

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ
“КИЇВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ”
Факультет електроніки
Кафедра фізичної та біомедичної електроніки

Інв. № _____

До захисту

допущено

Завідувач кафедри

_____ В.І. Тимофєєв

“___” _____ 200__р.

ПОЯСНЮВАЛЬНА ЗАПИСКА

до дипломної роботи освітньо-кваліфікаційного рівня «бакалавр»
за напрямком підготовки 6.090804 – "Електроніка"

на тему: «Моделювання резонансно-тунельного діода: метод
функцій Ейрі»

Студент групи _____ ДМ-52 _____

Іван Сергійович Тісний

Керівник роботи _____

А.В. Федяй

Консультант з технічної частини _____

к.т.н. А.О. Попов

Київ – 2009

РЕФЕРАТ

Тема роботи „Моделювання резонансно-тунельного діода: метод функцій Ейрі”. Об’єктом дослідження є моделювання електричних характеристик вказаних діодів за допомогою методу функцій Ейрі. Предмет дослідження – розв’язання прикладних завдань для отримання ВАХ згаданих діодів та знаходження коефіцієнтів прозорості їх активних областей, виявлення залежностей ВАХ від температури та залежностей коефіцієнтів прозорості активних областей від прикладеної напруги.

Метою роботи є огляд сучасного стану моделювання РТД та побудова моделі РТД методом функцій Ейрі; розв’язання фундаментальної задачі по знаходженню вищезгаданих залежностей та їх фізичній інтерпретації, розв’язання прикладних задач по аналізу температурної залежності статичних характеристик РТД та аналізу залежності коефіцієнтів прозорості активної області від прикладеної напруги.

У першому розділі дані основні відомості про процеси, що відбуваються в РТД, користуючись спрощеними уявленнями про його функціонування з тим, щоб розкрити суть його роботи. В другому розділі створено модель РТД методом функцій Ейрі, отримано та проаналізовано ВАХ даної моделі та коефіцієнт прозорості її активної області.

Робота виконана на 46 сторінках, вона містить 2 розділи, 11 ілюстрацій, 1df додатки та 14 джерел у переліку посилань.

РЕЗОНАНСНО-ТУНЕЛЬНИЙ ДІОД, МОДЕЛЮВАННЯ, МЕТОД ФУНКЦІЙ ЕЙРІ

ABSTRACT

The topic of the given work is “Modeling of resonant-tunneling diode: Airy function method”. The subject of work is solving some applications for obtaining I-V characteristics of the mentioned diodes and finding the coefficient of transparency of their active regions, identifying dependencies of I-V characteristics from the temperature and dependence of the coefficient of transparency of the active region from the voltage.

The aim of the work is to show the modern status of modeling of RTD and building the model of RTD using Airy function method; solving the fundamental tasks on obtaining above mentioned dependences, their physical interpretation; solving the applications on finding temperature dependence of static characteristics of RTD and voltage dependence of the coefficient of transparency of the active region.

The main information about the process taking place in RTD using the simplifying conception of its operation in order to show the principles of its work are given in the 1st chapter. In the second section, a model of RTD was built with use of Airy function method, received and analyzed I-V characteristics of this model and the coefficient of transparency of its active region.

The given work is performed on the 46 pages. It consists of 2 chapters, 11 illustrations, 2 appendix and 14 sources in the list of references.

RESONANT-TUNNELING DIODE, MODELING, AIRY FUNCTION METHOD

ЗМІСТ

ВСТУП.....	6
1. ОСНОВНІ ЕЛЕМЕНТИ МОДЕЛЕЙ РТД.....	8
1.1. Основні уявлення про електронний транспорт в РТД.....	8
1.2. Визначення зонної структури.....	9
1.3. Методи отримання гетероструктур.....	11
1.4. Енергетичні рівні в квантовій ямі як метастабільні електронні стани.....	12
1.5. Наближення плоских зон.....	17
1.6. Сумарний струм, що проходить через РТД.....	20
2. МОДЕЛЮВАННЯ ВАРИЗОННОГО РТД: МЕТОД ФУНКЦІЙ ЕЙРІ.....	24
2.1. Варизонна структура РТД.....	24
2.2. Підхід до знаходження коефіцієнта прозорості ДБКС методом функцій Ейрі.....	25
2.3. Припущення, покладені в основу моделі.....	28
2.4. Побудова математичної моделі.....	30
2.5. Алгоритм роботи.....	34
2.6. Результати моделювання.....	35
ВИСНОВКИ.....	37
ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ.....	38
Додаток А.....	40
Додаток Б.....	44

ВСТУП

Динаміка розвитку швидкодії та найважливіших параметрів пристроїв твердотільної електроніки, насамперед, обумовлена зменшенням характерних розмірів електронних компонентів, на основі яких будуються пристрої, прилади та системи сучасної електронної промисловості. До недавнього часу головні зусилля витрачалися саме на зменшення характерних розмірів пристроїв за рахунок, наприклад, застосування більш досконаліх або принципово нових технологій їхнього виготовлення. Такий підхід був й є економічно виправданим, і буде виправданим ще якийсь час. Однак, як відзначається, наприклад, в [1, с. 7] й [2, с. 1], лінійність закону Мура для збільшення швидкодії компонентів твердотільної електроніки може порушитися в бік більш низьких ступенів. А це означає зниження темпів розвитку електроніки.

Вчені зі всього світу вже давно замислювалися про ті межі розмірів, на яких ще здатні працювати традиційні пристрої мікроелектроніки. Ще в 1963 році радянський вчений Л. В. Йогансен запропонував [3], а в 1965т. [4] описав принцип дії нового пристрою, названого ним тонкоплівковим електронним інтерферометром. Принцип роботи пристрою заснований на квантових ефектах на відміну від елементної бази традиційної мікроелектроніки. У ньому зменшення розмірів робочих областей тільки поліпшує швидкодію, яка відрізняється від традиційних діодів Есакі на порядки. Надалі пристрої такого типу почали називати резонансно-тунельними діодами (РТД) після роботи Тсу та Есакі в 1967 р. [5], що описувала експериментальні дані вимірювання ВАХ першого РТД.

Зараз РТД - один з найбільш перспективних приладів твердотільної наноелектроніки [6]. Було продемонстроване застосування РТД для різних цілей в електроніці: цифро-аналогові перетворювачі (ЦАП), задаючі генератори, реєстри зсуву та статичні ЗУПВ із ультранизьким споживанням енергії [7]. РТД можуть бути виготовлені для більш високопродуктивних ЦАП, ніж ЦАП та інші пристрої на КМОП. Вони покривають частотний діапазон 10...100 ГГц і є технологією з

більш низьким споживанням енергії, що застосовується для розробки статичних запам'ятовувальних пристроїв з довільною вибіркою (ЗПДВ) [1].

Однак далеко не всі проблеми, з якими зітнулися розробники перших РТД, вирішені до кінця. Багато питань дотепер залишаються без задовільних відповідей. Деякі з них стосуються не тільки РТД, але є відображенням загальних проблем у розумінні принципів функціонування квантових приладів, які, очевидно, будуть актуальними ще тривалий час.

До них, зокрема, відноситься і проблема адекватного моделювання електронних характеристик приладів. Вона полягає в тому, що, ґрунтуючись на найпростіших уявленнях квантової механіки та кінетичної теорії, виявляється неможливим дати скільки-небудь задовільний опис навіть вольтамперних характеристик (ВАХ) квантових приладів. Результати розрахунків і вимірів відрізняються в декілька разів, а часто й на порядки. [8].

Робота має на меті описати використання метода функцій Ейрі для моделювання запропонованої варизонної структури, як приклад підходу до моделювання РТД. Зокрема, в роботі проведена побудова моделі РТД методом функцій Ейрі, отримано ВАХ моделі та показана їх залежність від температури, розраховано коефіцієнт прозорості активної області РТД та його залежність від прикладеної напруги.

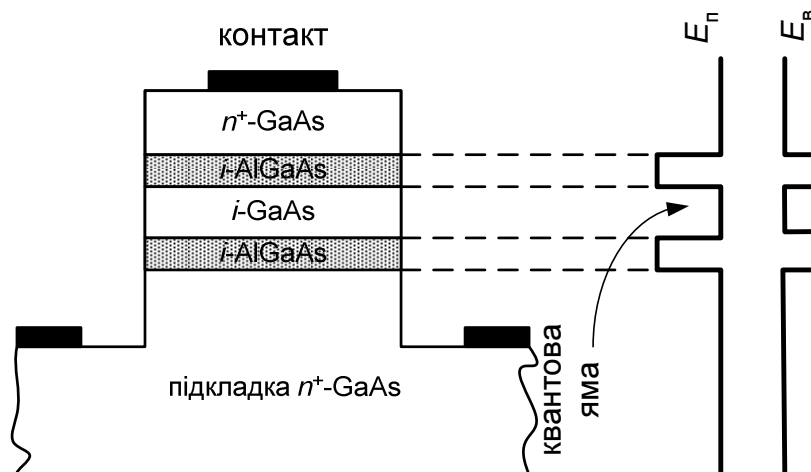
1. ОСНОВНІ ЕЛЕМЕНТИ МОДЕЛЕЙ РТД

1.1. Основні уявлення про електронний транспорт в РТД

РТД конструктивно являє собою гетероструктуру, що складається з двох основних частин. По-перше, це тонкий шар відносно вузькозонного напівпровідника (наприклад, GaAs), що міститься між двома тонкими шарами матеріалу з більшою шириною забороненої зони (наприклад, AlGaAs). По-друге, це масивні ділянки матеріалу («резервуари») з меншою забороненою зоною, які звичайно виготовляються з того ж матеріалу, що й тонкий шар відносно вузькозонного напівпровідника (наприклад, GaAs), та з'єднують всю структуру з контактними площадками.

Резервуари мають високий рівень легування (здебільшого донорними домішками), і слугують джерелом носіїв заряду. Тонкі шари формують двохбар'єрну квантову систему (ДБКС). Вони не легуються, щоб запобігти накопиченню заряду всередині квантової системи. Таким чином, ДБКС визначає транспортні можливості всієї структури, тобто модулює рух носіїв заряду в РТД.

Сказане вище умовно зображено на рис. 1.1. Між бар'єрами та резервуарами зазвичай формують тонкі шари нелегованих «спейсерів», що не показані на рис. 1.1. Їх формують з того ж матеріалу, що й резервуари. Для стаціонарних процесів їх вплив обмежується зменшенням ефективної напруги, що прикладається до ДБКС, крім того, спейсери дозволяють збільшити швидкодію РТД.



На діаграмі (праворуч) показана потенціальна яма в зоні провідності.

Рисунок 1.1 - Структура резонансно-тунельного діоду на GaAs-AlGaAs

1.2. Визначення зонної структури

Основою РТД, що обумовлює його властивості, є розглянута на початку цього розділу двобар'ерна квантова система. Для її одержання необхідна розбіжність параметрів зонної структури в зоні провідності або у валентній зоні (або обох разом) для того, щоб отримати квантову яму між двома потенціальними бар'єрами. Найбільш популярною комбінацією матеріалів, що використовується зараз для цієї мети, є GaAs-AlGaAs (рис. 1.1), GaInAs-AlInAs, а також інші сполуки елементів групи $A^{III}B^V$, наприклад, GaN-AlGaN, які є нітридами й, як видно з рис 1.2, мають феноменально широку заборонену зону.

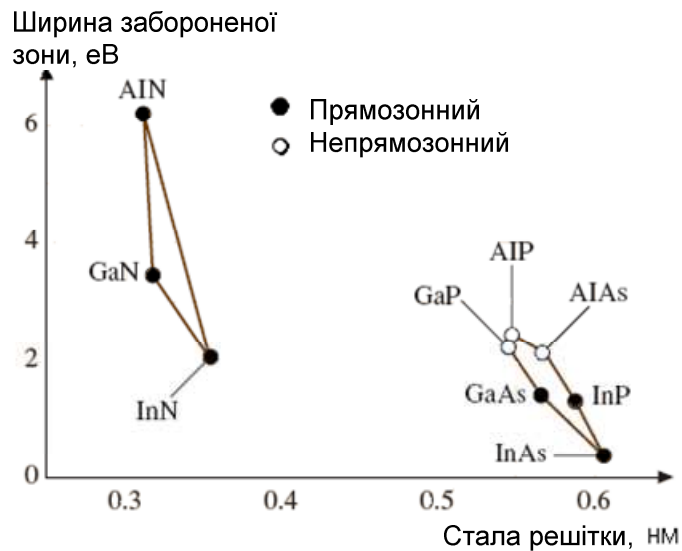


Рисунок 1.2 - Ширина забороненої зони при кімнатній температурі для деяких важливих матеріалів типу АІІВ в порівнянні з сталими їхніми кристалічними решітками

Для отримання розбіжностей параметрів зонної структури необхідно використовувати, як було сказано вище, різні матеріали та їх сполуки. Наприклад, зміна молярної частки x_m алюмінію в сполуці $\text{Al}_{x_m}\text{Ga}_{1-x_m}\text{As}$ приводить до лінійної зміни ширини забороненої зони по емпіричному закону $\Delta E_{33}(x_m(x)) = (1.42 + 1.247 x_m(x))$ [еВ] [9].

Зміна ширини забороненої зони, в свою чергу, визначає зміну положення дна зони провідності згідно емпіричної формули

$$\Delta E_{3\Gamma}(x) = 0.62(\Delta E_{33}(x) - \Delta E_{33_{\text{GaAs}}}),$$

де ΔE_{33} – ширина забороненої зони AlGaAs ;

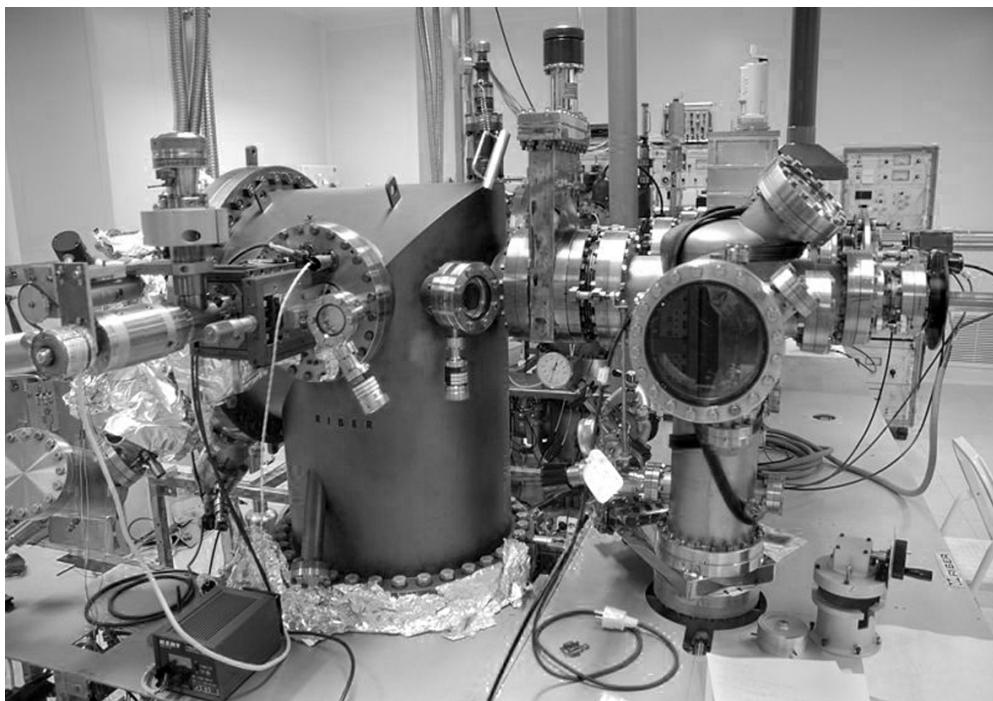
$\Delta E_{33_{\text{GaAs}}}$ – ширина забороненої зони GaAs [9].

Таким чином, зміна молярної маси $x_m(x)$ призводить до зміни потенціального рельєфу зони провідності, тобто існує необхідна розбіжність параметрів зонної структури.

1.3. Методи отримання гетероструктур

Так як для створення РТД необхідно створення тонких епітаксіальних шарів та різкі – стрибкоподібні - профілі легування, у більшості відомих випадках для закладання плівок використовується молекулярно-променева епітаксія (МПЕ), але іноді для цих цілей також застосовувалася технологія хімічного осадження з газової фази металоорганічних сполук.

Молекулярно-променева епітаксія (МПЕ) або молекулярно-пучкова епітаксія - епітаксіальне зростання в умовах надвисокого вакууму [10]. Дозволяє вирощувати гетероструктури заданої товщини з моноатомно гладкими гетерограницями і з заданим профілем легування. В основі методу лежить осадження випарованої в молекулярному джерелі речовини на кристалічну підкладку. Система МПЕ зображена на рис. 1.3.



Видно ростову камеру (зліва) і камеру завантаження зразків (справа).

Рисунок 1.3 - Система молекулярно-пучкової епітаксії

Основна перевага методу - можливість створення унікальних наноструктур з дуже високою чистотою, однорідністю і малою кількістю дефектів. До недоліків методу можна віднести високу ціну обладнання та вихідних матеріалів, малу швидкість росту, складність підтримання високого вакууму.

Хімічне осадження з газової фази являє собою осадження парів методом епітаксіального зростання матеріалів, особливо створення напівпровідників від поверхневих реакцій органічних сполук та гідридів металів, що містять необхідні хімічні елементи.

На відміну від молекулярно-променевої епітаксії ріст кристалів здійснюється за допомогою хімічної реакції, а не фізичного осадження. Це відбувається не у вакуумі, а у газовій фазі при помірному тиску (від 2 до 100 кПа). Як такий, цей метод є кращим для створення пристроїв, що включають термодинамічні та метастабільні сплави.

1.4. Енергетичні рівні в квантовій ямі як метастабільні електронні стани

Якщо розглядати двохбар'єрну квантову систему (ДБКС) як систему, що має здатність до розпаду, то рівні, отримані за умови повного ігнорування можливості розпаду, будуть збігатися з найбільш імовірною енергією електрона у відповідному метастабільному стані.

ДБКС з нескінченною шириною бар'єра є шуканою системою з нульовою ймовірністю розчеплення. Позначаючи ширину квантового бар'єра як a і його висоту - U_0 , розв'язок рівняння Шредінгера для такої системи можна представити у вигляді двох систем рівнянь, корені яких визначають положення енергетичних рівнів [11]:

$$\begin{cases} \cos \xi = \pm \gamma \xi \\ \operatorname{tg} \xi > 0 \end{cases}, \quad (1.1)$$

$$\begin{cases} \sin \xi = \pm \gamma \xi \\ \operatorname{tg} \xi < 0 \end{cases}, \quad (1.2)$$

де $\xi = ka / 2$;

$$k = \sqrt{2m^* E} / \hbar;$$

$$\gamma = \frac{\hbar}{a} \sqrt{\frac{2}{m^* U_0}},$$

де \hbar - постійна Планка;

E - енергія подовжнього руху електрона;

m^* - ефективна маса електрону.

Системи (1.1) і (1.2) мають корені тільки у випадку, якщо $\gamma \xi < 1$ або $\xi < 1 / \gamma$.

У такій області кожна з систем (1.1) або (1.2) буде мати лише один розв'язок на кожному з інтервалів $\left(\frac{\pi}{2}(n-1); \frac{\pi}{2}n \right)$, де $n = 1, 2, 3, \dots, n_{\max}$. Загальна кількість повних

інтервалів $s = \operatorname{int}\left(\frac{2}{\pi\gamma}\right)$, де "int" означає цілу частину. Крім того, якщо $\frac{2}{\pi\gamma} > s$, то

системи (1.1) або (1.2) мають ще один корінь, що належить до інтервалу

$$\frac{\pi}{2}n_{\max} < \xi < \frac{1}{\gamma}.$$

Таким чином, загальна кількість дискретних рівнів

$$N = \operatorname{int}\left(\frac{2}{\pi\gamma}\right) + 1,$$

а точніше:

$$N = \frac{\sqrt{2m^*}}{\pi\hbar} a \sqrt{U_0} + 1.$$

Графічна інтерпретація (рис. 1.4) розв'язків систем (1.1) і (1.2), дозволяє обмежити область досліджень до пошуку одного кореня рівняння для кожного з інтервалів $\left(\frac{\pi}{2}(n-1); \frac{\pi}{2}n\right)$.

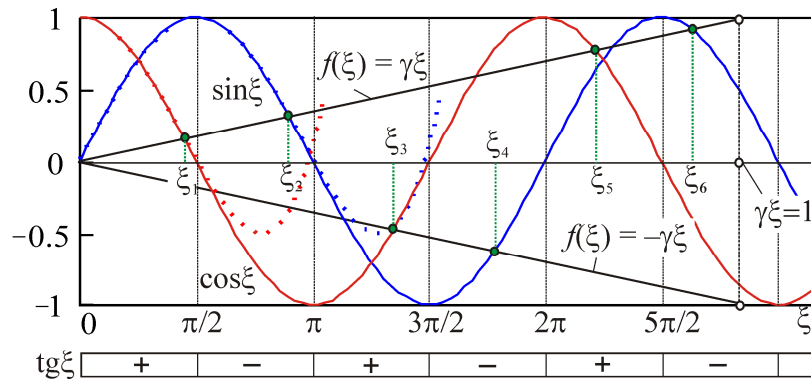


Рисунок 1.4 - Графічне зображення розв'язків системи (1.1) та (1.2)

З рис. 1.4 видно, що власні значення енергії E_n на перших чотирьох інтервалах енергії визначаються за допомогою наступних рівнянь:

$$n = 1: \cos \xi = \gamma \xi, \quad \xi \in \left(0; \frac{\pi}{2}\right), \quad (1.3)$$

$$n = 2: \sin \xi = \gamma \xi, \quad \xi \in \left(\frac{\pi}{2}; \pi\right),$$

$$n = 3: \cos \xi = -\gamma \xi, \quad \xi \in \left(\pi; \frac{3\pi}{2}\right),$$

$$n = 4: \sin \xi = -\gamma \xi, \quad \xi \in \left(\frac{3\pi}{2}; 2\pi\right).$$

Наприклад, пошук наближеного аналітичного рішення (1.3), розкладаючи косинус в околиці $\xi = 0$, і обмежуючись двома першими ненульовий членами ряду, можна отримати таким:

$$1 - \frac{\xi^2}{2} = \gamma\xi. \quad (1.4)$$

Додатній розв'язок (1.4) має вигляд:

$$\xi = \sqrt{\gamma^2 + 1} - \gamma,$$

або, повертаючись до звичайних позначень:

$$E_1 = \gamma^2 \left(\sqrt{\gamma^2 + 1} - \gamma \right)^2 U_0.$$

Аналітичний вираз для будь-якого вищого енергетичного рівня (якщо такі існують), можна знайти таким же чином, розкладаючи відповідну функцію в околиці будь-якої межі інтервалу, всередині якого шукали рішення.

Коефіцієнта пропускання потенційного бар'єру з висотою U_0 й шириною b може бути розрахований у відповідності із співвідношенням:

$$T = \frac{4k_1^2 \chi_2^2}{(k_1^2 + \chi_2^2)^2 \operatorname{sh}^2 b \chi_2 + 4k_1^2 \chi_2^2}, \quad (1.5)$$

$$\text{де } \hbar k_1 = \sqrt{2m^* E};$$

$$\hbar \chi_2 = \sqrt{2m^* (U_0 - E)}.$$

Енергетичний спектр електронів в потенціальній ямі, оточеній потенціальними бар'єрами кінцевої ширини, буде збільшуватися на відміну від випадку з нескінченною шириною бар'єрів. Хоча в такому випадку існує певна величина поздовжнього імпульсу електрона в ямі, де амплітуда хвильової функції електрона набагато більша, ніж поза нею. Максимальна амплітуда електронної хвилі в потенціальній ямі відповідає енергетичним рівням тієї ж системи, але з нульовою ймовірністю розщеплення.

Ці рівні є метастабільними, тому що електрон в кінці кінців залишить потенціальну яму через один із бар'єрів. При умові $|T_i|^2 \ll 1$ можна отримати

співвідношення для розрахунку середньої тривалості життя електрона на метастабільному рівні [12]:

$$\tau_n = \frac{2a}{v_i} \left(\frac{1}{|T_1|^2 + |T_2|^2} \right)$$

де $v_i = (2E_i / m)^2$ - швидкість руху електрона на i -му резонансному рівні;

T_1, T_2 - коефіцієнти передачі відповідно для 1-го та 2-го бар'єрів (вони визначаються у співвідношенні (1.5)).

Ширина цих рівнів пов'язана з середньою тривалістю життя електрона на цьому рівні, у відповідності з принципом невизначеності для енергії:

$$\Delta E_n = \frac{\hbar}{\tau_n},$$

і представлена в якості "природнього" розширення резонансного рівня.

У той же час, процеси розсіювання, що існують у потенціальній ямі, руйнують когерентність електронних хвиль і спричинюють додаткове розширення енергетичних рівнів за рахунок так званого "релаксаційного" розширення, величину якого позначають через ΔE_p . Перший з них пов'язаний з часом релаксації імпульсу τ_p відношенням:

$$\Delta E_p = \frac{\hbar}{\tau_p}.$$

Основний вид розсіювання властивий GaAs є полярне оптичне розсіювання. Такий вид розсіювання - неупругим. Полярні оптичні фонони мають енергію $\hbar\omega_o = 0,035$ eV. Таким чином, при кожному акті розсіювання енергії електрона змінюється на 0,035 eV, що як правило, набагато більше ніж ΔE_n . Це зменшує тривалість життя електрона на метастабільному рівні. Ось чому кожен рівень додатково розширюється.

Кінцеве розширення енергетичного рівня визначається як:

$$\Delta E = \Delta E_n + \Delta E_p$$

Кількісне значення ΔE має зрозумілий фізичний зміст: ймовірність знаходження електрона у центрі даного інтервалу з енергією відповідного дискретного рівня дорівнює $1/\sqrt{2}$.

Функція передачі ДБКС може бути апроксимована як сума функцій Лоренца :

$$D(E) = \sum_{i=1}^N \frac{\Delta E_{ni} / \Delta E_i}{1 + 4 \left(\frac{E - E_{ni}(V)}{\Delta E_{ni}} \right)^2},$$

де i – кількість дискретних рівнів.

Як приклад, знайдемо функцію передачі для ДБКС у випадку плоских зон.

1.5. Наближення плоских зон

Припустимо, що до ДБКС прикладена певна напруга V . Якщо питомі провідності всіх сполук $\text{Al}_{x_m} \text{Ga}_{1-x_m} \text{As}$ однакові і незалежать від молярної частки Al (x), вважаємо, що напруга спадає рівномірно вздовж всієї системи. Падінням напруги на резервуарах можна знехтувати тому, що вони сильно леговані, а сама ДБКС нелегована (рис. 1.5).

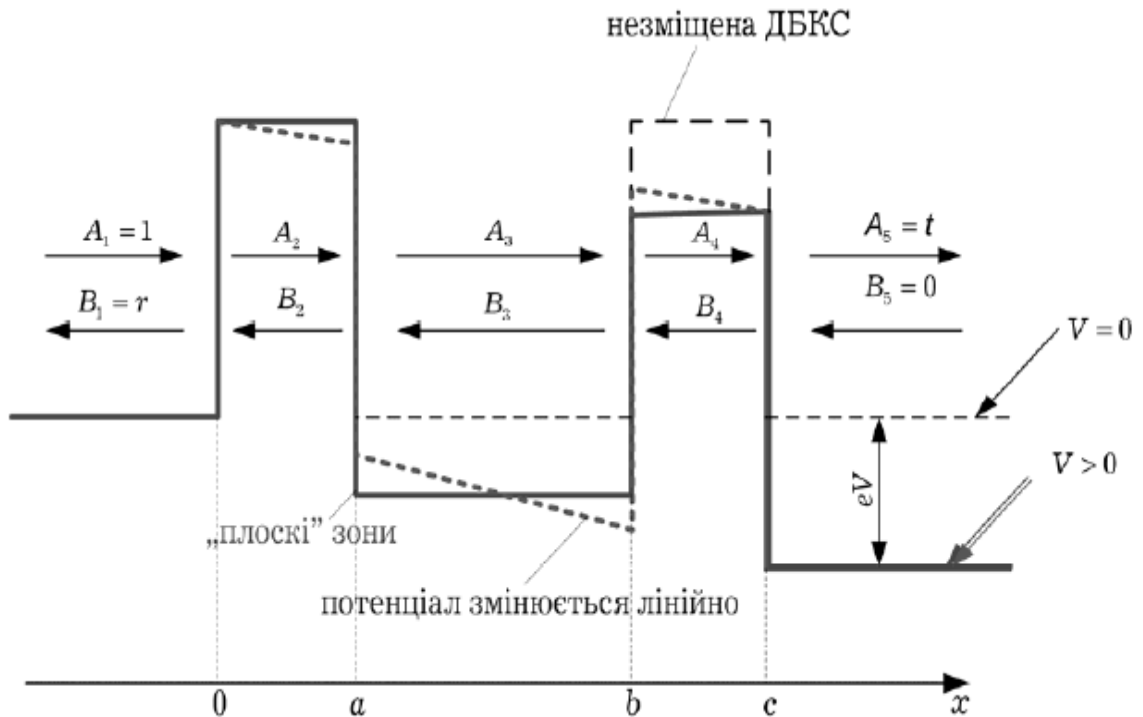


Рисунок 1.5 – Потенціальний профіль ДБКС для різних прикладених напруг: $V = 0$, $V > 0$ в наближенні потенціалу, що змінюється лінійно, а також в наближенні «плоских» зон

Хвильові властивості електрона проявляються в напрямку переносу заряду (поперечний транспорт). Наближення «плоских» зон дозволяє представити розв’язок рівняння Шредингера для кожної з областей РТД у вигляді суперпозиції падаючої та відбитої «плоских» хвиль. Для i -ї та $i+1$ -ї областей поздовжня складова хвильової функції (напрямок осі x) буде мати вигляд:

$$\psi_i = A_i e^{ik_i x} + B_i e^{-ik_i x}, \quad (1.6)$$

$$\psi_{i+1} = A_{i+1} e^{ik_{i+1} x} + B_{i+1} e^{-ik_{i+1} x}, \quad (1.7)$$

де $k_i = \sqrt{2m_i^*(U_i - E)} / \hbar$,

де m_i^* – ефективна маса електрона в i -му шарі;

U_i – потенціал зони провідності i -го шару;

E – енергія електрона;

$$\hbar = h / 2\pi,$$

де h – стала Планка-Дірака.

Якщо ми розглядаємо електрон, що падає на ДБКС зліва, то для коефіцієнтів A_1, B_1, A_5, B_5 треба покласти очевидні рівності:

$$A_1 = 1, B_1 = r, A_5 = t, B_5 = 0, \quad (1.8)$$

де $t = \psi_5 / \psi_1$, $r = 1 - t$ – величини, квадрати модулів яких мають фізичний смисл коефіцієнту проходження та коефіцієнту відбиття для ДБКС відповідно.

Основний вплив, що здійснює ДБКС при поперечному транспорті електрона через неї, є відбиття частини падаючих на неї електронів, що пропорційно $r^* r$ і проходження решти з них:

$$t^* t = D. \quad (1.9)$$

В подальшому величину D будемо називати коефіцієнтом передачі. Вона визначає величину струму через РТД.

Для ідентифікації величини D запишемо граничні умови для функції ψ та її просторової похідної $\frac{d\psi}{dx}$ [13] на границях i -го та $i+1$ -го шарів:

$$\psi_i(x) \Big|_{x=x_{i,i+1}} = \psi_{i+1}(x) \Big|_{x=x_{i,i+1}},$$

Беручи до уваги (1.6) та (1.7), для i -го шару ці граничні умови в матричній формі перепишуться наступним чином:

$$\begin{bmatrix} e^{ik_{i+1}x} & e^{-ik_{i+1}x} \\ \frac{k_{i+1}}{m_{i+1}^*} e^{ik_{i+1}x} & -\frac{k_{i+1}}{m_{i+1}^*} e^{-ik_{i+1}x} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{i+1} \\ B_{i+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{ik_i x} & e^{-ik_i x} \\ \frac{k_i}{m_i} e^{ik_i x} & -\frac{k_i}{m_i} e^{-ik_i x} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_i \\ B_i \end{bmatrix}.$$

Помножимо обидві частини на $\begin{bmatrix} e^{ik_{i+1}x} & e^{-ik_{i+1}x} \\ \frac{k_{i+1}}{m_{i+1}^*} e^{ik_{i+1}x} & -\frac{k_{i+1}}{m_{i+1}^*} e^{-ik_{i+1}x} \end{bmatrix}^{-1}$ зліва. Одержимо:

$$\begin{bmatrix} A_{i+1} \\ B_{i+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{ik_{i+1}x} & e^{-ik_{i+1}x} \\ \frac{k_{i+1}}{m_{i+1}^*} e^{ik_{i+1}x} & -\frac{k_{i+1}}{m_{i+1}^*} e^{-ik_{i+1}x} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} e^{ik_i x} & e^{-ik_i x} \\ \frac{k_i}{m_i^*} e^{ik_i x} & -\frac{k_i}{m_i^*} e^{-ik_i x} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_i \\ B_i \end{bmatrix} \equiv T_{i,i+1} \begin{bmatrix} A_i \\ B_i \end{bmatrix}.$$

Введена тут матриця $T_{i,i+1}$ (матриця передачі i -го шару) має розмірність 2×2 . Легко показати, що такі матриці мають властивість мультиплікативності, тому загальна матриця передачі T дорівнює:

$$T = T_{4,5} T_{3,4} T_{2,3} T_{1,2} = \begin{pmatrix} t_{11} & t_{12} \\ t_{21} & t_{22} \end{pmatrix}.$$

Водночас, за визначенням: $\begin{bmatrix} A_5 \\ B_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} t_{11} & t_{12} \\ t_{21} & t_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \end{bmatrix}$, або, враховуючи (1.8):

$$\begin{bmatrix} t \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} t_{11} & t_{12} \\ t_{21} & t_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ r \end{bmatrix}.$$

Звідси знайдемо t :

$$t = t_{11} - t_{12} \frac{t_{21}}{t_{22}}, \quad (1.10)$$

а значить і D згідно (1.9).

1.6. Сумарний струм, що проходить через РТД

Для знаходження струму, що проходить через РТД, будемо розглядати суму струмів електронів, які впадають в ДБКС (рис. 1.6) – з лівого резервуара (емітера)

j_{LR} , і струму електронів, що впадають в ДБКС – з правого резервуара (колектора) j_{RL} . Ці струми поділені за принципом належності його носіїв до певного ансамблю – ансамблів колектора або емітера, які при наявності прикладеної напруги, очевидно, відрізняються. Без такого поділу виявляється неможливим провести інтегрування по швидкостям, оскільки розподіл останніх по ансамблям різний.

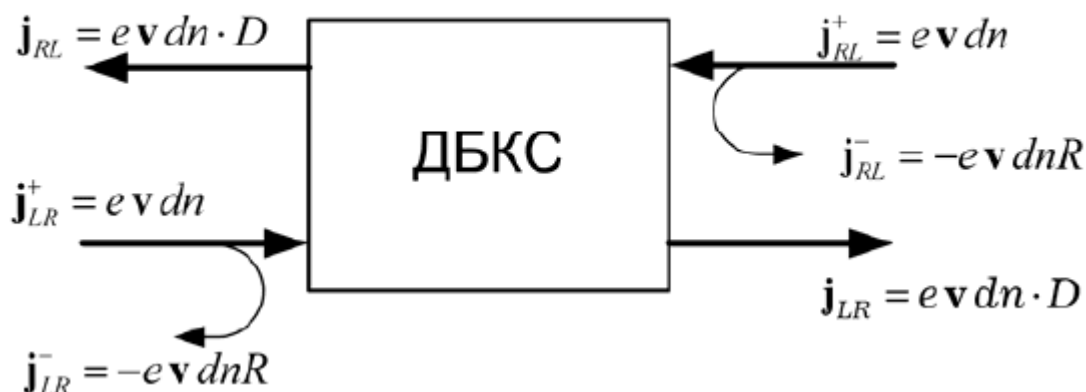


Рисунок 1.6 – Струми РТД

Струм, що його створює один електрон зі швидкістю v , дорівнює ev . Струм, що його створюють електрони, які мають швидкості в межах від v до $v+dv$ (або, що є аналогічним, електрони, значення хвильового вектора яких лежать в межах від k до $(k+dk)$), дорівнює:

$$dj = evdn = e \frac{\hbar k}{m^*} dn, \quad (1.11)$$

де dn - концентрація електронів, що мають швидкості у вищезазначених межах.

В точці, що лежить на границі між правим бар'єром та резервуаром (точка $x = c$ на рис. 1.5) концентрація електронів визначається як dn помножена на D , тому що тільки $dn \cdot D$ електронів досягає правого резервуара.

Для того, щоб знайти сумарний струм, що його створюють всі електрони ансамблю, який існує в точці c , відмітимо, що концентрація електронів в елементарному об'ємі хвильових чисел дорівнює:

$$dn = g(k)f(k)d^3k,$$

де через d^3k символічно позначено елементарний об'єм k -простору; $g(k), f(k)$ – відповідно густина станів та функція розподілу електронів в k -просторі.

Інтегруючи (1.11), одержимо:

$$\begin{aligned} j_{LR} &= \frac{e\hbar}{m^*} \frac{2}{(2\pi)^3} \iiint \frac{(k_x \mathbf{e}_x + k_y \mathbf{e}_y + k_z \mathbf{e}_z) D(k_x) dk_x dk_y dk_z}{\frac{\hbar^2}{2m^*}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) - (E_\phi - eV)} = \\ &= \frac{e\hbar}{m^*} \frac{2}{(2\pi)^3} \int D(k_x) dk_x \int \frac{k_r dk_r}{\frac{\hbar^2}{2m^*}(k_x^2 + k_r^2) - (E_\phi - eV)} \times \\ &\times \int_0^{2\pi} dk_\phi (k_x \mathbf{e}_x + k_r \cos k_\phi \mathbf{e}_y + k_r \sin k_\phi \mathbf{e}_z) dk_x dk_r dk_\phi = \\ &= \frac{e\hbar}{m^*} \frac{2}{(2\pi)^3} \int k_x dk_x D(k_x) \int_0^\infty \frac{e_x dk_r^2}{\frac{\hbar^2}{2m^*}(k_x^2 + k_r^2) - (E_\phi - eV)} = \\ &= \left| \begin{array}{l} u = \frac{\frac{\hbar^2}{2m^*}(k_x^2 + k_r^2) - (E_\phi - eV)}{k_B T} \\ du = \frac{\hbar^2}{2m^* k_B T} dk_r^2 \end{array} \right| = \\ &= e_x \frac{e\hbar}{m^*} \frac{2}{(2\pi)^3} \frac{2m^* k_B T}{\hbar^2} \int k_x dk_x D(k_x) \ln \left(\frac{1}{e^{-u} + 1} \right) \Bigg|_{\frac{E_x - (E_\phi - eV)}{k_B T}}^\infty = \\ &= e_x \frac{e\hbar}{m^*} \frac{2}{(2\pi)^3} \frac{2m^* k_B T}{\hbar^2} \int k_x dk_x D(k_x) \ln \left(e^{\frac{E_x - (E_\phi - eV)}{k_B T}} + 1 \right) = \\ &= -e_x \frac{4\pi e k_B m^* T}{h^3} \int dE_x D(k_x) \ln \left(e^{\frac{E_x - E_\phi + eV}{k_B T}} + 1 \right). \end{aligned}$$

Тут k_B – стала Больцмана, T – абсолютна температура кристалічної решітки.

Аналогічно дії здійснимо для знаходження j_{RL} , що створюється ансамблем електронів правого резервуару (колектора):

$$j_{RL} = -\frac{e\hbar}{m^*} \frac{2}{(2\pi)^3} \iiint \frac{(k_x e_x + k_y e_y + k_z e_z) D(k_x) dk_x dk_y dk_z}{\frac{\hbar^2}{2m^*}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) - (E_\phi - eV)} =$$

$$= e_x \frac{4\pi e k_B m^* T}{h^3} \int dE_x D(k_x) \ln \left(e^{\frac{E_x - E_\phi}{k_B T}} + 1 \right).$$

Сумарний струм через РТД:

$$j = j_{RL} + j_{LR} = e_x \frac{4\pi e k_B m^* T}{h^3} \int D(k_x) dE_x \ln \left(\frac{e^{\frac{E_x - E_\phi}{k_B T}} + 1}{e^{\frac{E_x - E_\phi + eV}{k_B T}} + 1} \right). \quad (1.12)$$

Інтегрування проводиться від нульової енергії до нескінченності, але в реальних випадках краще за верхню межу взяти рівень «вакууму» для електронів, що матиме дуже незначний вплив на точність обчислення інтегралу.

2. МОДЕЛЮВАННЯ ВАРИЗОННОГО РТД: МЕТОД ФУНКЦІЙ ЕЙРІ

2.1. Варизонна структура РТД

При розгляді різних структур РТД, слід звернути увагу на РТД, в якому потенціальна яма створюється за рахунок лінійної варизонності напівпровідника, що складає активну область пристрою. Таку структуру можна отримати за рахунок зміни молярної долі x_m алюмінію у сполуках $\text{Al}_{x_m}\text{Ga}_{1-x_m}\text{As}$, що утворюють тонкі шари активної області РТД. На практиці, такі шари отримують при використанні методів молекулярно-пучкової епітаксії або хімічного осадження з газової фази.

У даній моделі РТД, потенціальна яма створюється за рахунок лінійної варизонності напівпровідника, що складає активну область пристрою. Молярна частка x_m алюмінію в сполуці $\text{Al}_{x_m}\text{Ga}_{1-x_m}\text{As}$ лінійно зменшується від границь між резервуарами та активною областю до центру активної області. Це приводить, у свою чергу, до лінійної зміни ширини забороненої зони по емпіричному закону

$$\Delta E_{33}(x_m(x)) = (1.42 + 1.247x_m(x)) \text{ [eV] [9].}$$

Зміна ширини забороненої зони визначає зміну положення дна зони провідності згідно емпіричної формули

$$\Delta E_{3II}(x) = 0.62(\Delta E_{33}(x) - \Delta E_{33\text{GaAs}}),$$

де ΔE_{33} - ширина забороненої зони AlGaAs ;

$\Delta E_{33\text{GaAs}}$ - ширина забороненої зони GaAs [9].

Таким чином, лінійна зміна молярної долі $x_m(x)$ у напрямку електронного транспорту призводить до лінійної зміни потенційного рельєфу зони провідності.

2.2. Підхід до знаходження коефіцієнта прозорості ДБКС методом функцій Ейрі

Рівняння Шредінгера в наближенні ефективної маси на i -й ділянці РГД може бути записано у вигляді:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m^*}{\hbar^2}(E + U(x) - eV(x))\psi(x) = 0, \quad (2.1)$$

де $\psi(x)$ – хвильова функція електрона;

m^* - його ефективна маса;

\hbar – постійна Планка-Дірака;

$U(x)$ – потенціальний рельєф зони провідності при нульовій прикладеній напрузі;

e – заряд електрона;

$V(x)$ – різниця потенціалів між лівим краєм активної області пристрою та точкою x .

Якщо сила, яка діє на електрон, дорівнює нулю, що виконується на першій і останній ділянках (рис. 2.1) структури (резервуарах), то рішенням рівняння Шредінгера на цих ділянках є комбінація плоских хвиль, що відповідають падаючим і відбитим хвилям. При знаходженні коефіцієнта прозорості структури природно пронормувати $\psi(x)$ так, щоб у лівому резервуарі коефіцієнт при падаючій плоскій хвилі дорівнював одиниці, а також припустити відсутність відбитої хвилі в правому резервуарі. Тоді, якщо визначити коефіцієнт при відбитій хвилі в лівому резервуарі через r , а коефіцієнт при падаючій хвилі в

правому резервуарі через t , то квадрати модулів цих величин будуть мати сенс відповідно коефіцієнтів відбиття і пропускання активної області РТД.

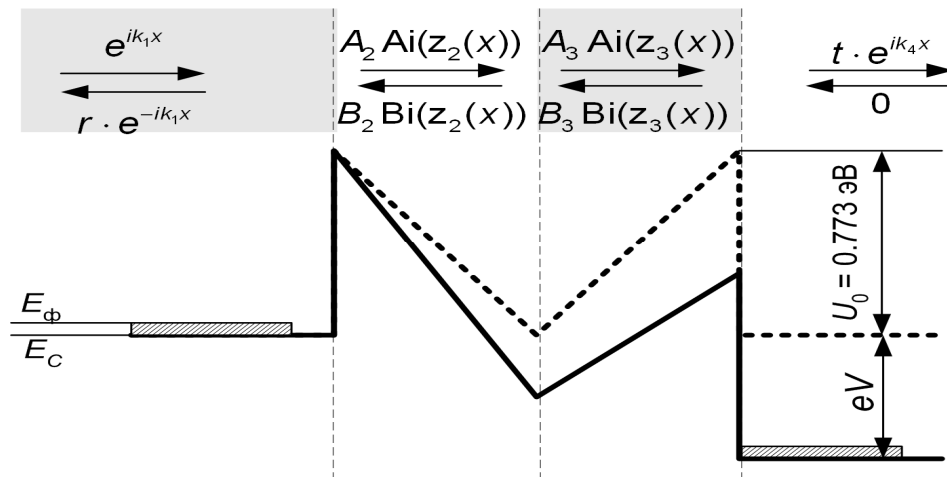


Рисунок 2.1 – Варизонна структура РТД

При ненульовій складовій $U(x) - eV(x)$ в (2.1), що спостерігається у активній області РТД, рішенням рівняння Шредінгера буде лінійна комбінація функції Ейрі $Ai(\xi)$ та компліментарної функції Ейрі $Bi(\xi)$ [14]. Це пояснюється тим, що вказаний доданок є лінійною функцією від координати. Аргументом функцій Ейрі буде безрозмірна величина

$$\xi(x) = \frac{2m^*}{\hbar^2} (E + U(x) - eV(x)).$$

Знаходження коефіцієнта прозорості активної області проводиться з використанням матриць передачі. Вони, як завжди, є однією з форм запису загальних вимог до хвильової функції, що пред'являються до неї на межах i -ї і $i+1$ -ї ділянок:

$$\begin{aligned} \psi_i(x_{i,i+1}) &= \psi_{i+1}(x_{i,i+1}) \text{ – неперервність хвильової функції,} \\ \frac{1}{m_i^*} \frac{d\psi_i(x_{i,i+1})}{dx} &= \frac{1}{m_{i+1}^*} \frac{d\psi_{i+1}(x_{i,i+1})}{dx} \text{ – неперервність першої похідної.} \end{aligned}$$

Тут через $x_{i,i+1}$ позначені координати кордону між ділянками i та $i+1$.

Для структури, яка, наприклад, поділяється на 4 ділянки (рис. 1.7), матриці передачі будуть такими:

$$\begin{bmatrix} Ai(\xi_2(x)) & Bi(\xi_2(x)) \\ \frac{1}{m_2^*} Ai'(\xi_2(x)) & \frac{1}{m_2^*} Bi'(\xi_2(x)) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_2 \\ B_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{ik_1x} & e^{-ik_1x} \\ \frac{k_1}{m_1^*} e^{ik_1x} & -\frac{k_1}{m_1^*} e^{-ik_1x} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \end{bmatrix}.$$

Помножимо обидві частини на $\begin{bmatrix} Ai(\xi_2(x)) & Bi(\xi_2(x)) \\ \frac{1}{m_2^*} Ai'(\xi_2(x)) & \frac{1}{m_2^*} Bi'(\xi_2(x)) \end{bmatrix}^{-1}$ зліва.

Одержимо:

$$\begin{bmatrix} A_2 \\ B_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Ai(\xi_2(x)) & Bi(\xi_2(x)) \\ \frac{1}{m_2^*} Ai'(\xi_2(x)) & \frac{1}{m_2^*} Bi'(\xi_2(x)) \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} e^{ik_1x} & e^{-ik_1x} \\ \frac{k_1}{m_1^*} e^{ik_1x} & -\frac{k_1}{m_1^*} e^{-ik_1x} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \end{bmatrix} \equiv T_{1,2} \begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \end{bmatrix}.$$

де через ξ_2 позначено значення відповідної функції в точці $x_{1,2}$ - границі між 1-ю та 2-ю ділянками. Ai' і Bi' означає диференціювання по ξ_2 .

Аналогічно знаходимо матриці передачі $T_{2,3}$ та $T_{3,4}$:

$$\begin{bmatrix} Ai(\xi_3(x)) & Bi(\xi_3(x)) \\ \frac{1}{m_3^*} Ai'(\xi_3(x)) & \frac{1}{m_3^*} Bi'(\xi_3(x)) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_3 \\ B_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Ai(\xi_2(x)) & Bi(\xi_2(x)) \\ \frac{1}{m_2^*} Ai'(\xi_2(x)) & \frac{1}{m_2^*} Bi'(\xi_2(x)) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_2 \\ B_2 \end{bmatrix},$$

тоді,

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} A_3 \\ B_3 \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} Ai(\xi_3(x)) & Bi(\xi_3(x)) \\ \frac{1}{m_3^*} Ai'(\xi_3(x)) & \frac{1}{m_3^*} Bi'(\xi_3(x)) \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} Ai(\xi_2(x)) & Bi(\xi_2(x)) \\ \frac{1}{m_2^*} Ai'(\xi_2(x)) & \frac{1}{m_2^*} Bi'(\xi_2(x)) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_2 \\ B_2 \end{bmatrix} \equiv \\ &\equiv T_{2,3} \begin{bmatrix} A_2 \\ B_2 \end{bmatrix} \equiv T_{2,3} \cdot T_{1,2} \begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \end{bmatrix}, \end{aligned}$$

$$\begin{bmatrix} e^{ik_4x} & e^{-ik_4x} \\ \frac{k_4}{m_4^*} e^{ik_4x} & -\frac{k_4}{m_4^*} e^{-ik_4x} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_4 \\ B_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Ai(\xi_3(x)) & Bi(\xi_3(x)) \\ \frac{1}{m_3^*} Ai'(\xi_3(x)) & \frac{1}{m_3^*} Bi'(\xi_3(x)) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_3 \\ B_3 \end{bmatrix},$$

тоді,

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} A_4 \\ B_4 \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} e^{ik_4x} & e^{-ik_4x} \\ \frac{k_4}{m_4^*} e^{ik_4x} & -\frac{k_4}{m_4^*} e^{-ik_4x} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} Ai(\xi_3(x)) & Bi(\xi_3(x)) \\ \frac{1}{m_3^*} Ai'(\xi_3(x)) & \frac{1}{m_3^*} Bi'(\xi_3(x)) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_3 \\ B_3 \end{bmatrix} \equiv \\ &\equiv T_{3,4} \begin{bmatrix} A_3 \\ B_3 \end{bmatrix} \equiv T_{3,4} \cdot T_{2,3} \cdot T_{1,2} \begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Узагальнюючи отримані результати та враховуючи нормування $\psi(x)$, отримаємо:

$$\begin{bmatrix} 1 \\ r \end{bmatrix} = M \cdot \begin{bmatrix} t \\ 0 \end{bmatrix},$$

де $M = \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{bmatrix} = T_{3,4} \cdot T_{2,3} \cdot T_{1,2}$ - результуюча матриця передачі активної

області РТД. Тоді, знаючи її, легко отримати коефіцієнт прозорості:

$$D \equiv t^* t,$$

де

$$t = M_{11} - M_{12} M_{21} / M_{22}.$$

2.3. Припущення, покладені в основу моделі

В основу моделі покладено наступні припущення:

а) в переносі заряду беруть участь лише електрони провідності. Енергія електрона провідності в полі кристалічної решітки відраховується від огинаючої функції потенціалу кристалічної решітки (від дна зони провідності). Наявність періодичного поля кристалічної решітки враховується через введення ефективної маси. Ефективна маса електрона $m^* = 0.067 \cdot m_0$, де m_0 - маса покою електрона, однакова і не залежить від просторової координати;

б) повністю ігноруються ефекти, зумовлені просторовим зарядом в ДБКС.

Перерозподіл електронів у квантовій ямі приводить до нерівномірного падіння напруги, тому рішенням рівняння Шредінгера вже не буде суперпозиція функцій Ейрі. Однак, при відносно невеликих концентраціях електронів у квантовій ямі цим ефектом можна знехтувати. Тому, активна область пристрою не легована ($N_D = 0$), а так звані резервуари (пасивна частина РТД) дуже леговані ($N_D = 10^{23} \text{ м}^{-3}$);

в) ігнорується розсіювання. Розсіювання призводить до переходів електрона у самій ямі між енергетичними рівнями або в середині даного метастабільного рівня. Це явище змінює сам характер руху носіїв з когерентного (з збереженням детермінованого відношення між фазами на вході та на виході) на послідовне (фаза електрона за час проходження повністю хаотизується) тунелювання, що призводить до того, що матриці передачі вже не мають мультиплікативних властивостей;

г) вплив, що його здійснює ДБКС на електрони під час їх прольоту через неї, зводиться до наступного: електрон з енергією E має певну ймовірність пройти через ДБКС, $T(E)$, а також певну ймовірність від неї відбитись, $R(E) = 1 - T(E)$;

д) взаємодія між електронами відсутня. На форму потенціального бар'єру впливає лише прикладена напруга, і не впливає просторовий заряд електронів.

е) резервуари вважаються напівнескінченними. При нульовій прикладеній напрузі електрони в резервуарах підпорядковані статистиці Фермі-Дірака. При прикладанні напруги енергетична діаграма змінюється у відповідності з розподілом потенціалу по ДБКС, розподіл електронів в правому резервуарі зміщується по енергії на величину eV , де V – напруга, що прикладена до РТД, e – заряд електрона;

є) потенціальний рельєф зони провідності активної області РТД завжди лінійний, тобто рішенням рівняння Шредінгера у даній області є лінійна комбінація функції Ейрі $Ai(\xi)$ та компліментарної функції Ейрі $Bi(\xi)$. Водночас, потенціальний рельєф дна зони провідності так званих резервуарів є завжди

плоским, тобто рішенням рівняння Шредінгера є комбінація падаючої та відбитої «плоских» хвиль.

2.4. Побудова математичної моделі

В якості тестової модельної структури був обраний РТД, активна область якого і основні топологічні параметри схематично зображена на рис. 2.2. Активна область пристрою не легована ($N_D = 0$), а так звані резервуари (пасивна частина РТД) сильно легована домішками донорного типу ($N_D = 10^{23} \text{ м}^{-3}$). Ширина активної області тестової структури складає 12 нм, причому в її центрі молярна частка алюмінію в сполуці $\text{Al}_{x_m} \text{Ga}_{1-x_m} \text{As}$ $x_m = 0$, а на границях з резервуарами $x_m = 1$.

Припустимо, що до ДБКС прикладена певна напруга V так, як показано на рис. 2.2. Якщо вважати питомі провідності всіх сполук $\text{Al}_{x_m} \text{Ga}_{1-x_m} \text{As}$ однаковими і незалежним від x , напруга спадає рівномірно вздовж всієї системи. Будемо вважати, що в активній області рельєф дна зони провідності залишається лінійним. Напруга впливає лише на висоту бар'єрів та глибину ями, а також потенціал правого резервуару, але не на його форму. Падінням напруги на резервуарах можна знехтувати тому, що вони сильно леговані, а сама ДБКС нелегована (рис. 2.2).

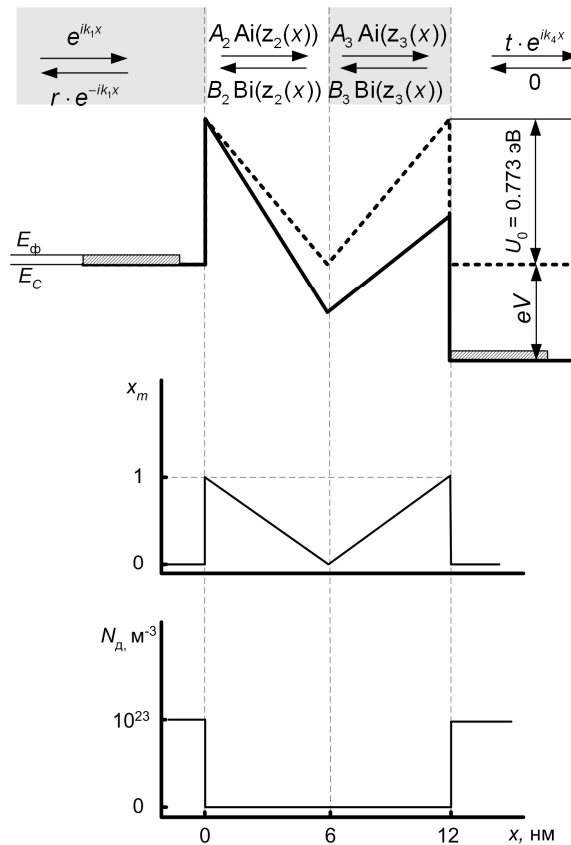


Рисунок 2.2 – Фізико-топологічна структура досліджуваного РТД

Якщо сила, яка діє на електрон, дорівнює нулю, що виконується на першій і останній ділянках (рис. 2.2) структури (резервуарах), то розв'язком рівняння Шредінгера на цих ділянках є комбінація плоских хвиль, що відповідають падаючим і відбитим хвилям. Якщо складова $U_0(x) \neq 0$, де $U_0(x) = U(x) + eV(x)$, в рівнянні Шредінгера (2.1), що спостерігається у активній області РТД, то введемо замість координати x безрозмірну величину

$$\xi(x) = \left(x + \frac{E}{F(x)}\right) \left(\frac{2m^* F(x)}{\hbar^2}\right)^{1/3},$$

де $F(x)$ – сила, що діє на електрон у однорідному полі.

Тоді, рівняння (2.1) прийме вигляд:

$$\psi'' + \xi\psi = 0.$$

Рішенням такого рівняння буде лінійна комбінація функції Ейрі $Ai(\xi)$ та компліментарної функції Ейрі $Bi(\xi)$.

Запишемо рішення рівняння (2.1) для кожної ділянки РТД:

$$\psi_I = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_2 x},$$

$$\psi_{II} = A_2 Ai(\xi_2(x)) + B_2 Bi(\xi_2(x)),$$

$$\psi_{III} = A_3 Ai(\xi_3(x)) + B_3 Bi(\xi_3(x)),$$

$$\psi_{IV} = A_4 e^{ik_4 x} + B_4 e^{-ik_4 x}.$$

$$\text{де } \xi_2(x) = - \left(x + \frac{U_0 - E}{\frac{eV}{2} + U_0} a \right) \left(\frac{2m^*}{a\hbar^2} \right)^{1/3} \left(\frac{eV}{2} + U_0 \right)^{1/3};$$

$$\xi_3(x) = - \left(x + \frac{U_0 + E}{\frac{eV}{2} - U_0} a \right) \left(\frac{2m^*}{a\hbar^2} \right)^{1/3} \left(\frac{eV}{2} - U_0 \right)^{1/3},$$

де U_0 - початкова висота бар'єрів;

a – координата границі між 2-ю і 3-ю ділянками.

Знаходження коефіцієнта прозорості активної області проводиться з використанням матриць передачі. Для отримання цих матриць використовують так звані граничні умови, тобто неперервність хвильової функції та неперервність її першої похідної.

В роботі було знайдено наступні вирази для матриць передачі $T_{1,2}$, $T_{2,3}$ та $T_{3,4}$, які ми пронумерували по ділянках, які вони зв'язують. Наприклад, матриця $T_{2,3}$ була приведена до наступного вигляду:

$$T_{2,3} = \pi \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{bmatrix},$$

$$\text{де } T_{11} = Ai(\xi_2)Bi(\xi_3) - \frac{\xi_2'}{\xi_3'} Bi(\xi_3)Ai'(\xi_2);$$

$$T_{12} = Bi(\xi_2)Bi'(\xi_3) - \frac{\xi_2'}{\xi_3'} Bi(\xi_3)Bi'(\xi_2);$$

$$T_{21} = \frac{\xi_2'}{\xi_3'} Ai(\xi_3) Ai'(\xi_2) - Ai(\xi_2) Ai'(\xi_3);$$

$$T_{21} = \frac{\xi_2'}{\xi_3'} Ai(\xi_3) Ai'(\xi_2) - Ai(\xi_2) Ai'(\xi_3).$$

Було отримано результуючу матрицю передачі активної області РТД

$$M = \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{bmatrix} = T_{3,4} \cdot T_{2,3} \cdot T_{1,2}$$

та, використовуючи її, був знайдений коефіцієнт прозорості ДБКС $D(E, V)$.

Густина струму, що протікає через РТД, розраховувався з використанням формули Тсу-Есакі [13]:

$$J(V) = \frac{4\pi e k_B m^* T}{h^3} \int D(E_x, V) dE_x \ln \left(\frac{e^{-\frac{E_x - E_\phi}{k_B T}} + 1}{e^{-\frac{E_x - E_\phi + eV}{k_B T}} + 1} \right) \cdot$$

Нижня границя інтегрування приймалася рівною нулю (дно зони провідності), а верхню границю можна брати не більше 1 еВ, так як її збільшення не впливає на точність обчислення інтегралу.

2.5. Алгоритм роботи

Блок-схема алгоритму роботи представлена на рис. 2.3.

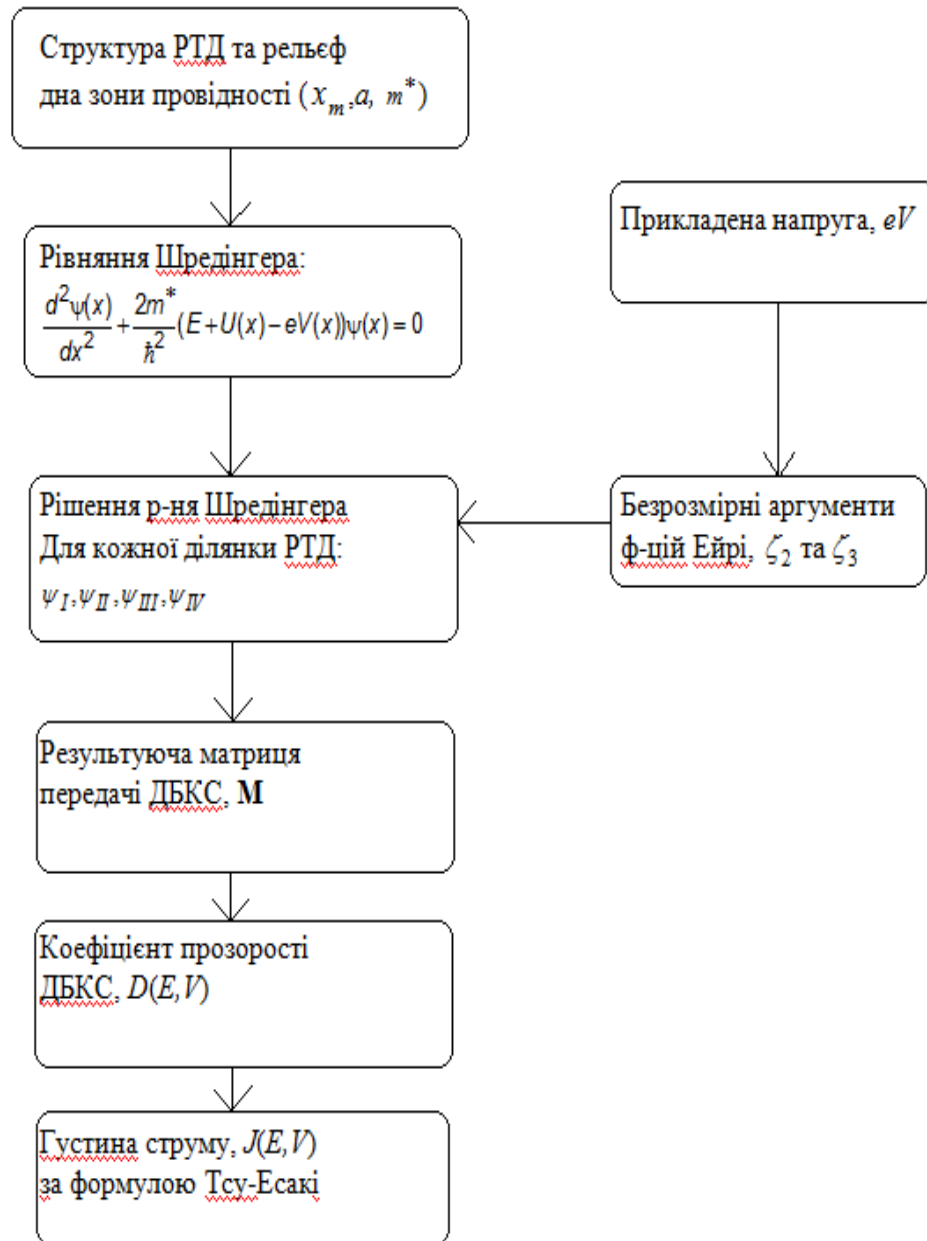


Рисунок 2.3 – Блок-схема алгоритму роботи

Якщо обчислення коефіцієнта прозорості при різних значеннях поперечної енергії електрона не викликає труднощів (метод функцій Ейрі для такого потенціального рельєфу дна зони провідності є стійким), то при обчислення

інтеграла у формулі Тсу-Есакі довелося використовувати чисельний метод, апроксимуючи інтеграл за допомогою квадратур Сімпсона з адаптивним кроком .

2.6. Результати моделювання

Результати моделювання коефіцієнта прозорості активної області РТД, а також його ВАХ наведені, відповідно, на рис. 2.4 і 2.5.

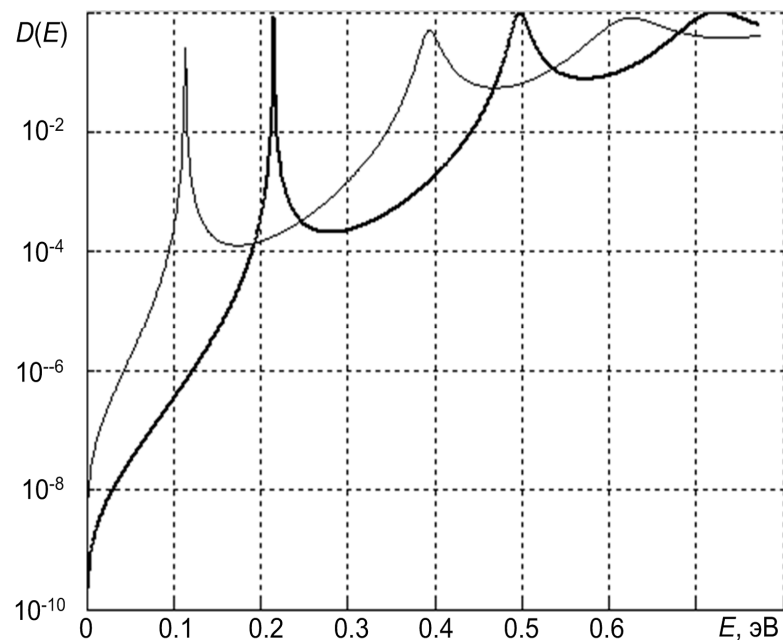


Рисунок 2.4 - Залежність коефіцієнта прозорості D від повздовжньої енергії електрона E для нульової (товста лінія) напруги, і напруги $V = 0.2$ В

З графіку видно, що зі збільшенням прикладеної напруги V , коефіцієнт прозорості збільшується, і електрони з меншими енергіями беруть участь у формуванні струму, що проходить через ДБКС.

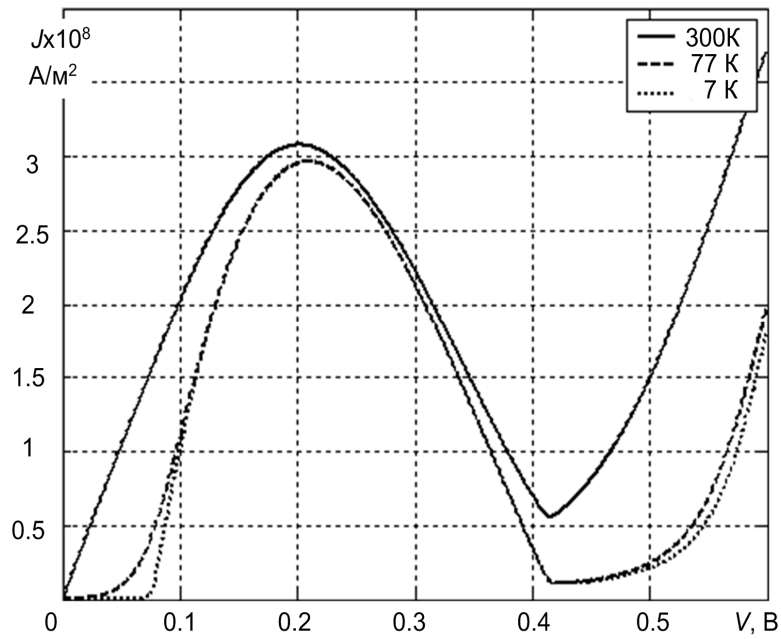


Рисунок 2.5 – ВАХ РТД для різних температур

З графіків видно, що зі зменшенням температури густина струму через ДБКС стає меншою. Також, спостерігається наявність негативної диференційної провідності, а також високі значення контрастності ВАХ, які досягають значення 6 і більше.

ВИСНОВКИ

У роботі розглянуто основні елементи моделей РТД, даються основні уявлення про електронний транспорт в ньому та визначення зонної структури. Також, наведено та проаналізовано основні методи отримання гетеро структур: молекулярно-променева епітаксія та хімічне осадження з газової фази. Недоліком метода МПЕ є його висока ціна, а перевагою - можливість створення унікальних наноструктур з дуже високою чистотою, однорідністю і малою кількістю дефектів. Хімічне осадження є кращим методом для створення пристроїв, що включають термодинамічні та метастабільні сплави.

Приведено загальний приклад побудови моделі РТД використовуючи метод «плоских» зон.

Запропонована топологія РТД, активна область якого виконана з варизонного напівпровідника. Були розраховані коефіцієнти прозорості такої структури та її ВАХ. Для розрахунків застосований метод функцій Ейрі. Функції Ейрі є точними рішенням рівняння Шредінгера для електрона в полі постійної напруги, тому для коефіцієнта прозорості вдалося знайти аналітичне вираження. Було показано наявність ділянок негативної диференційної провідності на ВАХ досліджуваного РТД. Знайдено залежності коефіцієнта прозорості активної області пристрою від прикладеної напруги та залежності ВАХ від температури. Можно зробити висновок, що чим більш розмитий спектр електронів по енергіям, тим менш чіткі піки на ВАХ можна спостерігати, і тим менша густина струму в них. Як наслідок, контрастність ВАХ зменшується рівно як і промислова придатність цих діодів.

Цінність даної роботи полягає в тому, що потреба в пристроях, що побудовані на квантових ефектах прямо слідує зі зменшення характерних розмірів електронних компонентів та погіршення їх характеристик при цьому. Подальше зменшення розмірів та збільшення частот електронних схем потребує принципово нових компонентів, яскравим представником яких є один з найбільш швидкодіючий електронних компонентів – резонансно-тунельний діод.

ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ

1. Compañó R., Molenkamp L., Paul D.J. Technology Roadmap for Nanoelectronics. Microelectronics Advanced Research Initiative MELARI NANO, 2000, 81 p. Режим доступа до ресурсу:
<ftp://ftp.cordis.lu/pub/esprit/docs/melnarm.pdf>.
2. Sun, J.P. Resonant tunneling diodes: models and properties / J. P. Sun // Proceedings of IEEE. – 1998. - Vol. 86. - P. 641-661.
3. Иогансен, Л. В. О возможности резонансного прохождения электронов в кристаллах через системы барьеров / Л. В. Иогансен // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 1963. - Т. 45, вып. 2. – С. 207-213.
4. Иогансен, Л. В. Тонкопленочные электронные интерферометры / Л. В. Иогансен // Журнал экспериментальной и теоретической физики. -1965. - Т. 86, вып. 1. – С. 175-179.
5. Esaki, L., Tsu, R. Superlattice and negative differential conductivity in semiconductors / L. Esaki, R. Tsu // IBM Journal of Research and Development. – 1970. - Vol. 14, № 1. - P. 61-65.
6. Алферов, Ж.И. Наноматериалы и нанотехнологии / Ж.И. Алферов // Микросистемная техника. - 2003. - N 8. - С.3-13.
7. Figueiredo, M. L., Ironside, C. N., Stanley, C. R. Ultralow voltage resonant tunnelling diode electroabsorption modulator / M. L. Figueiredo, C. N. Ironside, C. R. Stanley // Journal of Modern Optics. – 2002. – Vol. 49. - P. 939–945.
8. Обухов И. А. Моделирование переноса заряда в мезоскопических структурах. / И. А Обухов - Севастополь: «Вебер», 2005. - 226 с.
9. Brenan, K.F., Brown, A.S. Theory of modern electronic semiconductor devices. / K.F. Brenan, A.S. Brown–New York: J. Wiley & Sons, 2002. – 448 p.

10. Молекулярно-пучковая эпитаксия – Википедия Свободная энциклопедия Режим доступа до ресурсу: http://ru.wikipedia.org/wiki/Молекулярно-пучковая_эпитаксия.
11. Landau, L.D., Lifshits, E.M. Theoretical physics. Vol. 3. Quantum mechanics. Nonrelativistic theory. Moscow: Nauka, 1989. (in Russian).
12. Weil, T., Vinter, B. “Equivalence between resonant tunneling and sequential tunneling in double-barrier diodes” / T. Weil, B. Vinter // Appl. Phys. Letters - vol. 50, pp. 1281– 1283, 1987.
13. Tsu, R. Superlattice to nanoelectronics. / R. Tsu – London: Elsevier, 2005. – 325 p.
14. Vallee, O., Soares, M. Airy functions and application to physics. / O. Vallee, M. Soares – London: Imperial College Press, 2004. – 194 p.

Додаток А

Лістинг програми для моделювання залежності коефіцієнта прозорості від
прикладеної напруги

```
clear all;

clc;
i=sqrt(-1)
qe=1.6e-19; %заряд електрона
%kb=(1.38e-23)/qe; %постоянная Больцмана
h=(6.626e-34)/qe; %постоянная Планка
h_per=h/(2*3.14); %постоянная Планка-Дирака
m0=9.11e-31; %масса покоя електрона
m=0.067*m0; %эффек.масса електрона

a=6e-9; %м

%-----
ck1=sqrt(2*m*qe)/h_per
cz2=(2*m*qe/(h_per*h_per))^(1/3)*a^(2/3)
cz2s=(2*m*qe/(h_per*h_per*a))^(1/3)

%-----
U0=-1*1.247*0.62; %эВ
V=0;
E=0; % эВ
q=1;

while q < 1001
%-----
E(q)=-U0/1001*q;
%x1=0;

z2=-cz2*(E(q)+U0)/((-U0-V/2)^(2/3));
z2_shtrih=-cz2s*(-(U0+V/2))^(1/3);
k1=ck1*sqrt(E(q));
ca1=k1/z2_shtrih;

A0=AIRY(0,z2);
A1=AIRY(1,z2);
A2=AIRY(2,z2);
A3=AIRY(3,z2);
```



```
M1=pi*[A3-i*ca1*A2 A3+i*ca1*A2; -A1+i*ca1*A0 -A1-i*ca1*A0];
```

```
x2=a;
```

```
z2=-((1-(E(q)+U0)/(U0+V/2))*(-(U0+V/2))^(1/3))*cz2;
```

```
z3_shtrih=-cz2s*(U0-V/2)^(1/3);
```

```
z3=-cz2*(1+(E(q)-U0)/(U0-V/2))*(U0-V/2)^(1/3);
```

```
ca2=z2_shtrih/z3_shtrih;
```

```
A0=AIRY(0,z2);
```

```
A1=AIRY(1,z2);
```

```
A2=AIRY(2,z2);
```

```
A3=AIRY(3,z2);
```

```
A0_=AIRY(0,z3);
```

```
A1_=AIRY(1,z3);
```

```
A2_=AIRY(2,z3);
```

```
A3_=AIRY(3,z3);
```

```
M2=pi*[A3_*A0-ca2*A2_*A1, A3_*A2-ca2*A2_*A3; -A1_*A0+ca2*A0_*A1, -
A1_*A2+ca2*A0_*A3];
```

```
x3=2*a;
```

```
k2=ck1*sqrt((E(q)-V));
```

```
z3=-cz2*(2+(E(q)-U0)/(U0-V/2))*(U0-V/2)^(1/3);
```

```
ca3=z3_shtrih/(i*k2)
```

```
em=exp(-i*k2*x3);
```

```
ep=exp(i*k2*x3);
```

```
A0=AIRY(0,z3);
```

```
A1=AIRY(1,z3);
```

```
A2=AIRY(2,z3);
```

```
A3=AIRY(3,z3);
```

```
M3=-1/2*[-em*A0-ca3*em*A1 -em*A2-ca3*em*A3; -ep*A0+ca3*ep*A1 -ep*A2+ca3*ep*A3];
```

```
M=M3*M2*M1; %матрица передачи ДБКС
```

```
T=M(1,1)-M(1,2)*M(2,1)/M(2,2);
```

```
%D(q)=abs(T)^2;
```

```
D(q)=(abs(T))*(abs(T));
```

```
q=1+q;
```

```
end
```

```
hold on;
```

```
plot(E,D);
```

```
title('D(E,V=0)');
```

```
xlabel('E, eV');
```

```
ylabel('D(E,V)');
```

```
grid on;
```

```
V=-0.2;
```

```
E=0; % эВ
```

```
q=1;
```

```

while q < 1001
%
E(q)=-U0/1001*q;
%x1=0;

z2=-cz2*(E(q)+U0)/((-U0-V/2)^(2/3));
z2_shtrih=-cz2s*(-(U0+V/2))^(1/3);
k1=ck1*sqrt(E(q));
ca1=k1/z2_shtrih;

A0=AIRY(0,z2);
A1=AIRY(1,z2);
A2=AIRY(2,z2);
A3=AIRY(3,z2);

M1=pi*[A3-i*ca1*A2 A3+i*ca1*A2; -A1+i*ca1*A0 -A1-i*ca1*A0];

x2=a;
z2=-(1-(E(q)+U0)/(U0+V/2))*(-(U0+V/2))^(1/3)*cz2;
z3_shtrih=-cz2s*(U0-V/2)^(1/3);
z3=-cz2*(1+(E(q)-U0)/(U0-V/2))*(U0-V/2)^(1/3);
ca2=z2_shtrih/z3_shtrih;
A0=AIRY(0,z2);
A1=AIRY(1,z2);
A2=AIRY(2,z2);
A3=AIRY(3,z2);
A0_=AIRY(0,z3);
A1_=AIRY(1,z3);
A2_=AIRY(2,z3);
A3_=AIRY(3,z3);

M2=pi*[A3_*A0-ca2*A2_*A1, A3_*A2-ca2*A2_*A3; -A1_*A0+ca2*A0_*A1, -
A1_*A2+ca2*A0_*A3];

x3=2*a;
k2=ck1*sqrt((E(q)-V));
z3=-cz2*(2+(E(q)-U0)/(U0-V/2))*(U0-V/2)^(1/3);

ca3=z3_shtrih/(i*k2)
em=exp(-i*k2*x3);
ep=exp(i*k2*x3);
A0=AIRY(0,z3);
A1=AIRY(1,z3);
A2=AIRY(2,z3);
A3=AIRY(3,z3);
M3=-1/2*[-em*A0-ca3*em*A1 -em*A2-ca3*em*A3; -ep*A0+ca3*ep*A1 -ep*A2+ca3*ep*A3];

M=M3*M2*M1; %матрица передачи ДБКС

T=M(1,1)-M(1,2)*M(2,1)/M(2,2);

```

```
%D(q)=abs(T)^2;  
D(q)=(abs(T))*(abs(T));
```

```
q=1+q;  
end
```

```
plot(E,D);  
title('D(E,V=0)');  
xlabel('E, eV');  
ylabel('D(E,V)');  
grid on;
```

Додаток Б

Лістинг програми для моделювання ВАХ та їх температурних залежностей

```

clear all;
%close all;
clc;
%A_vih=4.07;% работа выхода, эВ
%T=7;% температура кристаллической решетки, К
%Nd=1e24; %концентрация доноров, 1/куб.м.
qe=1.6e-19;
%пределы интегрирования - от нулевой энергии до работы выхода
V=0;
j=1;
while V<0.6

I1=quad(@fun_Airy,0,1,1e21, 10^3,V,300);

VV(j)=V;
II1(j)=I1;
V=V+0.001;

j=j+1

end

V=0;
j=1;
while V<0.6

I2=quad(@fun_Airy,0,1,1e21, 10^3,V,77);

VV(j)=V;
II2(j)=I2;
V=V+0.001;

j=j+1

end

V=0;
j=1;

```

```

while V<0.6

I3=quad(@fun_Airy,0,1,1e21, 10^3,V,7);

VV(j)=V;
II3(j)=I3;
V=V+0.001;

j=j+1

end

plot(VV,II1*qe, VV, II2*qe, VV, II3*qe)

function fun_Airy=fun_Airy(E,V,T);

    Nd=1e23;
    %T=300;
%clear all;
%clc;
i=sqrt(-1);
qe=1.6e-19; %заряд электрона, Кл
%kb=(1.38e-23)/qe; %постоянная Больцмана, эВ/К
h=(6.626e-34);%%/qe; %постоянная Планка, эВ*с
h_per=h/(2*3.14); %постоянная Планка-Дирака, эВ*с
m0=9.11e-31; %масса покоя электрона
kb=1.38e-23;%постоянная Больцмана, Дж/К
m=0.067*m0; %эффек.масса электрона
m_GaAs=0.067*m;%эффективная масса электрона в GaAs
a=6e-9; %м
U0=-1*1.247*0.62; %эВ
Ef=0.177;%(h*h/2/m)*(3/8/pi)^(2/3)*Nd^(2/3)/qe;%eV
%-----
ck1=sqrt(2*m*qe)/h_per;
cz2=(2*m*qe/(h_per*h_per))^(1/3)*a^(2/3);
cz2s=(2*m*qe/(h_per*h_per*a))^(1/3);
%-----

dim=size(E);
dimm=dim(2);
j=1;
V=-V;
while j<dimm+1
%x1=0;

z2=-cz2*(E(j)+U0)/((-U0-V/2)^(2/3));
z2_shtrih=-cz2s*(-(U0+V/2))^(1/3);
    k1=ck1*sqrt(E(j));
    ca1=k1/z2_shtrih;

    A0=AIRY(0,z2);

```

```
A1=AIry(1,z2);
A2=AIry(2,z2);
A3=AIry(3,z2);
```

```
M1=pi*[A3-i*ca1*A2 A3+i*ca1*A2; -A1+i*ca1*A0 -A1-i*ca1*A0];
```

```
x2=a;
z2=-(1-(E(j)+U0)/(U0+V/2))*(-(U0+V/2))^(1/3)*cz2;
z3_shtrih=-cz2s*(U0-V/2)^(1/3);
z3=-cz2*(1+(E(j)-U0)/(U0-V/2))*(U0-V/2)^(1/3);
ca2=z2_shtrih/z3_shtrih;
A0=AIry(0,z2);
A1=AIry(1,z2);
A2=AIry(2,z2);
A3=AIry(3,z2);
A0_=AIry(0,z3);
A1_=AIry(1,z3);
A2_=AIry(2,z3);
A3_=AIry(3,z3);
```

```
M2=pi*[A3_*A0-ca2*A2_*A1, A3_*A2-ca2*A2_*A3; -A1_*A0+ca2*A0_*A1, -
A1_*A2+ca2*A0_*A3];
```

```
x3=2*a;
k2=ck1*sqrt((E(j)-V));
z3=-cz2*(2+(E(j)-U0)/(U0-V/2))*(U0-V/2)^(1/3);
```

```
ca3=z3_shtrih/(i*k2);
em=exp(-i*k2*x3);
ep=exp(i*k2*x3);
A0=AIry(0,z3);
A1=AIry(1,z3);
A2=AIry(2,z3);
A3=AIry(3,z3);
```

```
M3=-1/2*[-em*A0-ca3*em*A1 -em*A2-ca3*em*A3; -ep*A0+ca3*ep*A1 -ep*A2+ca3*ep*A3];
```

```
M=M3*M2*M1; %матрица передачи ДБКС
```

```
TT=M(1,1)-M(1,2)*M(2,1)/M(2,2);
```

```
D(j)=(abs(TT))*(abs(TT));
```

```
%D(q)=abs(T)^2;
```

```
j=j+1;
```

```
end;
```

```
V=-V;
```

```
E;
```

```
%Ec=1.45*1.6e-19;
```

```
A=4*pi*qe*m*kb*T./(h*h*h); % part staying in front of equation
```

```
q_nakt=qe/(kb*T);% 150.5741;
```

```
exp1=exp((Ef-E).*q_nakt); %numarator
```

```
exp2=exp((Ef-V-E).*q_nakt);%denominator
```

```
LOGARIFM=log( (1+exp1)./(1+exp2) );
```

```
fun_Airy=A.*D.*LOGARIFM;
```

```
%q=1+q;  
%end
```