

УДК 538.9

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР ЭЛЕКТРОНОВ В КВАНТОВОЙ НИТИ ПЕРЕМЕННОГО СЕЧЕНИЯ Si/SiO₂

К. ф.-м. н. С. И. Болдырев, К. Я. Исакова, к. ф.-м. н. Д. Л. Ника

Молдавский государственный университет
Молдова, г. Кишинев

sergbold@yahoo.com, isacova.calina@gmail.com, dlrika@yahoo.com

Исследован энергетический спектр электрона в кремниевых квантовых нитях переменного сечения. Было показано, что диэлектрические обкладки понижают энергию электрона, но слабо влияют на дисперсию. В свою очередь, изменение геометрии нанонитей влияет на дисперсию энергии электрона.

Ключевые слова: квантовые нити, кремний, электроны, энергетический спектр.

В последние годы исследованию физических свойств наноразмерных полупроводниковых структур уделялось большое внимание [1—3]. Их характерной чертой является конфинмент, который вызывает квантование энергетического спектра носителей заряда и фононов [3—5]. В данной работе была рассмотрена квантовая нить, состоящая из проводящего кремниевого канала переменного сечения, покрытого слоем диэлектрика SiO₂ (см. рис. 1). Электронный энергетический спектр данной нити был определен путем численного решения уравнения Шредингера в одноэлектронном приближении с использованием метода эффективной массы. Была учтена анизотропия эффективной массы в кремнии, а также разница эффективных масс между каналом и обкладкой. При использовании метода конечных разностей для решения уравнения Шредингера, задача сводилась к решению однородной системы линейных алгебраических уравнений относительно значений электронной волновой функции в рассматриваемых дискретных точках координатного пространства периодического элемента нити переменного сечения. Расчеты проводились при шаге дискретности 0,10 нм, одинаковом в направлениях X, Y, Z. Значения эффективных масс считали равными $m_x=0,916 m_0$, $m_y=m_z=0,19 m_0$ [6], где m_0 — масса свободного электрона в вакууме. Эффективная масса оксида кремния m изотропна и равна m_0 . Значения потенциальных барьеров на границах Si/SiO₂, SiO₂/вакуум, Si/вакуум принимали равными $V_1=3,2$ эВ, $V_2=5$ эВ, $V_3=4,2$ эВ [6], соответственно.

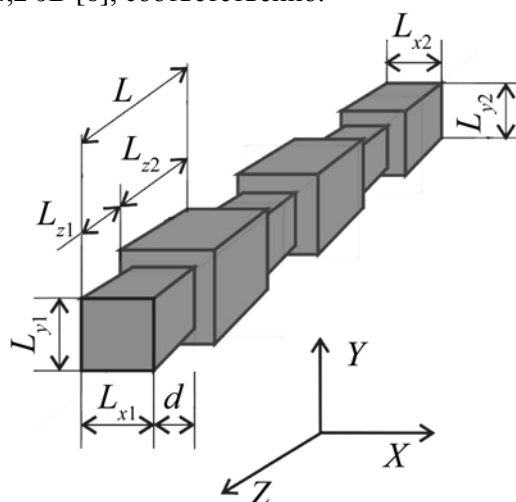


Рис. 1. Схематическое изображение исследуемой квантовой нити

Сравнение дисперсионных зависимостей энергий нижайших размерно-квантованных состояний, приведенных на рис. 2, иллюстрируют влияние обкладок и размеров нити на энергетический спектр. Из рис. 2, а и б видно, что обкладки практически не влияют на дисперсию уровней, но пони-

жают ее на 100—200 мэВ, что объясняется более низким потенциальным барьером на границе Si/SiO₂ по сравнению с границей SiO₂/вакуум. Расчеты показали, что дальнейшее увеличение толщины обкладки слабо влияет на энергетический спектр электрона. На рис. 2, *b* и *c* приведены энергетические спектры при различных соотношениях широкого и узкого «горла» проводящего кремниевого канала в зависимости от волнового вектора q . При небольшом значении ширины узкого горла электрон в основном локализован в широком сегменте нити, и наблюдается слабая дисперсия уровней энергии. С расширением узкого горла всё меньше электронов остаются локализованными в широкой части, и дисперсия энергии электрона вдоль оси Z возрастает. При этом уровни энергии понижаются, а их дисперсия увеличивается.

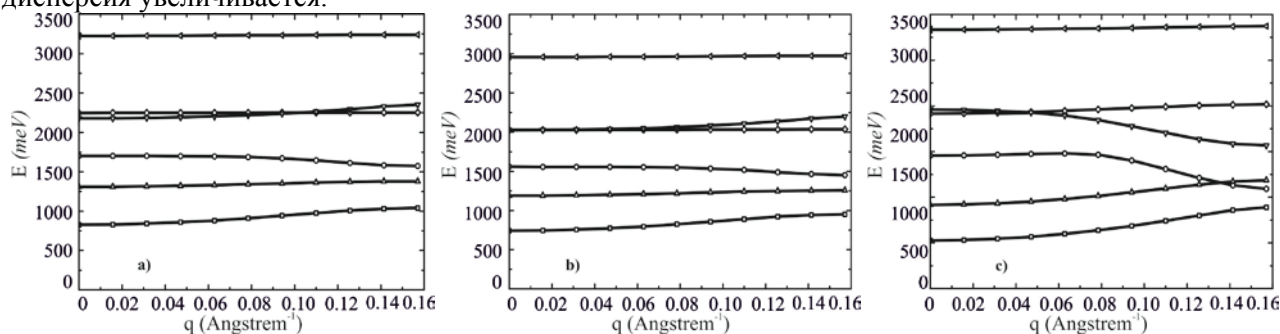


Рис. 2. Нижайшие уровни энергии электрона в нити переменного сечения, показанной на рис. 1:

- a)* $L_x=2$ нм, $L_{x1}=1$ нм, $L_z=2$ нм, $L_{z1}=1$ нм, $d=0$ нм; *b)* $L_x=2$ нм, $L_{x1}=1$ нм, $L_z=2$ нм, $L_{z1}=1$ нм, $d=4$ нм;
c) $L_x=2$ нм, $L_{x1}=1,4$ нм, $L_z=2$ нм, $L_{z1}=1$ нм, $d=0$ нм

Наши результаты показывают, что изменение размеров и геометрии нити переменного сечения, позволяет существенно влиять на ее свойства, определяемые электронными состояниями.

Авторы выражают благодарность за частичную финансовую поддержку в рамках исследовательских проектов Республики Молдова 11.817.05.10F и 14.820.18.02.012 и STCU.A/5937 фонда STCU (Project #5937).

ИСПОЛЬЗОВАННЫЕ ИСТОЧНИКИ

1. Kahill D. G., Ford W. K., Goodson K. E., Mahan G. D., Majumdar A., Maris H. J., Merlin R., Phillport S. P. Nanoscale thermal transport // *J. Appl. Phys.*— 2003.— Vol. 93.— P. 793.
2. Balandin A. A., Pokatilov E. P., Nika D. L. Phonon engineering in hetero- and nanostructures // *J. Nanoelectron. Optoelectron.*— 2007.— Vol. 2.— P. 140.
3. Balandin A. A. Thermal properties of graphene and nanostructured carbon materials // *Nature Materials.*— 2011.— Vol. 10.— P. 569.
4. Nika D. L., Pokatilov E. P., Shao Q., Balandin A. A. Charge-carrier states and light absorption in ordered quantum dot superlattices // *Phys. Rev. B.*— 2007.— Vol. 76.— P. 125417.
5. Pokatilov E. P., Nika D. L., Balandin A. A. Acoustic-phonon propagation in rectangular semiconductor nanowires with elastically dissimilar barriers // *Phys. Rev. B.*— 2007.— Vol. 72.— P. 113311.
6. Yassievich I. N., Moskalenko A. S., Prokofiev A. A. Confined electrons and holes in Si nanocrystals: Theoretical modeling of the energy spectrum and radiative transitions // *Materials Science and Engineering C.*— 2007.— Vol. 27.— P. 1386–1389.

S. I. Boldyrev, C. I. Isacova, D. L. Nika

Electron energy spectra of cross-section-modulated silicon nanowires with dielectric Si/SiO₂ coating.

Authors have theoretically investigated electron energy spectra and wave functions in cross-section-modulated silicon nanowires with dielectric coatings. It has been shown that dielectric coatings can reduce the electron energy, but have little influence on the dispersion. In its turn, changing the geometry of nanowires affects electron energy dispersion.

Keywords: *quantum wires, silicon, electrons, energy spectra.*