

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ, МОЛОДІ ТА СПОРТУ УКРАЇНИ  
НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ  
«КИЇВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ»



**ФЕДЯЙ** Артем Васильович

УДК 621.382

**ЕЛЕКТРОННИЙ ТРАНСПОРТ ТА КВАНТОВО-РОЗМІРНІ ЕФЕКТИ  
В РЕЗОНАНСНО-ТУНЕЛЬНОМУ ДІОДІ**

**05.27.01 – твердотільна електроніка**

**АВТОРЕФЕРАТ**

дисертації на здобуття наукового ступеня  
кандидата технічних наук



Дисертація є рукописом

Робота виконана у Національному технічному університеті України «Київський політехнічний інститут» Міністерства освіти і науки, молоді та спорту України на кафедрі фізичної та біомедичної електроніки

**Науковий керівник:** кандидат технічних наук, професор,  
**Москалюк Володимир Олександрович**,  
Національний технічний університет України  
«Київський політехнічний інститут»,  
професор кафедри фізичної та біомедичної  
електроніки

**Офіційні опоненти:** доктор технічних наук, професор,  
**Осінський Володимир Іванович**,  
НДІ Мікроприладів НТК «ІМК» НАНУ,  
заступник директора з оптоелектронних технологій,  
директор Центру оптоелектронних технологій

кандидат технічних наук,  
**Босий Віталій Ісайович**,  
ВАТ НВП «Сатурн», начальник науково-дослідного  
відділу

Захист відбудеться «**13**» березня 2012 р. о 14 годині 30 хв. на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 26.002.08 при Національному технічному університеті України «Київський політехнічний інститут» за адресою: 03056, м. Київ, пр. Перемоги, 37, корп. 12, ауд. 412.

З дисертацією можна ознайомитися у бібліотеці Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут», 03056, м. Київ, проспект Перемоги, 37.

Автореферат розісланий «**9**» лютого 2012 р.

## ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

**Актуальність теми.** Експериментальні зразки резонансно-тунельних діодів (РТД) на сьогодні знайшли своє застосування в задавальних генераторах та генераторах електромагнітних коливань, робочі частоти яких перевищують 1 ТГц; аналого-цифрових перетворювачах, регістрах зсуву, статичних запам'ятовувальних пристроях з довільною вибіркою, тощо. Використання РТД у вказаних областях дозволило отримати унікальні за швидкістю та енергоємністю пристрої.

Незважаючи на значну кількість робіт з дослідження РТД, існують значні прогалини в розумінні процесів, що відбуваються в активній частині діоду, та впливу на них фізико-топологічних параметрів. Недостатність знань про механізми електронного транспорту та квантово-розмірні ефекти в РТД ускладнює удосконалення топології існуючих та розробку нових типів РТД.

Існуючі фізико-топологічні моделі резонансно-тунельних діодів можна умовно розділити на *універсальні* та *спеціалізовані*. В рамках універсальних моделей фізичні процеси в РТД описуються ціною досить грубих припущень, і лише введення великої кількості (більше 5) припасувальних параметрів дозволяє отримати задовільне узгодження з експериментальними даними за виключенням певних ділянок ВАХ. Моделі цього типу зазвичай реалізуються на персональному комп'ютері, однак час проведення моделювання може виходити за межі комфортного очікування.

Спеціалізовані моделі спрямовані на вивчення окремих ефектів, що мають місце в РТД, наприклад фононного розсіювання, гістерезису ВАХ, змішування електронних станів на гетероінтерфейсах. Такі моделі виявляють підвищену адекватність лише стосовно предмету свого розгляду, який намагаються описати на фундаментальному рівні ціною залучення величезних чисельних ресурсів та використання складних алгоритмів.

Загальними недоліками усіх існуючих моделей РТД є неможливість встановлення причинно-наслідкових зв'язків між фізико-топологічними та вихідними характеристиками; відсутність достовірних знань про походження особливостей на падаючій ділянці ВАХ, відсутність знань про межі застосування моделей та ступінь їх адекватності.

Вказані прогалини в уявленнях про процеси, що мають місце в РТД, та недоліки способів їх включення до розроблених моделей призводять до низької прогностичної здатності моделей, і сповільнюють прогрес у відповідному напрямку розвитку техніки. За таких умов **актуальною** є задача дослідження окремих явищ та ефектів, що мають місце в РТД, пошук оптимальних способів їх включення в розроблені моделі, який передбачає розробку ряду моделей зі зрозумілими межами застосовності, взаємозв'язками, адекватністю та малою кількістю «узгоджувальних» параметрів. Це дозволить створити дієвий засіб для прогнозування характеристик РТД в залежності від запропонованої топології, і досягти швидкого прогресу в покращенні характеристик РТД.

**Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами.** Виконані у роботі дослідження є продовженням та розвитком робіт, що проводилися кафедрою

фізичної та біомедичної електроніки факультету електроніки НТУУ «КПІ» та пов'язані з розробкою та проектуванням перспективних надшвидкодуючих пристроїв. Дослідження проводилися у відповідності до програми наукових досліджень кафедри, включаючи НДР «Дослідження субмікронних та нанорозмірних структур на основі перспективних напівпровідникових матеріалів» номер державної реєстрації № 0108U005938 від 02.10.2008 р., у якій автор займався дослідженням зонної структури напівпровідників III-V груп; НДР «Дослідження новітніх напівпровідникових структур та приладів для розроблення і впровадження технологій їх виготовлення» номер державної реєстрації № 0107U002392 від 12.12.2008 р., у якій автору належить розробка аналітичної моделі резонансно-тунельного діоду; НДР «Дослідження новітніх напівпровідникових наноприладів і нанокомпонентів інтегральних схем на основі одно- і двовимірних структур» номер державної реєстрації № 0109U000658 від 01.01.2010 р., у якій автору належить розробка чисельної однодолинної самоузгодженої моделі РТД.

**Мета і задачі дослідження.** Метою дисертаційної роботи є створення ієрархічного ряду моделей резонансно-тунельних діодів, що призначений для оптимізації топології існуючих та проектування нових типів РТД та складається з взаємозв'язаних моделей, кожна з яких має визначену сферу застосування, функціональність та адекватність.

*Для досягнення поставленої мети розв'язуються наступні завдання:*

1. Аналіз та вибір методів моделювання, які дозволяють отримувати моделі, збалансовані за адекватністю, складністю та інтенсивністю використання чисельних ресурсів.

2. Розробка швидкої моделі, що дозволяє встановити аналітичні зв'язки між фізико-топологічними параметрами РТД, параметрами основних квантово-розмірних ефектів і механізмів електронного транспорту.

3. Розробка стабільних та ефективних чисельних моделей підвищеного рівня адекватності, що враховують квантово-розмірні ефекти та механізми протікання струму, які неможливо описати в рамках аналітичної моделі.

4. Аналіз застосовності та верифікація кожної моделі ієрархічного ряду, визначення їх обмежень та місця при проектуванні РТД; встановлення співвідношень між моделями різного рівня.

5. Розробка прикладної програми з графічним інтерфейсом користувача з метою автоматизації проектування резонансно-тунельних діодів.

**Об'єктом дослідження** є уніполярні напівпровідникові резонансно-тунельні діоди та споріднені структури.

**Предметом дослідження** квантово-розмірні ефекти та електронний транспорт у резонансно-тунельних діодах.

**Методи досліджень:** методи фізики твердого тіла, зокрема метод огибаючої хвильових функцій; окремі методи квантової механіки, теорії розсіювання, квантової статистики; феноменологічні уявлення про електронний транспорт у нанорозмірних гетероструктурах з поперечним транспортом; апарат математичної фізики; чисельні методи, зокрема триточкові скінченно-різницеві схеми другого порядку точності, адаптовані методи розв'язання лінійних алгебраїчних рівнянь та

адаптивні алгоритми інтегрування; програмна реалізація здійснювалася в середовищі *Matlab*.

### **Наукова новизна одержаних результатів:**

1. Уперше для моделювання РТД запропоновано ієрархічний підхід та реалізовано відповідний ієрархічний ряд, що складається з моделей трьох рівнів: аналітичної, чисельних одно- та дводолинної, що дозволяє використовувати переваги як аналітичного, так і чисельного моделювання. Для кожної моделі визначено універсальність, функціональність, адекватність та зв'язок з іншими моделями ряду. Це дозволяє враховувати лише значущі для конкретних цілей моделювання ефекти, виділяти з ряду фізичних явищ одне або кілька, та зосереджуватися на їх дослідженні.

2. Кожну з моделей ієрархічного ряду було вдосконалено порівняно з наявними аналогами. Так, аналітична модель РТД враховує відмінності ефективних мас в різних шарах, а для знаходження енергетичних рівнів у квантовій ямі та рівня Фермі в резервуарах використовуються більш адекватні методи. Чисельна однодолинна модель покращена завдяки тому, що самоузгодження проводилося в тому числі в спейсерних шарах, границя зшивки обиралася на границі між спейсерами та високолегованими областями, а електронний газ в резервуарах вважався виродженим. Це дозволило позбутися використання параметрів, які носили чисто «припасувальний» характер (поверхневий заряд на гетерограницях та положення границі зшивки квантової і класичної області), та скоректувати нефізичне припущення про невиродженість електронного газу в резервуарах.

3. Уперше, базуючись на оригінальному методі, заснованому на введенні «віртуального» резервуару, описано накопичення електронів у емітерній квантовій ямі та електронний транспорт через неї. За допомогою чисельного моделювання показано, що ці ефекти виявляються в особливостях, що виникають на падаючій ділянці ВАХ РТД (далі – «артефактах»). На відміну від попередніх робіт (де «артефакти» пов'язували з іншими чинниками), достовірність саме такого механізму їх формування нещодавно була підтверджена експериментально. Відтак, вперше вдалося отримати адекватні уявлення про важливу для функціонування ділянку ВАХ РТД.

4. Уперше, базуючись на результатах, отриманих методом псевдопотенціалів, було використано фізично виправдану апроксимацію гетеробар'єрів. Це дозволило отримати адекватні результати при верифікації по ВАХ без «припасувального» параметру, що описує форму гетеропереходів.

5. Уперше розроблено математичну модель, чисельні алгоритми якої адаптовані до задач, які виникають при моделюванні РТД. Так, адаптивними є процедури інтегрування, обернення матриць, самоузгодження; усі побудовані скінченно-різницевої схеми перевірено на консервативність та належність до 2-го класу точності.

### **Практичне значення одержаних результатів:**

1. Результати роботи можуть бути використані при проектуванні резонансно-тунельних діодів з наперед заданими властивостями. Ієрархічна структура

розроблених моделей забезпечує можливість швидкого проектування з високою прогностичною здатністю.

2. Значно покращена порівняно з існуючими аналогами адекватність розроблених моделей, що дозволяє точніше прогнозувати електричні характеристики тих чи інших спроектованих РТД.

3. Вперше встановлено зв'язок між моделями різного рівня складності, межі адекватності кожної моделі шляхом співставлення одна з одною та з експериментальними даними, на основі чого вироблено рекомендації щодо їх практичного застосування.

4. Уперше на основі формалізму хвильових функцій створено застосунок з графічним інтерфейсом користувача, який дозволяє проводити імітаційне моделювання РТД. Це перший такий програмний засіб з відкритим кодом; він відрізняється від аналогів можливістю відображення послідовної складової струму та густини станів не лише в  $\Gamma$ , а й у  $X$ -долині.

**Особистий внесок здобувача.** У дисертаційній роботі узагальнено результати теоретичних та експериментальних досліджень, виконаних автором дисертації особисто та в співавторстві.

Автором особисто одержано такі результати:

- розроблено ієрархічний ряд моделей, що складається з аналітичної та чисельних моделей різного рівня адекватності;
- до існуючих аналітичних та чисельних моделей внесено зміни з метою підвищення їх адекватності;
- розроблено метод врахування електронного транспорту через емітерну квантову яму;
- розроблено фізично обґрунтовану модель гетеропереходу в рамках формалізму хвильових функцій;
- розроблено, програмно реалізовано та перевірено на коректність адаптивні чисельні алгоритми для моделей всіх рівнів;
- проведено експериментальну верифікацію та проаналізовано адекватність кожної з моделей ієрархічного ряду;
- висунуто ідею прикладної програми з графічним інтерфейсом, розроблено використані в ній алгоритми, системи вхідних та вихідних величин та графіків, зовнішній вигляд інтерфейсу.

#### **Апробація результатів дисертації**

Основні результати дисертації доповідалися та обговорювалися на:

- міжнародних конференціях «Проблеми фізичної та біомедичної електроніки» (м. Київ 2007 – 2009 рр.),
- міжнародних конференціях «Електроніка та нанотехнології» (м. Київ, 2010 р., 2011 р.),
- IV і VI науково-технічних конференціях «Сучасні інформаційно-комунікаційні технології» (м. Лівадія, 2008 р., 2010 р.),
- міжнародних конференціях «International Spring Seminar on Electronics Technology» (м. Брно, Чеська Республіка, 2009 р., м. Варшава, Республіка Польща, 2010 р.),

– XXI Міжнародній конференції «СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии» (Севастополь, 12–16 вересня, 2011 р.).

**Публікації.** За результатами досліджень опубліковано 12 наукових праць, з них 7 – у провідних фахових виданнях (2 одноособові), 5 – у матеріалах та тезах конференцій.

**Структура і зміст роботи.** Дисертація складається з вступу, чотирьох розділів, висновку, викладеними на 171 сторінці машинописного тексту, списку використаних джерел із 115 публікацій вітчизняної та зарубіжної літератури. Робота містить 51 ілюстрацію, 6 таблиць, 4 додатки. Загальний обсяг роботи – 207 сторінок.

## ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступі** викладено загальну характеристику роботи, обґрунтовано актуальність проблеми, сформульовано мету та основні завдання досліджень, викладено наукову новизну роботи, показано практичну цінність отриманих результатів.

У **першому розділі** проведено аналіз наукових джерел щодо загальних квантово-механічних підходів до моделювання електронного транспорту та квантово-розмірних ефектів у РТД (метод огинаючої хвильових функції, метод функцій Гріна та Вігнера), з якого слідує, що оптимальним формалізмом за використовуваними чисельними ресурсами та адекватністю є метод хвильових функцій.

Загальний підхід до побудови моделей в рамках формалізму хвильових функцій полягає в поділі всієї області моделювання на квантову область (до неї відносять двобар'єрну квантову систему та прилеглі спейсери), та області, що її оточують – класичні області або «резервуари» (рис. 1). Метод знаходження струму через квантову область зводиться до пошуку коефіцієнта проходження квантової області  $T$  при релевантних поперечних енергіях  $E_z$ . Як тільки згаданий коефіцієнт знайдено, струм можна розрахувати за формулою Цу-Есакі:

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

де  $e$  – елементарний заряд,  $k_B$  – стала Больцмана,  $T$  – температура,  $V$  – напруга, що прикладена до двобар'єрної квантової системи,  $D(E_z)$  – так звана *функція постачання електронів*, що визначається за формулою:

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

де  $E_{\Phi}^{L(R)}$  – рівень Фермі у лівому (правому) резервуарах.

У залежності від способу знаходження коефіцієнта проходження та прийнятих при цьому припущень, можна виділити моделі різного рівня адекватності: від спрощених аналітичних до моделей, які враховують перерозподіл заряду, когерентний та послідовних механізми електронного транспорту, розсіювання на фононах у квантовій ямі, форму бар'єрів, інтерфейсне розсіювання та пов'язані з ним нові канали проходження квантової області.



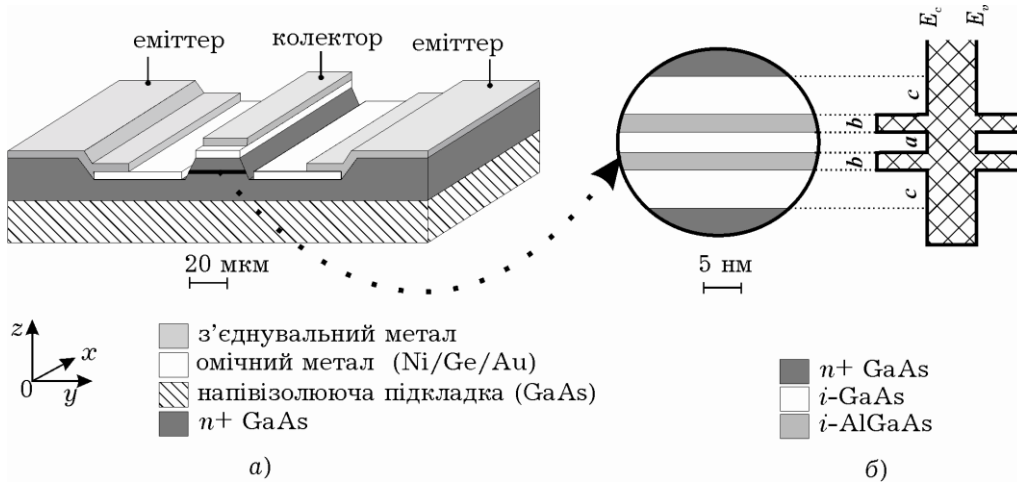


Рис. 1. Топологія всього резонансно-тунельного діоду (а); топологія активної області та її зонна діаграма (б).

У критичному огляді моделей визначено поточні недоліки, які заважають розкрити потенціал моделей різного рівня (в тому числі включення до розгляду розсіювання в емітерній квантовій ямі та використання фізично обґрунтованої апроксимації форми бар'єрів) та передумови, в тому числі недавні теоретичні та експериментальні роботи, які можуть бути використані для підвищення адекватності моделювання та функціональності моделей.

З огляду випливає, що оптимальним засобом для проектування нових та покращення існуючих топологій РТД є не одна модель, а система взаємопов'язаних моделей з визначеною функціональністю та адекватністю.

У другому розділі описано розробку трьох базових моделей РТД: аналітичної, чисельної однодолинної та чисельної дводолинної.

Для реалізації аналітичної моделі за основу взято модель, яка використовує апроксимацію коефіцієнта передачі квантової системи  $T(E_z)$  функціями лоренцевого типу:

$$T(E_z) = \sum_{i=1}^N \frac{\Gamma_i^2}{\Gamma_{\Sigma,i}^2 + 4(E_z - E_i)^2}, \quad (2)$$

де  $E_i$  – енергія  $i$ -го метастабільного резонансного рівня в квантовій ямі;  $\Gamma_{\Sigma,i}$  – це величина сумарного розширення  $i$ -го резонансного рівня, яке складається з природного розширення  $i$ -го рівня  $\Gamma_i$  та релаксаційного розширення  $\Gamma_p$ ;  $N$  – загальна кількість метастабільних рівнів у квантовій ямі.

В рамках теорії збурень можна показати, що центри метастабільних рівнів електрона в квантовій ямі РТД співпадають з дискретними рівнями, які існували б у ДБКС, якби бар'єри мали нескінченну ширину (див. рис. 2).

Задача зі знаходження енергетичних рівнів у системі, що зображена на рис. 2, а, зводиться до пошуку коренів трансцендентного рівняння:

$$\cos\left(\frac{\pi}{2}(n-1) - \xi\right) = \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{m_w^*}{m_b^*} \left(\frac{1}{\gamma^2 \xi^2} - 1\right)}}, \quad (3)$$



де  $\xi = ka/2$ ,  $k = \sqrt{2m_w^*E}/\hbar$ ,  $\gamma_0^2 = \frac{2\hbar^2}{m_0U_b a^2}$ ;  $\hbar$  – стала Планка,  $m_0$  – маса спокою електрона,  $m_{w(b)}^*$  – ефективна маса електрона в ямі (бар'єрі),  $U_b$  – висота потенціального бар'єру,  $a$  – ширина ями,  $n$  – номер енергетичного рівня.

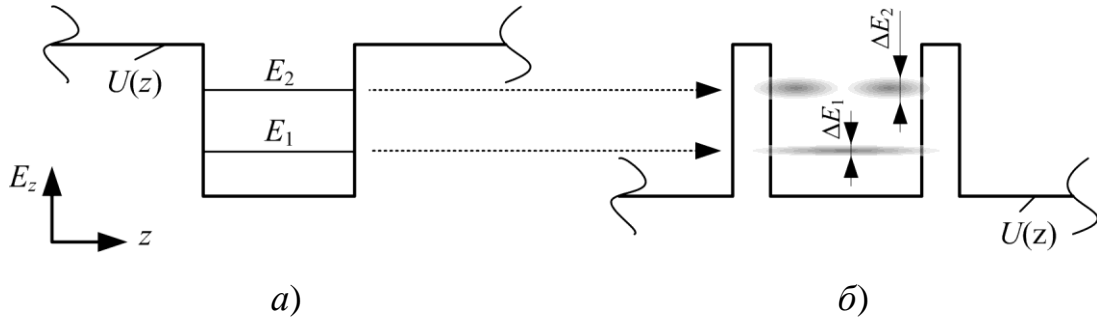


Рис. 2. До теорії збурень для двобар'єрної квантової системи: а) незбурена система (ширина бар'єрів нескінченна); б) збурена система (ширина бар'єрів скінченна).

У попередніх роботах власні енергії електрона у квантовій ямі шукалися за формулою для нескінченно глибокої квантової ями; у поточній же роботі розроблена процедура графічного та чисельного розв'язання (3), а також знайдено аналітичний вираз для першого енергетичного рівня.

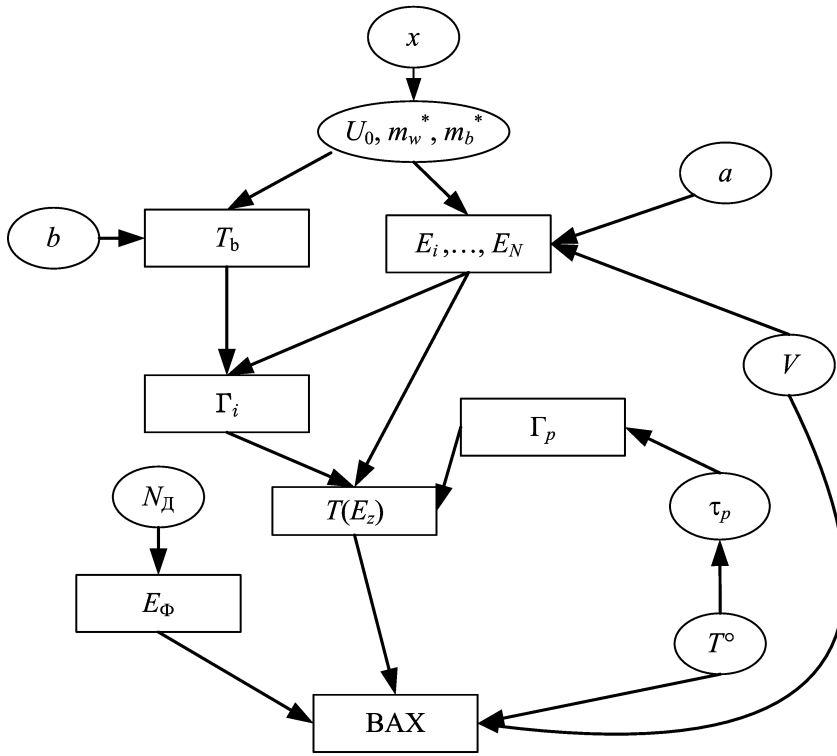
Природне розширення  $i$ -го енергетичного рівня  $\Gamma_i$  визначалося через час життя електрона на цьому рівні, який можна наближено знайти за формулою  $\tau_i = 2a/v_i T_b$ , де  $T_b$  – коефіцієнт проходження бар'єру,  $v_i = \sqrt{2E_i/m^*}$  – швидкість руху електрона на  $i$ -му енергетичному рівні в класичному наближенні. Релаксаційне розширення  $\Gamma_p$  пов'язувалося з часом релаксації імпульсу в об'ємному напівпровіднику. Ширини  $\Gamma_i$  та  $\Gamma_p$  пов'язані з відповідними часами однотипними співвідношеннями:

$$\Gamma_i = \frac{\hbar}{\tau_i}, \Gamma_p = \frac{\hbar}{\tau_p}. \quad (4)$$

Для розрахунку ВАХ за допомогою аналітичної моделі необхідно, таким чином, пройти чотири етапи:

1. Пошук кількості  $N$  та енергії дискретних рівнів енергії  $E_i$ , повністю нехтуючи можливістю розпаду електронних станів у квантовій ямі (задача на власні енергії для потенціального рельєфу з рис. 2, а)
2. Пошук коефіцієнтів проходження потенціальних бар'єрів ДБКС,  $T_b$ .
3. Пошук величин «природного»  $\Gamma_i$  та «релаксаційного»  $\Gamma_p$  розширення метастабільних енергетичних рівнів у квантовій ямі за формулами (4).
4. Використання розрахованих величин для отримання ВАХ з формули Цу-Есакі (1) або її аналітичної апроксимації.

Уперше побудовано схему, яка дозволяє відслідковувати причинно-наслідкові зв'язки між фізико-топологічними параметрами та параметрами і характеристиками квантово-розмірних ефектів, а також розрахованою ВАХ (рис. 3).

**Вхідні параметри:**

$x$  – молярна доля в потрібній сполуці (наприклад, для  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  - це Al) у бар'єрних шарах  
 $a$  – ширина квантової ями  
 $b$  – ширина бар'єру  
 $V$  – прикладена напруга  
 $N_D$  – концентрація електронів у резервуарах  
 $T^\circ$  – температура кристалічної решітки

**Параметри, що розраховуються:**

$E_\Phi$  – рівень Фермі в резервуарах  
 $U_0, m_w^*, m_b^*$  – висота бар'єру, та ефективні маси  
 $T_b$  – коефіцієнт проходження бар'єрів  
 $N, E_i$  – кількість та значення власних енергій  
 $\Gamma_i, \Gamma_p$  – природне та релаксаційне розширення  $i$ -го рівня  
 $T(E_z)$  – коефіцієнт проходження ДБКС  
 $\tau_p$  – час релаксації імпульсу

Рис. 3. Причинно-наслідкові зв'язки, які дозволяє відслідковувати аналітична модель.

Основу чисельної моделі складає система інтегро-диференціальних рівнянь:

$$\frac{d}{dz} \varepsilon(z) \frac{dV_s}{dz} = \frac{e}{\varepsilon_0} [n(z) - N_D^+(z)], \quad (5)$$

$$n(z) = \begin{cases} \sum_{i=L,R} \int |\psi_i(E_z(k_z), V_s, z)|^2 f_i(E_z) dE_z, z \in [z_1, z_5], \\ 4\pi(2m^*/h^2)^{3/2} \int_{U(z)}^{\infty} \frac{\sqrt{E-U(z)}}{1 + \exp\left(\frac{E - (E_\Phi + U_{1(N)})}{k_B T}\right)} dE, z \notin [z_1, z_5], \end{cases} \quad (6)$$

де  $\varepsilon_0$  – діелектрична стала,  $\varepsilon$  – відносна діелектрична проникність,  $n$  – концентрація електронів,  $V_s$  – самоузгоджений потенціал ( $U(z) = E_c + eV_s$ ),  $N_D^+$  – концентрація іонізованих донорів,  $\psi_{L(R)}$  – хвильова функція електронів, що походять з лівого (правого) резервуарів, індекси  $1(N)$  та  $i0(i5)$  позначають, відповідно, початок (кінець) області моделювання та квантової області (див. рис. 4);

$$f_i(E_z) \equiv \frac{N'_c}{\sqrt{E_z - U_{i0(i5)}}} \ln \left( 1 + \exp \left( - \frac{E_z - (E_\Phi + U_{1(N)})}{k_B T} \right) \right),$$

$$\text{де } N'_c = \frac{\sqrt{2}(m^*)^{3/2} k_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3}.$$

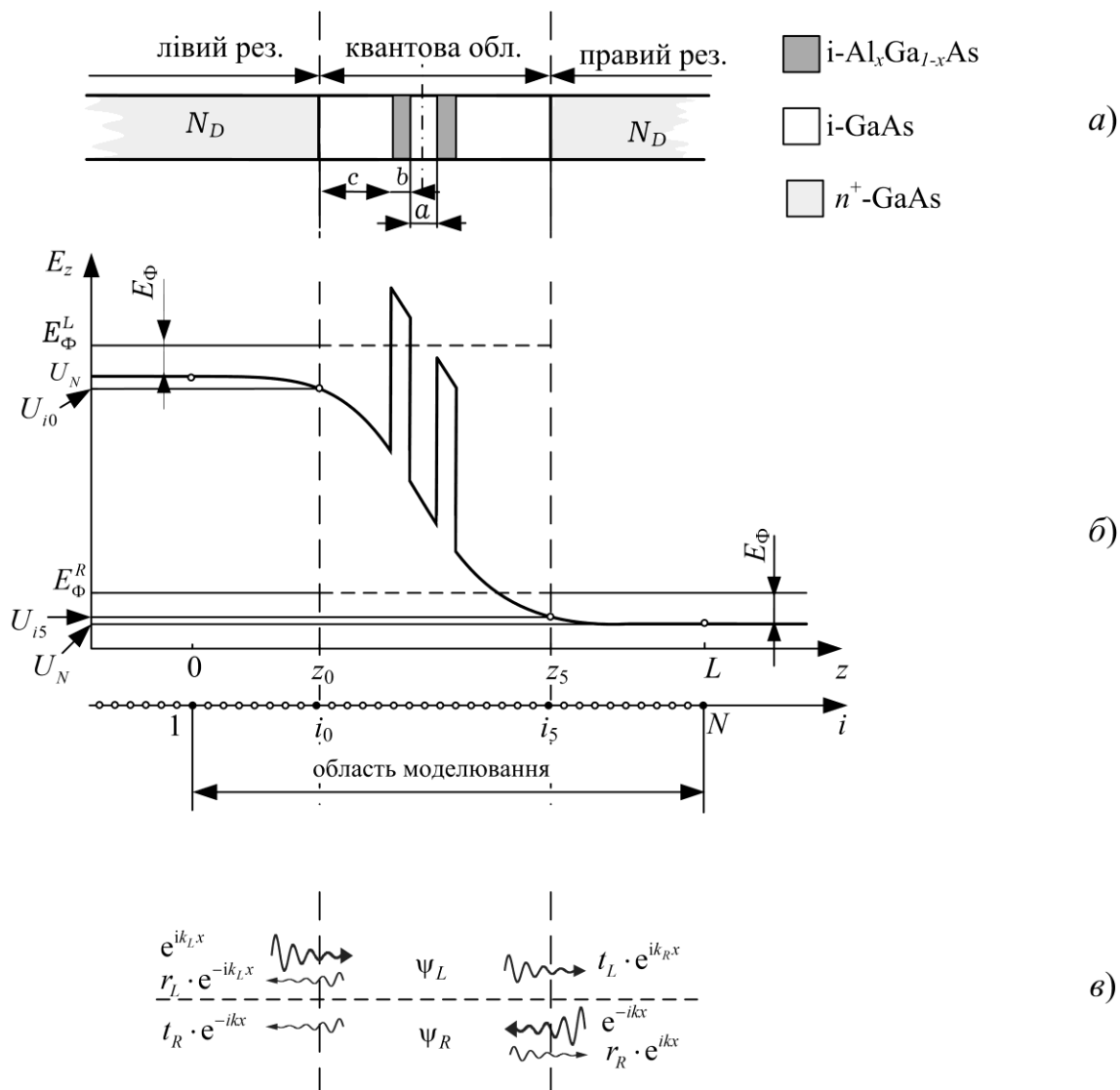


Рис. 4. Топологія РТД та позначення, прийняті при чисельному моделюванні: а) поділ на 3 області; б) дискретизація та умовні позначення; в) хвильові функції в області моделювання.

Друге з рівнянь (6) є звичайним рівнянням для пошуку концентрації електронів в тривимірному напівпровіднику, що знаходяться у стані термодинамічної рівноваги. Саме таке припущення приймається для резервуарів. Функція розподілу електронів у квантовій області (перше з рівнянь (6)) визначається з урахуванням того, що частинки потрапляють туди з лівого та правого резервуару та розподіляються у відповідності зі своєю статистикою в резервуарах та густиною ймовірності  $|\psi_{L(R)}|^2$ . Хвильові функції «лівих» та «правих» електронів є власними функціями рівняння Шредінгера для огинаючої:

$$\frac{d}{dz} \frac{1}{m^*(z)} \frac{d\psi_{L(R)}(z)}{dz} + \frac{2}{\hbar^2} (E - U(z)) \psi_{L(R)}(z) = 0, \quad (7)$$

які відрізняються лише граничними умовами (див. рис. 4, в).

Для розв'язання системи рівнянь (5) та (6) використовувався лінеаризований метод Гумеля, в рамках якого зв'язок між  $i$ -м та  $i+1$ -м наближенням до потенціалу задається співвідношенням:

$$\frac{d}{dz} \varepsilon(z) \frac{dV_s^{(i+1)}}{dz} - n^{(i)}(z) \frac{e V_s^{(i+1)}}{\varepsilon_0 k_B T} = \frac{e}{\varepsilon_0} \left[ n^{(i)}(z) \left( 1 - \frac{V_s^{(i)}}{k_B T} \right) - N_D^+(z) \right].$$

Початкове наближення до потенціалу задавалося, вважаючи падіння напруги рівномірним вздовж квантової області та нульовим на класичних областях. Якщо не уточнювати останнє припущення, отримуємо так звану «несамоузгоджену» модель, яка посідає важливе місце в розробленому ієрархічному ряді.

Уперше самоузгоджений розв'язок системи (5) та (6) проводився як у всій квантовій, так і в класичній області, причому межі між цими областями фіксувалися в площинах, які відділяють високолеговані області від спейсерів, що дозволило позбавитися «узгоджувального» параметру «границя зшивки» та оптимізувати використання чисельних ресурсів.

Базуючись на адаптації результатів, що отримані в рамках методу сильного зв'язку, до методу хвильових функцій, було розроблено чисельну дводолинну модель, у якій враховано перерозподіл електронів між  $\Gamma$  та  $X$  долинами за рахунок інтерфейсного розсіювання. Для пошуку відповідних хвильових функцій замість звичайного рівняння Шредінгера (7) розв'язувалася система зв'язаних рівнянь для  $\Gamma$  та  $X$ -долин:

$$\begin{bmatrix} -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m_\Gamma^*} \frac{d}{dz} & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m_X^*} \frac{d}{dz} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi_\Gamma \\ \Psi_X \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} U_\Gamma - E + \frac{\hbar^2 k_\parallel^2}{2m_\Gamma^*} & \alpha \delta(z_k) \\ \alpha^* \delta(z_k) & U_X - E + \frac{\hbar^2 k_\parallel^2}{2m_X^*} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi_\Gamma \\ \Psi_X \end{bmatrix} = 0, \quad (8)$$

де індекси « $\Gamma$ » та « $X$ » позначають відповідні величини в  $\Gamma$  та  $X$ -долині,  $\alpha$  – так звана стала міждолинної взаємодії,  $k_\parallel$  – поздовжній хвильовий вектор електрона,  $z_k$  – координати гетерограниць,  $\delta$  – дельта-функція Дірака.

З метою підвищення узгодження з експериментом обидві базові чисельні моделі були доповнені методами підвищення адекватності, а саме: врахування розсіювання у квантовій ямі, уточнення форми гетеробар'єру, врахування паразитного опору високолегованих шарів, врахування накопичення електронів у емітерній квантовій ямі та струмопереносу між емітерною квантовою ямою (ЕКЯ) та основною квантовою ямою (ОКЯ).

Для моделювання розсіювання у квантовій ямі у гамільтоніан в області ями вводився так званий оптичний потенціал  $-iW$ , який моделює процес виходу електронів з когерентного каналу переносу. Для врахування подальшого руху розсіяних електронів використана модель одиничного розсіювача, введенням якого моделюється перехід електронів у так званий некогерентний канал переносу.



Загальний коефіцієнт проходження складається з ймовірностей когерентного  $T_{coh}$  та некогерентного проходження  $T_{incoh}$ :

$$T = T_{coh} + T_{incoh},$$

де  $T_{incoh} = (1 - R_{coh} - T_{coh})T_R / (T_R + T_L)$ ,  $T_R$  та  $T_L$  – коефіцієнти проходження правого (лівого) бар'єру електроном, що налітає на нього зі сторони квантової ями;  $R_{coh}$  – коефіцієнт відбивання від квантової області.

Уточнено метод розрахунку коефіцієнтів  $T_R$  та  $T_L$ ; для цього використовувався потенціальний рельєф зони провідності, а не його груба апроксимація.

Для апроксимації форми гетеробар'єрів вперше було використано результати відомої роботи з розрахунку зонної структури гетеропереходів методом псевдопотенціалів, у якій показано, що кращим фізичним наближенням до форми гетеропереходу є модель двоступінчатого розриву зони; перехідна область при цьому моделюється шаром надрешітки зі строго визначеними параметрами та товщиною в один період кристалічної решітки (рис. 5, б). Це уточнює використовувану до цього плавну апроксимацію (рис. 5, а), основною функцією якої було наблизити результати моделювання до експериментальних даних шляхом підбору «узгоджувальних» параметрів такої апроксимації.

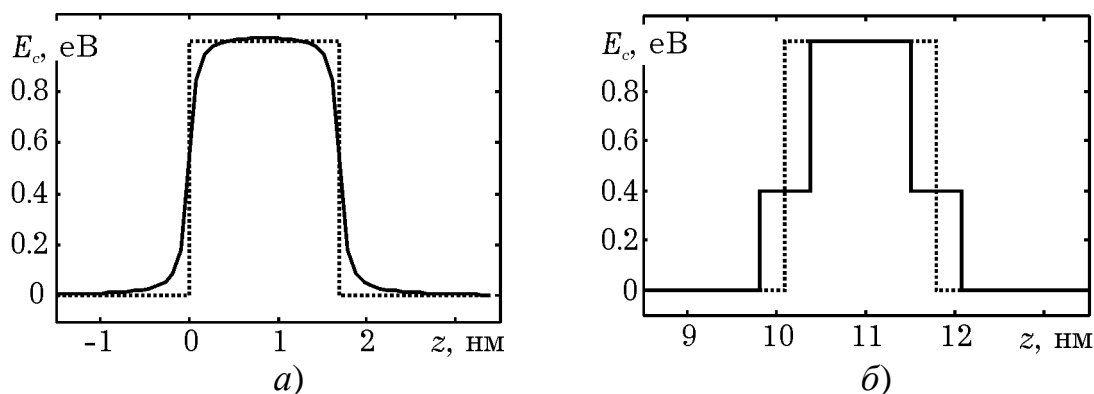


Рис. 5. Апроксимація форми бар'єру для GaAs/AlAs РТД: а) плавний гетероперехід, б) «надрешіткова» модель гетерограниці.

Уперше, базуючись на розробленому автором методі, заснованому на введенні «віртуального» резервуару, описано накопичення електронів у емітерній квантовій ямі та електронний транспорт через неї. Для цього при енергії, що нижча дна зони провідності в емітері, але вище дна ЕКЯ, вводиться «віртуальний» резервуар, який постачає електрони через бар'єр, що моделює інтенсивність непружного розсіювання (рис. 6).

Визначено та обґрунтовано зміни, які слід внести до моделі, щоб врахувати процеси розсіювання в ЕКЯ та електронний транспорт між метастабільними рівнями в ЕКЯ та ОКЯ. Зокрема, показано, що хвильову функцію електрона слід нормувати на сталу  $M = T_{\text{практ}} / T_{\text{теор}}$ , де  $T_{\text{практ}}$  – коефіцієнт проходження, розрахований для першого бар'єру структури, зображеної на рис. 7, а  $T_{\text{теор}}$  – величина коефіцієнту проходження, яка відповідає заданому часу релаксації енергії:

$$T_{\text{теор}} = \frac{\sqrt{2E_z / m^*}}{2a(E_z)} \frac{1}{\tau_E}$$

де  $a(E_z)$  – ширина ЕКЯ при енергії  $E_z$ . Показано, що на практиці зміни необхідно внести в граничні умови рівняння для хвильової функції «лівих» електронів.

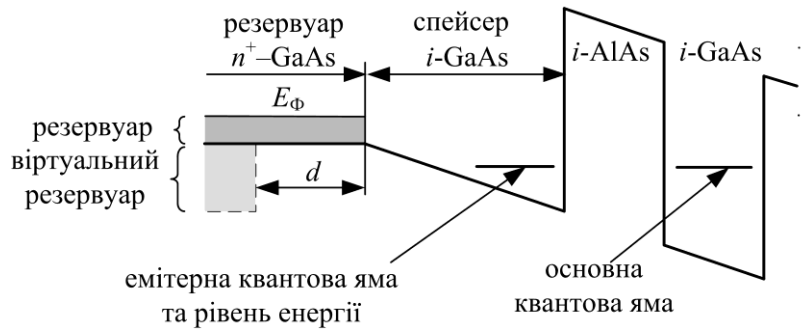


Рис. 6. Рельєф зони провідності (суцільна лінія). Штрихова лінія – віртуальний резервуар і бар'єр.

У цьому ж розділі описано чисельну реалізацію розроблених моделей. Так, системі інтегро-диференціальних рівнянь (5), (6) ставилися у відповідність консервативні триточкові скінченно-різницеві схеми, які було розроблено з використанням інтегро-інтерполяційного підходу та перевірено на належність до другого класу точності. Таким чином вдалося подолати проблему розривності коефіцієнтів рівнянь (5), (7) та (8).

У **третьому розділі** в рамках розроблених моделей проведено чисельні експерименти з метою визначення основних закономірностей електронного транспорту та квантово-розмірних ефектів, а також щоб дослідити властивості кожної моделі.

У рамках аналітичної моделі згідно схеми (рис. 3) проаналізовано залежності ширини метастабільних рівнів та їх положення від хімічного складу гетерошарів, геометричних розмірів, температури (див. рис. 7). Згадані залежності мають досить простий аналітичний вид, і це дозволяє здійснювати швидкий *якісний* аналіз найголовніших тенденцій, які спостерігаються при змінах фізико-топологічної структури РТД, зокрема вплив геометричних розмірів та хімічного складу шарів на ВАХ. Завдяки формулюванню моделі через положення рівнів, їх природне та релаксаційне розширення, результати моделювання досить просто інтерпретуються. У цьому аспекті запропонована модель вигідно відрізняється від моделей, що побудовані на методі матриць передачі, в рамках якого поняття метастабільних станів узагалі не вводиться.

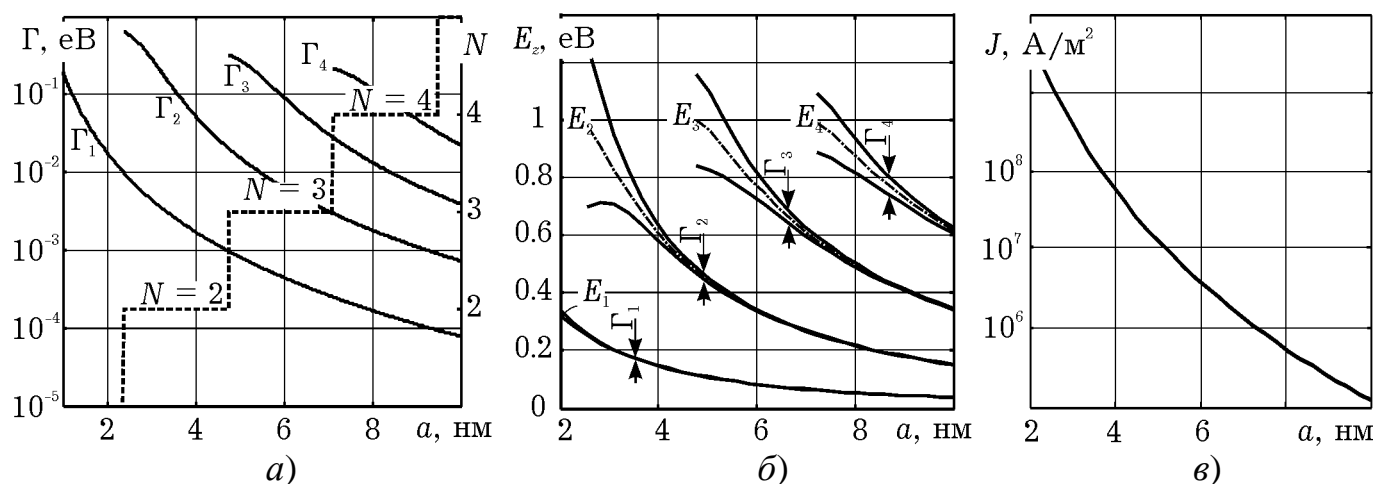


Рис. 7. Залежність природного розширення енергетичних рівнів  $\Gamma_i$ , їх кількості (а); енергії, та напівширини «природного» розширення  $\Gamma_i$  (б) та густини струму  $J$  (в) від ширини квантової ями  $a$ .

За допомогою чисельної однодолинної моделі досліджено найсуттєвіші електронні явища, що мають місце в РТД, зокрема: механізм формування від'ємного диференціального опору, накопичення просторового заряду в емітері внаслідок інтерференції електронних хвиль, зменшення контрастності ВАХ внаслідок розсіювання, збільшення пікової напруги при врахуванні перерозподілу просторового заряду. Це було зроблено завдяки розрахунку та відображенню локальної густини електронних станів, функції розподілу та коефіцієнту проходження в квантовій та класичних областях. Також для аналізу електронних процесів використано розподіл потенціалу та просторового заряду вздовж діоду (рис. 8).

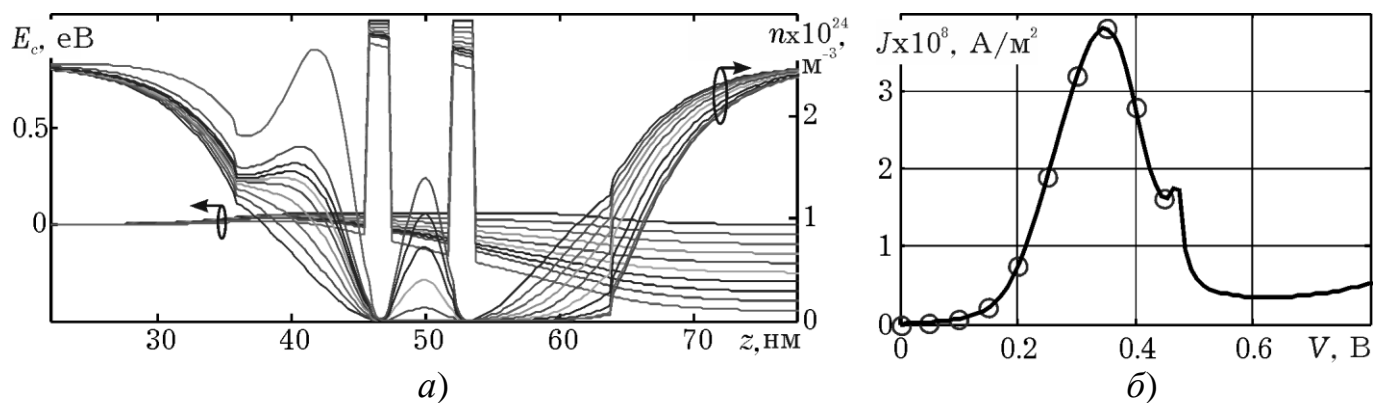


Рис. 8. Результати самоузгодженого моделювання РТД: а) розподіл концентрації  $n$  та потенціальної енергії електрона в зоні провідності  $E_c$  у напрямку росту за різних напруг; б) ВАХ, на якій колами показано напруги, що відповідають зображеним ліворуч розподілам.

Згадані мікроскопічні та макроскопічні характеристики було використано для обґрунтування запропонованої в другому розділі моделі накопичення заряду та електронного транспорту між ЕКЯ та ОКЯ. Показано, що область «плато» формується тоді, коли метастабільний рівень в ЕКЯ співпадає з рівнем в ОКЯ і вони

в деякому діапазоні напруг «опускаються» по осі енергій практично синхронно (рис. 9).

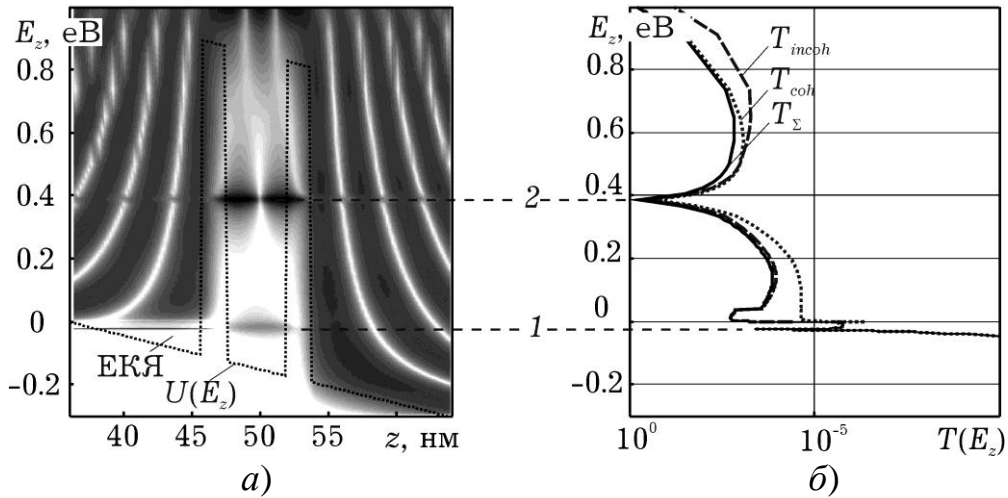


Рис. 9. Рівень енергії в ЕКЯ співпадає з рівнем енергії в основній квантовій ямі (область плато,  $V = 0.3$  В): *а*) локальна густина станів  $g(z, E_z)$ ; *б*) коефіцієнт проходження квантової системи. Цифри «1» та «2» позначають рівні енергії, які відповідають положенню метастабільного рівня в ЕКЯ та другого енергетичного рівня в основній квантовій ямі.

У рамках дводолинної моделі за допомогою аналізу густини станів і коефіцієнтів проходження окремо по кожній із долин було вивчено формування так званих резонансів Фано та метастабільних рівнів, якими вони обумовлені (рис. 10). Виявлено, що інтегрально вплив інтерфейсного розсіювання в двобар'єрних РТД переважно зводиться до зростання струму внаслідок формування додаткового каналу передачі Г-Х та модифікації каналу Г-Г.

У четвертому розділі розроблені моделі розглядаються та аналізуються системно – як засіб для всебічного вивчення та проектування РТД. Показано, що, приймаючи ті чи інші наближення в рамках розроблених моделей, можна побудувати систему взаємопов'язаних адаптованих до конкретних цілей моделей, базовими серед яких є аналітична, чисельна однодолинна та чисельна дводолинна. У рамках кожної чисельної моделі можна виділити 2 класи: самоузгоджені та несамоузгоджені моделі. В рамках кожного класу можна виділити методи підвищення адекватності моделювання: за допомогою врахування ЕКЯ, розсіювання, пасивних областей, фізично обґрунтованої апроксимації форми гетеробар'єрів (рис. 11).



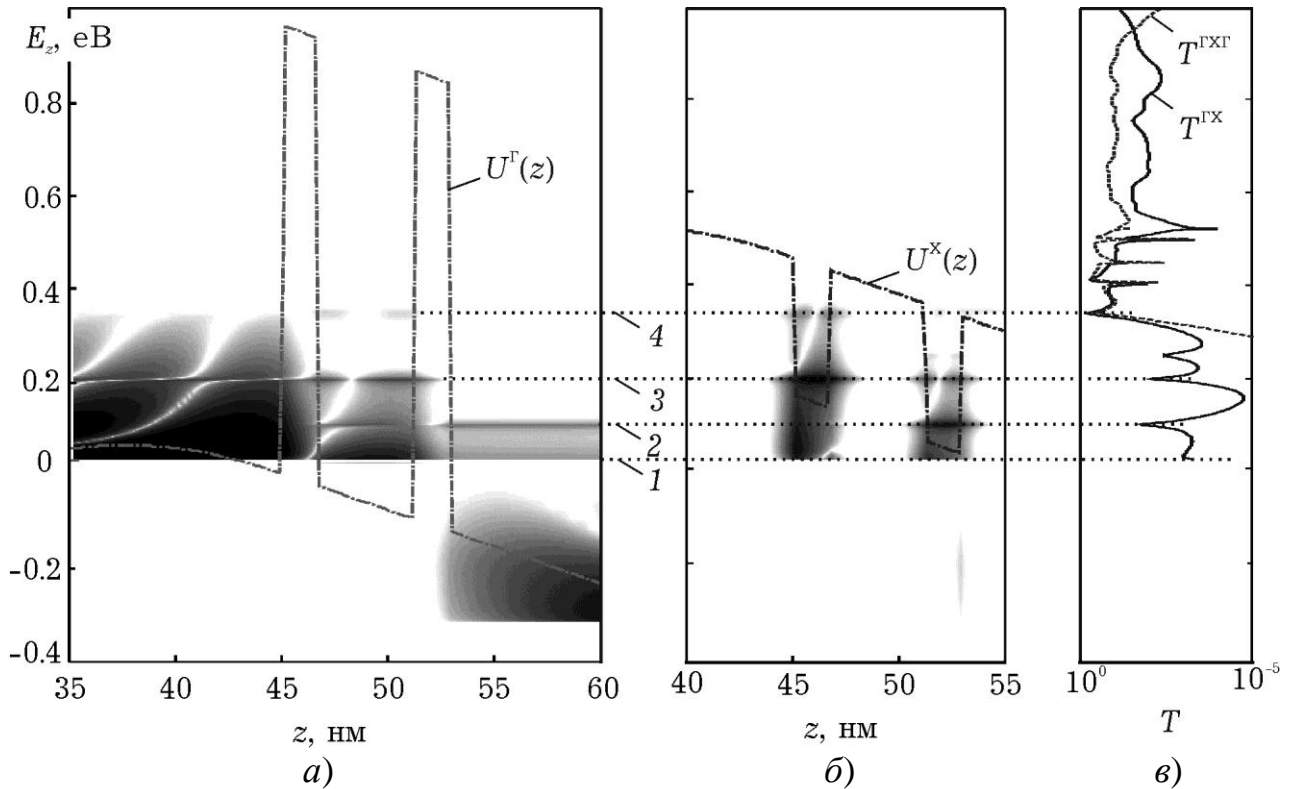


Рис. 10. Імітаційне моделювання квантово-розмірних ефектів за допомогою чисельної дводолинної моделі ( $V = 0.42$  В): а) функція розподілу в  $\Gamma$ -долині  $N^\Gamma(z, E_z)$ ; б) функція розподілу в X-долині  $N^X(z, E_z)$ ; в) коефіцієнти проходження  $T^{\Gamma X \Gamma}$  та  $T^{\Gamma X}$ . Позначення: 1 – дно зони провідності лівому резервуарі, 2,3 – інтерференційні рівні, 4 – другий основний рівень.

Було проведено систематизацію знань про моделі ієрархічного ряду, зокрема для моделей різного рівня ієрархії визначено систему вхідних та вихідних параметрів, проаналізовано якісну адекватність моделей різних типів, визначено умови, за яких моделі переходять одна в іншу. Виявлено, що аналітична модель суттєво відрізняється від чисельних своєю функціональністю, хоча і зводиться до чисельної однодолинної за певних умов. Чисельні ж моделі функціонально подібні, і дозволяють проводити *імітаційне* моделювання різного ступеня адекватності в залежності від типу, класу та ступені ієрархії моделі.

Описано способи адаптації чисельних алгоритмів до рівнянь моделей. Так, для обернення тридіагональних матриць (однодолинна модель) використано метод Томаса, а для обернення п'ятидіагональних матриць (дводолинна модель) –  $LU$ -факторизацію та концепцію розріджених матриць. Для інтегрування вектору функцій розподілу в *Matlab* було перероблено функції *quad* (яка реалізує метод Сімпсона з адаптивним підбором кроку інтегрування) з тим, щоб вона працювала з векторним аргументом і виводила в якості вихідних даних масив аргументів, у яких проводилося оцінювання підінтегральної функції. Для реалізації процедури самоузгодження використано метод Гумеля, який враховує вид функції розподілу електронів за енергією.

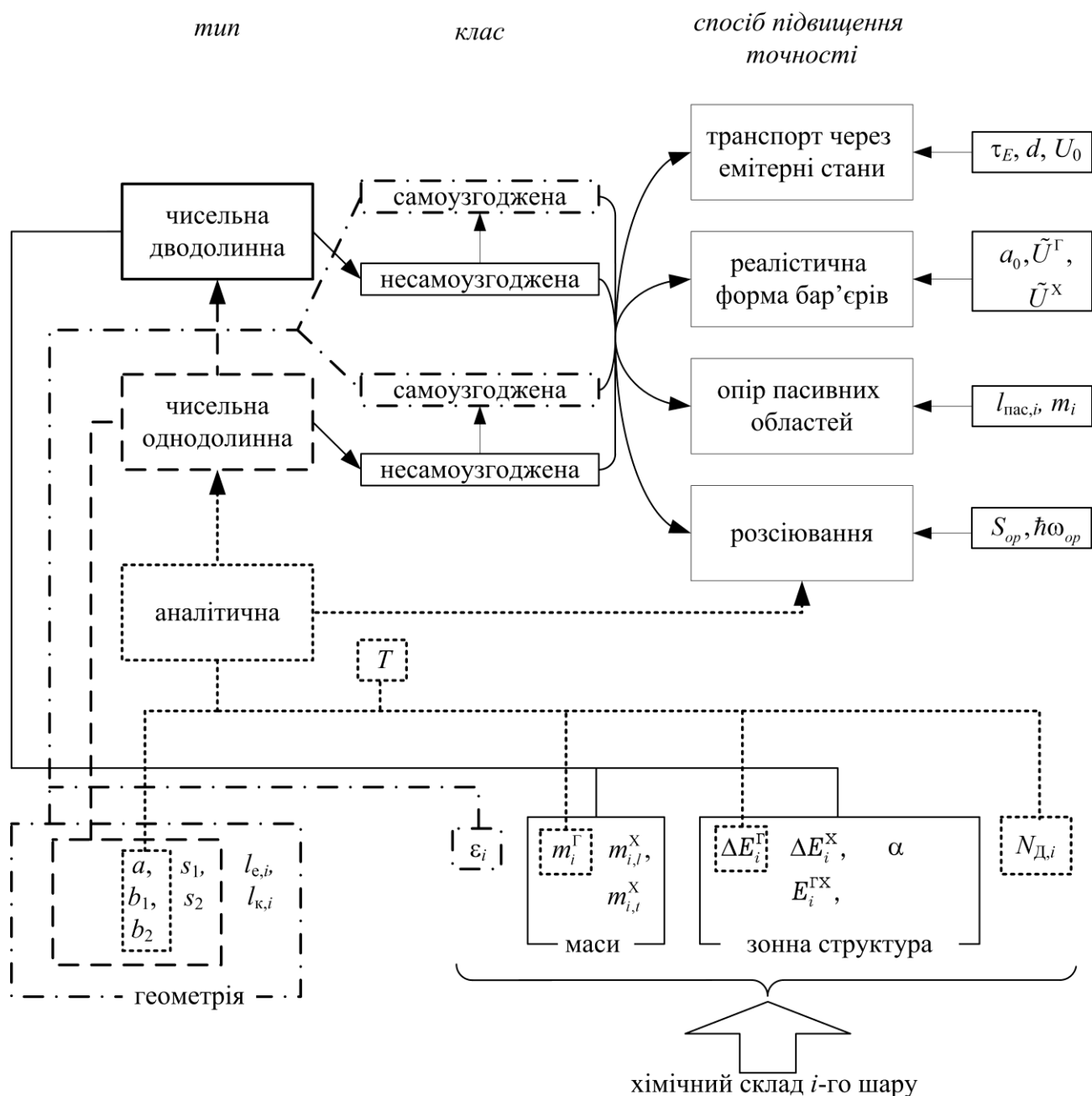


Рис. 11. Структура ієрархічного ряду моделей. Праворуч та внизу позначено «вхідні» параметри кожної з моделей. Напрямок стрілок вказує на підвищення адекватності.

Співставлення результатів моделювання ВАХ РТД з експериментальними характеристиками (рис. 12) показало як якісний, так і непоганий кількісний збіг, який у характерних точках при використанні всього *одного* «узгоджувального» параметру не перевищував 5%. Виявлено, що моделі, що стоять у ієрархічному ряді вище, дозволяють отримати кращий збіг з експериментальними кривими як за якісними, так і за кількісними ознаками.

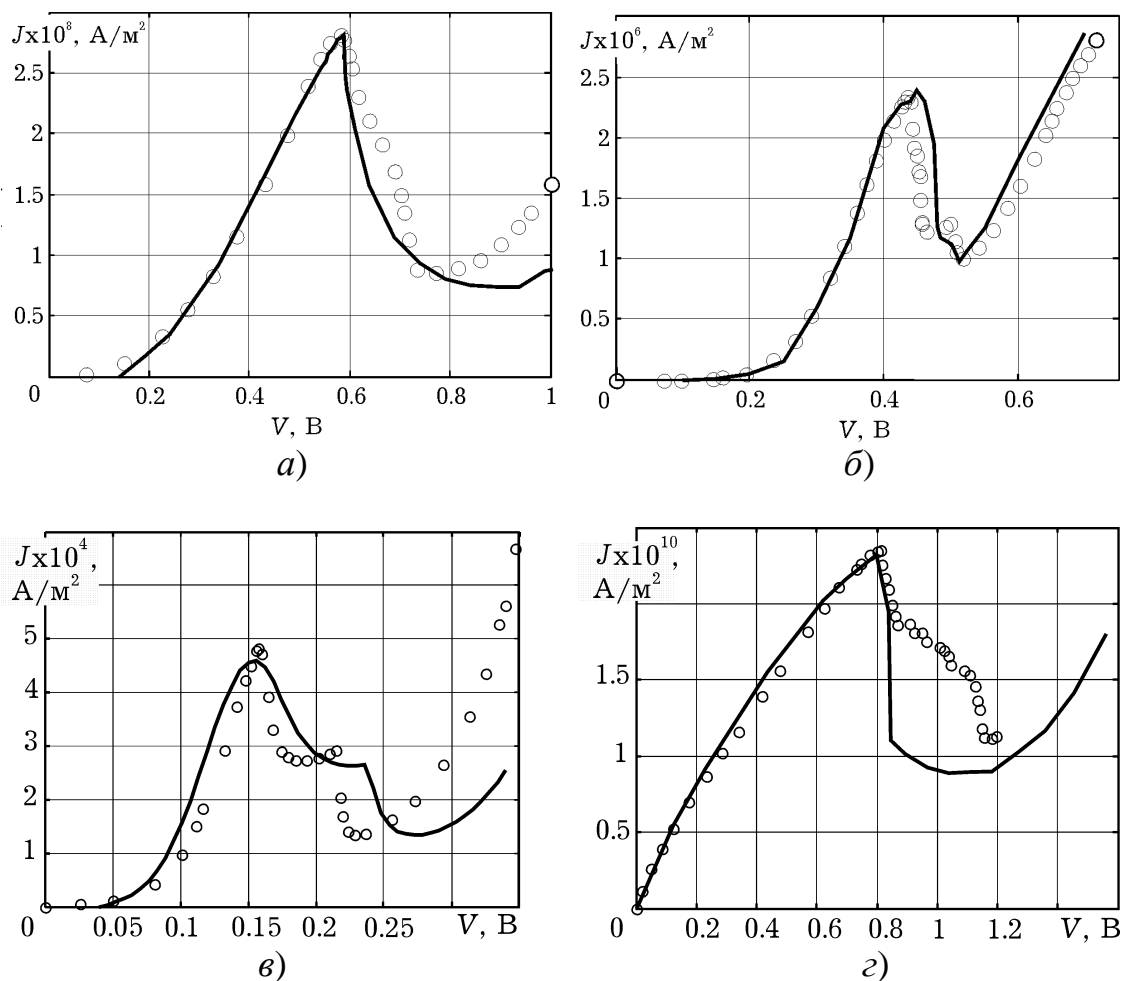


Рис. 12. Порівняння експериментальних ВАХ РТД, взятих із різних літературних джерел, з модельними. Суцільними лініями показано розраховані криві.

Для забезпечення необхідної гнучкості та швидкості проведення чисельних експериментів було розроблено прикладну програму з графічним інтерфейсом користувача. Тип інтерфейсу – *Matlab GUI*. Автору належить ідея, дизайн інтерфейсу та реалізація чисельних алгоритмів. За допомогою інтерфейсу можна задавати будь-яку конфігурацію шарів; їх параметри задаються посередництвом бази даних матеріалів, яку користувач може доповнювати самостійно.

## ВИСНОВКИ ПО РОБОТІ

У результаті проведених у дисертаційній роботі досліджень вирішена важлива науково-прикладна задача – розроблено ієрархічний ряд моделей резонансно-тунельних діодів, що дозволяє проводити комплексні дослідження квантово-розмірних ефектів та електронного транспорту у їх функціональному зв'язу з фізико-топологічними параметрами, і призначений для проектування РТД та споріднених структур.

У роботі отримані наступні наукові та практичні результати:

1. Уперше для фізико-топологічного моделювання РТД використано ієрархічний підхід та реалізовано відповідний ієрархічний ряд, що складається з моделей трьох рівнів: аналітичної, чисельних одно- та дводолинної. Це дозволяє використовувати переваги як аналітичних, так і чисельних моделей, які

функціонально доповнюють одна одну. Ієрархічний підхід дозволяє враховувати лише значущі для конкретних цілей моделювання ефекти, виділяти з ряду фізичних явищ одне або кілька, та зосереджуватися на їх дослідженні. Наслідком цього є економія чисельних ресурсів, що особливо важливо з огляду на високу інтенсивність їх використання. Вперше встановлено зв'язки між моделями різного рівня складності, області застосування, умови граничних переходів моделей одна в одну.

2. Кожну з моделей ієрархічного ряду було вдосконалено порівняно з наявними аналогами. Так, *аналітична модель* РТД враховує відмінності ефективних мас в різних шарах, а для знаходження енергетичних рівнів у квантовій ямі та рівня Фермі в резервуарах використовуються більш адекватні методи. *Чисельна однодолинна модель* покращена завдяки тому, що самоузгодження проводилося в тому числі в спейсерних шарах, границя зшивки обиралася на границі між спейсерами та високолегованими областями, а електронний газ в резервуарах вважався виродженим. Це дозволило позбутися використання параметрів, які носили чисто «припасувальний» характер (поверхневий заряд на гетерограницях та положення границі зшивки квантової і класичної області), та скоректувати нефізичне припущення про невиродженість електронного газу в резервуарах. На відміну від ряду сучасних робіт, *дводолинна модель* враховує змішування станів з двох найнижчих долин на гетерограницях, без врахування якого неможливо досягти задовільного узгодження з експериментальними даними. Усе це дозволило досягти високої адекватності моделей в межах областей їх застосовності.

3. Уперше, базуючись на оригінальному методі, заснованому на введенні «віртуального» резервуару, описано накопичення електронів у емітерній квантовій ямі та електронний транспорт через неї. За допомогою чисельного моделювання показано, що ці ефекти виявляються в особливостях, що виникають на падаючій ділянці ВАХ РТД (артефактах). На відміну від попередніх робіт (де «артефакти» пов'язували з іншими чинниками), достовірність саме такого механізму їх формування нещодавно була підтверджена експериментально. Відтак, *вперше вдалося отримати адекватні уявлення про важливу для функціонування ділянку ВАХ РТД.*

4. Уперше, базуючись на результатах, отриманих методом псевдопотенціалів, було використано фізично виправдану апроксимацію гетеробар'єрів. Запропонований спосіб разом з іншими вдосконаленнями дозволяє отримати адекватні результати при верифікації ВАХ без «припасувального» параметру, що описує форму гетеропереходів.

5. Вперше розроблено та програмно реалізовано чисельні алгоритми для моделей РТД всіх рівнів. Згадані алгоритми використовують адаптивні процедури інтегрування, обернення матриць, та самоузгодження. Користуючись інтегро-інтерполяційним методом, розроблено триточкові скінченно-різницеві схеми, які адаптовані до рівнянь, що містять розривні коефіцієнти (ефективну масу та потенціальну енергію); перевірено їх консервативність та належність до 2-го класу точності. Коректність використаних алгоритмів підтверджується співставленням із результатами для функції передачі та ВАХ, отриманими в рамках методів матриць



передачі: методу Цу-Есакі, методу функцій Ейрі, методу лоренцевої модельної функції, а також за допомогою теорії збурень.

6. Порівняння з експериментальними даними показало, що узгодження струмів у характерних точках знаходиться в межах 3%, напруги – 4% при наявності лише одного припасувального параметру, чого раніше досягти не вдавалося. Однак таке узгодження необхідне, вірогідно, через недостатню інформацію про топологію РТД, що засвідчує відмінна збіжність експериментальних та теоретичних значень параметру контрастності без *будь-яких «узгоджувальних» параметрів*: модель відрізняється на 3–4% від експериментальних даних. Також відмінно узгоджується з експериментом форма ВАХ. Загалом, отримано найкраще узгодження з експериментом порівняно з відомими публікаціями.

7. На основі розроблених чисельних моделей вперше в рамках формалізму хвильових функцій створено прикладну програму з графічним інтерфейсом користувача, що дозволяє моделювати широкий спектр резонансно-тунельних діодів та споріднених структур. Спектр мікроскопічних та макроскопічних величин, доступних для візуалізації, дозволяє вважати таке моделювання *імітаційним*.

8. Результати роботи використано в курсах «основи наноелектроніки» та «надшвидкодіючі прилади електроніки», що читаються на кафедрі фізичної та біомедичної електроніки; також результати було використано в НДР, присвячених розробці новітньої компонентної бази електроніки (номери державної реєстрації: 0108U005938 від 02.10.2008 р., 0107U002392 від 12.12.2008 р., 0109U000658 від 01.01.2010 р.).

#### **Список опублікованих праць за темою дисертації:**

1. Федяй А.В. Моделі резонансно-тунельних діодів (аналітичний огляд). Когерентні моделі / А.В. Федяй // Н.-техн. Ж. «Електроника и связь» – 2007. – №4. – С. 17–29.

2. Федяй А.В. Моделі резонансно-тунельних діодів (аналітичний огляд). Кінетичні моделі / А.В. Федяй // Н.-техн. Ж. «Електроника и связь». – 2007. – №5. – С. 11–16.

3. Москалюк В.А. Сравнительный анализ статических характеристик резонансно-туннельных диодов на основе AlGaAs и AlGaN / В.О. Москалюк, А.В. Федяй // Н.-техн. сб. «Электроника и связь», тематический выпуск "Проблемы электроники, ч.1. – 2007.– С. 10–14.

4. Федяй А.В. Моделирование резонансно-туннельного диода методом функций Эйри / А.В. Федяй, И.С. Тисный // Н.–техн. сб. «Электроника и связь», тематический выпуск «Электроника и нанотехнологии», ч.1. – 2009. – № 2-3, С. 19–21.

5. Москалюк В.О. Проблемы моделирования компонентов наноэлектроники на примере резонансно-туннельного диода / В.О. Москалюк, А.В. Федяй. // Н.-техн. ж. «Вісник ДУІКТ». – 2009. – Т. 7, №4. – С. 424–429.

6. Москалюк В.А. Метод нахождения резонансных уровней энергии при многозонном моделировании гетероструктур / В.А. Москалюк, А.В. Федяй // Техника и приборы СВЧ. – 2011. – №1. – С. 43–48.

7. Москалюк В.О. Прикладна програма для моделювання переносу заряду в

квантово-розмірних гетероструктурах з графічним інтерфейсом користувача / В.О. Москалюк, А.В. Федяй, О.Ю. Ярошенко // Н.-техн. сб. “Электроника и связь”. – 2011. – №1. – с. 48–53.

8. Москалюк В.А. Проблемы моделирования компонентов нанoeлектроники на примере резонансно-туннельного диода / В.А. Москалюк, А.В. Федяй // Тези доп. II міжн. н.-техн. конф. «Сучасні інформаційно-комунікаційні технології /COMINFO'2008/». – 2008. – с. 109.

9. Moskaliuk V. Simplified analytical model of resonant-tunneling diode / V. Moskaliuk, A. Fediai // Abstracts Proceedings of 32nd International Spring Seminar on Electronics Technology "ISSE 2009" . – Brno, Czech Republic, 2009. – P. 1–5.

10. Moskaliuk V.A. Simulation of transverse electron transport in resonant tunneling diode / V.A. Moskaliuk, V.I. Timofeev, A.V. Fedayay // Proceedings of 33rd International Spring Seminar on Electronics Technology. – Warsaw, Poland, 2010. – P. 210–211.

11. Москалюк В.А. Однозонная самосогласованная модель резонансно-туннельного диода / В.А. Москалюк, А.В. Федяй // Тези доп. VI міжн. н.-техн. конф. «Сучасні інформаційно-комунікаційні технології /COMINFO'2010/». – Лівадія, 2010. – С. 149–150.

12. Москалюк В.А. Моделирование артефактов на ВАХ резонансно-туннельного диода / В.А. Москалюк, А.В. Федяй // 21-я Международная конференция «СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии». – Севастополь. – 12-16 сентября 2011 г. – с. 787–788.

Роботи [1, 2] написані автором особисто. У роботах, написаних у співавторстві, особисто автору належить: у [3] – реалізація та аналіз результатів моделювання, у [4] – розробка моделі РТД та її адаптація для програмної реалізації; у [5] – опис методу функцій Гріна та зіставлення з дрейф-дифузійними методами, у [6] – ідея та програмна реалізація методу пошуку електронних станів; у [7] – розробка моделей та ідея графічного інтерфейсу; у [8] – опис методу функцій Гріна у [9] – ідея покращень моделі та їх програмна реалізація, у [10] – розробка чисельних методів та їх програмна реалізація, у [11] – розробка процедури самоузгодження; у [12] – ідея методу моделювання електронного транспорту через емітерну квантову яму та її програмна реалізація.

## АНОТАЦІЇ

**Федяй А.В. Електронний транспорт та квантово-розмірні ефекти в резонансно-тунельному діоді. – Рукопис.**

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата технічних наук за спеціальністю 05.27.01 – твердотільна електроніка. – Національний технічний університет України «КПІ», Київ, 2011.

Дисертаційна робота присвячена дослідженню електронного транспорту та квантово-розмірних ефектів в резонансно-тунельному діоді. У рамках формалізму хвильових функцій було розроблено ієрархічний ряд моделей, основою якого є аналітична, самоузгоджені чисельна однодолинна та чисельна дводолинна моделі, а також методи врахування додаткових ефектів: розсіювання, форми гетеробар'єрів,

пасивних областей. Розроблено новий метод врахування електронного транспорту через метастабільні рівні в емітерній квантовій ямі; вперше реалізовано фізично обґрунтовану апроксимацію гетеробар'єрів.

Було розроблено та програмно реалізовано адаптивні чисельні алгоритми для кожної з моделей. Проведено перевірку коректності розроблених алгоритмів та їх програмної реалізації шляхом порівняння з моделями, що засновані на методі матриць передачі. На основі чисельної моделі в середовищі *Matlab* розроблено прикладну програму з графічним інтерфейсом користувача.

Шляхом проведення чисельних експериментів виявлено основні закономірності протікання фізичних процесів у РТД. Пояснено причину формування області ВДП та особливостей на ній; визначено вплив геометричних розмірів та хімічного складу шарів РТД на параметри квантово-розмірних ефектів, розподіл мікро- та макроскопічних величин вздовж РТД та ВАХ. Визначено функціональність та межі адекватності кожної з моделей ряду.

Шляхом порівняння з експериментальними ВАХ здійснено верифікацію моделей РТД, яка показала відмінний якісний збіг та кількісний – в межах 5% у характерних точках. Проаналізовано вплив рівня моделі на кількісне та якісне узгодження з експериментальними даними.

**Ключові слова:** резонансно-тунельний діод, електронний транспорт, квантово-розмірні ефекти, моделювання.

**Федяй А.В. Электронный транспорт и квантово-размерные эффекты в резонансно-туннельном диоде. – Рукопись.**

Диссертация на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальности 05.27.01 – твердотельная электроника. – Национальный технический университет Украины «КПИ», Киев, 2011.

Диссертационная работа посвящена исследованию электронного транспорта и квантово-размерных эффектов в резонансно-туннельном диоде. Проведен анализ общих квантовомеханических формализмов, используемых для моделирования РТД, включая формализм неравновесных функций Грина и с метод функции Вигнера. Теоретическое обоснование моделей РТД, построенных на указанных формализмах, более строгое, чем моделей, построенных в рамках формализма огибающей волновых функций. Однако приближения, которые в рамках численных моделей необходимо применять, на практике аннулируют это преимущество, и сравнивает адекватность указанных подходов с формализмом волновых функций. Последний был выбран для реализации моделей в силу простоты и экономности с точки зрения использования вычислительных ресурсов.

В рамках формализма волновых функций разработан адаптивный иерархический ряд, состоящий из моделей, в основу которых положены три: аналитическая, численная однодолинная и численная двудолинная. Последние две модели снабжены методами повышения адекватности, реализуемыми посредством учета рассеивания в квантовой яме, учета пассивных областей, улучшенной аппроксимацией гетеробарьеров. Существует возможность самосогласованного расчета или использования линейной аппроксимации падения потенциала вдоль нелегированной части диода.

Рассеивание в квантовой яме учитывалось путем введения мнимой части (оптического потенциала) в гамильтониан уравнения Шредингера в области квантовой ямы в сочетании с моделью единичного рассеивателя. Это позволяет моделировать рассеивание как акт ухода электрона из «когерентного» канала в «последовательный» с учетом времени релаксации.

Разработан метод учета эмиттерных метастабильных состояний электронов, находящихся ниже дна зоны проводимости эмиттера, в так называемой эмиттерной квантовой яме (ЭКЯ). Это позволило описать как накопление заряда в области ЭКЯ, так и токоперенос между уровнями эмиттерной квантовой ямой и основной квантовой ямы, который ответственен за формирование особенностей на падающей ветке ВАХ РТД. Ранее предлагались не менее четырех физически отличных причин формирования так называемой области «плато» на ВАХ РТД, однако на практике подтвердилась лишь гипотеза, которая положена в основу указанного метода.

Учет реальной формы барьера впервые произведен с применением «сверхрешеточной» модели, выведенной из метода псевдопотенциалов и адаптированной для использования в рамках метода огибающей, но до сих пор не использовавшейся для моделирования РТД. Метод состоит в моделировании переходного слоя вблизи гетероперехода отрезком сверхрешетки с фиксированными свойствами, и естественным образом сочетается с общей структурой разработанных моделей.

Каждая из разработанных моделей была построена на основе существующих моделей разной сложности и адекватности путем уточнения принятых предположений, а также добавления разработанных автором методов повышения точности, упомянутых выше. Аналитическая модель резонансно-туннельного диода была улучшена по сравнению с имеющимися аналогами за счет учета отличия эффективных масс в разных слоях. Для нахождения энергетических уровней в квантовой яме, считалось, что яма имеет конечную глубину, чем уточнено ранее принимаемое предположение о бесконечной глубине ямы. Уровень Ферми в резервуарах рассчитывался, исходя из того, что электронный газ в них вырожденный; в то время как в предыдущих работах использовалась формула, справедливая для невырожденного коллектива, что снижало адекватность модели. Численная однодолинная модель была улучшена благодаря тому, что самосогласование проводилось не только в области двубарьерной квантовой системы, но и в спейсерных слоях, а также примыкающей к ним части резервуаров такой длины, которая достаточна для выполнения условий Дирихле для потенциальной энергии. Это позволило не использовать подгоночный параметр «поверхностный заряд». Граница сшивки «квантовой» и «классической» областей выбиралась между сильнолегированными слоями и резервуарами, и не использовалась в качестве «подгоночного» параметра.

Для каждой из моделей предложены адаптированные алгоритмы, которые были запрограммированы в *Matlab*. Адаптированными в частности являются процедуры обращения матриц и интегрирования; трехточечные схемы выведены с учетом разрывности эффективных масс, потенциальной энергии в зоне проводимости и диэлектрической проницаемости. В силу сложности алгоритмов

разработана и использована система их верификации путем сравнения с моделями РТД, в которых для вычисления коэффициента передачи использованы методы матриц передачи. Специально для этого разработаны методы расчета коэффициента прохождения с применением матриц передачи; они, однако, не были использованы для моделей из-за существенных вычислительных недостатков метода. На основе численных моделей в среде *Matlab* разработано приложение с графическим интерфейсом пользователя, обеспеченное библиотекой материалов и отображающее все необходимые для анализа физических явлений в РТД зависимости: плотность электронных состояний и функцию распределения в пространстве поперечных энергий; коэффициенты прохождения из  $\Gamma$ - в  $\Gamma$ -долину и из  $\Gamma$ - в X-долину, их когерентные и некогерентные составляющие.

Путем проведения численных экспериментов установлены основные закономерности в зависимостях параметров и характеристик, описывающих квантово-размерные эффекты и механизмы транспорта от физико-топологических параметров РТД. С помощью рассчитываемых величин объяснены как основные эффекты, такие как появления отрицательной дифференциальной проводимости, возрастание долиного тока, так и более «тонкие» - транспорт и накопление заряда, связанные с эмиттерной квантовой ямой, формирование резонансов Фано вследствие интерфейсного рассеивания и другие. На основании этих исследований определены границы адекватности и функциональность каждой из моделей ряда.

Достоверность полученных результатов продемонстрирована путем сопоставления результатов моделирования с экспериментальными ВАХ. Было обнаружено отличное качественное и хорошее количественное совпадение с экспериментальными данным – в пределах 5% в характерных точках. Также проанализировано влияния уровня модели на качественное и количественное согласование с экспериментом.

**Ключевые слова:** резонансно-туннельный диод, электронный транспорт, квантово-размерные эффекты, моделирование

**Fedyay A.V. Electron transport and quantum-dimensional effects in resonant-tunneling diode. – Manuscript.**

PhD thesis on speciality 05.27.01 – solid-state electronics. – National technical university of Ukraine «KPI», Kiev, 2011.

Ph.D. thesis is devoted to investigation of electron transport and quantum nanoscaled effects in resonant-tunneling diode. Hierarchical set of models is developed within the framework of envelope function formalism. The core models are analytical, numerical one-valley and two-valley models. The last two models are supplied with the methods of adequacy enhancement by taking to account of scattering, real shape of heterobarrier and series resistance. New method is developed which allows taking into account electron transport through metastable energy levels in the emitter quantum well; physical based approximation of heterobarriers was realized for the first time.

Adaptive numerical algorithms, realizing each model, is developed and programmed. Checking of correctness of the developed algorithms and respective codes is done by comparison with models, based on transfer matrix formalism. Based on numerical model, simulation tool is developed within Matlab GUI.

Main laws of physical processes in RTD are discovered by making numerical experiments. The cause of negative differential resistance region formation and singular peculiarities at the latter is explained; it was defined the influence of geometric dimensions and chemical compound on the parameters of quantum-dimensional effects, distribution of micro- and macroscopic quantities along RTD as well as on current-voltage characteristics. Functionality and the bounds of adequateness of each model is defined.

The influence of the model's level on quantitative and qualitative agreement with experimental data is analyzed. Verification of the model is done by comparison with experimental I-V curves, and it is observed excellent qualitative and quantitative agreement within 5% at the characteristic points.

**Key words:** resonant-tunneling diode, electron transport, quantum-dimensional effects, modeling.