

Министерство образования Республики Беларусь
Учреждение образования
Белорусский государственный университет
информатики и радиоэлектроники

УДК _____

Яцыно
Дмитрий Александрович

Структура и электронные свойства полупроводниковых наношнуров

АВТОРЕФЕРАТ

на соискание степени магистра технических наук
по специальности 1-41 80 03 «Нанотехнологии и наноматериалы (в
электронике)»

Научный руководитель

Мигас Дмитрий Борисович

д. ф.-м. наук, профессор

Минск 2015

КРАТКОЕ ВВЕДЕНИЕ

Полупроводниковые нанощнуры соединений $A^{III}-B^V$ являются уникальными структурами для исследования квантоворазмерных эффектов, а также представляют собой готовые элементы для изготовления электронных и оптоэлектронных приборов нового поколения, которые характеризуются высокой подвижностью носителей заряда и прямозонным характером запрещенной зоны с первым прямым переходом, обладающим большой силой осцилляторов. В частности, нанощнуры арсенида индия (InAs) нашли широкое применение при изготовлении контактов интегральных схем, высокочастотных одноэлектронных транзисторов, солнечных элементов, светоизлучающих диодов, лазеров. Получают полупроводниковые нанощнуры с помощью таких известных методов, как молекулярно-лучевая эпитаксия, химическое осаждение, лазерная абляция и высокотемпературный синтез, используя механизм роста пар-жидкость-твердое тело или пар – твердое тело. Однако зависимость электронных свойств от морфологии нанощнуров арсенида индия до конца не изучена и существуют противоречивые данные теоретических исследований.

Актуальность данной магистерской диссертации обусловлена всевозрастающим применением наноструктур в современной микро- и нанoeлектронике, вследствие проявления новых эффектов в свойствах по сравнению с объёмными материалами. В результате постоянной миниатюризации размеры элементов микросхем и приборов приближаются к нанометровым, поэтому использование полупроводниковых нанощнуров выглядит вполне логичным и закономерным шагом.

Диссертационная работа посвящена теоретическому исследованию структуры и электронных свойств полупроводниковых нанощнуров InAs. В данной работе предложена новая морфология $\langle 111 \rangle$ -ориентированных нанощнуров InAs со структурой цинковой обманки, которая кардинально влияет на их электронные свойства и является не только более стабильной за счет уменьшения плотности оборванных связей на поверхности, но и приводит к энергетическому спектру без образования локализованных зон, ассоциированных с поверхностными состояниями, в районе запрещенной зоны. Следует отметить, что объёмный материал соединения InAs имеет структуру только цинковой обманки, а нанощнуры данного соединения могут кристаллизоваться, как в структуре цинковой обманки, так и в структуре вюрцита. Для нанощнуров структура вюрцита становится более стабильной из-за меньшей плотности оборванных связей на поверхности нанощнуров по сравнению со структурой цинковой обманки. В данной магистерской диссертации нанощнуры со структурой вюрцита рассматривать-

ся не будут. Полученные данные о структуре и фундаментальных электронных свойствах полупроводниковых нанопроволок InAs могут быть использованы для проектирования новых приборов опто- и наноэлектроники, а также усовершенствования уже существующих устройств на их основе.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Связь работы с крупными научными программами и темами

Данная диссертационная работа на тему «Структура и электронные свойства полупроводниковых нанопроволок InAs» соответствует отрасли технических наук. Работа выполнялась на кафедре микро- и наноэлектроники Белорусского государственного университета информатики и радиоэлектроники в рамках НИР: «Исследование взаимосвязи структурных и электронных свойств в нанопроволоках GaAs, GaP, GaSb, InAs, InP и InSb» (по договору с Белорусским республиканским фондом фундаментальных исследований №Ф14У-001).

Цель и задачи исследования

Целью работы является установление особенностей атомной структуры и фундаментальных электронных свойств нанопроволок InAs для их использования в новых приборах опто- и наноэлектроники.

Для достижения поставленной цели необходимо решить следующие задачи:

- провести анализ состояния и перспектив использования полупроводниковых нанопроволок соединений группы $A^{III}-B^V$ и InAs, в частности, для создания нового поколения опто- и наноэлектронных приборов;
- выбрать и обосновать методы и методики моделирования атомной структуры и электронных свойств наноструктур полупроводниковых материалов;
- установить структурные особенности нанопроволок InAs и их влияние на фундаментальные электронные свойства нанопроволок;

Личный вклад магистранта

Личный вклад магистранта заключается в самостоятельной разработке структурных моделей $\langle 111 \rangle$ -ориентированных нанопроволок InAs, имеющих различную морфологию, и в проведении оптимизации структуры с последующим расчетом энергетического зонного спектра нанопроволок InAs,

а также в принятии участия в обсуждении полученных результатов и написании статей.

Апробация и опубликованность результатов диссертации

По теме диссертационной работы опубликована 1 статья в рецензируемом научном журнале «Доклады БГУИР», 1 статья принята к публикации в рецензируемом научном журнале «Nano Convergence» и 1 тезис докладов Международной научно-технической конференции, приуроченной 50-летию БГУИР. Все результаты, на основе которых сформулировано положение на защиту и выводы, базируются на публикациях и представлялись на научно-практических конференциях.

Структура и объем диссертации

Диссертационная работа состоит из перечня условных обозначений и терминов, общей характеристики работы, введения, четырех глав, заключения и списка использованных источников. Общий объем магистерской диссертации составляет 67 страниц, включая 47 иллюстраций, 6 таблиц, библиографический список из 42 наименований.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении и в общей характеристике работы обоснована актуальность темы диссертации и связь работы с приоритетными направлениями научных исследований, сформулированы цели и задачи исследований, даны сведения об объектах исследования и обоснован их выбор, степень разработанности темы и оценка современного состояния решаемой задачи, основание и исходные данные для разработки темы. Приведены сведения о личном вкладе магистранта, апробации результатов диссертации, их опубликованности, а также о структуре и объеме диссертации.

Первая глава носит обзорный характер. В ней приводится анализ как экспериментально полученных, так и теоретически рассчитанных свойств полупроводниковых нанощнуров соединений группы $A^{III}-B^V$. Особое внимание уделяется морфологии нанощнуров InAs, зависимости фундаментальных электронных свойств нанощнуров от структуры.

На основе анализа исходного состояния проблемы сформулирована цель работы и поставлены задачи исследований.

Во второй главе описаны методы и методика моделирования структурны и электронных свойств различных наноструктур. Дано краткое

представление о теории функционала электронной плотности, на основе которой разрабатывались методы из первых принципов. Детально рассмотрен метод псевдопотенциала, который реализован в программе VASP. Этот пакет зарекомендовал себя как надёжная и заслуживающая доверие программа для оптимизации структуры и расчёта их электронных свойств наноструктур.

В третьей главе представлены морфологические особенности $\langle 111 \rangle$ -ориентированных нанопроволок InAs с учётом образования различных граней на их поверхности, проведена оценка полной энергии нанопроволок с различными гранями, установлены зависимости их стабильности от исследуемой морфологии.

В четвертой главе для нанопроволок InAs рассмотрены особенности их энергетических зонных диаграмм в зависимости от формы сечения, реконструкции поверхности, пассивации водородом, а также проведена оценка переноса заряда.

Заключение по результатам выполненного исследования состоит из нескольких обобщающих пунктов, подводящих итог проведенной работы, и отражает возможные пути ее практического использования.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате выполнения магистерской диссертации было осуществлено теоретическое моделирование методами из первых принципов структуры и электронных свойств нанопроволок InAs, что позволило установить следующее положение:

Наличие небольших по размеру, но реконструированных $\{112\}$ граней на поверхности, играющих роль кромок между соседними $\{011\}$ гранями в $\langle 111 \rangle$ -ориентированных нанопроволках InAs с сечением шестигранника, приводит к существенному уменьшению полной энергии нанопроволок по сравнению с другими морфологиями и к отсутствию локализованных зон, ассоциированных с поверхностными состояниями, в районе запрещенной зоны в их энергетическом спектре, что позволяет исследовать полупроводниковые свойства нанопроволок InAs без пассивации водородом.

В дополнение к положению можно сделать следующие выводы по результатам проделанных вычислений:

– После проведения полной структурной оптимизации для $\langle 111 \rangle$ -ориентированных InAs нанопроволок независимо от морфологии выявлено, что изменения параметра решетки вдоль оси нанопроволки (a_{\parallel}) незначительны (не превышают 1% даже для наноструктур с небольшим диаметром), а

сами нанощнуры виртуально ограничены атомами мышьяка, так как поверхностные атомы мышьяка после релаксации смещаются наружу.

– Установлено, что электронные свойства $\langle 111 \rangle$ -ориентированных InAs нанощнуров изменяются от металлических до полупроводниковых в зависимости от их морфологии. Так отсутствие $\{112\}$ граней в виде кромок между каждыми соседними $\{011\}$ гранями, которые характеризуют поверхность InAs нанощнуров, приводит к появлению электронных состояний в запрещенной зоне, находящихся на уровне Ферми, и, как следствие, к металлическим свойствам. В то время как наличие $\{112\}$ граней обеспечивает полупроводниковый характер электронного энергетического спектра с первым прямым переходом, независимо от их диаметра.

– Обнаружено, что для нанощструктур с шестигранным сечением и основными $\{112\}$ гранями проявление металлического или полупроводникового характера электронного спектра зависит от размера сформированных $\{011\}$ граней на кромках.

– Проведенная оценка переноса заряда между атомами в объемном материале и нанощнурах арсенида индия, имеющих грани $\{011\}$, позволяет утверждать, что в объеме атомы индия отдают, а атомы мышьяка принимают $0,58e^-$. В случае нанощнуров перенос заряда практически такой же за исключением атомов, находящихся на поверхности и особенно атомов, формирующих димеры, где изменения могут достигать $0,20e^-$ от объемного значения.

– В случае наиболее стабильной морфологии $\langle 111 \rangle$ -ориентированных нанощнуров InAs, имеющих сечение шестигранника и основные грани $\{011\}$ с небольшими по размеру гранями $\{112\}$, играющими роль кромок между соседними гранями $\{011\}$, установлено, что грани $\{011\}$ заряжены положительно, а грани $\{112\}$ – отрицательно. Для нейтрализации заряда на поверхности нанощнуров, приповерхностная область приобретает отрицательный заряд, а внутренняя область нанощнуров характеризуется чередованием положительно и отрицательно заряженных областей. Подобный характер распределения заряда не зависит от диаметра нанощнура InAs.

– Также были проведены теоретические исследования влияния пассивации на зонную структуру нанощнуров InAs, в результате которого было установлено, что пассивация атомами водорода поверхности нанощструктур с и без димеров не приводит к существенному изменению ширины и характера запрещенной зоны.

Полученные результаты могут быть использованы для проектирования новых приборов опто- и наноэлектроники, усовершенствования уже

существующих устройств на их основе, а также дальнейшего исследования фундаментальных свойств таких наноструктур

СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ МАГИСТРАНТА ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Опубликована 1 статья в рецензируемом научном журнале «Доклады БГУИР»

Влияние морфологии на электронные свойства $\langle 111 \rangle$ -ориентированных GaAs, GaP, GaSb, InAs, InP и InSb нанопроволок / Д. А. Яцыно, Д. Б. Мигас, Я. С. Арситов, А. Б. Филонов, Б. С. Колосницын // Доклады БГУИР – 2015. – №3 (89). – С. 77-82

Принята к публикации 1 статья в рецензируемом научном журнале «Nano Convergence»

Role of edge facets on stability and electronic properties of III–V nanowires / Dmitri B. Migas, Andrew B. Filonov, Dmitri A. Yatsyna, Rusli and Cesare Soci // Nano Convergence – 2015. – P. (6)

Опубликован 1 тезис докладов Международной научно-технической конференции, приуроченной 50-летию БГУИР

Влияние морфологии на зонную структуру InAs и GaAs нанопроволок / Д. А. Яцыно, Я. С. Арситов, Д. Б. Мигас // Тезисы докладов Международной научно-технической конференции, приуроченной 50-летию БГУИР, – 2014. – С. 49-51