**Моделирование электронного транспорта в слое квантовых точек методом траекторий**

**Музыкина Е.А.**

студент, 2 курс магистратуры

Национальный Исследовательский Ядерный Университет «МИФИ»,институт нанотехнологий в электронике, спинтронике и фотонике, Москва, РоссияE–mail: kotya.muzykina@gmail.com

Гетероструктуры, содержащие слои квантовых точек или квантовых колец являются перспективными материалами для приборов электроники и фотоники – например, фотодетекторов, лазеров. При рассмотрении электронных транспортных свойств таких материалов важным этапом является моделирование рассеяния носителей заряда на наноструктурах. В частности, решение задачи рассеяния позволяет получить ток вероятности для электронов проводимости, его зависимость от энергии и вольт-амперную характеристику материала.

В данной работе предлагается решение нестационарного уравнения Шредингера, которое преобразовано в систему из уравнения непрерывности и уравнения, аналогичного уравнению Навье-Стокса для поля скоростей (1) [1, 2]. Данную систему можно решить методом траекторий, который позволяет перейти от полей к частицам. Рассматривается периодическая гетероструктура со слоем самоорганизованных квантовых колец или точек, в котором движутся частицы. Решение данной системы уравнений позволяет получить траектории движения частиц и поле скоростей.

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |
|  | (1) |
|  |

Вычисление квантового потенциала или потенциала Бома (2) является сложной задачей, так как он является нелинейным, существует неопределенность в точках, где плотность вероятности обращается в ноль, а также высокий порядок производных от плотности вероятности. В данной работе квантовый потенциал вычисляется аналитически как сумма волновых пакетов частиц (3). Для квантовых точек и квантовых колец используются функции Гаусса. Предложенный метод позволяет получить вольт-амперную характеристику гетероструктуры.



***Рис. 1.*** Слева: вольт-амперная характеристика, справа: подвижность.

Для расчетов и обработки данных написана программа на языке Rust. Пример результатов представлен на рисунке 1 – подвижность и вольт-амперная характеристика для случая с квантовым потенциалом и без него с рассеивающим потенциалом в виде квантовых точек. Видно, что в случае наличия квантового потенциала значения увеличиваются. Данный расчет проводился для 15 квантовых точек с амплитудой в 0,2 эВ, полушириной в 20 нм; полуширина волновых пакетов для расчета квантового потенциала – 10 нм.

|  |  |
| --- | --- |
|  | (2) |
|  | (3) |

Планируется проведение расчета с магнитным полем для интерпретации экспериментальных данных и исследования эффекта Ааронова-Бома.

**Литература**

1. Wyatt, Robert E. Quantum dynamics with trajectories : introduction to quantum hydrodynamics // USA, Springer Science+Business Media, Inc, 406 p.
2. V. Sverdlov, E. Ungersboeck, H. Kosina, S. Selberherr, Current transport models for nanoscale semiconductor devices // Materials Science and Engineering: R: Reports 2008. V. 58 (6). P. 228-270
3. D. Bohm, A suggested interpretation of the quantum theory in terms of “hidden” variables // Phys. Rev. 1952. V. 85 (166)
4. Ю.Д. Сибирмовский, Механизмы формирования, оптические и электронные транспортные свойства ансамблей квантовых колец GaAs/AlGaAs. Москва, 2018