

Raport științific sintetic

*privind implementarea proiectului PN-II-ID-PCE-2011-3-0224 în perioada
octombrie 2011 – septembrie 2016*

Proiectul PN-II-ID-PCE-2011-3-0224, cu titlul

Analogii între transportul electronilor în nanostructuri și propagarea luminii

este dedicat studiului detaliat al analogiilor între transportul electronilor în nanostructuri și propagarea undelor electromagnetice, având scopul de a dezvolta analogii care nu au fost studiate teoretic și/sau experimental până în prezent. Nanostructurile studiate includ semiconductori obișnuiți, în care electronii sunt descriși de ecuația Schrödinger și grafenă, în care electronii satisfac o ecuație de tip Dirac. În primul caz, analogiile sunt justificate de similaritatea formală dintre ecuația Schrödinger independentă de timp și ecuația Helmholtz, pe când în al doilea caz funcția de undă spinorială în grafenă poate fi pusă în corespondență cu stările de polarizare ale luminii, cu componentele câmpului electromagnetic, sau cu propagarea luminii în structuri fotonice hexagonale fără bandă interzisă. Intenția cercetărilor care fac obiectul acestui proiect este ca, prin evidențierea diferențelor și similarităților dintre propagarea electronilor și fotonilor, să contribuie la dezvoltarea unor dispozitive noi bazate pe analogia electron-foton precum și la aprofundarea înțelegerii transportului de sarcină în nanoconductori dezordonați cu o distribuție neomogenă și asimetrică a centrilor de împrăștiere.

Prima parte a proiectului (2011-2012) este dedicată studiului analogiilor între propagarea electronilor balistici descriși de ecuațiile Schrödinger sau Dirac și propagarea luminii, a doua parte (2013-2016) fiind rezervată simulărilor numerice și investigațiilor experimentale a transportului electronic în nanoconductori dezordonați, cu distribuție spațială neuniformă a centrilor de împrăștiere.

Rezultate obținute în etapa 2011 a proiectului

În etapa aferentă anului 2011 s-au evidențiat efectele polarizării luminii asupra analogiilor electron balistic-câmp electromagnetic, studiu ce reprezintă activitatea 1.1 din proiect. Transportul balistic are loc în nanostructuri cu dimensiuni mai mici decât distanța medie între două ciocniri ale electronului cu alți electroni sau cu impuritățile prezente în materialul semiconductor.

Polarizarea câmpului electromagnetic influențează propagarea luminii prin condițiile impuse la interfața dintre două medii cu constante optice (în particular, indici de refracție) diferite și deci trebuie luată în considerare în stabilirea unei analogii cantitative electron balistic-câmp electromagnetic.

Influența polarizării asupra analogiilor dintre lumină și electroni balistici descriși de ecuația Schrödinger

În condiții de transport balistic staționar, funcția de undă Ψ a electronilor cu masă efectivă m și energie constantă E în materiale semiconductoare obișnuite satisface ecuația Schrödinger independentă de timp

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + (V - E)\Psi = 0 \quad (1)$$

unde V este energia potențială. Această ecuație este formal similară cu ecuația Helmholtz satisfăcută de fascicule de lumină monocromatice cu frecvența ω și vector de undă $\mathbf{k}$ în medii cu permitivitate electrică ε și permeabilitate magnetică μ constante și (presupuse) izotrope [1]:

$$\nabla^2\mathbf{F} + k^2\mathbf{F} = 0. \quad (2)$$

În (2), $\mathbf{F}$ reprezintă orice componentă a câmpurilor electric $\mathbf{E}$ sau magnetic $\mathbf{H}$, iar $k = \omega\sqrt{\varepsilon\mu} = |\mathbf{k}|$. Vectorii $\mathbf{E}$, $\mathbf{H}$ și $\mathbf{k}$ sunt ortogonali și formează un sistem de referință drept.

Deși din ecuațiile (1) și (2) rezultă că Ψ poate fi echivalat cu orice componentă a câmpurilor $\mathbf{E}$ și $\mathbf{H}$ dacă $\mathbf{k}$ este înlocuit cu vectorul de undă al electronilor $\boldsymbol{\gamma}$, unde $|\boldsymbol{\gamma}| = \gamma = \sqrt{2m(E - V)}/\hbar$, analogii cantitative între

setul de parametri relevanți pentru electroni, m și $(E - V)$, și respectiv pentru lumină (ω , ε și μ) la propagarea printr-o succesiune de regiuni cu parametri diferiți dar constanți, ca în Fig. 1, depind de **polarizarea** câmpului electromagnetic, care determină condițiile de continuitate la interfață. Pe lângă aceste condiții impunem și egalitatea vitezei de grup, dată de $1/\sqrt{\varepsilon\mu}$ pentru unde plane electromagnetice, și respectiv de $\text{Re}[i\eta\Psi \cdot \nabla\Psi^*/m]/|\Psi|^2 = \eta\gamma/m$ pentru electroni.

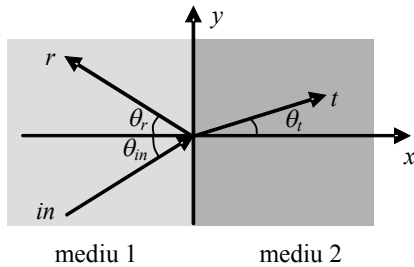


Fig. 1

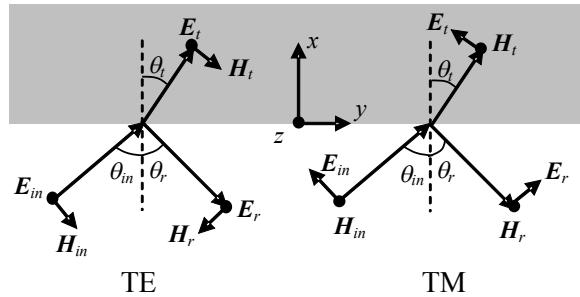


Fig. 2

Vom considera că planul de incidență al câmpului electromagnetic/fasciculului de electroni este (xy) , și vom utiliza indicii 1 și 2 pentru a desemna valorile parametrilor în mediul de incidență 1 și, respectiv, mediul de transmisie 2. În acest caz, indiferent de polarizarea luminii, componentele tangențiale la interfață ale $\mathbf{k}$ și γ se conservă, condiție cunoscută sub numele de lege Snell, și care poate fi exprimată ca

$$k_1 \sin \theta_{in} = k_1 \sin \theta_r = k_2 \sin \theta_t, \quad \gamma_1 \sin \theta_{in} = \gamma_1 \sin \theta_r = \gamma_2 \sin \theta_t, \quad (3)$$

de unde rezultă $\theta_r = \theta_{in}$. În (3) θ_{in} , θ_r și θ_t sunt unghiurile de incidență, reflexie și transmisie ale câmpului electromagnetic/fasciculului de electroni. Alte condiții la interfață, dependente de polarizarea câmpului electromagnetic, impun continuitatea componentelor tangențiale ale $\mathbf{E}$ și $\mathbf{H}$, în timp ce în cazul electronilor Ψ și $(\nabla\Psi \cdot \hat{\mathbf{x}})/m$ trebuie să fie continue la interfață, cu $\hat{\mathbf{x}}$ versorul pe direcția x .

Până în prezent, un set de parametri analogi pentru propagarea electronilor și luminii au fost găsiți doar în cazurile în care radiația electromagnetică este polarizată TE (transversal electric) sau TM (transversal magnetic) [1]. În primul caz, componenta (unică) a câmpului electric $\mathbf{E}$ polarizat în lungul axei z rămâne perpendiculară pe planul de incidență și poate fi echivalată cu Ψ , iar în al doilea caz, $\mathbf{H}$ rămâne perpendicular pe acest plan în cursul refracției câmpului electromagnetic, componenta (unică) a acestuia fiind analogă funcției de undă electronice. Direcțiile câmpurilor $\mathbf{E}$ și $\mathbf{H}$ pentru polarizările TE și TM sunt ilustrate în Fig. 2. Pentru ambele polarizări, TE și TM, este posibilă o echivalare unitară a câmpului electromagnetic cu funcția de undă electronică prin intermediul potențialului vector $\mathbf{A}$, care satisface ecuația (2) [2]. Relațiile între $\mathbf{A}$ și $\mathbf{E}$ și $\mathbf{H}$ sunt $\mathbf{E} = -i\omega\mathbf{A}$ și, respectiv, $\mathbf{H} = (\nabla \times \mathbf{A})/\mu$ dacă potențialul scalar al radiației electromagnetice este zero.

În cadrul Etapei 2011 a proiectului, am studiat problema echivalării funcției de undă scalare a electronilor cu potențialul vector al luminii polarizate liniar la un unghi α față de axa z . Cazul $\alpha = 0$ reprezintă unda TE, iar pentru $\alpha = \pi/2$ se obține unda TM. Pentru a obține un set de analogii care să regăsească parametrii corespunzători cazurilor TE și TM pentru diverse valori ale α , a fost necesară găsirea în prealabil a unor noi seturi de parametri analogi pentru undele TE și TM, deoarece în [2] masa efectivă, energia electronilor și chiar funcția de undă erau echivalate în cazurile TE și TM cu parametri cu dimensionalități diferite.

Pentru aceasta, am exprimat componentele incidentă, reflectată și transmisă ale funcției de undă electronice ca

$$\Psi_{in} \exp[i\gamma_1(x \cos \theta_{in} + y \sin \theta_{in})], \quad \Psi_r \exp[i\gamma_1(-x \cos \theta_r + y \sin \theta_r)], \quad \Psi_t \exp[i\gamma_2(x \cos \theta_t + y \sin \theta_t)], \quad (4)$$

și componentele similare ale potențialului vector pentru o undă TE ca

$$A_{in} \hat{\mathbf{z}} \exp[ik_1(x \cos \theta_{in} + y \sin \theta_{in})], \quad A_r \hat{\mathbf{z}} \exp[ik_1(-x \cos \theta_r + y \sin \theta_r)], \quad A_t \hat{\mathbf{z}} \exp[ik_2(x \cos \theta_t + y \sin \theta_t)]. \quad (5)$$

Punând condițiile de continuitate la interfața $x = 0$ pentru funcția de undă electronică și pentru componentele tangențiale ale $\mathbf{E}$ și $\mathbf{H}$ avem condițiile

$$\begin{cases} \Psi_{in} + \Psi_r = \Psi_t \\ \frac{\gamma_1}{m_1} \cos \theta_{in} (\Psi_{in} - \Psi_r) = \frac{\gamma_2}{m_2} \cos \theta_t \Psi_t \end{cases} \quad \begin{cases} A_{in} + A_r = A_t \\ \frac{k_1}{\mu_1} \cos \theta_{in} (A_{in} - A_r) = \frac{k_2}{\mu_2} \cos \theta_t A_t \end{cases} \quad (6)$$

la care se adaugă similaritățile între k și γ și între $1/\sqrt{\varepsilon\mu}$ și $\eta\gamma/m$. Forma similară a condițiilor la limită și a numărului de undă și vitezei de grup pentru funcția de undă electronică și câmpul electromagnetic duce la găsirea setului de analogii din Tabelul 1. În acest caz, masa efectivă, permitivitatea electrică și permeabilitatea magnetică au fost scrise ca un produs: $m = m_0 m_r$, $\varepsilon = \varepsilon_0 \varepsilon_r$, $\mu = \mu_0 \mu_r$, cu m_0 masa electronului liber și ε_0 și μ_0 parametrii vidului, parametri cu indice r reprezentând mărimi relative. Indicele de refracție în cazul câmpului electromagnetic este definit ca $n = \sqrt{\varepsilon_r \mu_r}$.

Tabel 1. Set de parametri analogi electron balistic-lumină pentru diferite polarizări ale câmpului electromagnetic

Funcție de undă electronică	Câmp electromagnetic		
	TE	TM	Polarizat la un unghi α
Ψ	A	$\sqrt{\varepsilon_r / \mu_r} A$	$\sqrt{A_{ }^2 + (\varepsilon_r / \mu_r) A_{\perp}^2} \exp[i \arctan(\sqrt{\varepsilon_r / \mu_r} \tan \alpha)]$
$2(E - V)/\eta$	ω	ω	ω
$E/(E - V)$	ε_r	μ_r	$\sqrt{\varepsilon_r \mu_r} \sqrt{(\varepsilon_r \cos^2 \alpha + \mu_r \sin^2 \alpha) / (\mu_r \cos^2 \alpha + \varepsilon_r \sin^2 \alpha)}$
m_r	μ_r	ε_r	$\sqrt{\varepsilon_r \mu_r} \sqrt{(\mu_r \cos^2 \alpha + \varepsilon_r \sin^2 \alpha) / (\varepsilon_r \cos^2 \alpha + \mu_r \sin^2 \alpha)}$
$m_0 / 2E$	$\varepsilon_0 \mu_0$	$\varepsilon_0 \mu_0$	$\varepsilon_0 \mu_0$

Similar, în cazul polarizării TM expresiile potențialului vector incident, reflectat și transmis sunt

$$A_{in}(\hat{x} \sin \theta_{in} - \hat{y} \cos \theta_{in}) \exp[ik_1(x \cos \theta_{in} + y \sin \theta_{in})], \quad A_r(\hat{x} \sin \theta_r + \hat{y} \cos \theta_r) \exp[ik_1(-x \cos \theta_r + y \sin \theta_r)], \\ A_t(\hat{x} \sin \theta_t - \hat{y} \cos \theta_t) \exp[ik_2(x \cos \theta_t + y \sin \theta_t)]. \quad (7)$$

condițiile de continuitate la interfață pentru componentele tangențiale ale $\mathbf{E}$ și $\mathbf{H}$ impunând

$$\begin{cases} \frac{k_1}{\mu_1} (A_{in} + A_r) = \frac{k_2}{\mu_2} A_t \\ \cos \theta_{in} (A_{in} - A_r) = \cos \theta_t A_t \end{cases} \quad (8)$$

Setul de noi parametri analogi pentru electroni și câmp electromagnetic este prezentat în Tabelul 1. După cum se poate observa, parametri analogi pentru cazurile TE și TM au aceeași dimensionalitate.

O situație mai complicată apare pentru o undă liniar polarizată la un unghi α față de axa z . În acest caz, notând cu $A_{||} = A \cos \alpha$ și $A_{\perp} = A \sin \alpha$, potențialul vector incident, reflectat și transmis se pot scrie ca

$$[A_{||,in} \hat{z} + A_{\perp,in}(\hat{x} \sin \theta_{in} - \hat{y} \cos \theta_{in})] \exp[ik_1(x \cos \theta_{in} + y \sin \theta_{in})], \\ [A_{||,r} \hat{z} + A_{\perp,r}(\hat{x} \sin \theta_r + \hat{y} \cos \theta_r)] \exp[ik_1(-x \cos \theta_r + y \sin \theta_r)], \\ [A_{||,t} \hat{z} + A_{\perp,t}(\hat{x} \sin \theta_t - \hat{y} \cos \theta_t)] \exp[ik_2(x \cos \theta_t + y \sin \theta_t)], \quad (9)$$

iar condițiile la interfață devin

$$\begin{cases} (A_{\parallel,in} + A_{\parallel,r})\hat{z} - (A_{\perp,in} - A_{\perp,r})\hat{y}\cos\theta_{in} = A_{\parallel,t}\hat{z} - A_{\perp,t}\hat{y}\cos\theta_t \\ \sqrt{\varepsilon_{r,1}/\mu_{r,1}}[(A_{\perp,in} + A_{\perp,r})\hat{z} + (A_{\parallel,in} - A_{\parallel,r})\hat{y}\cos\theta_{in}] = \sqrt{\varepsilon_{r,2}/\mu_{r,2}}[A_{\perp,t}\hat{z} + A_{\parallel,t}\hat{y}\cos\theta_t] \end{cases} \quad (10)$$

Condițiile la interfață (6, stânga) și (10) nu permit găsirea unui set de parametri analogi direct, deoarece în (10) intervin atât termeni care depind de $\cos()$ cât și termeni care nu depind de această funcție. Cu toate acestea, se poate obține un set de parametri electron-lumină analogi (vezi Tabelul 1) prin adunarea celor două ecuații (10) și compararea rezultatului cu condițiile la interfață pentru electroni. Pentru a sublinia caracterul diferit al termenilor cu aceeași orientare obținuți în urma adunării ecuațiilor (10), a doua ecuație a fost înmulțită în prealabil cu numărul imaginar i , ceea ce a permis echivalarea funcției de undă electronice cu un număr complex.

Dupa cum se observă din Tabelul 1, setul de parametri obținuți pentru lumina polarizată liniar la un unghi α se reduce la seturile corespunzătoare polarizărilor TE și TM în limitele respective. Însa, spre deosebire de cazurile TE și TM, acest set de parametri nu poate fi utilizat direct pentru a proiecta structuri optice cu același coeficient de reflexie R sau transmisie T ca și cel al nanostructurilor corespunzătoare pentru electroni, pentru că R în cazul unei polarizate liniar la unghi α se obține din [3]

$$R = |A_r / A_{in}|^2 = (\cos\alpha)^2 R_{TE} + (\sin\alpha)^2 R_{TM} = (\cos\alpha)^2 |A_{\parallel,r} / A_{\parallel,in}|^2 + (\sin\alpha)^2 |A_{\perp,r} / A_{\perp,in}|^2 \quad (11)$$

adică se obține tratând componentele TE și TM independent.

Unghiul α poate fi folosit însă ca parametru ușor variabil experimental în structuri optice care simulează propagarea electronilor balistici cu diferite energii. De exemplu, în Fig. 3 este reprezentată dependența de energie și unghi de incidență a coeficientului de reflexie pentru un fascicul de electroni în condițiile $V_1 = 0$, $V_2 = 0.2$ eV, $m_1 = 0.08 m_0$, și $m_2 = 0.15 m_0$, în timp ce în Fig. 4 este prezentată dependența lui R de α și θ_{in} la o interfață între două medii nemagnetice cu $n_1 = 1$, $n_2 = 2.5$. În ambele cazuri valorile mari corespund unor regiuni închise la culoare (R ia valori între 0 și 1).

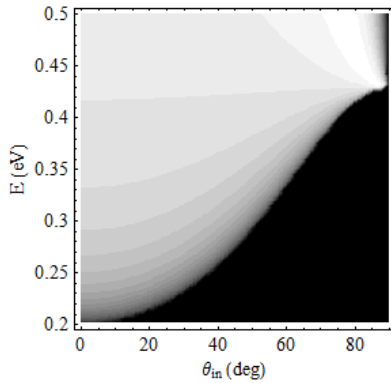


Fig. 3

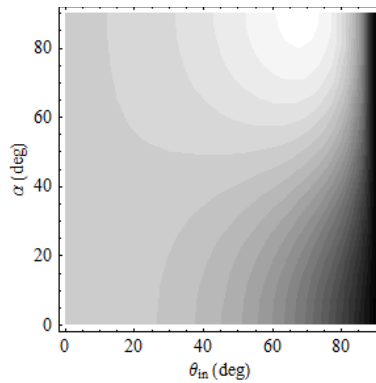


Fig. 4

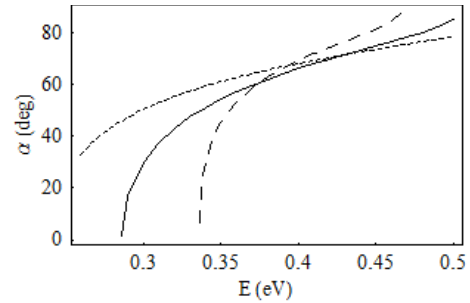


Fig. 5

Același coeficient de reflexie R pentru câmpul electromagnetic și fasciculul de electroni se poate obține corelând parametrii α și E . De exemplu, în Fig. 5 se prezintă o astfel de corelație pentru cazul considerat mai sus al electronilor/luminii incidente la unghiurile $40^\circ/50^\circ$ (linie continuă), $15^\circ/50^\circ$ (linie punctată) și $60^\circ/77^\circ$ (linie intreruptă). Merită observat faptul că alegerea unor unghiuri de incidență diferite pentru electroni și lumină flexibilizează alegerea parametrilor optimi pentru sisteme cuantice/optice cu același R .

Influența polarizării asupra analogiilor între componentele câmpului electromagnetic și componentele spinoriale ale funcției de undă în grafenă

Datorită masei efective nule a purtătorilor de sarcină în grafenă și a relației de dispersie liniară a acestora, similară cu cea întâlnită în cazul fotonilor, analogia dintre propagarea purtătorilor de sarcină în grafenă și a câmpului electromagnetic pare a fi mai evidentă. Cu toate acestea, nu s-a reușit până în prezent deducerea unui set de parametri analogi grafenă/lumină deoarece purtătorii de sarcină în grafenă posedă o proprietate pur cuantică, care nu are analog clasic: chiralitatea.

Grafena este un cristal bidimensional, pe care îl presupunem extins în planul (xy), format din atomi de carbon aranjați într-o structură periodică hexagonală [4]. Funcția de undă spinorială în grafenă, cu componente $\Psi^T = (\psi_1, \psi_2)$ (T indică transpoziția), satisface ecuația

$$\eta v_F \begin{pmatrix} 0 & \gamma_x - i\gamma_y \\ \gamma_x + i\gamma_y & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = (E - V) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \quad (12)$$

unde $v_F \cong c/300$ este viteza Fermi și γ_x și γ_y sunt componentele vectorului de undă γ al purtătorilor de sarcină de-a lungul direcțiilor x și y , cu număr de undă $\gamma = |\gamma|$. Relația de dispersie obținută din (12) este liniară: $E = V \pm \eta v_F |\gamma|$, semnul pozitiv sau negativ corespunzând stărilor de tip electron, respectiv gol.

Coeficientul de reflexie la interfața a două regiuni cu energii potențiale diferite se poate găsi exprimând în fiecare regiune funcția de undă ca o suprapunere de unde care se propagă în direcții x opuse:

$$\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \exp(i\gamma y \sin \theta) \begin{pmatrix} A \exp(i\gamma x \cos \theta) + B \exp(-i\gamma x \cos \theta) \\ s[A \exp(i\gamma x \cos \theta + i\theta) - B \exp(-i\gamma x \cos \theta - i\theta)] \end{pmatrix} \quad (13)$$

și punând condiția la limită ca Ψ să fie constantă la interfață. În (13), $s = \text{sgn}(E - V)$. Legea Snell devine

$$(E - V_1) \sin \theta_1 = (E - V_2) \sin \theta_2 \quad (14)$$

iar coeficientul de reflexie se poate scrie ca

$$R = \left| \frac{s_1 \exp(i\theta_1) - s_2 \exp(i\theta_2)}{s_1 \exp(-i\theta_1) + s_2 \exp(i\theta_2)} \right|^2 \quad (15)$$

Funcția de undă spinorială în grafenă a fost pusă în corespondență cu stările polarizate ale luminii [5], fără a se reuși găsirea unor condiții la limită similare, sau cu un câmp electromagnetic TE [6], fără a se găsi un set de parametri similari. Analogia grafenă-lumină pentru o undă liniar polarizată la un unghi α , ca și în cazul de mai sus, este studiată pentru prima dată în cadrul Etapei 2011 a acestui proiect.

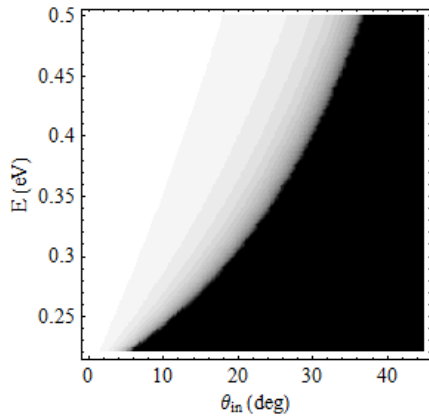


Fig. 6

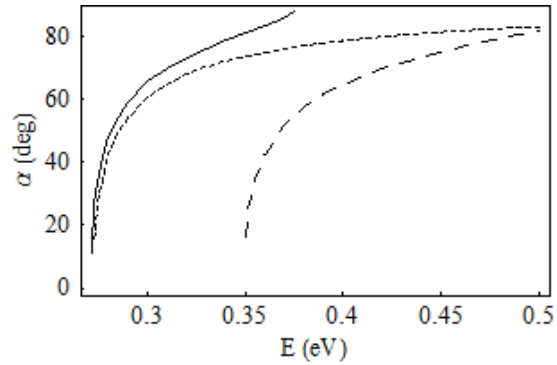


Fig. 7

Aceeași abordare ca și în cazul electronilor Schrödinger duce la o corelare între E și α . În Fig. 6 este prezentată dependența de unghiul de incidență și energie a coeficientului de reflexie al electronilor din grafenă pentru cazul $V_1 = 0$, $V_2 = 0.2$ eV, iar în Fig. 7 este ilustrată corelația dintre E și α când se dorește același coeficient de reflexie și în cazul optic, considerând parametrii dați mai sus referitor la Fig. 4. Curbele continue, cu linie punctată și linie întreruptă corespund electronilor/luminii incidente la unghiurile $15^\circ/75^\circ$, $15^\circ/70^\circ$ și respectiv $25^\circ/75^\circ$. După cum rezultă din Fig. 7, același R în cazul electronilor poate fi obținut în cazul optic într-un interval mai mare sau mai mic pentru E alegând unghiuri de incidență diferite pentru câmpul electromagnetic. Intervalul de energie E este ales astfel încât purtătorii de sarcină din grafenă să fie electroni; un tratament similar se aplică însă și golurilor, care transportă sarcina electrică dacă $E < 0.2$ eV. De asemenea, Fig. 7 arată că analogia cantitativă electron/lumină pe un interval larg de energii nu se poate întotdeauna realiza pentru un singur unghi de incidență. De exemplu, pentru a acoperi intervalul R din cazul electronilor cu energii între 0.2 eV și 0.5 eV, poate fi necesar ca analogul optic să fie iluminat la două

unghiuri de incidență, în fiecare caz variindu-se și polarizarea, astfel încât intervalul pentru coeficientul de reflexie să fie același ca și în cazul electronilor (vezi, de exemplu, curba cu linie continuă, pentru care nu s-a găsit o soluție pentru a care să corespundă unor energii E mai mari decât 0.36 eV).

Deși în simulările de mai sus, indiferent de ecuația satisfăcută de electroni (Schrödinger sau Dirac), s-a considerat cazul unei interfețe între două medii cu caracteristici diferite, rezultatele se pot extinde și pentru o succesiune de regiuni cu diferite lățimi dacă, pe lângă condiția de egalitate a coeficientului de reflexie la fiecare interfață este pusă și condiția de adaptare de fază:

$$k \cos \theta_{opt} L_{opt} = \gamma \cos \theta_{el} L_{el} \quad (16)$$

unde indicii opt și el se referă la cazul optic, și respectiv electronic, și L_{opt} , L_{el} sunt lățimile regiunilor străbătute de fascicule optice și de electroni.

Spre deosebire de setul de parametri analogi electroni/lumină folosit până acum, care impunea variația frecvenței luminii sau a indicilor de refracție pentru a se obține același R ca și în cazul electronilor care traversează structuri formate dintr-o succesiune de regiuni cu parametri diferiți, folosirea polarizării luminii ca parametru ușor controlabil experimental oferă posibilitatea realizării mai facile a unor structuri optice care să aibă aceleași caracteristici de reflexie și transmisie ca și nanostructurile balistice corespunzătoare.

Rezultatele obținute în cadrul prezentului proiect în etapa aferentă anului 2011 au fost publicate în revistă ISI (publicația [P1]).

Rezultate obținute în etapa 2012 a proiectului

În etapa aferentă anului 2012 au fost studiate analogiile desemnate ca activitățile 1.2 (Studiul analogiilor între optică și propagarea electronilor în medii anizotrope/heterostructuri de tip II), 1.3 (Studiul analogiilor între propagarea luminii în metamateriale și nanostructuri), și 1.4 (Studiul analogiei între spin/câmpul magnetic aplicat în nanostructuri și stările de polarizare ale luminii) în proiect. De asemenea, au fost dezvoltați algoritmi de calcul pentru studiul nanostructurilor neomogene și dezordonate.

Analogii între câmpul electromagnetic și electronii balistici ce satisfac ecuația Schrödinger în medii anizotrope/heterostructuri de tip II, metamateriale sau în prezența efectelor de spin

În ceea ce privește activitatea 1.2, bazându-ne pe analogia cu refracția amfoterică a luminii [7], am demonstrat ca la interfața dintre un mediu izotrop, notat cu 1, și unul anizotrop, desemnat ca mediul 2 (vezi Fig. 8) densitatea de curent a electronilor j se refractă la un unghi ϕ_2 ce diferă de unghiul de refracție al vectorului de undă k , θ_2 , aceste unghiuri fiind identice în mediul izotrop 1: $\phi_1 = \theta_1$. Pentru cazul concret al unei interfețe între cristalul izotrop Bi_2Se_3 și cristalul anizotrop Bi_2Te_3 , în care elipsoidul masei efective este oblic față de interfață, am arătat că semnele unghiurilor ϕ_2 și θ_2 pot fi diferite pentru un interval larg de unghiuri de incidență (vezi Fig. 9), coeficientul de transmisie al electronilor fiind semnificativ în tot acest interval, după cum se vede din Fig. 10.

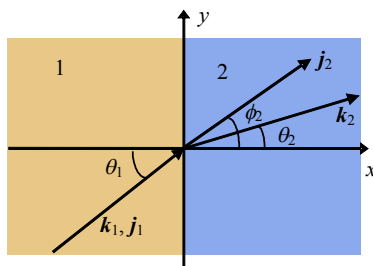


Fig. 8

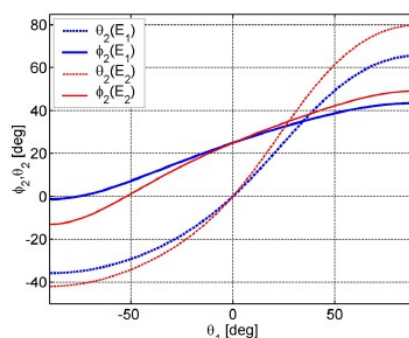


Fig. 9

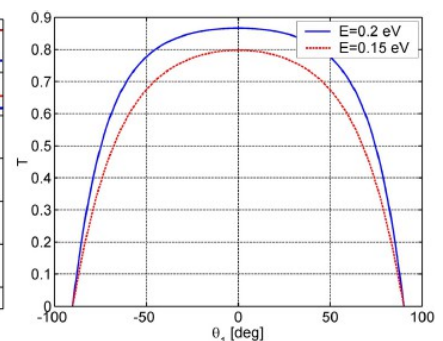


Fig. 10

Ca aplicație a acestui fenomen, am arătat că o sursă punctiformă de electroni, cu o divergență unghiulară de 60° poate fi colimată după refracția la interfața $\text{Bi}_2\text{Se}_3/\text{Bi}_2\text{Te}_3$ aflată la $x = 4$ nm în Fig. 11, divergența

acesteia $\Delta\phi_2 = \phi_2(30^\circ) - \phi_2(-30^\circ)$ scăzând față de valoarea inițială. În plus, fasciculul de electroni poate fi direcționat la un unghi $\phi_{st} = [\phi_2(30^\circ) + \phi_2(-30^\circ)]/2$. Traiectoriile electronilor sunt reprezentate cu linii roșii în Fig. 11, liniile albastre indicând sursa virtuală de electroni, iar dependențele de energia electronilor a unghiurilor $\Delta\phi_2$ și ϕ_{st} sunt ilustrate în Fig. 12. Figura 13 reprezintă probabilitatea de a găsi un electron ce traversează interfața la $x = 4$ nm, oscilațiile din partea stânga a figurii indicând interferența între funcția de unda incidentă și cea reflectată.

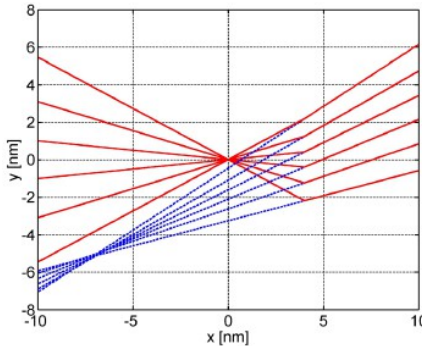


Fig. 11

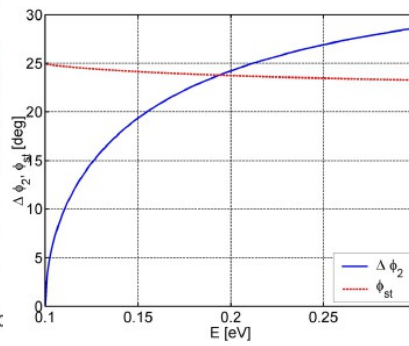


Fig. 12

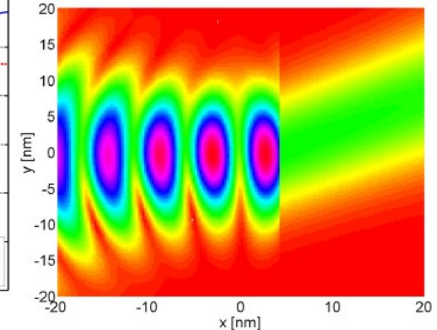


Fig. 13

Aceste rezultate, care sugerează un nou mecanism de manipulare a electronilor balistici, au fost publicate într-o revistă ISI [P2] și prezentate la o conferință internațională [C1].

Propagarea electronilor în heterostructuri de tip II implică o corelație între funcțiile de undă în banda de conducție și valență, ψ_c și ψ_v , funcția de undă totală având (până la un factor de fază) forma $\psi^T = (\psi_c, \psi_v) = (1, \beta)$, unde $\beta = \eta P k / (E - E_v)$, cu $k = [(E - E_c)(E - E_v)]^{1/2} / \eta P$ numărul de unda, P determină corelația între benzile de conducție și valență și $E_{c,v}$ sunt marginile benzilor de conducție și valență [8]. Această funcție de undă este similară vectorului Jones $J^T = (E_x, E_y)$, unde $E_{x,y}$ sunt componentele pe axe x, y ale câmpului electric ce se propagă pe direcția z [3]. În particular, funcția de undă în heterostructuri de tip II este identică vectorului Jones a luminii polarizate la un unghi θ față de axa x , cu $\tan \theta = \beta$. Corelația între energia electronilor E și unghiul de polarizare θ al luminii este reprezentată în Fig. 14 cu linie continuă pentru InAs, variația acestui unghi la interfața InAs/AlSb, $\Delta\theta$, fiind reprezentată cu linie punctată; interfața este similară unui dispozitiv ce rotește unghiul de polarizare al luminii.

În ceea ce privește activitatea 1.3, am arătat că echivalentul electronic al unui metamaterial optic, cu constante dielectrice $\varepsilon < 0$, $\mu < 0$, este un mediu periodic constând din straturi notate cu 1 și 2, cu lățimi $d = d_1 = d_2$, mase efective $m_1 > 0$, $m_2 < 0$ și energii potențiale $E - V_1 < 0$, $E - V_2 > 0$, înconjurate de straturi cu $m_{in}, m_{out} > 0$, $E > V_{in}, V_{out}$. În acest regim de metamaterial transmisia T printr-o structură cu N perioade are o valoare semnificativă chiar dacă numerele de undă $k_i = [2m_i(E - V_i)]^{1/2} / \eta$, $i = 1, 2$, în ambele straturi componente sunt imaginare, după cum se observă din Fig. 15 în care $m_1 = 0.04m_0$, $V_1 = 0.4$ eV, $m_2 = -0.02m_0$, $V_2 = 0$, $m_{in} = m_{out} = 0.03m_0$, $V_{in} = V_{out} = 0$, și $N = 10$, $d = 2$ nm (linie continuă), $N = 10$, $d = 3$ nm (linie punctată) și $N = 5$, $d = 2$ nm (linie gri). Acest rezultat generalizează clasa de nanostructuri similare metamaterialelor în optică [9], cu caracteristici de propagare specifice.

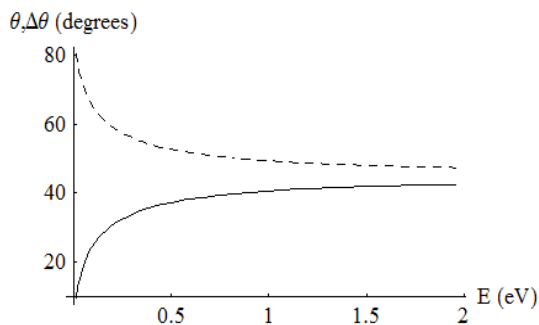


Fig. 14

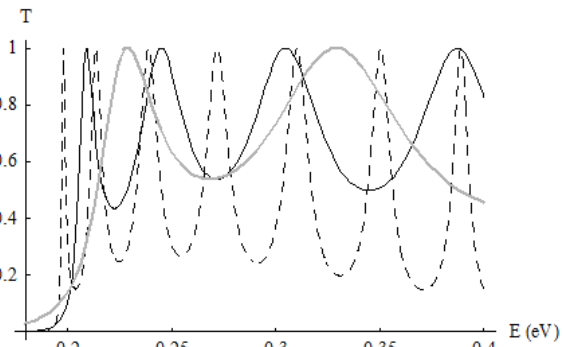


Fig. 15

Parametrii importanți pentru circuite electronice de înaltă frecvență sunt timpii de transfer prin nanostructuri. De aceea, am studiat dependența de energia electronilor incidenți în regim de metamaterial a timpului de întârziere $\tau_{ph} = \eta[\partial \text{Arg}(t)/\partial E]$, relevant pentru pulsuri de electroni cvasi-monoenergetici, și a timpului de traversare $\tau_{tr} = \int dx/v_g(x)$, relevant pentru fascicule de electroni monoenergetici; $v_g(x)$ este viteza de grup a electronilor care se propagă pe direcția x . Pentru cazurile din Fig. 15, aceste dependențe sunt reprezentate cu același tip de linie în Fig. 16 și respectiv Fig. 17, timpii fiind normalizați la timpul de traversare al structurii de lățime $L = N(d_1 + d_2) + d_1$ în absența mediului periodic, $\tau_0 = Lm_{in}/\eta k_{in}$. Se observă că există intervale de energie în care $\tau_{ph} < \tau_0$, structura periodică accelerând transportul electronilor, dar întotdeauna (cel puțin pentru exemplul considerat) $\tau_{tr} > \tau_0$.

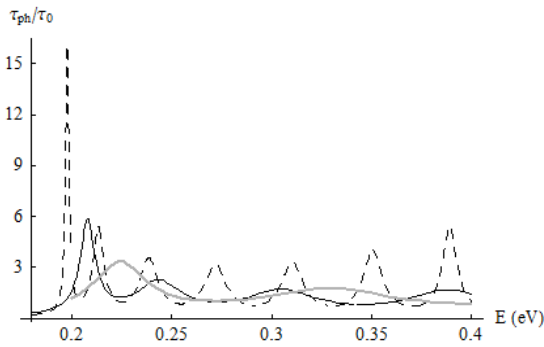


Fig. 16

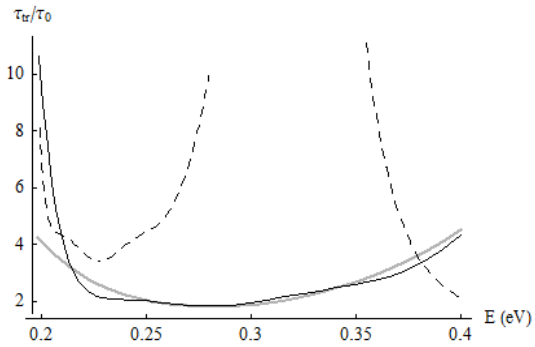


Fig. 17

Rezultatele obținute au fost publicate într-o revistă ISI (publicația [P3]) și prezentate la o conferință internațională [C2].

În ceea ce privește activitatea 1.4, am arătat că propagarea stărilor de polarizare ale luminii, reprezentate prin vectori Jones $J^T = (E_x, E_y)$, este analoagă transportului electronilor prin nanostructuri în prezența efectului Rashba [10]. Efectul Rashba este un cuplaj spin-orbită ce separă stările energetice ale electronilor cu spin sus și jos datorită câmpului electric local, perpendicular pe interfața unei heterojuncțiuni și datorat asimetriei la inversie a structurii. Într-un gaz de electroni bidimensional aflat în planul (x, y) în prezența efectului Rashba (sau a câmpului magnetic echivalent $B = 2\alpha k / g\mu_B$) Hamiltonianul este $H_{2D} = \eta^2 k^2 / 2m + \alpha(k_y \sigma_x - k_x \sigma_y)$, unde α este coeficientul Rashba, $\sigma_{x,y}$ sunt matricile Pauli și $k_{x,y}$ sunt componentele vectorului de undă $\mathbf{k}$ al electronilor pe direcțiile x, y . Funcțiile proprii ale electronilor cu spin sus și jos sunt date (până la un factor de fază) de $\psi_+^T = (\cos(\phi/2), -\sin(\phi/2))$, $\psi_-^T = (\sin(\phi/2), \cos(\phi/2))$ cu $\phi = \arctan(k_y/k_x)$, și sunt similare vectorilor Jones perpendiculari ai luminii polarizate liniar la unghiul $-\phi/2$ și $\pi/2 - \phi/2$ față de axa x , respectiv luminii polarizate circular stânga/dreapta [3]. O aplicație interesantă a acestei analogii este transportul electronilor printr-o interfață între o regiune în care efectul Rashba este absent și o regiune în care acest efect este prezent. La incidență normală spinul electronilor incidenți pe interfață suferă o precesie, ca și în cazul efectului Faraday optic, în timp ce la incidență oblică un fascicul de electroni cu spini de orientare dată se refractă în două fascicule cu spini orientați perpendicular pe vectorii de undă ai celor două fascicule.

Acest ultim fenomen este analog refracției duble în optică ce se întâlnește în cristale uniaxiale, cu indici de refracție ordinari și extraordinari n_e și n_o . Efectul Rashba este dificil de observat în gaze bidimensionale de electroni deoarece electronii nu au aceeași energie, nu sunt incidenți pe interfață sub același unghi, spinul acestora nu poate fi precis controlat și, de obicei, efectul Rashba este însoțit de alte fenomene cum ar fi efectul Dresselhaus [11] ce contribuie cu termenul $\beta(k_x \sigma_x - k_y \sigma_y)$ la Hamiltonianul electronilor. Analogia cu optica clasică poate determina care dintre acești factori este cel care limitează cel mai drastic observarea efectului Rashba. Un rezultat interesant este că, dacă se modifică coeficientul Dresselhaus astfel încât $\beta = \alpha$, funcția de undă este independentă de impulsul electronilor, ceea ce crește probabilitatea ca efectul Rashba să fie observat.

O analogie calitativă electron-câmp electromagnetic în cazul efectului Rashba poate fi găsită impunând, de exemplu, condiția ca pentru un cristal cu n_o și n_e date, unghiul de incidență optic δ_1 este ales astfel încât

unghiul de propagare al unei extraordinare, δ_o , este egal cu unghiul de propagare ale electronilor cu spin sus sau jos în AlGaIn/GaN în prezența efectului Rashba, unghiul de propagare al unei extraordinare, δ_e , fiind dedus din legea Snell. În Fig. 18 sunt prezentate cu linii negre sau gri ca funcție de α , normat la $\alpha_0 = \eta\sqrt{2e/m_0}$, soluțiile găsite pentru unghiurile de propagare optice corespunzătoare electronilor cu energie $E = 0.25$ eV incidenți la 15° pe mediul Rashba cu spin jos sau, respectiv, sus, pentru $n_0 = 1.67$ și $n_e = 1.55$. Dependențe similare, în funcție de energia electronilor sunt reprezentate în Fig. 19, pentru $\alpha = \alpha_0$.

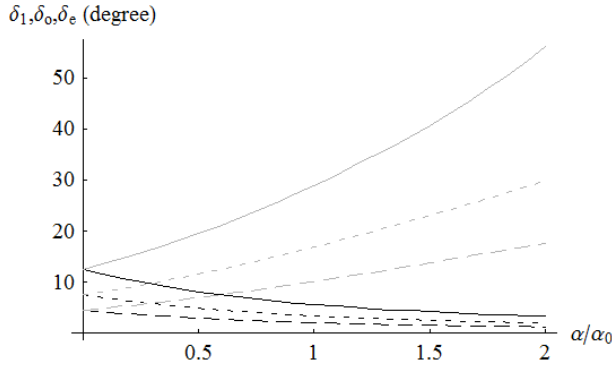


Fig. 18

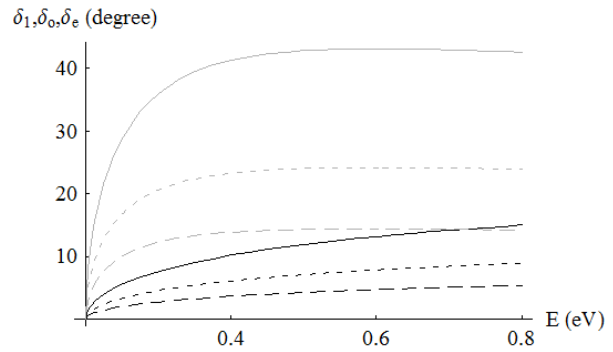


Fig. 19

În prezența efectelor Rashba și Dresselhaus, când $\beta = \alpha$, analogul optic al gazului de electroni este un cristal uniaxial cu axa optică oblică față de interfață, la unghiul χ . Punând condiția ca unghiurile de propagare și reflexie a electronilor cu spin jos și a unei optice extraordinare să fie egale, dependența înclinării axei optice de energia electronilor cu spin jos incidenți la un unghi de 15° este ilustrată în Fig. 20 pentru $\alpha = \beta = 0.05\alpha_0$ (linie continuă neagră), $0.07\alpha_0$ (linie punctată neagră), $0.1\alpha_0$ (linie întreruptă neagră), $0.15\alpha_0$ (linie continuă gri) și $0.2\alpha_0$ (linie punctată gri). Pentru altă condiție, de exemplu, egalitatea unghiurilor de propagare electronice și optice extraordinare pentru $\chi = 20^\circ$, de exemplu, unghiul de incidență pe cristalul uniaxial variază cu energia electronilor ca în Fig. 21. Rezultatele obținute cu privire la analogia între câmpul electromagnetic și electroni în prezența interacțiunii spin-orbită au fost publicate în [P6].

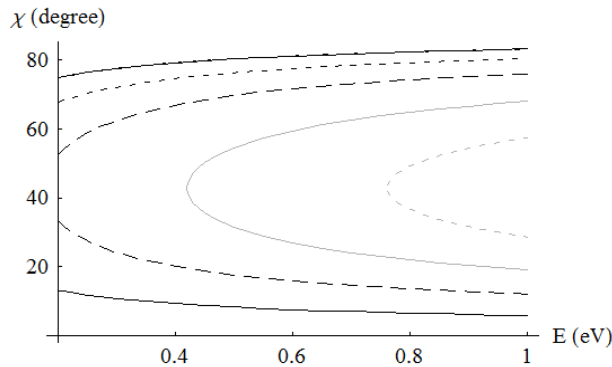


Fig. 20

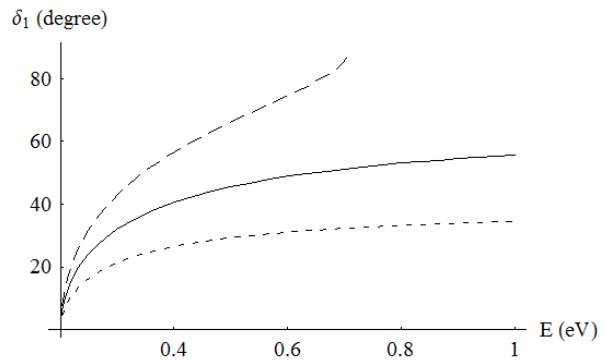


Fig. 21

Analogii între electronii balistici ce satisfac ecuația Dirac și câmpul electromagnetic în medii girotrope și electro-optice, complex conjugate și în cristale fotonice cu puncte Dirac

Aceste analogii cuprind activitățile desemnate în proiect ca 4.2 (Proiectarea unor structuri în care componentele câmpului electromagnetic se propagă similar sarcinilor electrice în dispozitive bazate pe grafenă), 4.3 (Studiul efectelor de polarizare asupra analogiilor între cristale fotonice cu puncte Dirac și grafenă), și 4.4 (Studiul efectelor diferitelor condiții la limită asupra analogiei între câmpul electromagnetic și grafenă). În cursul investigațiilor am observat că activitatea 4.4 nu poate fi tratată separat de 4.2 și 4.3, astfel încât raportarea se referă la două teme: analogia câmp electromagnetic-grafenă (care cuprinde 4.2 și 4.4) și analogia cristale fotonice cu puncte Dirac-grafenă (care cuprinde 4.3 și 4.4).

În ceea ce privește analogia câmp electromagnetic-grafenă am arătat că propagarea sarcinilor electrice în grafenă, caracterizată prin chiralitate, este similară propagării luminii prin medii girotrope și electro-optice și prin medii complex conjugate. În particular, ecuația Dirac pentru funcția de undă spinorială în grafenă, $\psi^T = (\psi_1, \psi_2)$, și ecuația ce descrie propagarea stărilor de polarizare ale luminii cu vector de undă α într-un mediu cu coeficient girotropic γ și coeficient electro-optic β sunt similare [12]:

$$\frac{(E - V)}{\eta v_F} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & k_x - ik_y \\ k_x + ik_y & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}, \quad (\alpha^2 / k_0^2 - \varepsilon) \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \beta - i\gamma \\ \beta + i\gamma & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix}, \quad (17)$$

cu $k_0 = \omega / c$. În consecință, coeficientul de transmisie al electronilor cu viteza Fermi v_F printr-o interfață între două medii cu potențiale V diferite în grafenă (Fig. 22(a)), t_{gr} , și raportul între amplitudinile stărilor de polarizare eliptice, independente, ale luminii, t_{pol} , este similar, adică $t_{pol} = it_{gr}$, dacă schimbarea stării de polarizare $\Delta\theta = \arctan(\gamma / \beta)$ a luminii la trecerea printr-o interfață între mediile 2 (aer) și 1 ($\text{Cd}_{0.5}\text{Mn}_{0.5}\text{Te}$), ca în Fig. 22(b), este corelată corespunzător cu unghiul de incidență al electronilor în grafenă. Dependența dintre $\Delta\theta$ și ϕ_1 , respectiv dintre raportul între câmpul magnetic (ce determină γ) și câmpul electric (ce determină β) și ϕ_1 este ilustrat în Fig. 23, pentru intervalul de unghiuri de incidență în care o astfel de analogie cantitativă există.

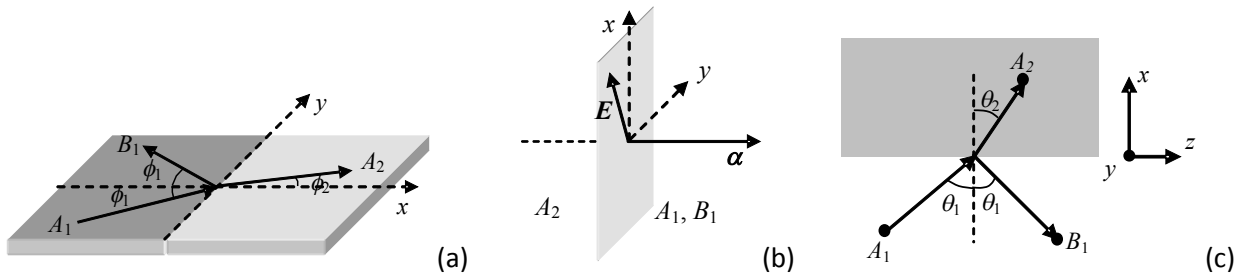


Fig. 22

În cel de-al doilea caz, propagarea electronilor printr-o interfață în grafenă este pusă în corespondență cu propagarea luminii printr-o interfață aer/ mediu complex conjugat (Fig. 22(c)), în care constantele dielectrice relative sunt complexe: $\varepsilon_r = m(a + ib)$, $\mu_r = a - ib$, dar indicele de refracție $n = (\varepsilon_r \mu_r)^{1/2} = [m(a^2 + b^2)]^{1/2}$ este real [13]. Dacă $m = 1$, $a = 1.5$ și $b = -0.05$, coeficientul de transmisie în cazul optic, t_{ccm} , este identic cu t_{gr} dacă $F = [\cos\phi_1(\sin\phi_1 - \sin\phi_2)]/[1 + \cos(\phi_1 + \phi_2)] - \text{Im}[t_{ccm}] = 0$. Această relație poate fi îndeplinită într-un interval larg de unghiuri de incidență ale luminii, $6^\circ < \theta_1 < 42^\circ$, curbele roșie, continuă și albastră, punctată din Fig. 24 corespunzând unghiurilor optice de incidență de 10° și 40° .

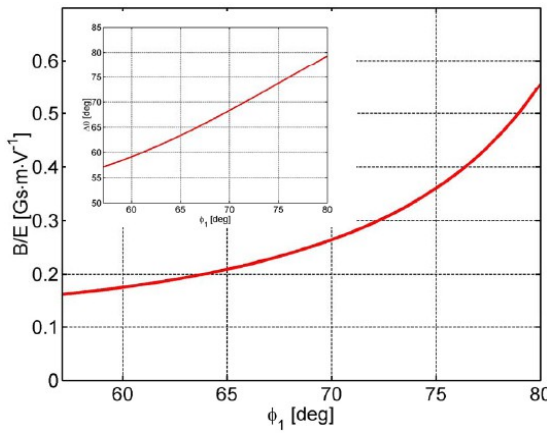


Fig. 23

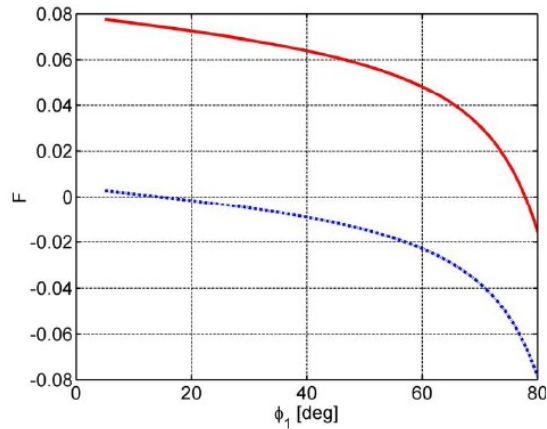


Fig. 24

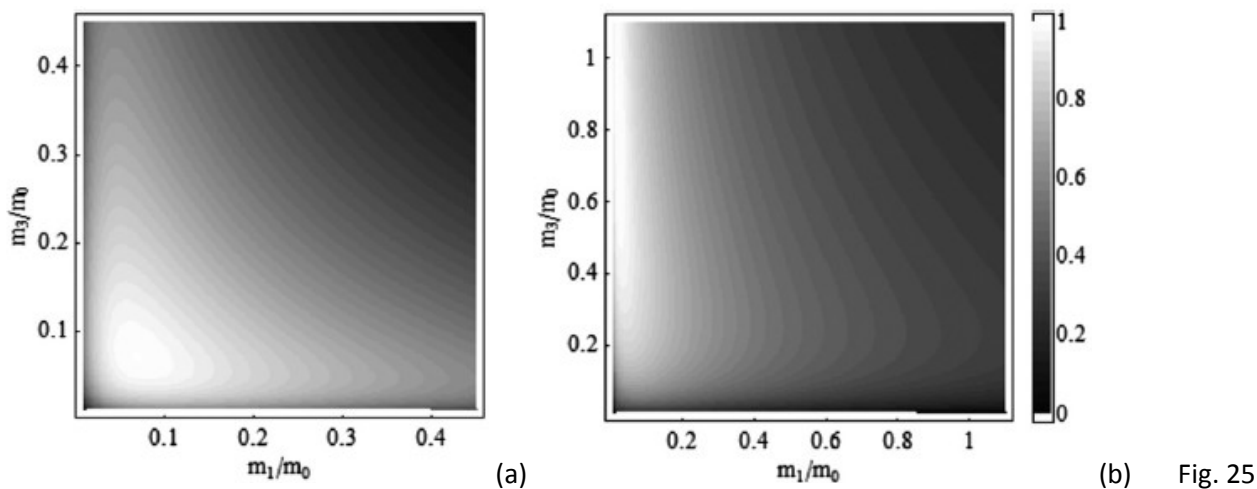
Rezultatele obținute, ce confirmă faptul că chiralitatea electronilor în grafenă poate fi simulată în sisteme optice clasice, au fost publicate într-o revistă ISI (publicația [P4]) și prezentate la o conferință internațională [C3] și la un seminar Heraeus internațional (prin două contribuții, [C4] și [C5], prima fiind invitată).

În ceea ce privește analogia cristale fotonice cu puncte Dirac-grafenă, studiul a pornit de la faptul că se observă puncte Dirac în cristale fotonice doar pentru polarizarea TE, nu și pentru polarizarea TM a luminii. În primul caz ecuația Dirac sub forma

$$\begin{pmatrix} 0 & v_D(k_x - ik_y) \\ v_D(k_x + ik_y) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = 2(\omega - \omega_D) \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} \quad (18)$$

(similară cu cea din grafenă) este satisfăcută de stările Bloch degenerate $\Psi_{1,2}$ în colțurile primei zone Brillouin, cu v_D viteza luminii în mediul omogen și ω_D frecvența în punctul Dirac. Analogia grafenă-cristale fotonice cu puncte Dirac a fost abordată din perspectiva propagării prin regiuni cu relație de dispersie liniară, tip grafenă, înconjurate de regiuni în care lumina satisface ecuația Maxwell, respectiv de regiuni în care electronii satisfac ecuația Schrödinger. O astfel de problemă a fost tratată separat în optică [14] și în dispozitive bazate pe grafenă [15], rezultatele obținute sugerând că tranziția între ecuații Maxwell-Dirac-Maxwell în cazul fotonilor sau Schrödinger-Dirac-Schrödinger în cazul electronilor ducând la scăderea transmisiei față de cazul în care o astfel de transformare a ecuației ce guvernează propagarea fotonilor/electronilor nu are loc. Avantajul corelării rezultatelor din optică și grafenă este că se poate propune și fabrica un cristal fonic care să simuleze propagarea electronilor în grafenă cu contacte. Studiul este cu atât mai important cu cât influența electrozilor asupra performanțelor dispozitivelor cu grafenă nu este pe deplin înțeleasă. Analogia folosită permite fabricarea unei structuri optice care, pentru diferite polarizări ale luminii, să simuleze fie propagarea electronilor prin grafenă cu contacte fie propagarea electronilor printr-un material semiconductor în prezența contactelor metalice; analogia optică/mecanică cuantică în a doua situație este mai bine înțeleasă.

Analogiile grafenă-cristal optic nu sunt unice în sensul că depind de condițiile de continuitate ale funcției de unda la interfața contact/grafenă. De exemplu, dependența transmisiei electronilor de energie și unghiul de incidență variază în funcție de condițiile de continuitate. Nu există motive pentru care una sau alta dintre condițiile la limită între contacte, în care electronii satisfac ecuația Schrödinger, și grafenă să fie favorizate. În consecință, fabricarea unui cristal fonic și studiul transmisiei prin acesta ca funcție de unghiul de incidență ar putea elucida problema condițiilor la interfață potrivite între grafenă și contacte metalice sau semiconductoare. Importanța practică a acestui studiu este găsirea contactelor potrivite pentru obținerea unei transmisii cât mai mari în dispozitivele bazate pe grafenă. De exemplu, în Fig. 25 (a) și (b) este reprezentată dependența transmisiei de masele efective, m_1 și m_3 , ale electronilor din contacte, pentru două condiții la limită diferite. Se poate observa din aceste simulări că, în funcție de condițiile la limită, transmisia optimă este obținută pentru contacte identice sau nu.



Dezvoltarea unor algoritmi de calcul pentru studiul nanostructurilor neomogene și dezordonate

Pe lângă activitățile intense în vederea dezvoltării unor analogii între electronii balistici și câmpul electromagnetic, s-a început dezvoltarea unor algoritmi de calcul pentru studiul transportului electric în nanostructuri dezordonate și neomogene [16]. Transportul în acest tip de nanostructuri a făcut obiectul unor simulări intense în 2013 în vederea găsirii unei configurații care să reprezinte cel mai apropiat analog pentru un mediu optic care amplifică sau absoarbe radiația electromagnetică.

Dificultatea majoră în tratarea transportului de sarcină în structuri nanometrice, tratate ca sisteme cuantice deschise, este determinarea funcțiilor de undă pentru un interval suficient de larg de energii, necesar în rezolvarea sistemului ecuațiilor cuplate Schrödinger și Poisson. Formalismul matricii R permite o soluționare eficientă a acestei probleme din punct de vedere al timpului de calcul. Acesta presupune parcurgerea a două etape: (i) determinarea valorilor proprii ale energiei pentru problema asociată sistemului fizic considerat, cu condiții la capete fixate, (ii) determinarea funcțiilor de undă și a coeficienților de transmisie pentru fiecare energie cu un cost computațional mult redus.



Fig. 26

În acest scop, în cadrul formalismului matricii R sistemul fizic analizat este divizat într-o regiune internă Ω_0 ("regiunea de împrăștiere", în care au loc interacțiunile propriu-zise) și o regiune externă Ω_s , corespunzând contactelor (semi-infinite, invariante translațional, cu un potențial de confinare care definește canalele de transport). Geometria problemei este descrisă în Fig. 26. În acest caz, funcția de undă a unui electron incident în canalul ν din contactul s este

$$\psi(\mathbf{r} \in \Omega_s; E) = L^{-1/2} [\exp(-ik_\nu z_s) \phi_\nu(\mathbf{r}_{\perp,s}) + \sum_{\nu'} S_{\nu\nu'}(E) \exp(ik_{\nu'} z_s) \phi_{\nu'}(\mathbf{r}_{\perp,s})] \quad (19)$$

elementele matricii de împrăștiere S fiind legate de funcțiile de transmisie prin $T_{\nu\nu'}(E) = |S_{\nu\nu'}(E)|^2$. În regiunea de împrăștiere funcțiile de undă sunt soluții ale ecuației Schrödinger staționare în potențialul self-consistent $W_{sc}(\mathbf{r})$, și sunt dezvoltate după sistemul complet format de funcțiile de unda $\chi_l(\mathbf{r})$ ale unei probleme Wigner-Eisenbud auxiliare cu energii proprii E_l . Pentru a găsi matricea S se determină întâi funcția R definită ca

$$R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = -(\hbar^2 / 2m) \sum_l \chi_l(\mathbf{r}) \chi_l^*(\mathbf{r}') / (E - E_l) \quad (20)$$

și apoi S prin relația $S = -[I + (i/m)R\kappa][I - (i/m)R\kappa]^{-1}$, unde I este matricea unitate, R este matricea cu elemente determinate de funcția R iar κ este o matrice diagonală cu elemente determinate de numerele de unda ale electronilor incidenti în diferite canale.

Pentru implementarea numerică a formalismului matricii R am utilizat o metoda iterativă self-consistentă pentru a rezolva sistemul cuplat al ecuațiilor Schrödinger și Poisson, în care se poate utiliza o procedură de mixare liniară pentru potențialul self-consistent sau una de tip Broyden. Secțiuni ale codului numeric dezvoltat sunt paralelizate, ceea ce duce la o reducere semnificativă a timpului de calcul. Dezvoltarea acestor algoritmi de calcul ne permite lucrul cu structuri neomogene. Intenția este să studiem neomogenități geometrice și neomogenități de dopare/de concentrații de purtători pentru a vedea care dintre aceste configurații poate fi considerată ca fiind cel mai apropiat analog pentru un mediu optic activ.

Rezultate obținute în etapa 2013 a proiectului

În etapa aferentă anului 2013 au fost realizate simulări intense ale transmisiei electronilor în nanostructuri neomogene și dezordonate. Toate simulările făcute au folosit metoda matricii R . În acest sens, au fost folosite rezultatele obținute în cadrul proiectului în ultima parte a anului 2012, când au fost dezvoltați algoritmi de calcul paralelizați care permit studiarea structurilor neomogene; acești algoritmi au fost optimizați în prima parte a anului 2013.

Obiectivul etapei din 2013, și anume studiul transportului electronilor în nanostructuri neomogene și dezordonate, își propune stabilirea unei analogii cu propagarea luminii în medii dezordonate active. Această analogie nu a mai fost studiată până acum în literatura de specialitate. În cazul luminii, s-a stabilit că pragul de localizare în structuri dezordonate depinde de caracterul omogen sau neomogen al distribuției centrilor de împrăștiere [17]. Confinarea spațială a luminii favorizează localizarea undelor electromagnetice cu anumite lungimi de undă datorită dependenței de lungimea de undă a interferenței induse în structurile cu dimensionalitate redusă [18]. În plus, dacă mediul optic este activ, adică absorbant sau amplificator, pragul de localizare al luminii depinde și de coeficientul de absorbție, care distruge localizarea fotonilor deoarece inhibă interferența luminii împrăștiată, respectiv de coeficientul de câștig, care favorizează localizarea prin amplificarea luminii retroîmprăștiată [17,18].

Aceste considerente au dus la analiza analogiilor lumină-electroni în medii dezordonate active dintr-o nouă perspectivă. În mediile optice active intensitatea luminii scade sau crește cu distanța de propagare, depinzând de caracterul absorbant sau amplificator al mediului. Pe de altă parte, în cazul electronilor curentul (considerat de obicei ca mărime similară intensității optice) este constant de-a lungul conductorului. În consecință o neomogenitate spațială în cazul propagării electronilor nu poate fi decât un conductor în care concentrația electronilor liberi, dimensiunea transversală a conductorului sau concentrația centrilor de împrăștiere variază spațial.

În stabilirea configurației unei nanostructuri neomogene analoage unui mediu optic activ dezordonat, care face obiectul activității 1.1, am luat în calcul și considerații practice în stabilirea configurației de interes. Cazul în care dimensiunea transversală a conductorului variază spațial nu prezintă utilitate din punct de vedere al aplicațiilor, astfel încât această situație nu a fost investigată. Pe de altă parte, dacă am avea o variație spațială a concentrației de electroni ar apare un câmp electric intern, fără echivalent optic, cu excepția mediilor în care indicele de refracție variază spațial; astfel de medii, în special cele dezordonate, sunt dificil de fabricat. În consecință, am considerat că o variație spațială a împrăștierii electronilor este mai apropiată de un mediu optic activ dezordonat, și am ales acest caz pentru investigații numerice. În plus, această situație are relevanță practică deoarece în timpul fabricării nanostructurilor, în particular a nanofirelor, dezordinea/distribuția centrilor de împrăștiere poate apare gradual.

Odată ce am stabilit configurația de interes, primele simulări au vizat o nanostructură omogenă bidimensională, cu o distribuție dezordonată a centrilor de împrăștiere (a impurităților). O astfel de structură este prevăzută a fi studiată în cadrul activității 1.2. Am studiat transportul de sarcină, în particular transmisia, în astfel de nanostructuri cu impurități atractive sau repulsive modelate ca arii de potențiale Gaussiene distribuite

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha} V_0 \exp\left(-\frac{(\mathbf{r}_{\alpha} - \mathbf{R}_{\alpha})^2}{2\sigma^2}\right) \quad (21)$$

unde $\mathbf{r}_{\alpha}$ sunt centrele unui grid pătratic și $\mathbf{R}_{\alpha}$ sunt alese arbitrar în regiunea de împrăștiere, funcție de un parametru de ordine. Potențialul de împrăștiere V_0 este -1 eV pentru impurități atractive și 1 eV pentru impurități repulsive iar deviația standard $\sigma = 1$ nm este păstrată aceeași pentru toate centrele. Gradul de ordine η definește deplasarea centrelor de împrăștiere față de gridul 10×10 pătratic: $\mathbf{R}_{\alpha} = \mathbf{R}_{\alpha}^0 + \delta\mathbf{R}$ cu $\delta\mathbf{R} = L(1-\eta)r_1\hat{x} + L(1-\eta)r_2\hat{y}$, unde $L = 80$ nm este latura regiunii de împrăștiere iar $r_{1,2}$ sunt numere aleatoare între 0 și 1. Pentru $\eta = 1$ sistemul este ordonat, cazul $\eta = 0$ corespunzând unei dezordini complete. Am presupus că regiunea pătrată de împrăștiere este marginită de contacte ideale, masa efectivă a electronilor în dispozitiv fiind $m = 0.065m_0$, valoare întâlnită în GaAs.

Parametrul de interes este transmisia electronilor între contactele sursă și drenă, T_{SD} . Menționăm că în toate simulările făcute, prin transmisie înțelegem transmisia totală, prin toate canalele deschise (valoarea normată a conductanței), astfel încât acest parametru poate lua valori supraunitare. În cazul conductorilor bidimensionali valoarea transmisie este determinată de numărul canalelor deschise. Acest parametru a fost reprezentat în figurile care urmează după ce a fost mediat peste 100 eșantioane cu dezordini distincte.

Figura 27 ilustrează transmisia pentru cazul centrilor de împrăștiere atractive, pentru valori ale η de 1.000, 0.994, 0.990, 0.986, 0.980, 0.970, 0.960, 0.940, 0.900, și 0.000, curbele respective fiind plasate de sus în jos în regiunea A. În inset-ul Fig. 28 sunt reprezentate transmisia pentru valori mari ale parametrului de ordine: 1.000, 0.998, 0.996, 0.994, 0.992, 0.990. Se poate observa că maximele abrupte ale transmisiei au tendința de a se aplatiza cu scăderea ordinii, iar regiunea interzisă, aflată între 0.06 și 0.1 eV pentru un sistem complet ordonat, dispare pe măsură ce η scade la valori de 0.97-0.98. Această regiune interzisă este un efect de superlatică. Existența acestei regiuni interzise în cazul centrilor de împrăștiere atractive se poate observa și din platoul care apare în integrala coeficientului de transmisie, reprezentată în Fig. 28. Această figură sugerează prezenta unei tranziții de fază pentru η în intervalul [0.97,0.98].

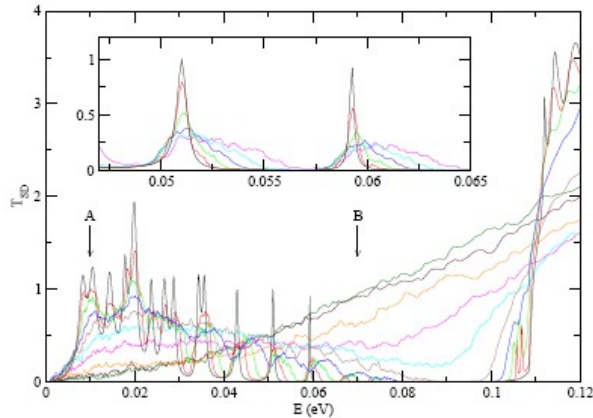


Fig. 27

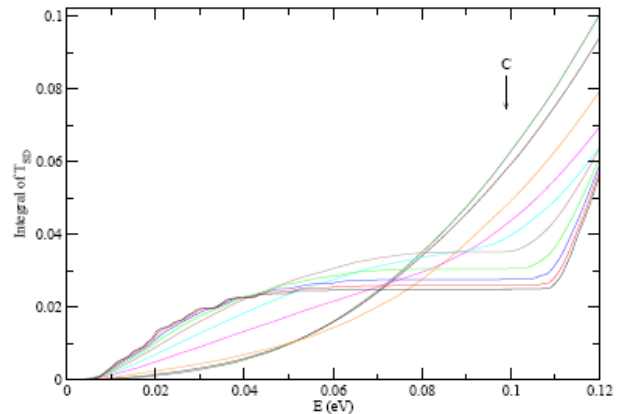


Fig. 28

Dependența de energie a T_{SD} în cazul centrilor de împrăștiere repulsivi este ilustrată în Fig. 29. Curbele descresc în amplitudine pentru valori η de 1.000, 0.990, 0.985, 0.980, 0.970, 0.920, 0.000. Ca și în cazul centrilor de împrăștiere atractivi, maximele se aplatizează cu creșterea dezordinii, și valoarea de prag a energiei, de la care transmisia are valori semnificative, scade odată cu creșterea η . Acest ultim efect poate fi explicat printr-o reducere a eficienței retroîmprăștierii de către rețeaua ordonată de centri repulsivi.

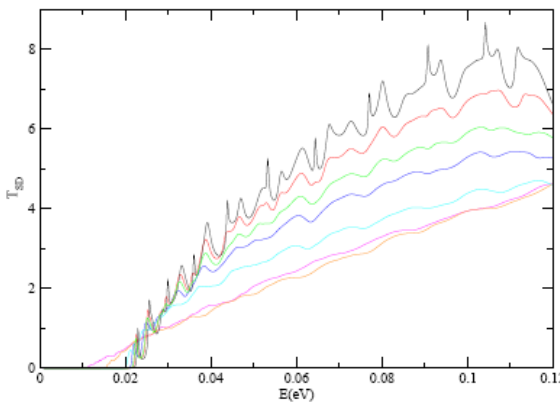


Fig. 29

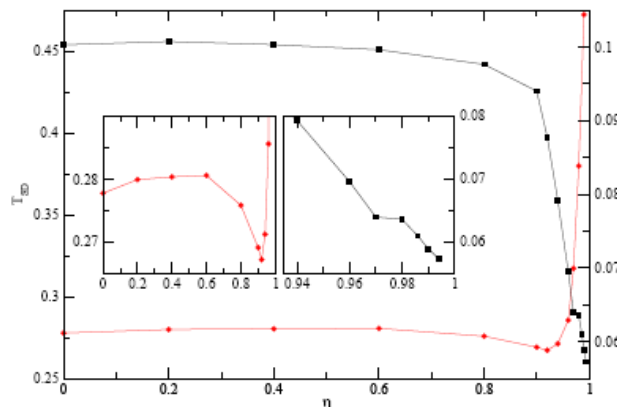


Fig. 30

Diferența semnificativă între efectele centrilor de împrăștiere atractivi și repulsivi este evidențiată și de dependența de energie a transmisie integrate totale, reprezentată în Fig. 30 cu linie neagră și, respectiv, roșie. Din această figură se observă că transmisia integrată scade abrupt la o anumită valoare a η pentru impuritățile repulsive, și crește rapid pentru cele atractive. Originea acestui fenomen este în studiu. Simulările numerice arată că se poate schimba valoarea și dependența de energie a coeficientului de transmisie prin introducerea (intenționată sau nu) a unor impurități de un anumit tip: atractive sau repulsive. Rezultatele obținute până în prezent au fost raportate la conferința internațională [C6].

Trebuie remarcat că studiul transmisiei în conductori dezordonați prezintă o complexitate mult mai mare decât împrăștierea luminii pentru că tipul centrilor de împrăștiere poate fi variat: aceștia pot fi fie atractivi fie repulsivi, transportul purtătorilor de sarcină fiind diferit în aceste cazuri. Aceste două tipuri de centre de împrăștiere nu au corespondent optic. Cele două tipuri de medii active în optică (absorbant sau

amplificator) nu pot fi echivalate cu impuritățile atractive sau repulsive în cazul transportului electronilor deoarece în ultimul caz se modifică tipul împrăștierii și nu doar amplitudinea câmpului/funcției de undă.

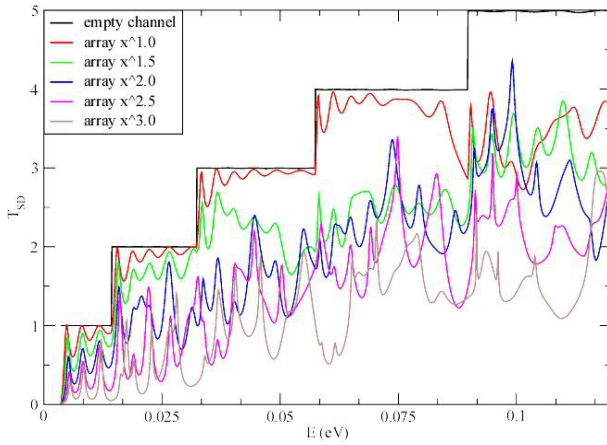


Fig. 31

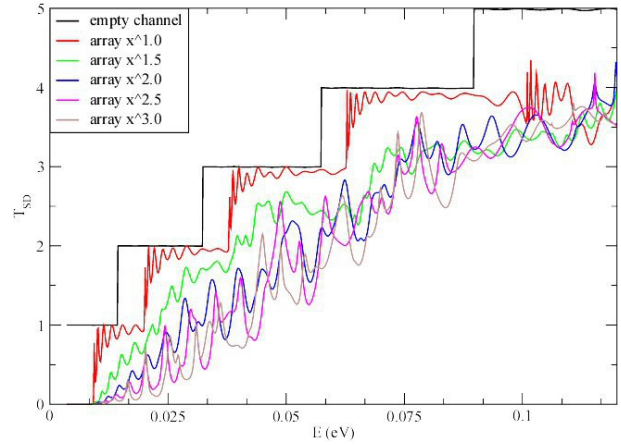


Fig. 32

Un studiu al influenței celor două tipuri de impurități, atractive și repulsive, asupra transmisiei electronilor în nanostructuri neomogene puternic confinate spațial este prezentat în Fig. 31 și, respectiv, Fig. 32. Structura bidimensională a avut o lățime $W = 40$ nm și o lungime $L = 160$ nm, cele $N = 100$ impurități considerate fiind plasate ordonat (în nodurile unui grid egal distanțat pe direcția transversală y și ne-egal distanțat pe direcția longitudinală x) dar distribuite spațial conform unei legi polinomiale. Mai exact, concentrația impurităților a fost aleasă de forma

$$n_m(x) = n_{0m}x^m, \quad \int_0^L n_m(x)dx = N \quad (22)$$

În Fig. 31 și 32 sunt prezentate rezultatele transmisiei pentru $m = 1, 1.5, 2, 2.5$ și 3 , cu linie neagră fiind reprezentată valoarea transmisiei în cazul în care nanoconductorul nu conține nici un centru de împrăștiere. Prima constatare, aparent surprinzătoare, este că transmisia se comportă similar pentru cazul centrilor de împrăștiere atractivi și repulsivi. Comportarea în trepte a transmisiei, cu un prag al energiei la fiecare treaptă în cazul centrilor de împrăștiere repulsivi (Fig. 32), urmărește transmisia unui nanoconductor ideal (fără impurități), pragul energiei fiind în acord cu rezultatele prezentate în Fig. 29. De asemenea, comparând Fig. 27 și 29 cu Fig. 31 și 32, se observă că impuritățile distribuite neomogen dar ordonat au un efect similar asupra transmisiei ca și dezordinea introdusă într-o rețea de centri de împrăștiere distribuiți omogen. În particular, structura în trepte a transmisiei se estompează cu cât neomogenitatea este mai pronunțată și valoarea coeficientului de transmisie scade, scăderea fiind mai accentuată pentru centrii de împrăștiere atractivi.

Rezultatele simulărilor din Fig. 31 și 32, deși au permis echivalarea distribuției neomogene dar ordonate a centrilor de împrăștiere cu o creștere a dezordinii într-un sistem omogen, nu au relevat diferențe între centrele de împrăștiere atractive și repulsive, lucru datorat (ținând cont și de Fig. 27 și 29) unei confinări prea puternice a sistemului, în care caracterul interacției electron-impuritate nu se poate manifesta plenar.

Din acest motiv, am considerat un nanoconductor bidimensional mai lat, cu dimensiuni $W = L = 80$ nm, în care am distribuit cele $N = 100$ impurități într-un mod ordonat, conform legii polinomiale (22). Rezultatele obținute în cazul centrilor de împrăștiere atractivi sunt prezentate în Fig. 33, un detaliu al acestei figuri putând fi observat în Fig. 34. Comparând aceste figuri cu Fig. 27 se pot trage următoarele concluzii: (i) pentru m mici (neomogenități moderate) coeficientul de transmisie se comportă similar cu cazul unei distribuții omogene de impurități ordonate, (ii) cu creșterea parametrului m (pe măsură ce neomogenitatea crește) regiunea interzisă, manifestată prin valori practic nule ale coeficientului de transmisie T_{SD} se deplasează spre energii mai mici și valoarea T_{SD} scade (în cazul dezordinii, regiunea interzisă nu se deplasează), (iii) comportarea oscilatorie a coeficientului de transmisie se manifestă pentru toate valorile m , fiind rezultatul interferenței funcției de undă în rețeaua de centri de împrăștiere dispuși ordonat. Pe de altă parte, comportarea globală a transmisie este similară celei din cazul sistemului omogen dezordonat. În

toate cazurile, valoarea T_{SD} este mult mai mică decât transmisia într-un nanoconductor fără centri de împrăștiere, reprezentată cu linie neagră în Fig. 33.

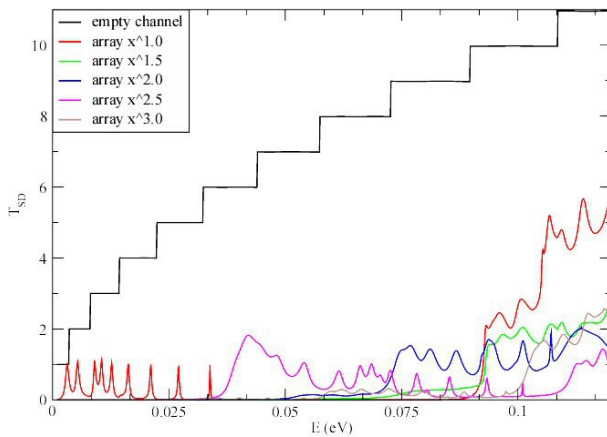


Fig. 33

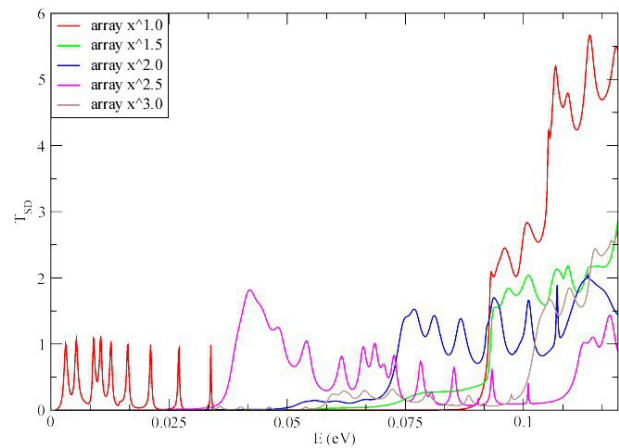


Fig. 34

Dependența de energie a coeficientului de transmisie pentru impuritățile repulsive poziționate ordonat dar neomogen este ilustrată în Fig. 35, un detaliu al acestei figuri fiind prezentat în Fig. 36. Observăm că T_{SD} este mai mare decât în cazul impurităților atractive, în acord cu rezultatele din cazul dezordonat. Din nou, comportarea generală pentru m mic este similară cu cea din cazul unei distribuții ordonate și omogene a centrilor de împrăștiere repulsivi, valori semnificative ale coeficientului de transmisie apărând la energii mai mari pe măsură ce m crește. Ultima observație este în dezacord cu comportarea T_{SD} în conductori omogeni. În plus, dependența de energie a coeficientului de transmisie este practic identică pentru $m > 2$ în cazul parametrilor utilizați de noi în simulări, cu excepția oscilațiilor observate în T_{SD} (datorate interferențelor funcției de undă în structura ordonată), care tind să nu mai fie regulate.

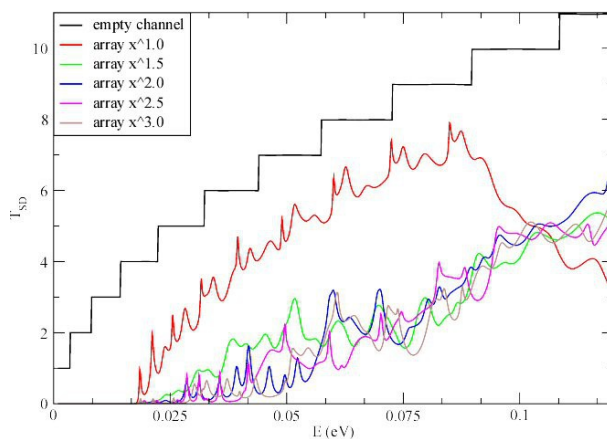


Fig. 35

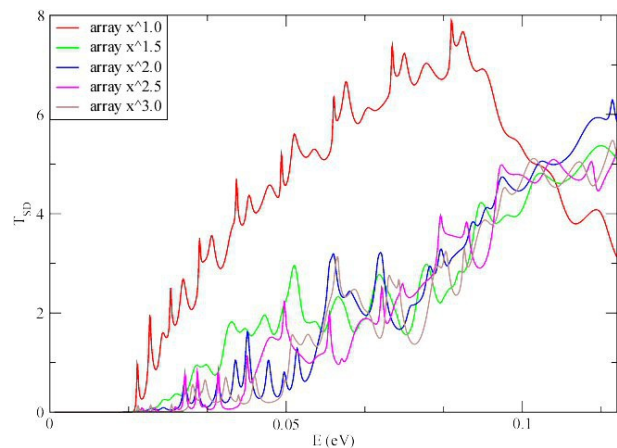


Fig. 36

Astfel, spre deosebire de cazul centrilor de împrăștiere atractivi, neomogenitatea impurităților repulsive are o influență mult mai mică asupra transportului electronilor. Acest lucru este important din punct de vedere practic, pentru că relaxează toleranțele de fabricație ale dispozitivelor de dimensiuni nanonetrice în care se introduc impurități repulsive. Simulările numerice obținute în 2013 au fost publicate într-o revistă ISI [P7].

Rezultate obținute în etapa 2014 a proiectului

Etapa aferentă anului 2014 s-a axat pe fabricarea unor nanofire neomogene, în care densitatea de purtători/centri de împrăștiere este variabilă și controlată, precum și pe caracterizarea morfologică și structurală a acestora. Această activitate a necesitat un volum de muncă foarte mare astfel încât, pentru găsirea condițiilor optime în care neomogenitatea purtătorilor de sarcină are efecte observabile, am considerat necesară dezvoltarea în paralel a simulărilor numerice pentru nanofire cu concentrații variabile

de purtători pe direcție longitudinală (în lungul firului). În continuare se vor detalia rezultatele obținute în cadrul studiilor de optimizare a profilului distribuției neomogene a centrilor de împrăștiere precum și de fabricare a nanofirelor.

Optimizarea efectului neomogenității centrilor de împrăștiere asupra transportului balistic

O distribuție neomogenă a centrilor de împrăștiere poate îmbunătăți caracteristicile termice și/sau de transport a unor dispozitive. De exemplu, se poate obține o creștere simultană a coeficientului Seebeck și a conductivității electrice în materiale policristaline [19], sau poate crește luminozitatea LED-urilor polimerice [20]. Modelarea unei distribuții neomogene a centrilor de împrăștiere a fost făcută până în prezent doar pentru transport difuziv [21-23], efecte cuantice fiind luate în considerare doar pentru sisteme nanometrice cu distribuție neomogenă a secțiunii transversale [24].

Pentru a studia efectul neomogenităților în distribuția centrilor de împrăștiere asupra transportului de sarcină, am calculat coeficientul de transmisie a purtătorilor balistici, folosind formalismul matricii R [16], detaliat mai sus. Spre deosebire de simulările făcute în alte etape ale acestui proiect, am considerat o distribuție ordonată a centrilor de împrăștiere/impurităților, în care am variat doar gradientul centrilor de împrăștiere. În acest fel, am putut să ne concentrăm atenția exclusiv asupra efectului neomogenității centrilor de împrăștiere asupra coeficientului de transmisie. În geometria studiată, reprezentată în Fig. 37, centrii de împrăștiere (reprezențați prin puncte în Fig. 37) sunt modelați prin potențiale Gaussiene, a căror distribuție spațială după direcția y (transversală) este omogenă iar după direcția x (longitudinală) variază după legea $x \propto n^p$, unde n indexează rândul impurităților pe direcția x .

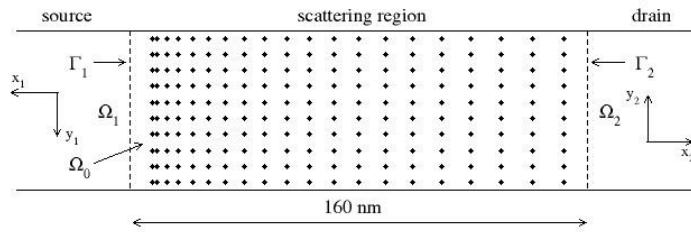


Fig. 37

Purtătorii de sarcină incidenti din contactul din stânga (sursă) interacționează cu centrii de împrăștiere în regiunea centrală și sunt colectați de contactul din dreapta (drenă), interacțiunea fiind descrisă de ecuația Schrödinger independentă de timp, în care Hamiltonianul uni-particulă în aproximația masei efective este

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + W(\mathbf{r}), \quad W(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha} V_0 \exp\left(-\frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha})^2}{2\sigma^2}\right) \quad (23)$$

unde m este masa efectivă a purtătorilor, $\mathbf{r} = (x, y)$ este vectorul de poziție, $\mathbf{r}_{\alpha}$ reprezintă poziția centrului impurității cu potențial Gaussian și deviație standard σ . A fost modelat efectul impurităților atractive și repulsive, cu $V_0 = -1$ eV și, respectiv, 1 eV, în ambele cazuri alegând $\sigma = 1$ nm.

Ca exemplu am studiat cazul împrăștierei într-un gaz electronic bidimensional în GaAs în care $m = 0.0655 m_0$, regiunea de împrăștiere, cu lungime de 160 nm și lățime de 80 nm, conținând 20×10 centri de împrăștiere. Considerând contactele ideale, s-au făcut simulări pentru impurități atractive și repulsive și $p = 1, 1.05, 1.1$ și 1.5. Primul caz corespunde unui aranjament periodic al impurităților.

În Fig. 38(a)-(c) este reprezentată dependența de energie a coeficientului de transmisie T între sursă și drenă pentru $p = 1, 1.1$ și, respectiv, $p = 1.5$, în cazul impurităților atractive și pentru un număr crescător de canale. Pentru $p = 1$ (Fig. 38(a)) se observă formarea unei succesiuni de benzi energetice permise și interzise pentru fiecare canal, ca rezultat al efectului de superlatice în structuri periodice. Totuși, indicii ale prezenței benzilor de energie se observă, la energii mici, până la $p = 1.1$. Maximele coeficientului de transmisie sunt largi în benzile permise și au o formă triunghiulară, datorată faptului că electronii în diferite canale/cu diferite energii E simt o distribuție diferită a energiei potențiale, lățimea și înălțimea gropilor de potențial Gaussiene periodice depinzând de E . Între 0.04 eV și 0.9 eV apare o bandă interzisă de energie, în care $T = 0$. Pe măsură ce neomogenitatea (valoarea lui p) crește, profilul potențialului nu mai este periodic, iar maximele descresc în amplitudine până ce, în structuri suficient de neomogene, coeficientul de

transmisie variază aproape liniar cu energia, ca și în cazul sistemelor dezordonate [C6]. Pentru impurități atractive intervalul de transmisie de până la 0.04 eV dispare pentru $p = 1.5$.

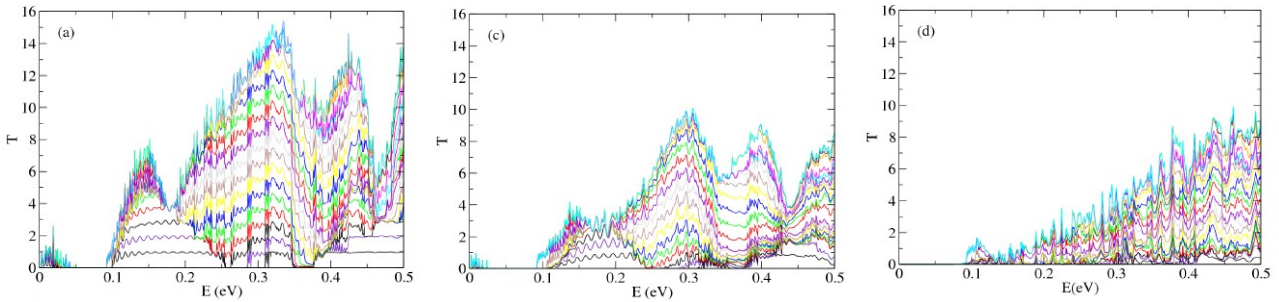


Fig. 38

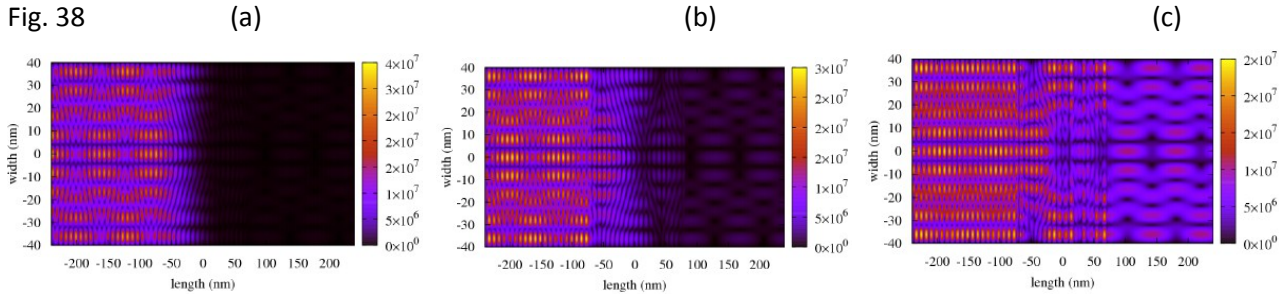


Fig. 39

Pe lângă modificarea dependenței de energie a coeficientului de transmisie, distribuția neomogenă a centrilor de împrăștiere atractivi produce o mixare a modurilor în regiunea de împrăștiere, cu precădere la energii mari. Simulări extensive (vezi articolul [P7]) au arătat că probabilitatea de distribuție a purtătorilor pentru un canal dat depinde neuniform de p : în general, pentru canale de ordin inferior modulul funcției de undă electronice își menține forma dar descrește dacă p crește, în timp ce pentru canale de ordin superior atât forma cât și valoarea probabilității de distribuție se modifică cu p , fără a se putea evidenția o comportare anume. Ca exemplu, în Fig. 39(a)-(c) s-a reprezentat variația cu p ($p = 1, 1.1$ și, respectiv, 1.5) a modului funcției de undă în întreaga structură (contacte și regiune de împrăștiere) pentru canalul 9 la $E = 0.178$ eV, valoare a energiei pentru care T total este minim. Pe lângă evidențierea redistribuției electronilor între diverse canale, această figură arată tendința de creștere cu p a probabilității la marginile exterioare ale regiunii de împrăștiere, ceea ce sugerează structuri sensibile la efecte de suprafață, și deci potrivite pentru aplicații ca senzori.

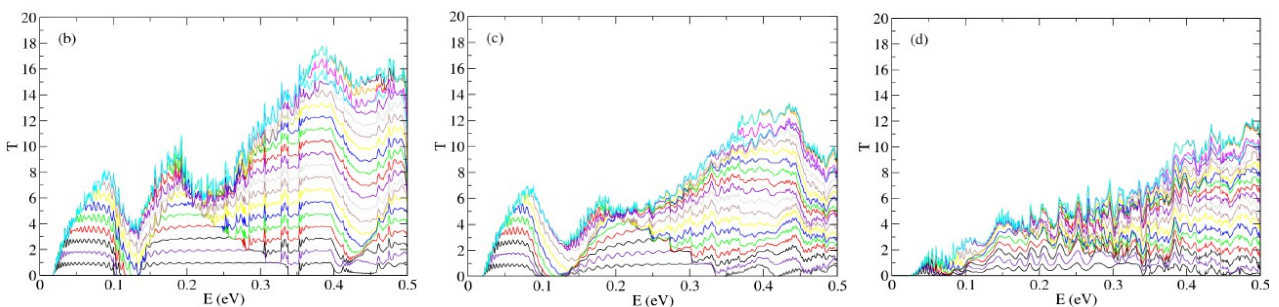


Fig. 40

O tratare similară a impurităților repulsive evidențiază aceeași tendință de descreștere a maximelor în transmisie pe măsură ce p crește și o dependență aproape liniară a T cu energia pentru $p = 1.5$ (vezi Fig. 40(a)-(c) în care s-a reprezentat dependența de energie a T pentru $p = 1, 1.1$ și, respectiv, $p = 1.5$, pentru un număr crescător de canale). Deși pentru $p = 1$ se observă aceleași maxime largi de formă triunghiulară, datorate periodicității structurii, care dispar gradual pentru neomogenități crescânde ale distribuției impurităților, maximele par a fi mai robuste decât în cazul impurităților atractive, putând fi observate la energii mici chiar pentru $p = 1.5$. Pragul de transmisie, poziționat la 0.02 eV pentru $p = 1$, și datorat formării unei benzi interzise la energii mai mici, se deplasează la energii mai mari cu creșterea p .

Din nou, diferitele moduri se mixează, electronii fiind redistribuiți între canalele deschise, neputându-se identifica o comportare anume a probabilității de distribuție și a T cu p . Simulări ale modulului funcției de undă arată că, în general, transmisia canalelor de ordin mai mic crește cu p , dar valoarea transmisiei și forma probabilității de distribuție pentru canalele cu ordin mai mare sunt mai puțin influențate de valoarea lui p decât în cazul impurităților atractive. Spre deosebire de împrăștierea pe centri atractivi, în acest caz se constată că modulul funcției de distribuție este concentrat în regiunea centrală pentru anumite canale, ca de exemplu pentru canalul 9 la $E = 0.134$ eV (pentru care transmisia totală este minimă). Comportarea funcției de undă în acest caz, reprezentat în Fig. 41(a)-(c) pentru $p = 1, 1.1$ și, respectiv, 1.5, sugerează o diminuare a sensibilității la efecte de suprafață.

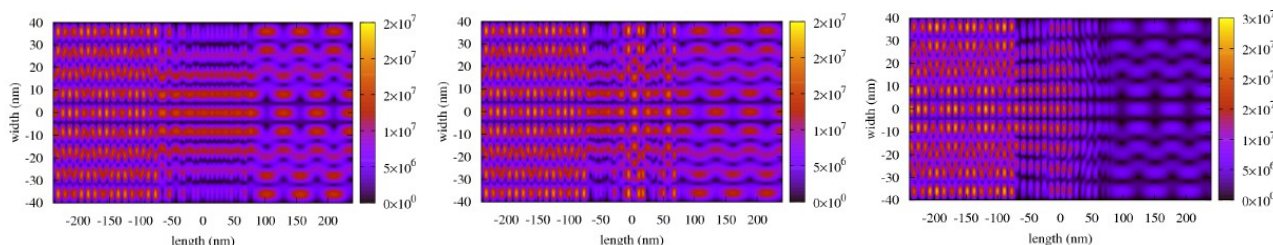


Fig. 41 (a) (b) (c)

Rezultatele obținute în cadrul simulărilor realizate în vederea optimizării creșterii de nanostructuri cu distribuție neomogenă a impurităților au fost publicate în articolul [P7] și au fost prezentate la o conferință internațională [C7].

Fabricarea nanofirelor cu distribuție neomogenă a centrilor de împrăștiere

Simulările numerice prezentate anterior arată că o distribuție neomogenă a centrilor de împrăștiere, fie ea și ordonată, are un efect asupra transportului balistic similar cu cel al unei distribuții aleatoare de impurități, acest lucru fiind observabil chiar și pe distanțe de propagare de zeci de nm. În consecință, concluzia a fost că efecte benefice pentru dispozitive electronice și nanoelectronice bazate pe nanofire ar putea fi evidențiate cu precădere în cazul în care nanofirele sunt segmentate. Pentru îndeplinirea obiectivelor acestei etape a proiectului, au fost crescute electrochimic arii de nanofire de Ni (la început uniforme, pentru a calibra metoda de creștere, și ulterior segmentate de tip Ni/Cu) în nanoporii unui șablon de alumina.

Sistemele nanostructurate pe bază de Ni sau aliaje ale nichelului sunt importante pentru aplicații în domeniul senzorilor datorită, pe de o parte, proprietăților magnetice, iar pe de alta proprietăților catalitice sau răspunsului chimic la prezența unor substanțe (eventual după o funcționalizare corespunzătoare a suprafeței). Este de subliniat faptul că atât răspunsul magnetic cât și cel de natură chimică este puternic dependent de compoziție, dimensiune, formă și morfologie.

Matrici de fire de Ni uniforme sau segmentate, inclusiv în sistemul Ni/Cu, au fost produse printr-o metodă de tip șablon. Această metodă este una dintre cele mai utilizate pentru producerea de fire cu diametru controlat, datorită versatilității ei [25-28]. Șablonul utilizat a fost alumina, în care a fost creată o matrice de nanopori printr-un proces de anodizare controlată.

Procedura de obținere a șablonului de alumina

Suportul este o plachetă de Si(111)/SiO₂ (grosimea stratului de SiO₂ fiind de 30 nm), curățată în prealabil prin ultrasonare într-o baie de solvenți organici (benzen și acetonă). Placheta este inițial acoperită cu un film de Au de 200 nm, depus prin pulverizare catodică în curent continuu (DC). Rolul filmului de Au este unul dublu:

- a) servește ca barieră de anodizare pe durata anodizării filmului de Al (depus ulterior);
- b) constituie electrod de lucru în procesul electrochimic de anodizare, dar și ulterior pe durata depunerii electrochimice a nanofirelor.

Al treilea strat este cel de Al, depus de asemenea prin pulverizare catodică DC (350 nm grosime). Procesul de anodizare al filmului de Al a fost efectuat într-o celulă electrochimică dezvoltată de noi pentru un bun control al temperaturii băii electrolitice. A fost utilizată o configurație de lucru cu trei electrozi (cei doi

electrozi de lucru și electrodul de referință – un electrod comercial de calomel saturat – SCE). Temperatura de anodizare trebuie menținută la valori în jur de 3-5°C, pentru a evita închiderea nanoporilor. Electrolițul de anodizare constă într-un amestec de acizi oxalic și fosforic, reacția chimică completă fiind:



Membrana de alumina obținută prezintă o structură de nanopori cu densitate mare, morfologia tipică fiind indicată în imaginea SEM din Fig. 42.

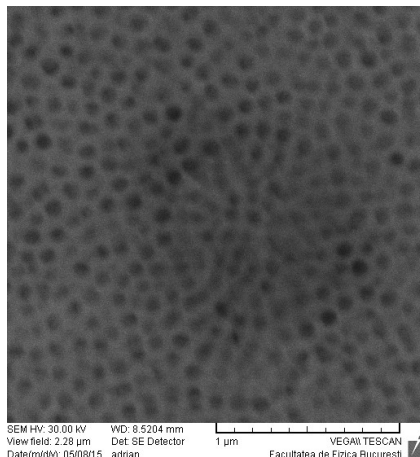


Fig. 42

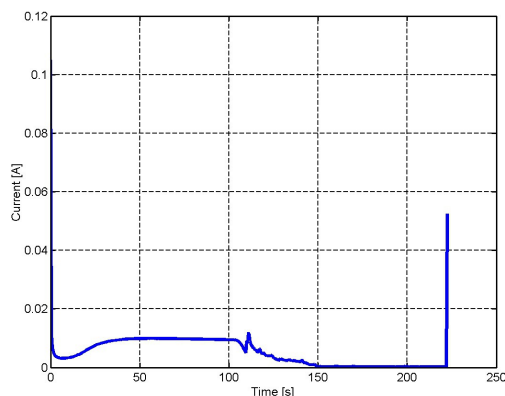


Fig. 43

Curba crono-amperometrică înregistrată pe durata procesului de anodizare este prezentată în Fig. 43. Pot fi observate cele trei etape ale procesului de anodizare:

- 1) formarea unui strat subțire de Al_2O_3 la suprafața catodului (filmului de Al), căruia i se asociază scăderea bruscă inițială a curentului;
- 2) stabilirea unui echilibru între două procese aflate în competiție, respectiv dizolvarea oxidului deja format în regiunile unde câmpul electric este mai intens și continuarea procesului de oxidare, competiția între aceste două procese ducând la formarea porilor;
- 3) avansarea porilor până la electrodul de Au, care blochează oxidarea, moment căruia i se asociază creșterea bruscă a curentului datorită scurt-circuitării electrolițului.

Producerea matricii de fire de Ni

Firele de Ni au fost crescute în porii membranei de alumina printr-o procedură electrochimică. Depunerea electrochimică prezintă avantajele utilizării unor echipamente nu foarte sofisticate și al unui preț de cost scăzut. Combinată cu metoda șablon, depunerea electrochimică este de asemenea foarte versatilă, putând fi aplicată pentru creșterea de fire din diverse materiale, metale sau semiconductori. Controlând parametrii de creștere specifici ea permite depunerea de fire omogene sau segmentate [29-31]. Firele de Ni au fost depuse electrochimic utilizând ca electrolit o baie Watts conținând 225 g/L sulfat de nichel hexahidratat ($\text{NiSO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$) și 30 g/L clorură de nichel hexahidratată ($\text{NiCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$). Pentru controlul procesului electrochimic a fost utilizat un potențiostat VoltaLab, controlat de un calculator, în configurația cu trei electrozi, cu catodul de Au, un anod de platină și SCE ca electrod de referință. Temperatura pe durata creșterii firelor de Ni a fost menținută la 5°C, pentru a evita închiderea nanoporilor membranei. Reacția care se dezvoltă la catod în aceste condiții este:



O curbă crono-amperometrică tipică obținută pe durata procesului de creștere a firelor în pori este arătată în Fig. 44.

La încheierea procesului de umplere a porilor, membrana șablon a fost eliminată, prin dizolvare într-o soluție alcalină de NaOH, matricea de fire de Ni rămânând astfel expusă. Figura 45(a)-(c) prezintă imagini SEM ale matricii de nanofire crescute pe un set de electrozi de Au interdigitați, realizate cu diferiți factori

de mărire. După cum se poate observa din aceste figuri, nanofirele cresc doar pe suprafețele metalice/electrozii interdigitati, și nu între electrozi.

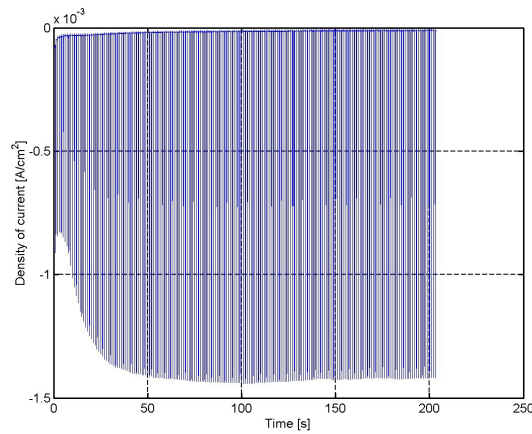


Fig. 44

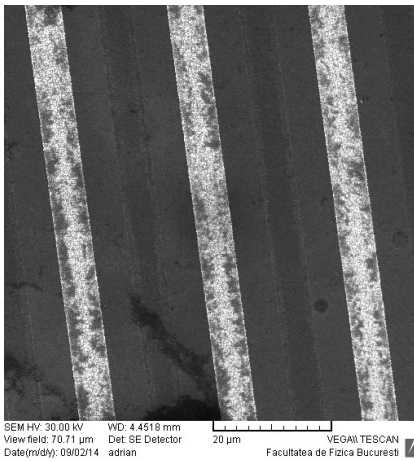
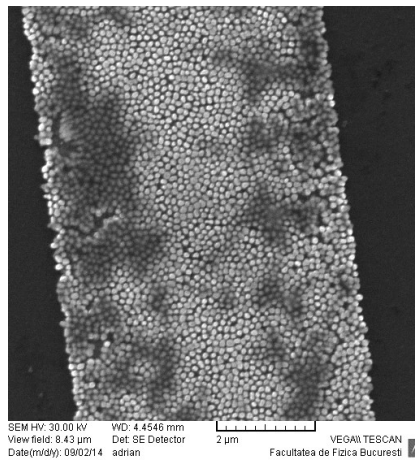
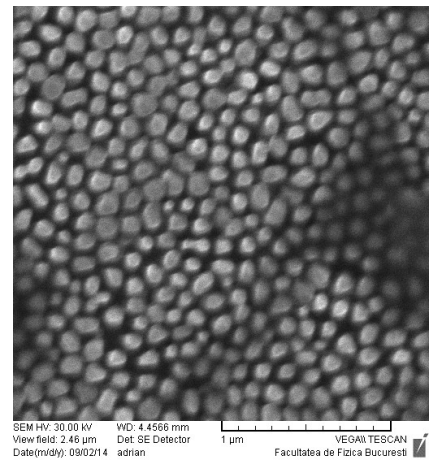


Fig. 45

(a)



(b)



(c)

Acest tip de electrozi a fost utilizat în vederea dezvoltării unei aplicații, respectiv utilizarea în calitate de sensor chimic cu detecție capacitivă. În particular, a fost testat răspunsul senzorului la glucoză, utilizând un sistem de detecție de tip lock-in reprezentat schematic în Fig. 46. Avantajul acestui tip de senzor constă în sensibilitatea lui crescută ca urmare a asigurării unui raport suprafață/volum foarte mare.

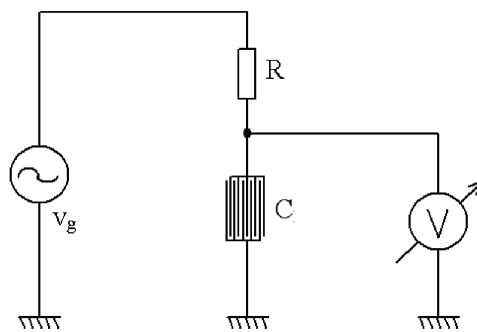


Fig. 46

Răspunsul capacitiv a fost evaluat prin spectroscopie de impedanță, capacitatea fiind evaluată pe baza expresiei:

$$C = \frac{\sqrt{(V_g - X)^2 - Y^2}}{2\pi f R \sqrt{X^2 + Y^2}} \sin \left[\arctan \left(\frac{-Y}{V_g - X} \right) - \arctan \left(\frac{Y}{X} \right) \right] \quad (26)$$

în care X și Y sunt părțile reală și imaginară ale semnalului de ieșire măsurat experimental, V_g este semnalul de intrare, iar f este frecvența semnalului de intrare. Răspunsul în frecvență al detectorului capacitiv pe bază de fire de Ni, obținut la diferite concentrații de glucoză ale soluțiilor test este prezentat mai jos după cum urmează: Fig. 47(a) ilustrează părțile reală și imaginară ale semnalului de ieșire, iar Fig. 47(b) capacitatea determinată experimental pe baza ecuației (26), concentrațiile soluțiilor test fiind indicate în legenda figurii.

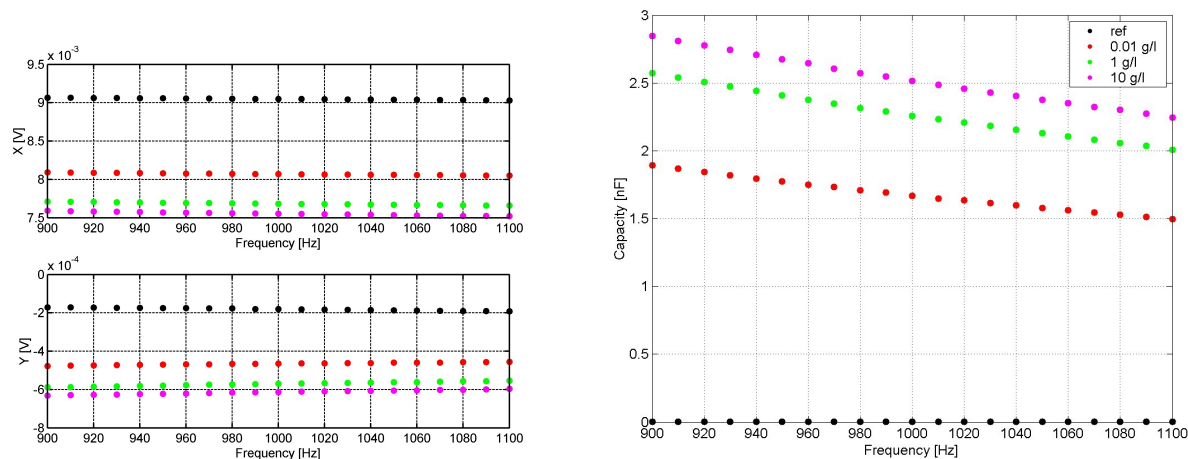


Fig.47

(a)

(b)

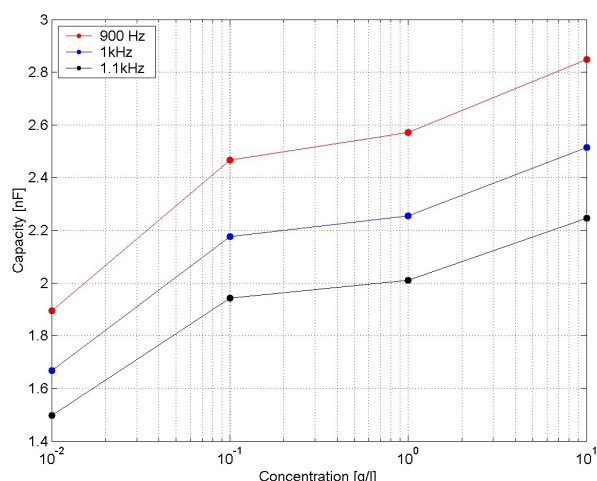


Fig. 48

Curbele de etalonare ale detectorului în domeniul de concentrații studiat, la diferite frecvențe, sunt prezentate în Fig. 48. Datorită raportului mare suprafață/volum și activității catalitice mari a Ni în procesul de oxidare a glucozei, senzorii capacitivi pe bază de matrici de nanofire de Ni pot fi deci utilizați cu succes în detecția acestei substanțe.

Funcționarea matricii de nanofire de Ni ca sensor pentru glucoză a fost prezentată la o conferință internațională [C8].

Producerea de nanofire segmentate în sistemul Cu/Ni

Acest sistem este interesant date fiind potențialele aplicații pentru detecția de câmp magnetic, exploatând efectul magnetorezistiv.

A fost utilizată tehnica depunerii secvențiale dintr-o singură baie electrochimică de tip Watts, conținând o soluție de sulfat de nichel hexahidratat (225 g/l), clorură de nichel hexahidratată (30 g/l), acid boric (22,5 g/l) și sulfat de cupru hidratat (4 g/l). A fost utilizată aceeași configurație de lucru cu trei electrozi indicată mai sus. Două curbe de polarizare/voltametrice înregistrate succesiv, pe durata depunerii firelor segmentate Ni/Cu, sunt arătate în Fig. 49.

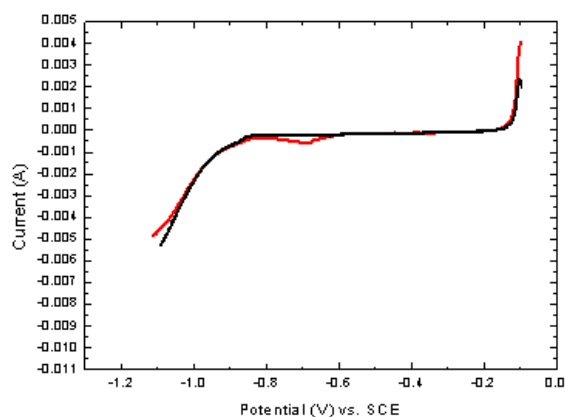


Fig. 49

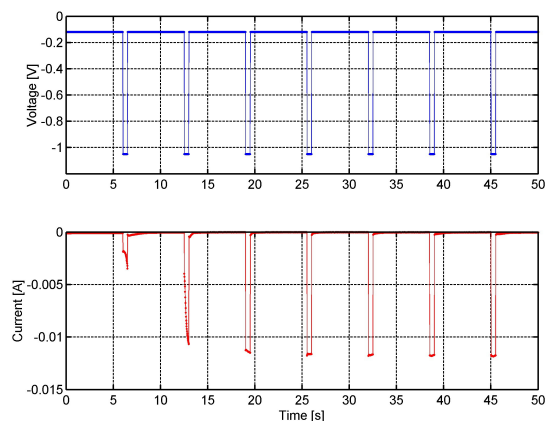


Fig. 50

Regiunea relativ plată în Fig. 49, în intervalul (-200 mV, -850 mV), corespunde depunerii unui compus Cu/Ni, în timp ce regiunea (-850 mV, -1200 mV) corespunde depunerii unui compus mult mai bogat în Ni (elementul cu cea mai mare concentrație în electrolit).

Depunerea secvențială este asigurată prin controlul potențialului de electrod în pulsuri care variază între valorile ce favorizează depunerea unuia sau altuia dintre metalele componente (Ni/Cu). Figura 50 prezintă secvența programată a pulsurilor potențialului de electrod (sus) și curentul de depunere/curba cronoamperometrică înregistrată (jos). Secvența pulsurilor este de 0.5 sec. la -1100 mV (potențial care favorizează depunerea speciei cu concentrația cea mai mare în electrolit, respectiv Ni) și 6.0 sec. la -120 mV (potențial care favorizează depunerea Cu).

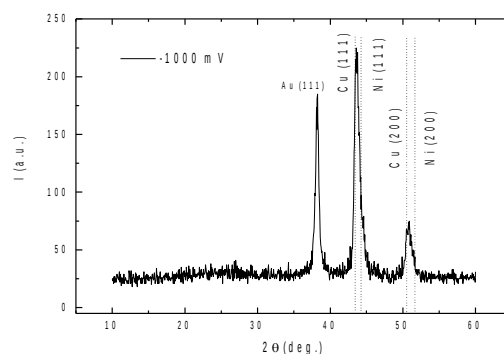
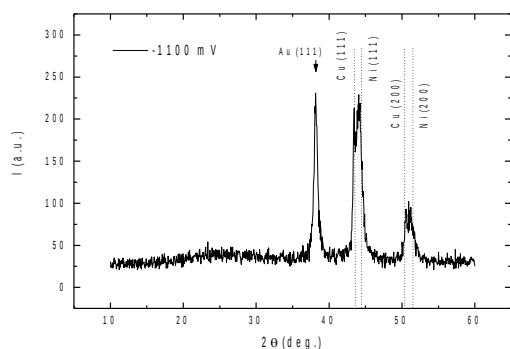


Fig. 51

(a)

(b)

Structura firelor din matricile obținute a fost caracterizată prin difracție de raze X. Spectrele de difracție au fost înregistrate cu ajutorul unui difractometru de înaltă rezoluție (Bruker D8 Discover), utilizând radiația Cu-K α_1 ($\lambda = 1.5406 \text{ \AA}$), într-o geometrie cu incidență razantă, pentru a crește drumul optic al razelor X în probă. Spectrele de raze X obținute pentru două eșantioane cu baza pulsurilor la -1100 mV, respectiv -1000 mV, sunt prezentate în Fig. 51(a) și, respectiv, 51(b). Se confirmă creșterea conținutului de Ni cu deplasarea spre potențiale mai negative. Picul (111) al Au este datorat electrodului de lucru (substratului).

Rezultate obținute în etapa 2015 a proiectului

În cadrul proiectului, etapa aferentă anului 2015 s-a axat pe caracterizarea electrică a unor nanofire neomogene segmentate, de tipul celor fabricate în 2014, în care densitatea de purtători/centri de împrăștiere este variabilă în lungul nanofirului, și asupra investigării unor posibile aplicații ale altor distribuții neomogene ale potențialului de interacție/împrăștiere. Rezultatele obținute sunt detaliate în continuare.

Caracterizarea electrică a nanofirelor cu distribuție neomogenă, segmentată, a purtătorilor/centrilor de împrăștiere

Simulările numerice obținute în cadrul etapei din 2014 au arătat ca nanofirele segmentate, în care distribuția de purtători/centre de împrăștiere variază în trepte de-a lungul firului, au cel mai mare potențial de aplicații în dispozitive electronice și nanoelectronice. În acest sens, în cadrul etapei din 2014 au fost crescute electrochimic arii de nanofire segmentate de tip Ni/Cu în nanoporii unui șablon de alumina. După cum am menționat deja, aceste nanofire pot detecta câmpul magnetic pe baza efectului magnetorezistiv.

Metoda de creștere a nanofirelor cu ajutorul șablonului permite producerea versatilă de fire cu diametru controlat [25-28]. Șablonul utilizat pentru obținerea matricii de nanofire segmentate Ni/Cu a fost alumina, în care a fost creată o matrice de nanopori printr-un proces de anodizare controlată, descris mai sus. În porii matricii de alumina au fost crescute nanofire segmentate printr-o procedură electrochimică [29-31]. La încheierea procesului de umplere a porilor, membrana șablon poate fi eliminată prin dizolvare în soluție alcalină.

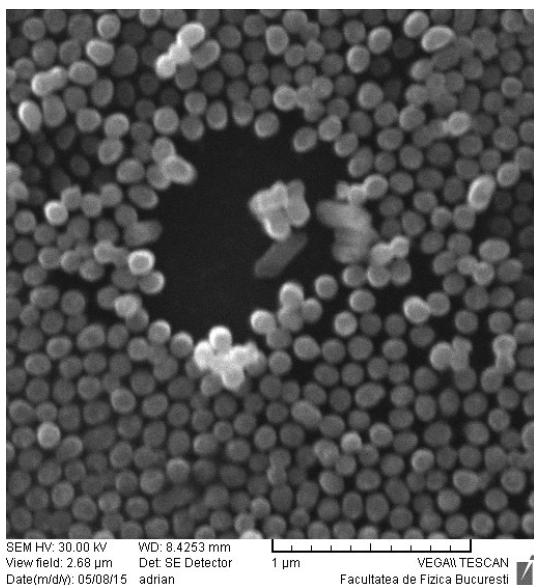


Fig. 52

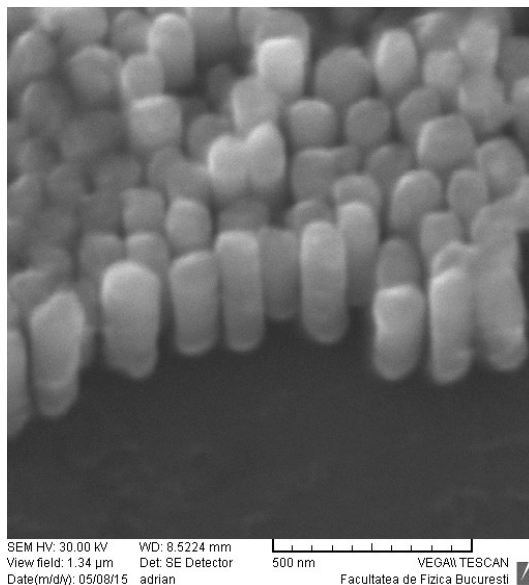


Fig. 53

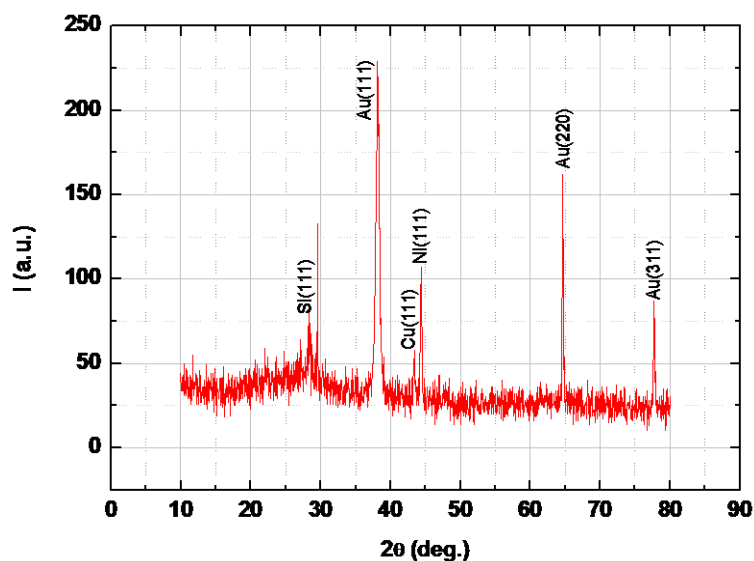


Fig. 54

Procedura de depunere secvențială a nanofirelor segmentate dintr-o singură baie electrochimică de tip Watts a fost descrisă mai sus, controlul depunerii fiind asigurat prin variația în trepte a potențialului de electrod între valorile care favorizează depunerea unuia sau altuia dintre metalele componente (Ni/Cu). Figurile 52 și 53 reprezintă imagini SEM ale nanofirelor segmentate Ni/Cu cu un diametru de 100 nm, în ultima imagine putându-se observa ușor diversele segmente ce compun nanofirele. Prezența ambelor elemente, Ni și Cu,

În nanofire este confirmată de spectrul de difracție de raze X din figura 54. În spectrul de difracție se observă și maxime de difracție corespunzătoare Au și Si, folosite ca electrod de lucru, respectiv suport/substrat.

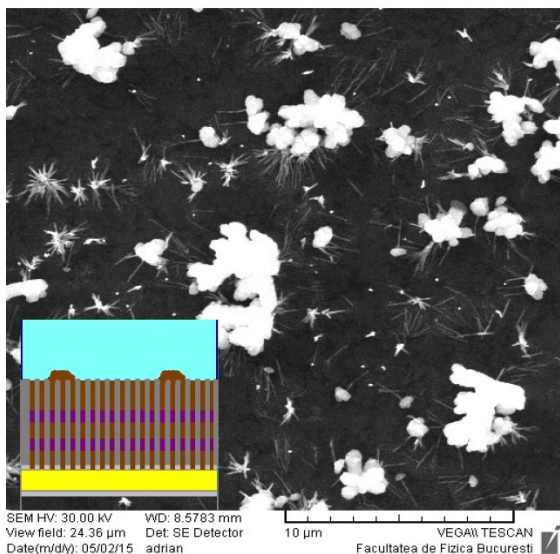


Fig. 55

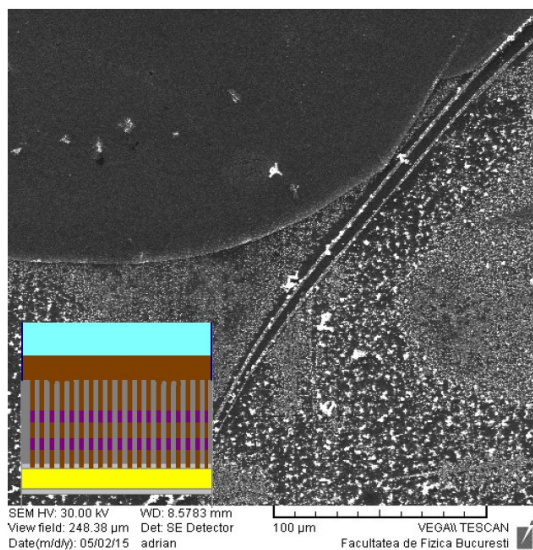


Fig. 56

Una dintre problemele apărute în efectuarea măsurătorilor electrice a fost contactul electric cu aria de nanofire. Pentru a îmbunătăți calitatea contactului, au fost depuse nanofire mai înalte decât șablonul, astfel încât să se formeze regiuni metalice de suprafață mai mare deasupra șablonului. În Fig. 55 și 56 se observă formarea unor aglomerări metalice, și respectiv formarea unui strat metalic continuu deasupra ariei de nanofire, ce poate fi folosit ca și contact electric. Inset-urile din aceste figuri reprezintă o descriere schematică a secțiunii transversale a ariei de fire depuse în porii șablonului, precum și formarea aglomerărilor/stratului continuu deasupra șablonului. Segmentele violacee corespund nichelului, iar cele maro cuprului.

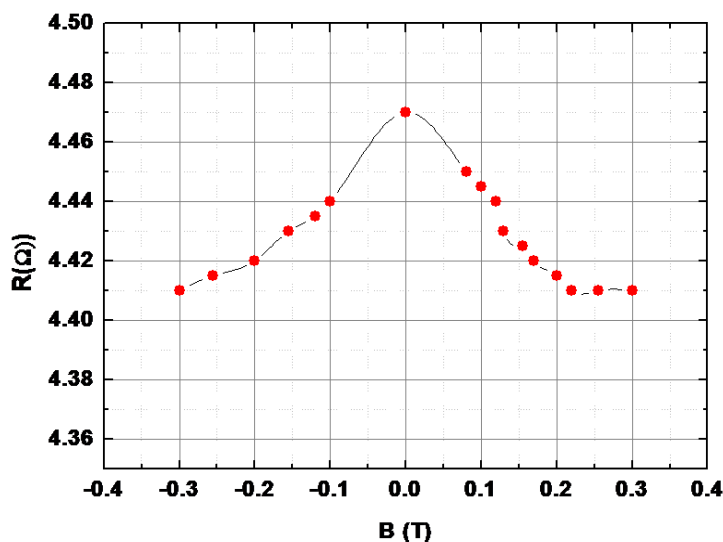


Fig. 57

Caracterizări electrice ale ariilor de nanofire segmentate au evidențiat, după cum era de așteptat, dependențe liniare ale curentului de tensiunea aplicată, interfața Ni/Cu fiind ohmică. Rezistența, obținută din panta caracteristicii curent-tensiune, are valori mici, de câțiva ohmi, corespunzând caracterului conductor al nanofirelor. Rezistența a fost măsurată la diferite valori ale câmpului magnetic aplicat, observându-se o dependență a acestui parametru de câmpul magnetic. Rezultatele obținute, un exemplu tipic fiind ilustrat în Fig. 57, sugerează posibilitatea detecției câmpurilor magnetice mici, de sub 0.3 T, cu ajutorul ariei de nanofire Ni/Cu. Aceste rezultate au fost prezentate la o conferință internațională [C9]. Scăderea rezistenței cu câmpul electric aplicat, de aproximativ 1.4%, se poate explica prin efectul magnetorezistiv, observat și în alte structuri segmentate din materiale feromagnetice și diamagnetice crescute de asemenea prin depunere electrochimică în porii unui șablon [32, 33].

Investigarea împrăstierii balistice pe potențiale ondulate

În cadrul tematicii acestui proiect, și anume studiul analogiilor între propagarea luminii și cea a electronilor balistici [1, 2], am considerat oportună investigarea unor configurații de împrăstiere neomogene mai puțin studiate, și anume regiunile cu indice de refracție, respectiv energie potențială, ce variază ondulator în spațiu. Plecând de la convingerea că orice concept nou în optică sau în mecanica ondulatorie poate duce la concepte similare și aplicații noi în nanoelectronică și invers, am început studiul acestor structuri pornind de la un articol recent [34] dedicat acestui subiect în cazul propagării undelor elastice. Scopul este de a determina modul în care potențiale de împrăstiere ondulatorii controlabile influențează transmisia electronilor balistici în semiconductori bidimensionali. În cazul configurației studiate, ilustrate în Fig. 58, atât energia potențială cât și numărul, perioada și lățimea regiunii de împrăstiere, reprezentată cu negru, pot fi variate controlat cu ajutorul unui electrod de poartă de formă ondulantă. Astfel de electrozi de poartă sunt folosiți în unii tranzistori cu efect de câmp [35], sau condensatori grafenă-pe-MoS₂ [36], fără însă a fi investigată propagarea balistică (cu menținerea fazei electronilor în urma reflexiilor/împrăstierii) în astfel de structuri. Având în vedere numărul mare de parametri care pot fi variați, ne așteptăm să putem controla mai ușor transmisia electronilor balistici, studiul de față investigând potențialele aplicații ale acestor structuri.

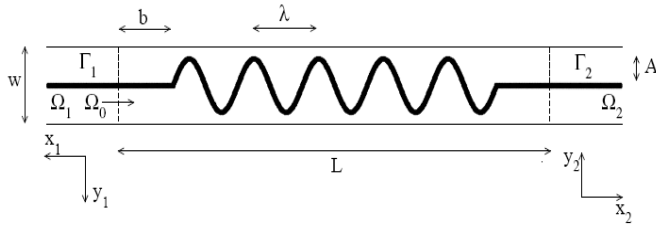


Fig. 58

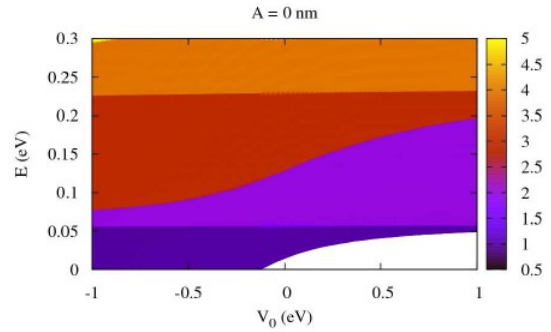


Fig. 59

Coeficientul de transmisie al electronilor a fost calculat folosind formalismul matricii R, detaliat anterior. În cazul configurației studiate, regiunea de împrăstiere conține un potențial de împrăstiere ondulator de lățime 1 nm, care se continuă cu un potențial de împrăstiere uniform de aceeași lățime în dreapta și stânga structurii. Parametrii variabili sunt: amplitudinea geometrică a undulației A , perioada λ , și valoarea (pozitivă sau negativă) a potențialului de împrăstiere, notată V_0 . Toate simulările au fost făcute pe configurații cu 5 undulații, în care lungimea potențialului ondulator este 5λ .

Propagarea electronilor este descrisă de ecuația Schrödinger independentă de timp, în care Hamiltonianul uni-particulă în aproximația masei efective este

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + W(\mathbf{r}), \quad (27)$$

cu $\mathbf{r} = (x, y)$ vectorul de poziție și valoarea masei efective $m = 0.0655 m_0$ (caracteristică pentru GaAs). Configurația studiată este cea a unui gaz de electroni bidimensional (2DEG) cu lățime $W = 20$ nm și lungime $L = 120$ nm, care include și porțiuni uniforme spațiale ale potențialului de împrăstiere. Amplitudinea V_0 a potențialului electrostatic poate fi variat între -1 eV și 1 eV prin variația tensiunii de poartă.

Dependența coeficientului de transmisie, calculat în formalismul matricii R, de energia electronului E și V_0 este reprezentată în Fig. 59 pentru $A = 0$ (poartă uniformă) și în Fig. 60 pentru $A = 3, 6$, and 9 (rândurile de sus, central și, respectiv, de jos) și $\lambda = 16$ nm, 18 nm și 20 nm (coloanele din stânga, centru și, respectiv, dreapta). În toate cazurile regiunea albă din colțul din dreapta jos indică faptul că propagarea electronilor nu este permisă datorită confinării transversale, care impune o valoare minimă pentru energia primului mod permis al structurii. Această energie minimă depinde de V_0 și devine nulă pentru $V_0 < -0.12$ eV, când efectul confinării spațiale a electronilor nu se manifestă (o energie potențială negativă aplicată pe electrodul de poartă uniform, mai îngust decât regiunea 2DEG induce o creștere a lățimii efective a structurii, în timp ce valori V_0 pozitive induc o scădere a lățimii efective a 2DEG).

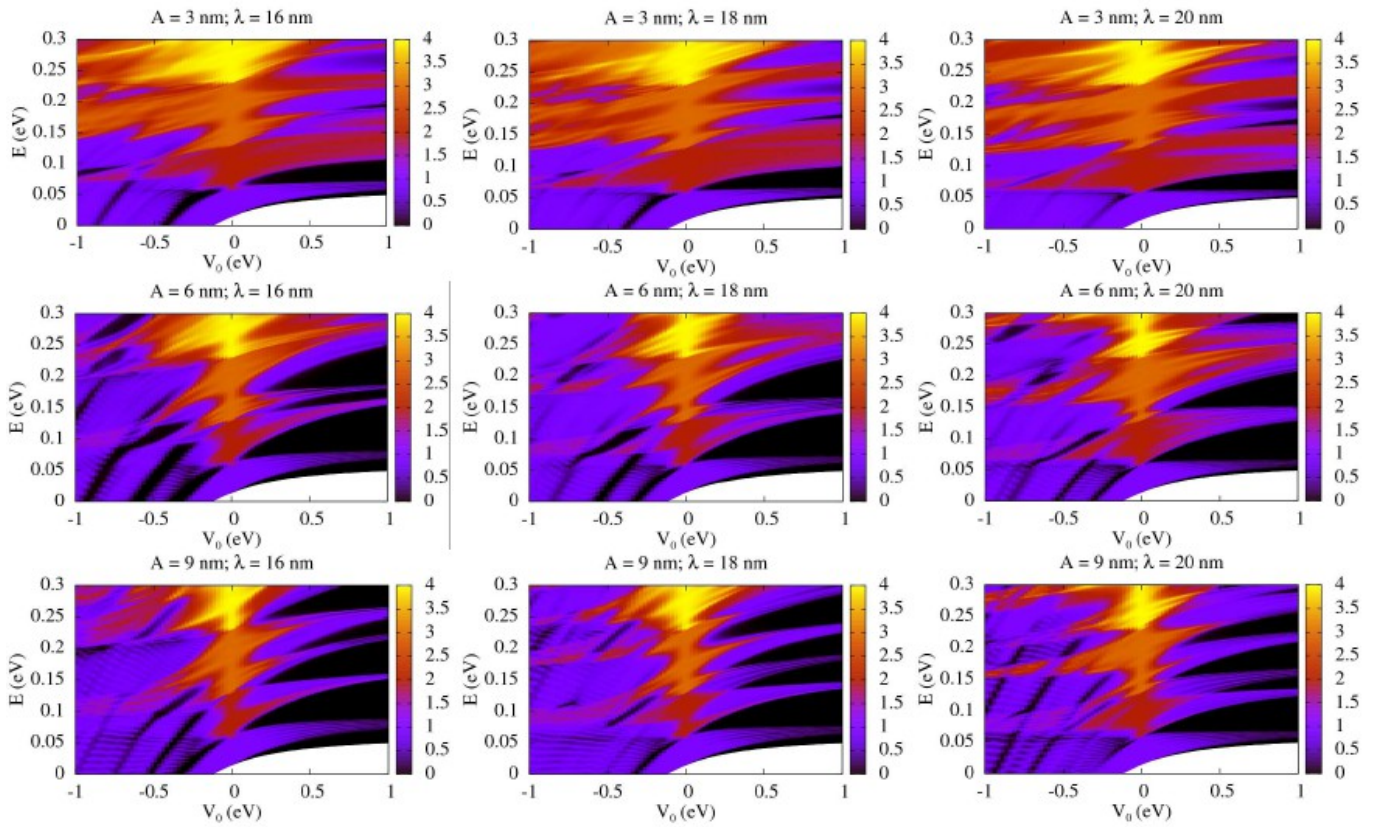


Fig. 60

Figurile 59 și 60 indică comportări diferite în cazul potențialului de împrăștiere uniform și ondulat. În primul caz transmisia crește uniform cu numărul de canale deschise, în timp ce în al doilea caz dependența transmisiei de E și V_0 este mai complexă, și depinde de semnul lui V_0 .

Forma coeficientului de transmisie pentru V_0 pozitiv în Fig. 60 poate fi explicată prin formarea minibenzilor în structura ce conține bariere de potențial periodice, a căror lățime și poziție se deplasează spre energii mai mari pe măsură ce înălțimea barierei crește [37]. Pe de altă parte, valori V_0 negative corespund unei structuri de împrăștiere periodică cu gropi de potențial în loc de bariere, structură ce favorizează interferențele nu numai între funcțiile de undă electronice cuantice împrăștiate de gropi adiacente, dar și în interiorul unei singure gropi. Suprapunerea acestor interferențe formează structura complexă din Fig. 60.

Pentru a înțelege în profunzime diferența între efectul unor bariere și gropi de potențial periodice asupra funcției de undă împrăștiată, am înlocuit potențialul de împrăștiere bidimensional ondulat cu un potențial unidimensional, constând din bariere/gropi cu aceeași dimensiune și înălțime ca cele întâlnite de electroni care se propagă la valori y diferite în Fig. 58. Configurația echivalentă unidimensională este reprezentată în Fig. 61(a), liniile verticale continue (punctate) reprezentând poziția regiunilor de împrăștiere pentru cazul traiectoriilor electronilor (linii subțiri de același tip) cu $y = 0$ (y diferit de 0); linia continuă gri ilustrează potențialul ondulator. Lățimea regiunilor de împrăștiere unidimensionale pentru y diferit de 0 este mai mare decât pentru cazul $y = 0$, și poziția acestora nu mai este echidistantă într-o perioadă λ , spre deosebire de situația $y = 0$.

Figurile 61(b)-(e) ilustrează dependența coeficientului de transmisie de E și V_0 pentru traiectorii de-a lungul $y = 0$, $0.33A$, $0.66A$ și, respectiv, $0.85A$. Deoarece în problema echivalentă unidimensională nu s-a luat în considerare continuarea uniformă în stânga și dreapta a potențialului de împrăștiere ondulator, regiunea în care propagarea este interzisă datorită confinării transversale are aceeași lățime, independent de valoarea lui V_0 . Lățimea acestei zone de culoare albă este aceeași ca și în Fig. 60 pentru $V_0 = 0$. Din Fig. 61(b)-(e) se observă că, deși coeficientul de transmisie prezintă minibenzi similare pentru valori pozitive și negative ale V_0 , forma acestora devine cu atât mai disimilă cu cât y (și lățimea regiunilor de împrăștiere) este mai mare. Într-adevăr, pentru gropi de potențial suficient de largi, ca în Fig. 61(e), se pot forma interferențe în interiorul acestora, care se suprapun peste interferențele funcției de undă între gropi vecine. În acest caz,

în timp ce transmisia este inhibată de bariere largi, în zona cu V_0 pozitiv, pentru valori negative ale acestui parametru interferențele constructive în gropile cuantice largi generează în continuare o valoare apreciabilă a transmisiei în interiorul minibenzilor.

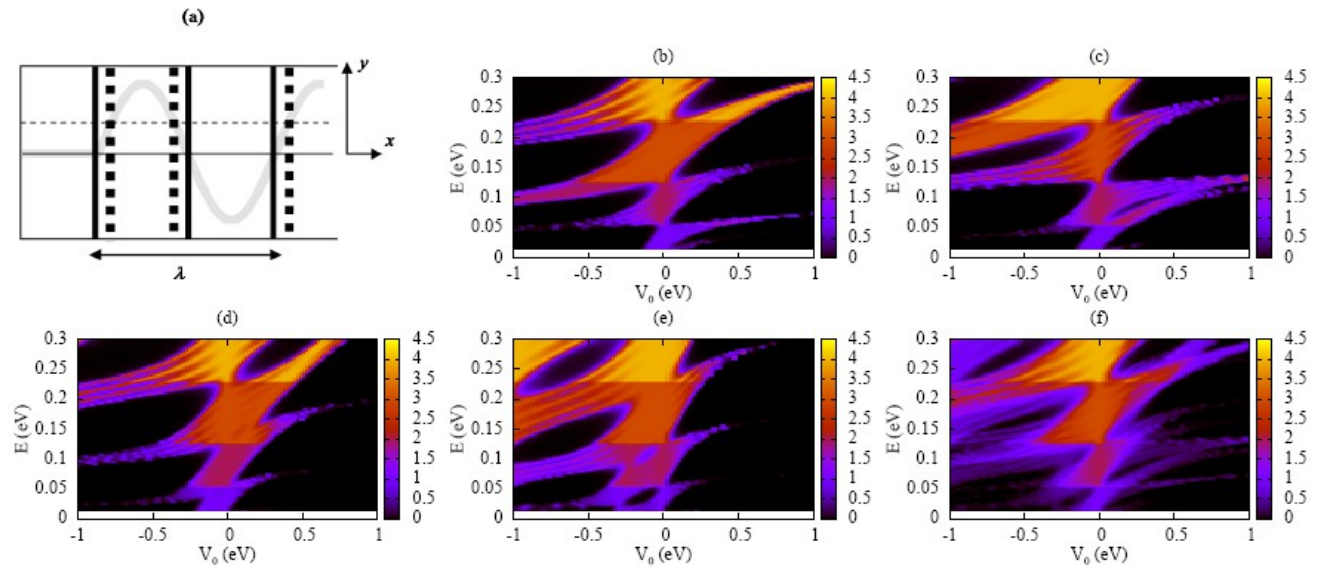


Fig. 61

Acest model simplu unidimensional permite o înțelegere a comportării coeficientului de transmisie în problema de împrăștiere bidimensională. Mai precis, dependența transmisiei de E și V_0 în ultimul caz (vezi Fig. 60) este similară cu cea reprezentată în Fig. 61(f), care este obținută sumând contribuțiile traiectoriilor cu diferite valori ale y .

Potențialul de împrăștiere ondulat afectează și funcția de undă în structură. Exemple ale propagării probabilității de distribuție nenormate în structura ondulată pentru modul fundamental la două energii diferite ale electronilor sunt date în Fig. 62 și 63 pentru $V_0 = -0.5$ eV și, respectiv, 0.5 eV. Aceste figuri ilustrează efectul continuării uniforme în stânga și dreapta a potențialului ondulat asupra funcției de undă: pentru aceeași energie, funcția de undă depinde de natura atractivă (V_0 negativ) sau repulsivă (V_0 pozitiv) a potențialului de împrăștiere deoarece acesta nu este aplicat pe întreaga lățime a structurii ci doar în regiunea centrală. În plus, aceste figuri arată efectul potențialului de împrăștiere ondulat și asupra fazei funcției de undă transmise. De exemplu, în Fig. 62, sus, interferențele constructive/maximele funcției de undă apar în centrul structurii înaintea regiunii de împrăștiere ondulate, și sunt înlocuite de interferențe distructive în urma împrăștierii. Într-un alt exemplu, în Fig. 63, sus, funcția de undă transmisă, deși are aceeași formă ca și cea incidentă, are o altă perioadă de oscilație în lungul axei x .

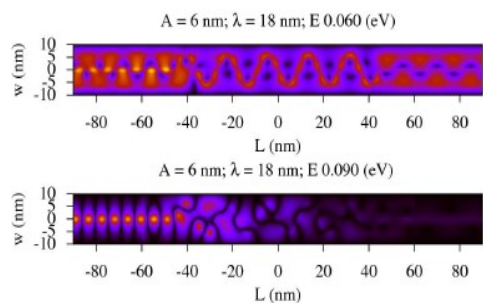


Fig. 62

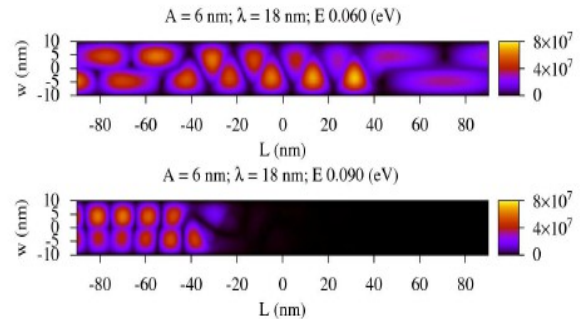


Fig. 63

Simulările numerice arată că, pentru un potențial de împrăștiere/electrod de poartă de formă dată, valoarea coeficientului de transmisie poate fi controlată prin aplicarea unui potențial de poartă dorit. Acest control nu este posibil/este nesemnificativ în cazul în care potențialul de împrăștiere are aceeași lățime dar este uniform.

Rezultatele obținute subliniază analogiile între propagarea electronilor balistici și cea a undelor electromagnetice. Dacă formarea minibenzilor este cunoscută în cazul propagării luminii prin structuri periodice, și are ca aplicații dezvoltarea domeniului cristalelor fotonice [38], propagarea electronilor prin gropi de potențial periodic are ca și analog optic propagarea luminii în structuri anti-rezonante, de tip ARROW (anti-resonant reflection optical waveguides) [39]. Acestea sunt mai puțin studiate, cel puțin din punctul de vedere al analogiilor electroni balistici-radiație electromagnetică. Rezultatele prezentate mai sus pot duce la generalizarea acestor analogii și la identificarea unor posibile aplicații ale 2DEG cu potențial de împrăștiere ondulator. Aceste rezultate au fost publicate într-o revistă ISI [P8] și au fost prezentate la o conferință internațională [C10].

Rezultate obținute în etapa 2016 a proiectului

Etapa 2016 a proiectului a avut ca scop compararea rezultatelor experimentale obținute în 2014 și 2015 cu simulările numerice (activitatea 3.4). Însă, pentru că ariile de nanofire segmentate Ni/Cu caracterizate electric în etapa din 2015 au rezultate promițătoare ca senzori de câmp magnetic, am considerat utilă extinderea cercetărilor experimentale și în 2016, pentru a investiga efectul structurii nanofirelor asupra caracteristicilor magnetice, și în special asupra magnetorezistenței, definită ca $\Delta R/R_0$, unde $\Delta R = R(B) - R(0)$ și $R_0 = R(0)$, B fiind câmpul magnetic aplicat.

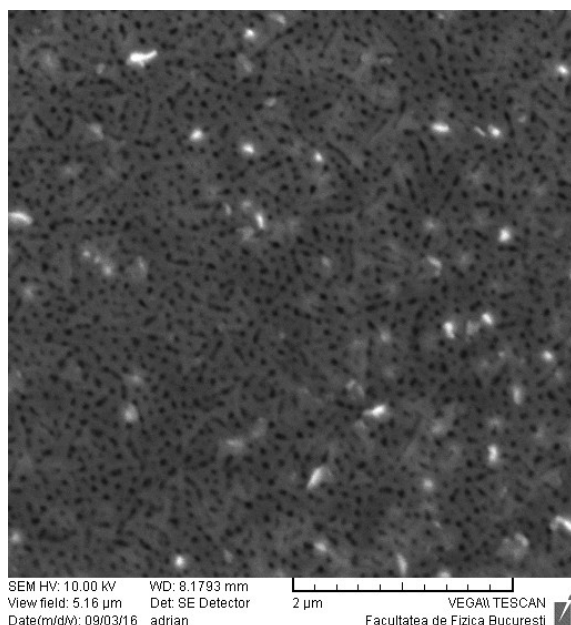


Fig. 64

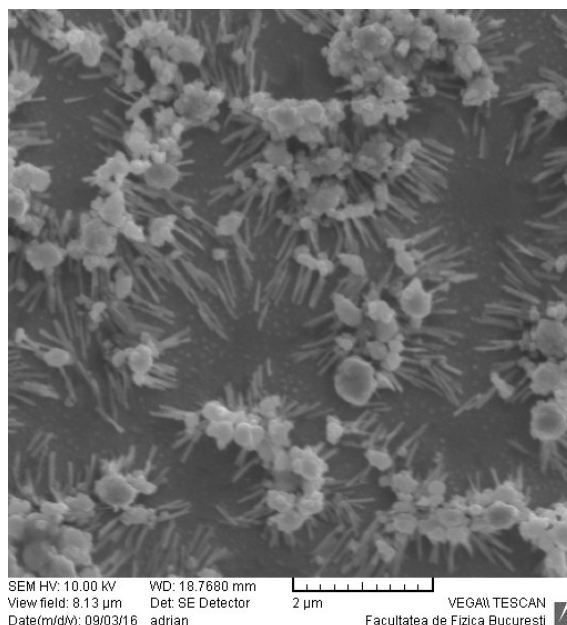


Fig. 65

În acest scop, au fost fabricate noi arii de nanofire segmentate Ni/Cu, urmând procedura deja folosită în etapele anterioare ale proiectului, cu diferite lățimi ale perioadei Ni+Cu. Astfel, au fost fabricate nanofire cu un diametru mediu de 90 nm și o lungime de 700 nm care conțin 5, respectiv 10 perioade Ni+Cu. În Fig. 64 și 65 sunt prezentate două imagini SEM ale unor arii de nanofire care ajung aproape până la suprafața șablonului și, respectiv, formează clustere metalice deasupra șablonului. Aceste clustere sunt utilizate pentru o contactare optimă a ariilor de nanofire.

După fabricare, a fost măsurată rezistența transversală (în câmp magnetic perpendicular pe direcția nanofirelor) a ariilor de nanofire Ni/Cu segmentate în funcție de câmpul magnetic aplicat, rezultate obținute tipice fiind reprezentate în Fig. 66(a) pentru nanofire cu 5 perioade de Ni+Cu și, respectiv, 66(b) pentru nanofire ce conțin 10 perioade.

Rezultatele obținute confirmă faptul că magnetorezistența crește cu creșterea câmpului magnetic, ceea ce este de așteptat, precum și faptul că magnetorezistența este mai mare pentru nanofire cu distanță mai mică între regiunile feromagnetice de Ni/cu perioade mai mici. Din nou, ultimul rezultat poate fi ușor explicat în nanofire individuale sau în arii de nanofire puțin dense prin existența unei interacții dipolare mai puternice

între segmente de Ni de-a lungul firului în acest caz. În aceste situații în nanofire în care segmentele de Ni au un raport lungime/diametru mic, cuplajul între segmente de Ni este dominant antiferomagnetic, iar pentru fire în care acest raport este mai mare este favorizat cuplajul feromagnetic [40]. În ceea ce privește axa de ușoară magnetizare, aceasta își schimbă direcția în funcție de raportul lungime/diametru, neexistând însă consens cu privire la direcția acesteia pentru un raport lungime/diametru dat (mare sau mic) [40, 41].

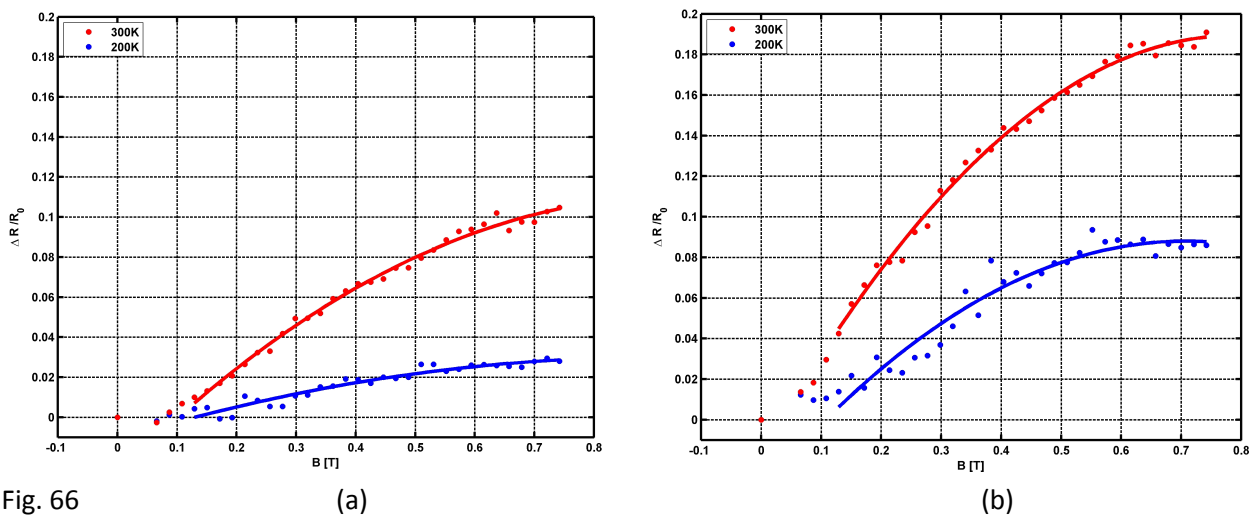


Fig. 66

Pe de altă parte, în cazul unei arii de nanofire segmentate cu densitate mare, cum sunt cele obținute în cadrul acestui proiect, pot exista și interacțiuni semnificative între segmente de Ni aparținând unor nanofire adiacente. Din acest motiv o modelare/prezicere a răspunsului magnetic al unei astfel de arii de nanofire este foarte dificilă, rezultatele experimentale putând varia de la o arie de nanofire la alta, deși aceste arii au fost obținute în condiții similare.

Un alt efect controversat este dependența magnetorezistenței cu temperatura. După cum se observă din rezultatele experimentale din Fig. 66(a)-(b), magnetorezistența la temperatura camerei (300 K) este mai mare decât la temperaturi mai scăzute, de 200 K, de exemplu. Acest rezultat, deși benefic din punct de vedere al aplicațiilor, nu reflectă un comportament obișnuit în literatura de specialitate, motiv pentru care măsurătorile au fost reluate pe mai multe arii de nanofire. Rezultatele obținute nu au fost însă concludente, în unele arii de nanofire magnetorezistența având chiar valori pozitive și negative pentru diferite temperaturi. O astfel de situație este ilustrată în Fig. 67, curbele fiind trasate pentru temperaturi între 100 K și 300 K, cu o variație de 50 K, curbele cu puncte mai deschise la culoare corespunzând unor temperaturi mai mari. Din motivul pe care l-am specificat mai sus, și anume dependența interacțiunii între segmente de Ni de configurația particulară de segmente din aria studiată, un astfel de rezultat nu este surprinzător.

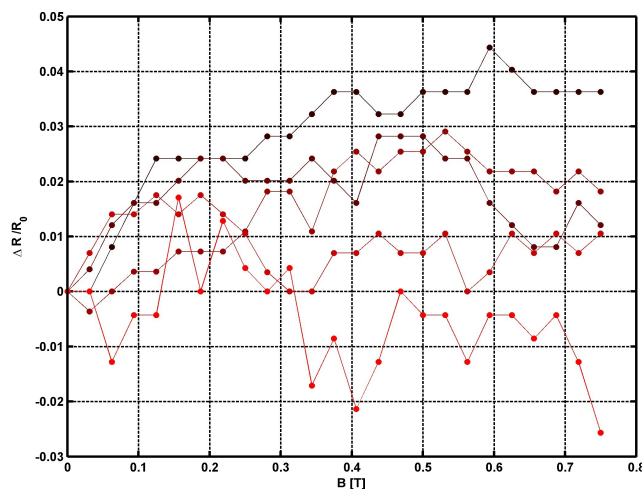


Fig. 67

În urma cercetării bibliografice creșterea magnetorezistenței cu temperatura în nanofire de Ni individuale și în arii de nanofire [42, 43] a fost asociată cu schimbarea direcției anizotropiei magnetice pe măsură ce

temperatura crește. Cauza acestei schimbări a direcției este stresul termic datorat coeficienților diferiți de expansiune termică a Ni și a mediului înconjurător. Trebuie remarcat că acești coeficienți termici depind și de diametrul nanofirelor, în general scăzând cu acest parametru.

Deoarece, așa cum am arătat mai sus, răspunsul magnetic depinde de mulți parametri, este necesară continuarea investigațiilor experimentale pentru a elucida răspunsul magnetic al unei arii date de nanofire ținând cont și de comportarea contactelor în condiții de stres mecanic și/sau termic deoarece contactarea nanofirelor în cazul nostru nu se face individual ci face prin intermediul clusterilor metalici de deasupra șablonului. Astfel de investigații suplimentare sunt în afara obiectivului prezentului proiect.

Rezultatele obținute referitor la folosirea ariilor de nanofire Ni/Cu segmentate ca detectori de câmp magnetic au fost trimise spre publicare [P9] și au fost comunicate la mai multe conferințe internaționale [C12, C14-C17].

În ceea ce privește acordul/dezacordul dintre simulările numerice și rezultatele experimentale precizăm următoarele:

- simulările numerice cu ajutorul formalismului matricii R au fost efectuate pe structuri semiconductoare în condiții de transport balistic în prezența impurităților atractive sau repulsive
- simulările numerice au arătat că orice distribuție neomogenă de impurități, chiar dacă este ordonată, afectează transportul de sarcină similar cu o distribuție aleatoare de centri de împrăștiere. Efectul net este de a atenua minimele și maximele relative ale coeficientului de transmisie al electronilor datorate interferențelor între funcții de undă reflectate de diverse interfețe, și de a favoriza o dependență aproape liniară a curentului de tensiune, caracteristică unui transport de sarcină difuziv
- din punct de vedere experimental este inevitabilă apariția unei distribuții dezordonate, și probabil neomogene de impurități în nanofirele crescute în porii șablonului de alumina. Ca atare, este de așteptat ca transportul de sarcină să fie difuziv, chiar și în nanofire conductoare. Faptul că experimentele pe care le-am efectuat au fost realizate pe nanofire metalice, în care drumul liber mediu între două ciocniri este foarte mic, condițiile de existență a transportului balistic nefiind satisfăcute, chiar la temperaturi relativ scăzute, nu este deci relevant în ceea ce privește compararea cu simulările numerice
- consecința studiului teoretic asupra unei distribuții neomogene de centri de împrăștiere este deci că o tratare fenomenologică a transportului de sarcină poate fi utilă în înțelegerea răspunsului magnetic al unei arii de nanofire segmentate de Ni/Cu, de exemplu. Simulări de tipul matricii R nu aduc neapărat ceva nou/o mai bună modelare a sistemului decât o tratare (semi)clasică
- cu toate acestea, chiar și o tratare fenomenologică a sistemului de nanofire crescute experimental în cadrul proiectului nu poate fi făcută fără investigații suplimentare privind relația între structura/morfologia ariei de nanofire și răspunsul magnetic al acesteia. Astfel de investigații sunt în afara scopului acestui proiect, care a avut ca obiect evidențierea analogiilor între propagarea luminii și cea a electronilor în regim (cuasi)balistic. În plus, așa cum a fost menționat deja, rezultatele experimentale pe nanofire individuale sau arii de nanofire de Ni și/sau Ni/Cu nu concordă unele cu altele, o înțelegere/descriere a răspunsului magnetic în astfel de sisteme de dimensionalitate redusă depinzând foarte mult de configurația/interacția între segmentele de Ni din cazul particular studiat
- sumărând, în urma investigațiilor experimentale asupra folosirii ariilor de nanofire segmentate Ni/Cu ca detectori de câmp magnetic, considerăm că pentru fabricarea unui detector cu răspuns previzibil este necesar în primul rând ca porii șablonului să fie mult mai rari, astfel încât să nu existe interacții semnificative între segmente de Ni poziționate pe nanofire adiacente. Doar în acest caz putem limita studiul teoretic și deci modelarea cu șanse de succes a răspunsului magnetic al sistemului la comportarea unui singur nanofir segmentat în câmp magnetic
- pe de altă parte, trebuie precizat că folosirea formalismului matricii R în studiul unor sisteme balistice cu analog optic a dus la rezultate interesante teoretic și cu aplicații practice în sisteme în care distribuția de centre de împrăștiere este periodică. Astfel, a fost sugerată o metodă inedită de modulare a transmisiei electronilor prin aplicarea unor potențiale pozitive sau negative pe o poartă cu profil ondulator, mai puțin lată decât gazul de electroni bidimensional

- chiar și în cazul unei interfețe între medii diferite și omogene analogia electroni balistici-lumină a condus la aplicații neașteptate. De exemplu, am arătat în cadrul acestui proiect că direcția de propagare a electronilor balistici poate fi modulată de o simplă interfață între un material cu un elipsoid al masei efective izotrop și unul în care acest elipsoid nu este izotrop și este înclinat față de interfață
- ultimele două predicții teoretice nu au putut fi însă demonstrate experimental în cadrul proiectului, tehnologia necesară fabricării dispozitivelor sugerate de simulările numerice nefiind accesibilă centrului de cercetare în care a fost implementat proiectul
- în concluzie considerăm că rezultatele experimentale obținute în cadrul proiectului pot fi descrise de modele teoretice și simulate cu ajutorul algoritmilor dezvoltati (chiar cu modele fenomenologice în anumite cazuri) dacă se cunosc interacțiile magnetice între segmentele feromagnetice de Ni obținute în porii șablonului. Acest lucru necesită însă investigații suplimentare, în afara scopului proiectului. Pe de altă parte, considerăm, bazați și pe referințe bibliografice de specialitate, că algoritmi dezvoltati în cadrul acestui proiect pot simula transportul de sarcină în sisteme cu distribuții arbitrare, inclusiv neomogene, de centri de împrăștiere, și că rezultatele prezise de simulările teoretice făcute în cadrul acestui proiect pot și vor fi demonstrate experimental folosind tehnologii avansate

Referințe

- [1] G.N. Henderson, T.K. Gaylord, E.N. Glytsis, Proc. IEEE 79, 1643 (1991).
- [2] D. Dragoman, M. Dragoman, Progress in Quantum Electronics 23, 131 (1999).
- [3] B.E.A. Saleh, M.C. Teich, *Fundamentals of Photonics*, 2nd edition, Wiley-Interscience (2007).
- [4] A.H. Castro Neto, F. Guinea, N.M.R. Peres, K.S. Novoselov, A.K. Geim, Rev. Mod. Phys. 81, 109 (2009).
- [5] D. Dragoman, J. Opt. Soc. Am. B 27, 1325 (2010).
- [6] I. Mihalache, D. Dragoman, J. Opt. Soc. Am. B 28, 1746 (2011).
- [7] H. Luo, W. Hu, X. Yi, H. Liu, J. Zhu, Opt. Commun. 254, 353 (2005).
- [8] D. Dragoman, M. Dragoman, Phys. Lett. A 210, 121 (1996).
- [9] D. Dragoman, M. Dragoman, J. Appl. Phys. 101, 104316 (2007).
- [10] Yu.A. Bychkov, E.I. Rashba, J. Phys. C 17, 6039 (1984).
- [11] S.D. Ganichev, et al., Phys. Rev. Lett. 92, 256601 (2004).
- [12] A. Erdoglu, *Wave Propagation and Radiation in Gyrotropic and Anisotropic Media*, Springer, New York (2010).
- [13] D. Dragoman, Opt. Commun. 284, 2095 (2011).
- [14] R.A. Sepkhanov, Ya.B. Bazaliy, C.W.J. Beenakker, Phys. Rev. A 75, 063813 (2007).
- [15] D. Dragoman, M. Dragoman, J. Appl. Phys. 110, 014302 (2011).
- [16] C.W.J. Beenakker, in *Oxford Handbook of Random Matrix Theory*, G. Akemann, J. Baik, P. Di Francesco, Eds., Oxford Univ. Press (2011).
- [17] A. Yamilov, B. Payne, J. Mod. Opt. 57, 1916 (2010).
- [18] H. Cao, J.Y. Xu, D.Z. Zhang, S.-H. Chang, S.T. Ho, E.W. Seelig, X. Liu, R.P.H. Cheng, Phys. Rev. Lett. 84, 5584 (2000).
- [19] N. Neophytou, X. Zianni, H. Kosina, S. Frabboni, B. Lorenzi, D. Narducci, J. Electron. Mater., doi: 10.1007/s11664-013-2898-z
- [20] X. Mo, T. Mizokuro, C. Heck, N. Tanigaki, T. Hiraga, Nano-Micro Lett. 1, 19 (2009).
- [21] P. Saha, S. Basu, J. Electron Dev. 15, 1254 (2012).
- [22] J. He, X. Xi, M. Chan, C. Hu, Y. Li, Z. Xing, R. Huang, Semicond. Sci. Technol. 17, 721 (2002).
- [23] N. Debbar, H. Al-Hokail, Int. J. Electronics 87, 1153 (2000).
- [24] M.G.A. Crawford, P.W. Brouwer, C.W.J. Beenakker, Phys. Rev. B 67, 115313 (2003).
- [25] D.D. Li, R.S. Thomson, G. Bergmann, J.G. Lu, Adv. Mater. 20, 4575 (2008).
- [26] H. Masuda, K. Fukuda, Science 268, 1466 (1995).
- [27] C. Tazlaoanu, L. Ion, I. Enculescu, M. Sima, M. Enculescu, E. Matei, R. Neumann, R. Bazavan, D. Bazavan, S. Antohe, Physica E 40, 2504 (2008).
- [28] M. Ghenescu, L. Ion, L. Enculescu, C. Tazlaoanu, V.A. Antohe, M. Sima, M. Enculescu, E. Matei, R. Neumann, O. Ghenescu, V. Covlea, S. Antohe, Physica E 40, 2485 (2008).
- [29] E. Matei, L. Ion, S. Antohe, R. Neumann, I. Enculescu, Nanotechnology 21, 105202 (2010).

- [30] V.A. Antohe, A. Radu, M. Matefi-Tempfli, A. Attout, S. Yunus, P. Bertrand, A. Dutu, A. Vlad, S. Melinte, S. Matefi-Tempfli, L. Piroux, Appl. Phys. Lett. 94, 073118 (2009).
- [31] E. Matei, I. Enculescu, M.E. Toimil-Molares, A. Leca, C. Ghica, V. Kuncser, J. Nanopart. Res. 15, 1863 (2014).
- [32] X.-T. Tang, G.-C. Wang, M. Shima, J. Appl. Phys. 99, 033906 (2006)
- [33] K.Y. Kok, C.M. Hangarter, B. Goldsmith, I.K. Ng, N.B. Saidin, N.V. Myung, J. Magnetism and Magnetic Materials 322, 3876 (2010).
- [34] S. Rudykh, M.C. Boyce, Phys. Rev. Lett. 112, 034301 (2014).
- [35] A. Poghosian, K. Schumacher, J.P. Klock, C. Rosenkranz, J.W. Schultze, M. Müller-Veggian, M.J. Schöning, Sensors 6, 397 (2006).
- [36] A.V. Kretinin, Y. Cao, J.S. Tu, G.L. Yu, R. Jalil, K.S. Novoselov, S.J. Haigh, A. Gholinia, A. Mishchenko, M. Lozada, T. Georgiou, C. Woods, F. Withers, P. Blake, G. Eda, A. Wirsig, C. Hucho, K. Watanabe, T. Taniguchi, A.K. Geim, R.V. Gorbachev, Nano Lett. 14, 3270 (2014).
- [37] P. Vasilopoulos, F.M. Peeters, D. Aitelhabti, Phys. Rev. B 41, 10021 (1990).
- [38] K. Sakoda, *Optical Properties of Photonic Crystals*, Springer (2005).
- [39] N.M. Litchinitser, A.K. Abeeluck, C. Headley, B.J. Eggleton, Opt. Lett. 27, 1592 (2002).
- [40] M. Susano, M.P. Proenca, S. Moraes, C.T. Sousa, J.P. Araújo, Nanotechnology 27, 335301 (2016).
- [41] M. Chen, C.-L. Chien, P.C. Searson, Chem. Mater. 18, 1595-1601 (2006).
- [42] Y. Rheem, B.-Y. Yoo, W.P. Beyermann, N.V. Myung, Nanotechnology 18, 015202 (2007).
- [43] D. Navas, K.R. Pirota, P. Mendoza Zelis, D. Velazquez, C.A. Ross, M. Vazquez, J. Appl. Phys. 103, 07D523 (2008).

Rezultate obținute/lucrări științifice realizate pe tematica proiectului:

a) articole în reviste ISI:

- [P1] D. Dragoman – Influence of light polarization on the analogy between ballistic nanostructures and the electromagnetic field, J. Opt. Soc. Am. B 29, 1528-1534 (2012)
- [P2] A. Radu, D. Dragoman, S. Iftimie – Steering and collimating ballistic electrons with amphoteric refraction, J. Appl. Phys. 112, 024318 (2012)
- [P3] A. Dumitriu, D. Dragoman – Composite metamaterial for ballistic electrons, J. Phys. D 45, 485104 (2012)
- [P4] D. Dragoman, A. Radu, S. Iftimie – Optical analogues of chiral fermions in graphene, J. Opt. 15, 035710 (2013)
- [P5] D. Dragoman – Dirac-Schrödinger transformations in contacted graphene structures, J. Appl. Phys. 113, 214312 (2013)
- [P6] D. Dragoman – Optical analogues of nanostructures with Rashba-Dresselhaus interactions, J. Opt. 16, 015710 (2014)
- [P7] T.L. Mitran, G.A. Nemnes, L. Ion, D. Dragoman – Effects of graded distribution of scattering centers on ballistic transport, J. Appl. Phys. 116, 124316 (2014)
- [P8] T.L. Mitran, G.A. Nemnes, L. Ion, D. Dragoman – Ballistic electron transport in wrinkled superlattices, Physica E 81, 131-135 (2016)
- [P9] A. Radu, S. Iftimie, L. Ion, S. Antohe, D. Dragoman – Ni-based nanowire arrays as chemical and magnetic field sensors, trimisă spre publicare

b) participări la conferințe și manifestări științifice internaționale:

- [C1] A. Radu, S. Iftimie, D. Dragoman – Manipulating ballistic electrons by refraction at an interface between isotropic and anisotropic media, Proc. of 35th International Semiconductor Conf., 15-17 October 2012, Sinaia, Romania, pp. 113-116

- [C2] A. Dumitriu, D. Dragoman – Ballistic electron propagation in a composite metamaterial, Proc. of 35th International Semiconductor Conf., 15-17 October 2012, Sinaia, Romania, pp. 487-490
- [C3] S. Iftimie, A. Radu, D. Dragoman – Optical testing of ballistic transport in graphene devices, EMRS 2012 fall meeting, September 2012, Warsaw, Poland
- [C4] D. Dragoman – Classical optical analogies of ballistic charge carriers in graphene, 518. WE Heraeus Seminar on Quantum-Optical Analogies: a Bridge Between Classical and Quantum Physics, 29 October-1 November 2012, Bad Honnef, Germania (lucrare invitata)
- [C5] S. Iftimie, A. Radu, D. Dragoman – Optical analogies of quantum chirality, 518. WE Heraeus Seminar on Quantum-Optical Analogies: a Bridge Between Classical and Quantum Physics, 29 October-1 November 2012, Bad Honnef, Germania
- [C6] T.L. Mitran, L. Ion, D. Dragoman – Ballistic transport in disordered nano-ribbons, Proc. of 36th International Semiconductor Conf., 14-16 October 2013, Sinaia, Romania, pp. 251-254
- [C7] T.L. Mitran, G.A. Nemnes, L. Ion, S. Iftimie, A. Radu, D. Dragoman – Ballistic scattering on nanoribbons with controlled disorder, EMRS Fall Meeting, 15-19 September 2014, Warsaw, Poland
- [C8] A. Radu, S. Iftimie, T.L. Mitran, L. Ion, D. Dragoman – Ni nanowire arrays as glucose sensor, EMRS Fall Meeting, 15-19 September 2014, Warsaw, Poland
- [C9] A. Radu, S. Iftimie, T.L. Mitran, L. Ion, S. Dulcea, M. Mitrea, S. Antohe, D. Dragoman – Tunable magnetic response of segmented Cu/Ni nanowires, E-MRS (European Materials Research Society) Spring Meeting, 11-15 May 2015, Lille, France
- [C10] T.L. Mitran, G.A. Nemnes, L. Ion, D. Dragoman – Ballistic electron transport in wrinkled metamaterials, 8th International Conference on Advanced Materials (ROCAM 2015), 7-10 July 2015, Bucharest, Romania
- [C11] D. Dragoman – Analogies between light and electrons in nanostructures. Applications, TIM 15-16 Physics Conference, 26-28 May 2016, Timisoara, Romania (invited contribution)
- [C12] A. Radu, S. Iftimie, L. Ion, S. Antohe, D. Dragoman – Study of magnetic response of segmented Cu/Ni nanowires, TIM 15-16 Physics Conference, 26-28 May 2016, Timisoara, Romania
- [C13] D. Dragoman – Light-inspired ballistic nanostructure configurations, 16th International Balkan Workshop on Applied Physics and Materials Science, 7-9 July 2016, Constanta, Romania (plenary)
- [C14] S. Iftimie, A. Radu, A.I. Calugar, B. Bitu, L. Ion, S. Antohe, D. Dragoman – Study of physical properties of Ni:Cu segmented nanowires for sensing devices, 16th International Balkan Workshop on Applied Physics and Materials Science, 7-9 July 2016, Constanta, Romania
- [C15] A. Radu, S. Iftimie, A.I. Calugar, L. Ion, S. Antohe, D. Dragoman – Optimization of metallic segmented nanowires fabrication process using Al₂O₃ template, 16th International Balkan Workshop on Applied Physics and Materials Science, 7-9 July 2016, Constanta, Romania
- [C16] S. Iftimie, A. Radu, A.I. Calugar, B. Bitu, L. Ion, S. Antohe, D. Dragoman – Study of morphological, structural and electrical properties of Ni:Cu segmented nanowires, 11th International Conf. on Physics of Advanced Materials, 8-14 Sept. 2016, Cluj-Napoca, Romania
- [C17] A. Radu, S. Iftimie, A.I. Calugar, A.-M. Raduta, L. Ion, S. Antohe, D. Dragoman – Optimization growth procedure of metallic segmented Ni nanowires for sensing devices, 11th International Conf. on Physics of Advanced Materials, 8-14 Sept. 2016, Cluj-Napoca, Romania

Director proiect,

Prof.dr. Daniela Dragoman