiając na powierzchni brzegowej wartość potencjału wyliczoną w warstwie sąsiadującą z brzegiem.

W rachunkach numerycznych nie można narzucić warunku brzegowego w nieskończoności, dlatego jest on narzucony w skończonej ale dużej odległości od interesującego nas obszaru przestrzeni. Ponieważ zwiększanie pudła obliczeniowego zwiększa czas wykonywania obliczeń, staramy się by pudło obliczeniowe było jak najmniejsze. W jak dużej odległości musimy narzucić warunek brzegowy sprawdzamy eksperymentalnie wykonując serię obliczeń z rosnącym pudłem obliczeniowym, kontrolując potencjał w najbardziej interesującej części nanourządzenia (np. w środku). Przy zbyt małym pudle obliczeniowym wynik będzie się zmieniał ale podczas jego wzrostu powoli się nasyci. To będzie wystarczająca wielkość pudła. Omówiona procedura iteracyjna jest zazwyczaj zbieżna i po kilku tysiącach kroków osiąga tzw. **samo-uzgodnienie**, czyli nowe wyliczone wartości potencjału przestają się zmieniać.

2 Metoda symulacji

Do zasymulowania tego urządzenia zaimplementowałem klasę w C++ z uwzględnieniem wszystkich niezbędnych parametrów początkowych. W celu sprawdzenia poprawności danych wykonałem mapę elektrod (rys 3).

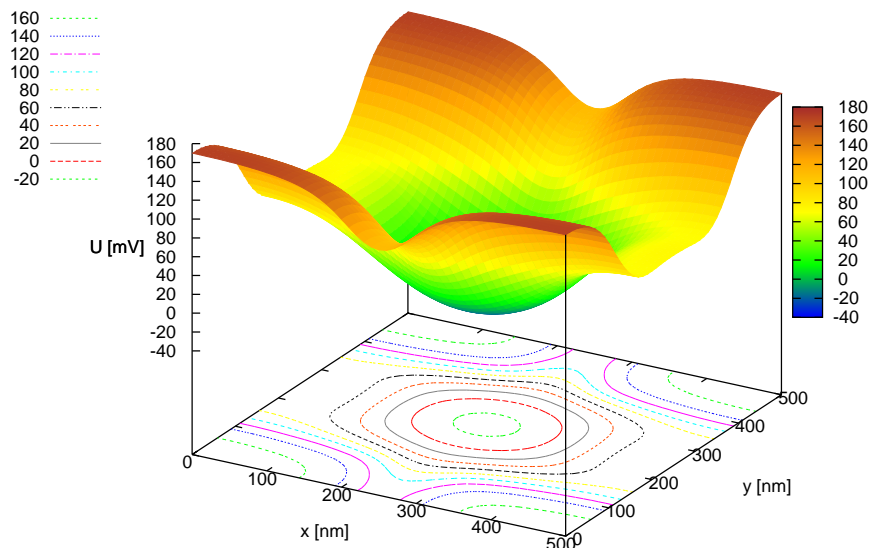


Rysunek 3: Mapa elektrod wykonana z danych umieszczonych w programie

Dalsze obliczenia bazują na schemacie opisanym we wstępie ze szczególnym wykorzystaniem równania (2)

3 Wykonanie symulacji

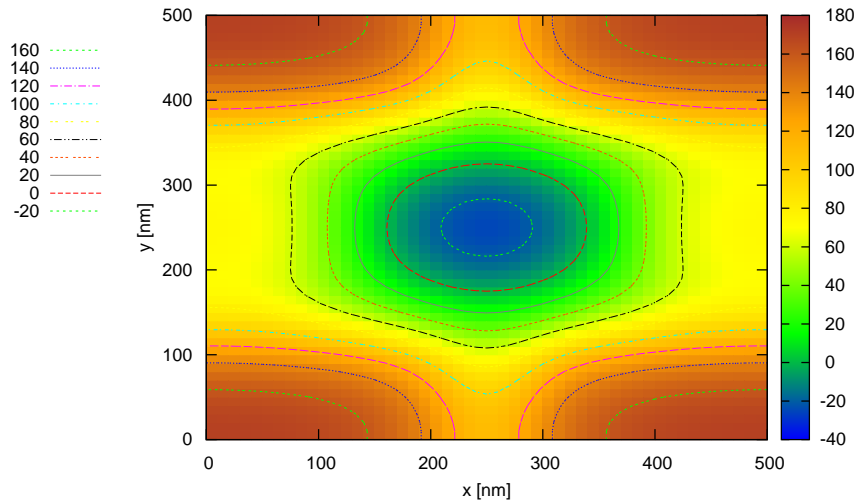
Dla parametrów początkowych (Załącznik 1. na końcu sprawozdania) otrzymałem rozkład potencjału wewnątrz nanourządzenia w warstwie nz1, który przedstawia Rys. 4.



Rysunek 4: Rozkład potencjału w nanourządzeniu dla warstwy w studni potencjału.

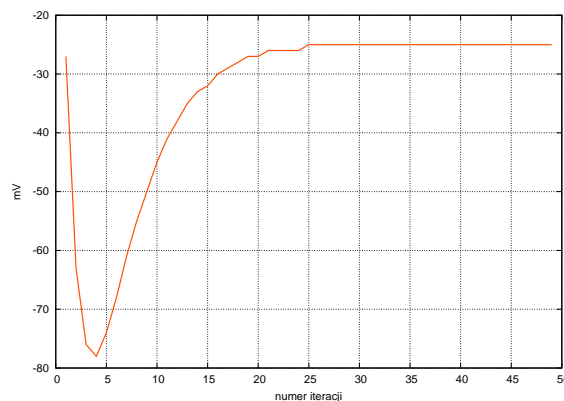
Czerwoną linią została oznaczona zerowa poziomnica $V=0$ określająca energię Fermiego, poniżej której do nanourządzenia może wpłynąć ładunek.

Jak widać rozkład potencjału jest symetryczny względem prostych przecinających nanourządzenie w połowie osi x oraz y , a także jest symetryczny względem obrotu o $\frac{\pi}{2}$, co wynika z symetrycznego rozkładu elektrod. Co więcej rozkład potencjału jest gładki co świadczy o istnieniu pochodnej w każdym jego punkcie. Poniżej zamieszczam rzut na płaszczyznę XY rozkładu potencjału (Rys 5)



Rysunek 5: Rozkład potencjału w nanourządzeniu dla warstwy w studni potencjału.

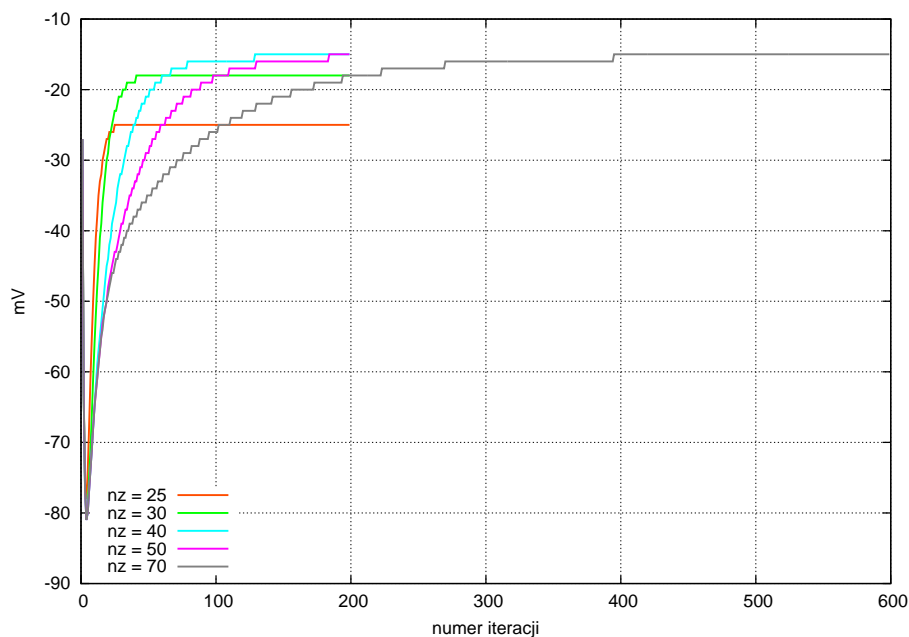
Aby sprawdzić po ilu iteracjach nastąpi samouzgodnienie stworzyłem wykres potencjału w centrum studni kwantowej (dla $n_x/2$, $n_y/2$, n_z1) w funkcji iteracji zewnętrznej (Rys. 6)



Rysunek 6: Rozkład potencjału w funkcji iteracji - jak widać 25 iteracji jest wystarczające aby uzyskać samouzgodnienie dla tych warunków początkowych (zał 1.)

3.1 Pudełko obliczeniowe

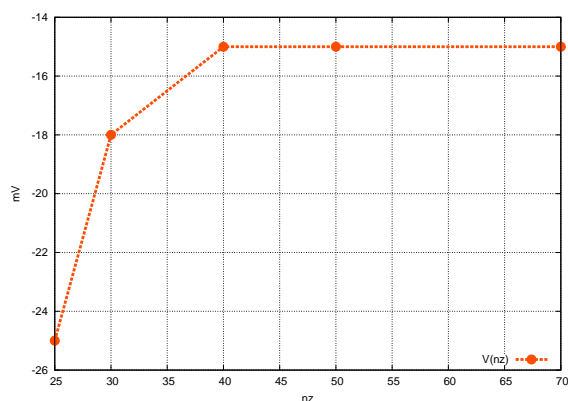
Kolejnym krokiem było sprawdzenie jaki wpływ na symulację ma zmiana rozmiaru pudełka obliczeniowego nz .



Rysunek 7: Stabilizacja potencjału (w centrum studni) w zależności od nr iteracji dla różnych pudełek obliczeniowych

Jak widać wraz ze wzrostem pudła obliczeniowego zbieżność iteracji maleje (należy wykonać więcej kroków iteracyjnych).

Następnie aby sprawdzić jaki rozmiar jest wystarczający, wykonałem wykres potencjału $V(nz)$



Rysunek 8: Wpływ rozmiaru pudełka na potencjał w środku studni

Z powyższego rysunku wynika, że wystarczającym rozmiarem pudełka jest $nz=40$.

Podobnie należałoby przetestować rozmiar pudła obliczeniowego w kierunkach poprzecznych, gdyby obliczenia były wykonywane dla pojedynczego układu, natomiast przyjęte warunki brzegowe są słuszne w przypadku matrycy periodycznie powtarzających się takich samych układów. Zakładając, że rozwiązywany był właśnie taki problem rozmiar pudełka pozostaje niezmienny w kierunkach poprzecznych.

4 Podsumowanie

W doświadczeniu znalazłem rozkład potencjału w warstwie nz1 dla nanourządzenia (rys 4. i 5.), do którego obliczenia wystarczy 25 iteracji (aby uzyskać samouzgodnienie dla warunków początkowych z załącznika 1).

Pudełko obliczeniowe powinno mieć wartość $nz=40$, a rozwiązanie stabilizuje się po ok. 200 iteracjach, i jest rozwiązaniem poprawnym przy założeniu periodycznego układu w płaszczyźnie poprzecznej (XY).

5 Załącznik 1: Parametry początkowe

Pattern:

dx, dy, dz,
 nx, ny, nz, nz1, nz2, iter, itp,
 nx1, nx2, nx3, nx4, nx5, nx6, nx7, nx8, nx9, nx10, nx11, nx12,
 ny1, ny2, ny3, ny4, ny5, ny6, ny7, ny8, ny9, ny10, ny11, ny12,
 v0, v1, v2, v3, v4, v5, v6

Values:

10, 10, 10,
 50, 50, 25, 10, 15, 50, 100,
 0, 20, 30, 50, 0, 10, 40, 50, 0, 20, 30, 50,
 0, 10, 0, 10, 20, 30, 20, 30, 40, 50, 40, 50,
 -350, 450, 450, 300, 300, 450, 450