

УДК 004.421:548.55

Оксанич А.П., Петренко В.Р. Автоматизована система управління компоновкою загрузок при вирощуванні монокристалів кремнію для сонячних ФЕП

Розглянуті функціональна структура і алгоритми вирішення завдань автоматизованої системи керування компоновкою завантажень при вирощуванні монокристалів кремнію для сонячних ФЕП. Наведено формалізований опис алгоритму керування процесом формування змішаних завантажень (обіговий матеріал + полікристалічний кремній), що оптимізує використання обігового матеріалу.

Ключові слова: вирощування монокристалів кремнію, сонячні фотоелектричні перетворювачі (ФЕП).

Іл. 2. Бібліогр.: 5 назв.

UDC 004.421:548.55

Oksanych A.P., Petrenko V.R. Automated System for Controlling Load Arrangements in Growing Silicon Monocrystals for Solar Photo-Electrical Transformers

The article determines the functional structure and algorithms for solving the problem of automated system for controlling load arrangements in growing silicon monocrystals for solar photo-electrical transformers. There is a formalized description of algorithm for controlling the process of forming mixed loads (circulating material + polycrystalline silicon), which optimizes the use of circulating material.

Key words: growing of a silicon monocrystal, solar photoelectric transducer.

Fig. 2. Ref.: 5 items.

УДК 621.382.323

ПРОБЛЕМЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ КОМПОНЕНТОВ НАНОЭЛЕКТРОНИКИ НА ПРИМЕРЕ РЕЗОНАНСНО-ТУННЕЛЬНОГО ДИОДА

В.А. Москалюк, А.В. Федяй

Национальный технический университет Украины «КПИ»

Очерчена проблема перехода на компоненты твердотельной электроники, принцип которых основан на квантовых эффектах. Определена проблема моделирования таких компонентов. Введен один из наиболее перспективных методов их моделирования.

Ключевые слова: резонансно-туннельный диод, моделирование.

Введение

Резонансно-туннельный диод (РТД) – один из наиболее перспективных компонентов твердотельной электроники [1]. До недавних пор основные усилия производителей интегральных микросхем были направлены на уменьшение характерных размеров электронных компонентов. Это достигалось совершенствованием технологии производства. За счет этого выполнялся так называемый «закон Мура» [2], то есть количество электронных компонентов на единицу площади микросхемы со временем увеличивалось линейно, соответственно увеличивалось и быстродействие. В ближайшее же время ожидается, что столь благоприятный закон перестанет выполняться. Произойдет это в связи с тем, что размеры компонентов достигнут тех величин, на которых перестанут действовать физические законы, обеспечивающие их функционирование. Естественным выходом из сложившейся ситуации есть переход на компоненты, чьи малые размеры не будут препятствием для функционирования их на КВЧ. Также естественно, что принцип работы этих последних будет продиктован законами квантовой механики скорее, нежели квазиклассической теории, весьма

основательно отвечающей на все вопросы функционирования «достаточно больших» современных компонентов.

Поэтому компании *Texas Instrument*, *Intel*, а также многие научные институты активно исследуют возможность перехода на компоненты, работающих не вопреки, а благодаря законам квантовой механики. Наиболее близким к промышленному уровню является РТД. На основе этих компонентов были созданы сумматоры в гигагерцовом диапазоне частот (исследовательская программа *DAPRA's Ultra Electronics Program* (США)), продемонстрированы ЦАП частотой 2 ГГц, АЦП частотой 3 ГГц, тактовые генераторы, регистры сдвига, статические ЗУПВ с ультранизким потреблением энергии – до 50 нВт/бит [3]. Предельная частота работы РТД как отдельного компонента лежит в терагерцовом диапазоне частот.

Абстрагируясь от технологических проблем создания таких структур, отметим сложность протекающих в них процессов. Если для понимания принципа функционирования РТД достаточно элементарных знаний квантовой механики, то количественное описание включают в себя решение задачи многих тел в рамках квантовой механики с привлечением таких специальных разделов квантовой теории как теория рассеивания, а также таких методов квантовой механики как метод вторичного квантования.

Оказалось, что для наиболее органичного учета всей совокупности квантовых эффектов, лучше всего подходит метод функций Грина.

Описание носителей заряда как квазиклассических частиц

Для достаточно больших электронных компонентов достаточно адекватным оказывается описание электронов и дырок как квазиклассических частиц (далее для простоты мы будем рассматривать электроны в зоне проводимости): уравнения движения для них записываются практически так же, как в классической механике.

$$\frac{d\hbar\mathbf{k}}{dt} = -\nabla_{\mathbf{r}}E_c(\mathbf{r},t), \quad (1)$$

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{1}{\hbar}\nabla_{\mathbf{k}}E(\mathbf{k}) + F_s(\mathbf{r},t), \quad (2)$$

где $\hbar\mathbf{k}$ - импульс частицы, E_c - дно зоны проводимости, \mathbf{r} - радиус-вектор электрона, E – энергия электрона, F_s - случайная сила, моделирующая процессы рассеивания.

Решая вместе уравнения движения в пространстве импульсов (1) и координат (2), получим траекторию каждой из частиц. Методы Монте-Карло позволяют решить эту систему напрямую. Менее затратный с точки зрения вычислительных ресурсов способ – не рассматривать отдельно движение каждого электрона, а найти вероятность заполнения состояния в определенной точке фазового пространства в определенный момент времени, то есть функцию распределения электронов, $f(\mathbf{r},\mathbf{k},t)$, из которой выводятся все величины, которые обычно интересуют исследователя [4]. Такую задачу обычно решают, сформулировав кинетическое уравнение Больцмана (КУБ):

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v}\nabla_{\mathbf{r}}f - \frac{q\boldsymbol{\varepsilon}}{\hbar\mathbf{k}}\nabla_{\mathbf{k}}f = \hat{C}f, \quad (3)$$

где \mathbf{v} - скорость электрона, q - его заряд, ϵ - напряженность электрического поля, $\hat{C}f$ - интеграл столкновений, учитывающий процессы рассеивания. Однако, в конечном счете, задачу по нахождению усредненных величин решают, получив из КУБ уравнения сохранения и непрерывности [5], а затем решают последние как систему дифференциальных уравнений.

Следует отметить, что усреднения, упомянутые выше, предполагают, что длина свободного пробега электрона намного меньше, чем характерная длина компонента. Если же наоборот, характерная длина компонента намного меньше длины свободного пробега электрона, то транспорт можно считать полностью баллистическим, т.е. электрон за время своего пробега не испытывает столкновений. Этот транспорт хорошо описывается в рамках формализма Ландауэра-Буттикера, описанного в следующем разделе.

В достаточно малых компонентах играют роль также волновые свойства электрона. Как только последние проявляются, говорить о понятии траектории частицы в фазовом пространстве нельзя: операторы координаты и импульса не коммутируют. Решающее значение этот факт играет в РТД, где процессы переноса связаны с туннелированием через два потенциальных барьера. Классическая частица пройти под потенциальным барьером не может, поэтому описание электрона как квазиклассической частицы здесь неприемлемо.

Формализм Ландауэра-Буттикера

С точки зрения квантовой механики, электрону соответствует т.н. волна де Бройля, а уравнение движения для электрона (без учета спина) – уравнение Шредингера, из которого можно получить волновую функцию $\Psi_n(\mathbf{r})$:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \Psi_n(\mathbf{r}) = E_n \Psi_n(\mathbf{r}), \quad (4)$$

Наноразмерный прибор обычно условно разбивают на три области: левую и правую контактную области (они считаются достаточно длинными или полубесконечными), а также узкую (рабочую) область «устройства», в которой происходят квантовые процессы (рис. 1). Эти последние «формируют» принцип работы компонента, а исследование «устройства» является главной проблематикой работ исследователей. В отсутствие процессов хаотизации фазы (которые обусловлены процессами рассеивания) было показано, что ожидаемое значение Q произвольного оператора \hat{Q} в области устройства будет равно [6]:

$$Q = \sum_{k,s} \langle \Psi_D^L | \hat{Q} | \Psi_D^L \rangle f_L(E) + \langle \Psi_D^R | \hat{Q} | \Psi_D^R \rangle f_R(E),$$

где $f_L(E)$ и $f_R(E)$ - функции распределения Ферми соответственно в левом и правом проводящем контактах, $\langle \Psi_D^L |$ и $\langle \Psi_D^R |$ - векторы состояния электронов, падающих соответственно слева и справа (кет-векторы). Суммирование ведется по импульсам, k , и спинам, s , причем последнее чаще всего не производится, а вся сумма умножается на «2» для учета двух возможных направлений спина.

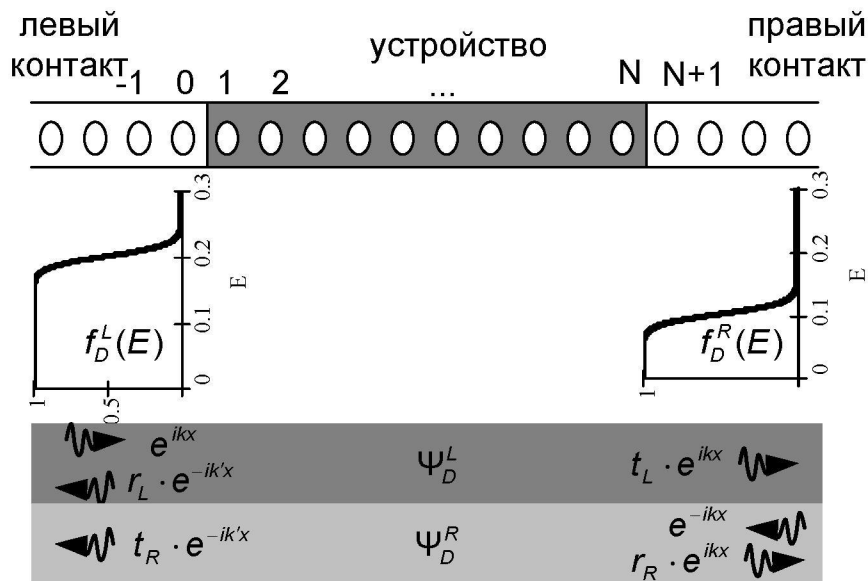


Рис. 1. Представление устройства в формализме Ландауэра-Буттикера

Плотность тока в данном формализме определяется из формулы:

$$J(x) = 2 \sum_k \frac{e\hbar}{2mi} \left[(\Psi_D^L(x))^\dagger \frac{d\Psi_D^L(x)}{dx} f_L(E) + (\Psi_D^R(x))^\dagger \frac{d\Psi_D^R(x)}{dx} f_R(E) \right].$$

При этом с уравнением Шредингера обычно самосогласованно решается уравнения Пуассона. Это позволяет учесть пространственное перераспределение заряда, и, соответственно, повысить адекватность модели.

Такое представление о процессах в наноразмерных структурах более адекватно отображает процессы в них происходящие, а именно: электроны уже рассматриваются и как волны; ошибочное представление о них как о классических частицах упраздняется.

Однако самым существенным недостатком такого описания является то, что в рамках последнего тяжело (а иногда – невозможно) рассматривать процессы рассеивания, особенно – неупругого, а также электрон-электронное взаимодействие. Нельзя учесть также влияния окружения (контактных областей) в которых могут формироваться области с низкой размерностью и квазидискретные энергетические уровни. Напомним, что выше мы приняли распределение электронов в контактных областях равновесным, и описывали его равновесными (хотя и разными) функциями Ферми.

Формализм неравновесных функций Грина

Метод функций Грина был разработан достаточно давно, и признавался как один из наиболее удачных методов в теории систем, состоящих из многих частиц. Сейчас он раскрылся в полной мере, так как задачи, стоящие перед исследователями вынуждают к его использованию. Строго говоря, для обоснования этого метода необходимо применение операций вторичного квантования и квантовой статистической механики. Мы же введем его феноменологически, отметив при этом, что эта часть теории может быть получена строго из квантовой кинетики. Также отметим,

что рассмотренный ниже метод адаптирован к случаю установившихся процессов в твердом теле.

Для получения интересующих нас величин (плотности тока, концентрации электронов, распределения потенциала) в наноразмерном устройстве прежде всего формулируют Гамильтониан сильной связи. Рассмотрим одномерное устройство, состоящее из цепочки атомов (рис. 1).

Запишем дискретное стационарное уравнение Шредингера для всего прибора, положив, что оператор Гамильтона соответствует Гамильтониану сильной связи:

$$(\mathbf{H} - \mathbf{E}) \Psi(x) = 0, \quad (5)$$

где \mathbf{H} - оператор Гамильтона, \mathbf{E} - энергия электрона. Если считать проводящие контакты устройства бесконечными, то матрицы \mathbf{H} и \mathbf{E} также будут иметь бесконечную размерность. Договоримся нумеровать атомы решетки от 1 до N (см. рис. 1).

Распишем более подробно матричное уравнение (5):

$$(\mathbf{H} - \mathbf{E})\Psi = 0 \rightarrow \begin{pmatrix} \bullet & \bullet & \bullet & & & & \\ & \bullet & \bullet & \bullet & -t & & \\ & & -t & U_1 + 2t & -t & & \\ & & & -t & \dots & -t & \\ & & & & -t & U_N + 2t & -t \\ & & & & & \bullet & \bullet & \bullet \\ & & & & & & \bullet & \bullet & \bullet \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bullet \\ \bullet \\ \Psi_{-1} \\ \Psi_0 \\ \Psi_{+1} \\ \bullet \\ \bullet \\ \bullet \end{pmatrix} = 0, \quad (6)$$

где $t \equiv \frac{\hbar^2}{2m^* a^2}$, a - расстояние между атомами цепочки, m^* - эффективная масса электрона; U_i - локальный потенциал в точке решетки i .

Функции Грина определяются из уравнения $(\mathbf{E} - \mathbf{H})\mathbf{G}(\mathbf{E}) = \mathbf{I}$, где \mathbf{I} - единичная матрица бесконечной размерности.

Выделив в матрице $(\mathbf{E} - \mathbf{H})$ и волновых функциях Ψ отдельно подматрицы, соответствующие области «устройства», которая будет иметь размерность $(N \times N)$, и две полубесконечные матрицы, соответствующие контактным областям, аналогично разобьем вектор волновой функции и функцию Грина. Получим:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{E} - \mathbf{H}_1 & -\tau_1 & 0 \\ -\tau_1^\dagger & \mathbf{E} - \mathbf{H}_d & -\tau_2^\dagger \\ 0 & -\tau_2 & \mathbf{E} - \mathbf{H}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{G}_1 & \mathbf{G}_{1d} & \mathbf{G}_{12} \\ \mathbf{G}_{d1} & \mathbf{G}_d & \mathbf{G}_{d2} \\ \mathbf{G}_{21} & \mathbf{G}_{2d} & \mathbf{G}_2 \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{I} & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{I} & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{I} \end{bmatrix} \quad (7)$$

Если считать \mathbf{g}_1 и \mathbf{g}_2 - функциями Грина, соответствующими *изолированным* первому и второму проводящему контакту (можно найти точное выражение для таких функций), то из (7) легко получить выражение, выражающее функцию Грина устройства (*уже с учетом проводящих контактов!*) через функции Грина изолированных полубесконечных контактов [7]:

$$\mathbf{G}_d = (\mathbf{E} - \mathbf{H}_d - \Sigma_1 - \Sigma_2)^{-1},$$

где $\Sigma_1 = \tau_1^\dagger \mathbf{g}_1 \tau_2$ и $\Sigma_2 = \tau_2^\dagger \mathbf{g}_2 \tau_2$ - так называемые собственные энергии.

Аналогично можно учесть через собственные энергии эффекты упругого и неупругого рассеивания, неровности границ раздела веществ, электрон-электронное взаимодействие, и расширить этот аппарат более, чем на одномерные системы.

Введя так называемую спектральную функцию $\mathbf{A} \equiv i(\mathbf{G} - \mathbf{G}^\dagger)$, можно получить плотность электронных состояний:

$$d(r, E) = \frac{1}{2\pi} A(r, r, E).$$

В простейшем случае ток через активную область наноразмерного устройства будет определяться выражением:

$$I = \frac{2e}{h} \int [f_L(E) - f_R(E)] \bar{T}(E) dE,$$

где $\bar{T} = \text{Sp}(\Gamma_1 \mathbf{G} \Gamma_2 \mathbf{G}^\dagger)$, в котором $\Gamma_{1,2} = i(\Sigma_{1,2} - \Sigma_{1,2}^\dagger)$, а Sp обозначает операцию взятия следа матрицы.

Выводы

Тенденция к уменьшению характерных размеров компонентов традиционной базы твердотельной электроники приведет в скором времени к тому, что они достигнут масштаба, на котором квантовые эффекты приведут к невозможности их функционирования. Одним из выходов из этой ситуации является переход на компоненты, работающие не вопреки, а благодаря квантовым эффектам, например РТД, рабочие частоты которого лежат в терагерцовом диапазоне. Для моделирования РТД не применимы ни представление об электроне как о квазиклассической частице, ни формализм баллистического транспорта Ландауэра-Буттикера. В этой работе дано введение в наиболее адекватный и удобный метод, который подходит для моделирования компонентов с длиной рабочей области несколько десятков нанометров.

Литература

1. Алферов Ж.И. и др. Наноматериалы и нанотехнологии // Микросистемная техника. - 2003. - N 8. - С.3-13.
2. Sun J.P. et. al. Resonant tunneling diodes: models and properties // Proceedings of IEEE. - 1998. - Vol. 86. - P. 641-661.
3. M.C. Roco, S. Williams, P. Alivisatos. Nanotechnology Research Directions: IWGN Workshop Report. Vision for Nanotechnology R&D in the Next Decade, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht/Boston/London, 1999, 318 p. (<http://www.wtec.org/loyola/nano/IWGN.Research.Directions>).
4. Москалюк В.О. Фізика електронних процесів. Частина 2. Динамічні процеси: Навч. Посіб. – К.: ІВЦ „Видавництво „Політехніка”, 2004. – 180 с.
5. В.И. Тимофеев, Е.М. Фалеева. Анализ релаксационных процессов в субмикронном гетеротранзисторе с квантовыми точками // Н.-техн. сб. «Электроника и связь», Москалюк В.А., Медяный Н.Л. Статическая модель резонансно-туннельного диода. // Н.-техн. сб. «Электроника и связь», тематический выпуск «Проблемы электроники», ч.1, 2008. – С. 100-104.
6. Lake R. et. al. Single and multiband modeling of quantum electron transport through layered semiconductor devices // Journal of Applied Physics. – 1997. – Vol. 81. - P. 7845-7869.
7. Datta S. Quantum Transport: Atom to Transistor, 2nd edn. - Cambridge University Press, 2005. – 404 p.

УДК 621.382.323

Проблеми моделювання компонентів наноелектроніки та прикладі резонансно-тунельного діоду

Окреслена проблема переходу на компоненти твердотільної електроніки, принцип яких заснований на квантових ефектах. Визначено проблему моделювання таких компонентів. Введено один із найбільш перспективних методів їх моделювання.

Ключові слова: резонансно-тунельний діод, моделювання.

UDC 621.382.323

The problem of nanoscale devices modeling: resonant tunneling diode

The problem of changing electronic devices to those based on quantum effects was drawing. The problem of modeling of such devices was defined. One of the most perspective methods of their modeling was introduced.

Key words: resonant-tunneling diode, modeling.

УДК 378.016

КОМП'ЮТЕРНА НАВЧАЛЬНА СИСТЕМА «АРИФМЕТИЧНІ ОСНОВИ ЕОМ»

С.К. Гладун

Державний університет інформаційно-комунікаційних технологій

В статті описана комп'ютерна навчальна система «Арифметичні основи ЕОМ» – структура, принципи та режими роботи, навчальні матеріали. Система була створена засобами інтегрованого середовища Delphi і може бути застосована у навчальному процесі на практичних заняттях та для перевірки рівня підготовки студентів.

Ключові слова: комп'ютерна навчальна система, навчальний процес, основи ЕОМ.

Вступ

Процес навчання можна представити схемою, зображеною на рис.1.

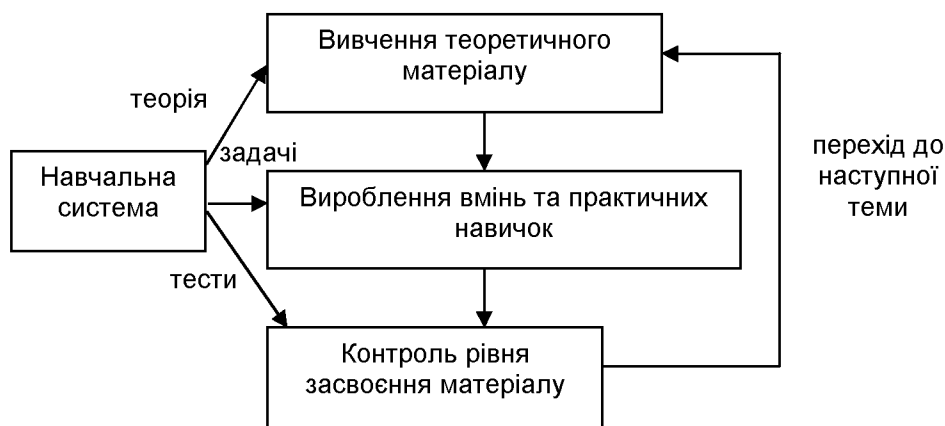


Рис. 1. Схема процесу навчання

Метою навчання, тобто метою роботи студента в навчальній системі, є отримання ним: