

## Nanofils semiconducteurs Simulation des propriétés électroniques et de transport

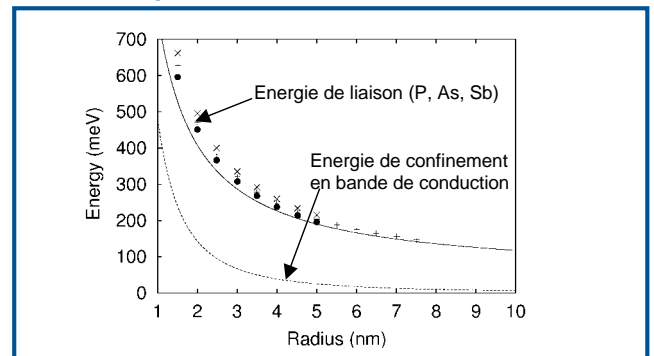
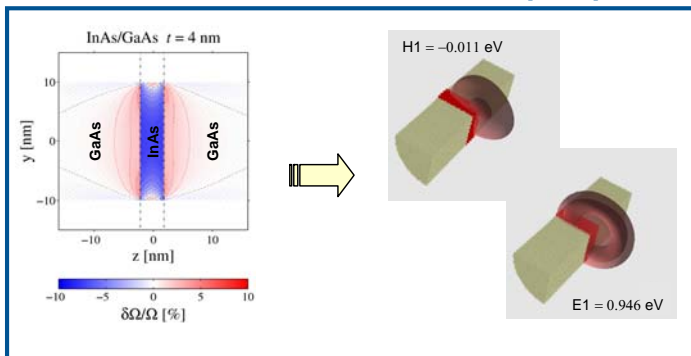
### Participants :

LPMCN, Lyon : X. Blase, Ch. Adessi, M.-V. Fernandez-Serra

CEA, Grenoble : Y.M. Niquet, S. Roche, F. Triozon, A. Lherbier, M. Persson, R. Avriiler, L. Foa-Torres

IEMN, Lille : M. Diarra, C. Delerue, G. Allan

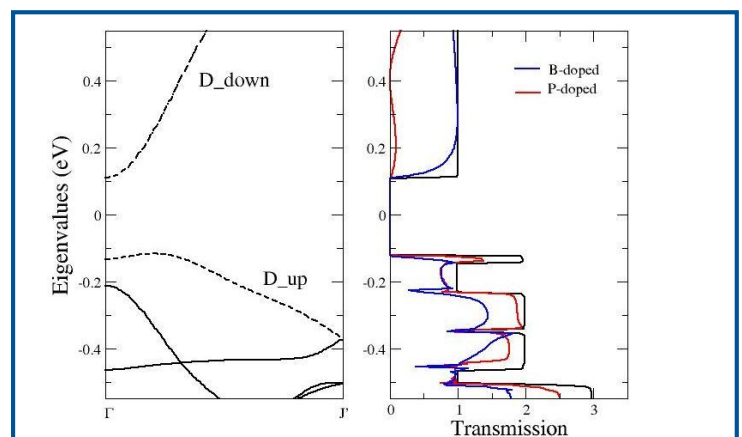
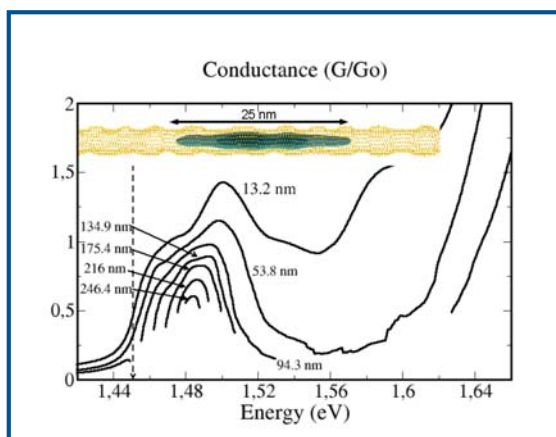
### Calcul des propriétés électroniques



**Gauche :** Les propriétés structurales et électroniques des nanofils sont intimement liées. Les contraintes (à gauche, variation du volume de la maille dans une hétérostructure InAs/GaAs) déforment en effet les fonctions d'onde des électrons et les trous [à droite, surfaces d'équiprobabilité de présence de l'électron ( $E1$ ) et du trou ( $H1$ )].

**Droite :** Forte augmentation de l'énergie de liaison des dopants due au confinement diélectrique. Quand le nanofil est entouré d'un milieu à faible constante diélectrique, l'énergie de liaison augmente fortement par rapport à sa valeur dans le semiconducteur massif. Les dopants ne sont plus ionisés à 300K.

### Calcul des propriétés de transport



**Gauche :** Forte influence du désordre (par exemple la rugosité de surface) sur les propriétés de transport des nanofils. Le désordre localise les électrons et les trous. La conductance (représentée ici en fonction de la position du niveau de Fermi dans la bande de conduction) diminue rapidement dès que la longueur du nanofil dépasse sensiblement la longueur de localisation du système.

**Droite :** Calculs de transport ab initio : application aux nanofils dopés. Développement d'un code de transport ab initio (code Tablier). La ségrégation en surface des dopants et leur impact sur la conductance ont été étudiés [Fernandez-Serra et al., PRL 96, 166805 (2006)].

Contacts : christophe.delerue@isen.fr