

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

“\_\_\_” \_\_\_\_\_ 20\_\_р.

**ПОЯСНЮВАЛЬНА ЗАПИСКА**

до дипломної роботи освітньо-кваліфікаційного рівня «бакалавр»

за напрямом підготовки 6.0908 "Електроніка"

на тему: «Моделювання РТД з параболічними потенціальними  
ямами»

Студент групи ДМ-61 \_\_\_\_\_

В. В. Мар'єнков

Керівник роботи \_\_\_\_\_

ас. А. В. Федяй

Консультант з технічної частини \_\_\_\_\_

к.т.н., доц. А. О. Попов

Київ – 2010 р.

## РЕФЕРАТ

Дипломну роботу виконано на \_\_\_ сторінках, що містять \_\_\_ розділів, \_\_\_ ілюстрацій, \_\_\_ таблиць, \_\_\_ додатків та \_\_\_ джерел в переліку посилань.

Об'єктом дослідження в роботі є резонансно-тунельний діод (РТД) з параболічною потенціальною ямою. Предмет роботи – моделювання статичних характеристик РТД з параболічною ямою та відтворення результатів моделювання за допомогою пакету моделювання Matlab 6.5.

Метою роботи є створення напіваналітичної спрощеної моделі РТД з параболічною квантовою ямою, визначення особливостей та переваг РТД з такою топологією над іншими видами РТД, а також сфер застосування таких приладів в електроніці.

У першому розділі викладені принципи побудови топології вже відомих РТД, а також сучасні матеріали, що застосовуються при їх виготовленні. В другому розділі описано метод огинаючої функції для врахування нанорозмірних ефектів при моделюванні РТД. В третьому розділі розроблена та формалізована модель досліджуваного РТД. В четвертому та п'ятому розділі наведено та інтерпретовано результати моделювання. В шостому розділі вказані можливі сфери застосування змодельованого діоду.

Розроблена модель може бути використана для інженерних розрахунків при створенні РТД з параболічними квантовими ямами, оскільки вона швидка та легка в інтерпретації.

Значущість роботи полягає в новизні та перспективності топологічної структури РТД, у підході до його моделювання (збереження аналітичності моделі, де це тільки можливо), а також в дослідженні можливого застосування в приладах багатозначної логіки.

Розроблена модель може бути уточнена послідовним включенням до розгляду паразитних ефектів, що мають місце в реальному РТД.

**РЕЗОНАНСНО-ТУНЕЛЬНИЙ ДІОД, ПАРАБОЛІЧНА КВАНТОВА ЯМА,  
МОДЕЛЮВАННЯ**

## ABSTRACT

Diploma's project is done at \_\_\_ pages . It contains \_\_\_ sections, \_\_\_ illustrations, \_\_\_ tables, \_\_\_ appendixes and \_\_\_ sources in the list of references.

The object of research is the resonant-tunneling diodes (RTD) with parabolic potential well. Subject of the work is modeling of stationary characteristics of RTD with the parabolic well and simulation, using Matlab 6.5.

The objective is to create semi-analytical simplified model of RTD with parabolic quantum well, identification of the properties and advantages of the RTD with this topology over other types of RTD as well as, defining the scope of application of such devices in electronics.

The first section outlines the principles of RTD with conventional topology as well as modern materials, used in their manufacturing. The second chapter describes method of envelope functions for simulation of nanoscale effects in RTD modeling. The model of the given RTD developed and formalized in section 3. In the fourth and fifth section results of simulation are being presented both with their interpretation. Possible scope of application of the simulated diode was indicated in the section 6.

Formal treatment of the modeling of RTD's entails advanced quantum transport theory, possibly including rather intricate formulations of multiband effective mass theory, quantum statistical theory based on the density matrix, Wigner functions, and Green's functions [1]. Frensley, Ferry, Grubin, and other authors have written extensive review papers on related subjects, more detailed information can be found from these reviews [2], [3]. Significant effort has been devoted to developing physical models of RTD's with varying degrees of sophistication and success.

The interest in achieving an accurate RTD model lies in the fundamental motivation to gain insight into mesoscopic transport and provide guidance for optimal device design, which are indispensable for conceiving new devices and pursuing realistic device development. Moreover, there exists a lag in theoretical modeling of quantum transport as compared to nanofabrication technology.

Quantum device modeling has yet to be as well established as modeling capabilities for conventional field-effect transistors (FET's) and bipolar transistors. On the other hand, quantum transport problems in nanoelectronic devices and their complicated material and structural dependence demand heavy reliance on computer simulation tools. In that sense, RTD models serve as a test vehicle for device modeling capabilities as we progress into the nanoelectronic regime.

Device terminal properties are determined by studying carrier transport of the electrons, whose available energies are described by the band structure. The carrier motion should include the major physical processes. In order to compute RTD I–V characteristics, it is clear that RTD modeling should include two important aspects.

First of them is proper energy-band parameters for a particular RTD structure, built up from dissimilar materials and their interfaces. For example, the band offsets at the heterointerfaces, carrier effective masses, and other material parameters derived from the band structure must be available with accuracy.

Second of them is a proper transport formalism, which must be able to model the major processes in the RTD. Since simplifications, approximations, and numerical discretization are always used in the various models, they must not violate the basic physical laws and principles of quantum mechanics. However, in practice, these simplifications and approximations often compromise some of these principles.

From a first-principles point of view, the RTD as a nanoelectronic device is in general an open quantum system, in which electron transport is three dimensional, time dependent, time irreversible, dissipative, and many-body interactive, with both particle and energy exchanges with the device's environment. The device system is therefore very different from a simple isolated quantum system, where a conservative Hamiltonian and the boundary conditions for the Schrödinger equation may be readily formulated.

On the other hand, since a full many-body formalism that is computationally manageable for such open device systems has not been well established, and may not be necessary for calculations of specific device properties, approximations and simplifications are typically used in various modeling approaches to simplify the calculations, provided that the major transport processes can be properly modeled.

Recent efforts in RTD modeling have generated fruitful results for evaluation of quantum effects in RTD's and for device design. In terms of the electron state description and the capability of correctly treating the electron interactions with its environment, the existing RTD physical models can be classified into two categories: dynamic or coherent models and kinetic models.

First indicate their common ingredients before identifying their differences. According to quantum mechanics, an electron can be described by its quantum state, represented by its state function. A simple or pure electron state is generally represented by the electron wave function and may be specified by its amplitude, momentum (wave vector), energy, and phase; its time evolution follows the time-dependent Schrödinger equation. An interaction between an electron and an optical phonon, however, may break the electron's phase coherence and generate correlations with other microparticles. We then speak of incoherent interactions and mixed electronic states. This is because the interacting particles have no phase relation with the incident electron wave, and it is therefore in practice impossible to trace the variation of the electron wave function of every particle.

According to quantum statistical theory, the mixed state may be characterized by the density matrix, Wigner (distribution) functions, or Green's functions. For device modeling purposes, we may have the view that common to all quantum transport models, one takes a model function to represent electron states in a quantum device. Once the model function is evaluated for a specific device under specific operating conditions, other physical quantities of interest as well as device properties can all be calculated from the available model function. It is the chosen model function that makes major differences in terms of the formalism, capabilities, and results from one model to another.

The model function in the coherent dynamic models is typically the envelope function, whereas in the kinetic models, the density matrix, Wigner function, and Green's functions are employed and formulated. These functions representing electron states in quantum devices are capable of modeling, to varying degrees, the physical processes in the device, such as electron transmission, reflection, and scattering processes, in a unified formulation.

The central formulation in a model can be a single equation or a set of equations, depending on the chosen model. Since the approximations often render an approach inadequate for all the processes to be modeled even approximately, however, additional formulation may still be needed. The central equation is typically a nonlinear differential or differential-integral equation, and solutions to the equation require extensive numerical work and computer programming as well as significant computer resources. An important issue closely related to the central equations is boundary conditions. It is essential to have a proper treatment of boundary conditions for any device model.

It is especially critical for quantum device models where the device system is open to particle reservoirs and driven far from equilibrium. As restricted by the scope of this paper, however, we will only point out the boundary conditions in RTD models. For a comprehensive review on this topic, the reader is referred to an in-depth analysis by Frensley [2]. As in any physical system, one would like to find how a system evolves in time with a computable equation of motion. Device transient and high-frequency properties, such as switching times and device admittance (impedance) at high frequencies, require a time-dependent solution of the model function. For device dc I–V characteristics, solutions of the time-independent or steady-state equation of the model function often suffice. In this paper, we identify in each approach a central model equation associated with its model function. A solution for the model function leads to the device terminal properties, such as I–V characteristics.

Envelope Function Models of RTD's. RTD models based on the envelope function description of electron states have been popular and very useful in studying RTD's and other nanoelectronic devices because they are conceptually simple, computationally efficient, and capable of modeling important properties of RTD's. Outline RTD models based on the envelope function in this section to illustrate the main issues. The envelope function description for electron states in semiconductors has been well documented and is familiar to device engineers. It is based on effective mass theory, where the internal crystal potential is integrated into the effective response of carriers to an external applied force, greatly simplifying the treatment of carrier transport in semiconductor devices. For RTD models, since quantum phenomena must be included, the effective mass Schrödinger

equation is invoked to calculate the electron state function, or the envelope wave function, neglecting the rapidly varying periodic component. This is the first major approximation made in the envelope function formalism, which brings about a great simplification, at the price of ignoring the microscopic information of the central cell part of the true wave function. Another major approximation involved in the envelope function approach is that it is limited to pure state calculations.

**Other RTD Models.** Based on the well-known Esaki–Tsu integral formula for the tunneling current, many modifications and improvements have been made. Analytic models for the RTD current such as those offer simple formulas relating the most important physical ingredients of RTD operation but do not adequately predict experimental I–V behavior. On the other hand, as RTD device and circuit developments advance to the stage of practical circuit innovation and implementation, there is a need to bridge the gap between the available RTD physical models and circuit simulation. The RTD quantum models are too complicated and generally not accurate enough to be directly called from a circuit simulator. Recent attempts have begun to incorporate the RTD NDR into circuit simulation models based on SPICE-type computeraided design tools. Therefore, simple analytic models that loosely relate both the essential RTD physical parameters and measured I–V characteristics are desired. Work in this area follows analytical approximations for the I–V characteristics based on transmission calculations with adjustable empirical parameters linked as closely as possible to real physical quantities. It has been shown that such models can accurately reproduce experimental I–V characteristics, which should be a very valuable tool for realistic RTD device and circuit development.

There are several important issues to note when comparing theoretical and experimental results, including the uncertainties in the material and doping profiles of the device, the possible error in the growth data, the material parameters employed such as effective masses and band offsets, and the effects of imperfectly known parasitic impedances on the measured I–V curve. These factors make it very difficult to obtain an accurate prediction or reproduction of experimental I–V characteristics and demand more accurate characterization and calculation of material and structural parameters pertinent to

RTD modeling calculations. Last, there is a well-known issue that is conceptually simple but difficult to include in practice: the inclusion of the series and contact resistances. These resistances modify the device I–V characteristics. It is difficult for all the above models to include an accurate evaluation of these resistances. Usually, a rough estimate or measurement is made to fit the measured I–V curve, which may not be satisfactory for circuit designers if the RTD's being used have a large fluctuation in their values for the resistance, and therefore in their peak and valley voltage values. A recently proposed technique to determine the RTD I–V characteristics experimentally based on microwave reflection coefficient measurement may be useful in this regard.

People now examine RTD dc properties, emphasizing only those that affect potential digital logic circuit applications, since this is where the major impact is expected. Before specific RTD dc properties required by its logic applications are discussed, we note that there are also serious considerations for analog applications, signal processing, and A/D converter applications of RTD's, which are not covered in this paper.

The most important property of an RTD lies in its NDR, which is sustainable to very high frequencies and offers very fast switching speed. Of course, the time-dependent device properties possess interesting and subtle effects that have absorbed a great deal of effort, particularly in relation to device transients and high-frequency behavior. Recent results have shown that RTD's can produce small amounts of power at frequencies above 800 GHz, and calculations predict an NDR response in the terahertz range. An analysis of RTD switching speed requires solving the central transport equations in the time domain. The resulting current transient information can be Fourier transformed into the frequency domain to obtain the admittance, which can in turn be used to construct a small signal circuit model for the analysis of the high-frequency properties. RTD switching characteristics have been investigated by many authors. Despite the impressive high-frequency oscillations that have been demonstrated [4] and theoretical predictions that terahertz frequencies are obtainable, current devices produce only very low levels of output power and have limited application as power sources.

It is hoped that recently proposed schemes for coherently combining the power of RTD's in array form can overcome this limitation. We will not discuss high-frequency



aspects of RTD's in this paper. For realistic applications of RTD's in digital circuits, some of the questions that need to be addressed are: What is required of the dc I–V characteristic for typical digital circuits, e.g., logic gates? How likely is it that these requirements can be attained? What are the major issues concerning the choice of material system and structural considerations?

In addition, there exist other quantum devices, notably the resonant tunneling transistor (RTT), the resonant tunneling hot-electron transistor (RHET), the RITD, and the Esaki TD, all of which exhibit NDR characteristics. Is the RTD more attractive than the others? We will provide a brief comparison among some of those devices in terms of their main features and properties. Before we make the comparison, it is helpful to see what is required from the device NDR characteristics for digital logic applications. First of all, it is important to note that two-terminal device logic circuits, i.e., using RTD's alone, have several limitations and are not adequate for most circuit applications. That is the main reason that circuits employing conventional Esaki TD's did not materialize in the past.

Recent advances in very-high-frequency transistors such as HBT's and HEMT's, however, and the possibility of integrating NDR devices such as RTD's with them, have changed the picture significantly. The combination of these devices now holds great promise for very high speed/functionality circuits. In the next section, we will mainly consider an RTD-HBT-based circuit as an illustration, but certainly RTD-HEMT based circuits and other circuits are also very important and are being pursued.

**Material and Structural Considerations.** For RTD's based on III–V compound materials, the original traditional material system, GaAs(well)/AlGaAs(barrier), has been extended to GaAs/AlAs, InGaAs/AlAs, InGaAs/InAlAs, InAs/AlSb, and others. The work on RTD's built from these material systems is extensive for a summary of the various RTD characteristics achieved in these systems. RTD's made from these systems can achieve a very high peak current density, a sufficient PVR, and a very high speed index (i.e., the ratio of the peak current to the device capacitance). At this time, the GaAs/GaAlAs and InGaAs/AlAs (on InP substrates) systems are the strongest candidates for actual circuit insertion. The InGaAs/AlAs system is clearly superior in terms of its intrinsic properties, but GaAs/GaAlAs IC fabrication technology is significantly more

mature in general. The focus now is on low power at moderately high frequencies (tens of gigahertz), as there are other more conventional high-frequency solutions available if power is not the primary objective. In this regard, a variation of the InGaAs/AlAs system has come to the fore. It contains a modified InGaAs well with extra In inserted, either in the form of a higher alloy concentration than called for by lattice matching or a small number of pure InAs central layers.

Either way, the extra In lowers the resonance energy in the well so that the peak voltage is lowered correspondingly. The tradeoff is that the peak current decreases as the resonance is lowered, so a compromise is required. The lower voltage is absolutely essential if low power is to be achieved. For that purpose, an even better system is the InAs/AlSb/GaSb RTD, or a variation thereof, which will be explained shortly.

We now make a comparison between RTD's and other quantum devices with NDR characteristics. RTT's and RHET's, being three-terminal devices, have the advantage that the NDR can be controlled by the voltage applied to the third terminal, an attractive feature for circuit design, since it provides isolation between different circuit stages. This allows better control of device operation and gain. Although RTT operation has been demonstrated [5], it is extremely difficult to make a low resistive contact to the RTT base. On the other hand, RHET's have limited gain due to scattering in the base and are difficult to fabricate [6]. However, this controllable NDR characteristic can be obtained with RTD's alone by connecting it in series with an FET or an HBT.

Another device whose operation is based on electron tunneling, the Esaki or tunnel diode, is the original quantum device with an NDR I-V curve. At that time, only discrete devices were possible. Now, there is no reason that they cannot also be integrated with HBT's or HEMT's. The challenges are different from those for RTD's in that it is the doping that varies instead of the composition. One or the other may be more appropriate for a given application. A comprehensive comparison among these devices with an in-depth analysis is of current interest, and research is ongoing on both device and circuit aspects.

It is generally agreed that the continued miniaturization of transistors and IC's may open a revolutionary regime for novel semiconductor devices and circuits. Research in

nanoelectronics today stands at a frontier of semiconductor science and engineering. The RTD is considered to be a major nanoelectronic device at the center of nanoelectronic research. In this review, we have addressed the following questions. How well do we understand RTD device operation? How accurately are we able to model its I–V characteristics and other properties? What basic requirements are there for application in digital logic in terms of the dc I–V characteristics? How realistic it is that the desired I–V characteristics can be attained with available material and device structures? These issues were discussed, and recent accomplishments as well as impediments were reviewed.

Numerical modeling is playing an increasingly important role as a tool for gaining insight into nanoelectronic device operation and providing guidance for device design. Quantum transport modeling and computer simulation tools will be very valuable for conceiving new device concepts and exploring novel nanostructures. Sophisticated RTD models have been developed with varying levels of success in reproducing and predicting the I–V characteristics. Accurate predictions of the I–V characteristics for different material systems and device structures are difficult to achieve. This is due to uncertainties in material growth and device process data as well as in the material parameters, especially when complicated materials and structures are involved.

Therefore, more accurate characterization and calculation of material and structural parameters are needed for further development. We also note that RTD models, including multiband and scattering effects, can become quite computationally expensive and demand significant human and computer resources, including a good understanding of advanced quantum physics. Tradeoffs between modeling cost and accuracy should be considered for specific applications. RTD's are very promising nanoelectronic devices for digital logic circuit application due to their intrinsically high-speed NDR characteristics at room temperatures. Integrated circuits made from the III–V semiconductors are the most likely opportunity for technology insertion, but if a material system compatible with silicon technology could be achieved, the circuits could also be developed for silicon very large scale integration.

Another concern for practical RTD applications is that achieving uniformity in resonant tunneling current, which depends exponentially on the parameters of the

tunneling barriers, presents a serious challenge for circuit design and performance. However, recent progress indicates that in situ probing of the epitaxial growth, with real-time feedback into the growth process, may adequately achieve this goal.

Nanoscience and nanotechnology are broad fields, highly interdisciplinary in breadth and depth. It may take years for RTD's to become routine workhorses in future electronics. Whether or not RTD's will achieve their promise may also be aided by advances in other areas of quantum devices, such as single electronic devices and quantum MOS transistors now under active research.

The RTD model with the parabolic potential pit can be used for engineering calculations when creating RTD with parabolic quantum pits, because it fast and easy to interpret.

The significance of the work is novelty and availability of RTD topological structure in his approach to modeling (analyticity preserving models, wherever it possible) and investigation the possibilities of using application in devices meaningful logic.

Further work in this direction should be devoted to consistent inclusion in the model parasitic effects that occur in a real RTD.

**RESONANT TUNNELING DIODE, PARABOLIC QUANTUM WELL, MODELING**

## ЗМІСТ

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ, СИМВОЛІВ, ОДИНИЦЬ, СКОРОЧЕНЬ І  
ТЕРМІНІВ

ВСТУП

РОЗДІЛ 1. МОЖЛИВА ТОПОЛОГІЯ РЕЗОНАНСНО-ТУНЕЛЬНИХ ДІОДІВ

1.1. Технології виготовлення РТД

1.1.1. Осадження металоорганічних сполук з газової фаза

1.1.2. Молекулярно-променева епітаксія

1.2. Матеріали для виготовлення РТД

1.3. Двобар'єрні структури з різким переходом між гетерограницями

1.4. Варіанти РТД з варізонних напівпровідників

1.4.1. РТД з трикутною потенціальною ямою

1.4.2. РТД з параболічною потенційною ямою

РОЗДІЛ 2. МОДЕЛЮВАННЯ РТД МЕТОДОМ ОГИНАЮЧОЇ ФУНКЦІЇ

2.1. Припущення та апроксимації при моделюванні методом огинаючої  
функції

2.2. Метод матриць передачі для знаходження коефіцієнта передачі  
двобар'єрної квантової системи

2.3. Формула Тсу-Есакі

РОЗДІЛ 3. МОДЕЛЬ РТД З ПАРАБОЛІЧНОЮ ПОТЕНЦІАЛЬНОЮ ЯМОЮ ЗА  
УМОВИ СТАЛОЇ ЕФЕКТИВНОЇ МАСИ

3.1. Об'єкт моделювання

3.2. Припущення, прийняті в моделі РТД

3.3. Потенціальний рельєф РТД з параболічною ямою, параметри структури

3.4. Хвильова функція в I та V областях

3.5. Хвильова функція в II та IV областях

3.6. Хвильова функція в III області

3.7. Математична модель

## РОЗДІЛ 4. КОЕФІЦІЄНТ ПЕРЕДАЧІ ДБКС

- 4.1. Розрахунок коефіцієнта передачі ДБКС
- 4.2.  $D(E)$  в залежності від прикладеної зовнішньої напруги
- 4.3.  $D(E)$  в залежності від висоти «допоміжних» бар'єрів
- 4.4.  $D(E)$  в залежності від довжини активної області РТД

## РОЗДІЛ 5. ВАХ РЕЗОНАНСНО-ТУНЕЛЬНОГО ДІОДА З ПАРАБОЛІЧНОЮ ПОТЕНЦІАЛЬНОЮ ЯМОЮ

- 5.1. Розрахунок ВАХ резонансно-тунельного діоду
- 5.2. ВАХ резонансно-тунельного діоду в залежності від геометричних розмірів активної області
- 5.3. ВАХ резонансно-тунельного діоду в залежності від положення рівня Фермі
- 5.4. ВАХ резонансно-тунельного діоду в залежності від температури
- 5.5. ВАХ резонансно-тунельного діоду при малій концентрації електронів в резервуарах

## РОЗДІЛ 6. ВИКОРИСТАННЯ РТД З ПАРАБОЛІЧНОЮ ПОТЕНЦІАЛЬНОЮ ЯМОЮ В БАГАТОЗНАЧНІЙ ЛОГІЦІ

- 6.1. Переваги у застосуванні багатозначної логіки
- 6.2. Можливі сфери застосування РТД з параболічною потенціальною ямою

## ВИСНОВКИ

## СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

Додаток А

Додаток Б

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ, СИМВОЛІВ, ОДИНИЦЬ, СКОРОЧЕНЬ І  
ТЕРМІНІВ

ВАХ – вольт-амперна характеристика

ДБКС – двобар'єрна квантова система

ЗП – заборонена зона

КМОП – комплементарна логіка на транзисторах метал-окис-напівпровідник

НВЧ – надвисокі частоти

ПТШ – польовий транзистор з затвором Шоттки

РТД – резонансно-тунельний діод

$k_B = 1,38 \cdot 10^{-23}$  Дж/К – стала Больцмана

$\hbar = 1,054 \cdot 10^{-34}$  Дж/с – зведена стала Планка

$f_{\text{Ф-Д}}(E, T) = 1 / \left( \exp \frac{E - E_{\text{Ф}}}{k_B T} + 1 \right)$  – функція Фермі-Дірака

$D(E)$  – коефіцієнт передачі

$R(E)$  – коефіцієнт відбивання

## ВСТУП

До недавнього часу фізики та інженери при моделюванні електронних компонентів користувалися т. зв. «напівкласичним» наближенням, оскільки електрони в них поводити себе подібно до класичних частинок, а квантові ефекти у більшості випадків вдавалося враховувати ефективно. Але розвиток електроніки з-поміж іншого передбачає необхідність зменшення геометричних розмірів електронних компонентів [7], тому методи моделювання таких компонентів повинні враховувати їх квантові ефекти, що проявляються зі зменшенням характерних розмірів.

На сьогодні вже створені наноструктури, підбором параметрів кристалічної решітки яких можна обмежити рух електронного газу у різних вимірах. Прикладом такої структури є резонансно-тунельний діод, структура, у якої в поперечному до площини шарів напрямком потенціальний рельєф для електронів складається з потенціальних бар'єрів та ям, що впливає на характер руху носіїв заряду у вказаному напрямку та перенесення струму [7].

Не дивлячись на, здавалося б, простий принцип функціонування РТД, моделювання таких пристроїв ускладнюється за рахунок багатьох факторів [8]. Виходом з цієї ситуації є застосування в умовах існуючих формалізмів двох основних різновидів моделей [9]: фізико-топологічної та електричної. Проте, сучасні фізико-топологічні моделі, на жаль, дають лише грубі якісні розрахунки, а електричні моделі в основному застосовується для аналізу електричних схем. Тому на даний момент нема моделей, які б добре узгоджувались з отриманими експериментальними ВАХ [8]. Таким чином, пріоритетним напрямком практичного вдосконалення моделей всіх формалізмів є створення комбінованих моделей, бо саме такі моделі, як правило, і дозволяють отримати результати, що узгоджуються з експериментом [8].

Одним з видів РТД є змодельований в даній роботі тунельно-резонансний діод з параболічною потенціальною ямою, який є не дуже широко дослідженим: існують



експериментальні дані ВАХ [10] такої структури, проте, створенням моделі будь-якого формалізму ще ніхто не займався.

Результатом виконаної роботи модель РТД з параболічною потенціальною ямою, що заснована на формалізмі огинаючої функції і максимально приведена до аналітичного вигляду, що в свою чергу має переваги над численним [11]. Показана можливість використання РТД такої топології в пристроях багатозначної логіки, адже, згідно експериментальних даних [10], така структура має кількість рівновіддалених піків ВАХ, що може налічувати більше чотирьох.

Викладена модель може слугувати основою для подальших кроків, щодо її удосконалення: врахування припущень, що прийняті в даній моделі, та паразитних ефектів в РТД.

## РОЗДІЛ 1

### ТОПОЛОГІЯ РЕЗОНАНСНО-ТУНЕЛЬНИХ ДІОДІВ

#### 1.1. Технології виготовлення РТД

Виготовлення РТД стало можливим з розвитком технологій молекулярно-променевої епітаксії (англомовна аббревіатура – «МВЕ», molecular beam epitaxy) та осадження металоорганічних сполук з газової фази (англомовна аббревіатура – «МОСVD», metal-organic chemical vapor deposition). Ці два методи спочатку були розроблені для мікроелектроніки, але згодом знайшли застосування в наноелектроніці.

##### 1.1.1. Осадження металоорганічних сполук з газової фази

Хімічне осадження з газової фази широко використовується для створення напівпровідникових епітаксціальних структур [12]. Воно включає орієнтоване зростання монокристалічної плівки з матеріалу, що надходить з газової фази, на підходящій для цих цілей монокристалічній підкладці. Газова середовище може містити як пари кристалізується матеріалу, так і газоподібні реагенти, що здатні утворити необхідний для епітаксціального росту матеріал в процесі хімічних реакцій на підкладці. Осадження плівок зазвичай проводиться у проточних камерах, де газ-носій, що містить відповідні реагенти, пропускається над нагрітою монокристалічній підкладкою. Хімічний склад, тиск газу і температура підкладки є головними параметрами, що контролюють процес осадження та властивості осаджених плівок.

Серед розмаїття методів проведення хімічного осадження з газової фази використання металоорганічних сполук в якості вихідних газоподібних реагентів дає найкращий результат при створенні досконалих надграток з різкою границею

поділу і товщиною до одного осадження моношару. Термін «металоорганіка» відноситься до широкої групи сполук, що мають хімічні зв'язки метал-вуглець, а також метал-кисень-вуглець і координаційні зв'язки між металами і органічними молекулами. У практиці хімічного осадження плівок з металоорганічних сполук переважно використовуються алкіл металів з метилової ( $\text{CH}_3$ ) і етилової ( $\text{C}_2\text{H}_5$ ) групами радикалів. Більшість з них – це рідини при кімнатній температурі. Їх вводять в реакційну камеру в потоці газу-носія, попередньо насиченого парами даного з'єднання в барботері, де газ-носії проходить («пробулькує») через рідке металоорганічне з'єднання. Осадження може проводитися як при атмосферному, так і при зниженому тиску реагентів у камері.

Установка для хімічного осадження з металоорганічних сполук показана на рисунку 1.1 у варіанті, типовому для осадження GaAs та гетероструктур GaAlAs.

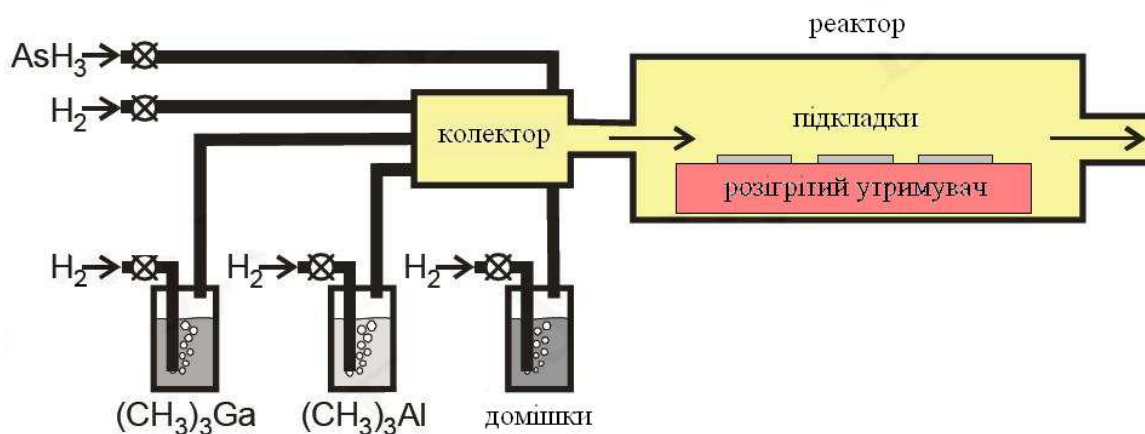


Рис. 1.1. Принципова компоновка установки для хімічного осадження плівок з газової фази металоорганічних сполук

Для формування різких меж розділу шляхом зміни хімічного складу осаджуваного матеріалу або легуючої домішки необхідно швидко змінювати склад газової суміші в реакційній камері. Для цього обсяги змішувальної камери і самої реакційної камери повинні бути мінімізовані. Зміна складу газової суміші має відбуватися без зміни загального потоку газу через реакційну камеру. Найбільш різкі міжфазні границі вдається сформувати з використанням режимів швидкісного нагріву, коли тривалість витримки підкладки при необхідній для осадження

температурі обмежена 30-60 с. При цьому значно зменшується дифузійний перерозподіл компонентів в околицях границь розділу.

Хімічне осадження з газоподібних металоорганічних сполук забезпечує осадження практично всіх бінарних, трійних і четверних напівпровідникових сполук  $A^{III}B^V$  з високим ступенем їх стехіометричності. Цей метод успішно застосовується і для осадження інших напівпровідників, таких як  $A^{II}B^{VI}$ , а також оксидів. За допомогою цього методу формуються не тільки суцільні епітаксіальні плівки, а й квантові ниті і квантові точки.

Головною перевагою методу є можливість одночасної обробки великої кількості підкладок, що як не можна краще відповідає вимогам масового виробництва. Обмеженням методу є важко контрольоване забруднення матеріалу плівок вуглецем, а також необхідність вживати серйозних заходів безпеки при роботі з гідридами, які токсичні та вибухонебезпечні.

### 1.1.2. Молекулярно-променева епітаксія

Молекулярно-променева епітаксія з'явилася як розвиток методу хімічного осадження плівок в надвисокий вакуумі [12]. Відзначимо, що тиск залишкових газів нижче  $10^{-7}$  мм. рт. ст. вважається високим вакуумом, а тиск  $10^{-11}$  мм. рт. ст. та нижче відноситься до надвисокого вакууму. Довжина вільного (без взаємних зіткнень) пробігу атомів і молекул у таких умовах досягає десятків метрів.

При молекулярно-променевої епітаксії реагенти вводяться в робочу камеру у вигляді молекулярних чи атомних потоків. Ці потоки формуються випаровуванням матеріалу всередині замкнутої комірки з дуже малим вихідним отвором. Вона називається ефузійною, або коміркою Кнудсена. Випаровуванні усередині неї молекули та атоми, виходячи з отвору малого діаметру в надвисокий вакуум, рухаються без зіткнень, тобто балістично, створюючи таким чином добре спрямовані потоки частинок.

Для молекулярно-променевої епітаксії зазвичай використовують кілька ефузійних комірок - по одній комірці на кожен матеріал, що конгуентно випаровується. Крім комірок для осадження самих матеріалів повинні бути також джерела легуючих домішок. Поряд з випаровуванням осаджуваного матеріалу всередині ефузійної комірки молекулярні потоки можуть формуватися за таким же принципом і з парів або газоподібних сполук. Для цього їх вводять в надвисоковакуумну камеру через спеціальні підігрівальні сопла.

Конструкція типової установки для молекулярно-променевої епітаксії схематично показана на рис. 1.2. Її основними частинами крім уже названих ефузійних або газових комірок є тримач підкладки з підігрівом та система моніторингу процесу осадження. Всі ці пристрої поміщено до надвисоковакуумної камери.

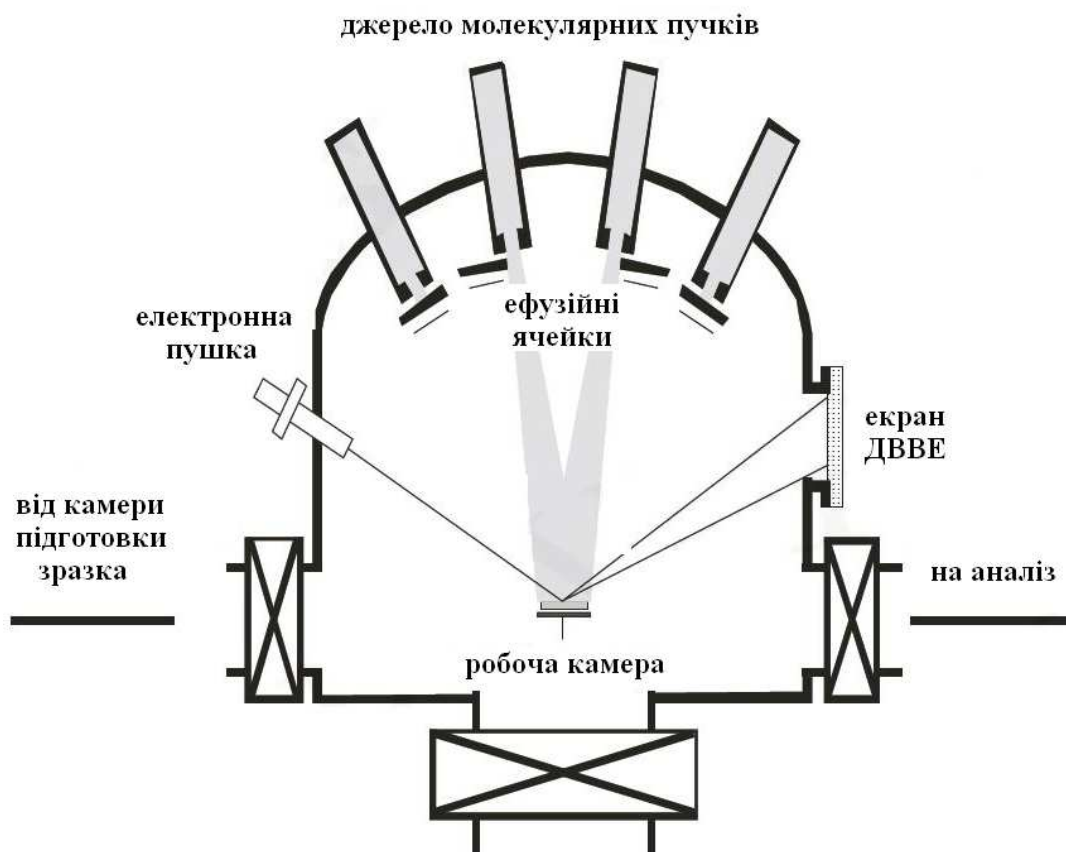


Рис. 1.2. Принципова схема компонування установки для молекулярно-променевої епітаксії

Для оперативного контролю і управління процесом осадження зазвичай використовують дифракцію відбитих високоенергетичних електронів. Для цього електрони з енергією 10-15 кеВ направляють на підкладку з осадженою плівкою під ковзаючим кутом. Дифракція відбитих електронів реєструється на екрані, розташованому на протилежній від електронної гармати стінці камери. Положення та інтенсивність дифракційних максимумів несуть інформацію про структуру і товщину поверхневого шару, що й використовується для моніторингу осадження.

Молекулярно-променевої епітаксії широко застосовується для формування високоякісних надграток. Слід нагадати, що для цих цілей підходить і більш продуктивний метод хімічного осадження з газової фази металоорганічних сполук. Проте за дефектності, складом неконтрольованих домішок і різкості міжфазних границь цей метод поступається молекулярно-променевої осадженню. Так само, як і у випадку хімічного осадження з газової фази, молекулярно-променевої епітаксії забезпечує формування як суцільних нанорозмірних плівок, так і (за певних умов осадження) квантових шнурів та квантових точок.

## 1.2. Матеріали для виготовлення РТД

Основними матеріалами для виготовлення РТД являються напівпровідникові сполуки типу  $A^{III}B^V$ , що характеризуються великим діапазоном значень ширини забороненої зони. Таким чином можна ефективно змінювати висоту потенційного бар'єру в РТД.

Найбільш вивченими є РТД, в яких в якості матеріалу для квантової ями використовується GaAs с бар'єрами з AlAs або AlGaAs. Відпрацьована технологія виготовлення таких структур, що дозволяє стабільно отримувати діоди з від'ємною динамічною провідністю при кімнатній температурі.

Використання твердих розчинів, наприклад AlGaAs, дозволяє створювати гетероструктури з неперервною зміною складу. В таких гетероструктурах ширина забороненої зони може *змінюватися неперервно*.

Для виготовлення гетероструктур важливо узгодження параметрів кристалічної решітки двох контактуючих матеріалів, хоча останнім часом з'явилося багато робіт по РТД з напруженими шарами [13]. Якщо два матеріали з сильно відмінними сталими решітки вирощуються один на одному, то при збільшенні товщини шарів на границі розділу з'являються великі деформації і дислокації невідповідності [14]. Деформації з'являються незалежно від того, чи є перехід між двома матеріалами плавним, чи ні. Для зменшення деформації сталі кристалічних решіток повинні відрізнятись якомога менше. Саме тому, при вивченні гетероструктур частіше використовують тверді розчини AlGaAs, бо арсеніди алюмінію та галію мають майже однакові параметри решітки. В такому випадку GaAs у вигляді монокристалу є ідеальною підкладною для росту гетероструктури. Іншою підкладкою являється фосфід індію InP, котрий використовується в комбінації з твердими розчинами GaAs/InAs, AlAs/AlSb та ін. [15]

Крім РТД на основі гетеропари AlGaAs / GaAs створені структури на основі InP / InGaAs, AlAs / InGaAs, AlGaAs / InGaAs.

Потреба в пошуках нових матеріалів для РТД пов'язана з можливістю досягти більшої густини струму в матеріалах з більш високим, ніж у GaAs, допустимим ступенем легування та великих потужностей НВЧ приладів. Обнадійливі результати за величиною від'ємної диференціальної провідності і значень пікових струмів отримані зі структурами InAlAs / InGaAs, AlAs / InGaAs.

Інтерес також становлять матеріали на основі азоту: AlN, GaN, InN, застосовувати які почали досить недавно. Їх основною відмінністю є велика ширина забороненої зони, а також висота потенціальних бар'єрів в резонансно-тунельних структурах на їх основі [16].

### 1.3. Двобар'єрні структури з різким переходом між гетерограницями

Резонансно-тунельний діод з прямокутною потенціальною ямою – один з найбільш досліджуваних видів РТД, який вже використовують в аналогових, цифрових, та аналогово-цифрових (інвертор, компаратор) схемах [14]. У загальному випадку такий резонансно-тунельний діод являє собою періодичну структуру, яка складається з послідовно розташованих квантових ям, розділених потенційними бар'єрами, з електричними контактами до двох крайніх протилежних областей. Найчастіше це двобар'єрні структури з одною квантовою ямою та симетричними характеристиками бар'єрів, оскільки, в міру збільшення значення кількості квантових ям, все важче реалізувати умови для узгодженого резонансного переносу носіїв заряду [17]. Такі діоди працюють на частотах до декількох ТГц.

Основною особливістю резонансно-тунельних діодів є наявність на його вольт-амперній характеристиці області від'ємного диференціального опору, що зображено на рис 1.3, яка є основою для більшості його практичних застосувань, а також його найкращого хвильового узгодження короткохвильової частини спектру.

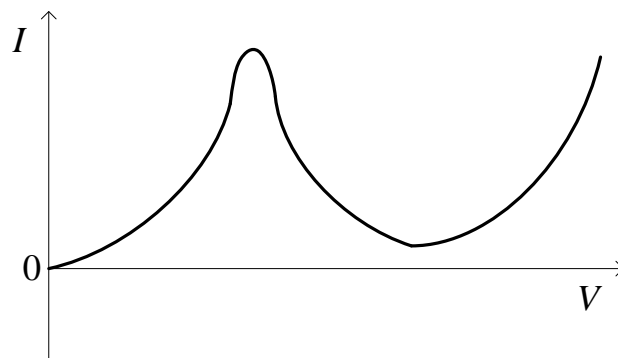


Рис. 1.3. Вольт-амперна характеристика РТД з прямокутною потенціальною ямою

В таблиці 1.1 наведено переваги використання РТД та ПТШ над КМОП в цифрових схемах [14].



**Кількість елементів, необхідних для виконання логічних функцій для різних типів елементної бази**

Тип схеми	КМОП	РТД/ПТШ
Дворівнева логіка XOR	16	4
Дворівнева мажоритарна логіка	18	5
Елемент пам'яті (9 станів)	24	5
Схеми NO-OR та NO-AND з тригером	12	4

#### 1.4. Варіанти РТД з варізонних напівпровідників

Зміна молярної долі одного з компонентів в сполуках, наприклад Al в AlGaAs, призводить до того, що потенціальний рельєф (дно зони провідності) такої структури буде змінюватися по тому ж закону, що й зміна молярної долі компонента (необхідно це аргументувати за допомогою емпіричних формул, які пов'язують висоту потенціального бар'єру в ЗП та молярну долю Al у вказаній сполуці). Завдяки цьому можна отримати прилад з потрібним потенціальним рельєфом, від якого залежать характеристики та властивості цього приладу. На такому принципі побудовані РТД з варізонних напівпровідників.

##### 1.4.1. РТД з трикутною потенціальною ямою

РТД з трикутною потенціальною ямою – один з різновидів РТД з варізонного напівпровідника, на рисунку 1.4 показано його рельєф дна зони провідності.

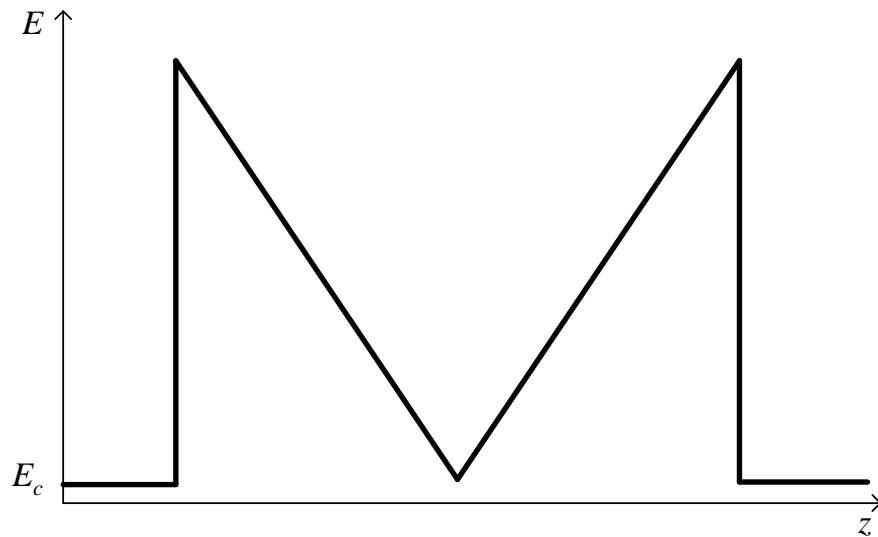


Рис. 1.4. Рельєф дна зони провідності в РТД з трикутною потенціальною ямою

Як показано в роботі [18], основною характеристикою РТД з такою топологічною структурою є високі значення контрастності ВАХ, що досягають 6, а також наявність ділянки з від'ємною диференційною провідністю.

#### 1.4.2. РТД з параболічною потенційною ямою

Об'єктом розгляду диплому є РТД з параболічною потенційною ямою. Особливість РТД з таким потенційним рельєфом, як буде визначено далі, полягає в тому, що завдяки знаходженню метастабільних рівнів на однакових відстанях один від одного, піки струму також рівновіддалені, а також в їх кількості, що на відміну від «класичного» РТД, може перевищувати 2-3 піки. Таким чином дана структура може використовуватися в багатозначній логіці. На рисунку 1.5 показана структури зміна молярної долі  $x$  алюмінію в сполуці  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , яка відповідає вигляду потенціального рельєфу.

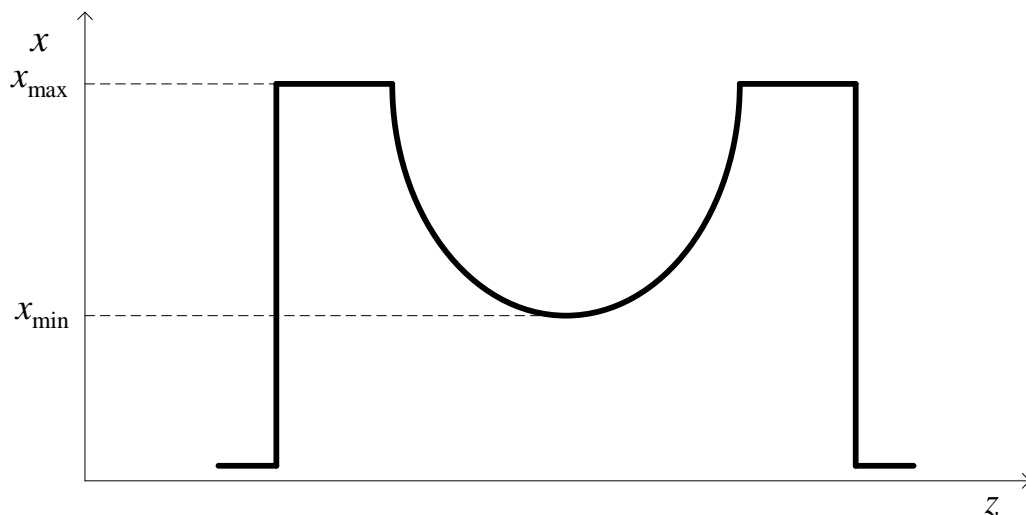


Рис. 1.5. Зміна молярної доли Al в AlGaAs в залежності від координати в РТД з параболічною потенціальною ямою

Як буде згодом показано, завдяки параметрам  $x_{\max}$  та  $x_{\min}$  можна задавати висоту потенціального бар'єру, від чого залежить кількість піків струму на ВАХ, а завдяки зміні довжини «параболічної» області можна змінювати положення метастабільних рівнів, що призведе до зміни «чутливості» струму РТД в залежності від напруги. З кожним піком струму пов'язана ділянка з від'ємною диференційною провідністю, котра йде одразу після ділянки росту струму. Зі зменшенням товщини «додаткових» бар'єрів збільшується загальний струм; струм в максимумах ВАХ збільшується, перші піки стають більш виразнішими.

## РОЗДІЛ 2

### МОДЕЛЮВАННЯ РЕЗОНАНСНО-ТУНЕЛЬНИХ ДІОДІВ МЕТОДОМ ОГИНАЮЧОЇ ФУНКЦІЇ

2.1. Модель РТД огинаючої функції, припущення та апроксимації, що приймаються при моделюванні методом огинаючої функції

Як зазначено в джерелі [1] моделі РТД, засновані на описі огинаючою функцією електронних станів були популярні і дуже корисні в вивченні РТД та інших наноелектронних пристроїв, так як вони концептуально прості, чисельно ефективні і здатні моделювати важливі властивості РТД. Метод огинаючої функції електронних станів в напівпровідниках заснований на використанні теорії ефективної маси, де вплив внутрішнього потенціалу кристалічної решітки на носії заряду інтегровано в поняття ефективної маси носіїв, що значно спрощує розгляд переносу носіїв заряду в напівпровідникових пристроях. Для моделей РТД, оскільки повинні бути враховані квантові ефекти, в рівняння Шредингера замість звичайної маси включена ефективна маса. Це перше велике припущення, зроблене у формалізмі огинаючої функції, що призводить до великих спрощенням.

В моделі огинаючої функції електронна провідність в квантових системах визначається коефіцієнтом передачі  $D(E)$ , що залежить від поздовжньої складової енергії електронів. Цей коефіцієнт показує, яка частина електронів «пройде» крізь бар'єр.

2.2. Метод матриць передачі для знаходження коефіцієнта передачі двобар'єрної квантової системи

Метод матриць передачі полягає в тому, що, представляючи хвильову функцію електрона як суму падаючої та відбитої хвильової функції в окремих

областях потенціального рельєфу, можна знайти коефіцієнти передачі та відбиття такої хвильової функції електрона через границю суміжних областей, тобто знайти, яка частина амплітуди падаючої хвильової функції «проходить» через границю в суміжну область, а яка відбивається від неї. Для цього потрібно знати вид хвильової функції електрона в усіх точках простору структури, а також її похідну.

Тобто хвильова функція  $i$ -тої області представляється у вигляді:

$$\Psi_i = A_i f_i + B_i g_i, \quad (2.1)$$

де  $f_i$ ,  $g_i$  – падаюча та відбита хвильова функція  $i$ -тої області відповідно, а  $A_i$ ,  $B_i$  - відповідно їхні амплітуди.

Похідна хвильової функції  $i$ -тої області буде мати наступний вигляд:

$$\Psi_i' = A_i f_i' + B_i g_i', \quad (2.2)$$

де  $f_i'$ , та  $g_i'$  – похідні падаючої та відбитої хвильової функції  $i$ -тої області відповідно, що нормовані на ефективну масу області.

Використовуючи граничні умови, за яких на границі двох областей значення хвильових функцій та їх похідний, що нормовані по ефективній масі, повинні бути відповідно рівними, отримаємо систему рівнянь, яку можна записати в матричному вигляді:

$$\begin{bmatrix} f_i & g_i \\ f_i' & g_i' \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} A_i \\ B_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_{i+1} & g_{i+1} \\ f_{i+1}' & g_{i+1}' \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} A_{i+1} \\ B_{i+1} \end{bmatrix}, \quad (2.3)$$

Щоб краще уявити вищезазначене, скористуємося рисунком 2.1, на якому зображено процес «проходження» хвильової функції з однієї області в іншу.

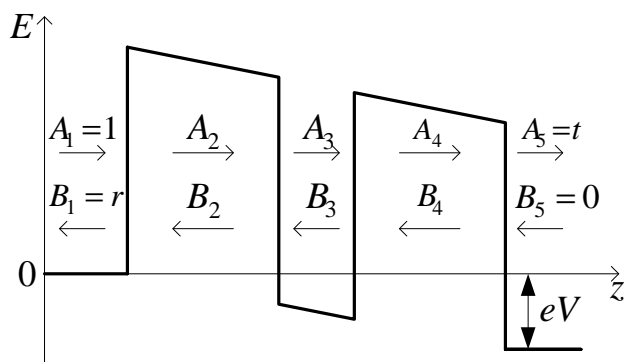


Рис. 2.1. Потенціальний профіль РТД з лінійним зміщенням, амплітуди падаючих та відбитих хвильових функцій

Повернемося до виразу (2.3) та помножимо обидві частини рівняння на

$\begin{bmatrix} f_{i+1} & g_{i+1} \\ f'_{i+1} & g'_{i+1} \end{bmatrix}^{-1}$ , таким чином воно зведеться до наступного вигляду:

$$\begin{bmatrix} A_{i+1} \\ B_{i+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_{i+1} & g_{i+1} \\ f'_{i+1} & g'_{i+1} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} f_i & g_i \\ f'_i & g'_i \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} A_i \\ B_i \end{bmatrix} = T_{i,i+1} \begin{bmatrix} A_i \\ B_i \end{bmatrix}, \quad (2.4)$$

де під матрицею  $T_{i,i+1}$  слід розуміти матрицю передачі хвильової функції з області  $i$  області в  $i+1$ . Такі матриці мають властивість мультиплікативності. Загальна матриця буде дорівнювати:

$$T = T_{i,i+1} T_{i-1,i} \times \dots \times T_{1,2} = \begin{pmatrix} t_{11} & t_{12} \\ t_{21} & t_{22} \end{pmatrix}, \quad (2.5)$$

$$\begin{bmatrix} A_{i+1} \\ B_{i+1} \end{bmatrix} = \begin{pmatrix} t_{11} & t_{12} \\ t_{21} & t_{22} \end{pmatrix} \cdot \begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \end{bmatrix}. \quad (2.6)$$

Враховавши те, що  $A_1 = 1$ ,  $B_1 = r$ ,  $A_{i+1} = t$ ,  $B_{i+1} = 0$ , отримаємо:

$$\begin{bmatrix} t \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{pmatrix} t_{11} & t_{12} \\ t_{21} & t_{22} \end{pmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ r \end{bmatrix} \quad (2.7)$$

$$t = t_{11} - t_{12} \frac{t_{21}}{t_{22}} \quad (2.8)$$

Кількість електронів, що пройшли крізь двобар'єрну квантову систему [19] пропорційна коефіцієнту передачі:  $D = t \cdot t^*$ .

### 2.3. Формула Тсу-Есакі

Запишемо формулу Тсу-Есакі, що виражає залежність струму РТД від напруги виражену через коефіцієнт передачі  $D(E)$  [20]:

$$J = \frac{em^*k_bT}{2\pi^2\hbar^3} \int_0^\infty D^*(E)D(E) \cdot \ln \left( \frac{1 + \exp\left[\frac{(E_f - E)}{(k_bT)}\right]}{1 + \exp\left[\frac{(E_f - E - eV)}{(k_bT)}\right]} \right) dE, \quad (2.9)$$

де  $e$  – заряд електрона,  $m^*$  – ефективна маса електрона в структурі,  $k_B$  – стала Больцмана,  $T$  – температура кристалічної решітки,  $\hbar$  – стала Планка,  $D(E)$  – коефіцієнт передачі,  $D^*(E)$  – комплексно спряжена величина до  $D(E)$ ,  $E_F$  – рівень Фермі в структурі,  $E$  – енергія електрона,  $V$  – напруга на діоді.

В формулі (2.9) під логарифмом стоїть вираз, що характеризує різницю електронів, що рухаються в обидва боки вздовж осі координат, тобто вираз враховує рух електронів в обидва боки РТД.

## РОЗДІЛ 3

### МОДЕЛЬ РТД З ПАРАБОЛІЧНОЮ ПОТЕНЦІАЛЬНОЮ ЯМОЮ ЗА УМОВИ СТАЛОЇ ЕФЕКТИВНОЇ МАСИ

#### 3.1. Об'єкт моделювання

РТД з параболічною потенціальною ямою – напівпровідникова структура, яка, завдяки параболічному профілю легування, має відповідний потенційний рельєф. Ця структура з'єднується з контактними площадками масивних ділянок відносно вузькозонного матеріалу. Таким чином РТД можна умовно поділити на 3 області: лівий та правий «резервуари», а також активну область. Резервуари мають високий рівень легування (звичайно донорними домішками), і слугують джерелом носіїв заряду. Нижче описано процес побудови математичної моделі РТД, виходячи з прийнятих припущень та уявлень про електронний транспорт.

#### 3.2. Припущення, прийняті в моделі РТД

Скористуємося переліком припущень, що прийняті в джерелі [19] для РТД з прямокутною потенціальною ямою, так як ці припущення відповідають і для моделі РТД з параболічною потенціальною ямою:

– в переносі заряду беруть участь лише електрони зони 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;

– 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  $D(E)$ , а також певну ймовірність від неї відбитись,  $R(E) = 1 - D(E)$ ;



– 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;

– Взаємодія між електронами в «активній» частині пристрою відсутня. На форму потенціального бар'єру впливає лише прикладена напруга, і не впливає просторовий заряд електронів;

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

– Ефективна маса в активній області РТД вважається постійною і дорівнює ефективній масі електрона в резервуарі;

– Зміна температури не впливає на параметр  $E_{\phi}$ ;

– Потенціал напруги змінюється лінійно на всій активній області РТД, а спад напруги на резервуарах не враховується, оскільки вони сильно леговані.

### 3.3. Потенціальний рельєф РТД з параболічною ямою, параметри структури

На рис. 3.3.1 зображено потенційний рельєф активної області такої структури без прикладення до неї зовнішньої напруги  $U_{lat}(z)$ , та зміну потенціалу за прикладеної напруги  $U_{lin}(z)$ . Активна область починається в точці з координатою  $z = 0$  та має довжину  $L = 2b + a$ . Решту простору займають резервуари.

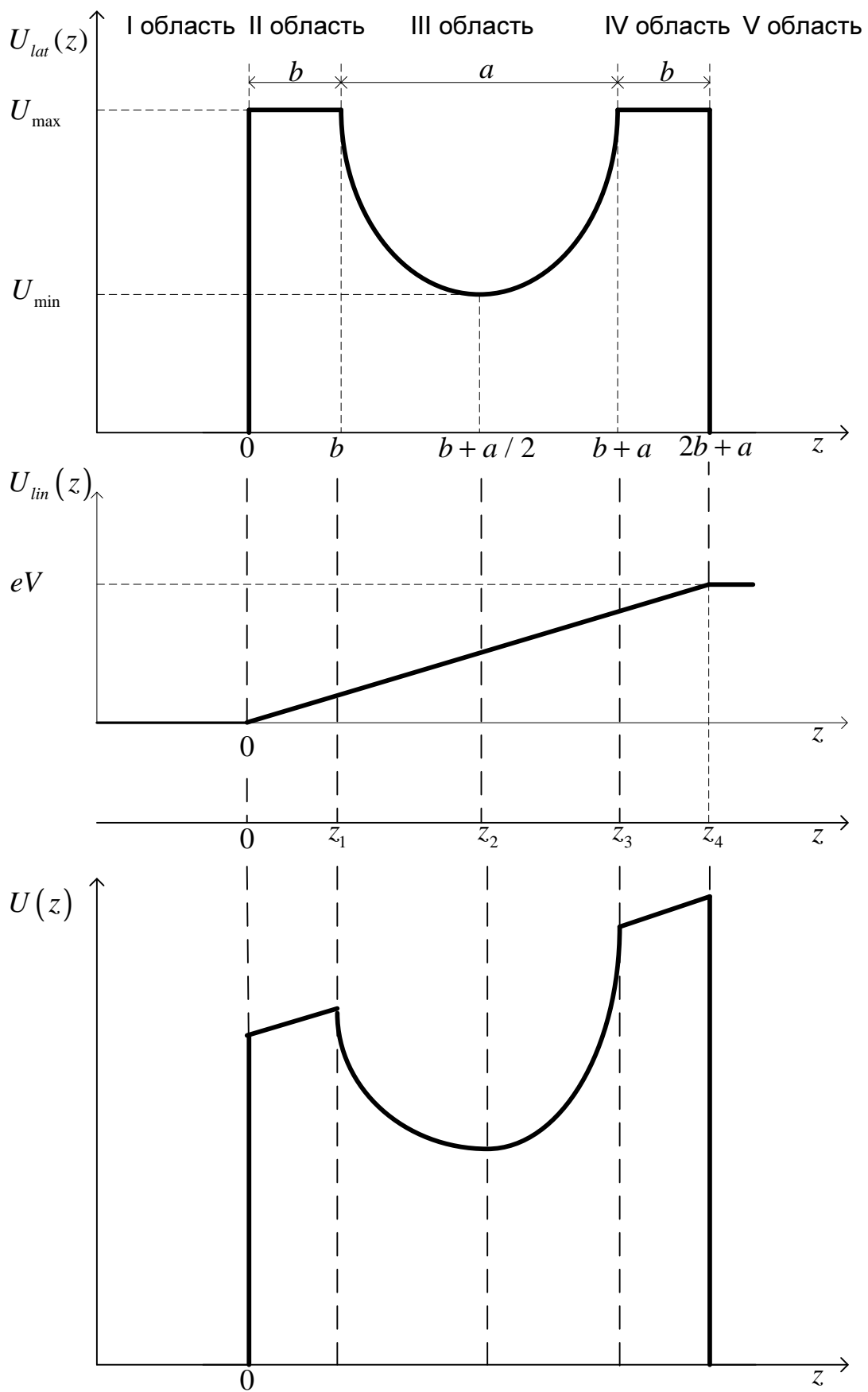


Рис. 3.1. Потенціальний рельєф РТД з параболічною ямою

Для зручності, рисунок 3.1 поділено на області; кожна така область характеризується своїм потенційним рельєфом. Доцільно буде розглядати не структуру в цілому, а виділені окремі області, так як хвильове рівняння кожної з них буде мати характерний вигляд. Такий вигляд визначається потенційним рельєфом області. Варто зауважити, що розв'язком рівняння Шредингера області I та V, а також II та IV, будуть однакові функції відповідно.

Вигляд  $U_{lat}(z)$  та  $U_{lin}(z)$  будуть задавати наступні параметри структури:

- $a$  – ширина потенціальної ями (від декількох одиниць до десятків нанометрів);
- $b$  – ширина «додаткових» бар'єрів (від нуля до одиниць нанометрів);
- $x_{max}$  – максимальна молярна доля Al в сполучі  $Al_xGa_{1-x}As$ ;
- $x_{max} \in [0,33:1]$ ;
- $x_{min}$  – мінімальна молярна доля Al в сполучі  $Al_xGa_{1-x}As$ ;
- $x_{min} \in [0:0,33]$ ;
- $U_{max}$  – максимальний потенціал активної області;
- $U_{min}$  – мінімальний потенціал активної області.

Наведений перелік вхідних параметрів є достатнім для рівняння Шредингера в задачі зі сталою ефективною масою в прийнятих припущеннях. Побудова фізичною моделі зводиться до того, щоб розв'язати рівняння Шредингера для кожної ділянки активної області, таким чином ми зможемо побудувати матрицю передачі, за допомогою якої знайдемо коефіцієнт передачі. Коефіцієнт передачі визначає струм через РТД за відомою формулою Тсу-Есакі (2.9).

Для подальшого використання, визначимо деякі характерні точки структури, що зображена на рис. 3.1:

$$z_1 = b,$$

$$z_2 = b + \frac{a}{2},$$

$$z_3 = b + a,$$

$$z_4 = 2b + a.$$

### 3.4. Хвильова функція в I та V областях:

В I та V областях розв'язок рівняння Шредингера, за прийнятими припущеннями, буде тривіальним; хвильова функція матиме вигляд:

$$\Psi = Ae^{ikz} + Be^{-ikz}, \quad (3.1)$$

де  $A$  – амплітуда «падаючої» хвилі;

$B$  – амплітуда «відбитої» хвилі;

$k$  – хвильове число,  $k = \sqrt{2m^*(U(z) - E)} / \hbar$ , де  $m^*$  – ефективна маса електрона,  $U(z)$  – потенціал дна зони провідності в області,  $E$  – енергія електрона,  $\hbar$  – стала Планка.

### 3.5. Хвильова функція в II та IV областях:

В II та IV області Гамільтоніан буде мати вигляд:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + U(z), \quad (3.2)$$

де

$$U(z) = \frac{V}{2b+a}z + U_{\max}. \quad (3.3)$$

Для зручності введемо заміну:

$$F = -\frac{V}{2b+a}. \quad (3.4)$$

Рівняння Шредингера після підстановки в нього виразу (3.2) буде мати наступний вигляд:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\Psi''(z) + (-Fz + U_{\max})\Psi(z) = E\Psi(z). \quad (3.5)$$

Перенесемо доданок  $E\Psi(z)$  у ліву частину рівняння та поділимо все рівняння на  $-\frac{\hbar^2}{2m^*}$ :

$$\Psi''(z) + \frac{2m^*}{\hbar^2}(Fz - U_{\max} + E)\Psi(z) = 0, \quad (3.6)$$

$$\Psi''(z) + \frac{2m^*F}{\hbar^2}\left(z + \frac{E - U_{\max}}{F}\right)\Psi(z) = 0. \quad (3.7)$$

Виконаємо заміну:

$$\xi = \left(z + \frac{E - U_{\max}}{F}\right)\left(\frac{2m^*F}{\hbar^2}\right)^{1/3}, \quad (3.8)$$

$$d\xi^2 = \left(\frac{2m^*F}{\hbar^2}\right)^{2/3} dz^2, \quad (3.9)$$

$$dz^2 = d\xi^2 \left( \frac{2m^* F}{\hbar^2} \right)^{-2/3}. \quad (3.10)$$

Рівняння Шредингера (3.7) з новою змінною буде мати вигляд:

$$\left( \frac{2m^* F}{\hbar^2} \right)^{2/3} \frac{d^2 \Psi(\xi)}{d\xi^2} + \left( \frac{2m^* F}{\hbar^2} \right)^{2/3} \xi \Psi(\xi) = 0, \quad (3.11)$$

$$\frac{d^2 \Psi(\xi)}{d\xi^2} + \xi \Psi(\xi) = 0. \quad (3.12)$$

Отримане рівняння (3.12) є рівнянням Ейлера, розв'язком якого є лінійна комбінація функції Ейрі  $\text{Ai}(\xi)$  та компліментарної функції Ейрі  $\text{Bi}(\xi)$ :

$$\Psi(\xi) = A \cdot \text{Ai}(-\xi) + B \cdot \text{Bi}(-\xi), \quad (3.13)$$

де  $A$  – амплітуда «падаючої» хвилі;

$B$  – амплітуда «відбитої» хвилі.

Функції Ейрі визначаються як:

$$\text{Ai}(\xi) = \frac{1}{\pi_0} \int_0^{\infty} \cos\left(\frac{t^3}{3} + \xi t\right) dt;$$

$$\text{Bi}(\xi) = \frac{1}{\pi_0} \int_0^{\infty} \left[ \exp\left(-\frac{t^3}{3} + \xi t\right) + \sin\left(\frac{t^3}{3} + \xi t\right) \right] dt.$$

### 3.6. Хвильова функція в III області:

Об'єктом дослідження є саме область з параболічним потенціалом, оскільки вона визначає поведінку ВАХ РТД, тому їй приділено найбільше увагу: формування фізичної та математичної моделі, а також пошук розв'язка рівняння Шредингера для цієї області описано значно ширше. Для фізичної моделі необхідно визначити вигляд Гамільтоніану. В III області Гамільтоніан має вигляд:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + U(z), \quad (3.14)$$

де

$$U(z) = U_{lat}(z) + U_{lin}(z). \quad (3.15)$$

Таким чином задача полягає у знаходженні функції  $U_{lat}(z)$  та  $U_{lin}(z)$ .

Знайдемо невідомі параметри  $U_{max}$  та  $U_{min}$ . Для знаходження  $U_{lat}(x_m)$ , де  $x_m$  - молярна доля Al в сполучі  $Al_{x_m}Ga_{1-x_m}As$ , використаємо емпіричний вираз з [21]:

$$U_{lat}(x_m) = 1,247x_m, \quad (3.16)$$

тоді:

$$U_{max} = U_{lat}(x_{max}) = 1,247x_{max}, \quad (3.17)$$

$$U_{min} = U_{lat}(x_{min}) = 1,247x_{min}. \quad (3.18)$$

З іншого боку:

$$U_{\max} = U_{lat}(z_1), \quad (3.19)$$

$$U_{\min} = U_{lat}(z_2). \quad (3.20)$$

Запишемо рівняння параболи  $U_{lat}(z)$ :

$$U_{lat}(z) = c(z - z_2)^2 + U_{\min}, \quad (3.21)$$

де  $c$  – невідома константа;

$z_2$  – величина, на яку зміщено параболу вправо.

Таким чином, скориставшись (3.19), маємо:

$$U_{\max} = c(z_1 - z_2)^2 + U_{\min}. \quad (3.22)$$

Знайдемо константу  $c$ :

$$c = \frac{U_{\max} - U_{\min}}{(z_1 - z_2)^2}, \quad (3.23)$$

$$c = \frac{1,247(x_{\max} - x_{\min})}{\left(b - b - \frac{a}{2}\right)^2}, \quad (3.24)$$

$$c = \frac{4 \cdot 1,247(x_{\max} - x_{\min})}{a^2}. \quad (3.25)$$

Звідки, повернувшись до (3.21), знайдемо  $U_{lat}(z)$ :

$$U_{lat}(z) = \frac{4 \cdot 1,247(x_{\max} - x_{\min})}{a^2}(z - z_2)^2 + U_{\min}, \quad (3.26)$$



$$U_{lat}(z) = \frac{4 \cdot 1,247(x_{\max} - x_{\min})}{a^2} \left( z - b - \frac{a}{2} \right)^2 + 1,247x_{\min}. \quad (3.27)$$

Знайдемо тепер рівняння прямої  $U_{lin}(z)$ :

$$U_{lin}(0) = 0, \quad (3.28)$$

$$U_{lin}(z_4) = eV. \quad (3.29)$$

З виразу (3.28) слідує, що:

$$U_{lin}(z) = cz, \quad (3.30)$$

$$c = \frac{U_{lin}(z)}{z}. \quad (3.31)$$

Скориставшись (3.29) отримаємо:

$$c = \frac{eV}{2b + a}. \quad (3.32)$$

Підставимо в вираз (3.30) знайдене значення константи  $c$ :

$$U_{lin}(z) = \frac{eV}{2b + a} z. \quad (3.33)$$

Таким чином, ми отримали рівняння  $U_{lat}(z)$  та  $U_{lin}(z)$ , записані через параметри топології РТД. Знаючи їх, ми тепер можемо знайти вигляд Гамільтоніану.

Підставимо (3.27) та (3.33) в (3.15):

$$U(z) = \frac{4 \cdot 1,247(x_{\max} - x_{\min})}{a^2} \left( z - b - \frac{a}{2} \right)^2 + 1,247x_{\min} + \frac{eV}{2b+a} z \quad (3.34)$$

а тепер (3.34) в (3.14):

$$\begin{aligned} \hat{H} = & -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + \frac{4 \cdot 1,247(x_{\max} - x_{\min})}{a^2} \left( z - b - \frac{a}{2} \right)^2 + \\ & + 1,247x_{\min} + \frac{eV}{2b+a} z. \end{aligned} \quad (3.35)$$

Для зручності, виконаємо заміни:

$$\Delta U = 1,247(x_{\max} - x_{\min}), \quad (3.36)$$

$$U_{\min} = 1,247x_{\min}, \quad (3.37)$$

$$w = 2b + a, \quad (3.38)$$

тоді:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + \frac{4\Delta U}{a^2} \left( z - b - \frac{a}{2} \right)^2 + U_{\min} + \frac{V}{2b+a} z. \quad (3.39)$$

В результаті, знаючи вигляд  $\hat{H}$ , ми можемо записати рівняння Шредингера для даної параболічної структури в розкритому вигляді:

$$\hat{H}\Psi(z) = E\Psi(z), \quad (3.40)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \Psi''(z) + \left( \frac{4\Delta U}{a^2} \left( z - \frac{w}{2} \right)^2 + \frac{V}{w} z + U_{\min} \right) \Psi(z) = E\Psi(z), \quad (3.41)$$

$$\Psi''(z) - \frac{2m^*}{\hbar^2} \left( \frac{4\Delta U}{a^2} \left( z - \frac{w}{2} \right)^2 + \frac{V}{w} z + U_{\min} - E \right) \Psi(z) = 0. \quad (3.42)$$

Таким чином, знаючи вигляд рівняння Шредингера з використанням топологічних даних, ми можемо перейти до розгляду математичної моделі, в результаті якого ми отримаємо хвильові функції електронів, що знаходяться в параболічній потенціальній ямі.

### 3.7. Математична модель параболічної структури

На основі отриманої фізичної моделі, що описується рівнянням Шредингера:

$$\Psi''(z) - \frac{2m^*}{\hbar^2} \left( \frac{4\Delta U}{a^2} \left( z - \frac{w}{2} \right)^2 + \frac{V}{w} z + U_{\min} - E \right) \Psi(z) = 0, \quad (3.43)$$

перейдемо до математичної моделі. Розкривши дужки та згрупувавши деякі доданки, щоб утворити повний квадрат, отримаємо:

$$\begin{aligned} & \Psi''(z) - \frac{2m^*}{\hbar^2} \left( \frac{4\Delta U}{a^2} \left( z + \frac{1}{2} \left( -w + \frac{a^2 V}{4\Delta U w} \right) \right)^2 \right) \Psi(z) + \\ & + \frac{2m^*}{\hbar^2} \left( -\frac{\Delta U}{a^2} \left( -w + \frac{a^2 V}{4\Delta U w} \right)^2 + \frac{\Delta U w^2}{a^2} + U_{\min} - E \right) \Psi(z) = 0. \end{aligned} \quad (3.44)$$

Введемо необхідні заміни:

$$\sigma = \frac{8m^* \Delta U}{\hbar^2 a^2}, \quad (3.45)$$

$$\tau = -\frac{\Delta U}{a^2} \left( -w + \frac{a^2}{4\Delta U} \frac{V}{w} \right)^2 + \frac{\Delta U w^2}{a^2} + U_{\min} - E, \quad (3.46)$$

$$x = z + \frac{1}{2} \left( -w + \frac{a^2}{4\Delta U} \frac{V}{w} \right) \Rightarrow z = x - \frac{1}{2} \left( -w + \frac{a^2}{4\Delta U} \frac{V}{w} \right), \quad (3.47)$$

$$dz = d \left( x - \frac{1}{2} \left( -w + \frac{a^2}{4\Delta U} \frac{V}{w} \right) \right) = dx \Rightarrow dz^2 = dx^2. \quad (3.48)$$

Таким чином ми перейдемо до математичного рівняння, виду:

$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} - \left( \sigma x^2 + \frac{2m^*}{\hbar^2} \tau \right) \Psi(x) = 0. \quad (3.49)$$

Ми отримали рівняння відповідного вигляду:

$$\frac{d^2y}{dx^2} + (ax^2 + bx + c)y = 0. \quad (3.50)$$

Розв'язком якого є функції параболічного циліндра (функції Вебера-Ерміта).

Існують дві стандартні форми подання цього рівняння [22], а саме:

$$\frac{d^2y}{dx^2} - \left( \frac{1}{4}x^2 + a \right) y = 0, \quad (3.51)$$

$$\frac{d^2y}{dx^2} + \left( \frac{1}{4}x^2 - a \right) y = 0. \quad (3.52)$$

Зведемо наше рівняння до першої з них. Заміна:

$$\xi = \sqrt[4]{4\sigma} x \Rightarrow x = \frac{\xi}{\sqrt[4]{4\sigma}}, \quad (3.53)$$

$$dx^2 = \frac{d\xi^2}{\sqrt{4\sigma}}. \quad (3.54)$$

Отримаємо рівняння:

$$\sqrt{4\sigma} \frac{d^2\Psi(\xi)}{d\xi^2} - \left( \sigma \frac{1}{\sqrt{4\sigma}} \xi^2 + \frac{2m^*}{\hbar^2} \tau \right) \Psi(\xi) = 0. \quad (3.55)$$

Поділивши все рівняння на  $\sqrt{4\sigma}$ , отримаємо:

$$\frac{d^2\Psi(\xi)}{d\xi^2} - \left( \frac{\xi^2}{4} + \frac{2m^*}{\hbar^2 \sqrt{4\sigma}} \tau \right) \Psi(\xi) = 0. \quad (3.56)$$

Скориставшись (3.46), зробимо нову заміну:

$$\lambda = \frac{2m^*}{\hbar^2 \sqrt{4\sigma}} \tau, \quad (3.57)$$

$$\lambda = \frac{2m^*}{\hbar^2 \sqrt{4 \frac{8m^* \Delta U}{\hbar^2 a^2}}} \left( -\frac{\Delta U}{a^2} \left( -w + \frac{a^2}{4\Delta U} \frac{V}{w} \right)^2 + \frac{\Delta U w^2}{a^2} + U_{\min} - E \right). \quad (3.58)$$

Отримаємо наше рівняння у бажаному вигляді:

$$\frac{d^2\Psi(\xi)}{d\xi^2} - \left( \frac{\xi^2}{4} + \lambda \right) \Psi(\xi) = 0. \quad (3.59)$$

Його частковим розв'язком є зазначені вище лінійно незалежні функції параболічного циліндра, а саме:

$$y_1 = e^{-\frac{\xi^2}{4}} M\left(\frac{1}{2}\lambda + \frac{1}{4}; \frac{1}{2}; \frac{1}{2}\xi^2\right), \quad (3.60)$$

$$y_2 = \xi e^{-\frac{\xi^2}{4}} M\left(\frac{1}{2}\lambda + \frac{3}{4}; \frac{3}{2}; \frac{1}{2}\xi^2\right), \quad (3.61)$$

де  $M(a; b; z)$  [22] - вироджений гіпергеометричний ряд:

$$M(a; b; z) = 1 + \frac{a}{b}z + \frac{a(a+1)z^2}{b(b+1)2!} + \dots = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(a)_k z^k}{(b)_k k!}, \quad (3.62)$$

де  $(a)_n$  і  $(b)_n$  визначені як:

$$(a)_n = a(a+1)(a+2)\dots(a+n-1), \quad (3.63)$$

$$(b)_n = b(b+1)(b+2)\dots(b+n-1). \quad (3.64)$$

Параметри  $a$  і  $b$  в нашому випадку – дійсні числа.

Таким чином, розв'язок нашого диференційного рівняння буде алгебраїчна сума цих двох функцій:

$$\begin{aligned} \Psi(\xi) = c_1 y_1(\xi) + c_2 y_2(\xi) = c_1 e^{-\frac{\xi^2}{4}} {}_1F_1\left(\frac{1}{2}\lambda + \frac{1}{4}; \frac{1}{2}; \frac{1}{2}\xi^2\right) + \\ + c_2 \xi e^{-\frac{\xi^2}{4}} {}_1F_1\left(\frac{1}{2}\lambda + \frac{3}{4}; \frac{3}{2}; \frac{1}{2}\xi^2\right). \end{aligned} \quad (3.65)$$

## РОЗДІЛ 4

### КОЕФІЦІЄНТ ПЕРЕДАЧІ ДБКС

#### 4.1. Розрахунок коефіцієнта передачі ДБКС

Для розрахунку коефіцієнта передачі в РТД з параболічною потенційною ямою скористаємось написаним алгоритмом в програмі Matlab (див. Додаток А, Б). Вхідні параметри структури (рис. 3.1) наступні:

- $a = 20$  нм;
- $b = 2$  нм;
- $x_{\max} = 0,2$ ;
- $x_{\min} = 0$ .

Далі наведені приклади залежності  $D(E)$  при зміні параметрів: зовнішньої напруги на РТД, висоти «допоміжних» бар'єрів структури, довжини активної області РТД. При зміні одного з параметрів, інші залишаються без зміни, тобто приймають початкові значення, наведені вище.

#### 4.2. Коефіцієнт передачі в залежності від прикладеної зовнішньої напруги

Отримані результати моделювання приведені на рисунку 4.1, де зображено залежність коефіцієнта передачі від енергії електрона, що рухається від I області в V, що вказані на рисунку 3.1. Розрахунки робилися для двох значень прикладеної напруги: при  $U = 0$  В та  $U = -0,1$  В.

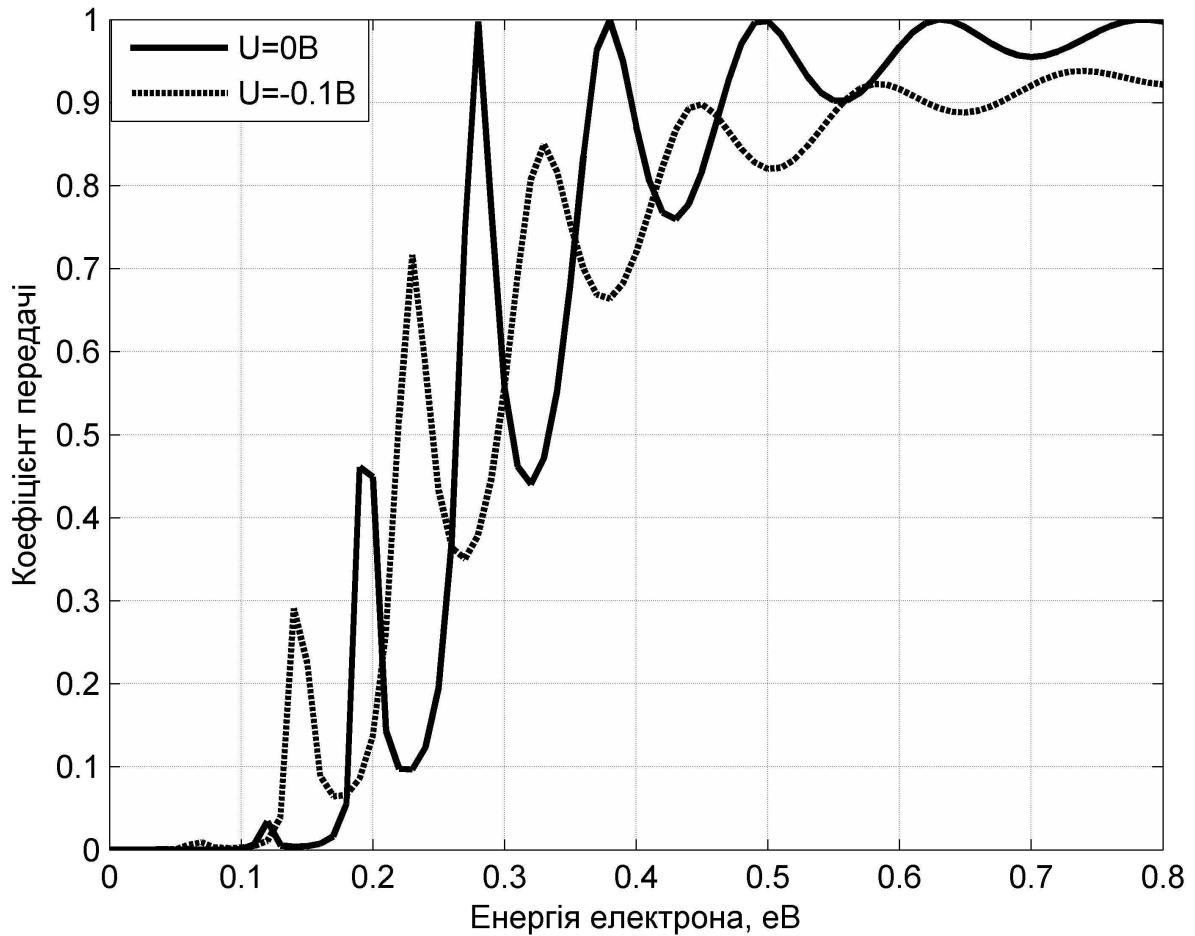


Рис. 4.1. Залежність коефіцієнта передачі від енергії електрона при напругах  $U = 0\text{ В}$  та  $U = -0,1\text{ В}$

Значення енергії електронів на графіку обмежено значенням  $0,8\text{ В}$ , так як електронів, що мали б більшу енергію в «резервуарах» не має, при енергіях вище зазначеної графік коефіцієнта передачі прямує до одиниці.

До рисунку 4.1 можна зробити декілька зауважень, що стосуються параметра  $U$  та графіка  $D(E)$  в цілому:

- існує загальна тенденція: при збільшенні енергії електрона, значення коефіцієнта передачі теж збільшується, проте при прикладанні напруги графік функції  $D(E)$  спадає;
- максимальне значення коефіцієнта передачі дорівнює одиниці, це пояснюється його фізичним змістом: амплітуда хвильової функції, що



пройшла через бар'єр, не може бути більше амплітуди падаючої хвильової функції;

– спостерігаються піки коефіцієнта, що слід розуміти, як рівність енергії електрона, що знаходиться в лівому «резервуарі» і енергії метастабільного рівня параболічної квантової ями. Таким чином, вірогідність тунелювання електрона при таких енергіях максимальна, і в деяких випадках може сягати одиниці;

– характерним є поступове «розширення» піків та плавний перехід їхніх вершин, це пояснюється поступовим «розширенням» енергетичних рівнів в потенціальній ямі зі збільшенням енергії;

– перші три піки знаходяться на однаковій відстані один від одного, що дорівнює в даному випадку 0,08 еВ, при від'ємному зміщенні ці піки переміщуються вліво, проте відстань між ними зберігається, це одна з чудових властивостей параболічної потенціальної ями;

– починаючи з третього піку відстань між ними поступово збільшується, це можна пояснити тим, що електрон рухається над «допоміжними» бар'єрами, тобто над потенціальним рельєфом в цілому. І справді, мінімальна енергія електрона для цього з розрахунків повинна бути 0,28 еВ, що й підтверджується графіком.

Хочеться підкреслити цікаву річ: всі піки, що знаходяться до енергії, значення якої дорівнює висоті «додаткових» бар'єрів, будуть рівновіддаленими. Ця особливість може бути зв'язана з тим, що метастабільні рівні енергії квантової ями при прикладенні напруги будуть досі знаходитися нижче найнижчого «додаткового» бар'єра (див. рис. 3.1.)

#### 4.3. $D(E)$ в залежності від висоти «допоміжних» бар'єрів

Нижче розглянута залежність коефіцієнта передачі від енергії електрона в лівому резервуарі при зміні структури потенціального рельєфу, а саме при зміні висоти «допоміжних» бар'єрів.

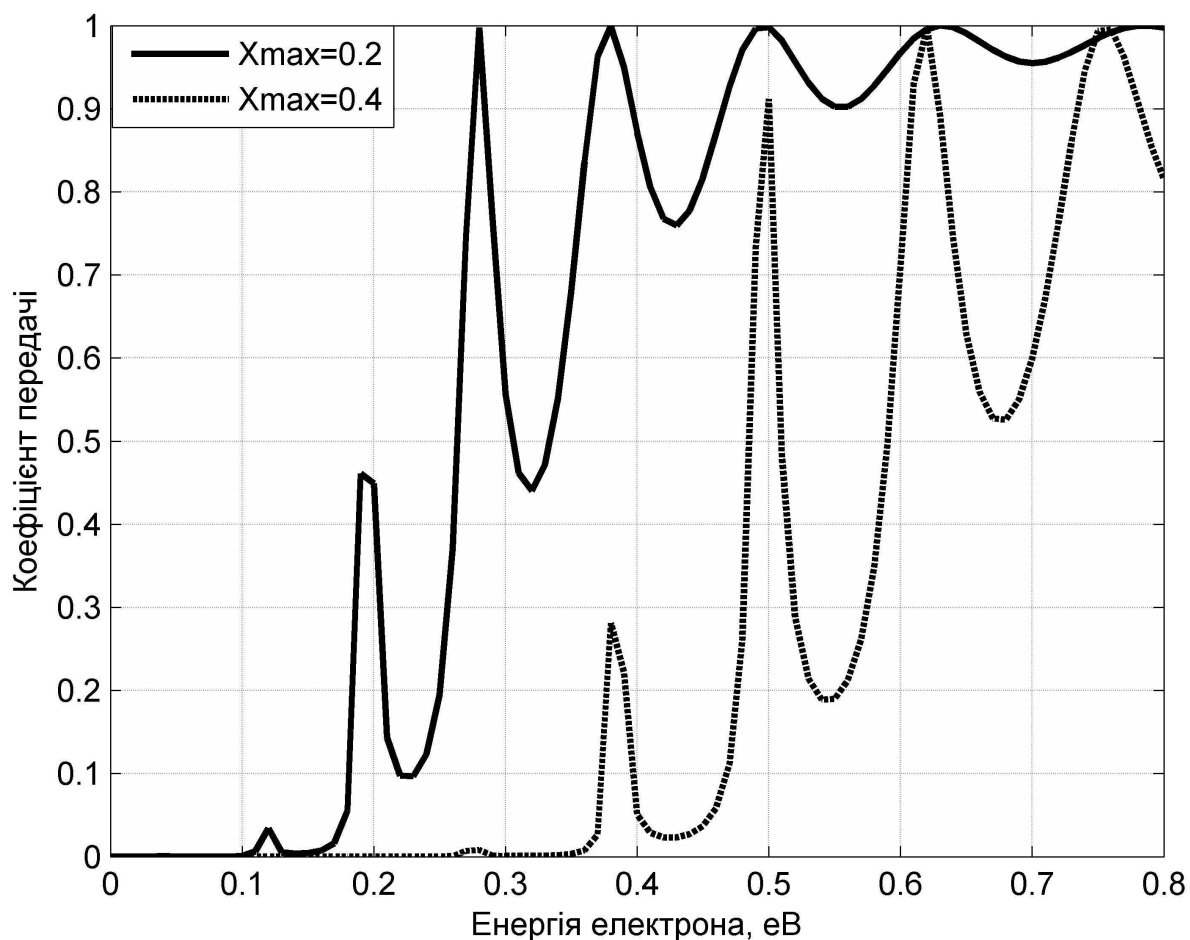


Рис. 4.2. Залежність коефіцієнта передачі від енергії електрона при зміні висоти «допоміжних» бар'єрів

Як видно з рисунку 4.2, при збільшенні висоти «допоміжних» бар'єрів, графік:

- змістився вправо;
- долини стали глибшими;
- збільшилася відстань між сусідніми піками;
- піки стали вужчими.

Вищезазначені зауваження можна пояснити тим, що метастабільні рівні в квантовій ямі піднялися вгору.

#### 4.4. $D(E)$ в залежності від довжини активної області РТД

Наступний графік (рис.4.3) ілюструє зміну коефіцієнта передачі від довжини активної області:

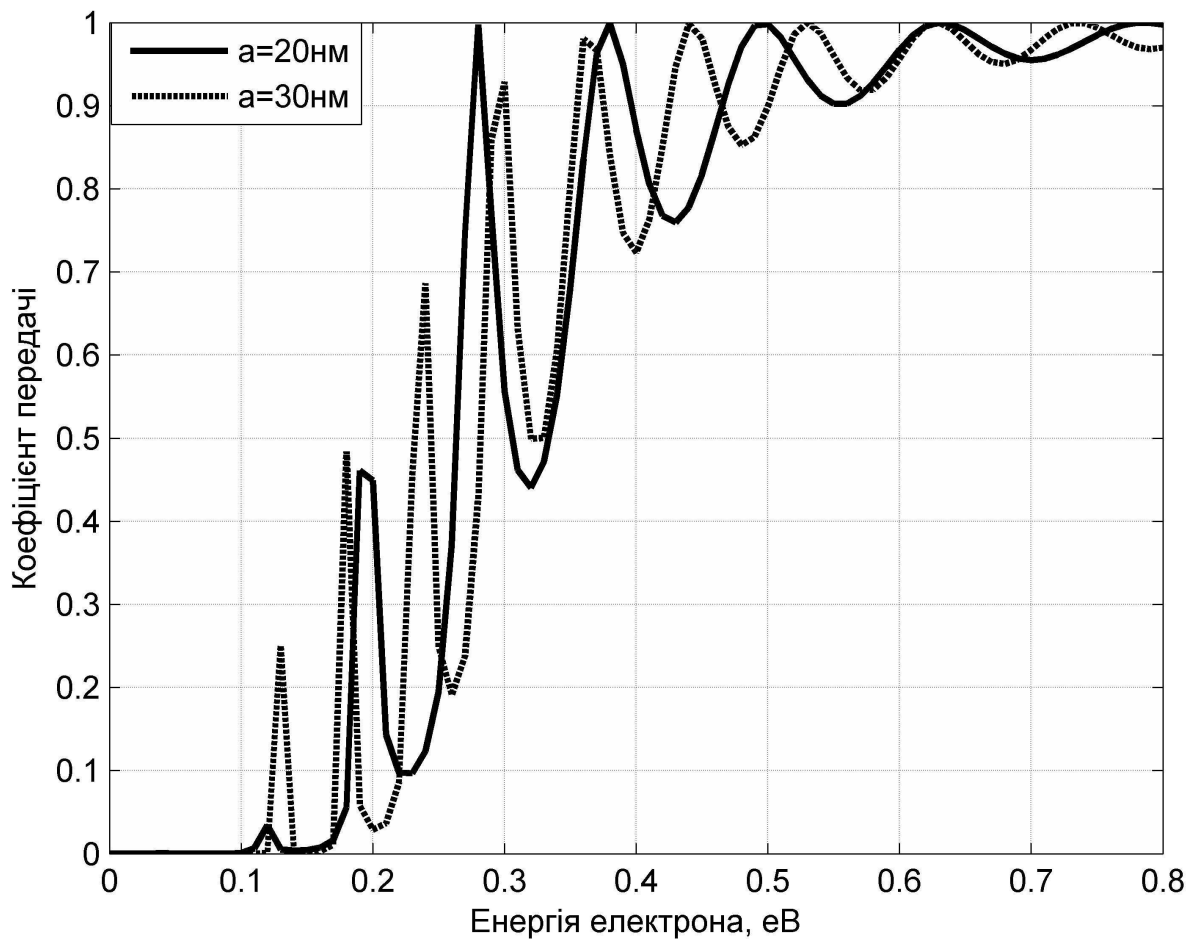


Рис. 4.3. Залежність коефіцієнта передачі від енергії електрона при зміні довжини активної області

Збільшення довжини активної області РТД призводить до вищевказаного переміщення метастабільних рівнів вниз за енергіями, що призводить до:

- переміщення графіку ліворуч по енергіям;
- долини стають глибшими;
- відстань між піками стає меншою;
- піки стають вужчими.

## РОЗДІЛ 5

### ВАХ РЕЗОНАНСНО-ТУНЕЛЬНОГО ДІОДА З ПАРАБОЛІЧНОЮ ПОТЕНЦІАЛЬНОЮ ЯМОЮ

#### 5.1. Розрахунок ВАХ резонансно-тунельного діода

Знаючи залежність коефіцієнта передачі від енергії електрона (розділ 4), в силу прийнятих припущень, викладених у розділі 3.2, можна розрахувати залежність струму РТД від напруги, прикладеної до нього, за формулою Тсу-Есакі (2.9), скористувавшись алгоритмом, що побудовано в програмному забезпеченні Matlab 6.5.

На рисунку 5.1 наведено приклад ВАХ РТД з параболічною потенціальною ямою при параметрах, зазначених нижче графіка.

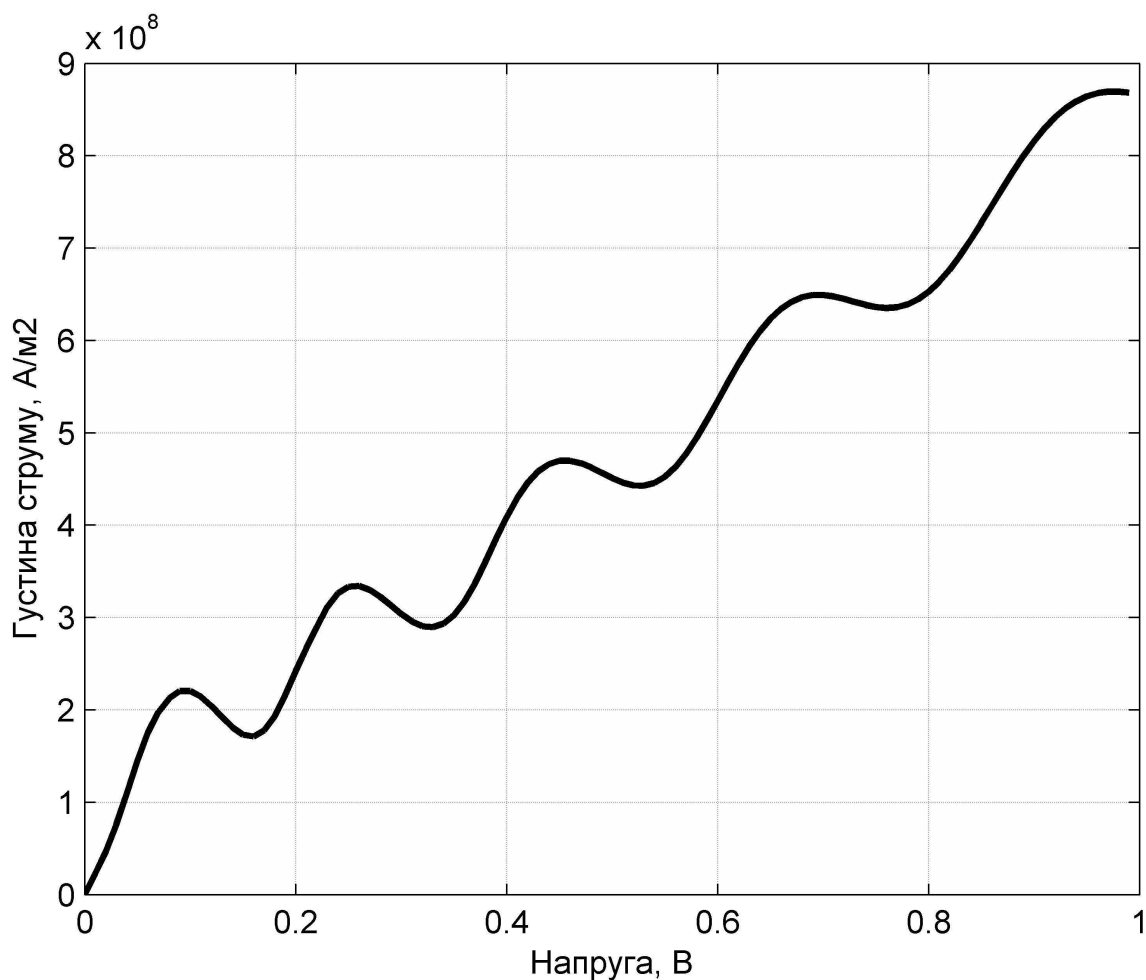


Рис. 5.1. ВАХ РТД з параболічною потенціальною ямою

Вхідні параметри для розрахунків такі:

- $a = 20$  нм;
- $b = 2$  нм;
- $x_{\max} = 0,2$ ;
- $x_{\min} = 0$ ;
- $T = 77$  К;
- $E_{\phi} = 0,1$  еВ.

З рисунку 5.1 видно, що графік ВАХ має багато піків, при збільшенні напруги відстань між ними збільшується, кожен такий стан характеризується наявністю ВДП після піку, як вже зазначалося в розділі 1.4.2.

Доцільно буде розглядати ВАХ при різних параметрах окремо, як це було зроблено з коефіцієнтом передачі.

## 5.2. ВАХ резонансно-тунельного діоду в залежності від геометричних розмірів активної області

Геометричні розміри РТД визначають залежність  $D(E)$ , тим самим задаючи поведінку ВАХ. Як було показано у розділах 4.3 та 4.4 зміна параметрів активної області РТД впливає на положення піків  $D(E)$ , їх ширину та величину густини струму, що й наведено на рисунках 5.2 та 5.3.

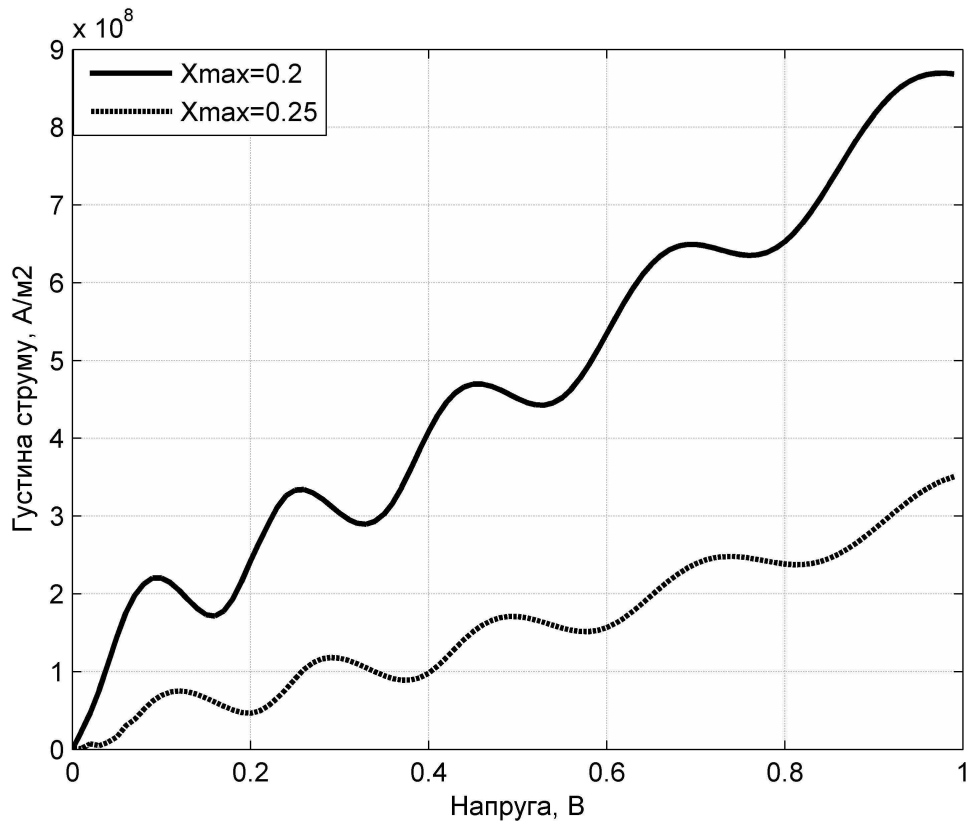


Рис. 5.2. ВАХ РТД в залежності від висоти «допоміжних» бар'єрів

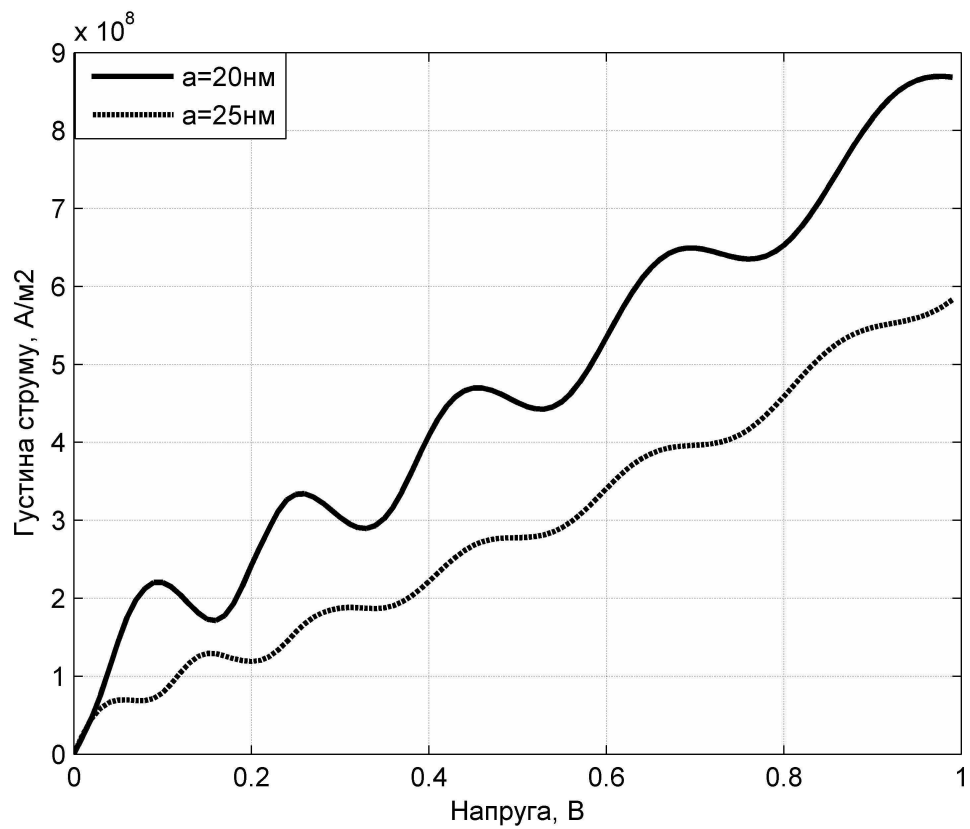


Рис. 5.3. ВАХ РТД в залежності від довжини активної області

Аналіз графіків показує, що збільшення довжини активної області або збільшення висоти «допоміжних» бар'єрів веде до загального зменшення величини густини струму в діоді, а також до зменшення контрастності ВАХ. Проте, існує особливість, а саме: при збільшенні висоти «додаткових» бар'єрів ВАХ діоду йде вправо, а при збільшенні довжини активної області – вліво. Довжина між піками зменшується ефективніше при зміні довжини активної області.

### 5.3. ВАХ тунельно-резонансного діоду в залежності від положення рівня Фермі

Рівень Фермі, як відомо з фізики електронних процесів, – це фактично параметр статистики Фермі-Дірака, проте йому можна присвоїти і фізичну суть – максимальна енергія електрона в колективі при температурі  $T = 0\text{K}$ . В нашому випадку буде корисно враховувати таку фізичну інтерпретацію. Рівень Фермі також визначає концентрацію електронів, так як являється параметром в інтегралі Фермі, що використовується при її обчисленні. Чим більше рівень Фермі – тим більша концентрація електронів в резервуарах.

Побудуємо графік ВАХ в залежності від рівня Фермі.



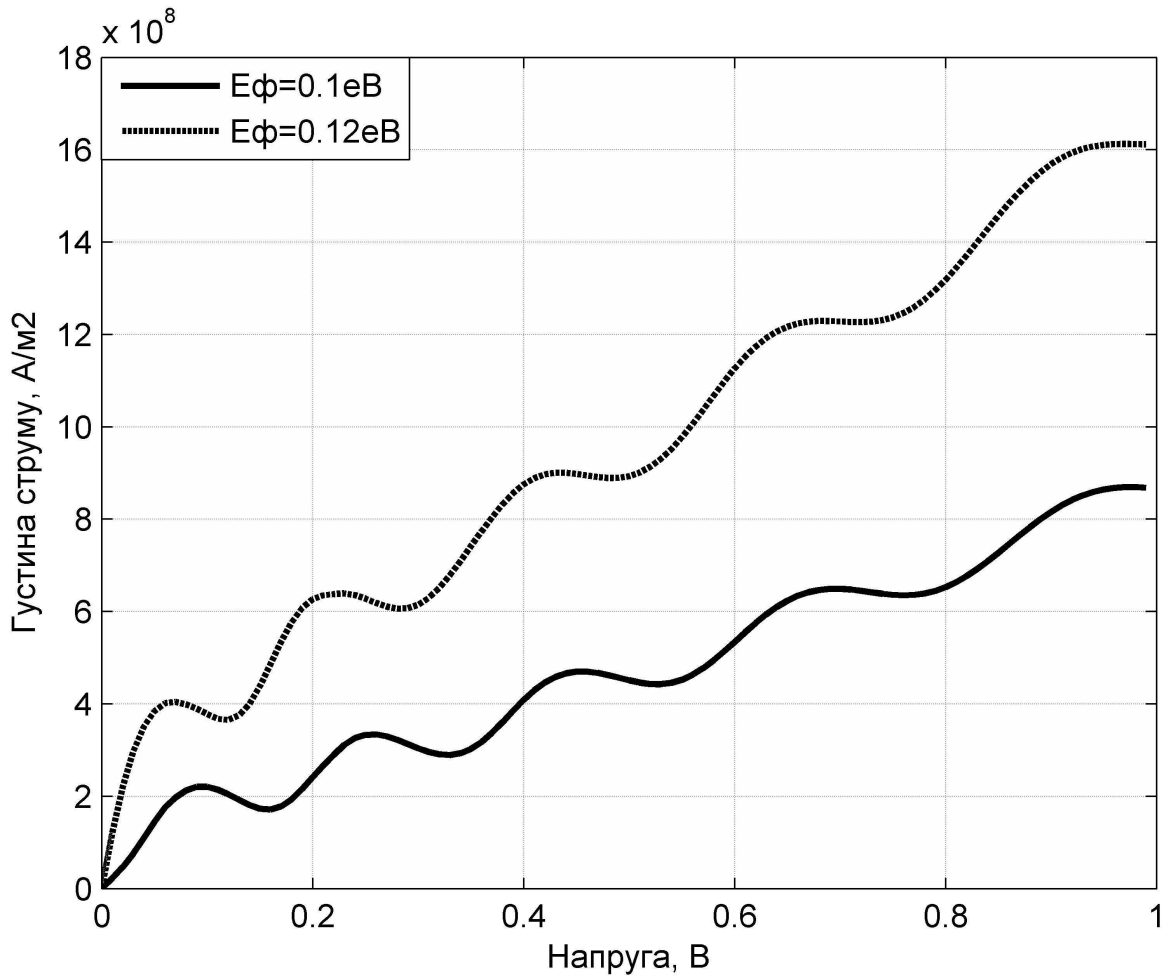


Рис. 5.4. ВАХ РТД в залежності від положення рівня Фермі

Збільшення параметру  $E_F$  призводить до того, що збільшується кількість електронів, що проходять потенціальний бар'єр, тому струм РТД збільшується. Перший та другий пік починається при меншій напрузі, так як в резервуарі з'явився електронний колектив з більшими енергіями, а тому потрібно прикласти менше напруги, щоб метастабільний рівень квантової ями опустився на рівень електронів з максимальною енергією.

Подальше збільшення  $E_F$  призведе до того, що контрастність ВАХ зменшиться, ВАХ РТД буде нагадувати ВАХ резистора.

Таким чином, при збільшенні  $E_F$ , а значить і концентрації електронів в резервуарах, можна отримати РТД з більшою потужністю, проте меншою контрастністю ВАХ.

#### 5.4. ВАХ тунельно-резонансного діоду в залежності від температури

Нижче наведено графік залежності ВАХ від температури. Температура на структуру  $D(E)$ , в прийнятих припущеннях, не впливає.

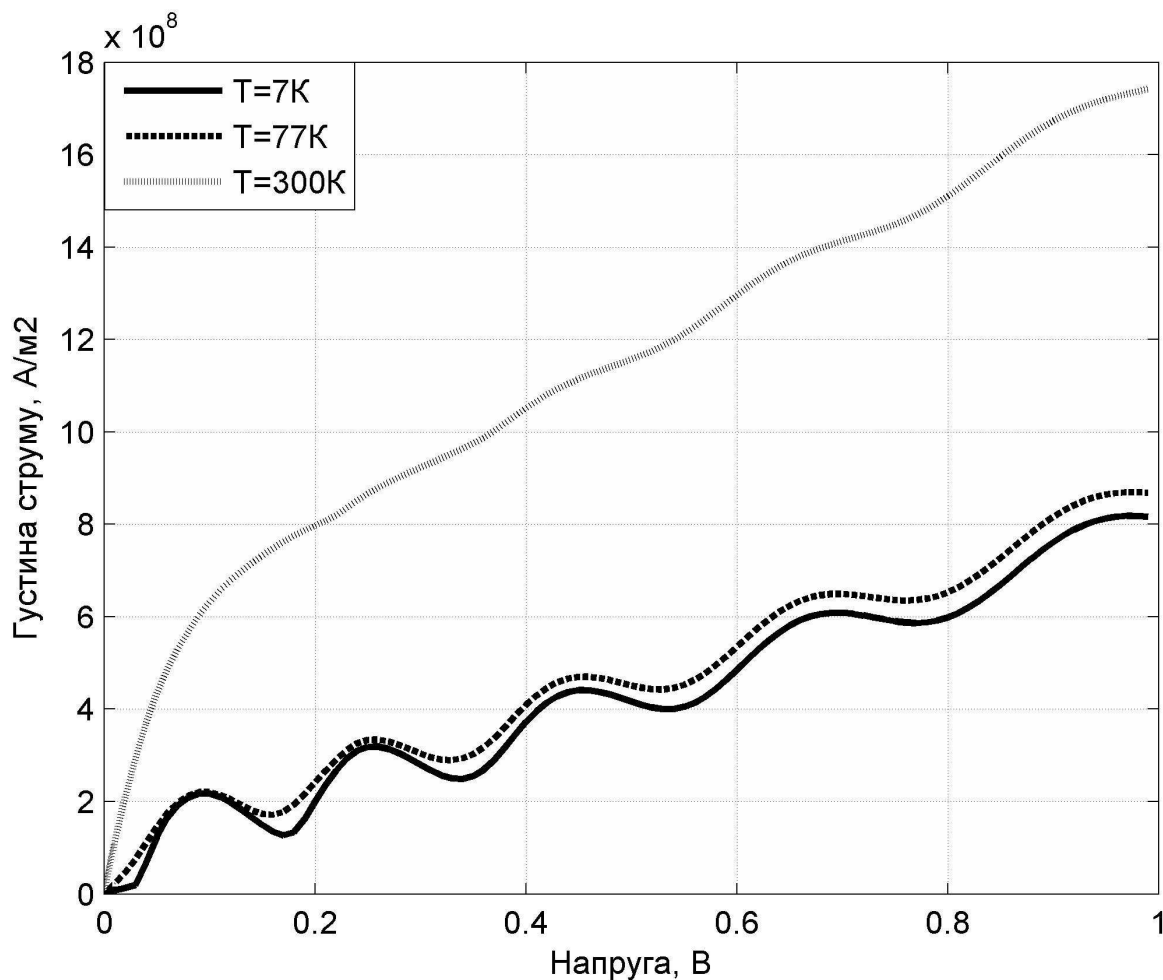


Рис. 5.5. ВАХ РТД в залежності температури

При підвищенні температури ступінчаста функція Фермі-Дірака  $f_{\text{Ф-Д}}(E)$  «розмивається», і тим сильніше, чим вища температура, проте збуджує лише ті електрони, енергії яких відрізняються від  $E_{\text{Ф}}$  на величину порядку  $k_{\text{Б}}T$  в обидві сторони [23]. Таким чином це призводить до зменшення контрастності ВАХ і до загального збільшення струму (рис. 5.5). Вже при  $T=300\text{К}$  ВАХ РТД з параболічною потенціальною ямою втрачає свої особливості, тому слід

використовувати менші температурні режими, або зменшити концентрацію електронів в резервуарах.

### 5.5. ВАХ тунельно-резонансного діоду при малій концентрації електронів в резервуарах

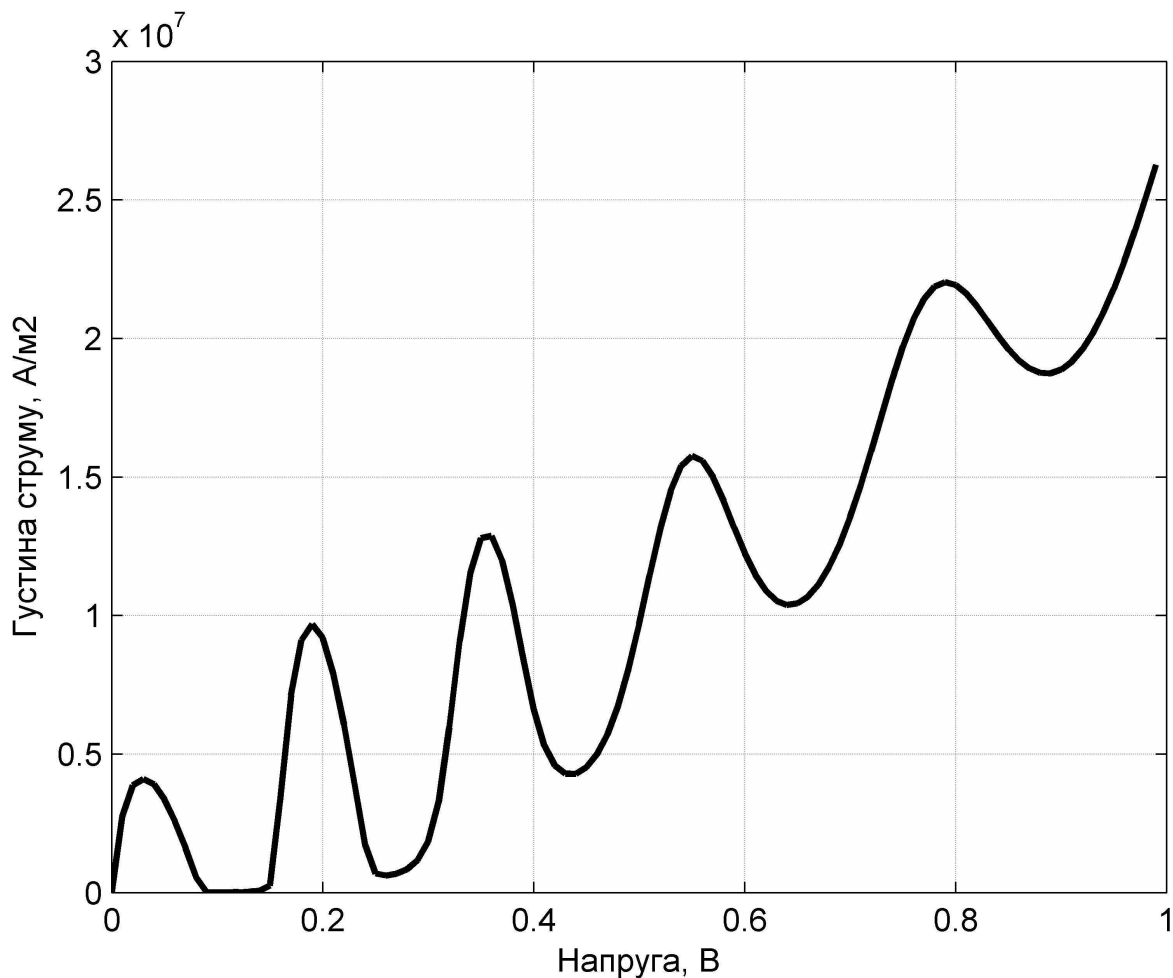


Рис. 5.6. ВАХ РТД при малих значеннях концентрації електронів в резервуарах

На рисунку 5.6 наведено приклад особливості ВАХ РТД з параболічною потенціальною ямою з параметрах, зазначених у розділі 5.1, проте рівень Фермі взято нижчий, а саме  $E_{\text{Ф}} = 0,05$  еВ.

Хочеться зауважити, що вищевказана ВАХ, як і відповідна їй залежність  $D(E)$  (дивись рис. 4.1), мають перші три рівновіддалені піки. Ця особливість

параболічної структури була вже вказана при розгляді  $D(E)$  в кінці розділу 4.2. Проте не при всіх параметрах вона буде видна на графіку ВАХ: при більших температурах та значеннях рівня Фермі перший пік ВАХ починає зливатися з другим. В першому випадку буде збільшуватись хвіст функції Фермі-Дірака, а в другому рівень Фермі буде зміщуватися в сторону більших енергій. Все це призводить до того, що електрони, вже при напрузі в 0В можуть займати енергетичний рівень в резервуарі, що відповідає другому метастабільному рівню в ямі. Таким чином, точного переходу від першого до другого піку струму ВАХ ми можемо не побачити.

## РОЗДІЛ 6

### ВИКОРИСТАННЯ РТД З ПАРАБОЛІЧНОЮ ПОТЕНЦІАЛЬНОЮ ЯМОЮ В БАГАТОЗНАЧНІЙ ЛОГІЦІ

#### 6.1. Переваги у застосуванні багатозначній логіки

Багатозначна логіка надає більш широкі можливості для синтезу алгоритмів цифрової обробки сигналів, ніж класична двійкова логіка. Крім того, розв'язання задач на базі багатозначної логіки значно компактніше та ширше в частині функціональних можливостей, а застосування багаторівневих сигналів в цифрових пристроях дозволяє: значно зменшити кількість внутрішніх з'єднань, підвищити швидкодію пристрою і збільшити щільність розміщення компонентів [24].

Безумовно, застосування багатозначною логіки вимагає нових рішень в галузі принципів роботи елементів і схемотехнічних рішень. В даний час багатозначна логіка в цифровій техніці використовується в двох напрямках [25, 26]:

- для ефективного вирішення завдань і алгоритмів цифрової обробки сигналів (синтез, аналіз, перетворення, оптимізація і т.д.);
- застосування багаторівневих сигналів в цифрових пристроях, таких як елементи пам'яті, арифметичні схеми, що програмуються.

Багатозначна логіка в цифровій техніці дозволяє отримати додаткові функціональні можливості при реалізації алгоритмів і синтезу реалізуються функції, а застосування багаторівневих сигналів в цифрових пристроях значно зменшує кількість взаємозв'язків, підвищує щільність і швидкодію [27].

#### 6.2. Можливі сфери застосування РТД з параболічною потенціальною ямою

Потенційною сферою застосування багаторівневості сигналу РТД з параболічною потенціальною ямою є цифрові електронні схеми, а саме цифрові

схеми з багаторівневою струмовою логікою. Сучасні багаторівневі цифрові пристрої будуються на схемах із застосуванням струмової логіки, оскільки вона найкраще підходить для багатозначної реалізації. У таких схемах струми вибираються такими, щоб одержувані логічні рівні були б цілочисловими множниками опорного струму. Це дозволяє просто реалізувати арифметичні операції. Наприклад, складання легко виконується додаванням струмів, а операція множення може бути виконана масштабуванням. Струмова логіка значно підвищує швидкодію і зменшує загальну кількість активних елементів [27]. Найбільш перспективне використання струмової багаторівневої логіки: модулі пам'яті, арифметичні пристрої, мультиплексори, декодери.

Іншою, не менш перспективнішою сферою використання РТД з параболічною потенціальною ямою – елемент пам'яті в многозначній логіці, так як ВАХ такої структури може мати більш ніж 2 піки струму.

В роботі [28] показано, як два паралельно з'єднанні РТД з прямокутною ямою утворюють логічний елемент, одне з використань якого – елемент пам'яті. Такий логічний елемент мав 2 піки на ВАХ при напрузі, що менша 0,8 В. Досліджена у розділі 5 ВАХ РТД з параболічною потенціальною ямою, має щонайменш 5 піків струму ВАХ при напрузі до 1 В.

Таким чином можна виділити переваги при використанні РТД з параболічною потенціальною ямою:

- кількість стійких станів більше 2;
- вдале хвильове узгодження з іншими приладами наноелектроніки;
- більша швидкодія у порівнянні з аналогічними приладами мікроелектроніки в силу менших розмірів;
- велика густина запису інформації на кристалі;
- менші втрати потужності.

Недоліком використання таких компонентів являється складність технологічного процесу та їх енергозалежність.

## ВИСНОВКИ

Робота містить необхідну інформацію, щодо структури РТД з параболічною потенціальною ямою, а саме: можливі технологічні методи і матеріали для виготовлення такої структури, опис задіяного метода моделювання та сама модель в аналітичному вигляді (її детальний вивід), комп'ютерну програму моделі для розрахунку її основних характеристик, графіки та їх аналіз, сфери застосування дослідженого пристрою.

Результатом комп'ютерного моделювання, написаному в програмному забезпеченні Matlab 6.5, є програма (Додатки А,Б), завдяки якій можна на персональному комп'ютері легко отримувати та досліджувати такі вихідні графічні результати моделі, як коефіцієнт передачі та ВАХ в залежності від вхідних параметрів структури.

Дослідження коефіцієнта передачі показало, що у порівнянні з РТД з прямокутною ямою, РТД з параболічною ямою має більше піків, що в свою чергу відображається піками ВАХ.

Збільшення висоти «додаткових» бар'єрів або збільшення довжини активної області приводить до зменшення густини струму в РТД. Проте, існує відмінність між цими двома способами управління, а саме:

- при збільшенні висоти «додаткових» бар'єрів ВАХ діоду зміщується вправо, тобто в сторону більших значень напруг, а при збільшенні довжини активної області навпаки – вліво, в сторону менших значень;
- відстань між піками при збільшенні висоти «додаткових» бар'єрів стає більшою, а при збільшенні довжини активних області – меншою;
- довжина між піками зменшується ефективніше при зміні довжини активної області.

Також не слід забувати, що збільшення піків на ВАХ РТД може призвести до того, що вони почнуть зливатися, внаслідок чого зменшиться контрастність ВАХ.

Іншим способом управління ВАХ РТД є концентрація електронів (положення рівня Фермі). При збільшенні їх концентрації загальний струм РТД збільшується, тобто можна отримати більш потужний пристрій, проте контрастність ВАХ зменшиться.

Було помічено, що, починаючи з кімнатної температури, ВАХ змодельованого РТД втрачає свої особливості, і діод працює майже як звичайний резистор. Тому при роботі таких РТД доречно слідкувати, щоб температура не перебільшувала порогової.

Мала концентрація носіїв, а також температура, важливі для того, щоб був помітний перший пік ВАХ, інакше він зіллється з другим.

Результати ВАХ РТД з параболічною потенціальною ямою свідчать про наявність більше двох піків на ВАХ, тому даний пристрій можна використовувати в багатозначній логіці, що перспективна на даний час, саме в якості елемента пам'яті та в цифрових схемах з багаторівневою струмовою логікою.



## СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Sun J.P. et. al. Resonant tunneling diodes: models and properties // Proceedings of IEEE. – 1998. – Vol. 86. – P. 641–661.
2. Frensley W. R. Boundary conditions for open quantum systems driven far from equilibrium // Rev. Mod. Phys. – 1990. – Vol. 62. – P. 745–791.
3. Ferry D. K., Grubin H. L. Modeling of quantum transport in semiconductor devices // Solid State Physics, Advances in Research and Application. – 1955. – Vol. 49. – P. 283–448.
4. Brown E. R., Soderstrom J. R., Parker C. D., Mahoney L. J., Molvar K. M., McGill T. C. // Oscillation up to 712 GHz in InAs/AlSb resonant tunneling diodes // Appl. Phys. Lett. – 1991. – Vol. 58. – P. 2291–2293.
5. Haddad G. I., Reddy U. K., Sun J. P., Mains R. K. The bound-state resonant tunneling transistor (BSRTT): fabrication, d.c. I–V characteristics, and high-frequency properties // Superlattices and Microstructures. – 1990. – Vol. 7. – P. 369–374.
6. Yokoyama N. et. al. Resonant-tunneling transistors using InGaAs-based materials // Proc. SPIE. – 1988. – Vol. 943. – P. 14–21.
7. Драгунов В.П., Неизвестный В.П., Гридчин В.А. Основы нанoeлектроники / Новосибирск: НТГУ, 2000. – 6–8 с.
8. Абрамов И.И. Проблемы и принципы физики и моделирование приборных структур микро- и нанoeлектроники. V. Резонансно-туннельные структуры // Нано- и микросистемная техника. – 2007. – №3. С. 57-70.
9. Абрамов И.И. Проблемы и принципы физики и моделирование приборных структур микро- и нанoeлектроники. II. Модели полуклассического подхода // Нано- и микросистемная техника. – 2006. – №9. С. 26-36.
10. Kiehl R.A., Sollner G. High speed heterostructure devices // Semiconductors and semimetals. – 1994. – Vol. 41. – P. 6-8.

11. Moskalyuk V., Fediai A. Simplified analytical model of resonant-tunneling diode // Abstracts Proceedings of 32<sup>nd</sup> International Spring Seminar on Electronics Technology "ISSE 2009", May, 13-16, 2009. Brno, Czech Republic. – ISBN 978-80-214-3874-3
12. Борисенко В.Е., Ворольева А.И. Нанoeлектроника: учеб. пособ. Нанотехнология / Мн: БГУИР, 2003. – 3-10 с. – ISBN 985-444-493-7 (ч. 2).
13. Ismail K. Electron resonant tunneling in Si/SiGe double barrier diodes // Appl. Phys. Lett. – 1991. – Vol. 59. – P. –973.
14. Електронний архів під ініціативою Федерального Міністерства Освіти та Досліджень Германії. Режим доступу до ресурсу: [http://www.nanotruck.de/fileadmin/nanoTruck/redaktion/download/Nanoelectronics\\_Roadmap\\_EU.pdf](http://www.nanotruck.de/fileadmin/nanoTruck/redaktion/download/Nanoelectronics_Roadmap_EU.pdf)
15. Гусев А.И. Наноматериалы, наноструктуры, нанотехнологии. / М.: ФИЗМАТЛИТ, 2005. – 416 с. – ISBN 5-9221-0582-5.
16. Боцула О.В., Прохоров Э.Д., Безмаль И.П. Резонансно-туннельные диоды на основе нитридов  $\text{AlN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ,  $\text{GaN}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  // Радиофизика и электроника – 2008. – Т. 13, № 3. – 518–522 с.
17. Борисенко В.Е. Нанoeлектроника: учеб. пособ. Перенос носителей в низкоразмерных структурах / Мн: БГУИР, 2003. – 76 с. – ISBN 985-444-721-9 (ч. 3).
18. Федяй А.В., Тисный И.С. Моделирование резонансно-туннельного диода методом функций Эйри НТУУ «КПИ» // Н.-техн. сб. «Электроника и связь», тематический выпуск «Электроника и нанотехнологии», ч.1, № 2-3, 2009, с. 19-21.
19. Дослідження новітніх нанорозмірних напіпровідникових структур та приладів для розроблення і впровадження технологій їх виготовлення / Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут» ; кер. В. І. Тимофєєв. – К., 2008. – 168 с. – Виконавці: Тимофєєв В.І., Москалюк В.О., Беявський Є. Д., Семеновська О.В., Фалєєва О. М.,

- Федяй А. В., Куліков К. В., Овчарук М. Г. [та ін.]. – Бібліогр.: с. 160-168. – № ДР 0107U002392. – [Інв. №?].
20. Tsu R. Superlattice to nanoelectronics. – London: Elsevier, 2005. – P. –325.
21. Електронний архів фізико-технічного інституту ім. Іоффе А.Ф. Російської Академії Наук. Режим доступу до ресурсу:  
<http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/rintroduction.html>
22. Abramowitz M., Stegun I. Handbook of mathematical functions with formulas, graphs, and mathematical tables // National bureau of standards applied mathematics series. – 1972. – P. 504–506, 686–687.
23. Москалюк В. А., Синекон Ю. С., Кассинг Р. Физика электронных процессов: Учеб. пособие. – Ч. I: Электронные состояния. – К.: УкрИНТЭИ, 2001. –148 с.
24. Brayton R.K., Khatri S. P. Multi-valued logic synthesis // Proc. 12th Int. Conf. on VLSI Design. – 1999. – P. 196–206.
25. Hurst S. L. Multiple-valued logic A its status and its future // IEEE Transactions on Computers. – 1984. – V. C-33, No. 12. – P. 1160–1179.
26. Smith K. C. The Prospects for Multivalued Logic: A Technology and Applications View // IEEE Transactions on Computers. – 1981. – V. C-30, No. 9. – P. 619–634.
27. Калинин В. А. Применение многозначной логики в цифровой технике/В. А. Калинин // Приборы и техника эксперимента, 2006. – 5–14 с.
28. Абрамов И.И. Теоретическое исследование приборных структур, содержащих резонансно-туннельные диоды // Журнал технической физики. – 2001. – Т. 53, вып. 6. – с. 128–133.

## Додаток А

Програма розрахунку підінтегральної функції формули Тсу-Есакі (див. формулу 2.9)  
для РТД з параболічною потенціальною ямою, написана в Matlab 6.5

```
function fun=fun(E,V,Temp,Ef)

%Постоянные
me=0.063*9.1e-31;
q=1.6e-19;
h=(6.63e-34)/(2*pi);
kb=1.38e-23;
%-----

%Параметры
a=20e-9;
b=2e-9;
xmmax=0.2;
xmmin=0;
Energy=E;
W=2*b+a;
dU=q*1.247*(xmmax-xmmin);
Umax=q*1.247*xmmax;
Umin=q*1.247*xmmin;
K=(q*kb*me*Temp)/(pi*pi*2*h*h*h);%коэффициент при интеграле
%-----

%Определим размер вектора Energy
SizeE(:,:)=size(Energy);
j=SizeE(1,2);
%-----

%Счетчик для T(E) справа налево
counter3=1;
%-----

%Выбор элемента вектора энергии
counter2=1;
while counter2<=j
E=Energy(1,counter2);
%-----

switch b
case 0
%*****b=0*****
%для 1 участка в x=0
x=0;
me1=me;
k1=(-E*2*me1/(h*h))^0.5;
```

```

M10=[1 1;
      k1/me1 -k1/me1];
%-----

%для 2 участка в x=0
me2=me;
x=0;
%замены параболического участка
z=x+0.5*(-W+(a*a*V)/(4*dU*W));
sig=(8*me2*dU)/(h*h*a*a);
tau=-1*(dU/(a*a))*((-W+(a*a*V)/(4*dU*W))^2)+((dU*W*W)/(a*a))+Umin-E;
lam=(2*me2*tau)/(h*h*((4*sig)^0.5));
ksi=((4*sig)^0.25).*z;
dksi=((4*sig)^0.25);
dc=ksi*dksi;
expa=exp(-0.25*(ksi.*ksi));
%-----
m2110=expa.*hyper(0.5*lam+0.25,0.5,0.5*ksi*ksi);
m2120=ksi.*expa.*hyper(0.5*lam+0.75,1.5,0.5*ksi*ksi);
m2210=((expa.*hyper(0.5*lam+0.25,0.5,0.5*ksi*ksi)*(-
ksi/2)*dksi)+(expa*hyperproizvodnaiaksi(0.5*lam+0.25,0.5,0.5*ksi*ksi)*dc))/(me2);
m2220=((ksi*expa*hyperproizvodnaiaksi(0.5*lam+0.75,1.5,0.5*ksi*ksi)*dc
+(hyper(0.5*lam+0.75,1.5,0.5*ksi*ksi)*(dksi*expa+ksi*expa*(-ksi/2)*dksi)))/(me2);
M20=[m2110 m2120;
      m2210 m2220];
%-----

%для 2 участка в x=a
me2=me;
x=a;
%замены параболического участка
z=x+0.5*(-W+(a*a*V)/(4*dU*W));
sig=(8*me2*dU)/(h*h*a*a);
tau=-1*(dU/(a*a))*((-W+(a*a*V)/(4*dU*W))^2)+((dU*W*W)/(a*a))+Umin-E;
lam=(2*me2*tau)/(h*h*((4*sig)^0.5));
ksi=((4*sig)^0.25).*z;
dksi=((4*sig)^0.25);
dc=ksi*dksi;
expa=exp(-0.25*(ksi.*ksi));
%-----
m211a=expa.*hyper(0.5*lam+0.25,0.5,0.5*ksi*ksi);
m212a=ksi.*expa.*hyper(0.5*lam+0.75,1.5,0.5*ksi*ksi);
m221a=((expa.*hyper(0.5*lam+0.25,0.5,0.5*ksi*ksi)*(-
ksi/2)*dksi)+(expa*hyperproizvodnaiaksi(0.5*lam+0.25,0.5,0.5*ksi*ksi)*dc))/(me2);
m222a=((ksi*expa*hyperproizvodnaiaksi(0.5*lam+0.75,1.5,0.5*ksi*ksi)*dc
+(hyper(0.5*lam+0.75,1.5,0.5*ksi*ksi)*(dksi*expa+ksi*expa*(-ksi/2)*dksi)))/(me2);
M2a=[m211a m212a;
      m221a m222a];
%-----

%для 3 участка в x=a
x=a;

```

```

me3=me;
k3=((V-E)*2*me3/(h*h))^0.5; %!!! E-V
m311a=exp(k3*x);
m312a=exp(-k3*x);
m321a=k3*exp(k3*x)/me3;
m322a=-k3*exp(-k3*x)/me3;
M3a=[m311a m312a;
      m321a m322a];
%-----

%Составим Матрицы Передачи
T12=(reversematrix(M20))*M10;
if E==V
    T=M2a*T12;
else
    T23=(reversematrix(M3a))*M2a;
    T=T23*T12;
end
A3=T(1,1)-(T(2,1)*T(1,2))/T(2,2);
%-----

otherwise
%*****В не равен 0*****
%для 1 участка в x=0
x=0;
me1=me;
k1=(-E*2*me1/(h*h))^0.5;
M10=[1 1;
      k1/me1 -k1/me1];
%-----

%для 2 участка в x=0
me2=me;
x=0;
%замены линейного участка
F=-V/(2*b+a);
if F>100*q
    ksi=(x+(E-Umax)/(F))*(((2*me2*F)/(h*h))^0.333333333333);
    dksi=-((2*me2*F)/(h*h))^0.333333333333;
%-----
    m2110=airy(-ksi);
    m2120=airy(2,-ksi);
    m2210=airy(1,-ksi)*dksi/me2;
    m2220=airy(3,-ksi)*dksi/me2;
    M20=[m2110 m2120;
          m2210 m2220];
else%плоские волны
    k2=((E-Umax)*2*me2/(h*h))^0.5;
    M20=[1 1;
          i*k2/me2 -i*k2/me2];
end
%-----

```

```

% для 2 участка в x=b
x=b;
me2=me;
% замены линейного участка
F=-V/(2*b+a);
if F>100*q
ksi=(x+(E-Umax)/(F))*(((2*me2*F)/(h*h))^0.3333333333333333);
dksi=-((2*me2*F)/(h*h))^0.3333333333333333;
%-----
m211b=airy(-ksi);
m212b=airy(2,-ksi);
m221b=airy(1,-ksi)*dksi/me2;
m222b=airy(3,-ksi)*dksi/me2;
M2b=[m211b m212b;
      m221b m222b];
%-----
else% плоские волны
k2=((E-Umax)*2*me2/(h*h))^0.5; %!!! E-V
m211b=exp(i*k2*x);
m212b=exp(-i*k2*x);
m221b=i*k2*exp(i*k2*x)/me2;
m222b=-i*k2*exp(-i*k2*x)/me2;
M2b=[m211b m212b;
      m221b m222b];
end

% для 3 участка в x=b
me3=me;
x=b;
% замены параболического участка
z=x+0.5*(-W+(a*a*V)/(4*dU*W));
sig=(8*me3*dU)/(h*h*a*a);
tau=-1*(dU/(a*a))*((-W+(a*a*V)/(4*dU*W))^2+((dU*W*W)/(a*a))+Umin-E);
lam=(2*me3*tau)/(h*h*((4*sig)^0.5));
ksi=((4*sig)^0.25).*z;
dksi=((4*sig)^0.25);
dc=ksi*dksi;
expa=exp(-0.25*(ksi.*ksi));
%-----
m311b=expa.*hyper(0.5*lam+0.25,0.5,0.5*ksi*ksi);
m312b=ksi.*expa.*hyper(0.5*lam+0.75,1.5,0.5*ksi*ksi);
m321b=((expa.*hyper(0.5*lam+0.25,0.5,0.5*ksi*ksi)*(-ksi/2)*dksi)
+(expa.*hyperproizvodnaiaksi(0.5*lam+0.25,0.5,0.5*ksi*ksi)*dc))/(me3);
m322b=((ksi*expa.*hyperproizvodnaiaksi(0.5*lam+0.75,1.5,0.5*ksi*ksi)*dc)
+(hyper(0.5*lam+0.75,1.5,0.5*ksi*ksi)*(dksi*expa+ksi*expa*(-ksi/2)*dksi)))/(me3);
M3b=[m311b m312b;
      m321b m322b];
%-----

% для 3 участка в x=b+a
me3=me;

```

```

x=b+a;
% замены параболического участка
z=x+0.5*(-W+(a*a*V)/(4*dU*W));
sig=(8*me3*dU)/(h*h*a*a);
tau=-1*(dU/(a*a))*((-W+(a*a*V)/(4*dU*W))^2+((dU*W*W)/(a*a))+Umin-E;
lam=(2*me3*tau)/(h*h*((4*sig)^0.5));
ksi=((4*sig)^0.25).*z;
dksi=((4*sig)^0.25);
dc=ksi*dksi;
expa=exp(-0.25*(ksi.*ksi));
%-----
m311ba=expa.*hyper(0.5*lam+0.25,0.5,0.5*ksi*ksi);
m312ba=ksi.*expa.*hyper(0.5*lam+0.75,1.5,0.5*ksi*ksi);
m321ba=((expa.*hyper(0.5*lam+0.25,0.5,0.5*ksi*ksi)*(-ksi/2)*dksi)
+(expa*hyperproizvodnaiaksi(0.5*lam+0.25,0.5,0.5*ksi*ksi)*dc))/(me3);
m322ba=((ksi*expa*hyperproizvodnaiaksi(0.5*lam+0.75,1.5,0.5*ksi*ksi)*dc)
+(hyper(0.5*lam+0.75,1.5,0.5*ksi*ksi)*(dksi*expa+ksi*expa*(-ksi/2)*dksi)))/(me3);
M3ba=[m311ba m312ba;
m321ba m322ba];
%-----

% для 4 участка в x=b+a
x=b+a;
me4=me;
% замены линейного участка
F=-V/(2*b+a);
if F>100*q
ksi=(x+(E-Umax)/(F))*(((2*me4*F)/(h*h))^0.333333333333);
dksi=-((2*me4*F)/(h*h))^0.333333333333;
%-----
m411ba=airy(-ksi);
m412ba=airy(2,-ksi);
m421ba=airy(1,-ksi)*dksi/me4;
m422ba=airy(3,-ksi)*dksi/me4;
M4ba=[m411ba m412ba;
m421ba m422ba];
else% плоские волны
k4=((E-Umax)*2*me2/(h*h))^0.5; % !!! E-V
m411ba=exp(i*k4*x);
m412ba=exp(-i*k4*x);
m421ba=i*k4*exp(i*k4*x)/me4;
m422ba=-i*k4*exp(-i*k4*x)/me4;
M4ba=[m411ba m412ba;
m421ba m422ba];
end
%-----

% для 4 участка в x=2b+a
x=2*b+a;
me4=me;
% замены линейного участка
F=-V/(2*b+a);

```



```

if F>100*q
    ksi=(x+(E-Umax)/(F))*(((2*me4*F)/(h*h))^0.3333333333333333);
    dksi=-((2*me4*F)/(h*h))^0.3333333333333333;
%-----
    m4112ba=airy(-ksi);
    m4122ba=airy(2,-ksi);
    m4212ba=airy(1,-ksi)*dksi/me4;
    m4222ba=airy(3,-ksi)*dksi/me4;
    M42ba=[m4112ba m4122ba;
           m4212ba m4222ba];
else% плоские волны
    k4=((E-Umax)*2*me2/(h*h))^0.5;    %!!! E-V
    m4112ba=exp(i*k4*x);
    m4122ba=exp(-i*k4*x);
    m4212ba=i*k4*exp(i*k4*x)/me4;
    m4222ba=-i*k4*exp(-i*k4*x)/me4;
    M42ba=[m4112ba m4122ba;
           m4212ba m4222ba];
end
%-----

% для 5 участка в x=2b+a
x=2*b+a;
me5=me;
k3=((V-E)*2*me5/(h*h))^0.5;    %!!! E-V
m5112ba=exp(k3*x);
m5122ba=exp(-k3*x);
m5212ba=k3*exp(k3*x)/me5;
m5222ba=-k3*exp(-k3*x)/me5;
M52ba=[m5112ba m5122ba;
        m5212ba m5222ba];
%-----

% Составим Матрицы Передачи
T12=(reversematrix(M20))*M10;
T23=(reversematrix(M3b))*M2b;
T34=(reversematrix(M4ba))*M3ba;
if E==V
    T=M42ba*T34*T23*T12;
else
    T45=(reversematrix(M52ba))*M42ba;
    T=T45*T34*T23*T12;
end
A3=T(1,1)-(T(2,1)*T(1,2))/(T(2,2));
%-----

end% закрытие case
%-----

% Коэффициент прохождения слева направо
Dleftright(1,counter2)=A3*(A3');
%-----

```

```

%Коэффициент прохождения справа налево
Drightleft(1,counter2)=Dlefttright(1,counter2);
%-----

%Подинтегральное выражение (ток правого резервуара)
fun1=K*log(exp(-(E-Ef)/(kb*Temp))+1)*Dlefttright(1,counter2);
%-----

%Подинтегральное выражение (ток левого резервуара)
fun2=K*log(exp(-(E-Ef+abs(V))/(kb*Temp))+1)*Drightleft(1,counter2);
%-----

%Подинтегральное выражение (суммарный ток)
fun(1,counter2)=fun1-fun2;
%-----

counter2=counter2+1;
end%закрытие цикла энергии
%-----

```

## Додаток Б

Програма розрахунку ВАХ для РТД з параболічною потенціальною ямою, написана в Matlab 6.5

```
clc;
clear all;

%Константи
q=1.6e-19;
%-----

%Параметры
Temperature=[7 77 300];
Ef=0.05*q;%енергия Ферми
%-----

%Расчет тока при различных V и Temp
for i = 3
    V=0;
    j=0;
    Temp=Temperature(1,i);
    while V>-1*q
        j=j+1;
        I(i,j)=quad(@fun1,0,0.8*q,1e3,[],V,Temp,Ef);
        U(1,j)=-V;
        V=V-0.01*q;
    end
end
%-----

%Постройка графиков
graph=plot(U/q,I,'k');
title('График зависимости I=I(V)');
xlabel('Напряга, эВ');
ylabel('Густина струму, А/м2');
grid on;
set(graph,'LineWidth',2);
legend('T= 7K','T= 150K', 'T= 300K');
%-----
```