

Московский Государственный Университет имени М.В. Ломоносова
Физический факультет

Теоретическое исследование электронного транспорта через тетраподы CdTe/CdSe

Захаров Роман Викторович
студент 2 курса

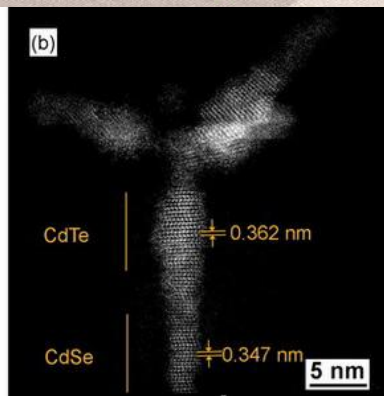
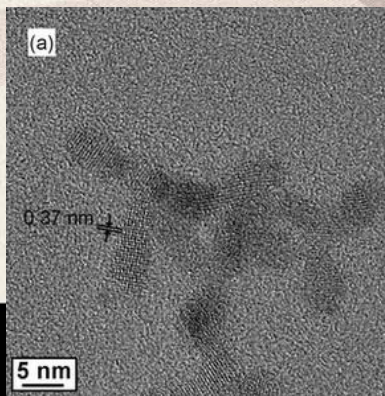
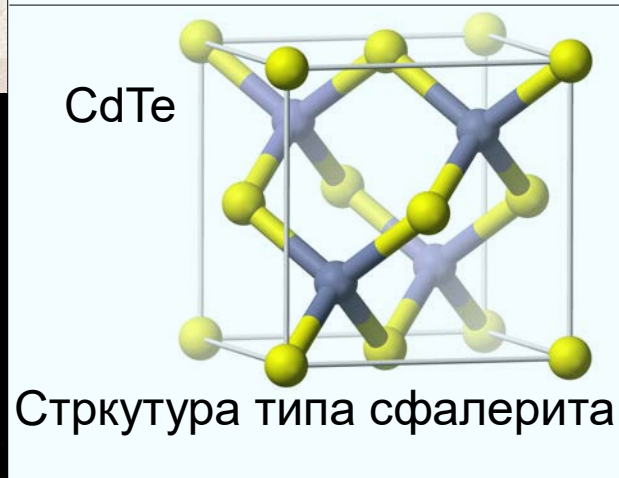
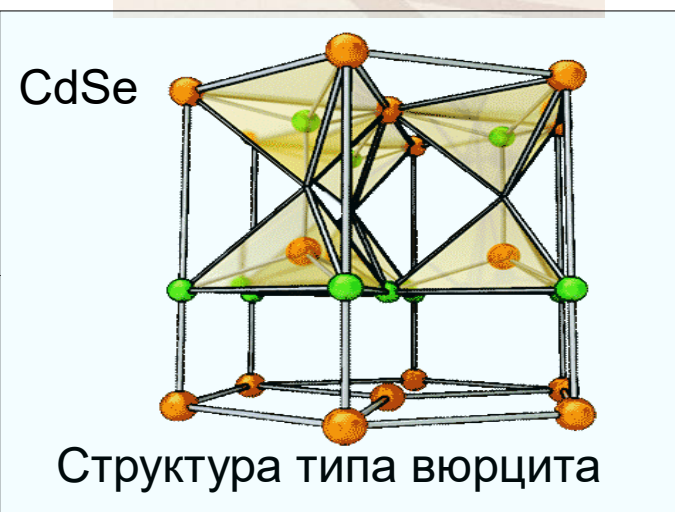
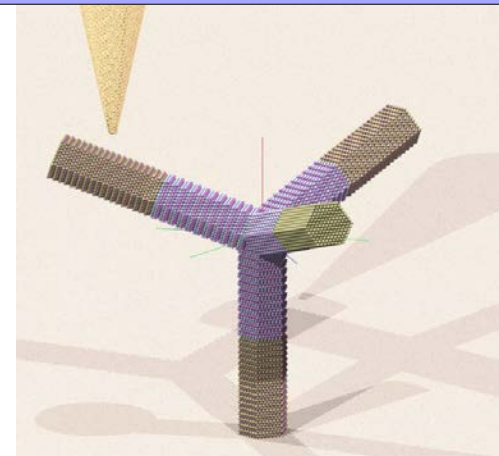
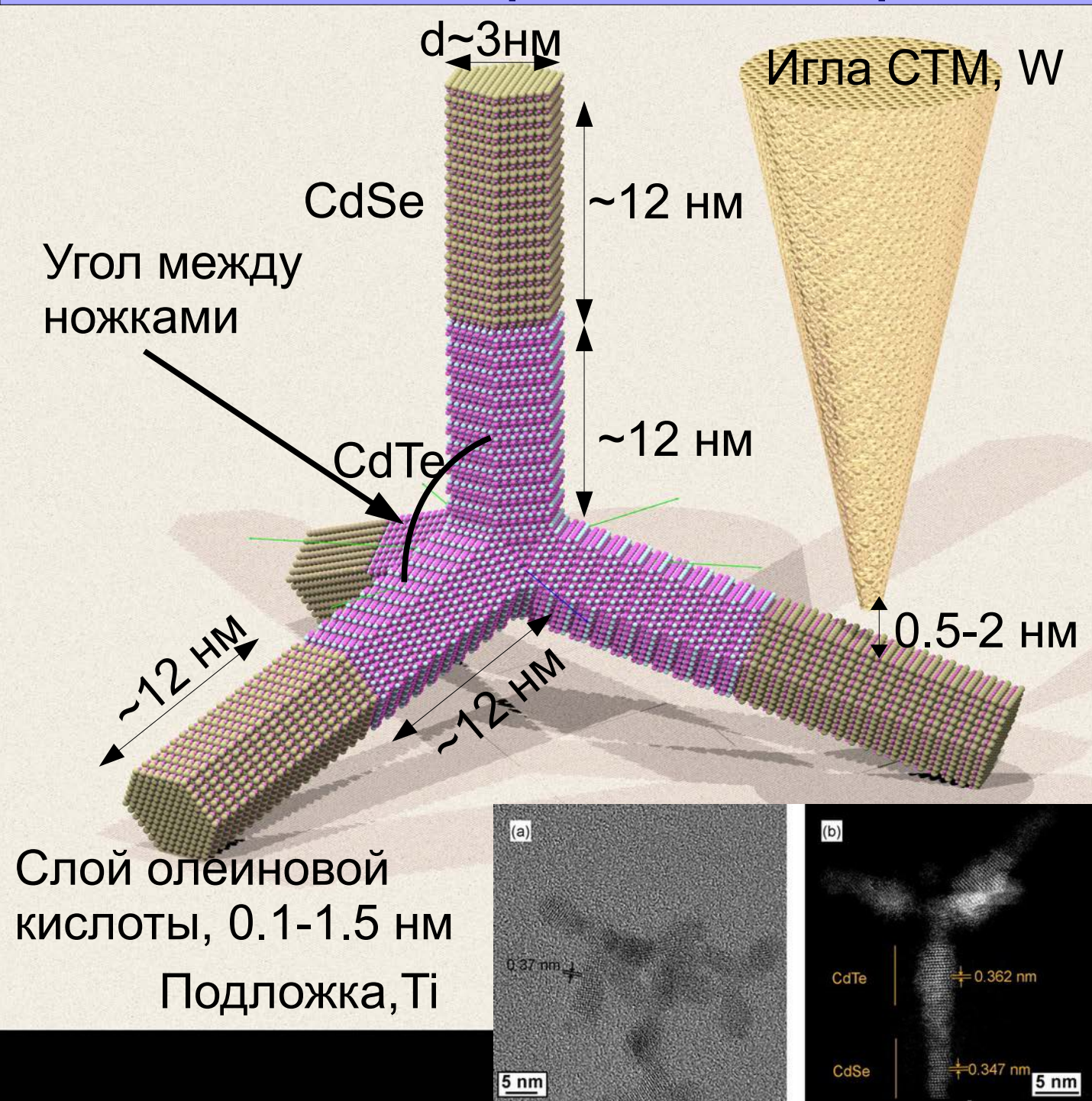
Научный руководитель: к.ф.-м.н. Шорохов В.В.

Параллельное программирование для решения
ресурсоемких задач физики, 2016

Москва, 2016

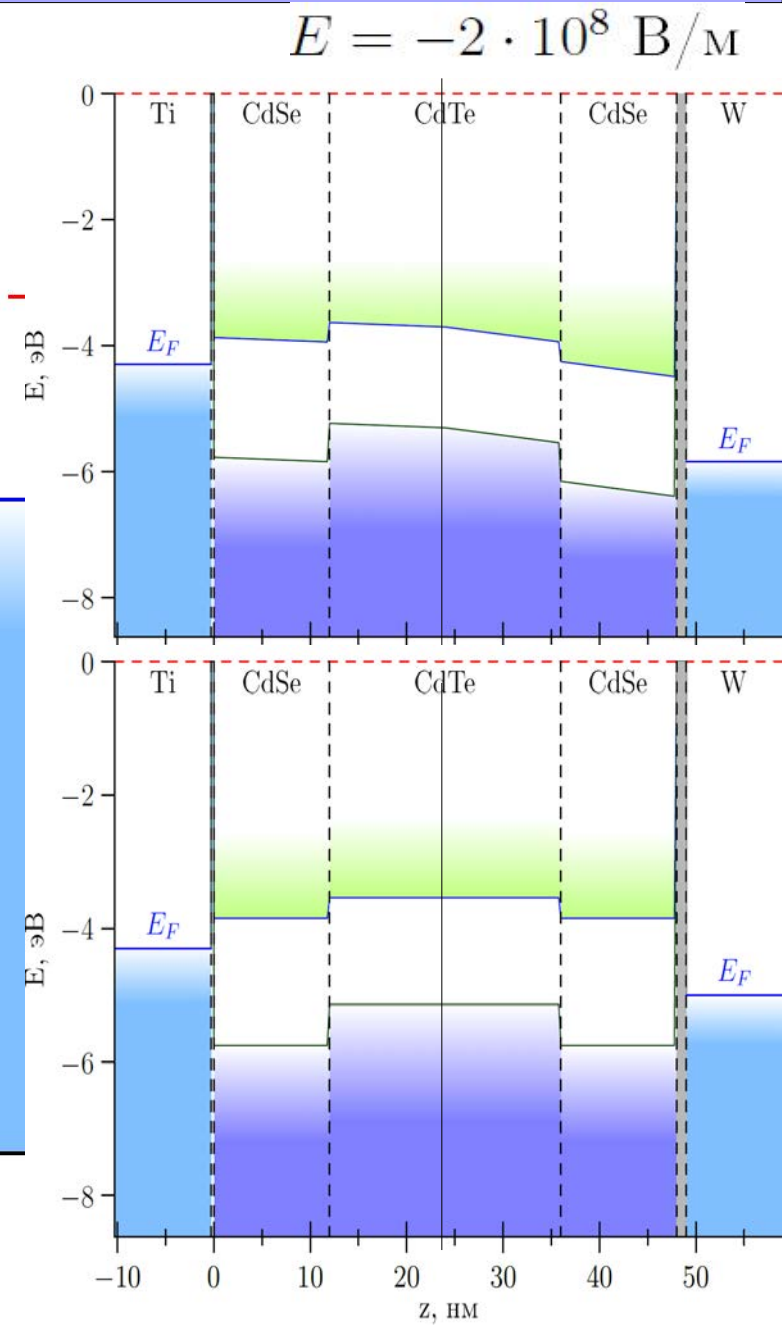
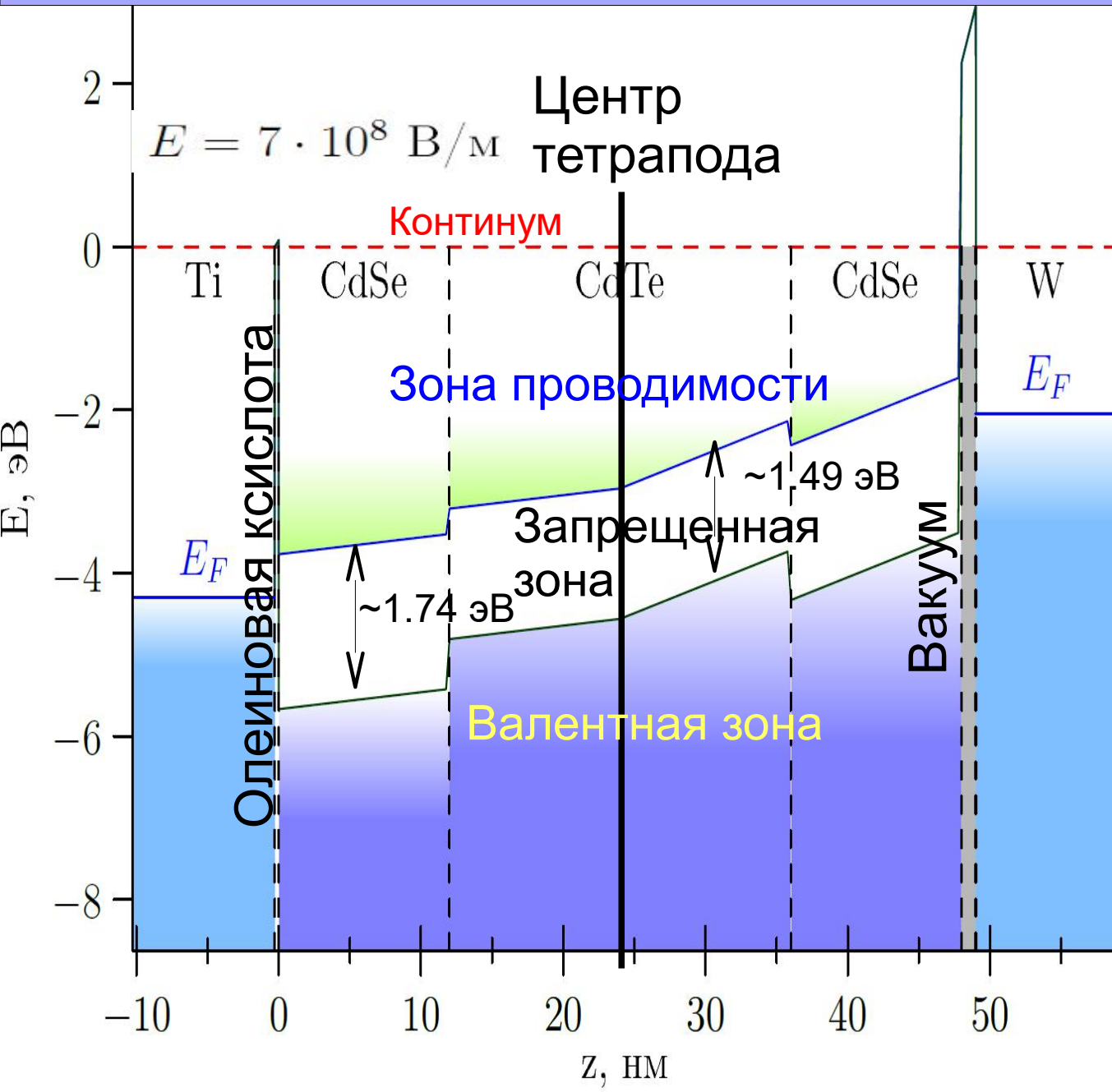


Введение. Строение тетрапода CdTe/CdSe



Введение.

Энергетическая диаграмма CdSe/CdTe



Цель работы

- Разработка теоретической модели электронного транспорта через нанокристаллы тетраподов CdSe/CdTe
- Численный расчет электрической проводимости тетраподов CdSe/CdTe при различных параметрах модели, распараллеливание вычислений.
- Выявление отличительных особенностей ВАХ тетраподов CdSe/CdTe, которые позволят однозначно их идентифицировать в эксперименте
- Сравнение данных численно рассчитанных ВАХ тетраподов CdSe/CdTe с имеющимися экспериментальными данными

Модель. Уравнение Пуассона

$$\Delta u = -\frac{\rho}{\epsilon_0}$$

u - электрический потенциал,

ρ - электронная плотность

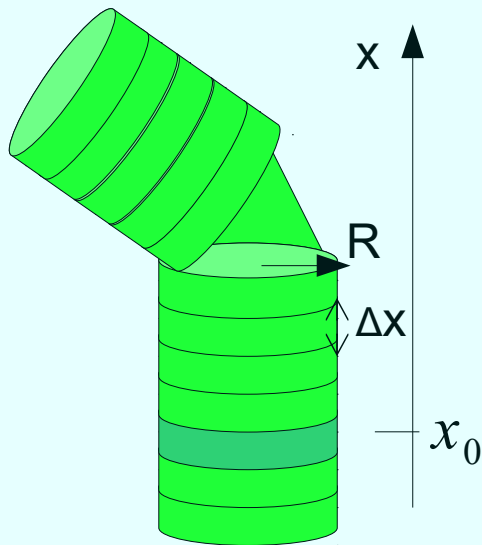
ϵ_0 - электрическая постоянная

Решение в квазиодномерном случае, считая что ножки имеют круглое сечение и их толщина $\ll$ длины

$$E(x_i) = -\frac{\rho_i}{2\epsilon_i\epsilon_0}((\sqrt{(x_i + \Delta x)^2 + R^2} - x_i - \Delta x) - (\sqrt{x_i^2 + R^2} - x_i))$$

$$E_0 = \sum_{i=1}^n E(x_i) * \text{sign}(x_0 - x_i), \quad x_i = |x_0 - x_{0i}|$$

$$\rho_i = (p_i - n_i)e$$



R - радиус ножки, около 1.5 нм

$E(x_i)$ - поле от элемента на расстоянии x_i от A

E_0 - поле в точке $A(x_0)$

Перераспределение зарядов

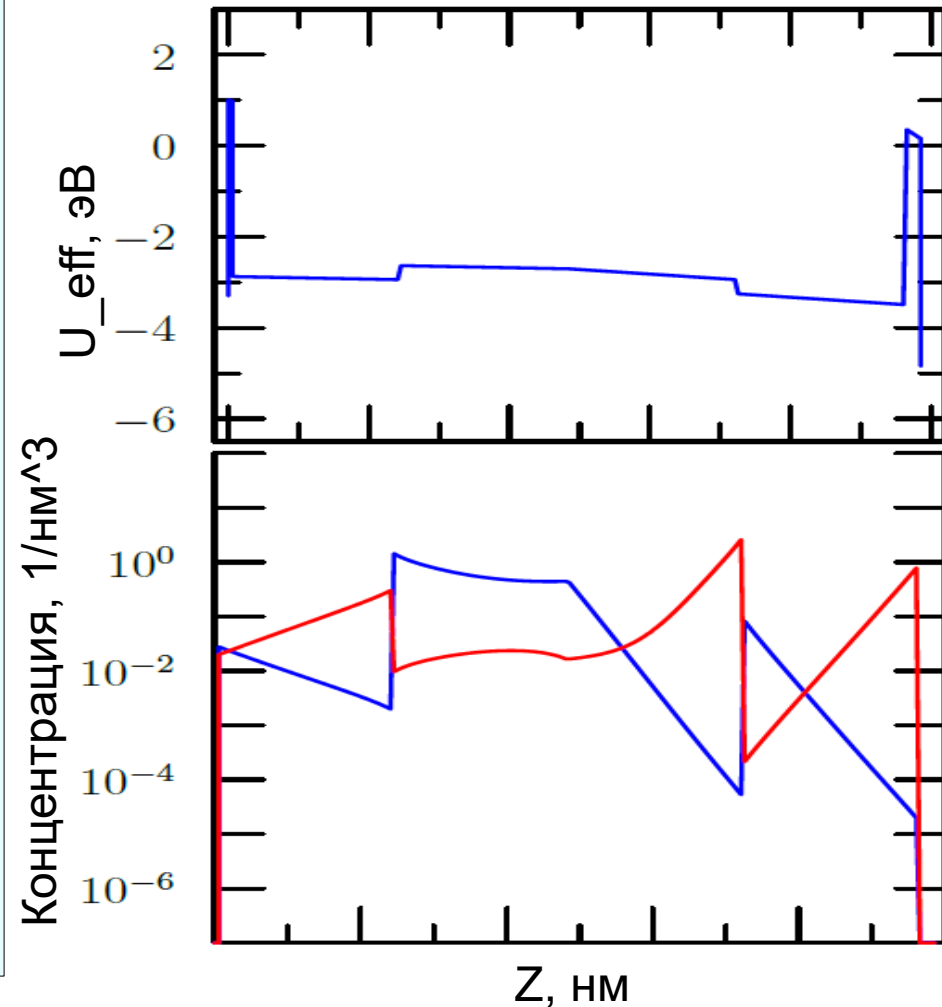
$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = \mu_n \left(E_i \frac{\partial n_i}{\partial x} + n_i \frac{\partial E_i}{\partial x} \right) + D_n \frac{\partial^2 n_i}{\partial x^2}$$

$$\frac{\partial p_i}{\partial t} = -\mu_p \left(E_i \frac{\partial p_i}{\partial x} + p_i \frac{\partial E_i}{\partial x} \right) + D_p \frac{\partial^2 p_i}{\partial x^2}$$

$$\frac{\partial n_i}{\partial x} = \frac{n_{i+1} - n_{i-1}}{2\Delta x}$$

$$\frac{\partial^2 n_i}{\partial x^2} = \frac{n_{i+1} + n_{i-1} - 2n_i}{2\Delta x^2}$$

Решение методом
Самосогласованного поля,
около 10000 итераций,
80 секунд на сетке
из 500 точек,
погрешность 0.1%



Ось Z вдоль ножки тетрапода,
имеет перегиб в центре!

Электронов в зоне проводимости: 1-3
Не переходят из зоны в зону

Расчет туннельного тока

$$G(U) = \frac{2e^2}{h} \frac{dn_{\perp}}{dE} \int_{-\infty}^{\infty} T(\varepsilon) (f(\varepsilon) - f(\varepsilon + eU)) d\varepsilon$$

$$\frac{dI}{dU} = G$$

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{1 + e^{\frac{(\varepsilon - F)}{kT}}}$$

$$I(0) = 0$$

Около пика

$$\int_{E_{peak} - \delta E}^{E_{peak} + \delta E} T(E) dE = \frac{2}{\sqrt{k}} \arctan \sqrt{k} \delta E$$

Поперечное квантование $\frac{dn_{\perp}}{dE} = \frac{2m^* S}{\pi \hbar^2}$, около 5 эВ⁽⁻¹⁾

Диапазоны расчета I
От -9 до 9 В
(поля до 2*10⁹ В/м)

Выбор шага интегрирования динамический,
в зависимости от кривизны T(E)

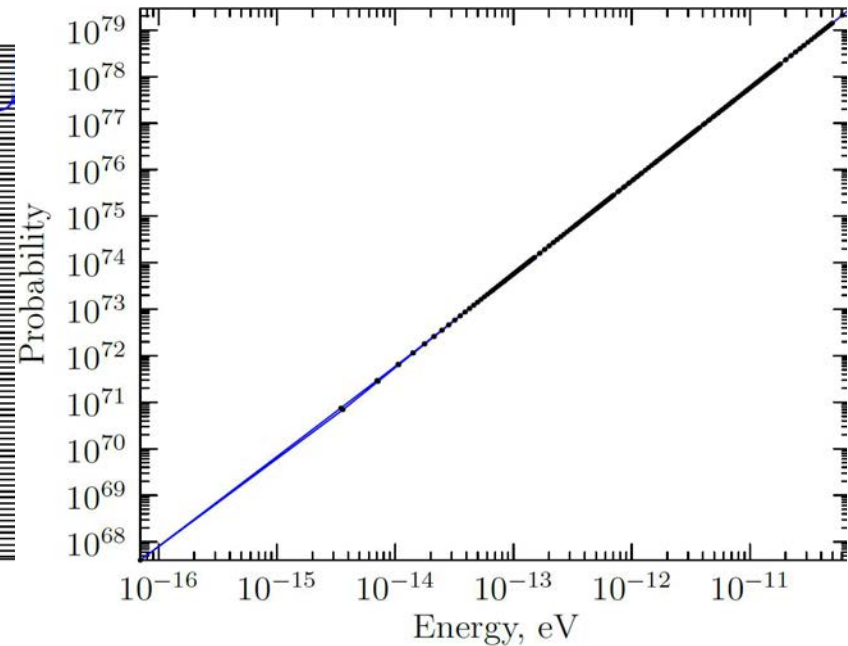
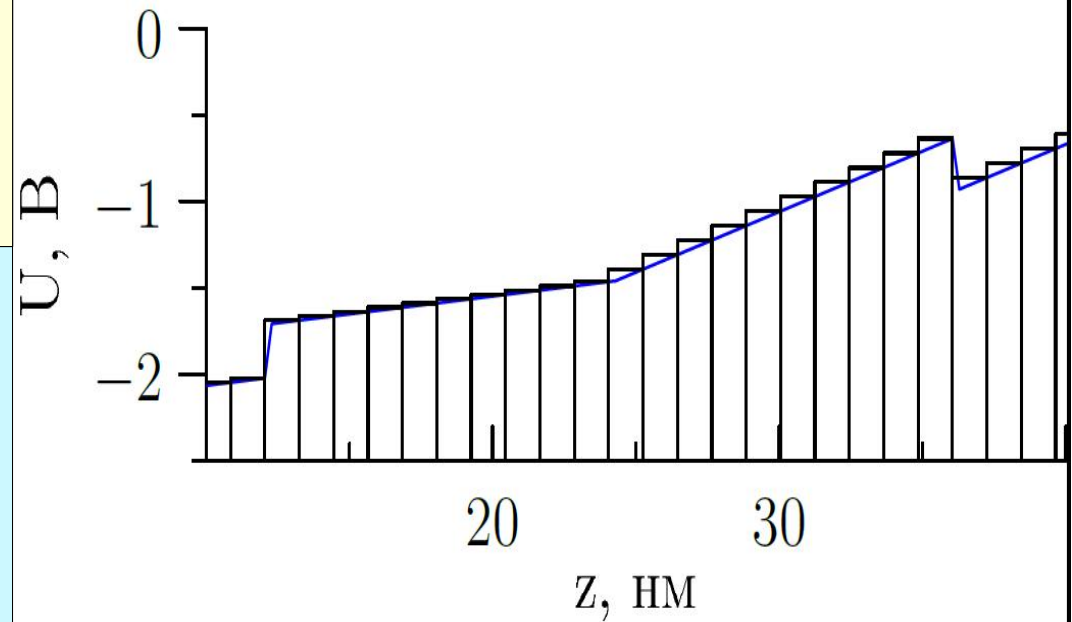
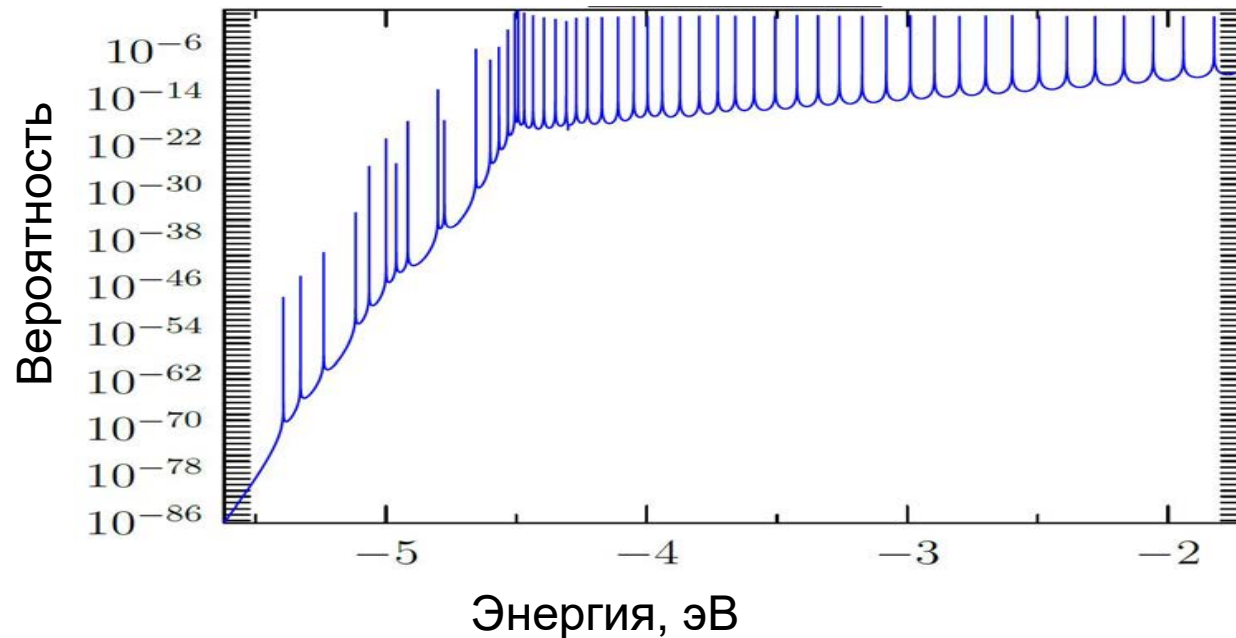
Расчет вероятности туннелирования из подложки в иглу через тетрапод

$$\begin{pmatrix} \Psi_{j+1}^+ \\ \Psi_{j+1}^- \end{pmatrix} = M_j \begin{pmatrix} \Psi_j^+ \\ \Psi_j^- \end{pmatrix}$$

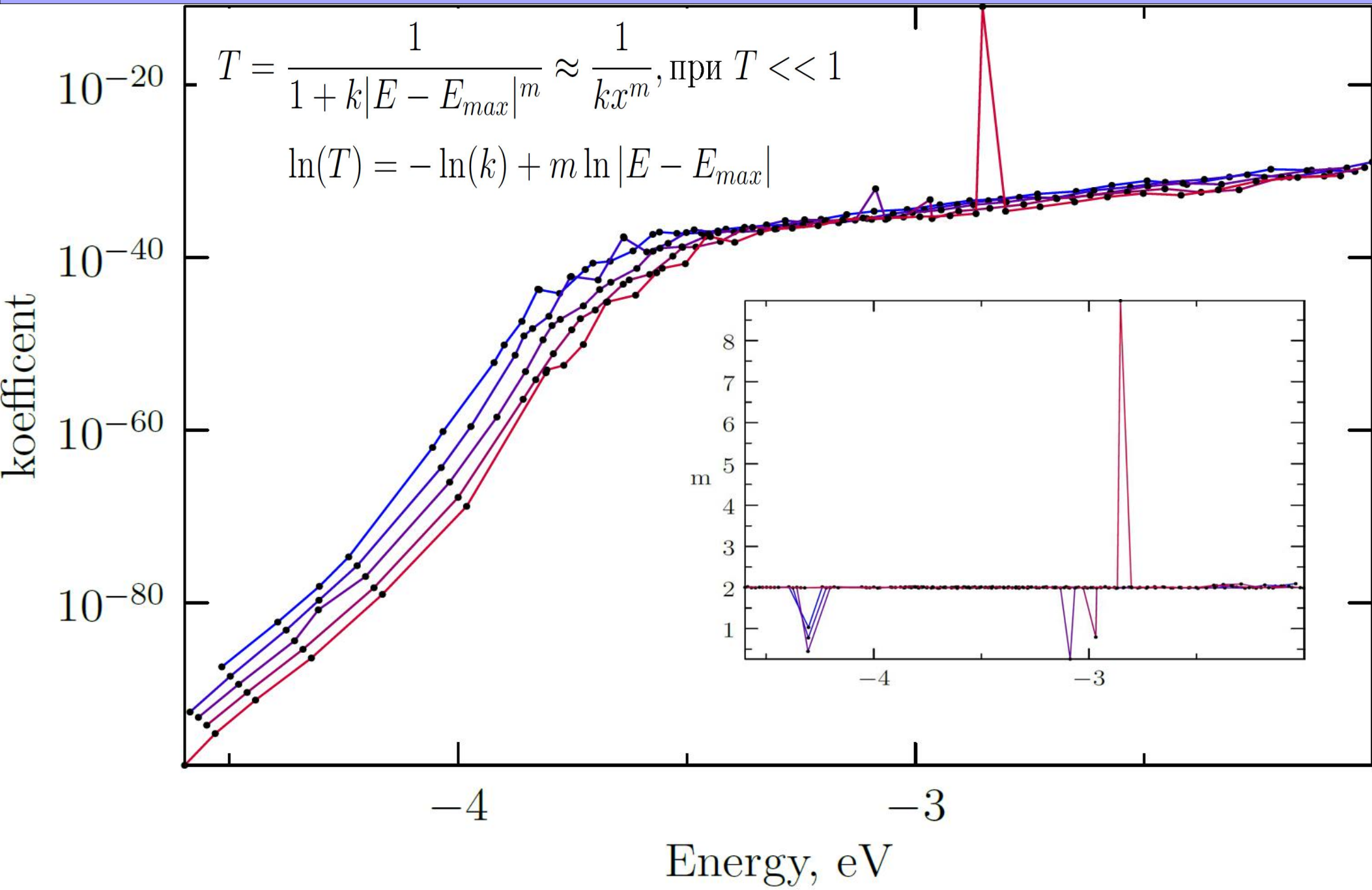
Аппроксимация пиков

$$T = \frac{1}{1 + k|E - E_{max}|^m} \approx \frac{1}{kx^m}, \text{ при } T \ll 1$$

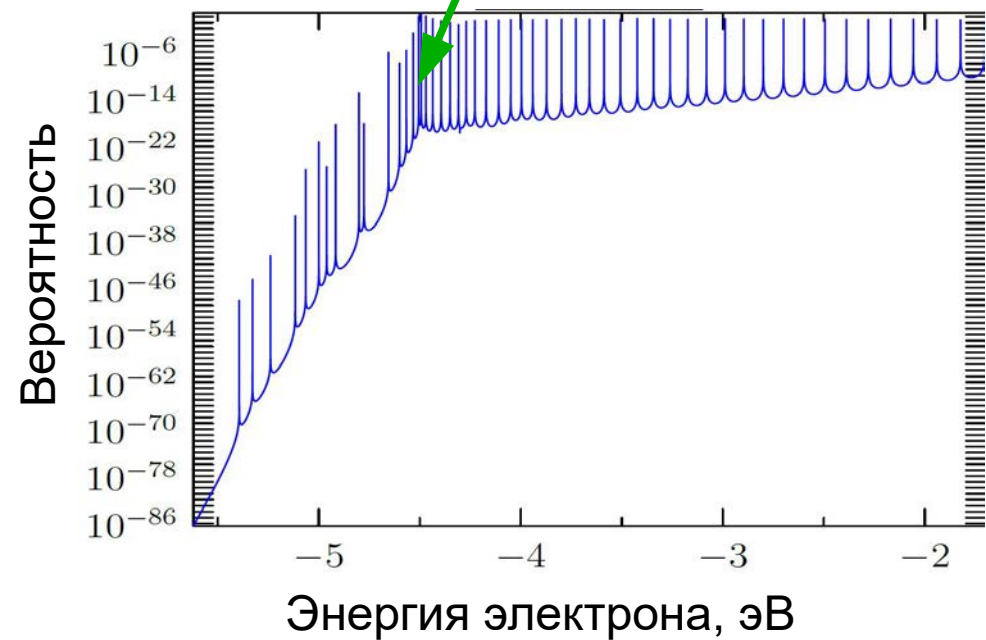
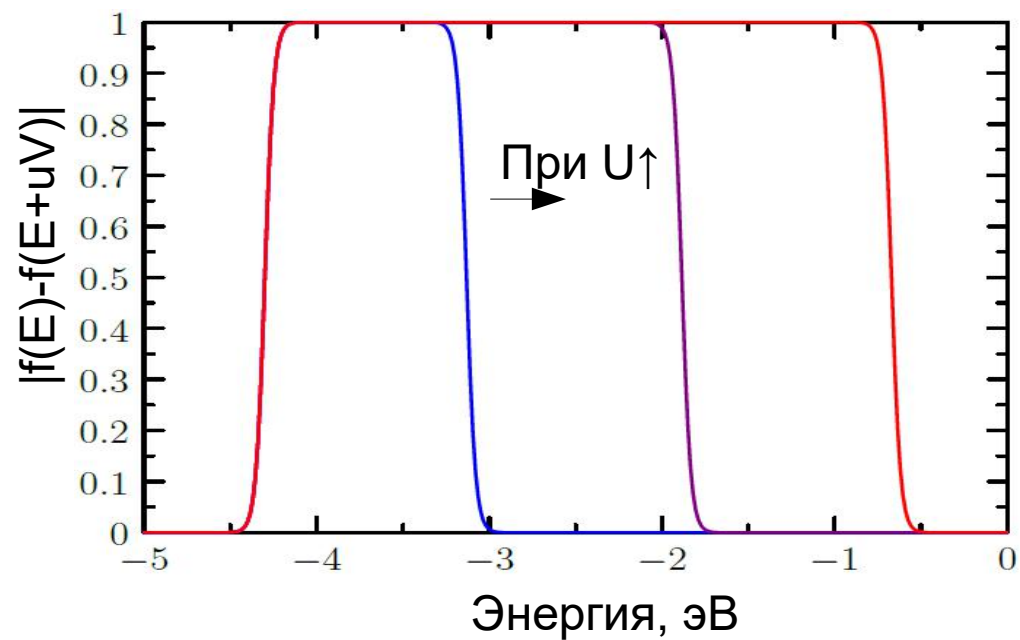
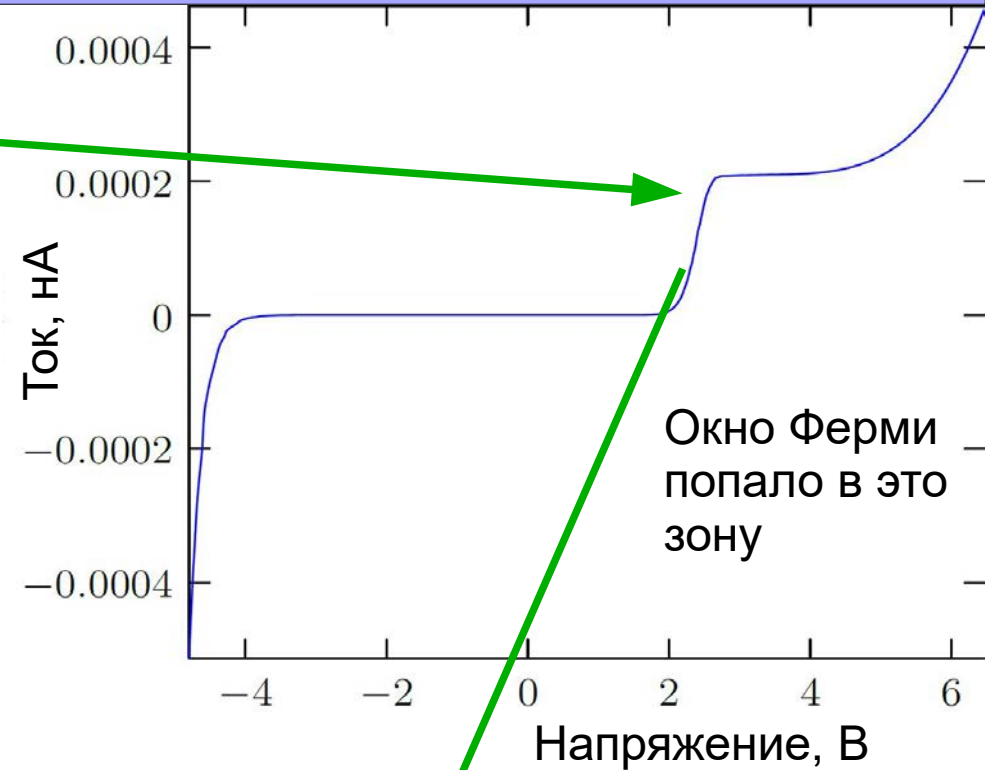
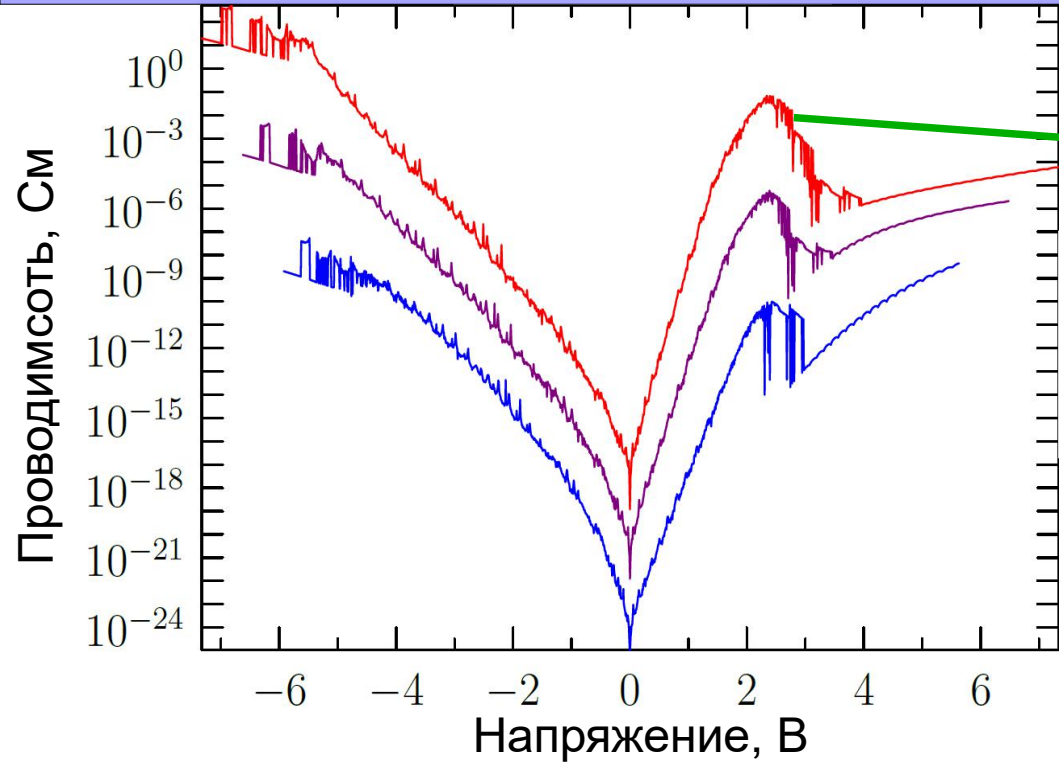
В точке ветвления ось поворачивается
Все пики достигают 1, но они очень узкие



Аппроксимация пиков

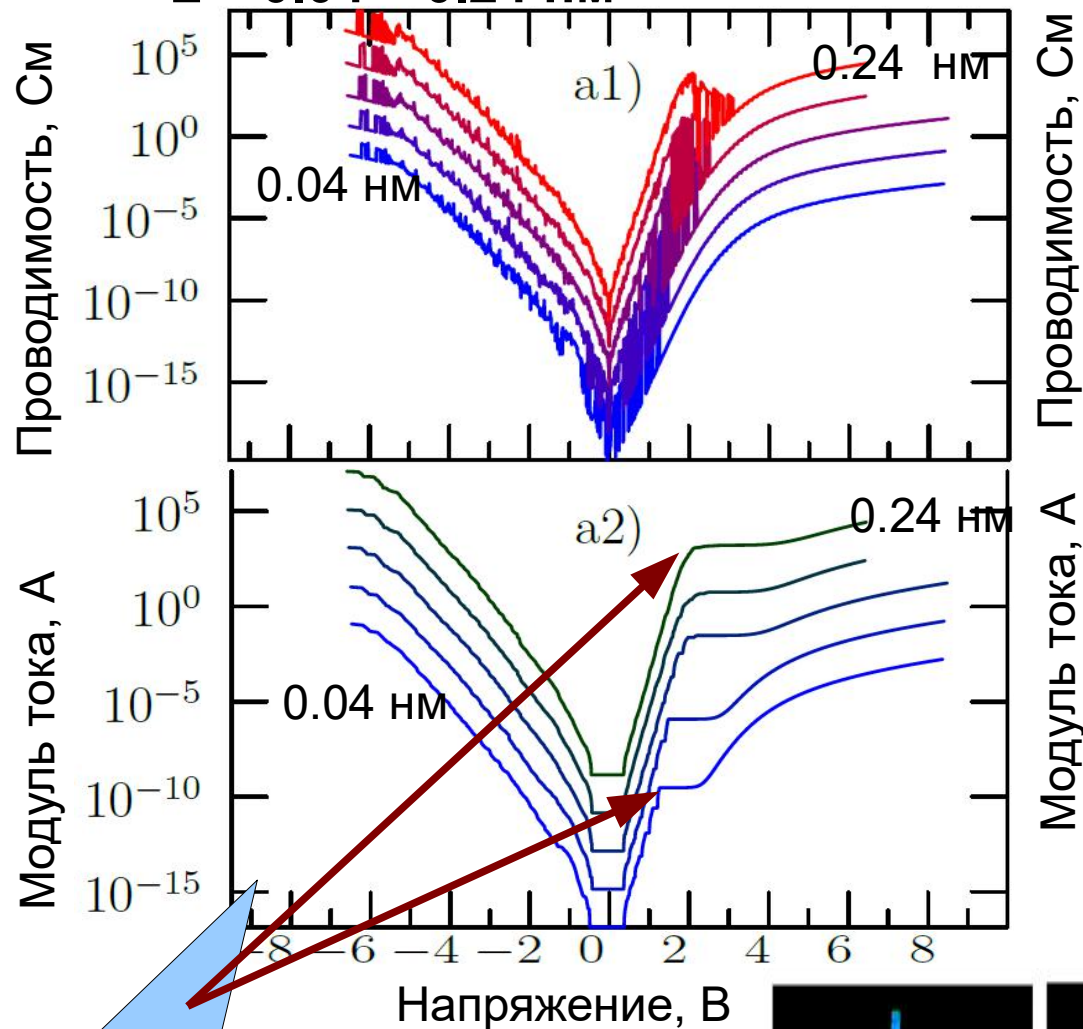


Проводимость и ВАХ

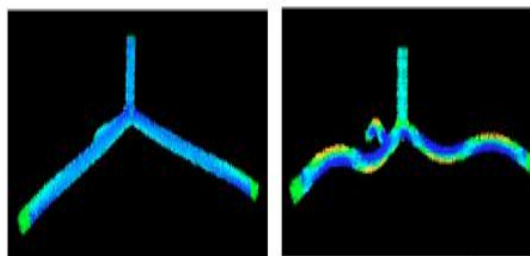


Серии зависимостей для различных значений параметров

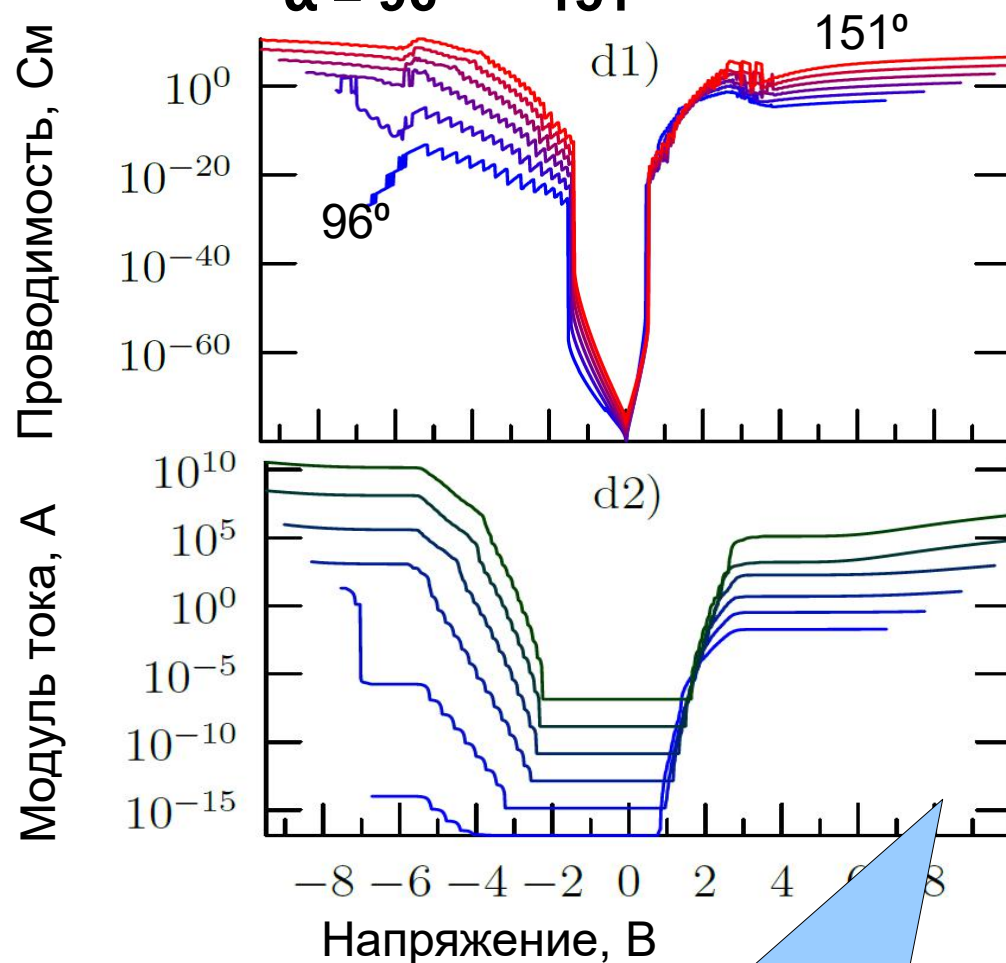
Толщина олеиновая кислоты
 $L = 0.04 - 0.24$ нм



Толщина слоя кислоты
влияет на
положение ступеньки

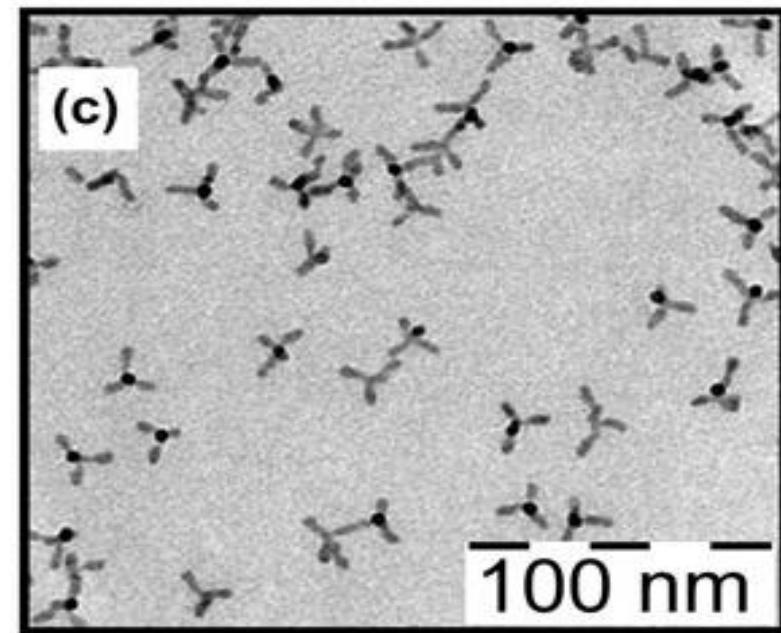
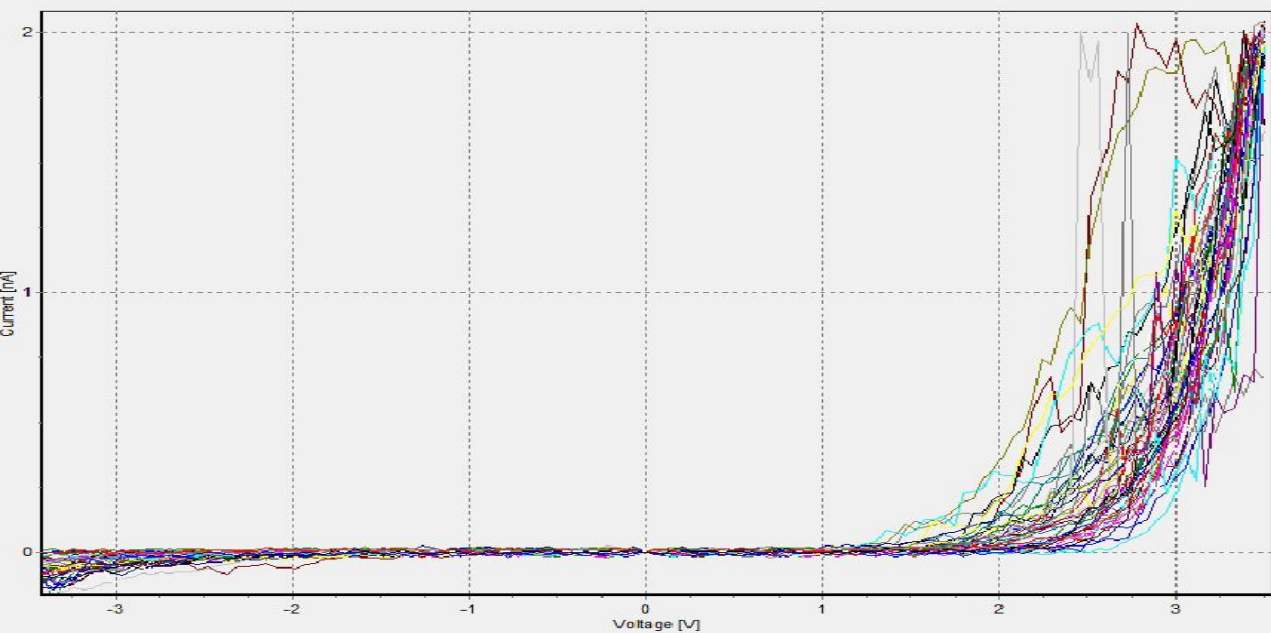


$T=0$, угол между ножками
 $\alpha = 96^\circ - 151^\circ$

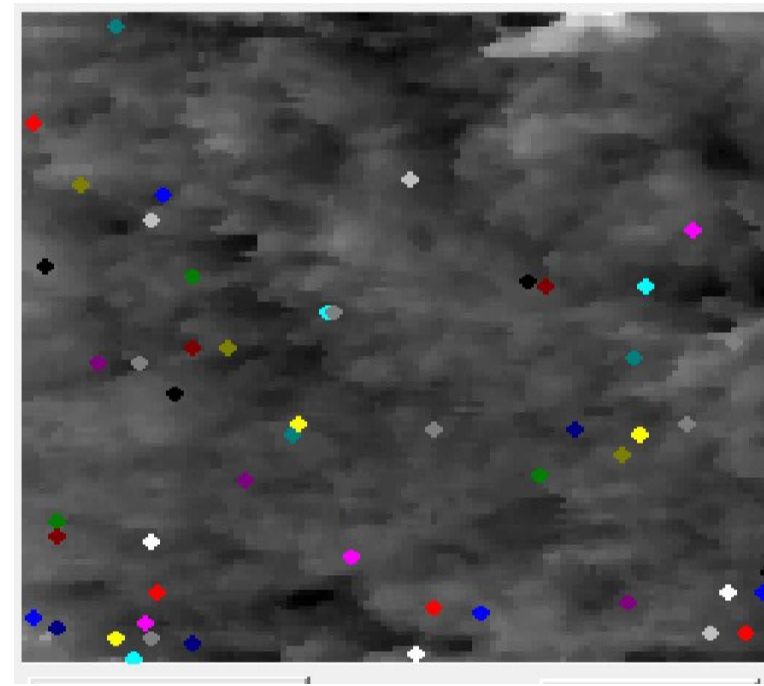
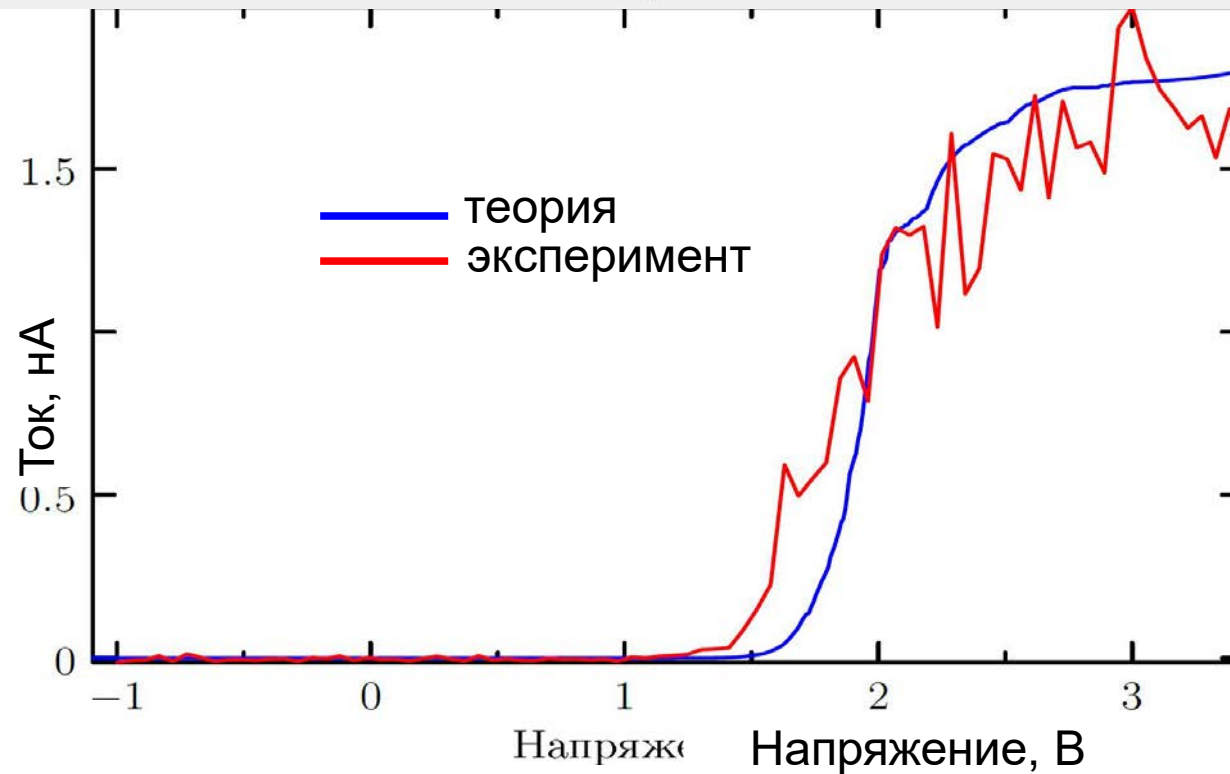


Угол между ножками
влияет на симметрию
ВАХов

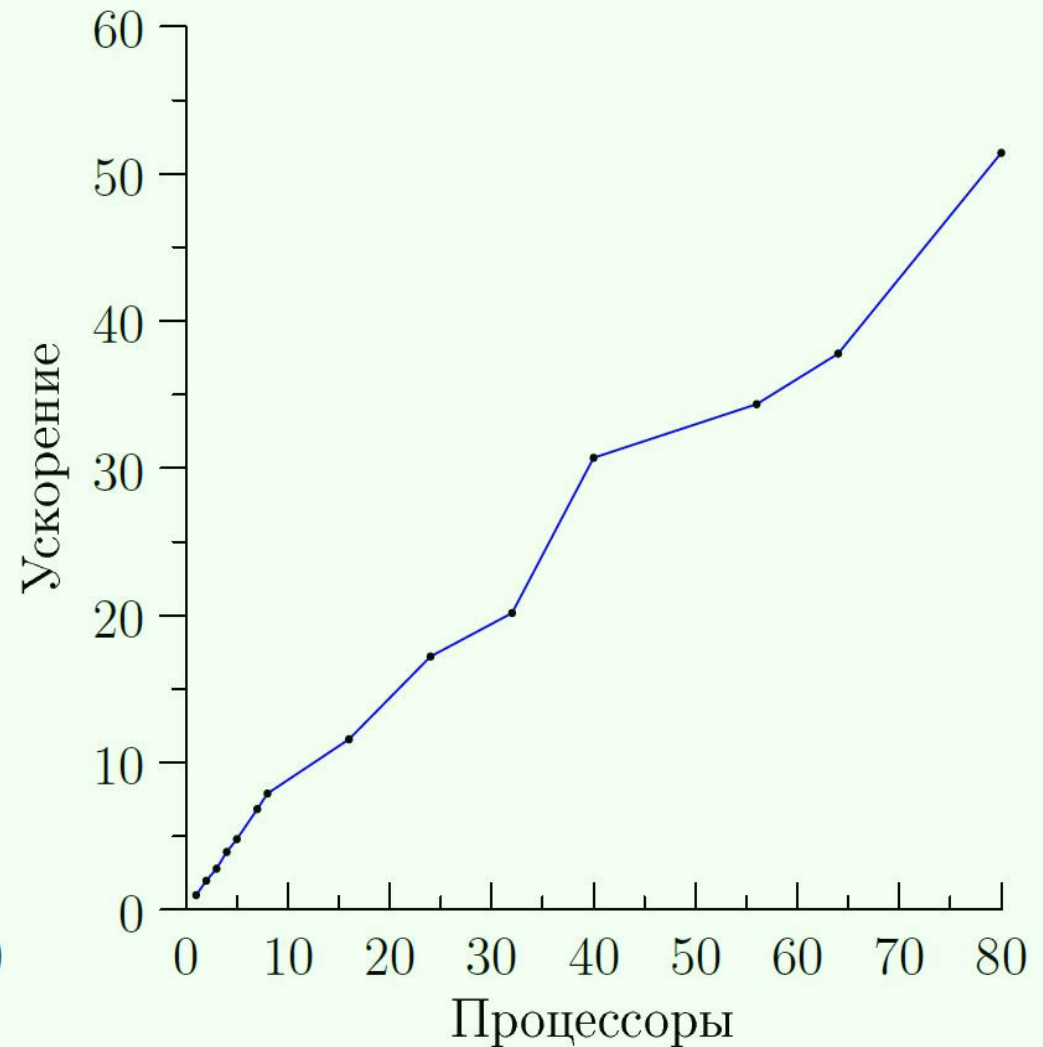
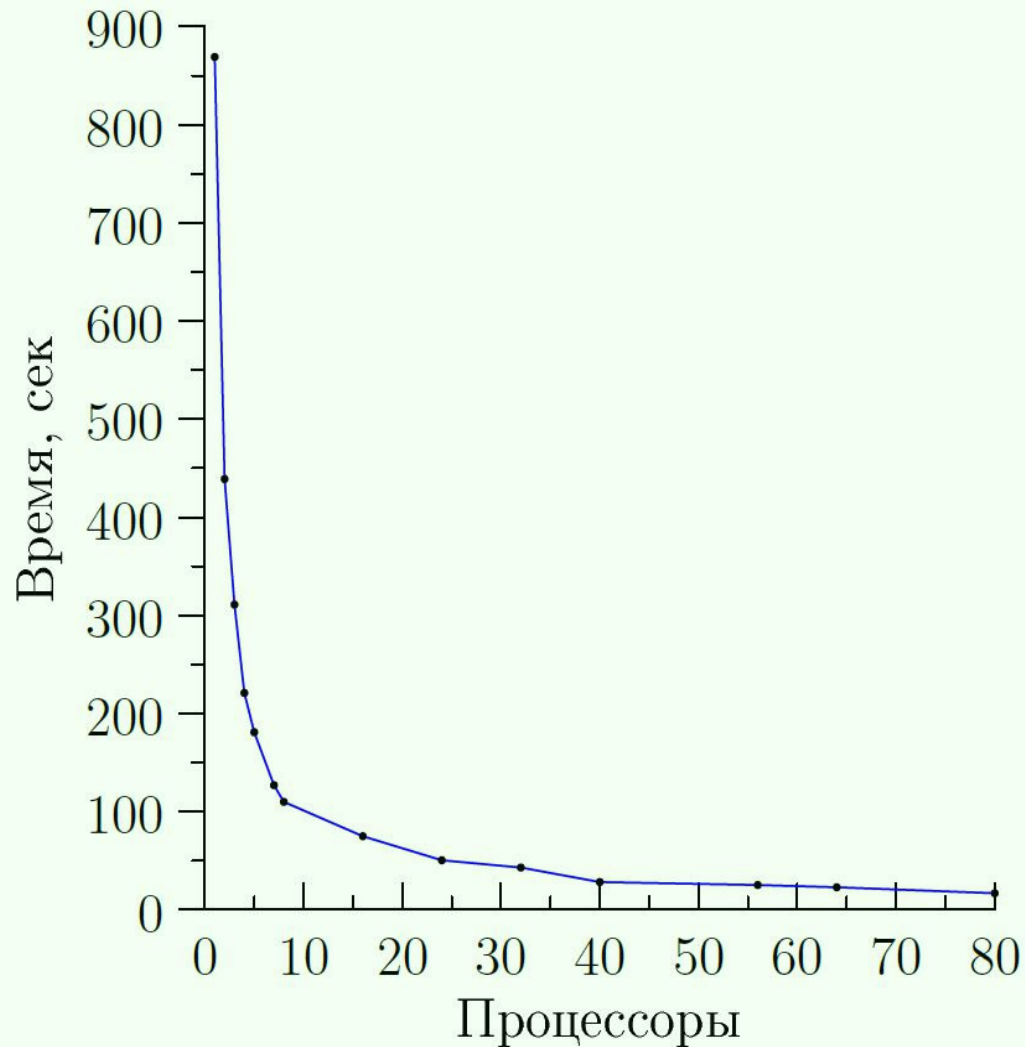
Сравнение с экспериментом



Тетраподы



Ускорение



На одном узле — внутренняя параллелизация,
Внешняя по группам процессоров

20 точек ВАХ, наибольшая эффективность на 8,16,32,40,80 процессорах

Результаты работы

- Построена квазиодномерная модель транспорта электронов через тетраподы CdSe/CdTe, ускорение на 80 процессорах в 55 раз
- Обнаружено, что угол между ножками тетрапода CdSe/CdTe влияет на симметрию ВАХов. При углах близких к 90° проводимость при положительном поле на много порядков выше (при 96° — в 10^{10} раз больше).
- На графиках электрической проводимости тетраподов CdSe/CdTe обнаружена точка резкого спада проводимости в районе 3-5 В, характерная для тетраподов. Определено, что ее положение зависит только от толщины слоя олеиновой кислоты на подложке.

Спасибо за внимание!