

4. РОЗРОБКА МАТЕМАТИЧНИХ МОДЕЛЕЙ РЕЗОНАНСНО-ТУНЕЛЬНОГО ДІОДУ

4.1. Сучасний стан проблеми моделювання резонансно-тунельних діодів

При побудові моделей РТД на сьогоднішній день застосовуються наступні загальні квантово-механічні формалізми [4.1]:

- хвильових функцій;
- матриці густини ймовірності;
- функцій розподілу Вігнера та Гріна;
- фейнманівських інтегралів по траєкторіям та ін.

При побудові спрощених моделей в якості вихідного використовується, як правило, формалізм хвильових функцій [4.2 – 4.4]. Розробка більш адекватних, а тому і більш складних числових моделей проводиться в рамках формалізмів хвильових функцій [4.5 – 4.8], функцій розподілу Вігнера [4.9 – 4.14] та функцій Гріна [4.15 – 4.18].

Автори [4.18] зазначають, що для адекватного моделювання РТД необхідно, щоб моделі включали два найбільш важливих аспекти:

- адекватні параметри зонної структури даного РТД, що побудований з різних матеріалів та параметри їх поверхонь. Наприклад, мають бути достатньо точно задані розриви зон на гетерограницях, ефективна маса носіїв заряду, а також інші параметри матеріалу;

- формалізм, необхідний для того, щоб описати найважливіші процеси в РТД. Оскільки спрощення, апроксимації та числова дискретизація завжди використовуються в найрізноманітніших моделях, вони не повинні порушувати базові фізичні закони та принципи квантової механіки при їх застосуванні. Однак, як відмічається в [4.18], часто саме вони призводять до реальної втрати тих принципів, які несуть з собою розв'язувані рівняння.

Загальні елементи моделей квантових пристроїв наведено на рис. 4.1.



Рисунок 4.1 - Елементи моделювання квантових пристроїв

З точки зору принципу функціонування, РТД як пристрій наноелектроніки є відкритою квантовою системою, в якій має місце тривимірний електронний транспорт що залежить від часу, незворотний у часі, дисипативний, зі взаємодією між багатьма частинками. В РТД присутній обмін енергією та частинками з навколишнім середовищем. Тому квантова система яку ми називаємо РТД, є далекою від простої ізольованої системи, для якої можна легко сформулювати сталий Гамільтоніан та граничні умови для рівняння Шредингера. З іншого боку, позаяк повний багаточастковий формалізм, що був би чисельно реалізований для такої системи, знаходиться далеко від свого задовільного вигляду, і може бути непотрібним для опису суттєвих властивостей пристрою, звичайно при моделюванні використовуються спрощення та апроксимації для того, щоб спростити обчислення і при цьому забезпечити адекватне моделювання головних процесів транспорту. Такі моделі зіграли визначну роль для оцінки квантових ефектів в РТД, а також для

розробки нових РТД на основі промодельованих структур. В поняттях опису електронних станів і здатності коректного опису взаємодії електронів з їх оточенням, існуючі моделі РТД можна поділити на дві категорії: *когерентні* та *кінетичні*.

Відповідно до квантової механіки, електрон може бути описаний своїм квантовим станом. Чистий стан електрона в загальному випадку представляється хвильовою функцією електрона і може бути описаний її амплітудою, імпульсом (хвильовим вектором), енергією та фазою; зміна стану підпорядковується незалежному від часу рівнянню Шредингера. Однак, взаємодія між електроном і оптичним фоном (як приклад) може зірвати когерентність фази електрона і призвести до кореляції з іншими мікрочастинками. В такому випадку ми говоримо про взаємодіючі частинки та про змішані електронні стани. Це відбувається тому, що взаємодіючі частинки не мають фазового співвідношення з падаючою електронною хвилею, і тому практично неможливо відслідкувати зміну хвильової функції кожної частинки. Відповідно до теорії квантової статистики, змішані стани можуть характеризуватися *матрицею густини*, *функцією розподілу Вігнера* бо *функціями Гріна*. Для моделювання пристроїв ми завжди можемо сказати, що якою б не була модель, ми завжди обираємо *модельну функцію* або формалізм, через які ми виражаємо електронні стани в квантовому пристрої. Як тільки модельна функція для даного пристрою встановлена за даних умов функціонування, інші фізичні величини, що нас цікавлять, можуть бути розраховані з існуючої модельної функції. Саме вибір модельної функції накладає подальший відбиток на процес моделювання. Її вибір визначає складності при моделюванні, можливості моделі та адекватність результатів моделювання.

Модельна функція в когерентних динамічних моделях – це, звичайно, огинаюча функції електронних станів, тоді як у кінетичних моделях застосовуються та сформульовані *матриця густини*, *функція Вігнера*, та *функції Гріна*. Ці функції, що описують електронні стани в квантових пристроях, придатні до моделювання з різним числом вимірів, для знаходження коефіцієнтів проходження, відбиття, розсіювання в рамках єдиного формалізму [4.18]. Центральна концепція моделі може бути виражена в одному або в системі рівнянь в залежності від вибраної моделі. Так як апроксимації, що використовуються при виводі рівнянь моделі можуть виключити з розгляду певні фізичні процеси, можуть знадобитися рівняння, що не є в строгому сенсі частиною даного формалізму. Від них, однак, краще за все позбавлятися. Центральне рівняння моделі звичайно нелінійне диференціальне або інтегро-диференціальне рівняння, а для його розв'язку необхідно затратити великі зусилля по переведенню в числовий вид, а потім – не менші для адаптації на одну з

мов програмування. Також проблемою зараз вважається великі затрати потужності обчислювальних машин для розв'язку рівнянь моделі.

Важливий аспект моделювання, що тісно пов'язаний з центральним рівнянням, є граничні умови. Для моделювання будь-якого пристрою необхідно щонайменше мати адекватний опис граничних умов, але особливо це критично для квантових пристроїв, що є відкритими системами та знаходяться в стані, далекому від рівноваги.

Як і в будь-якій фізичній системі, розглядаючи РТД, ми прагнемо знати, як система себе поводить в часовому розрізі та отримати придатні до обчислення рівняння руху. Очевидно, що для визначення перехідних та амплітудно-частотних характеристик пристрою, слід використовувати при моделюванні часозалежний розв'язок для модельної функції. Для ВАХ пристрою часто достатньо отримати розв'язок незалежного від часу рівняння модельної функції або рівняння стаціонарного стану.

4.2. Фізика стаціонарного стану РТД

РТД конструктивно являє собою гетероструктуру, що складається з двох основних компонентів. По-перше, це тонкий шар відносно вузькозонного напівпровідника (наприклад GaAs), що міститься між двома тонкими шарами матеріалу з більшою шириною забороненої зони (наприклад, AlGaAs). Вся ця структура з'єднується з контактними площадками масивними ділянками матеріалу з меншою забороненою зоною (наприклад, GaAs), які називаються «резервуарами».

Тонкі шари формують двохбар'єрну квантову систему (ДБКС). Вони не легуються, щоб запобігти накопиченню заряду всередині квантової системи. Резервуари мають високий рівень легування (звичайно донорними домішками), і слугують джерелом носіїв заряду, рух яких модулюється ДБКС.

Сказане вище умовно зображено на рис. 4.2. Між бар'єрами та резервуарами зазвичай формують тонкі шари нелегованих «спейсерів», що не показані на рис. 4.2. Їх формують з того ж матеріалу, що й резервуари. Для стаціонарних процесів їх вплив обмежується зменшенням ефективної напруги, що прикладається до ДБКС, тому в подальшому вони не розглядаються.

Для створення РТД практично не має альтернативи технологія молекулярно-променевої епітаксії, але іноді для цих цілей також застосовувалася технологія хімічного осадження з газової фази металоорганічних сполук.

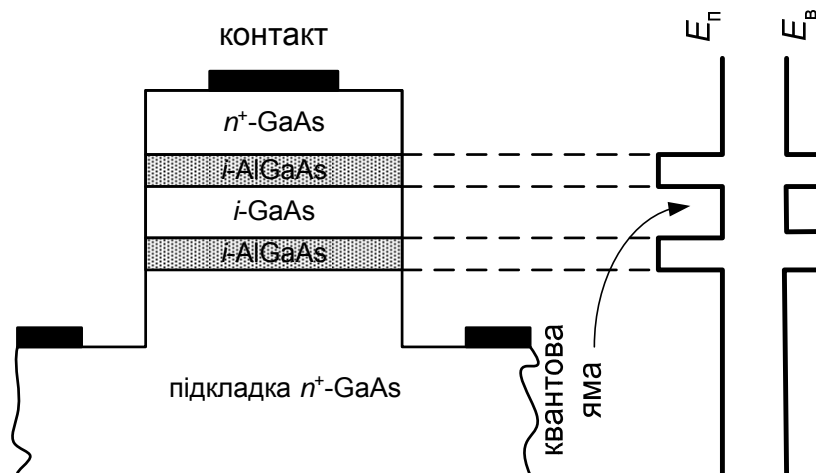


Рисунок 4.2 - Структура резонансно-тунельного діоду на GaAs-AlGaAs. На діаграмі (праворуч) показана потенціальна яма в зоні провідності

Очевидно, двохбар'ерна квантова система є відкритою квантовою системою. Між нею та рештою простору (резервуарами) існує обмін частинками та енергією. Виходячи за строгих позицій, відкрита система має описуватися матрицею густини [4.19, 4.20], і принципово не може – хвильовою функцією. Стани такої системи «змішані», а не «чисті».

Однак, моделі, що побудовані, виходячи зі строгих позицій, по-перше потребують значних обчислювальних ресурсів, по-друге часто не мають суттєвих переваг над «напівемпіричними». Тому в даній роботі вибір було зупинено на останніх.

4.3. Формалізація моделі

Нижче описано процес побудови математичної моделі РТД, виходячи з прийнятих припущень та уявлень про електронний транспорт.

Припущення, прийняті в моделі:

1. 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.

2. 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, $R(E)=1-T(E)$.

3. Рух електрона в ДБКС вважається когерентним (фаза хвильової функції електрона в точці падіння на ДБКС має детермінований зв'язок з фазою електрона, в місці виходу з ДБКС). Фізично, це означає відсутність взаємодії електрона з квантами коливань кристалічної решітки, а також її дефектами. Однак, процеси розсіювання можна в даному випадку врахувати як «затухання» хвилі де Бройля через емпіричні параметри, що й було здійснено.

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

5. Резервуари вважаються напівнескінченними. При нульовій прикладеній напрузі електрони в резервуарах підпорядковані статистиці Фермі-Дірака. При прикладенні напруги енергетична діаграма змінюється у відповідності з розподілом потенціалу по ДБКС, однак зони вважаються плоскими, а розподіл електронів в правому резервуарі зміщується по енергії на величину eV , де V – напруга, що прикладена до РТД, e – заряд електрона.

Далі поетапно перейдемо до побудови математичної моделі на основі прийнятих вище припущень.

1. Припустимо, що до ДБКС прикладена певна напруга, V . Якщо вважати питомі провідності всіх сполук $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ однаковим і незалежним від x , напруга спадає рівномірно вздовж всієї системи. Але будемо вважати, що в кожному з шарів, як і раніше, дно зони провідності плоске (це добре виконується для малого зміщення) напруга впливає лише на висоту бар'єрів та глибину ями, а також потенціал правого резервуару, але не на їх форму (рис. 4.3). Падінням напруги на резервуарах можна знехтувати тому, що вони сильно леговані, а сама ДБКС нелегована.

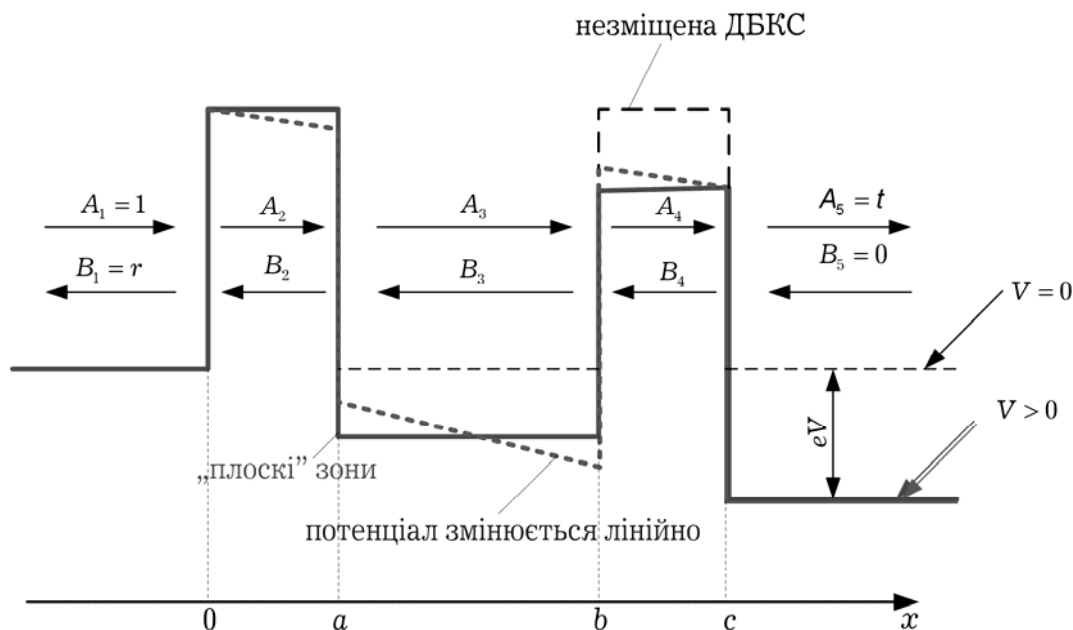


Рисунок 4.3 – Потенціальний профіль ДБКС для різних прикладених напруг: $V = 0$, $V > 0$ в наближенні потенціалу, що змінюється лінійно, а також в наближенні «плоских» зон

2. Хвильові властивості електрона, виходячи з прийнятих нами вище припущень, 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:

$$\psi_i = A_i e^{ik_i x} + B_i e^{-ik_i x}, \quad (4.1)$$

$$\psi_{i+1} = A_{i+1} e^{ik_{i+1} x} + B_{i+1} e^{-ik_{i+1} x}, \quad (4.2)$$

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:

$$A_1 = 1, B_1 = r, A_5 = t, B_5 = 0, \quad (4.3)$$

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

3. В прийнятих припущеннях 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:

$$t^* t \equiv D. \quad (4.4)$$

В подальшому величину D будемо називати коефіцієнтом передачі. Вона визначає величину струму через РТД. Зосередимося надалі на її ідентифікації.

Для цього запишемо граничні умови для функції ψ та її просторової похідної $\frac{d\psi}{dx}$ [4.21] на границях i -го та $i+1$ -го шарів:

$$\begin{aligned} \psi_i(x) \Big|_{x=x_{i,i+1}} &= \psi_{i+1}(x) \Big|_{x=x_{i,i+1}}, \\ \frac{1}{m_i^*} \frac{d\psi_i(x)}{dx} \Big|_{x=x_{i,i+1}} &= \frac{1}{m_{i+1}^*} \frac{d\psi_{i+1}(x)}{dx} \Big|_{x=x_{i,i+1}}. \end{aligned}$$

Беручи до уваги (4.1) та (4.2), для i -го шару ці граничні умови в матричній формі переписуться 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:

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

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

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

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 (4.3):

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

Звідси знайдемо t :

$$t = t_{11} - t_{12} \frac{t_{21}}{t_{22}}, \quad (4.5)$$

а значить і D згідно (4.4).

4. Перехід до тривимірної задачі.

Будемо шукати струм через РТД як суму струмів електронів, які впадають в ДБКС справа – з лівого резервуара (емітера) \mathbf{j}_{LR} , і струму електронів, що впадають зліва в ДБКС – з правого резервуара (колектора) \mathbf{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 ансамблях різний.

Струм, що його створює один електрон зі швидкістю \mathbf{v} , дорівнює $e\mathbf{v}$. Струм, що його створюють електрони, які мають швидкості в межах від \mathbf{v} до $\mathbf{v} + d\mathbf{v}$ (або, що те ж саме, електрони, значення хвильового вектора яких лежать в межах від \mathbf{k} до $(\mathbf{k} + d\mathbf{k})$)

$$d\mathbf{j} = e\mathbf{v} dn = e \frac{\hbar\mathbf{k}}{m^*} dn, \quad (4.6)$$

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. 4.2) концентрація електронів визначається як dn , помножена на D , тому що тільки $dn D$ електронів досягає правого резервуара. Умовно це зображено на рис. 4.4.

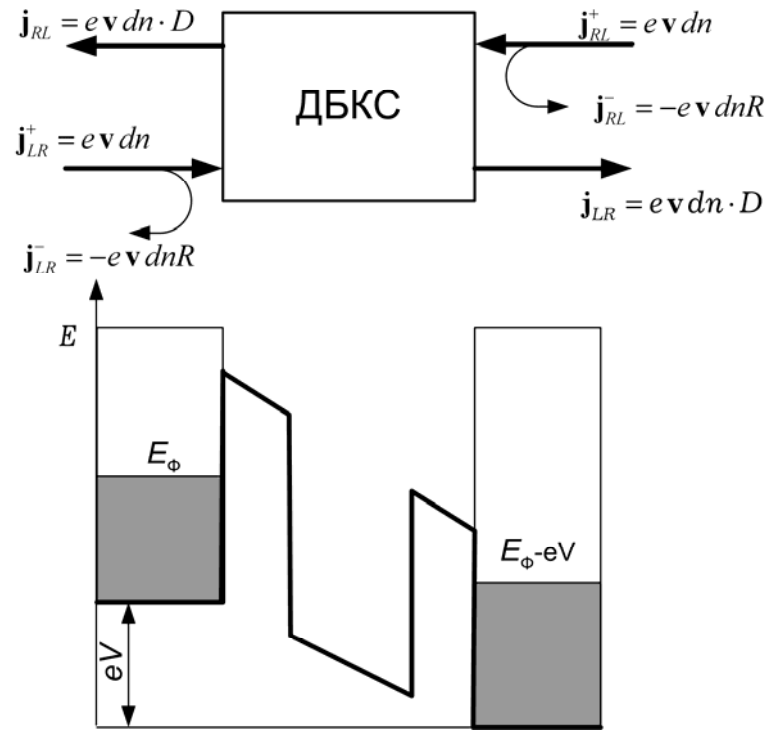


Рисунок 4.4 – До питання формалізації моделі РТД

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

$$dn = g(\mathbf{k}) f(\mathbf{k}) d^3 k ,$$

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

Інтегруючи (6), одержимо:

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

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

Аналогічно дії здійснимо для знаходження \mathbf{j}_{RL} , що створюється ансамблем електронів правого резервуару (колектора). Одержимо:

$$\begin{aligned}
\mathbf{j}_{LR} &= -\frac{e\hbar}{m^*} \frac{2}{(2\pi)^3} \iiint \frac{(k_x \mathbf{e}_x + k_y \mathbf{e}_y + k_z \mathbf{e}_z) D(k_x) dk_x dk_y dk_z}{e^{\frac{\hbar^2}{2m^*}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) - E_\Phi} + 1} = \\
&= \mathbf{e}_x \frac{4\pi e k_B m^* T}{h^3} \int dE_x D(E_x) \ln \left(e^{\frac{E_x - E_\Phi}{k_B T}} + 1 \right).
\end{aligned}$$

Сумарний струм через РТД:

$$\mathbf{j} = \mathbf{j}_{RL} + \mathbf{j}_{LR} = \mathbf{e}_x \frac{4\pi e k_B m^* T}{h^3} \int D(k_x) dE_x \ln \left(\frac{e^{-\frac{E_x - E_\Phi}{kT}} + 1}{e^{-\frac{E_x - E_\Phi + eV}{kT}} + 1} \right). \quad (4.7)$$

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.

5. Врахування розсіювання.

ДБКС не є замкненою системою, а це означає, що час перебування електрона на i -му енергетичному рівні має скінченне значення. Це, зокрема, призводить до того, що спектральна функція пропускання $D(E)$ має неперервний енергетичний спектр. Хвильова функція електрона не локалізована в потенціальній ямі при жодному значенні енергії, однак при певних значеннях енергії – резонансних – амплітуда хвильової функції всередині ями набагато більша, ніж поза нею. Ці резонансні рівні є метастабільними, тому що середній час перебування електронем на таких рівнях τ_n обмежується їх «витіканням» через лівий та правий бар'єри за рахунок того, що при кожному відбитті електронної хвилі від бар'єрів доля $|T_{L(R)}|^2$ електронів залишає ДБКС через лівий (правий) бар'єр, де $T_{L(R)}$ – коефіцієнт проходження лівого (правого) бар'єру. За реальних умов, коли $|T_{L(R)}|^2 \ll 1$, величину τ_n можна наближено визначити за формулою [4.22]:

$$\tau_n = \frac{2w}{v_n} \left(\frac{1}{|T_L|^2 + |T_R|^2} \right), \quad (4.8)$$

де w – ширина потенціальної ями, $v_n = \sqrt{2E_n/m^*}$ – швидкість поперечного руху електрона на n -му резонансному рівні, де E_n – енергія n -го метастабільного резонансного рівня (відповідає n -му максимуму функції $D(E)$).

У випадку симетричної ДБКС $T_L = T_R \equiv T$ і вираз (4.8) спрощується до наступного:

$$\tau_n = \frac{w}{v_n |T_L|^2}. \quad (4.9)$$

Розширення енергетичного рівня E_n можна визначити з принципу невизначеності Гейзенберга, записаному у вигляді:

$$\Delta E_n = \frac{\hbar}{\tau_n}. \quad (4.10)$$

Всі питання, що розглядалися вище, придатні для ДБКС, в якій відсутнє розсіювання, тому домовимося в подальшому називати τ_n часом життя електрона на n -му резонансному рівні, а ΔE_n – «природним» розширенням резонансного рівня.

В той же час розсіювання порушує фазову когерентність електронних хвиль і виявляється у тому, що енергетичні рівні додатково розширюються на величину так званого релаксаційного розширення, ΔE_p , яке пов'язане з часом релаксації імпульсу електрона τ_p залежністю:

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

Час релаксації імпульсу визначається, виходячи з того, що сумарна швидкість розсіювання дорівнює сумі швидкостей розсіювання всіх можливих механізмів. Цей час в даній роботі задається як емпіричний параметр.

Сумарне розширення енергетичного рівня $\Delta E = \Delta E_n + \Delta E_p$.

Величина ΔE має наступний фізичний сенс. Якщо взяти діапазон енергій електрона, з центром у відповідному максимумі функції $D(E_x)$ і шириною ΔE , то при рівномірному розподілі електронів по енергіям частка електронів, що пройшла ДБКС в діапазоні ΔE буде складати $\sqrt{2} \approx 0.707$ від загальної кількості електронів, що пройшли через ДБКС при будь-яких енергіях.

Функція $D(E)$ може бути апроксимована функцією Лоренцевого типу [4.1]:

$$D(E_x) \approx \sum_{k=1}^N \frac{\Delta E_{nk}^2 / \Delta E_k^2}{1 + 4 \left(\frac{E_x - E_{nk}}{\Delta E_k} \right)^2},$$

де ΔE_{nk} , E_{nk} , ΔE_k , – відповідно ширина «природного» розширення, висота енергетичного рівня, ширина сумарного розширення k -го енергетичного рівнів. Додавання проводиться по всім N енергетичним рівням, що існують в квантовій ямі.

4.4. Досліджувані структури

Параметри тестової модельної структури, що використовувалася для апробації моделі, наведено нижче і візуалізовано на рис. 4.5. В якості резервуарів (емітера та колектора) використовується сильно легований GaAs ($N_d = 10^{24} \text{ м}^{-3}$). Бар'єрні шари симетричні шириною 5 нм і створені зі сполуки $\text{Al}_{0.33}\text{Ga}_{0.67}\text{As}$, квантова яма має ширину 5.6 нм і створена з відносно вузькозонного GaAs. Бар'єрні шари та яма нелеговані. Фактично, припущення, що прийняті в моделі вимагають постулювати відсутність власних носіїв заряду в бар'єрах та ямі, що й було зроблено.

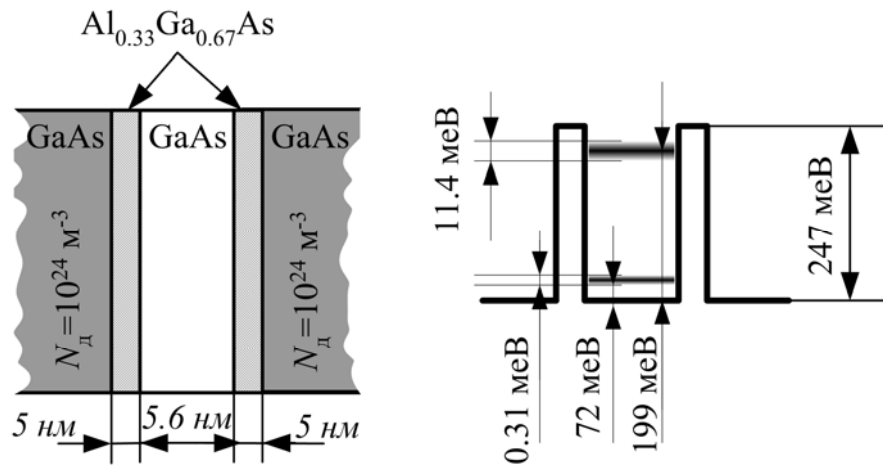


Рисунок 4.5 – Профілі легування, склад ДБКС (ліворуч), енергетичні характеристики ДБКС (праворуч)

Проведемо попередні розрахунки, щоб отримати параметри моделі.

Ефективна маса електрона в матеріалі $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ визначається за емпіричною формулою: $m^*(x) = 0.15m \cdot x + 0.067 \cdot m(1 - x)$, де m – маса спокою електрона.

Таким чином, ефективна маса електрона в GaAs $m_{\text{GaAs}}^* = 0.067m$, в $\text{Al}_{0.33}\text{Ga}_{0.67}\text{As}$ – $m_{\text{Al}_{0.33}\text{Ga}_{0.67}\text{As}}^* = 0.094m$. Розрив зони провідності $\Delta E_{\text{зп}}$, який дорівнює висоті потенціальних бар'єрів, може бути визначений за емпіричною формулою [4.23]: $\Delta E_{\text{зп}} = 0.62(\Delta E_{\text{зп AlGaAs}} - \Delta E_{\text{зп GaAs}})$, де $\Delta E_{\text{зп AlGaAs}}$ та $\Delta E_{\text{зп GaAs}}$ – ширина забороненої зони відповідно в AlGaAs та GaAs. Для довільної долі x алюмінію в сполуці $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ширина забороненої зони може бути визначена як: $\Delta E_{\text{зп}}(x) = (1.42 + 1.247x)$ [eV] [4.23].

Рівень Фермі електронів відносно дна зони провідності в обох резервуарах (емітері та колекторі) визначається як для сильно легovanого напівпровідника, що

знаходиться в рівноважному стані згідно [2.10]: $E_\phi = \left(\frac{\hbar^2}{2m^*e}\right)\left(\frac{3N_d}{8\pi}\right)^{2/3}$, де N_d – концентрація домішкових атомів, кожен з яких вважається іонізованим.

4.5. Результати моделювання

Результати моделювання коефіцієнта проходження ДБКС при врахуванні розсіювання і без нього для нульової напруги наведені на рис. 4.6.

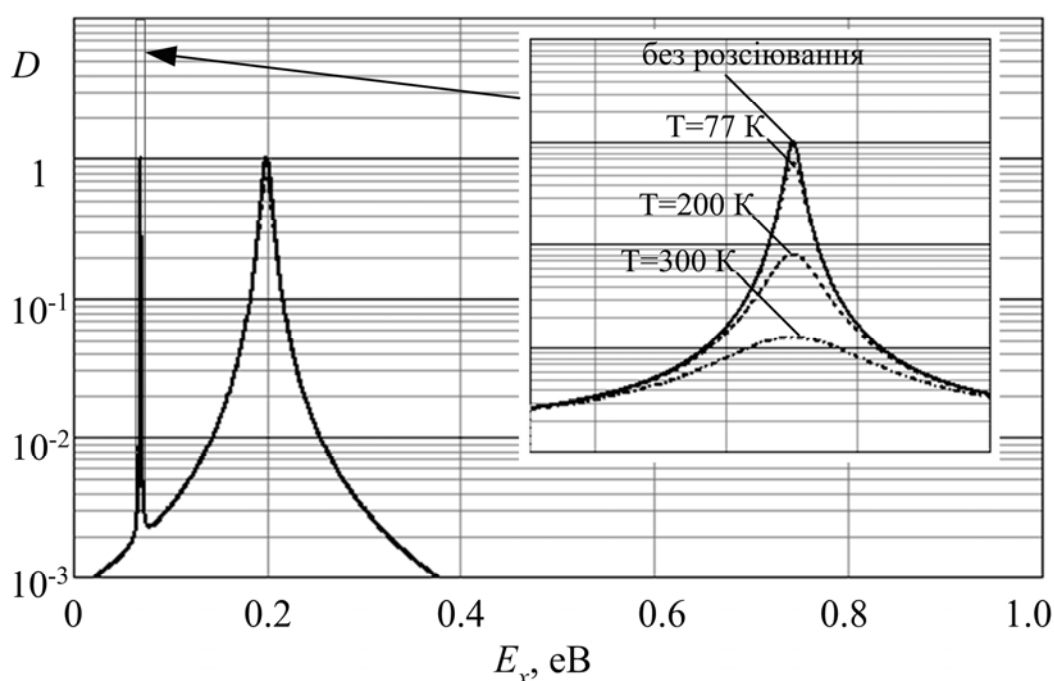


Рисунок 4.6 – Залежність коефіцієнту пропускання ДБКС від енергії у відсутності розсіювання, а також з врахуванням розсіювання при різних температурах. Праворуч показана форма першого максимуму $D(E_x)$ для кожного з випадків

З цього графіка очевидно, що при збільшенні температури, і, відповідно, розсіювання резонансні рівні стають більш розмитими. Надалі розглянемо, як розширення метастабільних енергетичних рівнів впливає на форму ВАХ РТД.

Розрахована для описаної структури ВАХ наведена нижче на рис. 4.7. Така структура містить два квазідискретні рівні у квантовій ямі, через які може вестись тунелювання. ВАХ, що показана нижче, приведена для такого діапазону напруг, в

якому рівень Фермі електронів в емітері лежить нижче другого резонансного рівня, тому на ВАХ спостерігається лише один «пік».

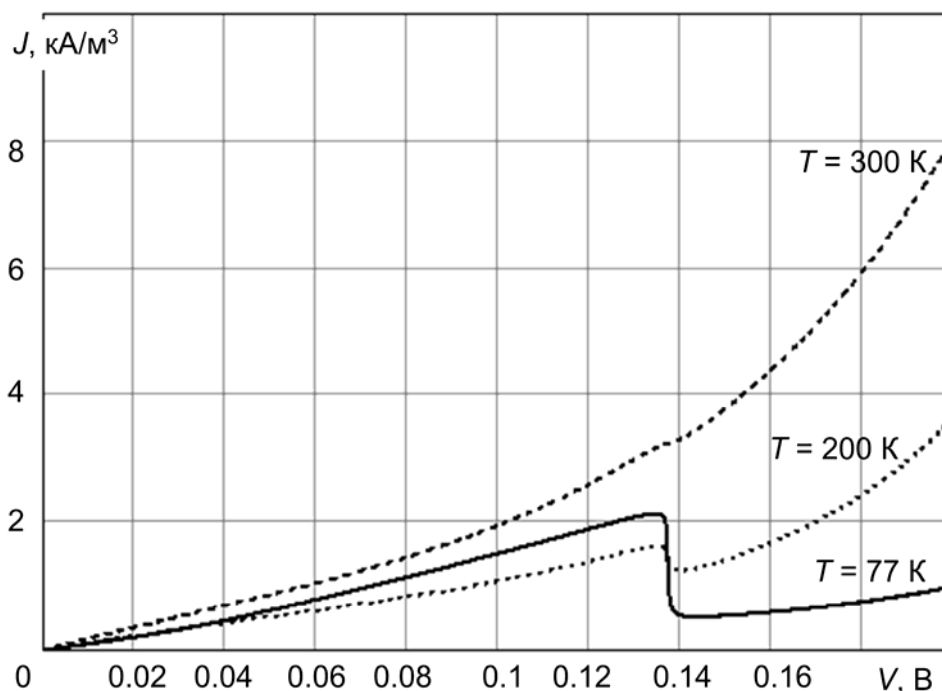


Рисунок 4.7 – ВАХ резонансно-тунельного діоду для різних температур

З цієї ВАХ помітно, що вже для температури 300 К область від'ємної диференціальної провідності на ВАХ відсутня. Оскільки єдиний фактор, що впливає на форму ВАХ (через коефіцієнт пропускання ДБКС) – це час релаксації імпульсу (що пов'язаний з розсіюванням), який залежить від температури, то звідси випливає, що розсіювання негативно впливає на контрастність ВАХ. Одним з очевидним шляхів покращення в цьому напрямку є пропорційне зменшення розмірів бар'єрів та ями. Чим менше електрон перебуває в ДБКС, тим меншу ймовірність взаємодії з коливаннями кристалічної решітки він має. Іншим шляхом зменшення розсіювання є покращення технології виготовлення РТД – використання більш чистих матеріалів, збільшення точності нанесення шарів гетероструктури.

Надалі приведемо залежності основних параметрів РТД від його технологічних параметрів:

- ширини бар'єрів;
- кількість резонансних рівнів;
- молярної долі x Al в сполуці $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$.

Кількість резонансних рівнів в залежності від *ширини бар'єрів* не змінюється. Тому при будь-якій ширині бар'єрів в модельній структурі кількість метастабільних резонансних рівнів залишається однаковою і рівною 2.

Водночас, змінюється їх розмитість (яку ми характеризуємо характерною шириною «природного» розширення ΔE_n). При зменшенні ширини бар'єрів метастабільні рівні розширюються. Це пояснюється тим, що чим вужчий бар'єр, тим менше часу електрон проводить в осциляціях в ямі ДБКС, і за кожний період коливань більша частина електронів покидає ДБКС. Це безпосередньо впливає з принципу невизначеності Гейзенберга, записаного у формі (4.8).

При нульовому ліміті ширини енергетичні рівні будуть мати деяку максимальну ширину. При нескінченно товстих бар'єрах електрон повністю локалізований в квантовій ямі. Рівні не квазидискретні, а істинно дискретні. Всі ці факти мають своїм результатом залежність, що зображена на рис. 4.8.

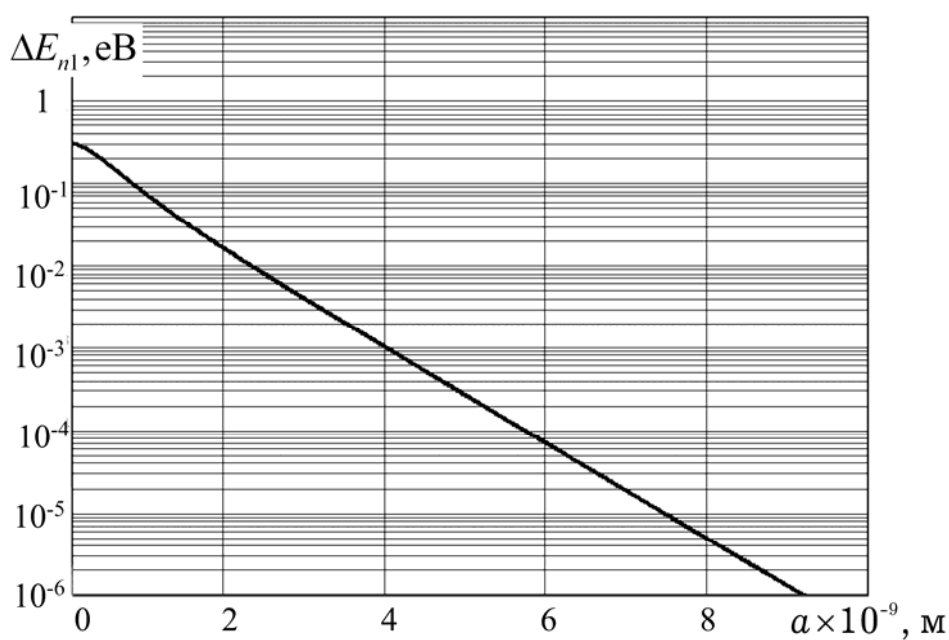


Рисунок 4.8 – Залежність величини «природного» розширення першого енергетичного рівня від ширини потенціальних бар'єрів

Параметри ВАХ РТД, як і величина «природного» розширення резонансних рівнів, сильно залежать від ширини бар'єрів. Зокрема, зменшення величини «природного» розширення зі збільшенням товщини бар'єрів має своїм наслідком збільшення контрастності ВАХ. Однак, ймовірність тунелювання через ДБКС зі збільшенням товщини потенціальних бар'єрів зменшується. Тому густина струму різко зменшується. Напруга, при якій спостерігається максимум струму збільшується, тому що більша частина наруги падає на бар'єрних шарах, і метастабільний рівень у квантовій ямі повільніше опускається до рівня Фермі електронів в емітері зі зростанням загальної наруги, прикладеної до ДБКС (рис. 4.9).

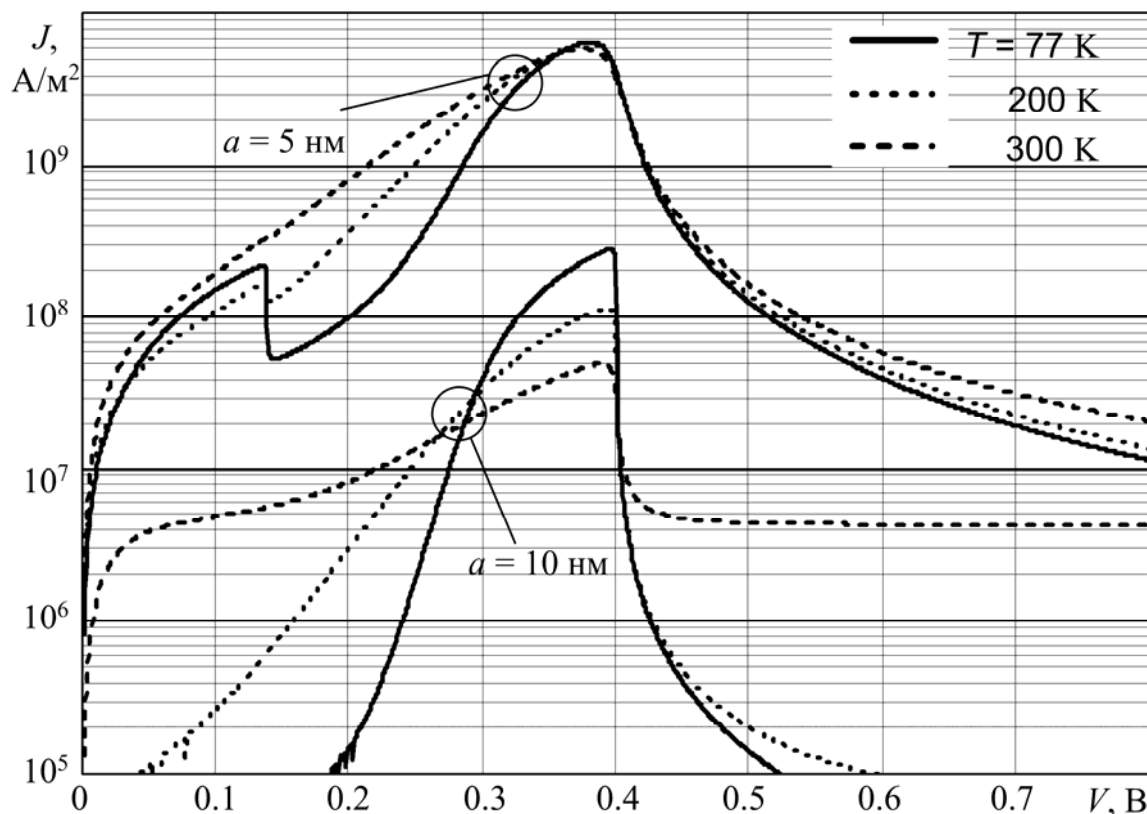


Рисунок 4.9 – ВАХ РТД з товщиною бар'єрних шарів 5 та 10 нм при різних температурах

Товщина ями визначає кількість резонансних рівнів. Зі збільшенням товщини квантової ями в ній може існувати нескінченна кількість квазидискретних рівнів (які можна розпізнати по пікам на спектральній характеристиці пропускання ДБКС). В ліміті нескінченно широкої потенціальної ями всі ці дискретні енергетичні рівні злілюються в один, тому що будуть нескінченно близько лежати одне від одного.

В ліміті нескінченно вузької потенціальної ями в ній не буде існувати жодного метастабільного резонансного рівня. Таким чином – і це розраховано для даної модельної структури – зі збільшенням товщини шару, який утворює потенціальну яму кількість резонансних рівнів у ній збільшується (рис. 4.10, а). В той же час висота енергетичних рівнів, утворених в потенціальній ямі, зі зростанням її товщини зменшується (рис. 4.10, б).

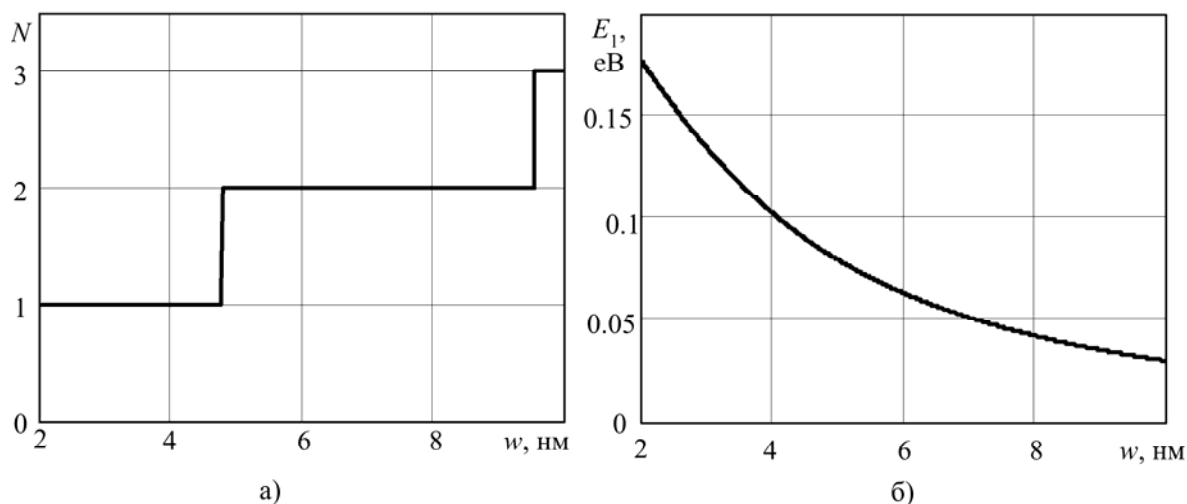


Рисунок 4.10 – Залежність кількості енергетичних рівнів N та залежність висоти першого енергетичного рівня E_1 в ямі від її товщини

Зі збільшенням товщини потенціальної ями електрони, що потрапили в неї, проводять там більше часу. Відповідно, метастабільні рівні стають «більш стабільними», тобто більш схожими на дискретні (стабільні), тому і величина ΔE_n , що характеризує «розмитість» або «нестабільність» енергетичних рівнів зменшується (рис. 4.11).

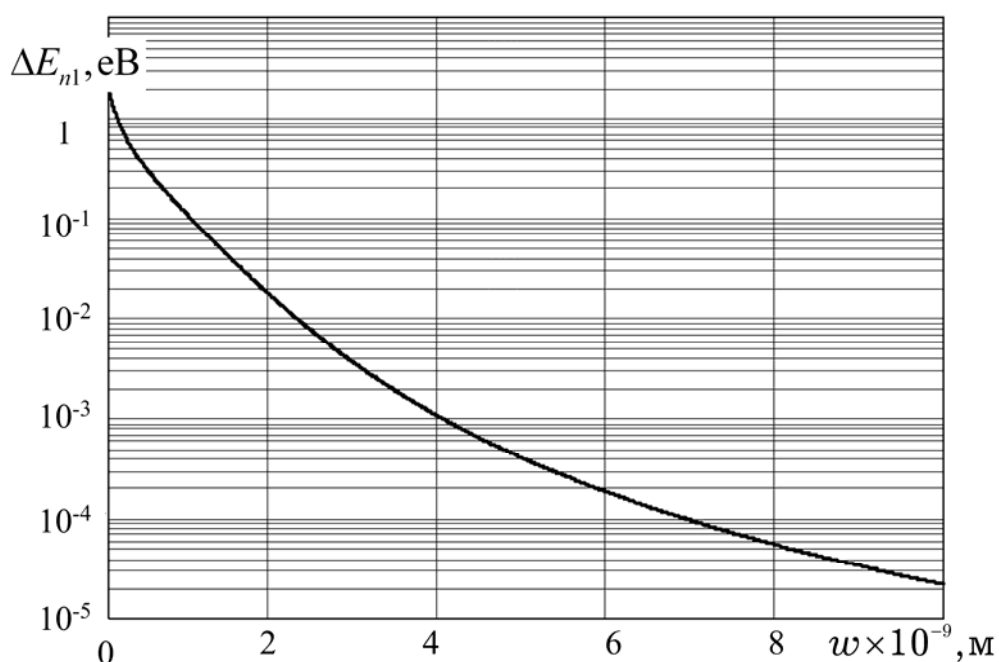


Рисунок 4.11 – Залежність величини «природного» розширення першого енергетичного рівня від ширини потенціальної ями

ВАХ РТД зі зменшенням товщини квантової ями видозмінюється. Для прикладу на рис. 4.12 показані ВАХ для РТД з шириною ями 4 та 5.6 нм. На

противагу очікуваному зменшенню контрастності виявляється, що вона в незначній мірі збільшується, і область негативної диференціальної провідності для $w = 4$ нм спостерігається навіть при температурі 300 К. Тут відбувається вплив двох факторів, які по різному впливають на ВАХ. З одного боку, енергетичні рівні розширюються при зменшенні товщини потенціальної ями, з іншого боку їх висота збільшується, тому максимум ВАХ спостерігається при більших напругах, при яких електрони мають більшу швидкість, тому і густина струму, що створюється електронами збільшується.

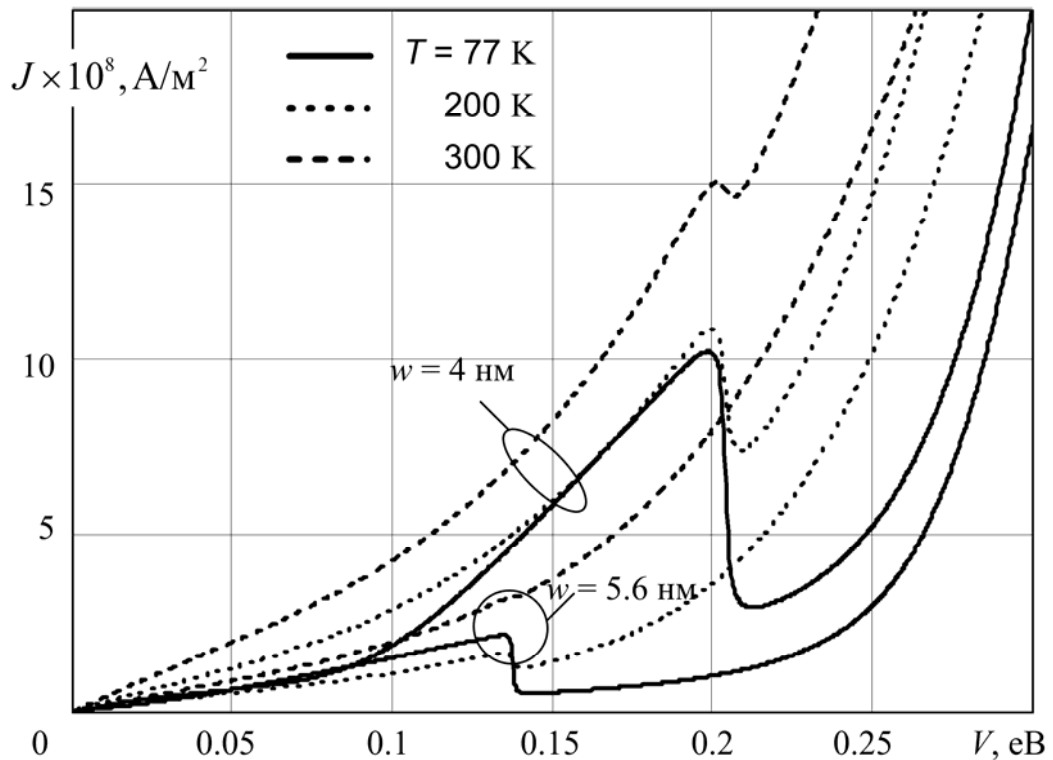


Рисунок 4.12 – ВАХ РТД для товщини шару, що утворює потенціальну яму 4 та 5.6 нм при різних температурах

Молярна доля x алюмінію в сполуці $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, з якої створені бар'єрні шари впливає на висоту потенціальних бар'єрів. Зокрема, при $x = 0$ бар'єру зовсім не буде – відповідно – жодної модуляції струму і ефекту негативної диференціальної провідності. При $x = 1$ висота потенціалів бар'єрів досягне свого максимуму. Цей випадок відповідає бар'єрам, що створені зі сполуки AlAs . Зі збільшенням молярної доли As за рахунок збільшення висоти потенціальних бар'єрів збільшується також і кількість енергетичних рівнів у квантовій ямі, що демонструє рис. 4.13.

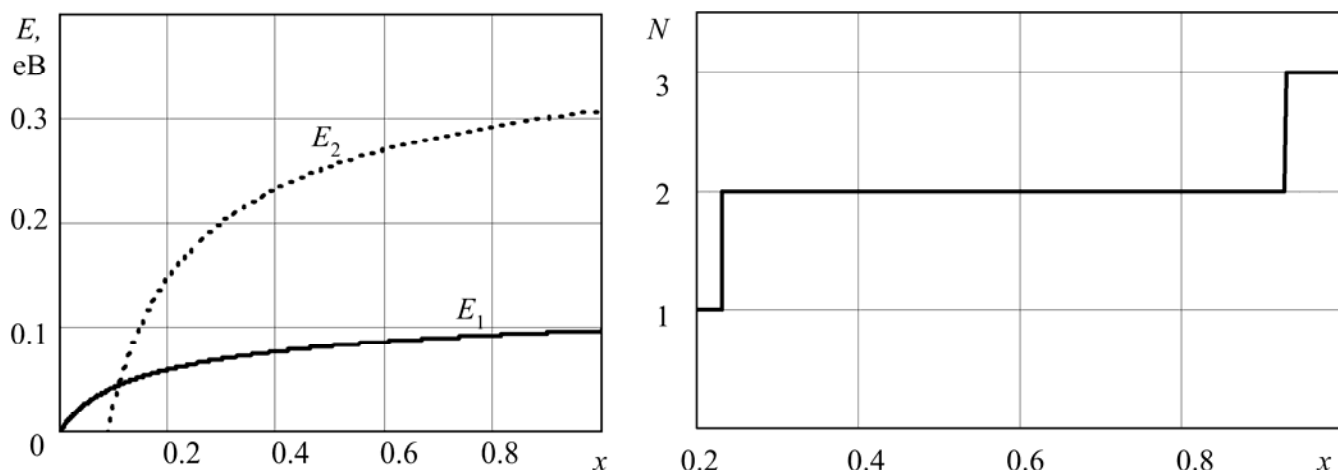


Рисунок 4.13 – Залежність висоти першого E_1 та другого E_2 енергетичних рівнів та кількості енергетичних рівнів N в ямі та від молярної доли x Al в сполуці $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$

Ймовірність тунелювання через потенціальний бар'єр експоненціально зменшується при зростанні його висоти, тому електрони проводять більше часу в квантовій ямі, отже величина природного розширення метастабільних рівнів зменшується, що показано на рис. 4.14.

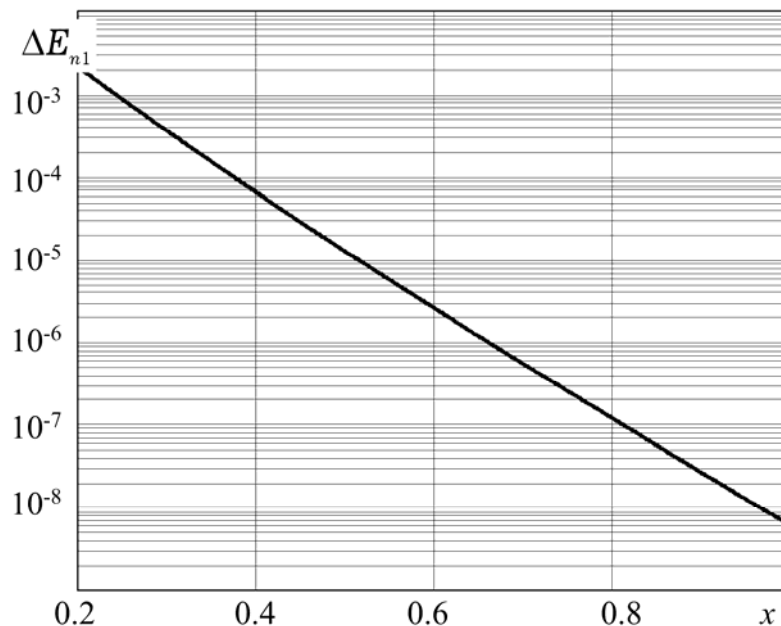


Рисунок 4.14 – Залежність «природного» розширення ΔE_{n1} першого резонансного рівня від молярної доли x Al в сполуці $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$

Оскільки при збільшенні молярної долі Al висота енергетичних рівнів в квантовій ямі збільшується, максимум на ВАХ спостерігається при більших напругах (рис. 4.15).

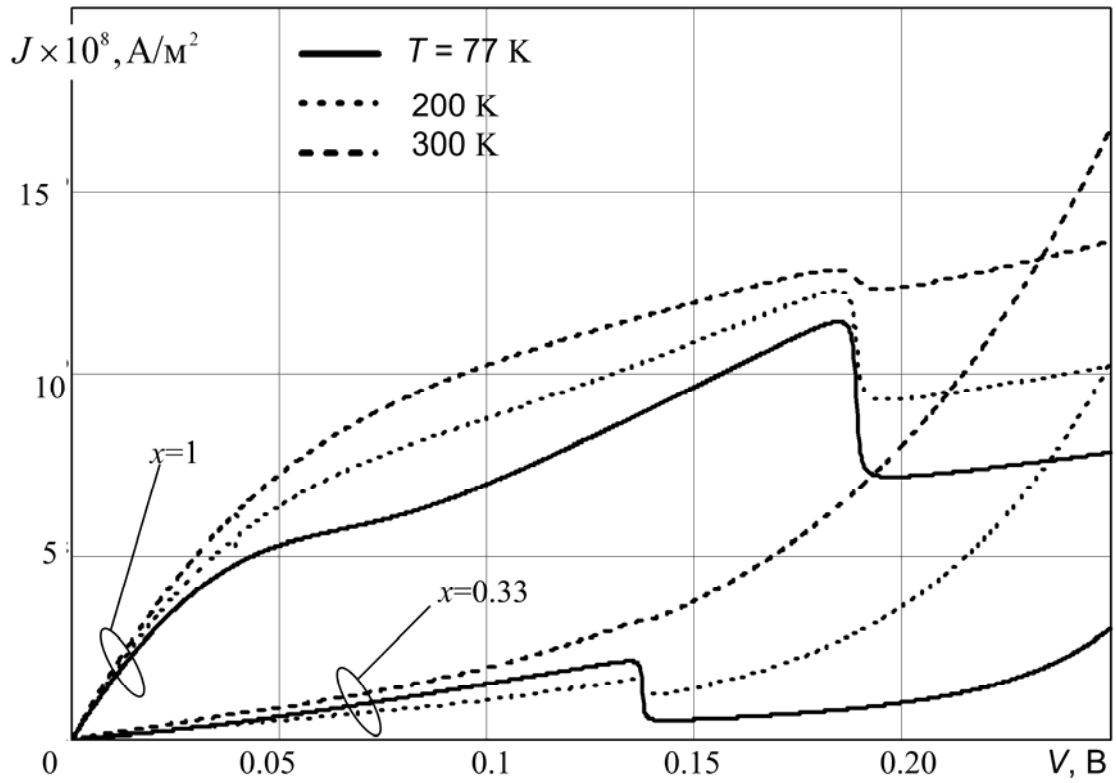


Рисунок 4.15 – Залежність струму через РТД при різних температурах для $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ де $x = 0.33$ та $x = 1$

- 4.1. *Абрамов И.И.* Моделирование физических процессов в элементах кремниевых интегральных микросхем. - Мн.: БГУ, 1999. - 189 с.
- 4.2. *Тагер А.С.* Размерные эффекты в субмикронных полупроводниковых структурах и перспектива их использования в электронике СВЧ // Электронная техника. Сер. „Электроника СВЧ”. – 1987. - Вып. 9. - С. 21-33.
- 4.3. *Consuelo M. Lima et. al.* Electron transmission through a single nonabrupt GaAs/Al_xGa_{1-x}As barrier subjected to an electric field // *Physical Review B* – 1995. – Vol. 52. - P. 5777-5780.
- 4.4. *Бузанева Е.В.* Микроструктуры интегральной электроники. - М.: Радио и связь, 1990. – 258 с.
- 4.5. *Драгунов В.П., Неизвестный В.П., Гридчин В.А.* Основы нанoeлектроники. Новосибирск: НТГУ, 2000. – 496 с.
- 4.6. *Mains R. K., Mehdi I., Haddad G. I.* Effect of Spatially Variable Effective Mass on Static and Dynamic Properties of Resonant Tunneling Devices // *Applied Physics Letters*. – 1989. – Vol. 55. - P. 2631-2633.
- 4.7. *Sun J.P., Haddad G.I.* Self-Consistent Scattering Calculation of Resonant Tunneling Diode Characteristics // *VLSI Design*. – 1997. – Vol. 3. - P. 1-4.
- 4.8. *Горбачевич А.А., Колтыженков В.М., Цибизов А.Г.* Моделирование резонансно-туннельных структур с учетом классического окружения // *Изв. вузов. Электроника*. – 2001. - №4. - С. 61-67.
- 4.9. *Pinaud O.* Transient simulations of a resonant tunneling diode // *Journal of Applied Physics*. – 2002. –Vol. 92. - P. 1987-1994.
- 4.10. *Frensley W.R.* Wigner-function model of a resonant-tunneling semiconductor device // *Physical Review B*. – 1987. – Vol. 36. - P. 1570-1580.
- 4.11. *Kluksdahl N.C., A.M. Kriman, D.K. Ferry.* Self-consistent study of the resonant-tunneling diode // *Physical Review B*. – 1989. – Vol. 39. - P. 7720-7735.
- 4.12. *Jensen K.L., F.A. Buot.* Effects of spacer layers on the Wigner function simulation of resonant tunneling diodes // *Journal of Applied Physics*. – 1989. – Vol. 65. - P. 5248-8061.
- 4.13. *Biegel, J.D. Plummer.* Comparison of self-consistency iteration options for the Wigner function method of quantum device simulation // *Physical Review B*. - 1996. – Vol. 54. - P. 8070-8082.
- 4.14. *Zhao, D.L. et. al.* Creation and quenching of interference-induced emitter-quantum wells within double-barrier tunneling structures // *Journal of Applied Physics*. – 2003. – Vol. 94. - P. 1833-1849.

- 4.15. *Klimeck G. et. al.* Quantum Device Simulation with a Generalized Tunneling Formula // *Applied Physics Letters*. – 1995. - Vol. 67. - P. 2539–2541.
- 4.16. *Bowen R.C. et. al.* Quantitative simulation of a resonant tunneling diode // *Journal of Applied Physics*. – 1997. – Vol. 81. - P. 3207-3213.
- 4.17. *Lake R. et. al.* Single and multiband modeling of quantum electron transport through layered semiconductor devices // *Journal of Applied Physics*. – 1997. – Vol. 81. - P. 7845-7869.
- 4.18. *Wang J-S. et. al.* Nonequilibrium Green's function method for thermal transport in junctions // *Physical Review. B*. – 2006. – Vol. 7. - P. 033408-033411.
- 4.19. *Sun J.P. et. al.* Resonant tunneling diodes: models and properties // *Proceedings of IEEE*. – 1998. - Vol. 86. - P. 641-661.
- 4.20. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика (нерелятивистская теория). – М.: Физматгиз, 1963. – 704 с.
- 4.21. *Tsu R.* Superlattice to nanoelectronics. – London: Elsevier, 2005. – 325 p.
- 4.22. *Weil T., Vinter B.* Equivalence between resonant tunneling and sequential tunneling in double-barrier diodes // *Appl. Phys. Lett.* – 1987. – Vol. 50. – P. 1281–1283.
- 4.23. *Brenan K.F., Brown A.S.* Theory of modern electronic semiconductor devices. – New York: J. Wiley & Sons, 2002. – 448 p.
- 5.1. *A.Akturk, G.Pennington, N.Goldsman.* Quantum Modelling and Proposed Design of CNT-Embedded Nanoscale MOSFET's // *IEEE Transactions on Electron Devices*.–2005. – V.52, №4 – P.577-584.
- 5.2. *R.Chu, Y.Zhou, J.Liu et al.* AlGaIn-GaN Double-Channel HEMTs // *IEEE Transactions On Electron Devices*. – 2005.– V.52, №4 – P.438–445.
- 5.3. *Yu.G. Sadofyev, S.E. Yevstigneev, Yu.V.Kopaev, D.S. Shipitsin, S.S. Shmelev.* New approach to the independent ohmic contact formation in the structures with two parallel isotype quantum wells // *J. Vac. Sci. Technol. B*.2000.18(3). – P.1668–1671.
- 5.4. *Москалюк В.А., Тимофеев В.И.* Моделирование процессов переноса электронов в канале и подложке субмикронного полевого транзистора // *Электронная техника. Сер.1., Электроника СВЧ*.–1990. – Вып.2 (426). – С.22–27.
- 5.5. *Тимофеев В.И.* Моделювання релаксаційних процесів розігріву електронного газу в субмікронних гетеротранзисторах // *Наукові вісті НТУУ „КПІ”*.– 2004.–№5.– С.23–29.
- 5.6. *Москалюк В.А., Иващук А.В, Тимофеев В.И.* Расчет релаксационных параметров GaAs в сильных полях. // *Технология и конструирование в электронной аппаратуре*. –2003.–№3.– С.61-64.