

Суперкомпьютерное моделирование полупроводниковых квантовых наносистем*

О.А. Ткаченко, В.А. Ткаченко

Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН

При исследовании квантовых эффектов и электронного транспорта в наноструктурах требуется многократно решать задачи на больших сетках с варьированием двух и более внешних параметров. Эти вычисления эффективно распараллеливаются. Учет реальной геометрии структур или взаимодействия электронов позволил обнаружить новые физические эффекты: переключение направления тока в Y-разветвителе, флуктуации фазы и температурной зависимости осцилляций Ааронова-Бома в кольцевом интерферометре, появление дополнительной особенности кондактанса в микроконтакте, формирование фрактальных террас падения напряжения и точечное тепловыделение в разупорядоченной решетке антиотчек.

1. Введение

В разных областях науки и техники существует множество вычислительных задач, допускающих максимально эффективное распараллеливание, когда однократное решение базовой системы уравнений возможно на однопроцессорном компьютере с достаточно большими оперативной памятью и быстродействием. Полная задача в этом случае требует распределенного решения только из-за обилия значений внешних параметров, т.е. разнообразия начальных, граничных и других условий, входящих в основные уравнения. В настоящее время складывается смешанная технология вычислительных экспериментов, в которых основная часть рутинных расчетов передается кластерным суперЭВМ путем простого распараллеливания, когда каждый процессор независимо от других выполняет серию однотипных заданий. Таким образом, суперкомпьютер становится существенной частью вычислительного эксперимента, тогда как персональный компьютер остается незаменимым для выполнения интерактивных предварительных и завершающих прикладных расчетов. В данной работе мы рассмотрим ряд примеров на эту тему из области, представляющей стык между полупроводниковыми нанотехнологиями и физикой наноструктур.

Основная физика квантовых эффектов и электронного транспорта в полупроводниковых наноструктурах схватывается достаточно простыми универсальными моделями, на основе которых можно получить много интересных результатов [1–4]. При моделировании эффектов, наблюдаемых в эксперименте, приходится многократно выполнять многопараметрические расчеты с решением одномерных, двумерных и трехмерных уравнений Шредингера, Пуассона или Кирхгоффа. Варьирование таких управляющих параметров, как энергия квазичастиц, магнитное поле, химпотенциал, затворное напряжение и температура допускает эффективное распараллеливание. В этих случаях с помощью кластерных суперЭВМ нами получены результаты, которые отчасти представлялись в [5–10] и приводятся здесь в сводном виде вместе с некоторыми новыми результатами.

Общим для изучаемых здесь электронных систем является принципиально одинаковый способ их формирования молекулярно-лучевой эпитаксией и нанолитографией. Подразумевается управляемое введение разрезающих электростатических барьеров в двумерный электронный газ, созданный в глубине гетероструктуры GaAs/GaAlAs. Этот способ ана-

*Работа поддержана программой Президиума РАН «Основы фундаментальных исследований нанотехнологий и наноматериалов» и междисциплинарным интеграционным проектом СО РАН «Математические модели, численные методы и параллельные алгоритмы для решения больших задач СО РАН и их реализация на многопроцессорных суперЭВМ» (2009–2011).

логичен приемам промышленного изготовления сверхбыстродействующих нанотранзисторов и совмещает необходимую технологическую надежность с разнообразием получаемых структур [3, 9]. На пяти примерах будут рассмотрены случаи геометрически простых и весьма сложных разрезов. Все изучаемые здесь электронные системы состоят из малых основных элементов – аксиально-симметричных барьеров (антиточек), а также коротких квазиодномерных сужений в двумерном электронном газе и соединяемых ими субмикронных квантовых точек. Топологически это случаи малых структур из одного [5], трех [6, 7] и шести [8] субмикронных квантовых точечных контактов, а также случай большой квадратной решетки таких контактов [9]. Соответственно, эти 5 структур содержат одну антиточку [7], одну [6, 7], две [2, 8] и 10^5 квантовых точек субмикронного размера [9]. Основным регулятором наполнения сформированных электронных каналов является затворное напряжение.

По мере увеличения размера анализируемых систем будет меняться детальность рассмотрения базовых физических явлений. От тонких эффектов электрон-электронного взаимодействия в одиночном микроконтакте мы перейдем к новым эффектам одночастичной интерференции для промежутка микроконтакт – перемещаемая антиточка, Y-перехода и кольцевого интерферометра и, наконец, опишем моделирование фрактального электронного транспорта в разупорядоченной решетке антиточек.

2. Основные алгоритмы

Электронный транспорт исследуется чаще всего в линейном приближении, когда ток I пропорционален приложенному тянущему напряжению V . Основной величиной, которая в целом характеризует транспорт и структуру, является электрическое сопротивление $R = V/I$, либо кондактанс $G = I/V$.¹ Самые разные структуры субмикронного размера при низкой температуре могут рассматриваться как квантовые волноводы, кондактанс которых дается формулой Ландауэра:

$$G = (2e^2/h) \int \sum_n T_n(E, U) F(E - \mu) dE, \quad (1)$$

где $2e^2/h$ – квант кондактанса, e – заряд электрона, h – постоянная Планка, $T_n(E, U)$ – коэффициент прохождения для волн, падающих на наноструктуру из n -ой подзоны широкого подводящего канала, E – полная энергия баллистического электрона, $U(\mathbf{r})$ – эффективный удерживающий потенциал в наноструктуре. Функция $F(E - \mu) = (1/4k_B T) \operatorname{sech}^2((E - \mu)/2k_B T)$ учитывает тепловое размытие функции Ферми, μ – химпотенциал, T – температура, k_B – константа Больцмана.

Расчет коэффициента прохождения предполагает решение одночастичного уравнения Шредингера

$$[(\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}/c)^2/2m]\psi + (E - U(\mathbf{r}))\psi = 0, \quad (2)$$

где $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla_{2D}$, \mathbf{A} – вектор потенциал, который учитывает действие перпендикулярного магнитного поля. Обычно при реалистическом моделировании наноструктур эффективный 2D потенциал $U(\mathbf{r})$ вместе с самосогласованным распределением заряда в структуре находится решением трехмерного уравнения Пуассона и далее не меняется. Предполагается, что изменением его формы можно пренебречь [1, 6–8] по сравнению с изменением E в уравнении Шредингера.²

¹Возможны два или больше электрических контактов к структуре, так что величины I , V являются двухиндексными. Индексы не пишутся в наиболее важном двухтерминальном случае, когда I , V можно отнести к одним и тем же двум точкам. Ниже будет рассмотрен также трехтерминальный случай (Y-переход).

²Иногда все же необходимо учитывать зависимость эффективного потенциала от затворного напряжения и температуры. Этот учет трудно совмещается с моделированием электронного транспорта, поскольку требует самосогласования и в качестве паллиатива может использоваться физически обоснованное задание потенциала $U(\mathbf{r})$ формулами. Далее этот $U(\mathbf{r})$ может переопределяться довольно громоздким численным расчетом, как в случае электрон-электронного взаимодействия в микроконтакте.

В основном для решения задач многоканального квантового рассеяния в двумерном случае применяются разные варианты метода сильной связи, позволяющие сеточную имитацию 2D непрерывных потенциалов. С этой целью нами реализованы программы расчета 2D волновых функций и кондактанса произвольной переходной области в широком двумерном волноводе [1, 2].

Для случаев без магнитного поля использован метод S -матриц [11]. Он основан на предположении постоянства потенциала в продольном направлении на отрезках (x_j, x_{j+1}) , допускающем расчет финитного движения по y и матричных элементов перехода $C_{mn}^{(j)} = \int \xi_m^{(j)} \xi_n^{(j+1)} dy$, где $\xi_n^{(j)}(y)$ – волновая функция уровня поперечного квантования $E_n^{(j)}$ на участке (x_j, x_{j+1}) . Полная волновая функция на этом участке имеет вид:

$$\Psi(x, y) = \sum_{n=1}^M (k_n^{(j)})^{-1/2} \left[a_n^{(j)} e^{ik_n^{(j)}(x-x_j)} + b_n^{(j)} e^{-ik_n^{(j)}(x-x_{j+1})} \right] \xi_n^{(j)}(y) \quad (3)$$

где $k_n^{(j)} = (E - E_n^{(j)})^{1/2}$ – действительное или мнимое волновое число, отвечающее продольному движению в каждой моде j , а суммирование ограничивается конечным числом мод M . Амплитуды $a^{(j)}$ и $b^{(j)}$ на соседних участках связаны матрицей рассеяния S_j :

$$\begin{pmatrix} a^{(j+1)} \\ b^{(j)} \end{pmatrix} = S_j \begin{pmatrix} a^{(j)} \\ b^{(j+1)} \end{pmatrix}. \quad (4)$$

Полная S -матрица, описывающая рассеяние на всей структуре, является комбинацией матриц S_j [11]:

$$S = S_0 \otimes S_1 \otimes \dots \otimes S_N = \begin{pmatrix} t & r \\ r' & t' \end{pmatrix}, \quad (5)$$

где t, t' – полные амплитуды прохождения для противоположных направлений, а r, r' – соответственно, амплитуды отражения. Суммарный коэффициент прохождения вычисляется как

$$T_{\text{tot}} = \text{Tr}[tt^\dagger] = \sum_n \sum_m |t_{nm}|^2, \quad (6)$$

где t_{nm} – комплексные амплитуды прохождения с переходом из падающей волны в моде n в прошедшую волну в моде m , и суммирование идет по открытым модам (одномерным подзонам) входного и выходного каналов.

В случае присутствия перпендикулярного магнитного поля использованы другие алгоритмы. Нами разработаны программы, реализующие метод рекурсивных функций Грина для расчета кондактанса [12], а также модификация этого метода для расчета волновых функций двумерного рассеяния [13]. Возможности разработанных программ проверены моделированием квантового транспорта через баллистический кольцевой интерферометр [1, 2, 8] и трехконтактную квантовую точку в Y -переходе [6, 7].

3. Примеры задач и расчеты

3.1. Фриделевские осцилляции в квантовом точечном контакте

Кондактанс субмикронного сужения в двумерном электронном газе (ДЭГ) хорошо описывается одночастичной квантовой механикой. Исключением является экспериментально обнаруженная на первой ступени квантования кондактанса $0.7 \cdot 2e^2/h$ особенность, для которой были предложены десятки объяснений: от простых феноменологических до сложных

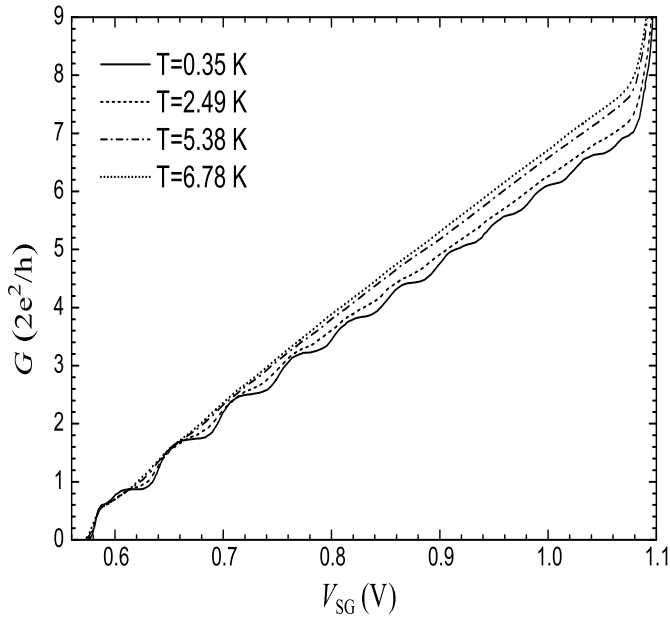


Рис. 1. Экспериментальные зависимости кондактанса микроконтакта G от V_{SG} – напряжения на расщепленном затворе [5]. На первой ступени квантования видна $0.7 \cdot 2e^2/h$ особенность; начиная со второй ступени средний наклон $G(V_{SG})$ с ростом температуры T увеличивается. Другие данные об этой структуре можно найти в [3].

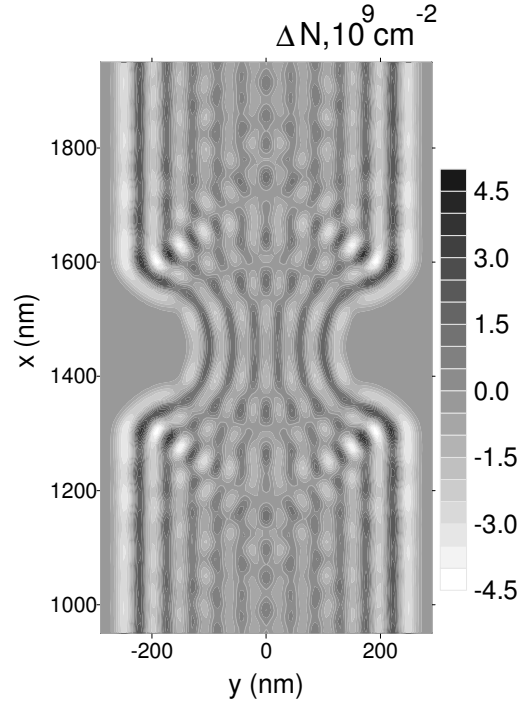


Рис. 2. Разница электронных плотностей $\Delta = n(\mu, T) - n(\mu, T^*)$ в канале с локальным сужением (микроконтактом): $\mu = 3.3$ мэВ, $k_B T = 0.03$ мэВ, $k_B T^* = 0.4$ мэВ.

теоретических и численных. Многомодовый режим казался ясным, но нашлись измерения, которые расходятся с предсказанием одночастичной картины о неподвижных точках кондактанса $N \cdot e^2/h$ при целых $N > 2$. В реальности эти точки с ростом температуры сдвигаются, т.е. средний наклон затворной характеристики увеличивается (рис.1) [5].

Чтобы объяснить температурное поведение кондактанса мы учли межэлектронное взаимодействие поправкой к потенциалу в духе несамосогласованного приближения Хартри-Фока. Такая поправка по форме совпадает с фриделевскими осцилляциями электронной плотности $n(x, y)$ (рис.2), которые находятся по вкладкам от всех занятых состояний решением уравнения Шредингера для исходного потенциала $U_0(x, y)$. В многомодовом режиме транспорта можно записать: $\delta U(x, y) = -\alpha \Delta / D$, где $\Delta = n(x, y, \mu, T) - n_0(x, y, \mu)$, где n_0 – плотность со сглаженными фриделевскими осцилляциями, например, $n(x, y, \mu, T^*)$ при достаточно большой температуре T^* , $D = m / (\pi \hbar^2)$ – квазиклассическая двумерная плотность состояний, α – безразмерная константа порядка единицы, значение которой не вычисляется в теории, но может быть оценено из сравнения вычисленного кондактанса для потенциала $U_0(x, y) + \delta U(x, y)$ с экспериментом.

Исходный плавающий потенциал многомодового канала с сужением $U_0(x, y)$ был задан простыми формулами и являлся грубой идеализацией реальных микроконтактов. Для $U_0(x, y)$ с малым шагом по E (10^{-3} мэВ) вычислены 10^4 двумерных волновых функций на сетке $600 \cdot 140$ узлов с шагом 5 нм по x, y . Эти вычисления, как затратные по времени, выполнялись на многопроцессорных машинах Сибирского суперкомпьютерного центра (СО РАН, Новосибирск) и суперкомпьютерного центра IDRIS (CNRS, France). Интегрированием $|\Psi(x, y, E)|^2$ по E с учетом заполнения состояний, т.е. функции Ферми, определялись электронные плотности для разных химпотенциалов μ и температур.

Наконец, для серий поправленных эффективных потенциалов $U_0(x, y) + \delta U(x, y, \mu, T)$

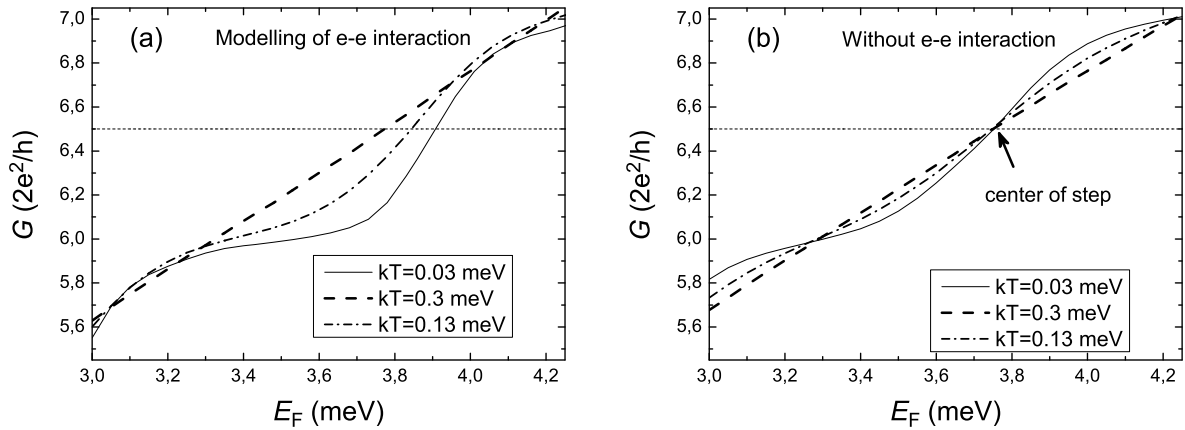


Рис. 3. Вычисленный кондактанс канала с микроконтактом как функция μ при разных T : (a) для $U = U_0(x, y) - \alpha\Delta(T, T^*)/D$, $k_B T^* = 0.4$ meV, $\alpha = 6$; (b) для $U = U_0(x, y)$ [5].

решались задачи двумерного квантового рассеяния со сканированием по энергии, и по формуле (1) вычислялся кондактанс. Найдено, что с учетом фриделевских осцилляций кондактанс сужения ведет себя при изменении μ и T аналогично измеренному: точки кондактанса $N \cdot e^2/h$ сдвигаются в сторону меньшего химпотенциала с ростом температуры. Напротив, если поправку взаимодействия обнулить, то расчет по формуле (1) сохраняет эти точки неподвижными и наблюдается только сглаживание кривых с ростом температуры (рис.3).

Для моделирования 0.7 особенности были выполнены расчеты электронного прохождения через одномерный барьер. Поправка к потенциалу от фриделевских осцилляций находилась по одномерной плотности состояний. Расчеты воспроизводят наблюдаемую температурную зависимость этой особенности (рис.4). Таким образом, электрон-электронное взаимодействие правильно описывает температурные зависимости затворных характеристик в микроконтакте.

3.2. Сканирующая затворная микроскопия канала с сужением

Здесь на примере канала с сужением развивается идея квантового бильярда с основным элементом в виде антиточки – малой области обеднения в ДЭГ под острием атомно-силового микроскопа, которое действует как перемещаемый затвор, находящийся вместе с гетероструктурой в криостате [7]. Электронная волна, выходящая из сужения в канал, рассеивается на антиточке (рис.5, левая часть). Показанный потенциал получен расчетом трехмерной электростатики устройства и для этого потенциала приведена вычисленная картина плотности вероятности.

Картина рассеяния является сложной и в ней видны частые осцилляции электронной

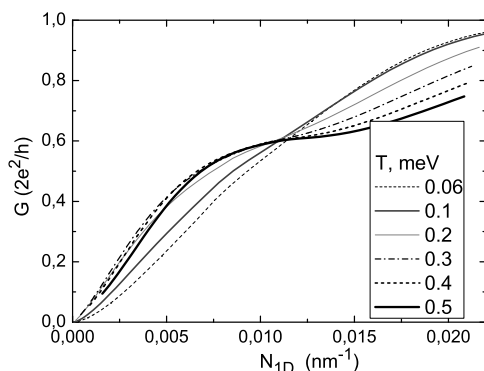


Рис. 4. Вычисленные зависимости коэффициента прохождения баллистического электрона через одномерный потенциальный барьер $U(x) = V_0/ch^2(x/a) - \alpha\delta n(x, \mu, T)\pi\hbar v_F$, содержащий фриделевские осцилляции ($V_0 = 4.8$ мэВ, $a = 100$ nm, $\alpha = 0.2$, $v_F(\mu)$ – скорость Ферми вдали от барьера). Аргументом является электронная плотность в центре барьере, которая в экспериментах с микроконтактом определяется напряжением на расщепленном затворе.

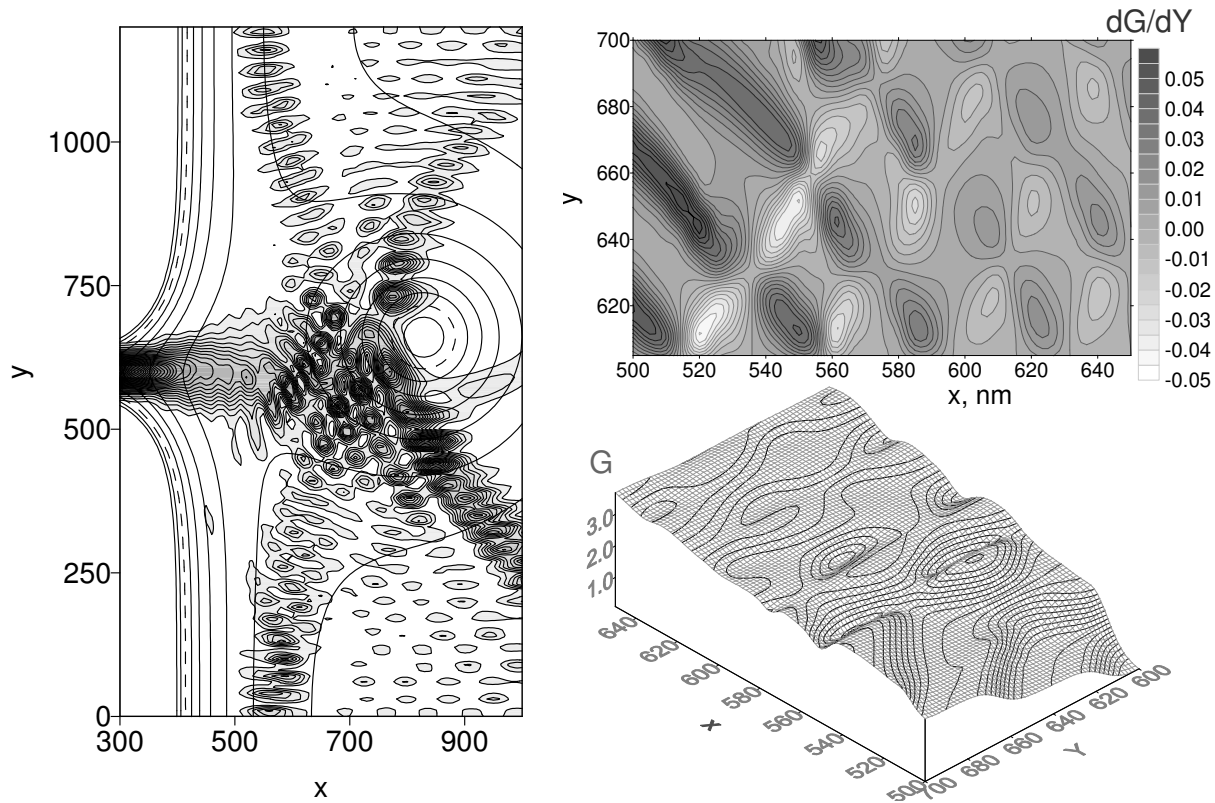


Рис. 5. Слева плотность вероятности и эффективный потенциал (плавные изолинии) для канала с сужением и антиточкой. Координаты центра антиточки $x_t = 830$ nm, $y_t = 660$ nm. Пунктирные изолинии соответствует уровню Ферми. Кондактанс $G = 1.94e^2/h$. Справа внизу кондактанс канала как функция положения антиточки, сверху производная dG/dy

плотности, т.е. эффекты интерференции. Благодаря этим эффектам кондактанс сужения чувствителен к положению антиточки, и построение кондактанса как функции координат острья дает микроскопическое изображение (рис.5, правая часть), которое в свернутом виде содержит информацию об интерференции. Об этом говорит частое чередование минимумов и максимумов производной кондактанса, соответствующее фермиевской длине волны. Эти изображения получены расчетом коэффициента прохождения электронных волн для многих реализаций 2D потенциала, отвечающих перемещению антиточки. Расчет выполнен на кластерной суперЭВМ Zahir центра Idris CRNS (Франция). В данном расчете 2D потенциал брался в виде суммы исходного потенциала в канале с сужением и универсального аксиально-симметричного барьера антиточки. Такая возможность и простая радиальная зависимость потенциала в антиточечном барьере найдены в результате предварительных расчетов трехмерной электростатики устройства, требующих десятков тысяч итераций. Найденное приближение для итогового 2D потенциала избавляет от многократных расчетов 3D электростатики и является весьма надежным, пока острье находится на достаточном расстоянии от сужения. В данном случае не учитывались пространственные флуктуации потенциала, обусловленные случайным расположением заряженных примесей. Заметим, что в эксперименте эффекты интерференции могут быть ослаблены или искажены по сравнению с рассмотренной идеализированной ситуацией, но они уже были зарегистрированы сканирующей затворной микроскопией.

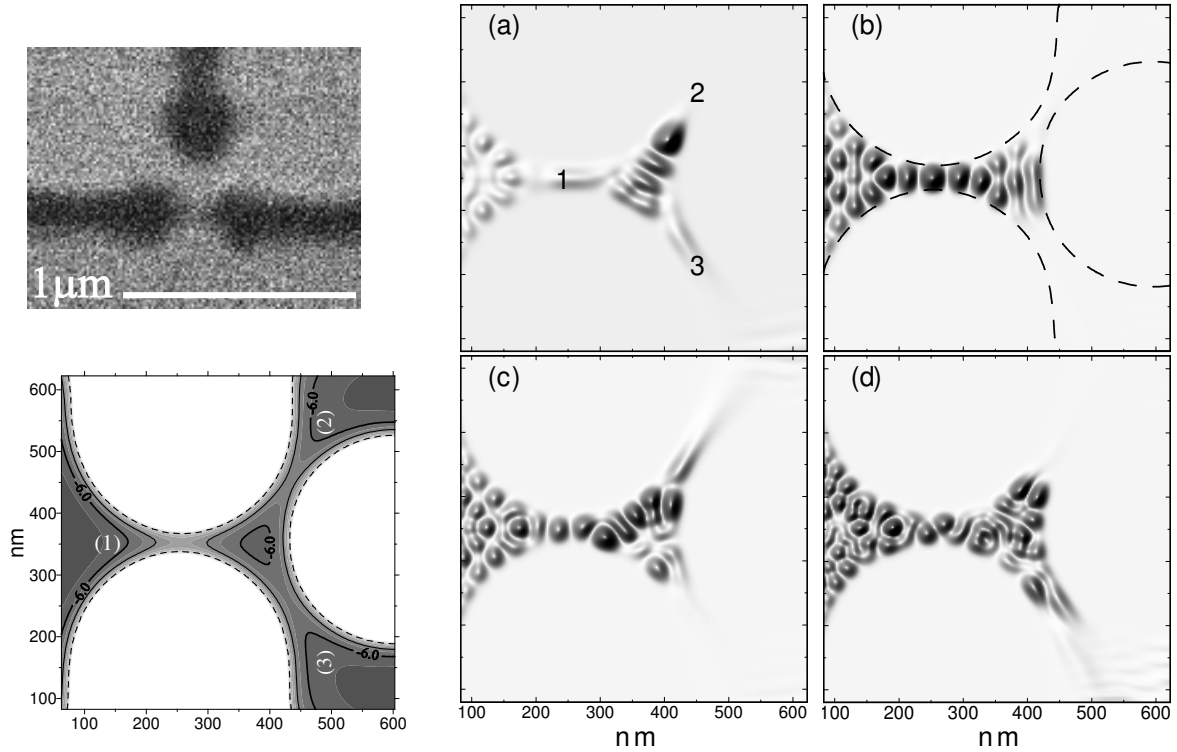


Рис. 6. Слева сверху микрофотография изучаемого устройства до напыления затвора. Видны три антиоточки и разрезы к ним – вытравленные (темные) области на поверхности гетероструктуры GaAs/AlGaAs. Внизу вычисленный эффективный потенциал $U(x, y)$ [мэВ] для такой структуры (показана только область $U \leq 0$). Справа распределение плотности вероятности обнаружить баллистический электрон, падающий из резервуара 1, вычисленное для четырех значений E_F : (a), (b), (c), (d) – электрон выходит, соответственно, в резервуар 3, 1, 2, 3. Пунктир обозначает границу классически разрешенной области при $E_F = U_2$ [6].

3.3. Интерференция в малой трехконтактной точке Y-перехода

Расчеты трехмерной электростатики показали [1], что развилка одномерных квантовых проволок (Y-переход) является одновременно малой трехвходовой квантовой точкой. Такая одиночная квантовая точка была изготовлена в ИФП СО РАН [3] (рис.6). Известно, что можно управлять направлением тока в Y-переходе с помощью изменения напряжения на двух боковых затворах, антифазно меняющего ширину выходных квантовых проволок. Ток идет преимущественно по более широкому каналу. Это классический эффект. Наши расчеты показывают, что в Y-переходе с небольшой асимметрией (которая в реальных устройствах присутствует всегда) возможен чисто квантовый эффект – управление направлением выхода электрона при изменении уровня Ферми. Степень асимметрии устройства при этом практически не меняется.

Пусть для определенности баллистический электрон попадает в квантовую точку из резервуара 1. Из рисунка 6 видно, что картины интерференции внутри этой точки складываются такими, что при одном значении уровня Ферми E_F электрон выходит в основном в резервуар 2, а при другом – в резервуар 3. По оценке при данном изменении E_F заполняется лишь несколько одночастичных состояний в квантовой точке, т.е. к точке добавляется 8-10 электронов. Из решения уравнения Шредингера вместе с волновыми функциями находятся коэффициенты прохождения между резервуарами, т.е. коэффициенты кондактанса (рис.7, левая часть). Можно видеть, что максимальная степень поляризации $(G_{12} - G_{13}) / (G_{12} + G_{13})$ в расчете меняется от -1 до 1 .

Заметим, что в эксперименте обнаружен такой же по порядку величины эффект (рис.7,

правая часть). Искать детального согласия теории и измерений не следует, потому что коэффициенты G_{ij} имеют ярко выраженное мезоскопическое поведение из-за интерференции. Это значит, что малейшие изменения геометрии устройства или переключение заряда лишь одного атома во всей наноструктуре меняют форму кривых $G_{ij}(E_F)$, $G_{ij}(V_G)$. Однако сам обнаруженный эффект перенаправлений остается. Таким образом, создание одиночной малой трехконтактной квантовой точки, расчеты и эксперимент позволили обнаружить новое проявление интерференции. Оно является общим для любых типов волн, если размеры слегка асимметричной развилки соизмеримы с длиной волны.

3.4. Мезоскопическое поведение осцилляций Ааронова-Бома в малом кольцевом интерферометре

Изготовление малых кольцевых интерферометров с помощью атомного силового микроскопа (АСМ) (локальным анодным окислением) позволило расчетом узнать электронные свойства конкретного экземпляра устройства [3]. По его изображению в АСМ мы восста-

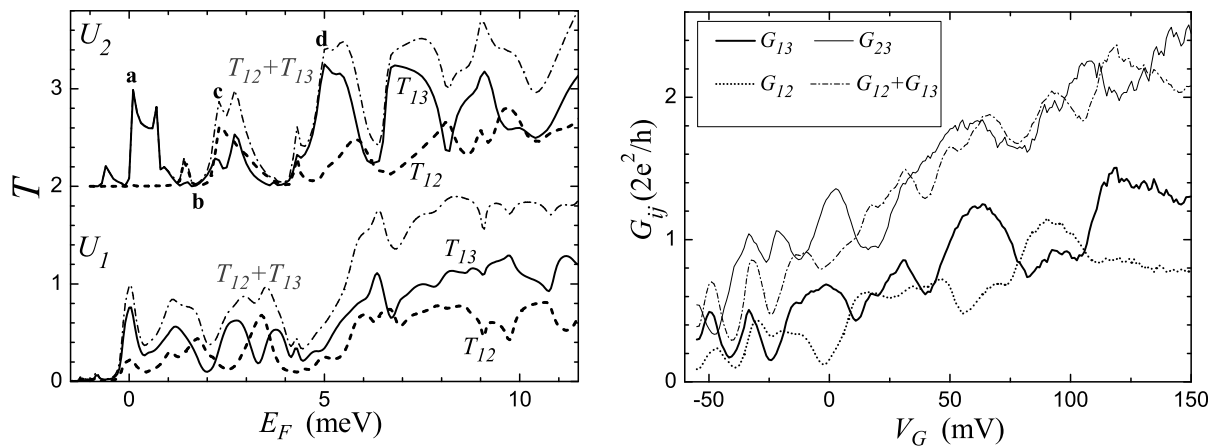


Рис. 7. Слева вычисленная зависимость коэффициентов прохождения от энергии для двух слегка разных реализаций эффективного потенциала U_2 и U_1 (кривые для U_2 сдвинуты вверх для ясности, буквы а–d указывают соответствующие E_F из предыдущего рисунка). Справа зависимость коэффициентов кондактанса от затворного напряжения в эксперименте [6].

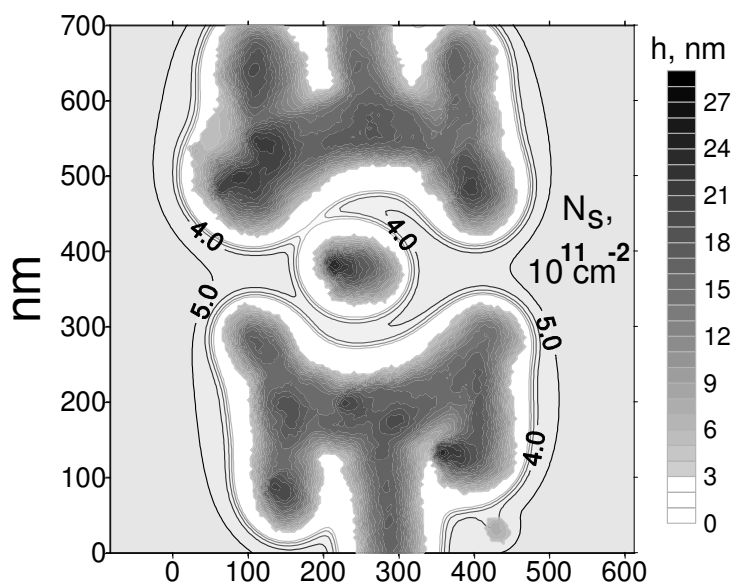


Рис. 8. Карта глубины локального анодного окисления h (показана темным на фоне области обеднения) и вычисленная электронная плотность N_s (изолинии) в случае кольцевого интерферометра, изготовленного с помощью АСМ [3].

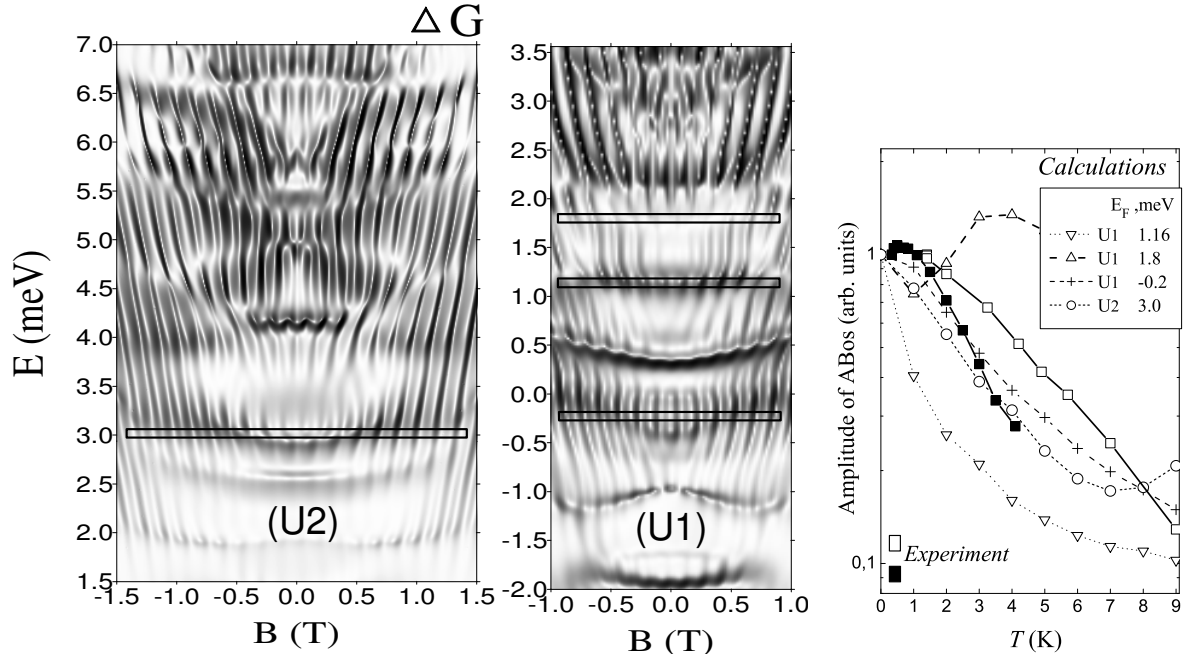


Рис. 9. Слева вычисленные осцилляции Ааронова-Бома в пределе нулевой температуры для слегка разных эффективных потенциалов U_2 , U_1 в малом кольцевом интерферометре. Максимальное отклонение от фонового кондактанса G составляет $0.4 \cdot e^2/h$. Видны мезоскопические флуктуации амплитуды и фазы осцилляций. Узкими прямоугольниками обозначены E_F , для которых на правой части рисунка показаны вычисленные температурные зависимости амплитуды осцилляций (сплошные линии – эксперимент).

навливаем глубину h для нижней (невидимой) границы анодного окисла (рис.8, темная часть), т.е. форму поверхности полупроводника, на которой ставится граничное условие при решении трехмерной задачи электростатики. Таким образом, находится эффективный потенциал в плоскости двумерного электронного газа, расположенной в 25 нм от исходной поверхности гетероструктуры GaAs/AlGaAs. На рисунке 8 изолиниями показано распределение электронной плотности. Видно, что асимметрия структуры передалась эффективно-му потенциалу.

Перед нами стояла задача прогнозирования поведения данного интерферометра в широком диапазоне изменения энергии электрона E , магнитного поля B , химпотенциала E_F и температуры T . Для этого необходимо было решать задачу двумерного квантового рассеяния баллистического электрона в найденном потенциале на сетке из 10^4 узлов для 10^5 пар значений (E, B) , что потребовало 6 часов счета на 64 процессорах машины Zahir суперкомпьютерного центра IDRIS (France) (рис.9). Видно, что разные реализации потенциала дают собственное сложное поведение амплитуды и, что неожиданно, фазы осцилляций Ааронова-Бома (АБ) в пределе нулевой температуры [8].

Имея полный набор состояний, можно было с помощью формулы (1), уже без супер-ЭВМ, проследить за температурным изменением осцилляций АБ. Этим расчетом было обнаружено, что фаза осцилляций стабилизируется при увеличении температуры до $T \sim 1$ К, но изменение E_F дает флуктуации формы температурной зависимости амплитуды осцилляций АБ [8] (рис.9). Нестабильность темпа теплового подавления осцилляций действительно обнаружена в измерениях с данной структурой [10].

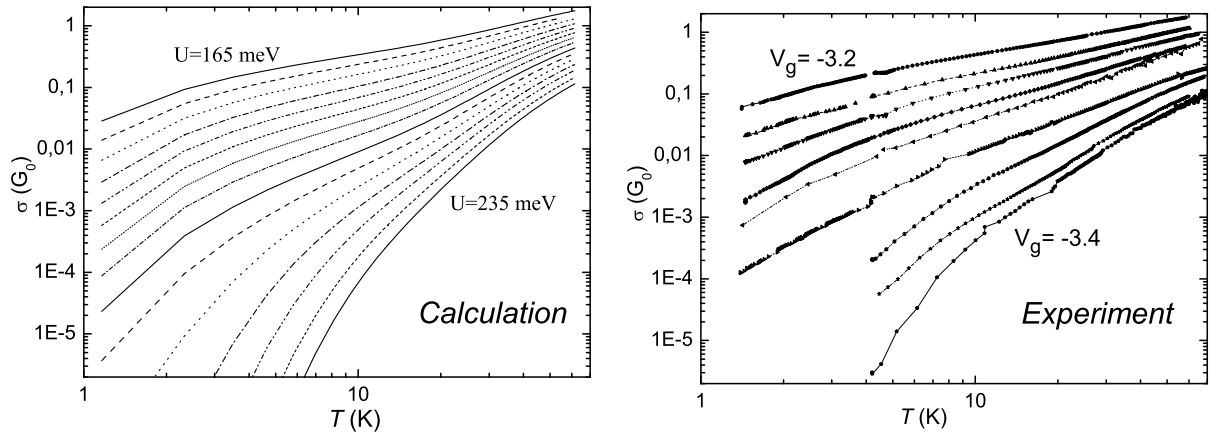


Рис. 10. Вычисленные и измеренные зависимости проводимости решетки антиточек с числом узлов 150 000.

3.5. Фрактальный транспорт в решетке антиточек

Недавно в Институте физики металлов УроРАН была изготовлена и экспериментально исследована разупорядоченная квадратная решетка антиточек–вытравленных углублений на поверхности структуры с квантовой ямой AlGaAs/GaAs/AlGaAs [9].¹ Диаметр областей обеднения в двумерном электронном газе под вытравленными углублениями управлялся напряжением на сплошном металлическом затворе. Чтобы понять поведение этой структуры мы разработали модель, соединяющую описание квантовых явлений в малом масштабе и классического электронного транспорта на больших масштабах.

Двумерный эффективный потенциал задается простыми формулами, как сумма антиточечных аксиально-симметричных потенциалов. Основной параметр — высота барьера U в центре антиточек, — линейно зависит от V_g . Вся структура мысленно разбивается на субмикронные квантовые точки и соединяющие их микроконтакты. Радиальная зависимость антиточечного потенциала и параметр U определяют глубину ямы в электронных озерах и высоту широкого барьера между ними V_{mn} (учтены вариации дистанции между антиточками). Из условий независимости полного числа электронов от T и емкости центра электронного озера от V_g найдено $E_F(U, T)$. При наличии тянущего напряжения квантовым точкам приписываются индивидуальные химпотенциалы, подобно макроскопическим резервуарам баллистических наноструктур. Локальная связь тока через микроконтакт и

¹ Полный размер решетки $300 \times 500 \text{ мкм}^2$, сторона квадрата в элементарной ячейке 1 мкм, диаметр антиточек 0.7 мкм, задаваемый случайный сдвиг антиточек от вершин квадрата не превышал 0.1 мкм.

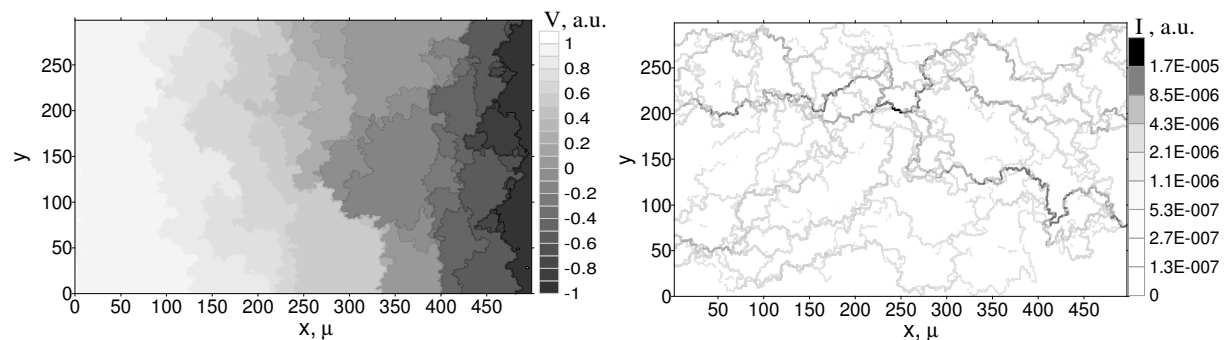


Рис. 11. Пример вычисленных распределений тянущего напряжения и тока в структуре с числом узлов 300×500 . Видны террасы напряжения и узкие токовые пути.

напряжения на микроконтакте дается формулой Ландауэра. Полное сопротивление всей решетки вместе с распределением в ней токов и тянущих напряжений вычисляется из законов Кирхгоффа (сумма токов, втекающих в каждую квантовую точку через микроконтакты к четырем соседним точкам, равна нулю). Существенно, что решетка большая (10^5 элементов), а кондактанс микроконтакта зависит от его геометрии, температуры и напряжения на затворе. Поэтому для упрощения расчетов микроконтакты полагаются квазиодномерными, т.е. все вклады T_n в (1) от более высоких подзон выражаются через коэффициент прохождения для нулевой подзоны $T_n(E) = T_0(E - n\hbar\omega, U)$. Профиль потенциала в этом случае есть $U(x) + m\omega^2 y^2/2$. Поверх широкого барьера задается узкий параболический барьер по x с параметрами $\hbar\omega_x$ и $V_0(1 + aT^{-1/2})$ (учет действия примесного флуктуационного потенциала и температурной зависимости высоты барьера из-за эффектов электрон-электронного взаимодействия). Для использованных $U(x)$ выписаны простые формулы для $T_0(E)$, но интеграл (1) берется численно.

Для большой решетки, которая изучалась в эксперименте [9] (150 000 узлов), модель может быть реализована лишь на кластерной суперЭВМ, потому что проводимость решетки зависит от двух непрерывно меняемых внешних параметров T , U . Кроме того, модель содержит около десятка внутренних параметров, значения которых нельзя вычислить из теории, но можно пытаться найти пробными расчетами из сравнения с экспериментом. В итоге этой работы для большой структуры получены зависимости, которые близки к измеренным (рис.10). Особый интерес для изучения электронного транспорта представляет случай малой проводимости $\sigma \sim 10^{-6}G_0$, когда структура близка к порогу перколяции (рис.10). Мы нашли, что распределения тока и напряжения (рис.11) в разупорядоченной решетке антиоточек при такой проводимости имеют ярко выраженную фрактальность и значение проводимости определяется кондактансом микроконтакта, оказавшегося на пересечении основной линии тока и линии резкого перепада между соседними террасами в распределении тянущих напряжений.

3.6. Заключение

В работе описаны 5 задач, решенные эффективным распараллеливанием в рамках смешанной технологии вычислительных экспериментов с использованием персональных компьютеров и кластерных суперЭВМ. Для быстрого решения этих задач, возникших недавно на стыке полупроводниковых нанотехнологий и квантовой физики, нами разработаны адекватные упрощенные модели и соответствующие прикладные программы. Расчеты выполнены на машинах суперкомпьютерного центра IDRIS (CNRS, France) и Сибирского суперкомпьютерного центра (СО РАН, Новосибирск).

В перспективе предполагается интеграция высокопроизводительных расчетов кондактанса и реальной трансформации трехмерного потенциала в устройстве при изменении затворных напряжений, магнитного поля и распределения заряда на примесях. Для ряда задач подобная интеграция уже испытана [3, 4]. Дальней целью является реалистическое моделирование рукотворных наноструктурированных электронных систем большой площади, в которых классический и квантовый транспорт переплетаются и требуется разработка новых физических моделей.

Литература

1. Ткаченко О. А., Ткаченко В. А., Бакшеев Д. Г., Квон З. Д., Портал Ж. К. Электростатический потенциал, энергетический спектр и резонансы Фано в кольцевом баллистическом интерферометре на основе гетероперехода AlGaAs/GaAs// Письма в ЖЭТФ 2000. Т. 71. С. 366–371.
2. Ткаченко О. А., Ткаченко В. А., Бакшеев Д. Г. Волновые функции баллистического электрона и отрицательное магнитосопротивление в малом кольцевом

- интерферометре// Письма в ЖЭТФ 2004. Т. 79. С. 351–355.
3. Ткаченко О.А., Ткаченко В.А., Квон З.Д., Латышев А.В., Асеев А.Л. Интроскопия квантовых нанозлектронных устройств// Российские нанотехнологии 2010. Т. 5. С. 117–127.
 4. Ткаченко В. А., Ткаченко О. А., Квон З. Д., Асеев А. Л. Внедрение компьютерного моделирования в физику нанозлектронных устройств// 1 Всероссийская конференция "Многомасштабное моделирование процессов и структур в нанотехнологиях" Москва. 2008. Тезисы докладов. С.299–300.
 5. Tkachenko O.A., Renard V.T., Pyshkin K.S., Gornyi I.V., Dmitriev A.P., Tkachenko V.A., Portal J.-C. Electron-electron interaction in multi-modal quantum point contacts// 15th Int. Symp. Nanostructures: Physics and Technology (Novosibirsk, 2007.) Proceedings. Ioffe Institute. St.Petersburg. 2007, P. 317–318; Renard V. T., Tkachenko O. A., Tkachenko V. A., Ota T., Kumada N., Portal J. C., Hirayama Y. Boundary-Mediated Electron-Electron Interactions in Quantum Point Contacts// Phys. Rev. Lett. 2008. Vol. 100. P. 186801.
 6. Tkachenko O. A., Tkachenko V. A., Kvon Z. D., Baksheev D. G., Portal J.-C., Aseev A. L. Steering of electron wave in three-terminal small quantum dot// 13th Int. Symp. Nanostructures: Physics and Technology (St. Petersburg, Russia, 2005.) Proceedings. P. 8–9; Tkachenko O. A., Tkachenko V. A., Kvon Z. D., Aseev A. L., Portal J.-C., Quantum interferential Y-junction switch, Nanotechnology, 2012, Vol. 23. P. 095202.
 7. Tkachenko O. A., Tkachenko V. A., Renard V. T., Portal J.-C., Aseev A. L. Scanning Gate microscopy/spectroscopy of quantum channel with constriction: tip voltage controlled electron wave direction in Y-junction// 15th Int. Symp. Nanostructures Physics and Technology (Novosibirsk, 2007). Proceedings. Ioffe Institute. St.Petersburg. 2007, P. 297–298.
 8. Tkachenko O. A., Tkachenko V. A., Baksheev D. G., Portal J.-C. Mesoscopic behavior of Aharonov-Bohm effect in small ring interferometer// 13th Intl. Symp. Nanostructures: Physics and Technology (St. Petersburg, 2005.), Proceedings. P. 205–206.
 9. Миньков Г. М., Шерстобитов А. А., Ткаченко В. А., Ткаченко О.А. Переход к перколяции и прыжковой проводимости в структурах с двумерным разупорядоченным массивом антиоточек// IX Российская конференция по физике полупроводников, Новосибирск-Томск. 2009. Тезисы докладов. С.108.
 10. Ткаченко О.А., Ткаченко В.А., Portal J.-C., Квон З.Д., Латышев А.В., Асеев А.Л. Моделирование полупроводниковых квантовых нанозустройств// Суперкомпьютерные технологии в науке, образовании и промышленности /Под редакцией: В.А. Садовниченко, Г.И. Савина, Вл.В. Воеводина. М: Издательство Московского университета, 2010, С. 55–62; URL: <http://hpc-russia.ru/book2/8.pdf>
 11. Cahay M., McLennan M., Datta S. Conductance of an array of elastic scatterers: A scattering-matrix approach// Phys. Rev. B 1988. Vol. 37. P. 10125–10136; Takagaki Y., Ferry D. K. Conductance of quantum waveguides with a rough boundary// J. Phys.: Condens. Matter. 1992. Vol. 4. P. 10421–10432.
 12. Ando T. Quantum point contacts in magnetic fields// Phys. Rev. B 1991. Vol. 44. P. 8017–8027.
 13. Usuki T., Saito M., Takatsu M., Kiehl R. A., Yokoyama N. Numerical analysis of ballistic-electron transport in magnetic fields by using a quantum point contact and a quantum wire// Phys. Rev. B 1995. Vol. 52. P. 8244–8255.