И.Е. МАРОНЧУК, д.т.н., директор НИЦ НФНМиРТЭ СНУЯЭиП,
Севастополь,

И.И. МАРОНЧУК, к.т.н., зав. НИЛ ПФиНТЭ СНУЯЭиП,
Севастополь,

А.Н. ПЕТРАШ, ст. преп. СНУЯЭиП, Севастополь

NANO-S: ПАКЕТ ДЛЯ РАСЧЕТА ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ СПЕКТРОВ ЭЛЕКТРОНОВ В НАНОГЕТЕРОСТРУКТУРАХ С КВАНТОВЫМИ ТОЧКАМИ

Описан пакет Nano-S, предназначенный для расчета энергетических спектров электронов в наногетероструктурах с ограниченным числом степеней свободы. Кратко рассмотрены математические модели таких структур в приближении эффективной массы. Указываются основные методы численного решения нелинейных алгебраических и дифференциальных уравнений, появляющихся в результате решения уравнения Шредингера с соответствующим модельным потенциалом, которые реализуются в пакете. Библиогр.: 11 назв.

Ключевые слова: наногетероструктуры, модель, уравнение Шредингера.

Постановка проблемы. Полупроводниковые наногетероэпитаксиальные структуры с квантовыми точками [1] привлекают все большее внимание исследователей в связи с перспективами создания на их основе новых поколений существующих приборов, например, солнечных батарей 3-го поколения с эффективностью свыше 50 % [2], а также приборов нанoeлектроники. Электронные процессы в таких материалах нельзя описать на основе представлений о газе квазичастиц, которые используются для описания электронных процессов в твердом теле, а технология получения материалов с закономерно расположенными квантоворазмерными объектами требует разработки новых нестандартных, самоорганизующихся процессов, которые не используются в технологии получения обыкновенных кристаллов и эпитаксиальных структур. Большое количество экспериментальных данных, полученных в последнее время, требует теоретического осмысления, что, в свою очередь, выражается в построении соответствующих адекватных математических моделей. Подавляющее большинство таких моделей основывается на численном решении уравнения Шредингера для различных потенциалов, а также трансцендентных уравнений, которые появляются в процессе теоретического анализа. Удобнее всего представлять полученные результаты в графической форме. Возникает необходимость создания пакета, позволяющего рассчитывать энергетические спектры электронов, находящихся в квантовых точках различных размеров и разной геометрией.

Анализ литературы. В настоящее время имеется много пакетов для моделирования процессов, происходящих в наноструктурах. Рассмотрим наиболее популярные из них. Одним из таких пакетов является QUANTUM ESPRESSO (QE) [3]. Его код основывается на теории функционала плотности, расчеты ведутся с использованием теории псевдопотенциала в базисе плоских волн. На аналогичных принципах основан другой, не менее популярный пакет ABINIT [4]. Оба эти пакета позволяют рассчитать общую энергию, плотность заряда и электронную структуру систем электронов и атомов, таких как молекулы и твердые тела. Кроме того, эти пакеты, используя функционал плотности, позволяют оптимизировать геометрию и вычислить силы, действующие в этих системах, провести моделирование методом молекулярной динамики.

Однако, несмотря на большие возможности, оба пакета обладают рядом недостатков, затрудняющих их использование исследователями-экспериментаторами при создании новых материалов с квантоворазмерными структурами. Во-первых, не всегда требуются такие громоздкие вычисления на основе теории псевдопотенциала. Часто бывает достаточно рассмотреть эмпирические и более простые по своей сути модели, например, в приближении эффективной массы. Во-вторых, для работы с такими пакетами необходимы хорошие навыки работы в UNIX-системах, в частности, необходимо уметь работать в командной строке (например, в `bash`), уметь программировать в такой оболочке хотя бы на начальном уровне. Наконец, у всех пакетов практически отсутствует графический интерфейс. Правда, для QE имеется написанный на Tcl интерфейс, который позволяет упростить процесс ввода данных для этого пакета. Тем не менее, для визуализации полученных результатов приходится применять другие пакеты, такие как GNUPLOT или GRACE. Для обучения сотрудников навыкам работы с этими пакетами необходимо определенное время, что негативно сказывается на скорости проведения исследований. Все это подвигло нас разработать визуальный, интуитивно понятный, быстрый пакет для расчетов энергетических спектров электронов на основе простых, но достаточно правдоподобных моделях структур с квантоворазмерными объектами.

Целью статьи является описание разработанного в НИЛ "Прикладной физики и нанотехнологий в энергетике" СНУЯЭиП пакета Nano-S, предназначенного для расчета энергетического спектра носителей зарядов в различных низкоразмерных структурах, таких как квантовые ямы, нити или точки, с различной геометрией поверхности, а также для моделирования физических процессов, происходящих в таких

наноструктурах. Наши вычисления основываются на эмпирических моделях таких квантовых объектов в приближении эффективной массы.

Математическая модель. Движение носителей зарядов (электронов, дырок) в полупроводниковых низкоразмерных структурах в приближении эффективной массы описывается уравнением Шредингера [5, 6]

$$\Delta\psi(\vec{r}) + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(\vec{r})]\psi(\vec{r}) = 0. \quad (1)$$

Здесь $\psi(\vec{r})$ – волновая функция электрона, m – его эффективная масса, E – его полная энергия, а $U(\vec{r})$ – потенциал ямы, в которой находится электрон. Как обычно $\hbar = h/(2\pi)$, а h – постоянная Планка, Δ – оператор Лапласа.

Для разных моделей наногетероструктур используются различные выражения для потенциала $U(\vec{r})$. Кроме того, в зависимости от удерживаемых степеней свободы для соответствующих объектов уравнение (1) будет представлять собой уравнение с одной, двумя или тремя степенями свободы. Ниже мы кратко опишем основные модельные потенциалы и укажем те численные методы решения уравнения Шредингера, которые используются в описываемом пакете.

Наибольший интерес для исследователей, занимающихся созданием материалов с низкоразмерными структурами, представляют такие наноструктуры как квантовые точки. Под квантовыми точками мы будем понимать такие объекты, размеры которых сравнимы с де-бройлевской длиной волны электрона. Сам электрон не имеет вообще степеней свободы. Он находится в соответствующей квантовой яме. Параметры ямы такие, как ее глубина, геометрия, могут быть заданы аналитическим или численным видом потенциала $U(\vec{r})$, а также симметрией всего уравнения (1).

Самым простым является случай квантовой точки в виде прямоугольного параллелепипеда с длинами ребер a , b и c . В случае бесконечно глубокой ямы задача допускает точное решение [5]. Для ямы конечной глубины U_0 уровни энергии находятся из следующего трансцендентного уравнения [6]

$$\arcsin \frac{k\hbar}{\sqrt{2mU_0}} = \frac{ka - \pi n}{2}, \quad (2)$$

где $k = \sqrt{2mE} / \hbar$, $n = 1, 2, \dots$ – номер энергетического уровня. Это уравнение легко может быть решено с помощью метода Ньютона. Аналогично считаются уровни энергии для мод вдоль двух других осей. Сумма энергий, рассчитанных для всех трех удерживаемых степеней свободы, и есть энергетический уровень электрона в такой квантовой точке.

Для цилиндрической квантовой нити бесконечной длины задача нахождения уровней энергии сводится к решению уравнения [7]

$$\frac{kJ_0'(kR)}{J_0(kR)} = \frac{\kappa K_0'(\kappa R)}{K_0(\kappa R)}, \quad (3)$$

где J_0, K_0 – функции Бесселя и Макдональда нулевого порядка соответственно, R – радиус нити, а

$$\kappa^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}, \quad k^2 = \frac{2m(U_0 - |E|)}{\hbar^2}, \quad (4)$$

U_0 – глубина ямы. Для численного решения уравнения (3) необходимо уметь вычислять функции Бесселя и Макдональда и их производные. Такие алгоритмы широко известны.

Если же мы рассматриваем квантовую нить конечной длины и, особенно, квантовую точку, где высота цилиндра сравнима с его радиусом основания, необходимо численно решать соответствующую краевую задачу на собственные значения. Удобным в этом случае оказывается метод пристрелки.

В случае сферической квантовой точки уровни энергии, помимо главного квантового числа n , характеризуются еще угловым l и магнитным m квантовыми числами. Для $m = 0$, $l = 0$ уровни энергии могут быть получены из следующего трансцендентного уравнения [8]

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2md^2} \left(n - \frac{1}{\pi} \arctg \sqrt{\frac{E}{U_0 - E}} \right)^2. \quad (5)$$

Здесь d – диаметр сферической квантовой точки. Аналогичные выражения могут быть найдены для случаев с другими значениями указанных квантовых чисел.

Во всех указанных выше моделях предполагается, что на границе наноструктуры потенциал возрастает скачком с нулевого значения до U_0 . Более реалистические модели требуют изменения поведения соответствующего потенциала. Пусть r – характерный размер квантовой

точки, в зависимости от которого необходимо найти энергетический спектр электрона. Часто используется так называемый параболический потенциал

$$U(r) = \frac{m\omega^2 r^2}{2}, \quad (6)$$

широко известный из теории квантового гармонического осциллятора [5, 6]. Параметр ω здесь выбирается так, чтобы на границе квантовой точки потенциал равнялся бы U_0 . В разное время были предложены другие модельные потенциалы. Среди них:

– потенциал Пешля-Теллера [9]

$$U(r) = -\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} \frac{\lambda(\lambda-1)}{\text{ch}^2 \alpha r}, \quad (7)$$

где безразмерный параметр $\lambda > 1$, и параметр α , с размерностью обратной длине, определяют вместе глубину и ширину потенциальной ямы;

– гауссов потенциал [10]

$$U(r) = -U_0 \exp\left(-\frac{r^2}{2R^2}\right), \quad (8)$$

где R – область действия потенциала удержания, U_0 – глубина ямы;

– потенциал де Филиппо-Салерно [11]

$$U(r) = -\frac{U_0}{(1 + r^2 / R^2)^2}, \quad (9)$$

где параметр R является настроечным.

Эти потенциалы на малых расстояниях ведут себя как параболический (6), а на больших расстояниях асимптотически приближаются к нулю. В описываемом нами пакете все эти потенциалы реализованы.

Описание пакета Nano-S. Пакет для моделирования электронных процессов в низкоразмерных квантовых структурах написан на языке C++. Интерфейс был создан с использованием библиотек Qt. Кроме того, для отображения графиков зависимости уровней энергии от размера квантовой точки использовались дополнения для Qt, а именно библиотеки QWT. Все это позволило создать кросс-платформенное приложение, которое с одинаковой легкостью может быть скомпилировано под операционными системами Windows, Linux и MacOS. Пакет должен собираться и под другими операционными

системами, куда портированы библиотеки Qt, однако мы явно это не проверяли.

Необходимость написания такого кросс-платформенного приложения была продиктована разными задачами, решаемыми в нашей лаборатории. Как уже указывалось выше, под ОС Linux имеется ряд пакетов (Quantum Espresso, Abinit), предназначенных для расчета электронных процессов, происходящих в твердых телах методом псевдопотенциала, другими более сложными методами. Так как Nano-S может работать под ОС Linux, исследователь имеет возможность сравнить результаты вычислений в приближении эффективной массы, на котором основан описываемый пакет, с результатами более сложных и громоздких вычислений, предоставляемых сторонними пакетами. В результате такого сравнения можно делать вывод об адекватности соответствующей модели.

С другой стороны, управление лабораторными установками, снятие и обработка результатов измерений происходит с помощью компьютеров, на которых установлена ОС Windows. Имея возможность запустить пакет Nano-S, экспериментатор, работающий в этой системе, может также проверить согласованность различных моделей, использующих различные потенциалы, с экспериментальными данными и в результате этого подобрать наилучшее приближение модели к эксперименту.

Интерфейс пакета разрабатывался с учетом пожеланий сотрудников лаборатории. Мы стремились сделать его интуитивно понятным для любых исследователей, в том числе и для тех, которые имеют низкий уровень компьютерной подготовки.

В верхнем левом углу расположены два выпадающих списка, позволяющих выбрать материал, из которого изготовлена квантовая точка, а также материал матрицы, в которой эта точка была выращена. Мы предусмотрели также идеальные случаи бесконечно глубоких ям и ввели соответствующий бесконечный потенциал. Пользователь может вручную ввести данные для соответствующих объектов. Для этого имеются соответствующие переключатели, блокирующие выпадающие списки и активирующие поля ввода.

В пакете реализованы расчеты энергетического спектра квантовых точек с разной геометрией (кубической, цилиндрической, сферической, пирамидальной, эллиптической). Для выбора соответствующей модели имеется выпадающий список, расположенный ниже элементов управления для выбора материалов структур. Для каждой модели имеются свои параметры, характеризующие энергетический спектр. Соответствующие поля ввода для параметров расчета автоматически

активируются в зависимости от типа модели. Для линейного размера нужно указать параметр изменения и, опционально, шаг.

По нажатию кнопки "Рассчитать спектр" производятся соответствующие вычисления, которые отображаются в таблице, и строится график. Таблицу с данными можно сохранить в виде текстового файла для последующей обработки в других программах. График также можно сохранить в виде графического файла. Стоит отметить, что параметры графика, такие как цвет, толщина, тип линии, являются настраиваемыми.

Выводы. Описан пакет Nano-S, разработанный и широко используемый в НИЛ "Прикладной физики и нанофизики в энергетике" СНУЯЭиП. За все время использования он показал себя как эффективный помощник сотрудникам лаборатории, которые занимаются получением и исследованием наногетероэпитаксиальных структур, на основе которых впоследствии создаются высокоэффективные солнечные элементы 3-го поколения. Проводимые на нем расчеты позволяют упростить подход к выбору необходимых для проведения технологических процессов материалов подложки, квантовых гетероструктур, их размеров и геометрии. Пакет легко может быть скомпилирован под разные платформы, включая такие популярные как Windows и Linux. Для работы с пакетом не требуется подключения к сети Internet, что позволяет установить его на локальный компьютер оператора, управляющего определенной исследовательской установкой. Пакет позволяет легко интегрировать в себя дополнительные программные модули. Это открывает широкие перспективы к его дальнейшему совершенствованию и наполнению другими, еще не представленными в нем, функциями.

Список литературы: 1. *Knoss R.W.* Quantum dots: research, technology and applications / *R.W. Knoss.* – New York: Nova Science Publ. – 2009. – P. 708. 2. *Cuadra L.* Intermediate band photovoltaic overview / *L. Cuadra, A. Marti, N. Lopez, A. Luque.* – Proceedings of 3rd World Conference on Photovoltaic Energy Conversion, Osaka, Japan. – 2003. – V. 1. – P. 3-8. 3. *Gianozzi P.* QUANTUM ESPRESSO: a modular and open source software project for quantum simulations of materials / *P. Gianozzi* // *J. Phys.: Condes. Matter.* – 2009. – V. 21. – № 39. – 395-502. 4. *Gonze X.* ABINIT: first-principle approach to material and nanosystem properties / *X. Gonze* // *Computer. Phys. Comm.* – 2009. – V. 180. – P. 2582-2615. 5. *Ландау Л.Д.* Квантовая механика / *Л.Д. Ландау, И.М. Лифшиц.* – М.: Наука, 1989. – 768 с. 6. *Давыдов А.С.* Квантовая механика / *А.С. Давыдов.* – М.: Наука, 1973. – 704 с. 7. *Flügge S.* Practical quantum mechanics / *S. Flügge.* – Springer, 1999. – 640 p. 8. *Смирнов С.Б.* Расчет энергетического спектра S-электронов сферической квантовой точки на основе узкозонных полупроводниковых соединений A^{III}B^V в матрице GaP / *С.Б. Смирнов, И.Е. Марончук, И.И. Марончук, А.Н. Петраш* // Сб. науч. трудов СНУЯЭиП. – 2011. – № 1 (37). – С. 95-101. 9. *Pöschl G.* Bemerkungen zur Quantenmechanik des anharmonischen Oszillators / *G. Pöschl, E. Teller* // *Zeitschrift für Physik.* – 1933. – V. 83. – №. 3-4. – P. 143-151. 10. *Adamowski J.* Electron pair in

a Gaussian confining potential / *J. Adamowski, M. Sobkowicz, B. Szafran, S. Bednarek* // Physical Review. – 2000. – V. 62. – № 7. – P. 4234-4237. **11.** *De Filippo S.* Spectral properties of a model potential for quantum dots with smooth boundaries / *S. De Filippo, M. Salerno* // Physical Review. – 2000. – V. 62. – № 7. – P. 4230-4233.

УДК 530.145.61

Nano-S: пакет для розрахунку енергетичних спектрів електронів в наногетероструктурах с квантовими точках / Марончук І.С., Марончук І.І., Петраш О.М. // Вісник НТУ "ХПІ". Тематичний випуск: Інформатика і моделювання. – Харків: НТУ "ХПІ". – 2011. – № 17. – С. 93 – 100.

Описан пакет Nano-S, який призначений для розрахунку енергетичних спектрів електронів в наногетероструктурах с обмеженою чисельністю степенів свободи. Кратко розглянуті математичні моделі таких структур у приближенні ефективної маси. Вказуються основні методи чисельного розв'язування нелінійних алгебраїчних та диференціальних рівнянь, які з'являються в результаті рішення рівняння Шредінгера з відповідним модельним потенціалом, які реалізуються у пакеті. Бібліогр.: 11 назв.

Ключові слова: наногетероструктури, модель, рівняння Шредінгера.

UDC 530.145.61

Nano-S: a package for modeling of electron processes in nanoheterojunctions with quantum dots/ Maronchuk I.E., Maronchuk I.I., Petrash A.N. // Herald of the National Technical University "KhPI". Subject issue: Information Science and Modelling. – Kharkov: NTU "KhPI". – 2011. – №. 17. – P. 93 – 100.

A package Nano-S intended for calculation of an energy spectrum of electrons in nanoheterojunctions with limited numbers of degrees of freedom are described. Mathematical models of low dimensional structures in effective mass approximation are shortly considered. Main methods of a numerical solution of non-linear algebraic and differential equations that appeared in a solving Schrödinger equation with appropriate model potential that released in the package are pointed. Refs.: 11 titles.

Key words: nanoheterojunctions, model, Schrödinger equation.

Поступила в редакцію 15.02.2011