

МЕТОД ХАРТРИ И ПРИБЛИЖЕНИЕ ЛИНЕЙНОГО ПАДЕНИЯ ПОТЕНЦИАЛА ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ РЕЗОНАНСНО-ТУННЕЛЬНОГО ДИОДА

Федяй А.В., Москалюк В.А.

Национальный технический университет Украины «КПИ»

03056, Киев-56, просп. Победы, 37, тел.: (044)454-90-64

E-mail: artem.fedyay@gmail.com

From the verification of current-voltage characteristics of the resonant-tunneling diodes with graded and simple emitter it was shown that “linear voltage drop approximation” appears to be more adequate than treating charge redistribution using the Hartree approach. This fact, firstly, put the question about the value of the self-consistent models, which need much more computational resources; and secondly opens the question about the necessity of treating exchange-correlating interactions or other ways that take into account neglected term of electrons interactions.

Из верификации вольтамперных характеристик резонансно-туннельных диодов со «ступенчатым» и обычным эмиттером показано, что приближение т.н. «линейного падения потенциала» оказывается качественно более адекватным, чем учет перераспределения заряда по методу Хартри. Это, во-первых, ставит под сомнение ценность самосогласованных моделей, которые требуют более существенных вычислительных ресурсов, во-вторых, открывает вопрос о необходимости учета обменно-корреляционного взаимодействия или иных путей, учитывающих пренебреженный в методе Хартри вид межэлектронного взаимодействия.

Введение

Использование резонансно-туннельного диода в генераторах электромагнитных колебаний позволяет достичь частоты порядка 1...10 ТГц [1], что является абсолютным рекордом среди твердотельных компонентов. Развитие этого класса приборов далеко от завершения, поэтому важной проблемой является предсказание электрических характеристик при помощи физико-топологического моделирования. Традиционно для учета пространственного заряда используется приближение Хартри или «самосогласованного» поля. В работах, где описаны так называемые «самосогласованные» модели использование этого приближения оправдывают тем, что оно повышает «пиковое» напряжение и тем самым улучшает согласование с экспериментальными ВАХ по этому параметру. Поскольку качественно форма ВАХ РТД обычно предсказывается плохо (особенно падающий и следующий за ним возрастающий участок) как в рамках «самосогласованных», так и «несамосогласованных» (т.е. использующих приближение линейного падения потенциала) приближений, то для традиционных РТД с простым эмиттером приближение Хартри казалось несомненным преимуществом. Однако это оказалось не совсем верным, когда мы сравнили адекватности двух приближений для РТД со сложной структурой эмиттера. В работе проведен сравнительный анализ «самосогласованной» и «несамосогласованной» модели РТД на предмет согласования с экспериментальными данными. Цель работы – определить прогностическую ценность каждой из моделей, основываясь на результатах моделирования «нового» типа РТД – РТД со «ступенчатым» эмиттером, а также на результатах моделирования РТД с однородным эмиттером. Задачи исследования, которые вытекают из цели: построить модели РТД, отличающиеся лишь способом учета пространственного заряда; их программная реализация, моделирование существующих РТД и сравнительная верификация двух моделей; анализ результатов такого сравнения касательно целесообразности использования каждой из аппроксимаций.

Модели РТД и их верификация

Резонансно-туннельный диод – это монополярный полупроводниковый диод, активная часть которого состоит из протяженных сильнолегированных слоев узкозонного полупроводника, между которыми находится нелегированная гетероструктура

протяжённостью не более 50 нм, слои которой чередуются так, что в зоне проводимости образовывается т.н. двухбарьерная квантовая система.

Для целей моделирования важно отличать протяженные приконтактные слои (далее – «резервуары») от нелегированных наноразмерных слоев гетероструктуры (далее – «квантовая область»). Последние не удовлетворяют условию макроскопичности, и требуют отличного описания. Сама область моделирования выбирается так, чтобы перераспределением заряда на ее краях можно было пренебречь. Для этого кроме квантовой системы в нее включают часть прилегающих резервуаров длиной в несколько десятков нанометров.

Модели построены с использованием формализма Ландауэра, который для транспорта через слои трехмерного полупроводника дает рецепт расчета плотности тока в виде формулы Цу-Эсаки:

$$J = \frac{2m^* e k_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3} \int_{eV}^{\infty} T(E_z) D(E_z) dE_z, \quad (1)$$

где e , \hbar , k_B – известные постоянные, m^* – эффективная масса, T – температура, V – приложенное напряжение, $T(E_z)$ – коэффициент прохождения, $D(E_z)$ – так называемая *функция обеспечения электронами*, которая определяется формулой:

$$D(E) \equiv \ln \left(\frac{\left\{ 1 + \exp \left(-\frac{E_z - E_{\Phi}^L}{k_B T} \right) \right\}}{\left\{ 1 + \exp \left(-\frac{E_z - E_{\Phi}^R}{k_B T} \right) \right\}} \right),$$

где E_{Φ}^i – уровень Ферми в «резервуарах».

Видно, что задача по нахождению тока через резонансно-туннельный диод сводится к нахождению коэффициента прохождения $T(E_z)$, который входит в подинтегральное выражение. В случае несамосогласованного моделирования считается, что рельеф зоны проводимости $U(z)$ при смещении на V совпадает с несмещенным потенциальным рельефом без учета пространственного заряда U_0 , от которого в активной области отнимается потенциал $eV_s(z) \cdot z / L_a$, где $V_s(z)$ – потенциал, отсчитанный от левого резервуара; L_a – длина активной области. Потенциалы левого и правого резервуаров считаются постоянными по всей их длине; разность между ними составляет, естественно, V . Для определения тока необходимо найти $T(E_z)$ при каждом V . При этом существенно, что форма потенциального рельефа для каждого V считается известной.

В случае самосогласованного моделирования потенциальный рельеф $U = U_0 - eV_s$ неизвестен наперед и подлежит определению из уравнения Пуассона:

$$\frac{d}{dz} \varepsilon(z) \frac{dV_s}{dz} = \frac{e}{\varepsilon_0} [n(z) - N_d^+(z)], \quad (2)$$

где ε_0 – диэлектрическая постоянная; ε – относительная диэлектрическая проницаемость; N_d^+ – концентрация ионизированных доноров, n – концентрация электронов в зоне проводимости.

В (2) входит концентрация $n(z)$, формула для которой получается из тех же соображений, что и формула Цу-Эсаки:

$$n(z) = \begin{cases} \sum_{i=L,R} \int |\Psi_i(E_z(k_z), U(z), z)|^2 f_i(E_z) dE_z, z \in [z_L, z_R]; \\ 4\pi (2m^*/\hbar^2)^{3/2} \int_{U_i}^{\infty} \sqrt{E - U(z)} / (1 + \exp((E - E_{\Phi}^i)/k_B T)) dE, z \notin [z_L, z_R], \end{cases} \quad (3)$$

$$\text{где } f_i(E_z) \equiv \frac{\sqrt{2}(m^*)^{3/2} k_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3} \ln \left(1 + \exp \left(-\frac{E_z - E_{\Phi}^i}{k_B T} \right) \right) / \sqrt{E_z - U_{i0(i5)}}.$$

Формула (3) включает в себя $U(z)$, но ни $U(n)$, ни $n(U)$ не могут быть получены в явном виде. Уравнения (2) и (3) формируют систему, которая называется «самосогласованной» или системой «Шредингера-Пуассона». Решением этой системы является самосогласованный потенциальный рельеф.

Модели РТД хуже всего предсказывают участок ВАХ, следующий за «пиком» Области «плато», которые там наблюдаются, удается хоть как-то объяснить лишь в рамках внутренне противоречивых подходов, или манипуляций с «подгоночными» параметрами в рамках «двудолинной» модели (см. [2] и ссылки внутри).

Мы исследовали резонансно-туннельные диоды при помощи целого ряда созданных нами моделей [3], который можно представить в виде некоторой иерархии по достигаемой адекватности и сложности, за счет которой первая и увеличивается. Естественно, метод Хартри мы считали более адекватным, чем линейного падения потенциала. Однако верификация показала, что форма ВАХ и особенно участка «плато» лучше предсказывается в рамках модели линейного падения потенциала. Особенно ясно это удается видеть для РТД со сложной структурой эмиттера. Для примера возьмем типичный РТД со ступенчатым эмиттером, описанный в [4]. Его топологическая структура показана на рис. 1, а. Экспериментальная ВАХ упомянутого диода и результаты ее моделирования при помощи несамосогласованной модели, приведены на рис. 1. Для удобства сравнения модельная ВАХ сдвинута на 0.03 В вправо. Самосогласованное моделирование ВАХ этого диода *не предсказывает* наличие области плато.

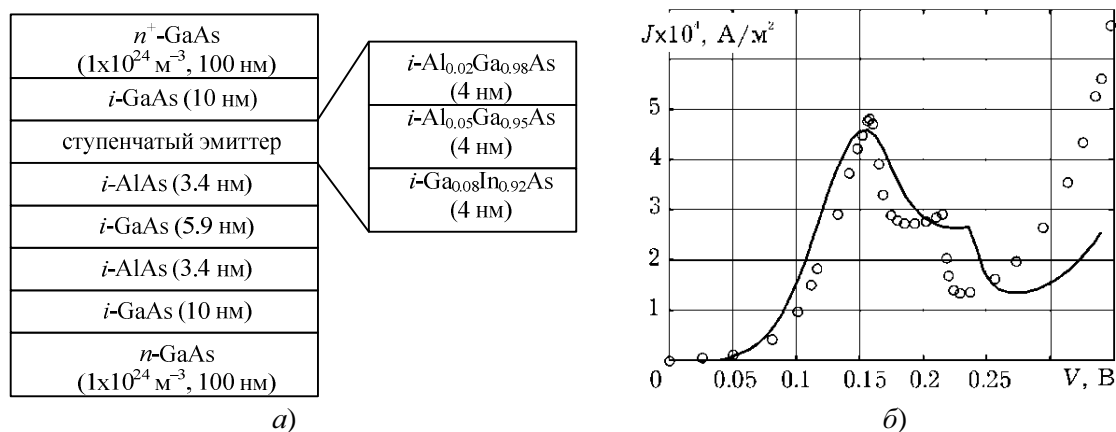


Рис. 1. Верифицируемый РТД: а) Топология резонансно-туннельного диода [4] (а), его экспериментальная (кружечки) и модельная (сплошная линия) (б) ВАХ

Отметим, что механизм формирования «плато» в РТД со ступенчатым эмиттером отличается от механизма формирования «плато» в РТД с обычным эмиттером. В последнем случае есть экспериментальное доказательство того, что ответственность за формирование области «плато» несет перенос между квантовой ямой, образующейся в эмиттере (ЭКЯ) и основной квантовой ямой (ОКЯ) [5]. Поэтому-то область плато для таких «простых» РТД никогда не наблюдается в моделях РТД, основанных на формализме огибающей волновой функции и всех остальных, не учитывающих неупругое рассеивание (напр. *WinGreen*), а лишь в моделях, которые специально такой транспорт учитывают [2]. Но и модель [2], которая учитывает перенос заряда между ЭКЯ и ОКЯ в РТД с обычным эмиттером, предсказывает наличие областей плато только в случае *несамосогласованного* моделирования.

Механизм же формирования области плато для РТД со ступенчатым эмиттером не связан с переносом заряда между ЭКЯ и ОКЯ. В случае ступенчатого эмиттера характер потенциального рельефа таков, что по мере увеличения напряжения вслед за основным пиком следует область плато, которая обусловлена тем, что «ступенька» эмиттера уже после прохождения «пикового» напряжения опускается ниже, и, несмотря на то, что

условие резонанса выполняется уже для меньшего количества электронов, вероятность прохождения по всем энергиям увеличиваются (рис. 2).

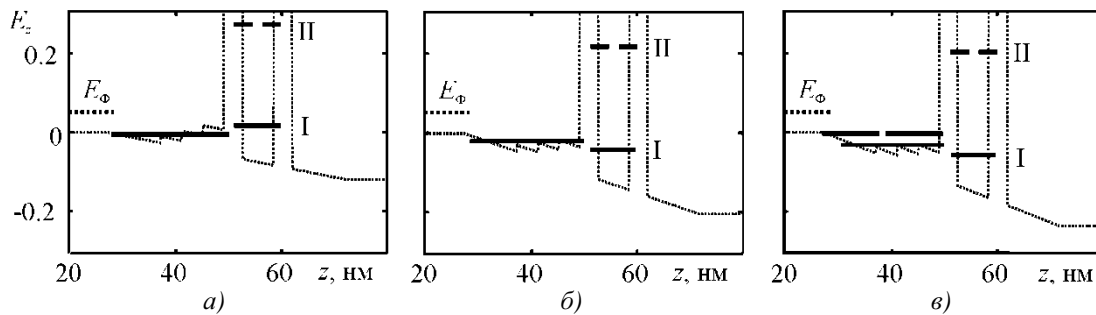


Рис. 2. Положение уровней энергии и уровня Ферми в ДБКС диода со ступенчатым эмиттером: а) пиковое напряжение, $V = 0.019$ В, б) напряжение экстра-пика $V = 0.197$ В, в) напряжение долины $V = 0.23$ В. Наибольшая плотность тока через диод наблюдается, когда уровень энергии в основной квантовой яме лежит между E_F и E_c ; экстра-пик и долина на ВАХ возникают, когда уровень в ОКЯ оказывается ниже дна зоны проводимости, но не совпадает с уровнем энергии в ЭКЯ

Выводы

Обнаружено, что модели РТД, использующие для учета пространственного заряда метод Хартри обладают более низкой прогностической ценностью, чем модели, в которых используется приближение линейного падения потенциала. Так, самосогласованные модели никогда не предсказывают область «плато» и хуже описывают другие элементы кривой $J(V)$. Наблюдения основаны на верификации моделей РТД как с обычным (однородным) эмиттером, так и со ступенчатым. Механизм формирования области «плато» в отмеченных случаях отличный, но несмотря на это несамосогласованная модель предсказывает области плато, а приближение Хартри – нет. Предполагаемая причина следующая. Поскольку приближение Хартри не учитывает обменно-корреляционного взаимодействия, то очевидно, что эти модели дают завышенную концентрацию электронов в активной области, за счет чего вся ДБКС «подымается» выше, чем это есть на самом деле, и ЭКЯ «выталкивается» вверх настолько, что перенос из (квази-)двумерного газа ЭКЯ в ОКЯ результаты моделирования не предсказывают. При прогнозировании электрических характеристик РТД следует, таким образом, полагаться на модель линейного падения потенциала, поскольку она не только более адекватна, но и на порядок быстрее по времени счета.

Список литературы

1. Suzuki S. Fundamental oscillation of resonant tunneling diodes above 1 THz at room temperature / S. Suzuki, M. Asada, M. Teranish et.al. // Appl. Phys. Lett. – 2010. – Vol. 97. P. 242102-1–3.
2. Москалюк В.А. Моделирование артефактов на ВАХ резонансно-туннельного диода / В.А. Москалюк, А.В. Федяй // 21-я Международная конференция «СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии». – Севастополь. – 12-16 сентября 2011 г. – с. 787–788.
3. Fediai A. Hierarchical approach to resonant-tunneling diode modeling / A. Fediai, V. Moskaliuk // XXXII International Scientific Conference "ELNANO 2012", April 10-12, 2012: Proceedings. – Kyiv (Ukraine). – P. 58–59.
4. Yatskiv R. Analysis of the resonant tunneling diode with the stepped pre-barrier / R. Yatskiv, J. Voves // Journal of physics: conference series. – 2009. – Vol. 193. – P. 1–4.
5. Qiu Z.J. Experimental verification of origin of plateau-like current-voltage characteristics of resonant tunneling diodes / Z.J. Qiu, Y.S. Gui, S.L. Guo et. al. // Appl. Phys. Lett. – 2007. – Vol. 4. – P. 1961–1963.