

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ имени М.В. ЛОМОНОСОВА

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Курсовая работа по дисциплине
“Параллельное программирование”

**Теоретическое изучение электронного транспорта через нанокристаллы
тетраподов CdTe/CdSe**

Выполнил
студент 2 курса группы 216
Захаров Роман Викторович
“13” марта 2016

Научный руководитель
Шорохов Владислав Владимирович
“13” марта 2016

Москва, 2016 г.

Аннотация

Исследовано влияние пространственной ориентации тетраподов относительно подложки на форму ВАХ и величину туннельных токов. Путем фитинга численного расчета к экспериментальным данным определены основные классы ВАХ, которые непосредственно связаны с их пространственной ориентации и размерами.

Содержание

1	Строение тетраподов	2
2	Основные уравнения, физика процессов.	4
2.1	Процессы, происходящие в тетрапode при переносе электронов	4
2.2	Метод расчета распределения электрического потенциала в тетраподах	4
2.3	Метод расчета вероятности прохождения электронов через тетрапод	5
2.4	Метод расчета вероятности прохождения электронов через тетрапод с учетом его разветвления	6
2.5	Плотность состояний и число состояний в тетрапode	7
3	Итоговые уравнения и методы их решения	8
3.1	Поиск перераспределения электронов и дырок	8
3.2	Расчет прозрачности структуры	9
3.3	Расчет проводимости	9
4	Результаты и анализ	10
4.1	Эффективный потенциал, барьеры и прозрачность	10
4.2	Проводимость и ВАХи	14
4.3	Ускорение	17
5	Выводы	17

1 Строение тетраподов

Электрическая проводимость полупроводниковых наночастиц-тетраподов CdTe/CdSe существенно зависит от их размера и сложного пространственного строения. Размерно-зависимые эффекты в таких наночастицах интенсивно изучаются в последнее время как экспериментальными, так и теоретическими методами. Наночастицы с формой тетрапода состоят из четырех лучей, соединенных под тетраэдрическим углом в точке. На основе наночастиц-тетраподов могут быть созданы высокоэффективные светоизлучающие диоды, солнечные батареи и, возможно, одноэлектронные устройства с несколькими зарядовыми центрами. В настоящей работе теоретически произведен расчет электрической проводимости для модельной структуры, состоящей из титановой подложки, олеиновой кислоты, нанокристалла тетрапода, вакуумного барьера и иглы СТМ. На 1 изображен тетрапод и игла СТМ. Центральная часть - CdTe, от нее идут отростки CdSe.

Основные параметры (стандартные для тетраподов CdSe/CdTe [4, 7, 8], если при некотором расчете отличается, то это указано):

Длины ножек: CdSe(12 nm)-CdTe(12 nm)- (center) -CdTe(12 nm)-CdSe(12 nm)

Барьеры: олеиновая кислота 0.1-1 nm, вакуум 0.2-2 nm

Концентрации:(CdSe/CdTe)

электронов(n) $10^{18} \text{cm}^{-3} / 5 * 10^{17} \text{cm}^{-3}$

дырок(n) $10^{17} \text{cm}^{-3} / 5 * 10^{17} \text{cm}^{-3}$

Температура: 300K

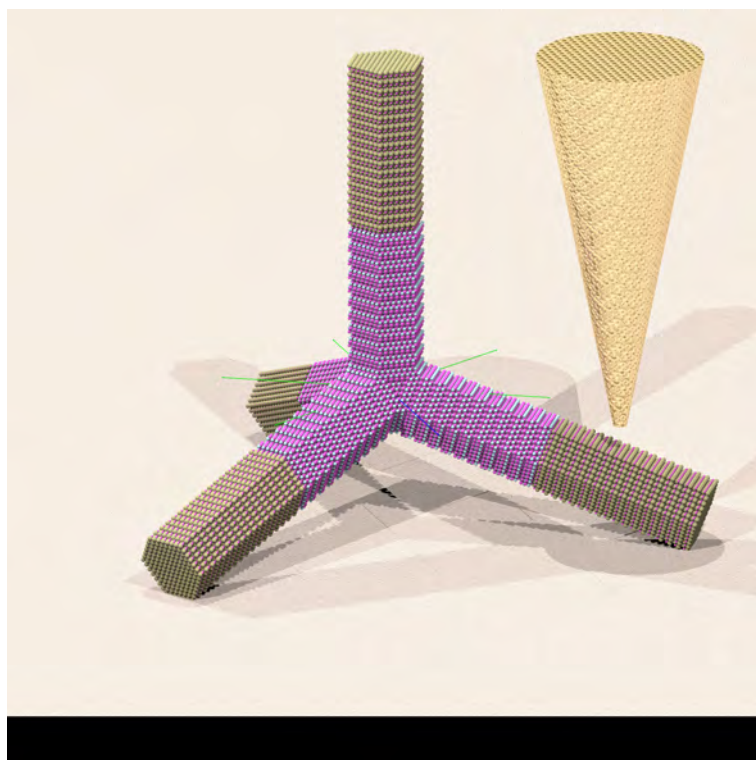


Рис. 1: Модель тетрапода

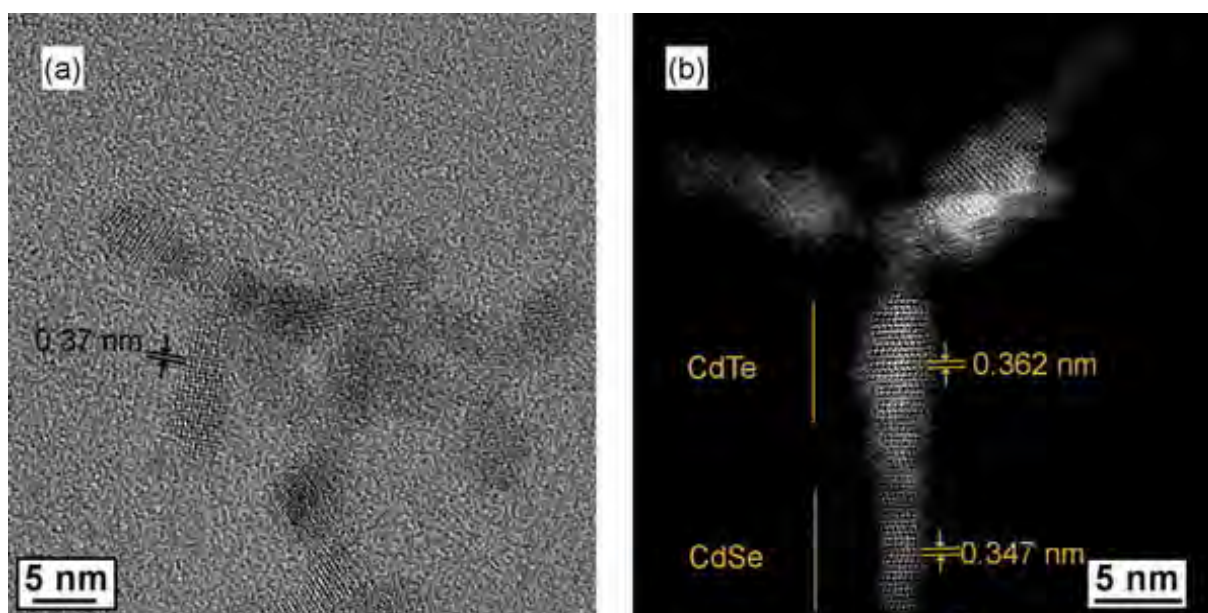


Рис. 2: Фотография с просвечивающего электронного микроскопа

2 Основные уравнения, физика процессов.

2.1 Процессы, происходящие в тетраподе при переносе электронов

Дифференциальное уравнение для перераспределения концентрации свободных носителей (дырок в валентной зоне и электронов в зоне проводимости), которое зависит и от потенциала, диффузия и образование электронно-дырочных пар. [1, 5, 6]

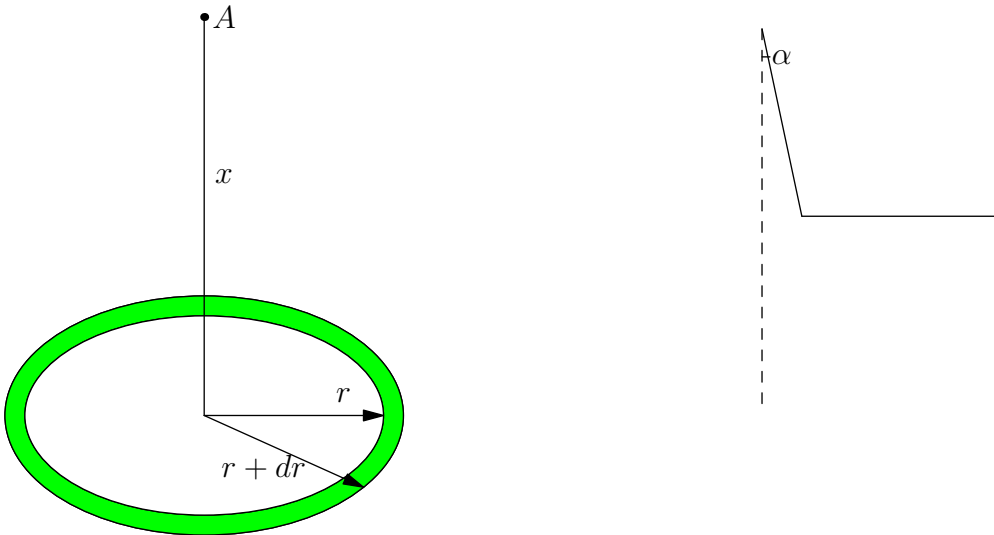
$$\frac{\partial n}{\partial t} = \mu_n \left(E \frac{\partial n}{\partial x} + n \frac{\partial E}{\partial x} \right) + D_n \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + G_n - \frac{n - n_0}{t_n} \quad (1)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\mu_p \left(E \frac{\partial p}{\partial x} + n \frac{\partial E}{\partial x} \right) + D_p \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + G_p - \frac{p - p_0}{t_p} \quad (2)$$

n и p - концентрации электронов и дырок, μ_n и μ_p их подвижности, D_n и D_p их коэффициенты диффузии, E -напряженность электрического поля, $E = -\nabla\varphi$, φ -потенциал

2.2 Метод расчета распределения электрического потенциала в тетраподах

Модель: тетрапод имеет цилиндрическую форму, радиус R



$$d\varphi_A(x, dh, r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{\rho * 2\pi r dr}{\sqrt{r^2 + x^2}} dh \quad (3)$$

где ρ -плотность заряда(Кл/М³), dh -толщина цилиндрика (вдоль x)

$$\varphi_A(x, dh) = \int_0^R d\varphi_A(x, dh) = \frac{2\pi\rho dh}{4\pi\epsilon_0} (\sqrt{x^2 + R^2} - x) \quad (4)$$

Чтобы можно было не сравнивать x и dh при подсчете потенциала, имеет смысл посчитать потенциал от заполненного цилиндра высоты h . Для этого надо проинтегрировать $d\varphi_A(x, dh)$ по h , учитывая что расстояние от центра до точки будет равно $x+h$. Тогда при расчете потенциала от тетрапода точность будет зависеть от шага разбиения только из-за неоднородности плотности заряда. Погрешность в этом случае существенно меньше.

$$\varphi_A(x_0) = \frac{2\pi\rho}{4\pi\epsilon_0} \int_{x_0}^{x_0+h} (\sqrt{x^2 + R^2} - x) dx \quad (5)$$

Этот интеграл берется, получается не очень красивая формула, относительно долго счита-
емая(пересчет напряжения требуется на шагах перераспределения, он занимал наибольшее
время). Легче посчитать напряженность электрического поля(особенно учитывая, что иначе
из-за разной диэлектрической проницаемости пришлось бы учитывать граничные условия).

$$E(x_0) = -\frac{d\varphi(x_0)}{dx_0} \quad (6)$$

$$\varphi(x_0) = F(x_0 + h) - F(x_0), \quad \frac{dF(x)}{dx} = \frac{2\pi\rho}{4\pi\epsilon_0}(\sqrt{x^2 + R^2} - x) \quad (7)$$

Последнее следует из формулы Ньютона-Лейбница для определенного интеграла. Таким
образом, поле создаваемое элементом толщины h в точке на расстоянии x_0 от конца.(ϵ -
диэлектрическая проницаемость)

$$E(x_0) = -\frac{\rho}{2\epsilon\epsilon_0}((\sqrt{(x_0 + h)^2 + R^2} - x_0 - h) - (\sqrt{x_0^2 + R^2} - x_0)) \quad (8)$$

Просуммировав поле от всех элементов получится полное поле в точке A . Зная потенциал
в предыдущей точке, можно получить потенциал в точке A . Надо учесть что x в данном
выводе считался положительным, поэтому если точка A имеет меньшую координату чем
элемент, то нужно поменять знак $E(x_0)$.

$$E_A = \sum_{i=1}^n E(x_{0i}) * \text{sign}(x_A - x_i), \quad x_{0i} = |x_A - x_i| \quad (9)$$

Теперь нужно рассмотреть тетрапод с тремя ножками. Для центра и частей близких к цен-
тру можно считать по тем же формулам, умножая на синусы углов. Углы ножек с поверх-
ностью малы $\alpha = (4^\circ - 19^\circ)$, поэтому для близких к центру частей проекции напряженности
полей будут малы из-за малых синусов, а при больших расстояниях можно считать цилиндр
бесконечно тонким. Малым будем считать расстояние меньшее радиуса. Такой метод внесет
некоторые погрешности из-за плохой точности подсчета для средних расстояний, но они не
так существенны, так как носители зарядов после перераспределения будут находиться в
основном у краев зон, а центр тетрапода находится в середине зоны CdTe. При подсчете
потенциалов в разветвленном тетрапode надо будет суммировать E_{Ai} от трех ножек умно-
женные на соответствующие \cos углов

2.3 Метод расчета вероятности прохождения электронов через тет- рапод

В первом приближении будем считать, что процесс переноса электронов баллистический.
Как дальнейшее уточнение модели может быть использование модель релаксации носителей
за счет процессов рассеяния.

Для расчета коэффициента прозрачности потенциальной структуры тетрапода исполь-
зуется методом матрицы переноса, путем разбиения эффективного потенциала на прямо-
угольные барьеры. Вероятностью прохождения структуры тетрапода можно считать как
отношение приходящего и прошедшего потоков. [2]

Расчет матрицы переноса в случае $U_i = E$, т.е. $k = 0$.

Уравнение примет вид $\Psi'' = 0$

Тогда $\Psi = ax + b$

При этом

$$a = \frac{\partial\Psi(x)}{\partial x} \Big|_{x=x_1} = \frac{\partial\Psi(x)}{\partial x} \Big|_{x=x_2} \quad (10)$$

$$ax_1 + b = \Psi(x_1) \quad (11)$$

$$ax_2 + b = \Psi(x_2) \quad (12)$$

Пусть в точках x_1 и x_2 $k_1 \neq 0, k_2 \neq 0$, а между ними $k = 0$

$$x = x_2 - x_1 \quad (13)$$

$$\begin{pmatrix} \Psi^+(x_2) \\ \Psi^-(x_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{k_2 + k_1}{2k_2} + ik_1x & \frac{k_2 - k_1}{2k_2} - ik_1x \\ \frac{k_2 - k_1}{2k_2} + ik_1x & \frac{k_2 + k_1}{2k_2} - ik_1x \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi^+(x_1) \\ \Psi^-(x_1) \end{pmatrix} \quad (14)$$

Критерии достаточной малости шага разбиения.

2.4 Метод расчета вероятности прохождения электронов через тетрапод с учетом его разветвления

Основной сложностью при рассмотрении такой структуры является то, что используется квазиодномерный метод расчета прозрачности потенциальной структуры тетрапода, который не предусматривает включение в такой расчет точки разветвления.

Далее рассмотрим квазиодномерную модель тетрапода с 3 ножками. Обозначим точку разветвления как x_b . Пусть слева от этой точки находятся 2 ножки тетрапода, которые далее будут обозначать индексами $(l, 1)$ и $(l, 2)$, а ножку справа r .

Поскольку в реальном эксперименте будет работать закон Кирхгофа для суммы токов в точке разветвления, то следует ожидать, что плотность токов вероятности в точке разветвления тоже должна удовлетворять аналогу закона Кирхгофа

$$j_{l,1}(x_b) + j_{l,2}(x_b) = j_r(x_b). \quad (15)$$

Это уравнение будет выполняться, если потребовать непрерывности первой производной волновой функции слева и справа в виде

$$\left. \frac{\partial \Psi_{l,1}(x)}{\partial x} \right|_{x=x_b} + \left. \frac{\partial \Psi_{l,2}(x)}{\partial x} \right|_{x=x_b} = \left. \frac{\partial \Psi_r(x)}{\partial x} \right|_{x=x_b}. \quad (16)$$

Поскольку тетрапод, как предполагается, имеет симметричную структуру, то должно выполняться условие

$$\left. \frac{\partial \Psi_{l,1}(x)}{\partial x} \right|_{x=x_b} = \left. \frac{\partial \Psi_{l,2}(x)}{\partial x} \right|_{x=x_b} = \frac{1}{2} \left. \frac{\partial \Psi_r(x)}{\partial x} \right|_{x=x_b}. \quad (17)$$

Распределение плотности вероятности должны быть непрерывно в точки разветвления, поскольку нет физических причин, которые могли бы привести к образованию ее скачка. Следовательно волновая функция также должна меняться непрерывным образом. Из этого следует, что волновая функция должна удовлетворять следующему условию

$$\Psi_{l,1}(x)|_{x=x_b} = \Psi_{l,2}(x)|_{x=x_b} = \frac{1}{2} \Psi_r(x)|_{x=x_b}. \quad (18)$$

$$\frac{1}{2} \Psi_r^+(x_b) + \frac{1}{2} \Psi_r^-(x_b) = \Psi_r^+(x_a) + \Psi_r^-(x_a) \quad (19)$$

$$ik_r \frac{1}{2} \Psi_r^+(x_b) - ik_r \frac{1}{2} \Psi_r^-(x_b) = ik_l \Psi_r^+(x_a) - ik_l \Psi_r^-(x_a) \quad (20)$$

Используя все выше сказанное граничные условия для перехода из левой ножки тетрапода с индексом “1” в правую ножку можно записать в матричной форме

$$\begin{pmatrix} \Psi_r^+(x_b) \\ \Psi_r^-(x_b) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{2k_r + 2k_{l,1}}{2k_r} & \frac{2k_r - 2k_{l,1}}{2k_r} \\ \frac{2k_r - 2k_{l,1}}{2k_r} & \frac{2k_r + 2k_{l,1}}{2k_r} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_{l,1}^+(x_b) \\ \Psi_{l,1}^-(x_b) \end{pmatrix} \quad (21)$$

Если обозначить вероятность прохождения через ножку с индексом “1” как \mathcal{T}_1 , через ножку с индексом “2” \mathcal{T}_2 , а вероятность отражения как \mathcal{R} , условие нормировки записывается следующим образом

$$\mathcal{T}_1 + \mathcal{T}_2 + \mathcal{R} = 1. \quad (22)$$

Определяя эти вероятности стандартным образом как отношение входящего и выходящего потоков можно считать вероятность прохождения такой структуры равной $2\mathcal{T}_1$.

Для процесса в обратном направлении аналогичное условие нормировки вероятностей записывается как]

$$\mathcal{R}_1 + \mathcal{R}_2 + \mathcal{T} = 1. \quad (23)$$

2.5 Плотность состояний и число состояний в тетрапode

Для оценки изменения концентрации носителей заряда внутри тетрапода в процессе их переноса необходимо оценить плотность поперечных квантованных мод, которые находятся между химическими потенциалами подложки и иглы СТМ. Кроме того, для оценки возможности накопления носителей заряда внутри тетрапода будем исходить из идеальности внутренней структуры тетрапода, т.е. отсутствия дефектов кристаллической решетки и примесей. Число таких мод и прозрачности барьеров позволяют оценить поток приходящих и уходящих электронов. Плотность поперечных квантованных мод без учета вырождения по спину может быть оценена на основе двухмерного прямоугольного потенциального ящика с площадью основания S , равной площади поперечного сечения ножки тетрапода. Оценочная плотность поперечных квантованных мод тетрапода

$$\frac{dn_{\perp}}{dE} = \frac{2m^*S}{\pi\hbar^2}, \quad (24)$$

где m^* — эффективная масса электронов. Число поперечно квантованных мод, которые находятся между химическими потенциалами подложки и иглы СТМ на один вольт приложенного напряжения смещения, можно оценить как

$$\frac{\Delta n_{\perp}}{\Delta V_T} = \frac{dn_{\perp}}{dE} e = \frac{2m^*Se}{\pi\hbar^2}. \quad (25)$$

Для тетрапода, поперечный размер ножки которого равен 4 нм, эта величина составляет $\Delta n_{\perp} \sim 5 \text{ V}^{-1}$.

Число продольных состояний, которые находятся в диапазоне от энергии поперечно-квантованной моды до химического потенциала иглы СТМ или подложки, на каждой поперечно-квантованной моде с учётом спина может быть также оценена из модели потенциального ящика как

$$\Delta n_{\parallel}(n_{\perp}, V_T) = \Theta(E_{n_{\perp}} + eV_T - E_c) \frac{2L}{\hbar\pi} \sqrt{2m^*(E_{n_{\perp}} + \eta eV_T - E_c)}, \quad (26)$$

где $\Theta(\dots)$ — функция Хэвисайда, E_c — дно зоны проводимости ножки тетрапода, которое, конечно же, разное для различных её частей, но для оценки можно взять некоторую усредненную характеристику. η — коэффициент деления напряжения, которые определяется геометрией тетрапода и туннельных барьеров и положением дна зоны проводимости внутри

тетрапода. Число продольных состояний на одной поперечной моде в диапазоне напряжений 1 В для одной ножки тетрапода с характерной длиной 50 нм составляет $\Delta n_{\parallel} \sim 40$.

Полное число состояний внутри тетрапода можно оценить как

$$n = \frac{2m^* SeV_T}{\pi \hbar^2} \sum_{n_{\perp}} \Delta n_{\parallel}(n_{\perp}, V_T), \quad (27)$$

что при напряжении 1 В дает оценку на общее число состояний носителей заряда в диапазоне энергии от дна зоны проводимости до химического потенциала подложки или иглы СТМ $n \sim 200$.

3 Итоговые уравнения и методы их решения

3.1 Поиск перераспределения электронов и дырок

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = \mu_n (E_i \frac{\partial n_i}{\partial x} + n_i \frac{\partial E_i}{\partial x}) + D_n \frac{\partial^2 n_i}{\partial x^2} \quad (28)$$

$$\frac{\partial p_i}{\partial t} = -\mu_p (E_i \frac{\partial p_i}{\partial x} + n_i \frac{\partial E_i}{\partial x}) + D_p \frac{\partial^2 p_i}{\partial x^2} \quad (29)$$

$$\frac{\partial n_i}{\partial x} = \frac{n_{i+1} - n_{i-1}}{2\Delta x} \quad (30)$$

$$\frac{\partial^2 n_i}{\partial x^2} = \frac{n_{i+1} + n_{i-1} - 2n_i}{2\Delta x} \quad (31)$$

$$E(x_i) = -\frac{\rho_i}{2\epsilon_i \epsilon_0} ((\sqrt{(x_i + \Delta x)^2 + R^2} - x_i - \Delta x) - (\sqrt{x_i^2 + R^2} - x_i)) \quad (32)$$

$$E_0 = \sum_{i=1}^n E(x_i) * \text{sign}(x_0 - x_i), \quad x_i = |x_0 - x_{0i}| \quad (33)$$

$$\rho = (p - n)e \quad (34)$$

Эту систему можно решить методом самосогласованного поля: в некоторый момент заданы концентрации $n(x, t)$, $p(x, t)$ и $E(x, t)$ из уравнений (28), (29) находим $\frac{\partial n}{\partial t}(x, t)$ и $\frac{\partial p}{\partial t}(x, t)$, тогда через dt концентрации станут $n(x, t + dt) = n(x, t) + \frac{\partial n}{\partial t}(x, t)dt$

Из (33) находим $E(x, t + dt)$ и цикл повторяется.

Численное решение производится путем ввода сетки (около 1000 точек) и выбором dt настолько малым, чтобы $dn/n < 0.3$ и $dp/p < 0.3$. Далее dt меняется в зависимости от среднеквадратичного изменения концентрации на шаге. Если слишком большие изменения, то dt уменьшается и идет откат на шаг назад. Если концентрации меняются слабо, dt увеличивается. Выполняется 1000-10000 итераций с шагом dt . Если при увеличении dt изменение концентрации во всех точках продолжает удовлетворять соотношению малости ($dn/n < 0.05$), цикл прекращается после последовательности из 100 хороших итераций. Т.к концентрации не могут быть отрицательными, в тех точках где после итерации они стали < 0 задается 0. Чтобы сохранялось число частиц введена нормировка после каждой итерации.

Производные считаются:

$$\frac{\partial n}{\partial x}(x_i) = \frac{n(x_{i+1}) - n(x_{i-1}))}{2\Delta x}$$

$$\frac{\partial^2 n}{\partial x^2}(x_i) = \frac{n(x_{i+1}) + n(x_{i-1}) - 2n(x_i)}{\Delta x}$$

Для граничных точек первая по 2-м точкам, вторые как у рядом находящихся внутренних точек.

Метод распараллеливания: каждый процессор просчитывает итерацию для своего набора точек(новые концентрации, нормировка, новые заряды, отклонения), далее обменивается с остальными полученными данными и происходит расчет поля для своего набора точек(используя данные по зарядам от всех процессоров). Далее рассчитываются отклонения от предыдущих значений, на 0 процессоре собираются все данные, находится среднее по модулю и максимальное и определяется(по некоторым границам) хорошая или плохая итерация. Если плохая то счетчик хороших обнуляется. Если совсем плохая то уменьшается интервал времени. При хорошей он увеличивается.

2000 итераций дают погрешность около 1%, время расчета 70 сек, в сетке 500 точек.

3.2 Расчет прозрачности структуры

$$\begin{pmatrix} \Psi_{j+1}^+ \\ \Psi_{j+1}^- \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \alpha_j & 1 - \alpha_j \\ 1 - \alpha_j & 1 + \alpha_j \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i(k_j - k_{j+1})\Delta x} & 0 \\ 0 & e^{-i(k_j - k_{j+1})\Delta x} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_j^+ \\ \Psi_j^- \end{pmatrix} \quad (35)$$

$$\alpha_j = \frac{k_j m_{j+1}^*}{k_{j+1} m_j^*} \quad (36)$$

где m_j^* эффективная масса электрона,

$$k_j = \sqrt{\frac{2m_j^*(E_{el} - U_j)}{\hbar^2}}$$

Соответственно необходимо перемножить n (число точек в сетке) матриц и решить систему из 2-х линейных уравнений для нахождения прозрачности.

$$\begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M1 & M2 \\ M3 & M4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \quad (37)$$

Где известно что $A_1 = 1$ и $B_n = 0$, $T = \frac{k_n}{k_1} |A_n|^2$ Принцип распараллеливания: наборы матриц считаются на отдельных процессорах, перемножаются внутри групп, затем половина процессоров передает матрицы, вторая половина перемножает. Порядок перемножения сохраняется. На каждом шаге число процессоров уменьшается в 2 раза(± 1 из-за четности).

3.3 Расчет проводимости

$$G(U) = \frac{2e^2}{h} \frac{dn_{\perp}}{dE} \int_{-\infty}^{\infty} T(\varepsilon)(f(\varepsilon) - f(\varepsilon + eU))d\varepsilon \quad (38)$$

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{1 + e^{(\varepsilon - E_{fermi})/kT}} \quad (39)$$

$$\frac{dI}{dU} = G \quad (40)$$

$$I(U = 0) = 0$$

Численно берется интеграл (38), при этом необходимо считать $T(E)$ и для этого нужно знать энергетический профиль при некотором поле(этим расчетам посвящены предыдущие разделы). Далее интегрируя $G(U)$ и подставляя условие для тока в 0 получается ВАХ. Выбор шага интегрирования динамический, в зависимости от кривизны $T(\varepsilon)$. Эта часть распараллелена по внешнему циклу(разбитые группы точек ВАХ посылаются на группы процессоров по 8(число на одном узле), они считаются абсолютно независимо, но за разное время, поэтому производить только внешнюю параллелизацию неэффективно, особенно если число процессоров < 8). Внутренняя параллелизация сильно тормозит при пересылке сообщений между разными узлами, поэтому она вводится в рамках одного узла.

На графике коэффициента прохождения T от энергии электронов E наблюдаются резкие максимумы. Это связано с квазистационарными состояниями, которые образуются за счет зажатия электронов между туннельными барьерами подложки(олеиновой кислоты) и СТМ(вакуумный барьер). Реализована динамическое изменение dE для увеличения точности у пиков. Но точности 17 знаков для полного просчета максимума не хватает, поэтому предложена примерная зависимость $T(E)$ в районе максимума.

$$T = \frac{1}{1 + k|E - E_{max}|^m} \approx \frac{1}{kx^m}, \text{ при } T \ll 1 \quad (41)$$

$$\ln(T) = -\ln(k) + m \ln |E - E_{max}|$$

Эта зависимость оказывается линейной на большом диапазоне, $m=2$ Полученная формула похожа на формулу Брейтта-Вигнера. По 30 точкам вблизи пика находится значение k по МНК(при этом проверяется соотношение $m = 2 \pm 0.01$, если оно не выполнено, то это был "ложный" пик, обычно он встречается 1-2 раза на одной зависимости $T(E)$) и считая распределение ферми-дирака примерно постоянным вблизи пика можно получить аналитическую зависимость и посчитать вклад пиков в интеграл (38).

$$\int_{E_{peak}-\delta E}^{E_{peak}+\delta E} T(E)dE = \frac{2}{\sqrt{k}} \arctan \sqrt{k}\delta E \quad (42)$$

Пики дают существенный вклад в проводимость и их неучет приведет к неверным конечным результатам.

В интеграле (38) пределы заменены на $E_{fermi} \pm 100kT$, т.к функция ферми дирака быстро спадает, но вероятность T изменяется от 10^{-50} на E_{fermi} до 10^{-10} на $E_{fermi} \pm 100kT$.

4 Результаты и анализ

4.1 Эффективный потенциал, барьеры и прозрачность

На (рис.4) показаны эффективный потенциал, концентрации после перераспределения, потенциал электрического поля и прозрачность при 4-х разных напряжениях. Видно что электроны и дырки скапливаются у краев зон, но почти не влияют на эффективный потенциал и электрическое поле СТМ. Если увеличить начальные концентрации в 100 раз(до 10^{20}cm^{-3}) то влияние станет заметным.

$$T = \frac{1}{1 + k|E - E_{max}|^m} \approx \frac{1}{kx^m}, \text{ при } T \ll 1 \quad (43)$$

$$\ln(T) = -\ln(k) + m \ln |E - E_{max}|$$

Эта зависимость оказывается линейной на большом диапазоне, $m=2$

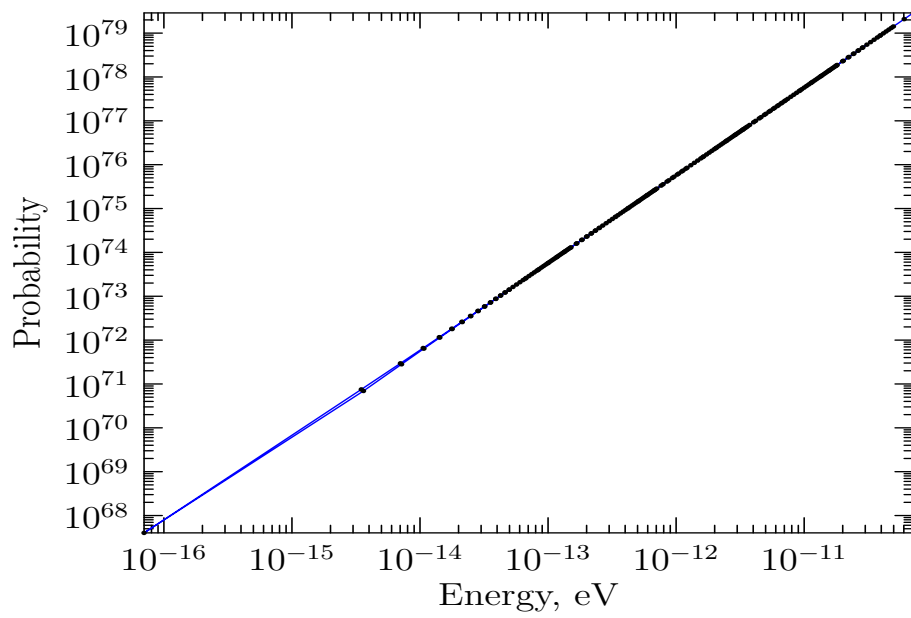


Рис. 3: Подтверждение зависимости(по оси Energy - отличие энергии от энергии выбранного пика)

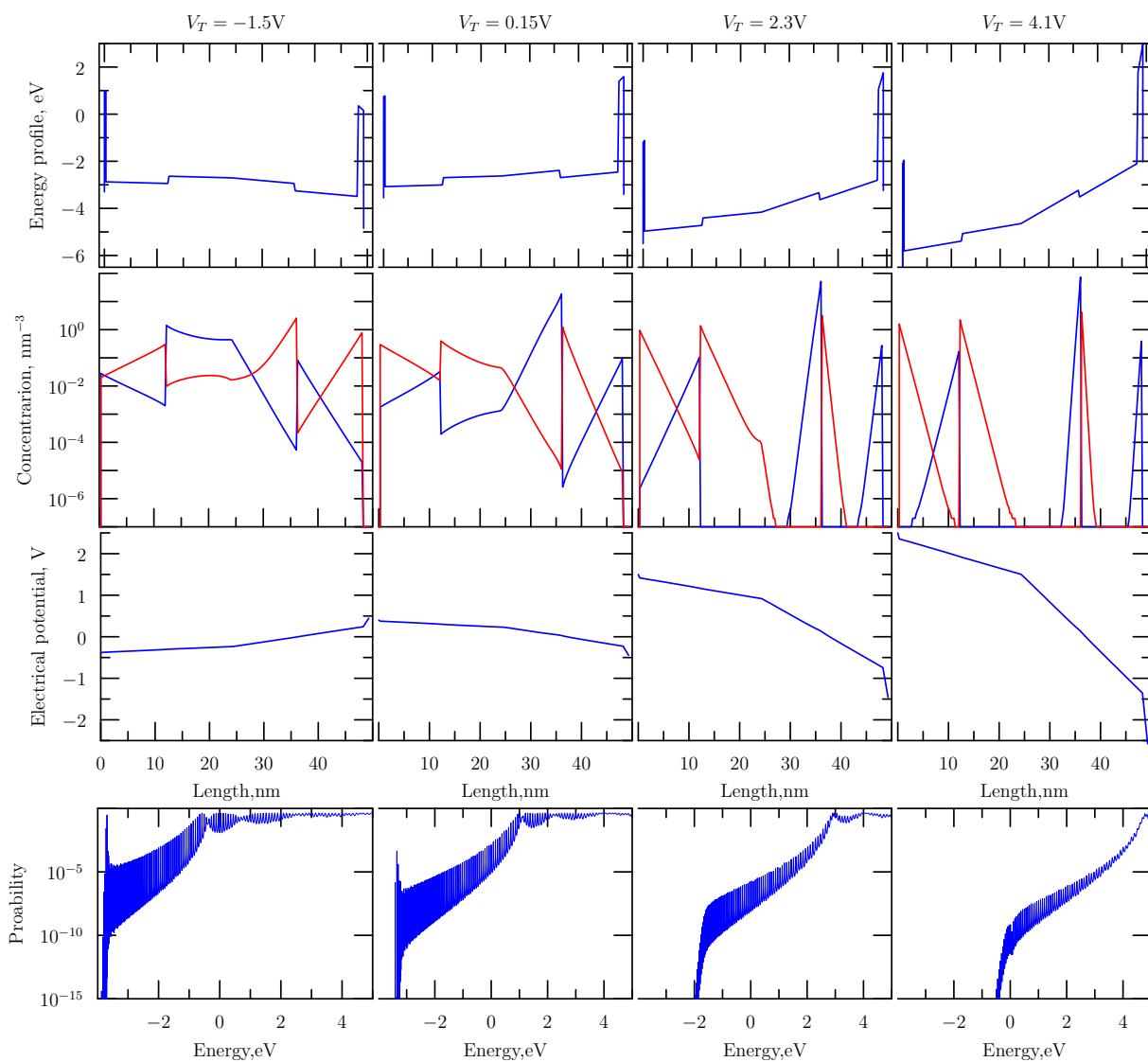


Рис. 4: Зависимости эффективного потенциала, концентраций дырок(синий) и электронов(красный), электрического потенциала от координаты вдоль тетрапода(эта ось искривлена и идет вдоль одной из трех ножек, а затем по центральной ножке), вероятности туннелирования через тетрапод от энергии электрона при четырех разностях потенциалов: $-1.5V$, $0.15V$, $2.3V$ и $4.1V$.

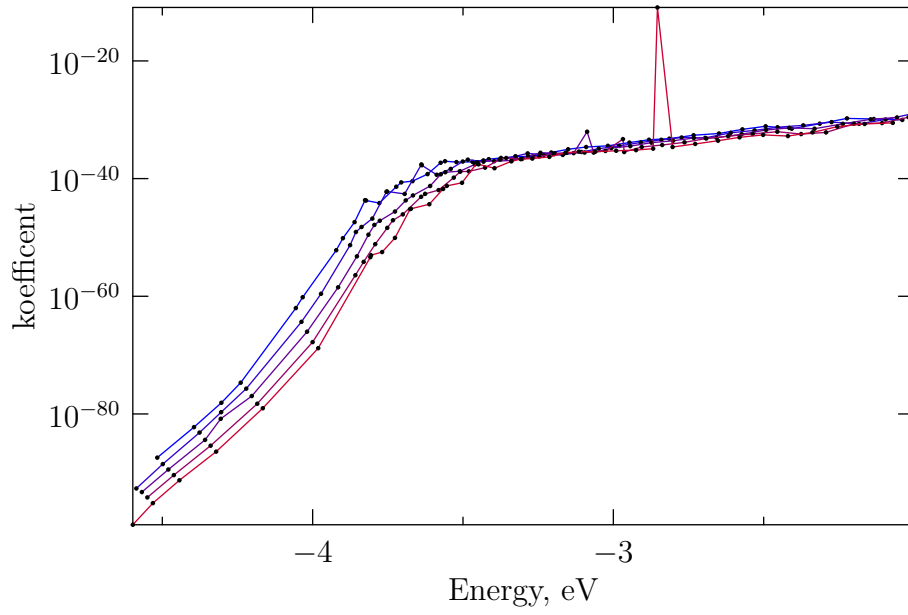


Рис. 5: Зависимость коэффициента от энергии. Разными цветами показаны зависимости при разных напряжениях между подложкой и иглой. Разница между 2-мя напряжениями около 0.2 V, диапазон 0.8-1.8 V

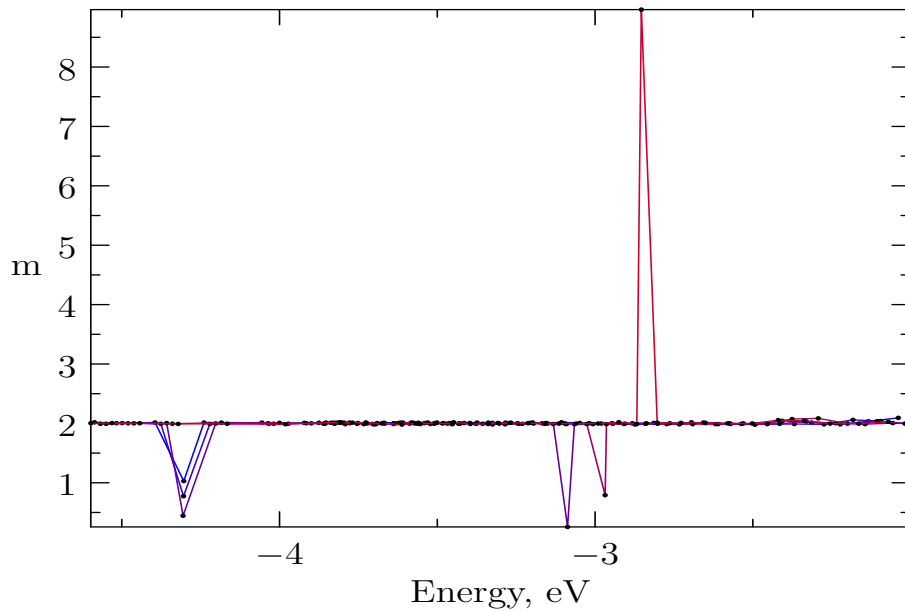


Рис. 6: Зависимость степени m от энергии. Разными цветами показаны зависимости при разных напряжениях между подложкой и иглой. Разница между 2-мя напряжениями около 0.2 V, диапазон 0.8-1.8 V

Видно, что есть точки где зависимость явно не выполняется. Было проверено что эти точки не являются максимумами, находятся на в минимуме между пиками. Эти точки не учитываются при подсчете проводимости.

Полученная формула похожа на формулу Брейта-Вигнера. По 30 точкам вблизи пика находится значение k по МНК(при этом проверяется соотношение $m = 2 \pm 0.01$, если оно не выполнено, то это был "ложный" пик, обычно он встречается 1-2 раза на одной зависимости $T(E)$) и считая распределение ферми-дирака примерно постоянным вблизи пика можно получить аналитическую зависимость и посчитать вклад пиков в интеграл (38).

На графике зависимости (рис.5) приведены зависимости при 5 напряжениях 0.8-1.8В, видно что коэффициент в точках пиков закономерно изменяется с изменением напряжения, что показывает неслучайность образования пиков(в них есть глубокий физический смысл - электрон с энергией пиков может находится в связанном состоянии между барьерами).

$$\int_{E_{peak}-\delta E}^{E_{peak}+\delta E} T(E)dE = \frac{2}{\sqrt{k}} \arctan \sqrt{k}\delta E \quad (44)$$

Пики дают существенный вклад в проводимость и их неучет приведет к неверным конечным результатам.

При увеличении разности потенциалов вероятность прохождения уменьшается из-за того, что эффективная ширина и высота туннельного барьера увеличивается из-за поднятия дна зоны проводимости между туннельными барьерами, сформированными олеиновой кислотой и вакуумом. Эффективный уровень Ферми остается на неизменной высоте, а треугольник, образованный дном зоны проводимости, над этим уровнем поднимается тем больше, чем больше напряжения.

Сами токи растут за счет увеличения диапазона, где разность ферми-дираковских функций не близка к 0. С этим связаны и пики на графике проводимости: при достижении окном нового пика предыдущие уже имеют гораздо меньшую ширину и почти не влияют.

Различая частота пиков при $T=0$ и $T=300$

4.2 Проводимость и ВАХи

На рис. 8 все графики в логарифмическом масштабе из-за большого разброса значений по порядкам величин. В обычном масштабе не было бы видно интересных особенностей ВАХ(модуль тока от напряжения) тетраподов. Ко всем токам добавлена малая величина(порядка тока при 0.1 В)

Все кроме рисунка D рассчитаны при $T=300K$, D при $T=0K$. На всех графиках заметен экспоненциальный рост дифференциальной проводимости до некоторого критического напряжения при котором она резко падает. На графике ВАХ в этом случае будет заметна достаточно большая область на которой ток почти постоянен. Параметры:

1) Серия ВАХов и проводимостей при разной толщине олеиновой кислоты. Наилучшее соответствие с экспериментом при 0.28 нм. При 2-5В есть резкий спад проводимости и его положение сильно зависит от толщины слоя олеиновой кислоты. При увеличении толщины слоя ступенька появляется при больших напряжениях.

2) Серия ВАХов и проводимостей при разных концентрациях: при концентрациях $10^{17} - 10^{19} \text{ 1/cm}^3$ эффект кулоновской блокады не проявляется, при больших он может вызвать существенное изменение(рис. 8, В, красный график). Тетраподы с которыми проводились эксперименты не были специально допированы и концентрации свободных в них не превышали 10^{17} 1/cm^3 ;

3) Серия графиков при изменении длины части CdTe, она может зависеть от условий роста. 4) Серия ВАХов и проводимостей при изменении угла между ножками при $T=0$. В идеальном тетраподе угол тетраэдрический, но из-за действия электростатического поля

ножки тетрапода могут прогибаться [3]. Угол влияет на симметрию ВАХов, при угле около 90° отношение токов при разных полярностях может достигать 10^{15}

Также на графиках проводимости видны небольшие скачки, их причина - дохождение окна из разности ферми-функций до пиков прозрачности. С увеличением напряжения прозрачность уменьшается, окно увеличивается, поэтому предыдущие пики становятся менее существенными. При $T=0$ график проводимости похож на ломаную из-за узости пиков и вырождения разности функций ферми в прямоугольник.

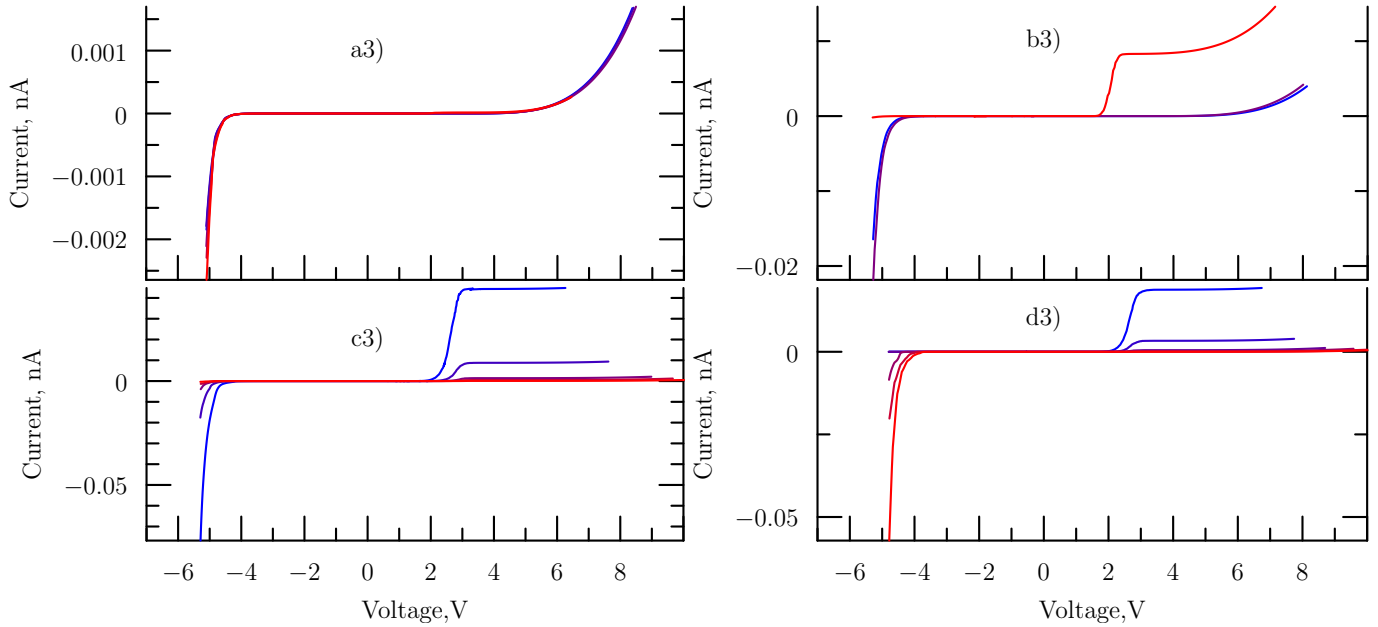


Рис. 7: Зависимости тока от напряжения, при изменении различных параметров (синий - минимальная величина, красный - максимальная). А - зависимость от толщины олеиновой кислоты в диапазоне от 0.04 нм до 0.24 нм с шагом 0.04 нм. В - зависимость от концентрации, увеличенной в 1, 10, 100, 1000 раз. С - зависимость от длины центральной части CdTe: от 10 до 50 нм с шагом 10 нм. Д - зависимость от угла между ножками от 96° до 151° с шагом 22° при температуре $T=0\text{K}$. В серии каждый следующий домножен на 100

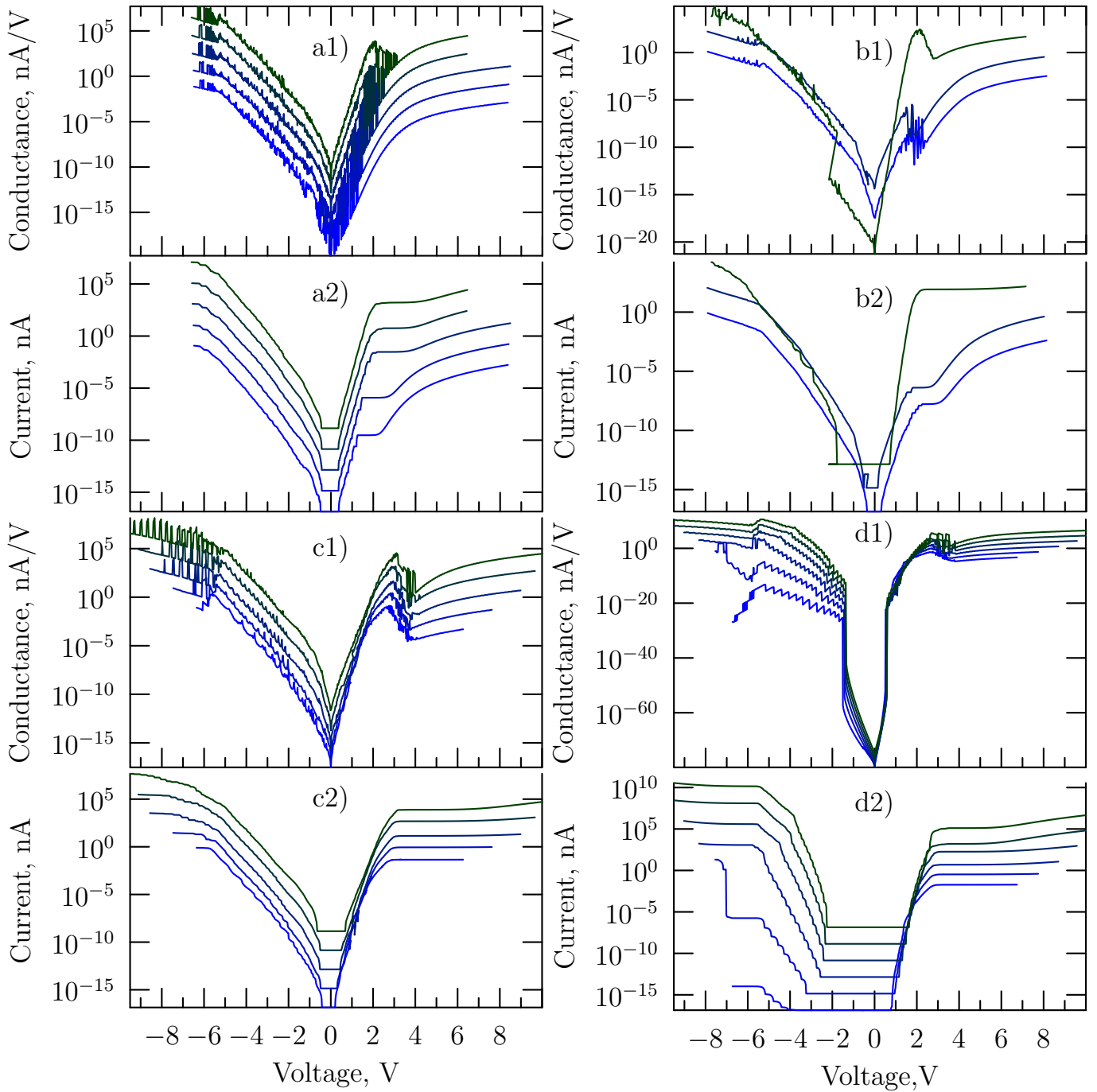


Рис. 8: Зависимости тока и проводимости от напряжения, при изменении различных параметров (синий - минимальная величина, зеленый - максимальная). А - зависимость от толщины олеиновой кислоты в диапазоне от 0.04 нм 0.24 нм с шагом 0.04 нм. В - зависимость от концентрации, увеличенной в 1,10,100,1000 раз. С - зависимость от длины центральной части CdTe: от 10 до 50 нм с шагом 10 нм. D - зависимость от угла между ножками от 96° до 151° с шагом 22° при температуре $T=0\text{K}$. В серии каждый следующий домножен на 100

4.3 Ускорение

Для меньших затрат по времени запускалась упрощенная версия из 20 точек ВАХ (вместо стандартных 1000 из-за большого времени расчета 16 часов), но это не должно влиять на ускорение от внутренней параллелизации, т.к. оно идет внутри каждой точки (но в зависимости от поля время расчета одной точки может различаться (max - в 5 раз)). Из-за большого количества пересылок при подсчете перераспределения внутренняя параллелизация выгодна только если процессоры на одном узле. Поэтому в нее вводится не более 8 процессоров и была введена внешняя параллелизация при числе процессоров >8 . Она не так эффективна из-за разного времени расчета одной точки ВАХ. Также на графике имеются скачки из-за расчета невозможности равномерного распределения 20 точек по $[N/8]$ группам, где N - число процессоров.

На графиках видно почти линейное ускорение до 8 процессоров (в рамках одного узла), далее точки только с числа процессоров, которые возможно разбить на группы по 8 (на узле), ускорение перестает меняться линейно. При большом числе точек ВАХ скачки связанные с неравномерностью деления по группам исчезнут. При запуске на $2*8=16$, $4*8=32$, $5*8=40$, $10*8=80$ ускорение при 20 точках ВАХ наиболее эффективно (т.к. удалось разделить 20 точек на равные группы). Это видно на графике ускорения.

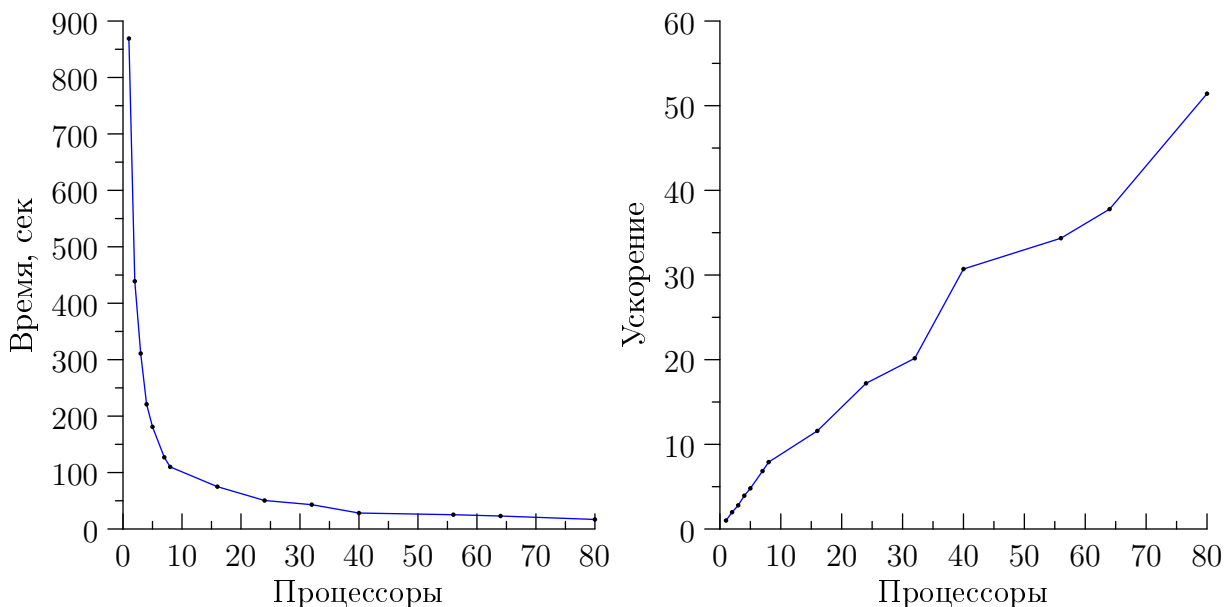


Рис. 9:

5 Выводы

В результате работы построена квазиодномерная модель транспорта электронов через нанокристаллы тетраподов CdSe/CdTe. На графиках проводимости обнаружены скачки, которые видны как небольшие ступеньки на ВАХах. Обнаружено что угол между ножками влияет на симметрию ВАХов, при этом при углах около 90 градусов отношение токов при разной полярности может достигать 10^{10} .

На графиках ВАХов присутствует большая ступенька в районе 2 — 5 В, ее положение зависит в основном от толщины барьера из олеиновой кислоты. По ступеньке на экспериментальном графике можно установить что в точке снятия ВАХ присутствовал тетрапод и выделить экспериментальные ВАХи, характерные для тетраподов.

Задача хорошо распараллеливается двойной параллелизацией, так как наиболее долгую часть - перераспределение зарядов можно ускорять линейно (просто разбивая сетку), расчет

туннелирование ускоряется, как $N/(\log_2(N) + 2)$, но время работы в последовательной программе на порядок меньше, чем у перераспределения (утверждение верно, когда процессоры находятся на одном узле). Время выполнения остальных последовательных частей программы на несколько порядков меньше. Внешняя параллелизация позволяет хорошо ускорить при запуске на числе процессоров число на одном узле при большом числе требуемых точек. Достигнуто ускорение в 55 раз на 80 процессорах.

Список литературы

- [1] C. Canali, F. Nava, G. Ottaviani, and C. Paorici. Hole and electron drift velocity in CdSe at room temperature. *Solid State Communications*, 11(1):105–107, 1972.
- [2] Yi Cui, Uri Banin, Mikael T Björk, and A Paul Alivisatos. Electrical transport through a single nanoscale semiconductor branch point. *Nano letters*, 5(7):1519–1523, 2005.
- [3] Liang Fang, Jeong Young Park, Yi Cui, Paul Alivisatos, Joshua Shcrier, Byounggak Lee, Lin-Wang Wang, and Miquel Salmeron. Mechanical and electrical properties of CdTe tetrapods studied by atomic force microscopy. *The Journal of Chemical Physics*, 127(18):–, 2007.
- [4] Liberato Manna, Delia J Milliron, Andreas Meisel, Erik C Scher, and A Paul Alivisatos. Controlled growth of tetrapod-branched inorganic nanocrystals. *Nature materials*, 2(6):382–385, 2003.
- [5] K.D. Sattler. *Handbook of Nanophysics: Nanoparticles and Quantum Dots*. Handbook of Nanophysics. CRC Press, 2010.
- [6] S.M. Sze. *Physics of Semiconductor Devices*. Wiley-Interscience publication. John Wiley & Sons, 1981.
- [7] Roman B. Vasiliev, Dmitry N. Dirin, Maria S. Sokolikova, Vladimir V. Roddatis, Alexander L. Vasiliev, Alexei G. Vitukhnovsky, and Alexander M. Gaskov. Facet-selective growth and optical properties of CdTe/CdSe tetrapod-shaped nanocrystal heterostructures. *Journal of Materials Research*, null:1621–1626, 2011.
- [8] Shôji Yamada. On the Electrical and Optical Properties of p-type Cadmium Telluride Crystals. *Journal of the Physical Society of Japan*, 15(11):1940–1944, 1960.