

Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут»

На правах рукопису

Федяй Артем Васильович

УДК 621.382.323

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

Спеціальність 05.27.01 – твердотільна електроніка

Дисертація на здобуття вченого ступеня
кандидата технічних наук

Науковий керівник
Москалюк Володимир
Олександрович,
кандидат технічних наук,
професор

Київ – 2011

ЗМІСТ

ЗМІСТ.....	3
ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ.....	7
ВСТУП.....	11
РОЗДІЛ 1 АНАЛІТИЧНИЙ ОГЛЯД МОДЕЛЕЙ РЕЗОНАНСНО- ТУНЕЛЬНИХ ДІОДІВ	23
1.1. Загальні квантово-механічні підходи до моделювання резонансно-тунельних діодів.....	23
1.1.1. Метод огибаючої хвильових функцій.....	23
1.1.2. Метод функцій Вігнера	25
1.1.3. Метод функцій Гріна.....	28
1.2. Загальний підхід до побудови моделей в рамках формалізму хвильових функцій.....	31
1.2.1. Поділ на структурні складові.....	31
1.2.2. Методика розрахунку струму.....	36
1.3. Рівні моделювання квантово-розмірних ефектів та механізмів транспорту в РТД.....	39
1.3.1. Спрощені моделі резонансно-тунельних діодів.....	40
1.3.2. Врахування перерозподілу просторового заряду.....	52
1.3.3. Багатодолинне моделювання РТД.....	54
1.3.4. Врахування розсіювання та інших факторів, що впливають на статичні характеристики РТД.....	55
1.4. ВИСНОВКИ.....	58
РОЗДІЛ 2 МОДЕЛІ РЕЗОНАНСНО-ТУНЕЛЬНОГО ДІОДУ.....	62
2.1. Аналітична модель.....	62
2.2. Чисельна однодолинна модель	69
2.2.1. Концентрація електронів	70
2.2.2. Хвильові функції електронів у квантовій області	77
2.2.3. Наближення Хартрі для врахування просторового заряду.....	80
2.2.4. Узагальнена формула Цу-Есакі.....	86

2.3. Чисельна дводолинна модель.....	89
2.4. Розробка методів підвищення адекватності моделей шляхом врахування паразитних ефектів.....	98
2.4.1. Методика врахування розсіювання у квантовій ямі РТД.....	98
2.4.2. Моделювання опору пасивних областей РТД.....	103
2.4.3. Фізична модель реальної форми розривів зон.....	105
2.4.4. Фізична модель електронного транспорту через метастабільні стани в емітерній квантовій ямі.....	107
2.5. Висновки.....	111
РОЗДІЛ 3 ВИКОРИСТАННЯ РОЗРОБЛЕНИХ МОДЕЛЕЙ ДЛЯ АНАЛІЗУ КВАНТОВО-РОЗМІРНИХ ЕФЕКТІВ ТА ЕЛЕКТРОННОГО ТРАНСПОРТУ В РТД.....	
	114
3.1. Функціональність спрощеної аналітичної моделі.....	114
3.2. Імітаційне моделювання за допомогою чисельної однодолинної моделі.....	123
3.3. Вплив найближчої вищої долини на характеристики РТД в рамках дводолинної моделі.....	132
3.4. Вплив розсіювання, паразитних опорів, форми бар'єрів та емітерних станів на характеристики РТД.....	137
3.4.1. Розсіювання та некогерентний канал переносу.....	137
3.4.2. Вплив паразитного опору на вольт-амперну характеристику	139
3.4.3. Врахування реальної форми бар'єрів.....	141
3.4.4. Вплив емітерних станів на квантово-розмірні та транспортні явища в РТД.....	141
3.5. Висновки.....	144
РОЗДІЛ 4 ІЄРАРХІЧНИЙ ПІДХІД ДО МОДЕЛЮВАННЯ РТД.....	
	148
4.1. Взаємозв'язки між розробленими моделями та формування ієрархічного ряду.....	148
4.1.1. Класифікація моделей ієрархічного ряду.....	148
4.1.2. Система вхідних та вихідних параметрів моделей ряду.....	150
4.1.3. Взаємозв'язки між моделями ієрархічного ряду.....	152

4.2. Порівняння моделей за універсальністю та якісною адекватністю.....	156
4.3. Чисельна верифікація та адаптація математичних моделей..	158
4.4. Експериментальна верифікація моделей ряду.....	161
4.5. Автоматизація проектування РТД за допомогою застосунку з графічним інтерфейсом користувача.....	169
4.6. Висновки.....	172
ВИСНОВКИ ПО РОБОТІ	176
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	180
ДОДАТОК А.....	195
ДОДАТОК Б	198
ДОДАТОК В	206
ДОДАТОК Г	213

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ

АЦП – аналого-цифровий перетворювач

ВАХ – вольт-амперна характеристика

ВВЧ – вкрай високі частоти

ВДП – від’ємна диференціальна провідність

Γ_i – природне розширення i -го енергетичного рівня

Γ_p – релаксаційне розширення енергетичного рівня

$\Gamma_{\Sigma, i}$ – сумарне розширення i -го релаксаційне рівня

ДБКС – двобар’єрна квантова система

ДДП – додатна диференціальна провідність

ЕКЯ – емітерна квантова яма

ЕОМ – електронно-обчислювальна машина

ЗПДВ – запам’ятовуючий пристрій з довільною вибіркою

КМОП – комплементарна структура метал-оксид-напівпровідник

НВЧ – надвисокі частоти

ОКЯ – основна квантова яма

РТД – резонансно-тунельний діод

СРС – скінченно-різницева схема

ЦАП – цифро-аналоговий перетворювач

A_i (B_i) – функція Ейрі (комплементарна функція Ейрі)

e – елементарний заряд

E – енергія електрона

E_c – потенціальна енергія електрона в полі кристалічної решітки («дно зони провідності»)

E_F – енергія (рівень) Фермі електронів

$f(E)$, $f_{Ф-Д}(E)$ – ймовірність заповнення електронних станів (функція Фермі-Дірака)

$g(E)$ – густина енергетичних електронних станів

$g(\mathbf{k})$ – густина електронних станів у \mathbf{k} -просторі

h (\hbar) – стала Планка (Планка-Дірака)

j – густина потоку ймовірності

J – густина струму

\mathbf{k} – хвильовий вектор електрона

k_B – стала Больцмана

m – маса спокою електрона

$M(a, b, z)$ – вироджений гіпергеометричний ряд

m^* – ефективна маса

MBE – молекулярно-променева епітаксія (*molecular beam epitaxy*)

$MOCVD$ – хімічне осадження із газової фази методом розкладання металоорганічних сполук (*metal-organic chemical vapor deposition*)

N – концентрація електронів

$N(E)$ – повна енергетична функція розподілу електронів за енергією

N_D – концентрація донорних домішок

T – абсолютна температура

$T(E_z)$ – коефіцієнт проходження в залежності від поперечної енергії

U – потенціальна енергія електрона

U_s – потенціальна енергія електрона в полі просторового заряду

V_s – самоузгоджений потенціал

α – стала міждолинної взаємодії

ε – відносна діелектрична проникність

ε_0 – діелектрична стала

μ – рухливість електронів

ρ – питома провідність

τ – час релаксації енергії електрона

τ_i – час життя електронів на i -му енергетичному рівні

$\tau_{p(E)}$ – час релаксації імпульсу(енергії) електрона

ψ – огинаюча хвильової функції електрона

ВСТУП

Мініатюризація традиційної елементної бази твердотільної електроніки поступово підходить до своєї природної межі. Передбачається, що в найближчі роки закон Мура втратить свою силу [1]. Одна з причин – підвищення ролі квантово-розмірних ефектів у функціонуванні електронних компонентів, що невідворотно настає при зменшенні їх характерних розмірів. Перспективним способом вирішення цієї проблеми є розробка елементної бази, компоненти якої працювали б завдяки, а не всупереч квантово-розмірним ефектам.

Розвиток технології молекулярно-променевої епітаксії (*MBE*) та хімічного осадження з газової пари металоорганічних сполук (*MOCVD*) дозволяє виготовляти напівпровідникові гетероструктури з тонкими плівками, зокрема резонансно-тунельні діоди (РТД) та споріднені структури, в яких можливе унікальне явище, що не має аналогів в об'ємних напівпровідниках – резонансне тунелювання носіїв заряду через двобар'єрну квантову систему. РТД – єдиний заснований на квантових ефектах пристрій, що готовий до масового застосування в електроніці [1], один з найбільш перспективних пристроїв твердотільної наноелектроніки [2].

Нещодавно було продемонстроване застосування РТД для різних цілей в електроніці: створення цифро-аналогових перетворювачів (ЦАП), задаючих генераторів, регістрів зсуву та статичних запам'ятовувальних пристроїв з довільною вибіркою (ЗПДВ) із ультранизьким споживанням енергії [3]. РТД можуть бути виготовлені для більш високопродуктивних ЦАП, ніж ЦАП та інші пристрої на основі комплементарних структур метал-оксид-напівпровідник структурі (КМОП). Вони покривають частотний діапазон 10..100 ГГц і є технологією з більш низьким споживанням

енергії, ніж існуючі ЗПДВ [1]. Як відзначається в [4], на сьогодні РТД знаходять, застосування в електронних пристроях НВЧ та ВВЧ діапазонів що постійно розширюється. Наприклад, в результаті виконання дослідницької програми *DAPRA's Ultra Electronics Program* (США) були створені суматори в гігагерцовому діапазоні частот. Було продемонстровано процедуру інтеграції для створення базових елементів електричних кіл, необхідних для суматорів, сигнальних процесорів та кіл з багатозначною логікою. Були продемонстровані 4-бітні ЦАП частотою 2 ГГц, АЦП частотою 3 ГГц, тактові генератори, регістри зсуву, а також статичні ЗПДВ зі споживанням енергії 50 нВт/біт [5].

Завдяки високій швидкості процесу тунелювання резонансно-тунельні діоди мають потенціал до підвищення частотного діапазону. У 2010 році було продемонстровано роботу GaInAs/AlAs РТД в якості генератору сигналів частотою 1.04 ТГц та потужністю 7 мкВт [6].

Актуальність роботи:

Недостатній розвиток уявлень про фізичні процеси, що мають місце в активній частині резонансно-тунельного діоду, є однією з перепон, що стоять на шляху до покращення їх статичних та динамічних характеристик, а отже – виходу виробництва цих приладів на промисловий рівень. Незважаючи на значну кількість робіт з моделювання квантово-розмірних ефектів та явищ переносу в РТД, засобу для всебічного аналізу хоча б стаціонарних процесів створено не було. За своїм призначенням моделі, що зустрічаються в літературі, можна умовно розділити на універсальні та спеціалізовані. *Універсальні* моделі претендують на повноту опису всіх частин та процесів, що відбувається у РТД [7, 8, 9, 10, 11]. Зазвичай вони не враховують у повній мірі досягнення попередніх робіт з моделювання; потребують великої кількості фізично

необґрунтованих узгоджувальних параметрів. За рахунок останніх досягається задовільне узгодження з експериментальними даними, однак адекватність залишається на рівні найпростіших аналітичних моделей. Деякі з моделей залучають величезну кількість чисельних ресурсів для врахування несуттєвих ефектів, що викликають виключно фундаментальний інтерес (фононне резонансне розсіювання, вплив вищих енергетичних зон) і до того ж апроксимуються досить грубо [12]. Спеціалізовані моделі концентруються на одному або певному колі ефектів, що відбуваються в РТД, та проявляють підвищену адекватність лише стосовно них. Приклади: модель, акцентована на уточнення долинного струму [13], резонансне розсіювання в квантовій ямі [14], гістерезис та бістабільність ВАХ [15].

Сучасні моделі РТД [7, 8, 10, 11], як правило, чисельні, оскільки аналітичні моделі [16, 17, 18] можна побудувати лише з урахуванням основних квантових ефектів та механізмів струмопереносу. Відтак, аналітичні моделі не є достатньо адекватними. Однак, за допомогою чисельних моделей вкрай незручно відслідковувати тенденції залежності характеристик діоду від конструктивних та інших факторів. Тому актуальним є включення аналітичного моделювання у якості першого наближення для подальшого уточнення за допомогою чисельного моделювання.

У сучасних роботах прикладної направленості часто недостатньо ефективно використовуються досягнення математичної фізики та чисельної математики для моделювання РТД. Відсутні також ефективні спеціалізовані прикладні програми з графічним інтерфейсом, які б дозволяли здійснювати автоматизоване проектування перш ніж перейти до виготовлення експериментальних зразків.

Мала увага приділяється визначенню границь застосування та адекватності моделей, що побудовані на тих чи інших формалізмах, співвідношенню між моделями різного рівня складності. Тому не зрозуміло, для яких цілей достатнім рівнем є аналітичне, а де буде необхідно залучати чисельне моделювання.

У такій ситуації постає необхідність створення моделі, у якій дотримано баланс між складністю, використанням чисельних ресурсів та адекватністю. Було виявлено, що найкращим підходом до опису релевантних квантово-розмірних ефектів та електронного транспорту в РТД є використання на різних етапах проектування моделей різного рівня – від аналітичної до чисельної дводолинної, що враховує процеси перерозподілу заряду, розсіювання, вплив омічних областей, форму бар'єрів і таке інше. Оскільки інтуїтивно зрозумілих величин при моделюванні електронного транспорту в РТД значно менше, ніж при моделюванні традиційних компонентів, розуміння фізики процесів серйозно ускладнюється. Відтак, необхідно особливу увагу приділяти *візуалізації* квантово-розмірних ефектів.

Додаткової актуальності моделюванню РТД додає значна вартість та час на виготовлення дослідних зразків. Нещодавно у Києві введено в експлуатацію лабораторний комплекс «Нанофаб», де будуть створені технологічні умови для вирощування тонких плівок активної частини РТД. Очікується, що це викличе підвищений інтерес до реальних інструментів передбачення властивостей вирощуваних гетероструктур. Тому дана робота, зокрема, має на меті надати надійний та зручний інструмент для проектування РТД.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами.
Проведені дослідження мають самий безпосередній зв'язок з роботами, що проводилися кафедрою фізичної та біомедичної електроніки факультету електроніки НТУУ «КПІ» з дослідження та

розробки надшвидкодiючих напiвпровiдникових пристроiв, включаючи:

1. НДР «Дослiдження субмiкронних та нанорозмiрних структур на основi перспективних напiвпровiдникових матерiалiв», номер державної реєстрацiї № 0108U005938 вiд 02.10.2008 р. Автор дисертацiї є співавтором роздiлiв, що присвяченi дослiдженню зонної структури напiвпровiдникiв III–V груп, iнформацiя про яку була використана при побудовi моделей, що описанi в дисертацiї.

2. НДР «Дослiдження новiтнiх напiвпровiдникових структур та приладiв для розроблення i впровадження технологiй iх виготовлення», номер державної реєстрацiї № 0107U002392 вiд 12.12.2008 р. Роль автора полягає в розробцi аналітичної моделi резонансно-тунельного дiоду, що вiдповiдає роздiлу звiту «Розробка математичних моделей резонансно-тунельних дiодiв».

3. НДР «Дослiдження новiтнiх напiвпровiдникових наноприладiв i нанокомпонентiв iнтегральних схем на основi одно- i двовимiрних структур», номер державної реєстрацiї № 0109U000658 вiд 01.01.2010 р. Роль автора полягає в розробцi однодолинної чисельної моделi резонансно-тунельного дiоду, якiй присвячений роздiл звiту «Самоузгоджена модель резонансно-тунельного дiоду».

Об'єктом дослідження є унiполярнi напiвпровiдниковi резонансно-тунельнi дiоди та спорiдненi структури.

Предметом дослідження є моделювання квантово-розмiрних ефектiв та електронного транспорту у резонансно-тунельних дiодах.

Метою дисертацiйної роботи є створення iєрархiчного ряду моделей резонансно-тунельних дiодiв, що призначений для удосконалення топологiї iснуючих та проектування покращених типiв 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.

Методи дослідження:

Для дослідження фізичних процесів, що протікають у РТД використовувалися методи фізики твердого тіла, зокрема метод огибаючої хвильових функцій; окремі методи квантової механіки, теорії розсіювання, квантової статистики, а також феноменологічні уявлення про електронний транспорт у нанорозмірних гетероструктурах з поперечним транспортом. Для отримання математичних моделей застосовувався апарат математичної фізики.

При побудові чисельних моделей використовувалися чисельні методи, зокрема трьохточкові скінченно-різницеві схеми другого порядку точності, адаптовані методи розв'язання лінійних алгебраїчних рівнянь та адаптивні алгоритми інтегрування. Програмна реалізація чисельних алгоритмів проводилася в середовищі *Matlab*, у якому також була створена прикладна програма для автоматизованого проектування РТД.

Наукова новизна отриманих результатів:

1. Уперше для проектування 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 у різних шарах, а для знаходження енергетичних рівнів у квантовій ямі та рівня Фермі в резервуарах використовуються більш адекватні методи. *Чисельна одноступінна 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 формування «артефактів» 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-різницеві схеми перевірено на консервативність та належність до 2-го класу точності.

Обґрунтованість і достовірність наукових положень, висновків та рекомендацій досягається:

- формально-математичною коректністю математичної моделі та її чисельної реалізації;

- обґрунтованістю припущень, прийнятих при формулюванні рівнянь математичної моделі.

Коректність побудови ієрархічного ряду моделей обумовлена строгістю застосування математичного апарату при створенні моделі, і підтверджується дwoяко:

1. Моделі ієрархічного ряду переходять одна в одну за певних граничних умов (наприклад дводолинна модель зводиться до однодолинної, якщо вибрати параметр міждолинної взаємодії $\alpha = 0$).

2. Характеристики, розраховані в рамках чисельних моделей, співпадають з характеристиками, що розраховані з залученням методів матриць передачі, в тому числі методу Цу-Есакі, методу функцій Ейрі, а також методу лоренцевої функції і теорії збурень.

Обґрунтованість прийнятих при моделюванні припущень підтверджується порівнянням з експериментальними даними, що взяті з фахових публікацій.

Наукове значення роботи. В дисертаційній роботі вперше запропоновано використовувати комплексний підхід до проектування резонансно-тунельних діодів шляхом створення ієрархічного ряду моделей, який дозволяє враховувати лише значущі для конкретних цілей моделювання ефекти, виділяти з ряду фізичних явищ одне або кілька, та зосереджуватися на їх дослідженні. Процес вибору топології з використанням такого підходу можна звести до схеми «оцінка»–«уточнення».

Пояснено важливий механізм транспорту, який полягає в переносі заряду між емітерною та основний квантовою ямою, та вперше застосовано фізично обґрунтовану апроксимацію гетеропереходів.

Практичне значення роботи.

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. Вперше такий застосунок має відкритий код. Вперше серед решти формалізмів застосунок передбачає можливість відображення послідовної складової струму та розрахунку густини станів не лише в Γ , а й у X-долині, а також дозволяє моделювати артефакти на ВАХ та має інші корисні для проектувальника функції. Відкритість коду, написаного на *Matlab*, дозволяє забезпечити постійний розвиток та вдосконалення цього програмного засобу, залучення до роботи над застосунком широкого кола спеціалістів.

Особистий внесок здобувача. Автором розроблено ієрархічний ряд моделей резонансно-тунельних діодів, на основі них побудовано чисельні моделі квантово-розмірних ефектів та явищ переносу в РТД, реалізовано вказані чисельні моделі в середовищі *Matlab*. Ідеї всіх суттєвих покращень моделей, обґрунтування теоретичних положень, що використовувалися для побудови моделей належать особисто автору.

Роботи [1, 2] написані автором особисто. У роботі [3] автору належить виконання розрахунків та їх аналіз, в роботах [4, 11]

результати належать авторам рівною мірою, в роботі [7] автору належить постановка задачі, вибір методу реалізації, в роботі [9, 10] автору належить вибір методу розв'язання задачі та його реалізація. У роботі [5] автору належить вибір методу розв'язання задачі, розробка чисельних алгоритмів та їх програмна реалізація, в роботі [6] автору належить постановка задачі, вибір методу, розробка чисельних алгоритмів, їх програмна реалізація; ідея структури меню та графіки прикладної програми. У роботі [12] автору належить ідея методу, його теоретичне обґрунтування, розробка алгоритмів та їх чисельна реалізація.

Апробація результатів дисертації. Результати досліджень, що включені в дисертаційну роботу, доповідалися та обговорювалися на міжнародних конференціях «Проблеми фізичної та біомедичної електроніки» (м. Київ 2007 р., 2009 р.), «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. Основні результати дисертаційної роботи опубліковані в 7 статтях наукових журналів [19, 20, 21, 22, 23, 24, 25], що відповідають вимогам ВАК, 5 – в матеріалах та тезах конференцій [26, 18, 27, 28, 29].

РОЗДІЛ 1

АНАЛІТИЧНИЙ ОГЛЯД МОДЕЛЕЙ РЕЗОНАНСНО-ТУНЕЛЬНИХ ДІОДІВ

1.1. Загальні квантово-механічні підходи до моделювання резонансно-тунельних діодів

З часу піонерських робіт [30, 31] і до сьогоднішнього часу для моделювання РТД застосовувалися наступні загальні квантово-механічні формалізми: метод огинаючої хвильових функцій [10, 7, 8, 27]; метод матриці густини [32], метод функцій Гріна [33, 34, 9, 35]; метод функцій Вігнера [36, 37, 38, 39]; метод функціоналу густини та інші. Мета даного підрозділу – обрати оптимальний формалізм для вирішення завдань дисертаційної роботи шляхом критичного аналізу найбільш розроблених.

1.1.1. Метод огинаючої хвильових функцій

В рамках методу огинаючої хвильової функції для опису руху електронів у активній області РТД використовується рівняння Шредінгера для огинаючої хвильової функції $\psi(\mathbf{r})$ електрона з ефективною масою m^* , що в однозонному наближенні має вигляд [40]:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \nabla \left(\frac{1}{m^*} \nabla \right) + U(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \quad (1.1)$$

де \hbar – стала Планка, $U(\mathbf{r})$ – потенціальна енергія електрона в полі кристалічної решітки та поля просторового заряду, E – енергія електрона.

Використання огинаючої хвильової функції замість самої хвильової функції дозволяє звести задачу зі знаходження струму через РТД до задачі знаходження функції проходження електрона T від енергії поперечного руху E_z – так званого коефіцієнту проходження $T(E_z)$ [40]. При цьому необхідно, щоб закон дисперсії при релевантних енергіях був параболічним, а також, щоб ефективні маси електронів емітера та шару, в якому формується квантова яма, були рівними [41].

Знаючи коефіцієнт проходження $T(E_z)$, можна обчислити густину струму J за відомою формулою Цу-Есакі [30] з модифікаціями [42]:

$$J = \frac{2m^* e k_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3} \int_{eV}^{\infty} T(E_z) D(E_z) dE_z, \quad (1.2)$$

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 резервуарах (див. рис. 1.1, б).

Щоб знайти $T(E_z)$, необхідно знати потенціальну енергію U , що складається з енергії електрона в полі кристалічної решітки E_c та в полі просторового заряду U_s :

$$U = E_c + U_s. \quad (1.3)$$

Задача зі знаходження $U(E_z)$ зазвичай розв'язується в наближенні Хартрі, в якому вона зводиться до самоузгодженого розв'язання рівнянь Шредінгера та Пуасона [43, 44, 7, 28].

У рамках формалізму хвильових функцій можливе врахування розсіювання за допомогою введення в гамільтоніан оптичного потенціалу, iW [45, 46, 7] та введення додаткового, некогерентного, каналу переносу [47], [45]. Також можливий опис змішування електронних станів з Γ та X -долин. [48], [49], [50].

Адекватність самого методу хвильових функцій суттєво обмежена, оскільки він базується на одночастинковій хвильовій функції. Підвищення адекватності досягається використанням *ad-hoc* методів. Тому при розробці моделей слід ретельно перевіряти виконання законів збереження. Перевагою методу хвильових функцій є ефективність використання чисельних ресурсів та задовільне узгодження з експериментальними даними. Останнє на сьогодні досягається лише шляхом введення більш, ніж чотирьох узгоджувальних параметрів; при цьому деякі особливості ВАХ РТД все ще потребують пояснення.

1.1.2. Метод функцій Вігнера

Моделі огибаючої функції, що не враховують змішування електронних станів та розсіювання, інколи класифікуються як «динамічні» або «когерентні» моделі [51], оскільки вони зводяться

до опису руху одного електрона рівнянням Шредінгера для огибаючої (1.1). В рамках такого підходу відслідковування впливу внутрішніх сил, наприклад непружного розсіювання, вводиться лише феноменологічно. Врахувати явно внутрішню кінетику дозволяє кінетичне рівняння Больцмана, до якого прямо або опосередковано включені внутрішні сили. Спроби створення таких квантових «кінетичних» моделей РТД від початку були викликані бажанням адекватного врахування процесів непружного розсіювання. З цією метою було розроблено методи з використанням матриці густини та функцій Вігнера. Великий обсяг роботи був проведений з моделювання РТД з використанням функцій Вігнера [36, 52, 37, 38], а їх розвиток дозволив отримувати дуже цінну інформацію про властивості РТД.

Сама по собі функція Вігнера є поняттям, що виникає в так званому вігнерівському формулюванні квантової механіки [53], що еквівалентне шредінгерівському чи будь-якому іншому. Перевагою моделей, що засновані на використанні функцій Вігнера, є простота опису «змішаних» станів.

За визначенням, *функція Вігнера* – це трансформація Фур'є оператора одночасткової матриці густини [54], [36]:

$$f(x, k, t) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x + y; t) \psi(x - y; t) e^{2iky} dy,$$

де ψ – хвильова функція, k – хвильовий вектор електрона. Її часова еволюція описується транспортним рівнянням Ліувілля:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\hat{L}}{i\hbar} f + \hat{C} f, \quad (1.4)$$

де \hat{C} – оператор зіткнень, $\hat{C} f(x, y, t) = \int dk' [W_{kk'} f(x, k', t) - W_{k'k} f(x, k, t)]$,
де $W_{kk'}$ – ймовірності переходу зі стану з хвильовим числом k до k' .

В рівнянні (1.4) оператор Ліувілля \hat{L} виражає зміну функції розподілу Вігнера за рахунок балістичного електронного транспорту, а оператор зіткнень враховує дисипативні взаємодії, наприклад, оптичне фононне розсіювання. Результуюче квантове рівняння Ліувілля можна розглядати як квантово-механічну версію транспортного рівняння Больцмана.

Недоліками методу функцій Вігнера є застосування наближення часу релаксації [51], допустимість якого для квантових систем сумнівна. Між тим, мотивацією використання методу є саме можливість адекватного врахування розсіювання. Інколи для забезпечення адекватності моделювання на додачу до рівняння Ліувілля доводиться розв'язувати рівняння Шредінгера [55]. Відтак, фактично необхідно створювати модель, засновану на двох формалізмах. В [56] було показано, що при побудові дискретних моделей РТД, можуть виникати проблеми з виконанням законів збереження. Можливий помітний «ненульовий струм» при відмінному від нуля зміщенні [57]. Інколи проти використання функцій Вігнера висловлюються радикальні аргументи [53]: «сама по собі функція Вігнера позбавлена фізичного смислу, і наочність вігнерівського представлення значною мірою є уявною».

Наслідком відмічених недоліків є те, що результати моделювання методом функцій Вігнера вкрай погано узгоджуються з експериментальними даними [51]; дослідники взагалі уникають їх співставлення.

Перевагами методу функцій Вігнера є його здатність без додаткових припущень прогнозувати область «плато» [38], а також те, що процес знаходження самоузгодженого потенціалу включає в

себе аналіз перехідного процесу від початкового наближення для потенціалу до самоузгодженого потенціалу, тобто самоузгоджені моделі є автоматично моделями перехідних процесів. Це, однак, призводить до збільшення інтенсивності використання чисельних ресурсів.

1.1.3. Метод функцій Гріна

Метод нерівноважних функціях Гріна розроблений в рамках представлення взаємодії. У цьому методі для врахування взаємодії між мікрочастками сформульовано єдину теоретичну основу [34, 58], в рамках якої теоретично можуть бути враховані електрон-електронні взаємодії в контактних областях, включаючи збагачений шар емітера, взаємодії між електронами та фононами, а також інші процеси розсіювання [51].

Фізичний смисл функцій Гріна полягає в тому, що вони визначають реакцію в точці \mathbf{r} в момент часу t завдяки збудженню в точці \mathbf{r}' в момент часу t' . Цей метод дозволяє визначати струм через РТД як реакцію на збудження. У вказаному формалізмі вводяться кілька функцій Гріна, таких як запізнювальна G^R , випереджувальна функція Гріна G^A , функції кореляції $G^{<(>)}$ та власні енергії, що їм відповідають: Σ^R , Σ^A , $\Sigma^{<(>)}$. Зазначені функції можуть розглядатися, відповідно, як відгук електронної хвилі в різних точках по відношенню до збудження, кореляції між різними станами в різні моменти часу та Гамільтоніани потенціалів розсіювання [51].

Рівняння, що формують метод функцій Гріна, можна отримати з рівняння Дайсона [59], виходячи з якого в рамках формалізму Келдиша-Каданова-Бейма, Датта та Лейк сформулювали систему рівнянь для функцій Гріна [60, 61]:

$$[E - H_0(\mathbf{r})] G^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) - \int \Sigma^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1) G^R(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'; E) d\mathbf{r}_1 = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (1.5)$$

$$G^<(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \int G^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1; E) \Sigma^<(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; E) G^{R*}(\mathbf{r}', \mathbf{r}_2; E) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2, \quad (1.6)$$

де H_0 – одноелектронний гамільтоніан, \mathbf{r} – координата;

$$\Sigma^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) - i \frac{\Gamma(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E)}{2}, \quad (1.7)$$

де $\sigma = \frac{\Sigma^R + \Sigma^A}{2}$, а $\frac{i\Gamma}{2} = \frac{\Sigma^R - \Sigma^A}{2}$. В (1.7) σ – це ермітова частина Σ^R , а

$\frac{i\Gamma}{2}$ – антиермітова. Якщо ми здійснимо перетворення Фур'є від

$(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ до \mathbf{k} , то σ та $\frac{i\Gamma}{2}$ стануть, відповідно, дійсною та уявною

частиною $\Sigma^R(\mathbf{R}, \mathbf{k}, E)$, де $\mathbf{R} = \frac{\mathbf{r} + \mathbf{r}'}{2}$ – координата центру мас.

Ермітова частина Σ^R – це сума результату гільбертового перетворення антиермітової частини та члена Σ_{HF} , обумовленого сингулярною частиною Σ^R з діаграм Хартрі-Фока [62]:

$$\sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \frac{1}{\pi} P \int \frac{dE'}{2\pi} \frac{\Gamma(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E')}{E - E'} + \Sigma_{HF}, \quad (1.8)$$

де P позначає головне значення інтегралу.

Величина Γ задається сумою двох функцій власної енергії $i\Sigma^>$ та $i\Sigma^<$. Як тільки вони будуть визначені, рівняння (1.5)–(1.8) плюс рівняння для визначення $\Sigma^{<(>)}$ формують замкнену систему рівнянь до вирішення. Для подальшого використання згаданої системи в числових моделях використовуються спрощення та апроксимації.

Знайшовши всі функції Гріна, можна визначати струм, концентрацію, а також мікроскопічні величини – коефіцієнт проходження, густину станів. Наприклад, в [61] густина елементарного струму в точці \mathbf{r} розраховується за формулою:

$$J(\mathbf{r}, E) = -\frac{e\hbar}{4\pi m^*} \lim_{\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}} [(\nabla - \nabla')G^<(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E)],$$

результат інтегрування якої дає повний струм, що його створює квантовий ансамбль.

У формалізмі функцій Гріна проблемою є отримання такої апроксимації згаданої системи рівнянь, яка була б придатна для чисельної реалізації і зберігала фізичну адекватність. Так, замість двох рівнянь в методі хвильових функцій у формалізмі функцій Гріна їх чотири. Тому для чисельної реалізації використовується наближення часу релаксації [63], яке зводить нанівець теоретичні переваги методу.

У рамках формалізму функцій Гріна розроблені так звані «десятизонні» моделі, які враховують зонну структуру як зони провідності, так і валентних зон [64]. Однак існуючі апроксимації погано відтворюють закон дисперсії у найважливіших частинах – поблизу дна зони провідності в Γ -долині, що добре видно при використанні пакету WinGreen [65]. Існують також проблеми неузгодженості прийнятих апроксимацій [66], наявність ненульового струму за нульового зміщення [67], порушення закону збереження густини потоку [68]. Останні дві ситуації рекомендується обходити шляхом додаткового використання законів збереження [67, 68], що, строго кажучи, справедливо лише для замкнених систем; крім того це додає до моделі додаткові рівняння.

У [69] зазначається, що «...метод функцій Гріна... в розрахунковому аспекті ... в жодному разі не є найпростішим. Іноді він дозволяє розв'язати задачу лише ціною достатньо «грубих» апроксимацій» [69]. Тому при нехтуванні всіма видами розсіювання метод функцій Гріна фактично є захаращеною версією повністю когерентного варіанту формалізму огибаючої хвильових функції.

1.2. Загальний підхід до побудови моделей в рамках формалізму хвильових функцій

Опис загальних квантово-механічних формалізмів, що використовуються для моделювання РТД, свідчить про перспективність розвитку моделей в рамках формалізму огибаючої хвильових функцій. Адекватність моделей на його основі може досягати рівня кінетичних моделей, а ефективність використання чисельних ресурсів при цьому значно вища.

В даному підрозділі розглянуто загальні підходи до побудови різних за адекватністю та інтенсивністю використання чисельних ресурсів моделей на основі методу хвильових функцій. Спільним для них є концепція диференційованого опису різних областей діоду та методика розрахунку струму.

1.2.1. Поділ на структурні складові

Типова топологічна структура резонансно-тунельного діоду, гетероструктури якого виготовлено з AlGaAs/GaAs показана на рис. 1.1,а. Гетероструктура, що зумовлює функціональні властивості резонансно-тунельного діоду, показана на рис. 1.1, б.

Вважається, що квантово-розмірні ефекти слід враховувати, якщо характерні розміри системи менші за деякі характерні розміри [70], якими є:

1. Довжина хвилі де Бройля електрона $\lambda_{\text{Ф}}$, яка зазвичай визначається для хвильового числа Фермі $k_{\text{Ф}}$: $\lambda_{\text{Ф}} = 2\pi / k_{\text{Ф}}$, а її характерне значення для напівпровідників складає $\lambda_{\text{Ф}} \approx 35$ нм.

2. Середня довжина вільного пробігу електрона L_p , що визначається через час релаксації імпульсу електрона τ_p , що рухається зі швидкістю Фермі $L_p = \tau_p v_{\text{Ф}}$, де $v_{\text{Ф}}$ – швидкість Фермі. Оціночне значення L_p для напівпровідників – 0.35 мкм.

3. Довжина релаксації фази $L_{\text{ф}}$ визначається як середній шлях, який має пройти електрон для того, щоб позбутися так званої «фазової пам'яті». Величина $L_{\text{ф}}$ зазвичай у декілька разів менша за довжину вільного пробігу електрона.

Як видно з рис. 1.1, а у структурі можна виділити дві області, що прилягають до контактних площадок та оточують нелеговану гетероструктуру. Ці області мають усталені в літературі імена – *резервуари*. На рис. 1.1, а, б їм відповідають нижня та верхня високолеговані області. Резервуари називають також *класичними областями*. Частина РТД, до якої входять нелеговані двобар'єрна квантова система та спейсери (інколи разом з незначною частиною прилеглих резервуарів) називається *квантовою областю*, або *активною областю*. В іноземній літературі застосовується слово «*device*» («пристрій»).

Порівняємо розміри щойно введених структурних частин РТД з величинами $\lambda_{\text{Ф}}$, $L_{\text{ф}}$, L_p :

1. Розміри резервуарів у всіх трьох напрямках перевищують $\lambda_{\text{Ф}}$, $L_{\text{ф}}$, L_p , через що електрони в них можна розглядати в рамках *квазікласичного наближення*.

2. У квантовій області в площині гетерограниць розміри РТД мають значення від одиниць до кількох десятків мікрометрів, що значно більше за період решітки (який для GaAs складає $a_{\text{GaAs}} \approx 0.56$ нм) та довжину хвилі де Бройля електрона $\lambda_{\text{Ф}}$, а також довжини $L_{\text{ф}}$ і $L_{\text{р}}$.

3. В напрямку росту гетероструктури (що співпадає з віссю $0z$) характерні розміри навпаки менші або мають один порядок в порівняно з товщиною відповідних шарів. Таким чином, активна частина РТД в напрямку росту може класифікуватися у першому наближенні як «мікроскопічна система», або як «мезоскопічна система» [70] – якщо на довжині в напрямку $0z$ процеси хаотизації фази стають суттєвими.

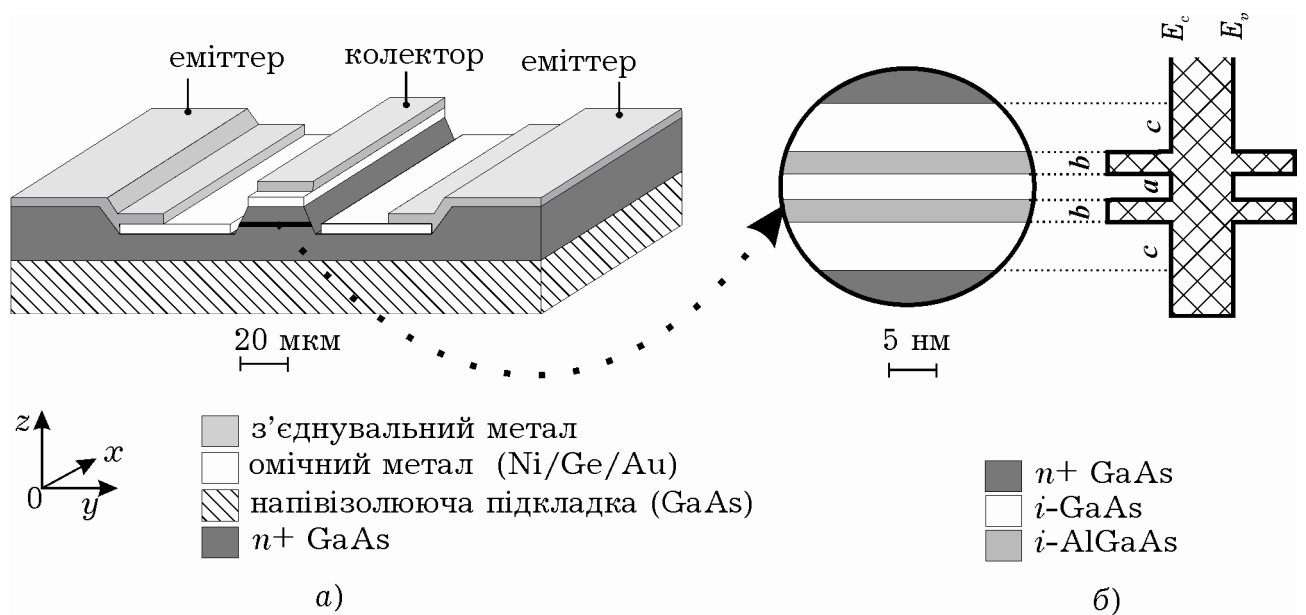


Рис. 1.1. Топологія резонансно-тунельного діоду (а) та його активної частини і її зонна діаграма (б).

Відомо, що електронний колектив у кристалі може бути описаний багаточастинковим рівнянням Шредінгера, що в адіабатичному наближенні зводиться до системи незалежних рівнянь для одноелектронних хвильових функцій [71]:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\mathbf{r}) + U_{\text{пер}}(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \quad (1.9)$$

де ψ – одноелектронна хвильова функція, m – маса спокою електрона, $U_{\text{пер}}(\mathbf{r})$ – потенціальна енергія електрона в полі всіх інших електронів та іонів, що не змінюється при зміщенні на вектор трансляції \mathbf{a} : $U_{\text{пер}}(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = U_{\text{пер}}(\mathbf{r})$, $U(\mathbf{r})$ – неперіодична частина потенціальної енергії електрона, яка обумовлена зовнішніми та внутрішніми неперіодичними полями, наприклад розривами екстремумів зон у гетероструктурах, прикладеною напругою та об'ємним зарядом.

Для опису руху електронів у квантовій області використовується відомий метод огинаючої хвильової функції, який у традиційній твердотільній електроніці зокрема застосовується в теорії локальних рівнів [71]. Цей метод полягає в тому, що замість рівняння (1.9), у яке входить невідома потенціальна енергія $U_{\text{пер}}(\mathbf{r})$, поблизу країв зон можна розглядати рівняння:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta + U(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (1.10)$$

де ψ – *огинаюча* одноелектронної хвильової функції, m^* – ефективна маса поблизу краю відповідної зони (для спрощення вважаємо масу ізотропною, а закон дисперсії – параболічним). Рівняння (1.2) називають рівнянням Шредінгера з ефективною масою [72, 73].

Неперіодична частина потенціальної енергії електрона $U(\mathbf{r})$ змінюється лише в напрямку осі $0z$, оскільки в ньому прикладається напруга та створені гетеропереходи, на яких має місце розрив зон.

Шукаючи хвильову функцію у вигляді $\Psi(\mathbf{r}) \equiv \Psi_x(x)\Psi_y(y)\Psi_z(z)$, з (1.10)

отримаємо $\Psi_x\Psi_y \sim e^{i(k_x x + k_y y)}$ та

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + U(z) \right] \Psi_z(z) = E_z \Psi_z(z), \quad (1.11)$$

де $E_z = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*}$, k_i – i -складова хвильового вектора ($i = \{x, y, z\}$).

Зазвичай вважають, що на границі двох сполук А та Б, у точці $z = a$, відбувається стрибкоподібна зміна потенціальної енергії та ефективної маси електрона [72], наприклад, як показано на рис. 2.1, б. Ці нефізичні припущення вимагають примусового накладання граничних умов [72]:

$$\Psi_A(a) = \Psi_B(a), \quad (1.12)$$

$$\frac{1}{m_A^*} \frac{d\Psi_A(a)}{dz} = \frac{1}{m_B^*} \frac{d\Psi_B(a)}{dz}, \quad (1.13)$$

де $m_{A(B)}^*$, $\Psi_{A(B)}$ – ефективна маса та хвильова функція у сполучі А(Б).

Обидві ці умови автоматично виконуються якщо модифікувати (1.11) таким чином:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m^*(z)} \frac{d}{dz} + U(z) \right] \Psi_z(z) = E_z \Psi_z(z). \quad (1.14)$$

Далі замість Ψ_z будемо писати просто Ψ .

Таким чином, було показано, що для опису електронів у резервуарах та в напрямках $0x$ та $0y$ можна користуватися *квазікласичним наближенням*. Для опису руху електронів у

квантовій області в напрямку осі Oz слід застосовувати *метод хвильових функцій*. Ці висновки справедливі для простої зони з ізотропною ефективною масою поблизу екстремуму.

Моделі формалізму огиначаючої хвильової функції звичайно використовують додаткові наближення [40]:

1. Електронний газ у резервуарах знаходиться в стані локальної термодинамічної рівноваги, а відтак підпорядковується статистиці Фермі-Дірака з параметрами E_{Φ_1} та E_{Φ_2} , відповідно, причому: $E_{\Phi_1} - E_{\Phi_2} = eV$, де V – прикладена напруга. Актуальність припущення обумовлена високим рівнем легування ($N_D = 10^{24} \text{ м}^{-3}$ і більше) резервуарів у порівнянні з нелегованою квантовою областю.

2. Резервуари поглинають та термалізують усі електрони, що надходять до них з квантової області. Електрони при досягненні резервуару миттєво термалізуються (не порушують термодинамічну рівновагу).

3. Електрони потрапляють у квантову частину виключно з правого та лівого резервуару та не взаємодіють там між собою. Таке припущення обумовлено тим, що електронний газ в активній області є невідродженим, за виключенням, можливо, резонансних напруг.

Для «когерентних» моделей вважається, що електрони не взаємодіють не тільки між собою, але і з дефектами кристалічної решітки, тобто не розсіюються і, відповідно, не втрачають «фазову пам'ять».

1.2.2. Методика розрахунку струму

Густину струму, який протікає через квантову область \mathbf{J} , можна розрахувати як суперпозицію струмів електронів, що потрапляють туди з лівого та правого резервуару, \mathbf{J}_{12} та \mathbf{J}_{21} , відповідно: $\mathbf{J} = \mathbf{J}_{12} + \mathbf{J}_{21}$.

В силу розмірів та геометрії РТД струм розподіляється рівномірно по поперечному перерізу та має єдину ненульову складову з густиною $J \equiv J_z$.

З огляду на припущення про незмішуваність потоків має бути: $dJ_{12(21)}/dz = 0$, відтак густину струму через РТД можна розраховувати зокрема так:

$$J = J_{12}(z_R) + J_{21}(z_L), \quad (1.15)$$

де z_R та z_L – права та ліва границя квантової області (рис. 1.2). У точках z_L та z_R електрон можна вважати квазікласичною частинкою, тому йому властиве детерміноване значення швидкості v .

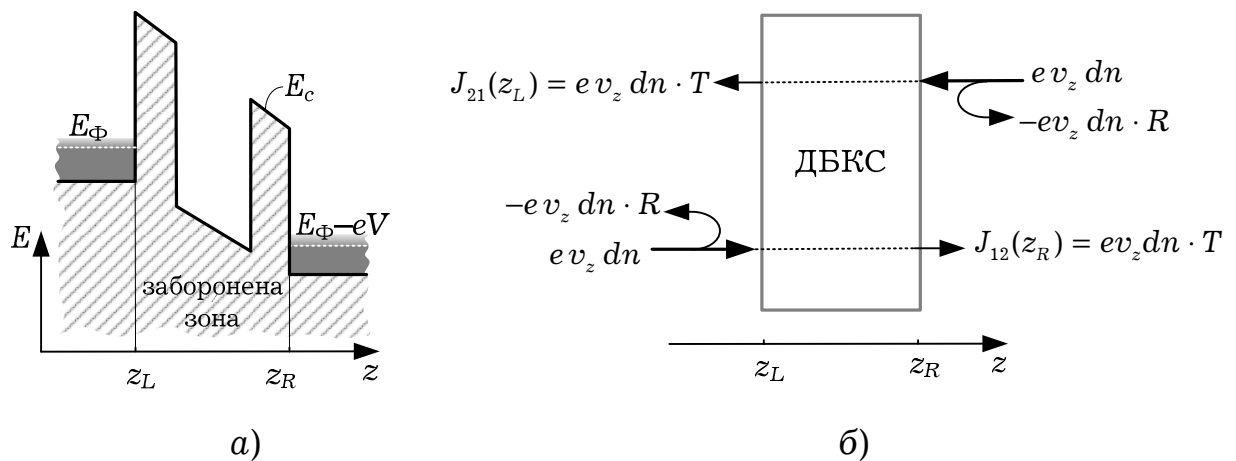


Рис. 1.2. Спрощена зонна діаграма двобар'єрної квантової системи (а) та складові струму через неї (б).

Знайдемо струм, який створюють електрони з лівого резервуару в точці z_R . Електрон зі швидкістю v створює елементарний струм $j = ev_z$. Густина струму, що його створюють електрони, які мають швидкості в межах від $v_z = \hbar k_z / m^*$ до $v_z + dv_z$, дорівнює:

$$dJ_{12} = e v_z dn(z_R) = e \frac{\hbar k_z}{m^*} dn(z_R), \quad (1.16)$$

де $dn(z_R)$ – концентрація електронів, що мають швидкості у вищезазначених межах у точці z_R .

За відсутності процесів декогеренції

$$dn(z_R) = T(E_z) dn(z_L). \quad (1.17)$$

Тут $T(E_z)$ – поки що невідомий коефіцієнт проходження квантової області;

$$dn(z_L) = g_L(\mathbf{k}) f_L(\mathbf{k}) dV_{\mathbf{k}}, \quad (1.18)$$

де $g_L(\mathbf{k})$ та $f_L(\mathbf{k})$ – густина станів та функція розподілу електронів у лівому резервуарі, відповідно; $g_L(\mathbf{k}) = 2/(2\pi)^3$; $f_L(\mathbf{k}) = 1/(1 + e^\varepsilon)$, де, в свою чергу

$$\varepsilon(E_\Phi, \mathbf{k}) \equiv \left(\underbrace{\frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*}}_{\equiv E_x} + \underbrace{\frac{\hbar^2 k_y^2}{2m^*}}_{\equiv E_y} + \underbrace{\frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*}}_{\equiv E_z} - eV - E_\Phi \right) / k_B T. \quad (1.19)$$

З урахуванням (1.18) рівняння (1.16) у розкритому вигляді переписеться таким чином:

$$dJ_{12} = \frac{e\hbar}{m^*} \frac{2}{(2\pi)^3} \frac{k_z T(E_z(k_z))}{1 + \exp\{\varepsilon(\mathbf{k}, E_{\Phi 1})\}} dV_{\mathbf{k}}. \quad (1.20)$$

Оскільки $T = T(E_z(k_z))$, інтегрування у формулі (1.20) можна провести лише по поперечних значеннях хвильового вектору (k_x та k_y). Вид коефіцієнту проходження $T(E_z)$ навіть для найпростіших

форм квантової області зазвичай не дозволяє провести інтегрування по z -складовій аналітично.

Інтегрування по k_z в (1.20) проводиться по інтервалу $k_z \in (0; \infty)$, оскільки інших електронів з лівого резервуару в точці z_5 існувати не може. Решта проєкцій швидкості (хвильового вектору) можуть приймати довільні значення. Інтегруючи (1.20) по k_x та k_y та переходячи до інтегрування по енергії, отримаємо:

$$J_{12} = \frac{2m^* e k_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3} \int_{eV}^{\infty} T(E_z) \cdot \ln \left(1 + \exp \left(-\frac{E_z - E_{\Phi} - eV}{k_B T} \right) \right) dE_z, \quad (1.21)$$

де нижня границя інтегрування враховує відсутність у лівому резервуарі електронів з енергією, меншою за eV (див. рис. 1.2, а).

Проводячи аналогічні дії для знаходження J_{21} та враховуючи, що $T(E_z) = 0$ для $E_z < eV$, знайдемо:

$$J_{21} = \frac{2m^* e k_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3} \int_0^{\infty} T(E_z) \ln \left(1 + \exp \left(-\frac{E_z - E_{\Phi}}{k_B T} \right) \right) dE_z. \quad (1.22)$$

Підсумовуючи (1.21) та (1.22), отримаємо формулу Цу-Есакі (1.2).

1.3. Рівні моделювання квантово-розмірних ефектів та механізмів транспорту в РТД

З формули (1.2) видно, що задача зі знаходження струму через діод зводиться до визначення коефіцієнту проходження $T(E_z)$, який, у свою чергу залежить від потенціального рельєфу активної області $U(z)$, який у наближенні Хартрі може бути знайдений з системи:

$$\begin{cases} \frac{d}{dz} \varepsilon(z) \frac{dV_s}{dz} = \frac{e}{\varepsilon_0} [n(z) - N_d^+(z)], \\ n(z) = F(\psi(V_s, z)), \end{cases} \quad (1.23)$$

де $\varepsilon(z)$ – відносна діелектрична проникність, V_s – самоузгоджений потенціал, $U = E_c - eV_s$. F – функціонал концентрації, точний вид якого буде вказано в розд. 2.2.3.

1.3.1. Спрощені моделі резонансно-тунельних діодів

Для реальних задач систему рівнянь (1.23) можна розв'язати лише чисельно. Відповідно, сама функція $T(E_z)$ не представляється в аналітичному вигляді та *не придатна для математичного аналізу*. З тим, щоб можна було встановити *аналітичний зв'язок* $T(E_z)$ з геометричними параметрами та параметрами зонної структури РТД, температурою, параметрами розсіювання та іншими конструктивними параметрами, доцільно використовувати спрощення, які б дозволяли отримати аналітичний розв'язок рівняння Шредінгера.

Історично першою спробою встановлення такого зв'язку було використання методу матриць передачі, в рамках якого було розроблено метод Цу-Есакі [30, 31], метод функцій Ейрі [74, 25, 75] та інші методи. Загальна ідея цих методів полягає у визначенні коефіцієнту проходження $T(E_z)$ з матриці, що пов'язує падаючі та відбиті хвилі з обох боків квантової системи.

За межами квантової системи огинаюча хвильової функції електрона – це суперпозиція падаючих та відбитих плоских хвиль. Тому розв'язок рівняння (1.14) для лівого та правого резервуарів, ψ_L та ψ_R , запишеться так:

$$\Psi_L = A_L e^{ik_L z} + B_L e^{-ik_L z} \quad (1.24)$$

$$\Psi_R = A_R e^{ik_R z} + B_R e^{-ik_R z} \quad (1.25)$$

де A_L , B_L , A_R , B_R – сталі інтегрування рівняння (1.14), $k_{L(R)} = \sqrt{2m_{L(R)}^*(E_z - U_{L(R)})}/\hbar$, де $m_{L(R)}^*$ – ефективна маса електрона, $U_{L(R)}$ – потенціальна енергія електрона в лівому (правому) резервуарі. Введемо позначення для членів рівнянь (1.24) та (1.25): $\Psi_L^{\rightarrow} \equiv A_L e^{ik_L z}$, $\Psi_L^{\leftarrow} \equiv B_L e^{-ik_L z}$, $\Psi_R^{\rightarrow} \equiv A_R e^{ik_R z}$, $\Psi_R^{\leftarrow} \equiv B_R e^{-ik_R z}$, які традиційно звуться, відповідно, падаючими та відбитими хвилями у першій та п'ятій області.

Матриця передачі усієї квантової системи \mathbf{M} вводиться так:

$$\begin{bmatrix} A_R \\ B_R \end{bmatrix} = \mathbf{M} \begin{bmatrix} A_L \\ B_L \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_L \\ B_L \end{bmatrix} \quad (1.26)$$

За визначенням коефіцієнт проходження [76]:

$$T = |j_R^{\rightarrow}| / |j_L^{\rightarrow}|, \quad (1.27)$$

де j_R^{\rightarrow} – потік густини ймовірності у електронній хвилі, що пройшла у п'яту область; j_L^{\rightarrow} – потік густини ймовірності у падаючій хвилі в першій області. Згідно з визначенням густини потоку ймовірності:

$$j_{R(L)}^{\rightarrow} = \frac{i\hbar}{2m_{R(L)}^*} \left(\{\Psi_{R(L)}^{\rightarrow}\}^* \frac{d\Psi_{R(L)}^{\rightarrow}}{dz} - \Psi_{R(L)}^{\rightarrow} \frac{d\{\Psi_{R(L)}^{\rightarrow}\}^*}{dz} \right).$$

Нехай електрон налітає з лівого резервуару. Хвиля ψ_R^{\leftarrow} за таких умов відсутня. Без втрати загальності можна нормувати хвильову функцію у лівому резервуарі на одиницю: $A_L = 1$. Введемо позначення $t \equiv A_R$, $r \equiv B_L$. Обчислення дають:

$$T = |t|^2 \frac{|k_R| m_L^*}{|k_L| m_R^*}. \quad (1.28)$$

Невідома величина t визначається з рівняння (1.26):

$$t = m_{11} + m_{12} m_{21} / m_{22} \quad (1.29)$$

В [54] показано, що для електронів, які налітають справа чи зліва коефіцієнти проходження (та відбивання) однакові: $T_{LR} = T_{RL}$. З цих причин у формулі Цу-Есакі (1.2) фігурує один коефіцієнт проходження. Таким чином, знаючи матрицю передачі квантової системи (1.26), можна визначити коефіцієнт проходження згідно (1.29).

1.3.1.1. Метод Цу-Есакі

Якісну картину процесів тунелювання через ДБКС можна отримати, апроксимуючи потенціальний рельєф у кожному шарі кусково-сталими функціями (рис. 1.3, а). Ця апроксимація та метод обчислення, що виходить з цього припущення, називається методом Цу-Есакі [77]. Точність методу можна підвищити, а сферу застосування розширити, якщо апроксимувати потенціальний рельєф, як показано на рис. 1.3, б.

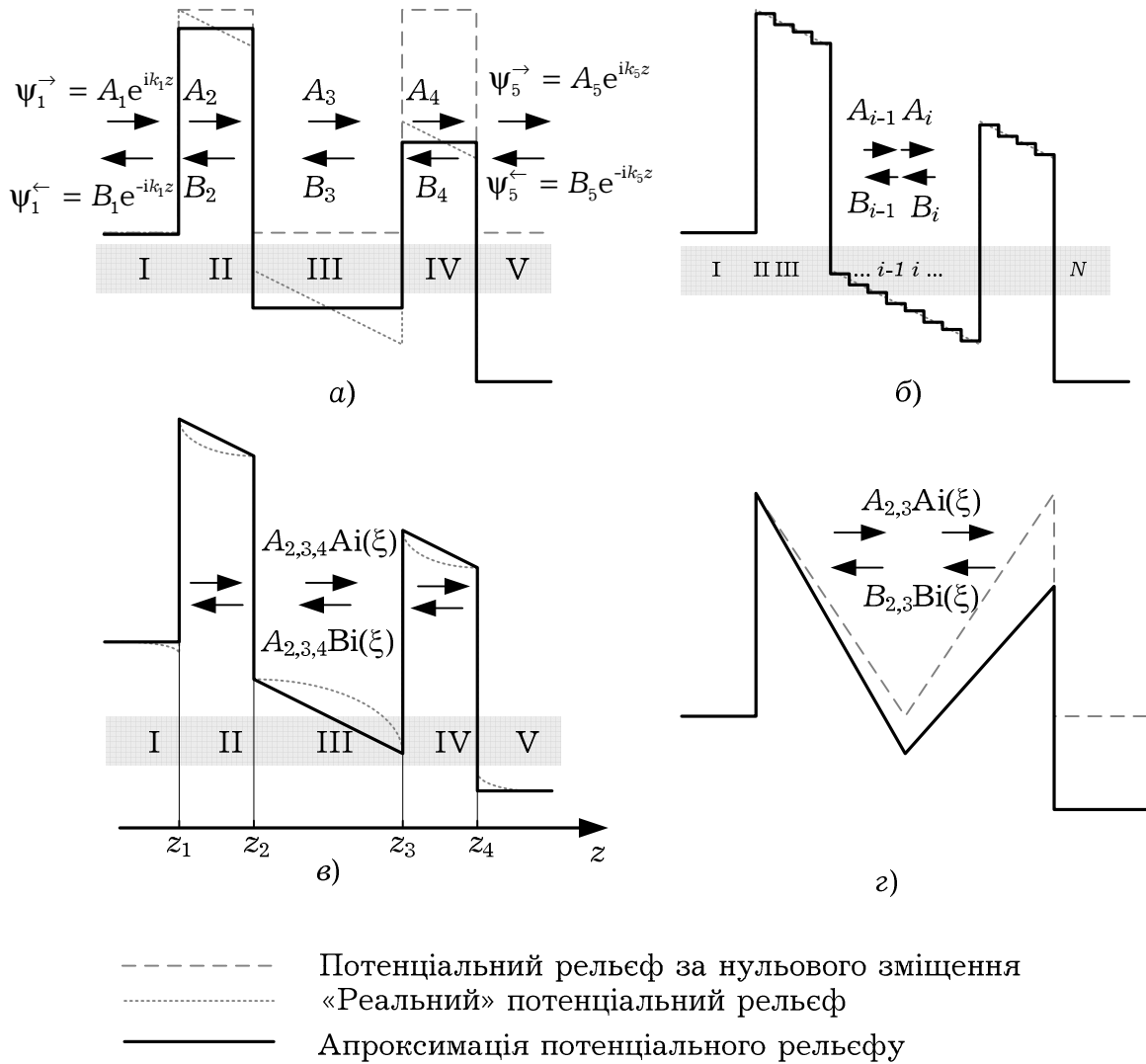


Рис. 1.3. Різні форми потенціальних бар'єрів та їх апроксимації при використанні аналітичних методів розрахунку коефіцієнту передачі.

У i -й та $(i + 1)$ -й ділянках зі сталим рельєфом розв'язком рівняння Шредінгера є суперпозиція плоских хвиль:

$$\psi_i = A_i e^{ik_i z} + B_i e^{-ik_i z}, \quad (1.30)$$

$$\psi_{i+1} = A_{i+1} e^{ik_{i+1} z} + B_{i+1} e^{-ik_{i+1} z}, \quad (1.31)$$

де $k_i = \sqrt{2m_i^*(U_i - E_z)} / \hbar$, де m_i^* – ефективна маса електрона в i -му шарі, U_i – потенціальна енергія електрона в зоні провідності i -го шару.

На границі між i -ю та $i+1$ -ю областями в точці $z_{i,i+1}$ хвильова функція та потік ймовірності в ній мають бути неперервними, тобто необхідно забезпечити виконання співвідношень (1.12) та (1.13), які у даних позначеннях перепишуться так:

$$\Psi_i(z_{i,i+1}) = \Psi_{i+1}(z_{i,i+1}); \quad (1.32)$$

$$1/m_i^* \cdot \Psi_i'(z_{i,i+1}) = 1/m_{i+1}^* \cdot \Psi_{i+1}'(z_{i,i+1}), \quad (1.33)$$

де штрихом позначено диференціювання по z .

З урахуванням (1.32) та (1.33) рівняння (1.30) та (1.31) можна записати у матричному вигляді:

$$\begin{bmatrix} A_{i+1} \\ B_{i+1} \end{bmatrix} = \mathbf{M}_{i+1,i} \begin{bmatrix} A_i \\ B_i \end{bmatrix},$$

$$\text{де } \mathbf{M}_{i,i+1} = \begin{bmatrix} e^{ik_{i+1}z} & e^{-ik_{i+1}z} \\ \frac{k_{i+1}}{m_{i+1}^*} e^{ik_{i+1}z} & -\frac{k_{i+1}}{m_{i+1}^*} e^{-ik_{i+1}z} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} e^{ik_i z} & e^{-ik_i z} \\ \frac{k_i}{m_i^*} e^{ik_i z} & -\frac{k_i}{m_i^*} e^{-ik_i z} \end{bmatrix} - \text{ матриця}$$

передачі електронних хвиль (або просто \mathbf{M} -матриця).

Аналогічно можна отримати рівняння, що пов'язує відповідні амплітуди в $(i-1)$ -му та i -му шарі, $\mathbf{M}_{i,i-1}$ і виразити $[A_{i+1}, B_{i+1}]^T$ через $[A_{i-1}, B_{i-1}]^T$:

$$\begin{bmatrix} A_{i+1} \\ B_{i+1} \end{bmatrix} = \mathbf{M}_{i+1,i} \times \mathbf{M}_{i,i-1} \begin{bmatrix} A_{i-1} \\ B_{i-1} \end{bmatrix},$$

що виражає «мультиплікативність» \mathbf{M} -матриць. Вказана властивість \mathbf{M} -матриць дозволяє виразити амплітуди падаючих та

відбитих хвиль у лівому резервуарі через аналогічні величини правого резервуару:

$$\begin{bmatrix} A_N \\ B_N \end{bmatrix} = \mathbf{M}_{N,N-1} \times \mathbf{M}_{N-1,N-2} \times \dots \times \mathbf{M}_{2,1} \begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \end{bmatrix} = \prod_{i=2}^N \mathbf{M}_{i,i-1} \begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \end{bmatrix}.$$

Матриця $\mathbf{M} = \prod_{i=2}^N \mathbf{M}_{i,i-1}$ є шуканою матрицею передачі усєї квантової системи, елементи якої дозволяють визначити $T(E_z)$ згідно (1.29).

Сам по собі метод Цу-Есакі сьогодні неактуальний, оскільки матриця передачі лише формально є аналітичним виразом, а на практиці є занадто складною для аналізу. Однак цей метод можна використовувати для перевірки чисельних та інших моделей РТД на коректність за нульової напруги, що й буде зроблено в цій роботі.

1.3.1.2. Метод функцій Ейрі

Метод функцій Ейрі [74, 25, 75] в рамках прийнятих наближень дозволяє точно знайти коефіцієнт передачі для квантової системи, якщо не враховувати взаємодію між електронами. За таких умов напруга буде лінійно спадати на активній частині РТД (рис. 1.3, в, г).

Розглянемо його застосування для знаходження матриці передачі квантової системи, що зображена на рис. 1.3, в: таку форму мала б зона провідності РТД, якби перерозподілу заряду в ньому не було.

У першій та п'ятій областях системи (це резервуари) розв'язком рівняння Шредінгера з ефективною масою є суперпозиція плоских хвиль – вирази (1.30) та (1.31).

Вважаючи падіння напруги вздовж всієї квантової області рівномірним, рівняння Шредінгера для i -ї області ($i = 2, 3, 4$) можна записати так:

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} + \frac{2m_i^*}{\hbar^2} (E_z - \tilde{U}_i(z))\psi = 0. \quad (1.34)$$

у якому $\tilde{U}_i(z) = (eV - U_i)(z - z_i) / L$, де U_i – потенціальна енергія електрона в полі кристалічної решітки в i -му шарі ($U_3 = 0$, $U_{2(4)} = 1$ еВ для AlAs/GaAs РТД), L – довжина квантової області, V – падіння напруги на квантовій області.

Введемо позначення: $F = -eV/L$ – сила, що діє на електрон в квантовій області, та перепишемо (1.34) в еквівалентній формі:

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} + \frac{2m_i^*F}{\hbar^2} \left(z + \frac{E_z - Fz_1 - U_i(z)}{F} \right) \psi = 0 \quad (1.35)$$

За допомогою заміни змінної:

$$\xi_i(z) \equiv - \left(z + \frac{E_z + Fz_1 - U_i}{F} \right) \left(\frac{2m_i^*F}{\hbar^2} \right)^{1/3} \quad (1.36)$$

рядом перетворень [78] рівняння (1.35) може бути зведено до рівняння Ейрі:

$$\frac{d^2\psi}{d\xi_i^2} - \xi_i\psi = 0, \quad (1.37)$$

лінійно незалежними розв'язками якого є функція Ейрі $Ai(\xi_i)$ та компліментарна функція Ейрі $Bi(\xi_i)$ [78]:

$$\text{Ai}(\xi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \cos\left(\frac{u^3}{3} + u\xi\right) du,$$

$$\text{Bi}(\xi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \left[\exp\left(-\frac{u^3}{3} + zu\right) + \sin\left(\frac{u^3}{3} + u\xi\right) \right] du.$$

Як і у випадку з плоскими хвилями, розв'язок рівняння (1.37) в i -й області ($i = 2, 3, 4$) запишемо у вигляді лінійної суперпозиції функцій Ейрі:

$$\Psi_i(z(\xi_i)) = A_i \text{Ai}(z(\xi_i)) + B_i \text{Bi}(z(\xi_i)).$$

Таким чином, для кожної з п'яти областей нам відомо вигляд розв'язку рівняння Шредінгера:

$$\Psi_i(z) = A_i g_i(z) + B_i h_i(z),$$

де g_i та h_i – плоскі хвилі, якщо $i \in \{1, 5\}$ або функції Ейрі, якщо $i \in \{2, 3, 4\}$.

Проводячи «зшивання» розв'язків рівняння Шредінгера по обидва боки від гетерограниць z_i ($i = 1, 2, 3, 4$) за співвідношеннями (1.32) та (1.33), можна встановити зв'язок між амплітудами відповідних хвиль (функцій Ейрі або плоских хвиль):

$$\begin{bmatrix} A_{i+1} \\ B_{i+1} \end{bmatrix} = \mathbf{M}_{i+1,i} \begin{bmatrix} A_i \\ B_i \end{bmatrix},$$

$$\text{де } \mathbf{M}_{i,i+1} = \begin{bmatrix} g_{i+1} & h_{i+1} \\ \frac{1}{m_{i+1}^*} g_{i+1}' & \frac{1}{m_{i+1}^*} h_{i+1}' \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} g_i & h_i \\ \frac{1}{m_i} g_i' & \frac{1}{m_i} h_i' \end{bmatrix} - \text{відповідна матриця}$$

передачі з i в $i+1$ шар. Тут штрихом позначено диференціювання по z .

Кроки, які необхідно надалі провести, щоб отримати коефіцієнт передачі, такі ж, як для методу Цу-Есакі.

Метод функцій Ейрі використовується в даній роботі для тестування чисельних моделей при відмінних від нуля напругах та для визначення адекватності розробленої аналітичної моделі.

1.3.1.3. Метод лоренцевої модельної функції

Використання матриць передачі на практиці потребує чисельної реалізації, бо множення п'яти матриць передачі призводить до складного з точки зору можливості математичного аналізу виразу для коефіцієнту передачі, хоча такі спроби здійснювалися [79].

Спеціально для РТД можна користуватися функціями, суперпозиція яких задовільно апроксимує резонансний характер залежності $T(E_z)$. Називаються вони функціями *лоренцевого типу*, і описуються формулою:

$$T_i(E_z) = \frac{\Gamma_i^2}{\Gamma_i^2 + 4(E_z - E_i)^2}, \quad (1.38)$$

де Γ_i – це величина розширення резонансного рівня, яке обумовлене принципом невизначеності Гейзенберга для енергії; E_i – положення i -го метастабільного резонансного рівня в квантовій ямі. Легко бачити, що $T_i(E_i) = 1$, а при $|E_z - E_i| \gg \Gamma_i$ $T_i(E_i)$ прямує до нуля, тобто ця функція описує деяку резонансну залежність.

У квантовій теорії збурень особливе місце займає задача, коли збурення мале, однак його вид такий, що спектр квантової системи з дискретного стає неперервним [54], [76]. Така задача виникає, коли яма, оточена нескінченно широкими потенціальними бар'єрами,

розглядається як незбурена система (рис. 2.4, а), а яма, оточена достатньо широкими бар'єрами скінченної ширини – як збурена система (рис. 2.4, б).

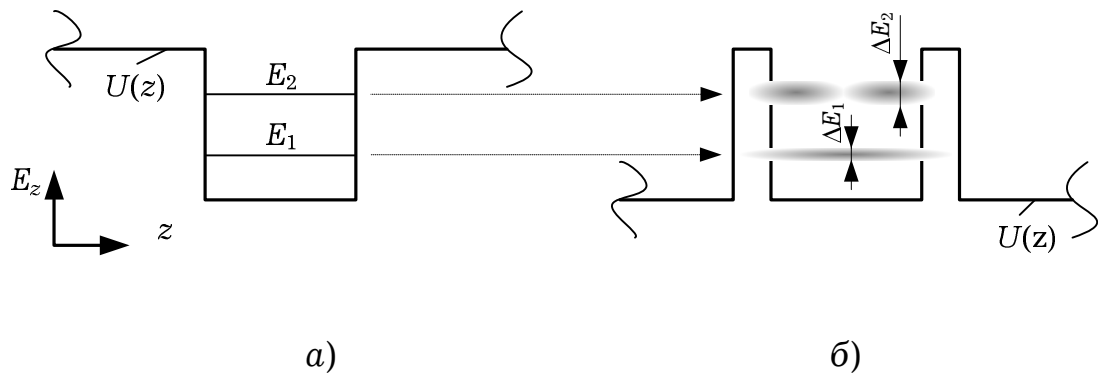


Рис. 1.4. До теорії збурень для двобар'єрної квантової системи: а) незбурена система (ширина бар'єрів нескінченна); б) збурена система (ширина бар'єрів скінченна).

У системі, що зображена на рис. 1.4, а при енергії, що менша за висоту бар'єра, спектр енергії електрона дискретний, і електрон *локалізований* у квантовій ямі.

Ситуація принципово змінюється, якщо бар'єри мають скінченну ширину. За рахунок тунелювання час перебування електрона на енергетичному рівні τ обмежений, що згідно з принципом невизначеності для енергії призводить до невизначеності «розмивання» рівня: $\Delta E \sim \hbar / \tau$.

Якщо величина ΔE значно менша за відстань між дискретними рівнями, то ймовірність знайти електрон у квантовій ямі з енергією $E_i \pm \Delta E$ значно більша за ймовірність знайти його там за інших енергій.

Параметр E_i в формулі (1.38) – це положення *дискретних* рівнів, і вони співпадають з центрами відповідних *метастабільних* рівнів. Таким чином, для знаходження E_i необхідно розв'язати задачу на власні енергії для *незбуреної* системи (рис. 1.4, а) в області дискретного спектру. З формули (1.38) слідує, що при $E_z = E_i$

центри відповідних метастабільних рівнів співпадають з максимумами коефіцієнту проходження.

Величина Γ_i в формулі (1.38) – це так звана ширина i -го метастабільного рівня. Її називають «природнім розширенням» відповідного рівня; воно визначається як:

$$\Gamma_i = \frac{\hbar}{\tau_i}, \quad (1.39)$$

де τ_i – це середній час життя електрона в даному метастабільному стані.

Для системи, коефіцієнт проходження якої описується лоренцевою функцією, частка електронів, що пройшла через систему в діапазоні Γ_i з центом в $E_z = E_i$ буде складати $1 / \sqrt{2} \approx 0.707$ від загальної кількості електронів, що пройшли через ДБКС при будь-яких енергіях (за умови якщо розподіл електронів за енергіями рівномірний). Умовно кажучи «вікно прозорості» квантової системи має порядок Γ_i .

При кожному відбитті від i -го бар'єру частка $T_i = 1 - R_i$ електронної хвилі «витікає» з ями. Частота зіткнень електрона з бар'єрами v_i приблизно дорівнює: $v_i/2a$, де v_i – це швидкість руху електрона на i -му метастабільному рівні; $v_i = \sqrt{2E_i / m^*}$; a – ширина квантової ями. Ймовірність того, що при зіткненні з бар'єром електрон покине квантову яму складає $T_i^{(1)}$ для лівого та $T_i^{(2)}$ для правого бар'єру. Вказані оцінки справедливі за умови $|T_i^{(1)}| \ll 1$, $|T_i^{(2)}| \ll 1$; тоді величину τ_i можна наближено розрахувати за формулою:

$$\tau_i = \frac{2a}{v_i} \left(\frac{1}{T_i^{(1)} + T_i^{(2)}} \right). \quad (1.40)$$

Якщо в квантовій ямі резонансно-тунельного діоду знаходиться N метастабільних рівнів енергії, то функція $T(E_z)$ може бути апроксимована сумою функцій лоренцевого типу:

$$T(E_z) = \sum_{i=1}^N \frac{\Gamma_i^2}{\Gamma_i^2 + 4(E_z - E_i)^2} \quad (1.41)$$

Якщо в квантовій ямі існують інші механізми, що дозволяють електрону покинути даний енергетичний рівень, наприклад процеси розсіювання, то в рамках лоренцевої апроксимації їх теж можна врахувати. Нехай сумарний час для всіх механізмів релаксації дорівнює τ_p і визначається звичайним чином:

$$1 / \tau_p = \sum_n \lambda_n,$$

де λ_n – частоти n -го виду розсіювання. З часом τ_p так само, як і з часом τ_i можна пов'язати додаткове розширення метастабільного рівня:

$$\Gamma_p = \frac{\hbar}{\tau_p}, \quad (1.42)$$

яке зветься «релаксаційним».

По аналогії з резонатором Фабрі-Перо [16] або слідуючи квантовій теорії можна показати, що при врахуванні розсіювання формулу (1.38) можна уточнити і отримати:

$$T(E_z) = \sum_{i=1}^N \frac{\Gamma_i^2}{\Gamma_{\Sigma,i}^2 + 4(E_z - E_i)^2}, \quad (1.43)$$

де $\Gamma_{\Sigma,i} = \Gamma_i + \Gamma_p$ – сумарне розширення i -го енергетичного рівня.

Вважається, що прикладена напруга V зміщує резонансні рівні за законом: $E_i(V) = E_i(0) - \frac{eV}{2}$.

Метод лоренцевої модельної функції, на відміну від методів матриць передачі, дозволяє знайти аналітичний зв'язок між конструктивно-технологічними параметрами РТД та ВАХ, а величини, що виникають при розрахунках (енергії рівнів в квантовій ямі, їх напівширина та загальна кількість) служать зручними характеристиками квантово-розмірних ефектів, що мають місце в активній частині РТД.

В рамках описаного методу було створено кілька моделей [16, 17], однак в них прийнято припущення про сталу ефективну масу вздовж всієї структури, та використано досить грубу формулу для енергії Фермі. Таким чином, моделі, які використовують лоренцеву апроксимацію, дозволяють проводити реальний аналіз причинно-наслідкових зв'язків, однак *потребують подальшого вдосконалення та визначення меж застосовності і адекватності*.

1.3.2. Врахування перерозподілу просторового заряду

Просторовий заряд може бути врахований лише в рамках чисельних методів. Для цього використовується система (1.23). При реалізації чисельних методів слід дотримуватися особливої ретельності у зв'язку з трьома аспектами, якими в сучасних роботах часто нехтують:

1. Фізична коректність чисельних методів. В роботах [7, 8] при розрахунку самоузгодженого потенціалу спейсери не було віднесено до квантової області, незважаючи на те, що на накопичення заряду в емітерній квантовій ямі (ЕКЯ) суттєво впливають квантово-розмірні ефекти. Натомість введено поверхневий заряд як «припасувальний» параметр. Крім того в роботах [7, 8, 11] положення границі, що відділяє квантову область від класичної, обиралася як «припасувальний» параметр.

2. Скінченно-різницеві схеми (СРС), що відповідають системі інтегро-диференціальних рівнянь моделі, мають враховувати розривність коефіцієнтів відповідних рівнянь, таких як: ефективна маса, дно зони провідності, діелектрична проникність на гетерограницях. Цього, зокрема, не було враховано в роботі [80]; в інших роботах автори уникали доказу коректності використаних схем.

3. Алгоритми, що використовуються для обчислення інтегралів, які наявні в моделі, мають бути адаптовані до поведінки підінтегральної функції. Алгоритми, які застосовуються для розв'язання рівнянь СРС мають враховувати вид матриці коефіцієнтів, яка в найпростішому випадку тридіагональна. При цьому лише в роботі [10, 11] є згадки про метод адаптації кроку інтегрування, що, ймовірно, не є оптимальним.

При цьому збіжність самої процедури самоузгодження є математичною проблемою, що розглядалася, наприклад в [10]. Для деяких задач збіжність може не досягатися, або ж її швидкість дуже мала. У зв'язку з останньою обставиною виникає необхідність у методах, які б давали оцінку самоузгодженого потенціалу і, відповідно, коефіцієнту проходження. Цю роль можуть відігравати моделі, у яких прийнято припущення про лінійне падіння напруги вздовж активної області – так звані несамоузгоджені моделі.

1.3.3. Багатодолинне моделювання РТД

У резонансно-тунельних діодах, які складаються з певних комбінацій матеріалів, наприклад з AlAs/GaAs, суттєва роль в електронному транспорті належить не одній, а двом долинам. Так, в шарах, що формують квантові бар'єри, найнижчою долиною в зоні провідності є X-долина. За рахунок цього, базуючись на результатах методу сильного зв'язку та їх апроксимації для використання в методі огинаючої хвильових функцій [48], було встановлено, що на гетерограницях можливе пружне Γ -X розсіювання. Для його врахування в [49] був розроблений, а в [50] – розвинений метод, який дозволяє врахувати наявність міждолинного розсіювання, що призводить до появи додаткових каналів переносу. При цьому два незалежні рівняння Шредінгера для огинаючих хвильових функцій електрона в X- та Γ -долинах ув'язуються між собою за допомогою параметра міждолинної взаємодії, становлячи систему диференціальних рівнянь, з яких можуть бути знайдені хвильові функції електрона в X- та Γ -долинах ψ_{Γ} та ψ_X , а також коефіцієнти проходження електрона по кожному з існуючих каналів $T^{\Gamma X}$, $T^{\Gamma\Gamma}$ та T^{XX} .

Слід зазначити, що при знаходженні кожного зі вказаних коефіцієнтів проходження слід використовувати самоузгоджений потенціал, розрахований із врахуванням перерозподілу електронів між Γ - та X-долинами, а не лише в рамках Γ -долини. Цього у наявних публікаціях [50, 8], здійснено не було, що вступає у протиріччя з постульованим самоузгодженням.

1.3.4. Врахування розсіювання та інших факторів, що впливають на статичні характеристики РТД

Як зазначається в ряді публікацій [81, 47] та доведено експериментально [82], поряд з когерентним електронним транспортом в РТД існує так званий «некогерентний» або послідовний механізм транспорту. Він полягає в тому, що електрон, рухаючись від одного резервуара до іншого, зазнає актів розсіювання, що призводять до хаотизації фази хвильової функції – так звана «декогеренція», що може зокрема бути викликана непружним чи пружним розсіюваннями. Єдиним підходом, що може бути реалізованим на звичайній ЕОМ в рамках моделювання всього РТД є підхід, заснований на введенні у Гамільтоніан рівняння Шредінгера (1.1) уявної частини – так званого оптичного потенціалу, iW [45, 46, 7]. При цьому сам Гамільтоніан стає неермітовим, а отже, за визначенням, описує певні дисипативні процеси. У даному випадку – це процес виходу електронів з когерентного каналу. Сам оптичний потенціал при цьому пов'язують з часом релаксації імпульсу. Існує простий спосіб врахувати втрати електронів за рахунок декогеренції у квантовій ямі, який полягає в тому, щоб вважати, що в квантовій ямі РТД знаходиться єдиний «розсіювач», який характеризується певною матрицею розсіювання [47]. Показано [45], що за таких припущень коефіцієнт проходження $T(E_z)$, що входить у формулу Цу-Есакі (1.2), можна знайти як суму:

$$T(E_z) = T_{coh}(E_z) + T_{incoh}(E_z), \quad (1.44)$$

де $T_{coh(incoh)}(E_z)$ – так званий «когерентний» («некогерентний») коефіцієнт проходження. Перший розраховується, вважаючи транспорт когерентним. Другий – обчислюється за формулою [47]:

$$T_{incoh} = (1 - R_{coh} - T_{coh}) \frac{T_R}{T_R + T_L}, \quad (1.45)$$

де $T_{R(L)}$ – коефіцієнт проходження електроном правого (лівого) бар'єру, $T_{coh}(R_{coh})$ – когерентні коефіцієнт проходження та відбивання.

При цьому забезпечується закон неперервності струму в цілому для квантової області, однак для кожної точки РТД такий закон може не виконуватися. При цьому (1.45) була від початку виведена для простої моделі, де бар'єри вважалися плоскими, тому в чисельних моделях слід ввести відповідні модифікації, чого здійснено не було.

Окрім того, врахування когерентного каналу має також передбачати перерозподіл заряду, концентрація якого є функціоналом, що залежить від хвильової функції електрона. Цього також поки що не було зроблено. Відмітимо, що непружний характер у такій моделі дуже складно відобразити, адже при цьому електрон змінює свою енергію, що ніяк не узгоджується з одночастинковим рівнянням Шредінгера, до розв'язання якого була фактично зведена багаточастинкова задача. Така вимога призводить до необхідності розгляду електрон-фонної взаємодії, концепція якої для даних систем слабо розроблена навіть теоретично, а існуючі роботи [83, 84] не можуть бути використані в рамках формалізму хвильових функцій в силу своєї непомірної складності. Однак, можна помітити, що в силу прийнятих припущень (1.45) після розсіювання рух електрона втрачає резонансний характер і набуває чи втрачена енергія, скажімо, полярного оптичного фонону в GaAs, що становить $\hbar\omega = 0.036 \text{ eV}$, несуттєво впливає на величини $T_{L(R)}(E_z)$: $T(E_z) \approx T(E_z \pm \hbar\omega)$. Тому за даних припущень немає значення, які

фонони призводять до декогеренції, оптичні чи акустичні, важлива лише швидкість сумарної взаємодії.

Проблемною залишається ситуація з врахуванням реальної форми бар'єру. Очевидно, що при розмірах самого бар'єру в декілька моношарів вже не можна вважати розрив зон стрибкоподібним. Можливо, це б не привернуло увагу, якби експериментальні дані не показували значне перевищення пікового струму над величиною, яка розраховувалась в наближенні прямокутних бар'єрів. Це породило ряд апроксимацій [7, 8], які були аргументувалися виключно необхідністю наблизити теоретичні розрахунки до експериментальних даних, нехтуючи фізичною природою процесів на гетерограницях. Разом з тим у [85] на основі методу псевдопотенціалів було показано, що, цитуючи дослівно: «наближення різкої гетерограниці є виправданим», – при цьому малася на увазі запропонована модель гетерограниці, в котрій зона провідності зазнавала розриву у два етапи, між якими потенціал вважався сталим. До цього часу цієї фізично обґрунтованої апроксимації використано не було.

В рамках моделі огинаючої хвильових функцій дуже важко врахувати непружне розсіювання [51]. Вище було сказано, як це робиться для квантової ями. При деякій прикладеній напрузі в області емітера формується так звана емітерна квантова яма (ЕКЯ). У [86] експериментально встановлено, що метастабільні електронні стани, що існують в ЕКЯ, відповідальні за особливості, що проявляються в області від'ємної диференціальної провідності. Їх іноді називають «область плато» [8] або «артефакти» [29]. Їх походження було предметом активної дискусії протягом багатьох років. Були намагання пояснити їх внутрішньою [87] чи зовнішньою [88] бістабільністю, а також Γ - X розсіюванням [8]. При цьому в рамках формалізму хвильових функцій спроб пояснити артефакти з

експериментально обґрунтованої точки зору не було. Це є актуальним завданням, оскільки артефакти знаходяться в функціонально важливій області вольт-амперної характеристики РТД.

При розгляді впливу пасивних областей РТД на процеси, що відбуваються в квантовій області, вважають, що збурення, яке вносить прикладена напруга, досить швидко спадає по мірі віддалення від квантової області. Тому для отримання самоузгодженого потенціалу достатньо розглядати лише частину резервуарів порядку декількох десятків нанометрів. Аргументується це тим, що резервуари зазвичай легуються домішками донорного типу до концентрації $N_D \sim 10^{24} \text{ м}^{-3}$ у той час як активну область залишають вільною від домішок. Не дивлячись на це, з огляду на велику протяжність резервуарів, на них може падати достатньо велика напруга, що розраховується відповідно до елементарних уявлень про провідність тривимірних напівпровідників [7]. У ряді робіт, що претендують на створення кількісних моделей [10, 11], пасивні області не враховувалися.

1.4. ВИСНОВКИ

Моделі, які класифікуються як «кінетичні», теоретично є значно адекватнішими за моделі формалізму хвильових функцій, однак при їх реалізації збільшується кількість рівнянь моделі; чисельні ресурси використовуються неефективно, а сама чисельна реалізація можлива ціною апроксимацій, які часто зводять нанівець переваги кінетичних моделей. Метод огинаючої хвильових функцій при доопрацюванні може вирівнятися по адекватності з кінетичними моделями, при цьому зберігаючи чисельну ефективність.

Аналітичні моделі можуть бути побудовані лише з використанням лоренцевої модельної функцій. Існуючі аналітичні моделі потребують доопрацювання в частині розрахунку енергії метастабільних рівнів та енергії Фермі. Для визначення меж їх застосовності та адекватності необхідне порівняння з більш адекватними моделями. Такими по відношенню до аналітичних моделей є моделі, засновані на методі Цу-Есаки.

В рамках існуючих чисельних моделей резонансно-тунельних діодів можна описати такі ефекти як перерозподіл заряду та розсіювання. Однак ці моделі потребують суттєвого покращення. Так, необхідно визначити границю між квантовою та класичною областями, уточнити ступінь виродженості електронного колективу в резервуарах, уточнити знаходження некогерентного коефіцієнту передачі, а процедуру самоузгодження розповсюдити на всю квантову та достатню частину класичної області.

Врахування найближчої вищої долини та ряду інших факторів в сучасних роботах здебільшого не проводиться. Для досягнення високої адекватності необхідно створити модель, яка б поєднувала успіхи в моделюванні всіх попередніх робіт.

У рамках моделей хвильових функцій не розроблено фізично обґрунтований метод врахування транспорту через емітерні метастабільні рівні, струм через які породжує область «плато» на ВАХ. Фізично обґрунтовані моделі гетерограниць не використовувалися для моделювання РТД. Між тим, форма потенціального бар'єру може суттєво впливати на електричні характеристики. Оскільки передумови для створення фізично обґрунтованих моделей наявні в недавніх публікаціях, необхідно розробити методи моделювання вказаних факторів.

Оскільки аналітичні та чисельні моделі за своєю функціональністю є взаємодоповнюючими, а також в силу великої

кількості факторів, що враховують чисельні моделі, доцільно розробити ієрархічний ряд взаємопов'язаних моделей з визначеною функціональністю та адекватністю. Це дозволить проводити акцентовані дослідження окремих квантових ефектів та ефективно використовувати чисельні ресурси.

Необхідно розробити чисельну модель ієрархічного ряду, використовуючи алгоритми, адаптовані до виду рівнянь моделі. Чисельні методи та програмний код необхідно перевірити на коректність, для чого порівняти з моделями, заснованими на методах матриць передачі, та на виконання граничних переходів у рамках ієрархічного ряду. Такий ряд для комфортного використання необхідно оформити у вигляді застосунку з графічним інтерфейсом користувача та вичерпним колом відображуваних величин.

РОЗДІЛ 2

МОДЕЛІ РЕЗОНАНСНО-ТУНЕЛЬНОГО ДІОДУ

Розділ присвячений побудові трьох основних моделей ієрархічного ряду – аналітичній та чисельній однодолинній і дводолинній. Описано припущення, які приймаються при моделюванні тим чи іншим методом, побудовано алгоритми моделювання та чисельні моделі, обґрунтовано вибір чисельних методів при розв’язанні рівнянь моделі. Розглянуто теоретичне підґрунтя та реалізацію в рамках методу огинаючої хвильових функцій методів підвищення адекватності чисельних моделей.

2.1. Аналітична модель

Розвиток моделей РТД пролягав через послідовне скасування припущень, які було введено в піонерській роботі Цу та Есакі [30]. Так, було розроблено моделі, що враховували перерозподіл заряду [43, 46, 28, 52, 45], процеси розсіювання [44, 83], врахування вищих долин [50, 48, 8] та інші ефекти. Одночасне врахування всіх вказаних факторів призводить до значного ускладнення процедури моделювання. І хоча чисельні методи можна оптимізувати, зв’язок між топологією РТД та його електричними характеристиками не може бути описаний за допомогою аналітичних інтуїтивно зрозумілих виразів та величин. За таких умов постає необхідність мати модель, що складна настільки, щоб відображати основні тенденції в залежності електричних характеристик від фізико-

топологічних параметрів, і проста настільки, щоб робити це за допомогою *аналітичних* виразів.

Спроби створення такої моделі здійснювалися [16, 17, 89, 18], однак вони мали суттєві недоліки, наприклад, припущення про сталу ефективну масу вздовж гетероструктури, наближення нескінченно високих бар'єрів при розрахунку рівнів енергії. Усе це негативно впливало на адекватність моделювання. В цій роботі вищевказані недоліки усунуто, а також визначено причинно-наслідкові зв'язки, що існують між топологією та електричними характеристиками. При цьому проміжні величини характеризують квантово-розмірні ефекти та мають простий інтуїтивний смисл.

Аналітична модель, що задовольняє наведеним критеріям, може бути побудована на основі формули Цу-Есакі (1.2), у якій для апроксимації коефіцієнту проходження $T(E_z)$ використовується суперпозиція лоренцевих функцій, яка задається формулою (1.43). Для отримання максимальної інформації про квантово-розмірні ефекти процедуру моделювання слід проводити в 4 етапи:

1. Пошук кількості та енергії дискретних рівнів енергії N , повністю нехтуючи можливістю розпаду електронних станів у квантовій ямі (тобто задача на власні енергії для потенціального рельєфу з рис. 1.4, *a*)
2. Пошук коефіцієнтів проходження для кожного з потенціальних бар'єрів ДБКС, $T^{(1)}$ та $T^{(2)}$.
3. Пошук величин «природного» Γ_i та «релаксаційного» Γ_p розширення метастабільних енергетичних рівнів в квантовій ямі.
4. Використання розрахованих величин для отримання ВАХ з формули Цу-Есакі (1.2).

Знайти кількість та енергію дискретних рівнів у квантовій ямі, оточеній нескінченно широкими бар'єрами (рис. 1.4, *a*), можна,

розв'язавши відповідну квазіквантовомеханічну задачу, яка лише ненабагато складніша ніж за розглянуту в [54].

Розрахунки дозволяють отримати наступні формули [23]. Кількість метастабільних рівнів у квантовій ямі:

$$N = \left[\frac{2\sqrt{m_b}}{\pi\gamma} \right] + 1 = \left[\sqrt{\frac{m_b}{m_0} \cdot \frac{m_w}{m_0} \frac{2}{\pi\gamma_0}} \right] + 1 \quad (2.1)$$

де $[x]$ позначає цілу частину x ; m_0 , m_w , m_b – маса спокою електрона та ефективні маси електрона в ямі та бар'єрі; $\gamma^2 = \frac{2\hbar^2}{m_w U a^2}$,

$\gamma_0^2 = \frac{2\hbar^2}{m_0 U a^2}$; U – висота потенціального бар'єру, a – ширина ями.

Власні енергії електрона в квантовій ямі можуть бути знайдені з трансцендентного рівняння:

$$(-1)^{n+1} \cos\left(\frac{\pi}{2}(n-1) - \xi\right) = (-1)^{n+1} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{m_w}{m_b} \left(\frac{1}{\gamma^2 \xi^2} - 1\right)}} \quad (2.2)$$

де

$$\xi = ka / 2, k = \sqrt{2m_w E} / \hbar \quad (2.3)$$

При $m_w = m_b$ права частина рівняння (2.2) є рівнянням прямої: $f(\xi) = \pm\gamma\xi$, (якщо ж $m_w \neq m_b$, то це будуть деякі криві, що виходять з точки (0;0)), ліва – в залежності від парності n – синусом або косинусом. Точки перетину двох згаданих функцій є шуканими ξ_i , яким відповідають шукані E_i згідно (2.3). Один із можливих способів графічного розв'язку (2.2) показано на рис. 2.1.

Коефіцієнт проходження через прямокутні потенціальні бар'єри можна розрахувати, наприклад, користуючись методом матриць передачі. Знайдена формула для електрона, з енергією $E_z = E_i$ має вигляд:

$$T_i = \frac{4C_i^2}{(C_i + 1)^2 \operatorname{sh}^2 b\chi_i + 4C_i^2}, \quad (2.4)$$

де b – ширина бар'єру, $C_i = \frac{k_i}{\chi_i} \cdot \frac{m_2^*}{m_1^*}$, $\hbar k_i = \sqrt{2m_b^* E_i}$,

$\hbar \chi_i = \sqrt{2m_2^* (U_0 - E_i)}$, U_0 – висота потенціального бар'єру.

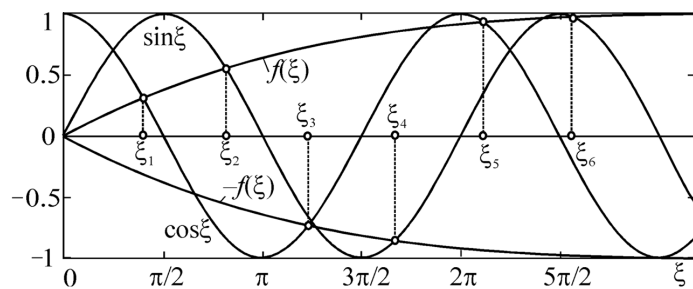


Рис. 2.1. Графічний розв'язок (2.2): точки перетину кривих $f(\xi)$ та кривих $\sin(\xi)$ або $\cos(\xi)$ – його корені.

У найпростішому випадку можна знехтувати залежністю $T^{(1)}$ та $T^{(2)}$ від прикладеної до ДБКС напруги V , і вважати, що під впливом напруги рівні енергії «опускаються» на величину $eV/2$:

$$E_i(V) = E_i(0) - \frac{eV}{2}.$$

Після того як при енергіях E_i проникності лівого та правого бар'єрів $T_i^{(1)}$ та $T_i^{(2)}$ знайдено, природне розширення i -го резонансного рівня τ_i можна визначити з рівняння (1.40).

Найбільш суттєвим механізмом розсіювання в GaAs за кімнатної температури є полярне оптичне розсіювання [90]. Наближено можна вважати, що час релаксації імпульсу в квантовій ямі співпадає з часом релаксації в тривимірному напівпровіднику, який визначається за формулою [90]:

$$\frac{1}{\tau_p} = \alpha \omega_0 \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{t^{1/2}}{\text{sht}} K_0(t) \quad (2.5)$$

де α полярна стала для GaAs; $t = \frac{\hbar \omega_0}{2k_B T}$; K_0 – функція Бесселя нульового порядку другого роду.

Використання для розрахунку Γ_p часу релаксації імпульсу часто піддають критиці. Згідно квантової статистики є більше підстав використовувати в цій ролі час релаксації фази [91, 89]. Однак, як вказано в [4], час релаксації, що в даному випадку входить до (1.42), слід розглядати як емпіричний параметр, оскільки задача з його знаходження навряд чи буде послідовно вирішена найближчим часом.

Для якісного аналізу пікового струму можна звернутися до апроксимації формули Цу-Есакі, вважаючи, що температура прямує до нуля: $T \rightarrow 0$, звідки можна отримати, вважаючи що в ямі існує лише один резонансний рівень [18]:

$$J = \frac{em^*}{2\pi^2\hbar^3} \Delta E_1^2 \left\{ \frac{E_\Phi - E_1}{\Delta E} \left[\operatorname{tg}^{-1} \left(\frac{E_\Phi - E_1}{\Delta E} \right) + \operatorname{tg}^{-1} \frac{E_1}{\Delta E} \right] - \frac{1}{2} \ln \frac{(E_\Phi - E_1)^2 + \Delta E^2}{E_1^2 + \Delta E^2} \right\}. \quad (2.6)$$

Перший пік на вольт-амперній характеристиці спостерігається, коли дно зони провідності співпадає з першим резонансним рівнем: $E_1 = 0$. Підставляючи це значення в (2.6), отримаємо вираз для пікового струму:

$$J_{\max} = \frac{em^*}{2\pi^2\hbar^3} \frac{\Delta E_1^2}{\Delta E^2} E_\Phi \Delta E. \quad (2.7)$$

Чисельні методи потрібні лише для розрахунку ВАХ резонансно-тунельного діоду. Автор використовував для інтегрування формули Цу-Есакі адаптований метод Сімпсона, який у *Matlab* реалізується функцією *quad*.

Було встановлено зв'язок між фізико-топологічними параметрами структури та параметрами відповідних квантових ефектів, знання яких дозволяє отримати вольт-амперну характеристику.

Фізико-топологічними параметрами є:

1. Хімічний склад шарів, що формують бар'єри та яму, який для випадку $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ РТД може характеризуватися молярною долею x алюмінію. Молярна доля визначає ефективну масу електрона в квантовій ямі (бар'єрах) $m_{w(b)}^*$ та висоту потенціальних бар'єрів U_0 за емпіричними формулами [92, 93]:

$$m^*(x) = 0.15mx + 0.067m(1 - x);$$

$$U_0 = 1.247\beta x, \text{ якщо } x < 0.45;$$

$$U_0(x) = \beta(1.247x + 1.147(x - 0.45)^2), \text{ інакше,}$$

де $\beta = 0.6$ еВ – параметр зонної структури.

2. Геометричні розміри: ширина квантової ями та бар'єрів, a та b .

3. Концентрація донорів у резервуарах N_D , що пов'язана з рівнем Фермі формулою $E_F = \left(\frac{\hbar^2}{2m^*e}\right)\left(\frac{2N_D}{8\pi}\right)^{2/3}$.

4. Параметри зовнішнього середовища: прикладена напруга V та температура T° .

5. Параметри розсіювання, за допомогою яких визначається час релаксації τ_p .

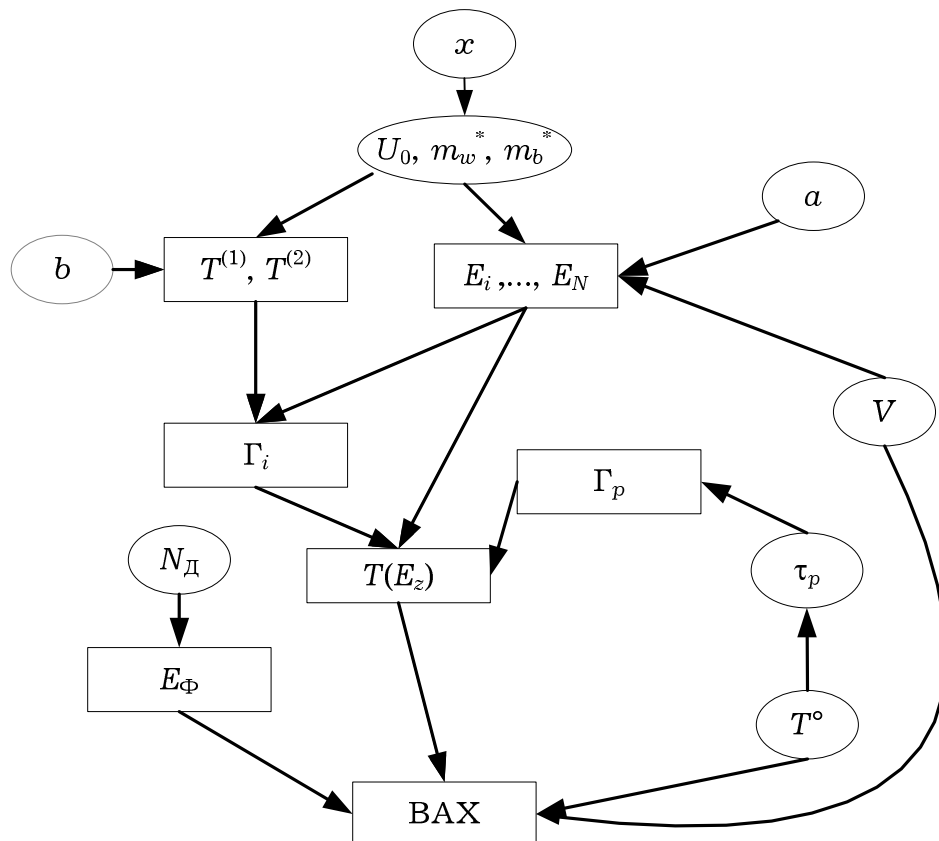


Рис. 2.2. Причинно-наслідкові зв'язки, які дозволяє відслідковувати аналітична модель.

За допомогою аналітичної моделі, використовуючи в якості вихідних параметрів перелічені, можна знайти параметри, які характеризують квантово-розмірні ефекти в РТД:

1. Кількість N та енергію E_i , $i = \{1, \dots, N\}$ метастабільних рівнів у квантовій ямі, що визначається шириною ями a та висотою бар'єрів U_0 , а також прикладеною напругою V .

2. Коефіцієнт проходження через кожний з бар'єрів $T^{(1)}$ та $T^{(2)}$, що визначається висотою та шириною бар'єру, а також ефективними масами.

2. Величину природного розширення енергетичних рівнів, Γ_i , $i = \{1, \dots, N\}$, яка визначається проникністю бар'єрів та їх положенням.

3. Величину релаксаційного розширення енергетичних рівнів Γ_p , що визначається часом релаксації, який в свою чергу залежить від температури та параметрів розсіювання напівпровідника.

4. Положення енергетичних рівнів та їх кількість у сукупності з величинами розширення енергетичних рівнів дозволяє знайти коефіцієнт проходження $T(E_z)$.

Знаючи $T(E_z)$, можна отримати вольт-амперну характеристику шляхом чисельного інтегрування або оцінити максимальний струм за формулою (2.7).

2.2. Чисельна однодолинна модель

Основні транспортні явища та квантово-розмірні ефекти в звичайному резонансно-тунельному діоді відбуваються у Γ -долині зони провідності [40]. У цьому підрозділі буде побудована чисельна самоузгоджена модель РТД, вважаючи, що електрони населяють виключно Γ -долину. Врахування заряду відбувалося у наближенні

Хартрі [54, 94]. Виведено основні рівняння моделі, на їх основі розроблено чисельну модель; описано особливості її програмної реалізації.

2.2.1. Концентрація електронів

Для проведення самоузгодженого моделювання необхідно мати вирази, що пов'язують концентрацію електронів з потенціалом поля в якому вони рухаються.

Для виведення формули концентрації електронів будемо в подальшому розглядати квантову систему, що зображена на рис. 2.3, а.

В наближенні Хартрі вважається, що електрон рухається у полі, що його створюють всі інші електрони, так званому самоузгодженому полі, потенціал якого позначимо через $V_s(z)$. У цьому пункті вважається, що потенціал $V_s(z)$ знайдено.

Вихідним положенням для знаходження концентрації електронів є поділ області, що моделюється, на квантову та класичну області, тобто «пристрій» та «резервуари» (рис. 2.3, а).

У [7, 8] границі квантової області співпадали з границями ДБКС, таким чином не даючи змогу врахувати квантово-розмірні ефекти у спейсерах, де вони мусять проявлятися через малі розміри (зазвичай порядку 10 нм) та значне падіння напруги (зазвичай більше, ніж 1/3 всієї прикладеної напруги). Очевидно, щоб це якось компенсувати вводився *чисто припасувальний* параметр «заряд на границях квантової області», чим регулювався вид ВАХ. У [11] границі квантової області обиралися на розсуд автора: ці точки могли лежати як всередині спейсеру, так і в резервуарах. Обидва ці підходи з мотивів підвищення точності ігнорують фізику процесів, яка полягає в тому, що через високе легування резервуарів та більшу інтенсивність розсіювання найбільш виправдано вважати, що

до квантової області належать ДБКС та спейсери, що й було прийнято в даній роботі.

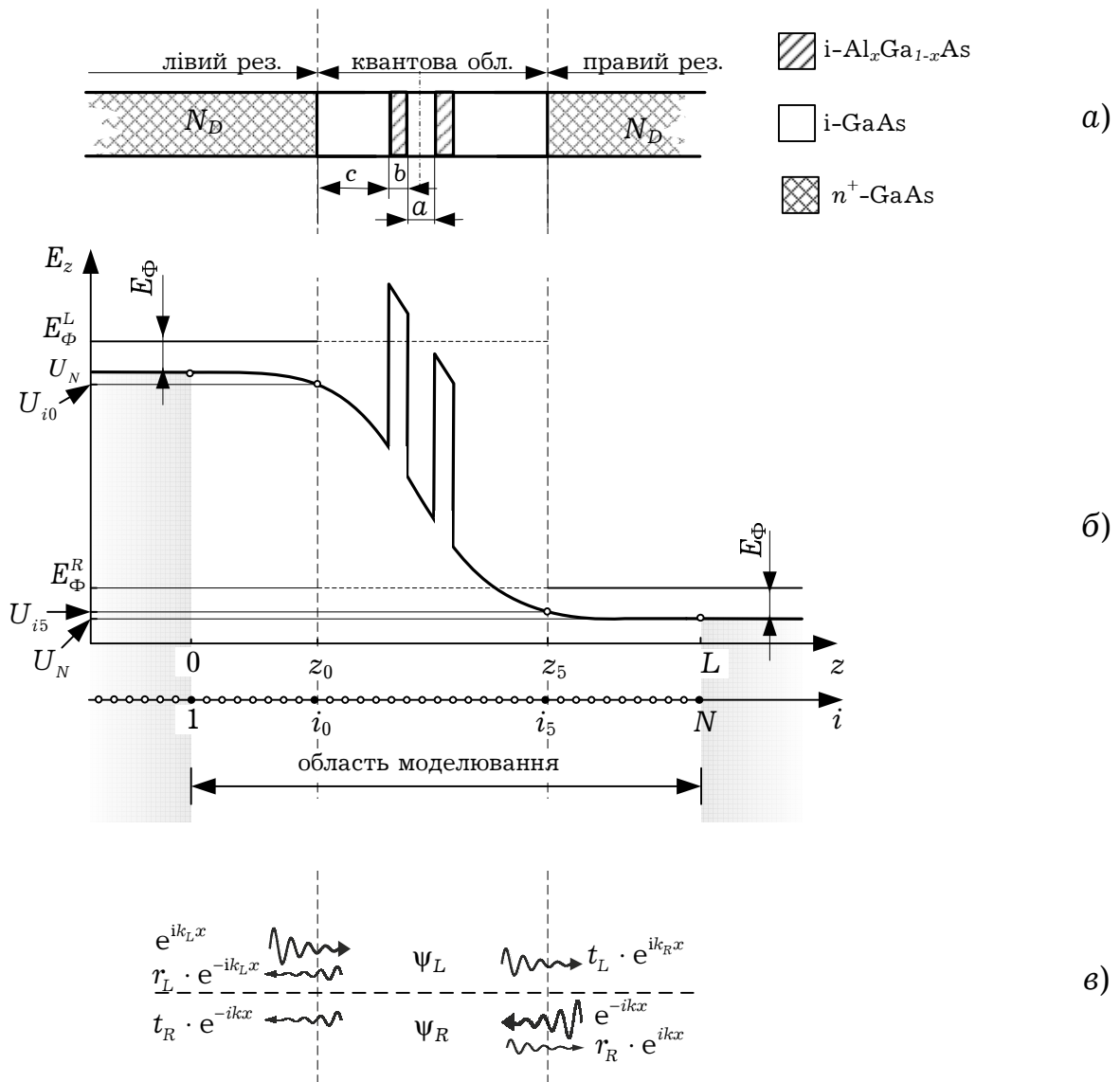


Рис. 2.3. Ілюстрація припущень та позначення, прийняті при моделюванні: а) поділ на 3 області; б) дискретизація та умовні позначення; в) хвильові функції в області моделювання.

До класичних областей належить ділянка високолегованих областей такої довжини, яка необхідна для того, щоб на її кінцях концентрація та потенціал вирівнювався до своїх рівноважних

значень зі вказаною точністю. На практиці такі ділянки обирають довжиною десятки нанометрів.

На рис. 2.3, б квантовій області відповідає область $z \in [z_0; z_5]$, де $z_0 = (i_0 - 1)\Delta$, $z_5 = (i_5 - 1)\Delta$. Области $z \in [0; z_0]$ та $z \in [z_5; L]$ відносяться до лівого та правого резервуару відповідно. Тут Δ – це крок дискретної сітки, яка для простоти вважається регулярною та буде використана для побудови чисельної моделі.

Вважається, що електрони в класичних областях підпорядковані статистиці Фермі-Дірака. Електронний газ у всьому лівому резервуарі підпорядковується статистиці Фермі-Дірака з параметром:

$$E_{\Phi}^L = U(0) + E_{\Phi} = U_1 + E_{\Phi},$$

у правому:

$$E_{\Phi}^R = U(L) + E_{\Phi} = U_N + E_{\Phi}.$$

Тут $U(z) = E_c + U_s$, тобто сума потенціальної енергії електрона в кристалічній решітці E_c та самоузгодженого потенціалу $U_s = -eV_s$; L – довжина ділянки, що моделюється; $U_i = (i-1)\Delta$; E_{Φ} – приведений до дна зони провідності рівень Фермі електронів у високолегованих областях. Він визначається як корінь рівняння:

$$N_{\text{д}}^+ = 4\pi(2m_c^* / h^2)^{3/2} \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{E}}{1 + \exp\left(\frac{E - E_{\Phi}}{k_{\text{Б}}T}\right)} dE,$$

де $N_{\text{д}}^+$ – концентрація іонізованих домішок, h – стала Планка, $k_{\text{Б}}$ – стала Больцмана, T – температура кристалічної решітки, m_c^* – ефективна маса густини станів електрона в резервуарах.

Зауважимо, що в [7] вважалося, що в резервуарах електрони підпорядковуються статистиці Максвела-Больцмана, що видається абсолютно некоректним, оскільки резервуари зазвичай леговані настільки, що рівень Фермі лежить *вище* дна зони провідності. Інші автори користувалися наближенням Томаса-Фермі, що ще менш точне [95].

Профіль дна зони провідності у класичних областях, або інакше – потенціальна енергія $U(z)$ електрона в кристалі знаходяться як розв'язок рівняння Пуассона для *всієї* ділянки, що моделюється (див. рис. 2.3, б). Він визначає для класичних лівої та правої ділянок густину станів тривимірного електронного газу.

В довільній точці i (якій відповідає координата $z_i = \Delta(i - 1)$) лівої чи правої класичної області

$$g_i(E) = 4\pi(2m_i^* / h^2)^{3/2}(E - U_i);$$

функція Фермі для лівого (правого) резервуару

$$f_{L(R)}(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_{\Phi}^{L(R)}}{k_{\text{Б}}T}\right)} = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - (E_{\Phi} + U_{1(N)})}{k_{\text{Б}}T}\right)}.$$

Таким чином, в довільній точці i лівого (правого) резервуару, якій відповідає координата $z_i = \Delta(i - 1)$, концентрація може бути віднайдена за формулою:

$$n_i = 4\pi(2m^*/h^2)^{3/2} \int_{U_i}^{\infty} \frac{\sqrt{E - U_i}}{1 + \exp\left(\frac{E - (E_{\Phi} + U_{1(N)})}{k_B T}\right)} dE. \quad (2.8)$$

Вважаючи, що електрони у квантову область потрапляють або з правого або з лівого резервуарів і між собою не взаємодіють та керуючись тими ж судженнями, що і в розд. 2.2, легко показати, що у загальному випадку концентрацію електронів у неоднорідній області можна визначити, взявши потрібний інтеграл (див. додаток А):

$$n = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(\mathbf{k})|^2 N(\mathbf{k}) dk_x dk_y dk_z, \quad (2.9)$$

який у випадку одновимірного квантового транспорту може бути зведений до двох ординарних інтегралів за поперечною (щодо гетерограниць) складовою енергії E_z :

$$n = n_R + n_L. \quad (2.10)$$

Відмітимо, що таким самим чином це було зроблено для представлення струму через квантову область у вигляді $j = j_{12}(z_5) + j_{21}(z_0)$ у розд. 2.2.

При переході від (2.9) до (2.10) вважалось, що:

1. Ймовірність заповнення електронного стану з імпульсом $\hbar\mathbf{k}$ електронами, що емітуються з лівого (правого) резервуару (тобто функція розподілу електронів у \mathbf{k} - просторі) співпадає з рівноважною у відповідному резервуарі, що помножена на ймовірність знайти електрон в даній точці квантової області, що дорівнює квадрату модуля хвильової функції інжекттованих

електронів: $f(\mathbf{k}) = f_{L(R)}(\mathbf{k})|\psi(\mathbf{k})|^2$. При цьому $\psi(\mathbf{k})$ слід нормувати так, щоб амплітуда падаючої хвилі була рівна одиниці (див. рис. 2.3, в). Для класичних областей вище було припущено, що електрони в резервуарах підпорядковані рівноважній статистиці Фермі. Відповідні рівні Фермі в квантових областях позначено на рис. 2.3, б пунктирними лініями, що стають суцільними в класичних областях, де енергія Фермі має безпосередній фізичний зміст.

2. Густина станів вважається рівною густині станів у граничних з квантовою областю точках, тобто точці $z_0 = (i_0-1)\Delta$ для електронів, що інжектуються з лівого резервуару, та $z_5 = (i_5-1)\Delta$ для електронів, що інжектуються з правого резервуару.

Прийняті для квантових областей початки відліку функції густини станів (тобто енергії, за яких густина станів дорівнює нулю) позначені на рис. 2.3, б пунктирними лініями. В класичних областях вони позначені суцільною лінією; поняття «густина станів» там має безпосередній зміст, чого не можна сказати про квантову область.

Доданки формули (2.10) отримано, виходячи з наступних суджень. Інтегрування проводиться за всіма складовими хвильового вектора, що паралельні до напрямку росту гетероструктури, k_x та k_y , та по додатнім (від'ємним) складовим k_z , що відповідає електрону, що балістично рухається зліва направо (справа наліво):

$$n_{L(R)} = \int_{0(-\infty)}^{\infty(0)} |\Psi_{L(R)}(E_z(k_z))|^2 dk_z \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} N(\mathbf{k}) dk_x dk_y \quad (2.11)$$

У формулі (2.11)

$$N(\mathbf{k}) = g(\mathbf{k})f(\mathbf{k}),$$

де $g(\mathbf{k}) = 2/(2\pi)^3$ – густина k -станів для тривимірного кристалу; $f(\mathbf{k}, k_\Phi)$ – модифікована функція Фермі-Дірака, що визначається так:

$$f(\mathbf{k}, k_\Phi) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E(\mathbf{k}) - E_\Phi^{L(R)}(k_\Phi)}{k_B T}\right)} =$$

$$= \begin{cases} \frac{1}{1 + \exp\left(\left\{\frac{\hbar^2}{2m^*}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) + U_{i0} - \left(U_1 + \frac{\hbar^2}{2m^*}k_\Phi^2\right)\right\} / k_B T\right)}, & k_z > 0 \\ \frac{1}{1 + \exp\left(\left\{\frac{\hbar^2}{2m^*}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) + U_{i5} - \left(U_N + \frac{\hbar^2}{2m^*}k_\Phi^2\right)\right\} / k_B T\right)}, & k_z < 0 \end{cases}$$

Остання рівність отримана, виходячи з того, що закон дисперсії для електронів, що інjektуються з лівого (правого) резервуару:

$$E(\mathbf{k}) = \begin{cases} \frac{\hbar^2}{2m^*}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) + U_{i0} = E_x + E_y + E_z, & k_z > 0 \text{ (з правого)}, \\ \frac{\hbar^2}{2m^*}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) + U_{i5} = E_x + E_y + E_z, & k_z < 0 \text{ (з лівого)}. \end{cases}$$

В останній рівності вважається, що $E_z = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} + U_{i0(i5)}$, що вказує на те, що поля, в яких знаходиться електрон змінюють лише z -складову його енергії.

Рівень Фермі у лівому(правому) резервуарі, як, зокрема, видно з рис. 2.3, б:

$$E_\Phi^{L(R)} = U_{1(N)} + \frac{\hbar^2 k_\Phi^2}{2m^*} = U_{1(N)} + E_\Phi.$$

Підставляючи ці значення $g(\mathbf{k})$ та $f(\mathbf{k}, k_\Phi)$ у (2.11) та проводячи інтегрування за двома поперечними проекціями \mathbf{k} , отримаємо формули для $n_{L(R)}$:

$$n_{L(R)} = N'_c \int_{U_{i_0}(U_{i_5})}^{\infty} \frac{|\Psi_{L(R)}|^2}{\sqrt{E_z - U_{i_0(i_5)}}} \ln \left(1 + \exp \left(-\frac{E_z - E_{\Phi}^{L(R)}}{k_B T} \right) \right) dE_z \quad (2.12)$$

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

Формула для концентрації електронів у квантовій області, що інжектуються в неї з лівого резервуару, n_L виведена у додатку А. Процедура інтегрування для отримання n_L аналогічна.

2.2.2. Хвильові функції електронів у квантовій області

Формули (2.12) дають можливість обчислити концентрацію електронів в будь-якій точці активної частини пристрою, якщо відомі відповідні хвильові функції $\Psi_{L(R)}$ та потенціальна енергія електрона. У цьому пункті шукаються вирази для хвильових функцій електрона.

Якщо шукати $\Psi_{L(R)}$ на дискретній сітці, виникає необхідність дискретизації рівняння Шредінгера для огинаючої хвильової функції електрона:

$$\frac{d}{dz} \frac{1}{m^*(z)} \frac{d\Psi_{L(R)}(z)}{dz} + \frac{2}{\hbar^2} (E - U(z)) \Psi_{L(R)}(z) = 0. \quad (2.13)$$

Консервативна скінченно-різницева схема, отримана інтегро-інтерполяційним методом [96, 97] для внутрішніх точок сітки має вигляд (див. Додаток Б):

1. Якщо точка i не лежать на границі двох матеріалів, $i \notin \{1, i_1, i_2, \dots, i_5, N\}$:

$$\psi_{i+1} - 2 \left(1 - \frac{\Delta^2 m \cdot m_i}{\hbar^2} (E_z - U_i) \right) \psi_i + \psi_{i-1} = 0, \quad (2.14)$$

де m_i – відносна ефективна маса, m – маса спокою електрона;

2. Якщо точка i співпадає з гетерограницею, $i \in \{i_1, i_2, \dots, i_5\}$:

$$\frac{m_{i+1}}{m_{i-1}} \psi_{i-1} - \left(1 + \frac{m_{i+1}}{m_{i-1}} - \frac{2\Delta^2 m \cdot m_{i+1}}{\hbar^2} (E_z - U_i) \right) \psi_i + \psi_{i+1} = 0. \quad (2.15)$$

У (2.14) та (2.15) під ψ слід розуміти як ψ_L , так і ψ_R , оскільки скінченно-різницеві схеми у внутрішніх точках для них однакові.

Для зовнішніх точок, використовуючи загальні вимоги до хвильової функції та її похідної, можна отримати наступні рівняння, що замикають скінченно-різницеві схеми для ψ_L та ψ_R (див. Додаток В):

- рівняння, що замикає скінченно-різницеву схему для ψ_L ліворуч:

$$(ik_L \Delta - 1) \psi_1 + \psi_2 = 2ik_L \Delta; \quad (2.16)$$

- рівняння, що замикає скінченно-різницеву схему для ψ_L праворуч:

$$(ik_R \Delta - 1) \psi_N + \psi_{N-1} = 0; \quad (2.17)$$

- рівняння, що замикає скінченно-різницеву схему для ψ_R ліворуч:

$$(ik_L \Delta - 1) \psi_1 + \psi_2 = 0; \quad (2.18)$$

- рівняння, що замикає скінченно-різницеву схему для ψ_R праворуч:

$$(ik_R\Delta - 1)\psi_N + \psi_{N-1} = 2ik_R\Delta, \quad (2.19)$$

де $k_{L(R)} = \sqrt{2m^*(E_z - U_{i1(i5)})} / \hbar$; причому у рівняннях (2.16) та (2.17) під ψ слід розуміти ψ_L , а в (2.18) та (2.19) – ψ_R .

Рівняння (2.17) – (2.19) були отримані, вважаючи, що границя між квантовою областю та резервуарами не співпадає з гетерограницею. Метод отримання цих рівнянь називається методом квантової передачі через границю (англ. «*Quantum transmitting boundary method*» [98])

Рівняння (2.14), (2.15) та (2.16) – (2.19) формують скінченно-різницеві схеми рівнянь Шредінгера для ψ_L та ψ_R для усіх N точок, на які розбита активна область $[z_0; z_5]$. Відтак, рівнянню Шредінгера для $\psi_{L(R)}$ ставиться у відповідність система лінійних алгебраїчних рівнянь:

$$\mathbf{A}_{L(R)} \Psi_{L(R)} = \mathbf{B}_{L(R)}, \quad (2.20)$$

де $\Psi_{L(R)} = [\psi_{L(R), 1}, \psi_{L(R), 2}, \dots, \psi_{L(R), Nk}]^T$ – вектор-стовпець, що складається з невідомих значень хвильових функцій для електронів, що потрапляють в квантову область з лівого (правого) резервуару в точках $z_i = \Delta(i - 1)$ квантової області; $\mathbf{B}_{L(R)}$ – вектор-стовпець вільних членів,

$$\mathbf{B}_L = [2ik_L\Delta, 0, \dots, 0]^T, \quad (2.21)$$

$$\mathbf{B}_R = [0, 0, \dots, 2ik_R\Delta]^T, \quad (2.22)$$

$\mathbf{A}_{L(R)}$ – тридіагональна матриця, що складається з коефіцієнтів a_i , b_i , c_i рівнянь (2.14) та (2.15), які ми представили у вигляді $a_i\psi_{i-1} + b_i\psi_i + c_i\psi_{i+1} = d_i$, та коефіцієнтів $b_{L(R), 1}$, $c_{L(R), 1}$, $a_{L(R), N}$, $b_{L(R), N}$

рівнянь (2.16) – (2.19), які ми представили у вигляді

$$a_{L(R),i} \Psi_{L(R),i-1} + b_{L(R),i} \Psi_{L(R),i} + c_{L(R),i} \Psi_{L(R),i+1} = d_{L(R),i},$$

$$\mathbf{A}_{L(R)} = \begin{bmatrix} b_{L(R),1} & c_{L(R),1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a_2 & b_2 & c_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_3 & b_3 & c_3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & a_i & b_i & c_i & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a_{N-1} & b_{N-1} & c_{N-1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a_{N-1} & b_{N-1} & c_{N-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a_{L(R),N} & b_{L(R),N} \end{bmatrix},$$

де жирними точками умовно позначають ненульові елементи матриці.

Для розв'язання системи лінійних алгебраїчних рівнянь (2.20) використовується метод Томаса («прямої та зворотної прогонки») [99], використання якого обмежується тридіагональними матрицями, і який не потребує ні резервування пам'яті під нульові елементи матриці $\mathbf{A}_{L(R)}$, ані здійснення обернення матриці.

2.2.3. Наближення Хартрі для врахування просторового заряду

Врахувати перерозподіл електронів в рамках одноелектронного наближення дозволяє метод Хартрі [54, 94], за допомогою якого можна знайти найкраще «одноелектронне» наближення для потенціалу $V_s(z)$ і, відповідно, концентрації $n(z)$. В даному випадку вважається, що електрон рухається під дією полів кристалічної решітки та самоузгодженого поля, потенціальна енергія в яких,

відповідно, $E_c(z)$ та $U_s(z) = -eV_s$, тому підсумкова потенціальна енергія електрона визначається рівнянням:

$$U(z) = E_c(z) + U_s(z). \quad (2.23)$$

Самоузгоджений потенціал V_s визначається з рівняння Пуассона [44]:

$$\frac{d}{dz} \varepsilon(z) \frac{dV_s}{dz} = \frac{e}{\varepsilon_0} [n(z) - N_d^+(z)], \quad (2.24)$$

де ε_0 – діелектрична стала; ε – відносна діелектрична проникність; N_d^+ – концентрація іонізованих донорів.

Ані V_s , ані $n(z) = n_L(z) + n_R(z)$ невідомі апріорі. Однак, відомо, що $n_{L(R)}(z)$ визначається формулами (2.8) та (2.12) та є функціями V_s : в силу прийнятого наближення повної потенціальної енергії:

Таким чином, для знаходження самоузгодженого потенціалу необхідно розв'язати систему інтегро-диференціальних рівнянь:

$$\frac{d}{dz} \varepsilon(z) \frac{dV_s}{dz} = \frac{e}{\varepsilon_0} [n(z) - N_d^+(z)], \quad (2.25)$$

$$n(z) = \begin{cases} \sum_{i=L,R} \int |\Psi_i(E_z(k_z), V_s, z)|^2 f_i(E_z) dE_z, z \in [z_1, z_5], \\ 4\pi(2m^*/h^2)^{3/2} \int_{U_i}^{\infty} \frac{\sqrt{E - U(z)}}{1 + \exp\left(\frac{E - (E_\Phi + U_{1(N)})}{k_B T}\right)} dE, z \notin [z_1, z_5], \end{cases} \quad (2.26)$$

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

Рівняння (2.25) та (2.26) інколи називають системою Шредінгера-Пуассона [100]. Для її розв'язання спочатку задають початкове

наближення для самоузгодженого потенціалу $V_s^{(0)}(z)$, наприклад вважаючи, що вся напруга лінійно падає на активній області:

$$V_s^{(0)}(z) = \begin{cases} 0, & z < z_1, \\ \frac{V}{L}z, & z \in [z_1, z_5], \\ V, & z > z_5, \end{cases} \quad (2.27)$$

$L = z_5 - z_0$ – довжина квантової області.

Найпростіший спосіб знайти самоузгоджений потенціал з абсолютною точністю ε_V – це організувати ітераційний процес так, щоб наближення $V_s^{(0)}(z)$ використовувалося для пошуку нульового наближення концентрації $n^{(0)}(z)$ згідно (2.26). Підставляючи $n^{(0)}(z)$ в (2.25), знаходять перше наближення для потенціалу $V_s^{(1)}(z)$ і так далі.

Це – так званий метод простих ітерацій. Однак, практика показує, що умова $\max |V_s^{(i+1)}(z) - V_s^{(i)}(z)| < \varepsilon_V$ не виконується за будь-якої кількості ітерацій, тобто ітераційний процес не є збіжним.

Тому альтернативно використовуються два методи [10]:

1. *Релаксаційний алгоритм.* Він полягає в тому, щоб для пошуку $n^{(i)}(z)$ використовувати не безпосередньо $V_s^{(i)}$, а величину згідно формули:

$$V_s^{(i)'} = V_s^{(i)} + \alpha(V_s^{(i)} - V_s^{(i)}), \quad (2.28)$$

що зводиться до методу простих ітерацій, якщо $\alpha = 1$. Однак при $\alpha \ll 1$ (2.28) позбавляється нестійкості, що властива попередньому методу. Типові значення α складають 0.01 та менше; за цих умов метод зазвичай впевнено сходиться, однак дуже повільно.

2. *Метод Гумеля.* Він враховує характер залежності концентрації від самоузгодженого потенціалу. Якщо вважати, що електронний газ в області моделювання не вироджений та перебуває в локальній рівновазі, то концентрація може бути віднайдена за формулою [90]:

$$n(z) = N_c \exp\left(\frac{E_\Phi - E_c(z) + eV_s(z)}{k_B T}\right) = n_0 \exp\left(\frac{eV_s}{k_B T}\right).$$

Для $V_s^{(i)}$ отримаємо $n^{(i)}(z) = n_0 \exp(eV_s^{(i)}/k_B T)$, для $V_s^{(i+1)}$ $n^{(i+1)}(z) = n_0 \exp(eV_s^{(i+1)}/k_B T)$. Якби мала місце локальна рівновага та не виродженість, то нові і старі наближення мусили б бути пов'язаними між собою співвідношенням:

$$n^{(i+1)}(z) = n^{(i)}(z) \exp\left(\frac{e(V_s^{(i+1)} - V_s^{(i)})}{k_B T}\right) \quad (2.29)$$

що безпосередньо слідує з двох попередніх формул. У випадку, коли вказані умови не виконуються, (2.29) є хорошим наближенням для концентрації, оскільки враховує її нелінійну залежність від потенціалу. Метод Гумеля [101] полягає в тому, щоб знаходити нові наближення для потенціалу за формулою:

$$\frac{d}{dz} \epsilon(z) \frac{dV_s^{(i+1)}}{dz} = \frac{e}{\epsilon_0} \left[n^{(i)}(z) \exp\left(\frac{V_s^{(i+1)} - V_s^{(i)}}{k_B T}\right) - N_d^+(z) \right]. \quad (2.30)$$

Це рівняння нелінійне відносно $V_s^{(i+1)}$, тому скінченно-різницева схема, що йому відповідає, буде складатися з нелінійних рівнянь, які можуть бути розв'язані, наприклад, методом Ньютона.

З точки зору економії чисельних ресурсів більш привабливим є лінеаризований метод Гумеля, який можна отримати, розвиваючи $\exp\left(\frac{V_s^{(i+1)} - V_s^{(i)}}{k_B T}\right)$ в (2.30) у ряд Маклорена, обмежившись першими двома членами: $\exp(x) \approx 1 + x$. Результат має вигляд:

$$\frac{d}{dz} \varepsilon(z) \frac{dV_s^{(i+1)}}{dz} - n^{(i)}(z) \frac{e}{\varepsilon_0} \frac{V_s^{(i+1)}}{k_B T} = \frac{e}{\varepsilon_0} \left[n^{(i)}(z) \left(1 - \frac{V_s^{(i)}}{k_B T} \right) - N_d^+(z) \right]. \quad (2.31)$$

Рівнянню (2.31), на відміну від (2.30), буде відповідати скінченно-різницева схема, що складається з лінійних алгебраїчних рівнянь. Спосіб їх отримання цілком аналогічний раніше застосованому до рівняння Шредінгера (див. додаток Б).

Запишемо скінченно-різницеву схему, що відповідає рівнянню (2.31) в i -й точці дискретної сітки, у вигляді:

$$a_i V_{i-1} + b_i V_i + c_i V_{i+1} = d_i \quad (2.32)$$

(тут і далі, щоб не ускладнювати сприйняття, замість V_s пишемо просто V). Коефіцієнти рівняння (2.32) мають вигляд:

1. Для всіх внутрішніх точок, що не є гетерограницями $i \notin \{1, i_1, i_2, \dots, i_5, N\}$:

$$a_i = c_i = 1, \quad (2.33)$$

$$b_i = -2 - \frac{1}{\varepsilon_i} \Delta^2 \frac{e n_i^{old}}{\varepsilon_0 V^{ref}}, \quad (2.34)$$

$$d_i = \frac{\Delta^2}{\varepsilon_i} \frac{e}{\varepsilon_0} \left[n_i^{old} \left(1 - \frac{V_i^{old}}{V_i^{ref}} \right) - N_i^+ \right]. \quad (2.35)$$

2. Для всіх гетерограниць $i \in \{1, i_1, i_2, \dots, i_5, N\}$:

$$a_i = 1, \quad (2.36)$$

$$b_i = -1 - \frac{\varepsilon_{i-1}}{\varepsilon_{i+1}} - \frac{1}{\varepsilon_{i+1}} \Delta^2 \frac{en_i^{old}}{\varepsilon_0 V^{ref}}, \quad (2.37)$$

$$c_i = \frac{\varepsilon_{i-1}}{\varepsilon_{i+1}}, \quad (2.38)$$

$$d_i = \frac{\Delta^2}{\varepsilon_{i+1}} \frac{e}{\varepsilon_0} \left[n_i^{old} \left(1 - \frac{V_i^{old}}{V_i^{ref}} \right) - N_i^+ \right]. \quad (2.39)$$

Що стосується зовнішніх точок, то вони обираються настільки далеко від активної частини пристрою, що електричне поле в них можна вважати відсутнім: $dV_s/dz = 0$, звідки отримуємо умови Діріхле, що запишуться у вигляді:

$$V_1 = 0, V_N = V. \quad (2.40)$$

Рівняння (2.33)–(2.40) формують скінченно-різницеву схему, що відповідає рівнянню (2.31), яке виражає $V_s^{(i+1)}$ через $V_s^{(i)}$ за участі (2.26). Самоузгоджений потенціал вважається знайденим з точністю ε_V , якщо виконується умова $\max |V_s^{(i+1)}(z) - V_s^{(i)}(z)| < \varepsilon_V$.

На відміну від [10, 11], розроблена СРС забезпечує консервативність, не зважаючи на розривність діелектричної проникності на гетерограницях.

2.2.4. Узагальнена формула Цу-Есакі

Покажемо, що розроблена чисельна модель задовольняє умові консервативності струму вздовж активної області.

Густина струму через РТД може бути розрахована відповідно до загальної концепції розрахунку середніх значень фізичних величин у статистичній фізиці:

$$\mathbf{J} = e \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{v}(\mathbf{k}, z) N(\mathbf{k}) dk_x dk_y dk_z, \quad (2.41)$$

де

$$N(\mathbf{k}, z) = \begin{cases} N_L(\mathbf{k}) \cdot |\psi_L(\mathbf{k}, z)|^2, & \text{якщо } k_z > 0, \\ N_R(\mathbf{k}) \cdot |\psi_R(\mathbf{k}, z)|^2, & \text{якщо } k_z < 0; \end{cases} \quad (2.42)$$

$\mathbf{v}(\mathbf{k}, z)$ – середня швидкість електрона в точці z , що визначається як густина потоку ймовірності, яка поділена на саму густина ймовірності [76]:

$$\mathbf{v}(\mathbf{k}, z) = \frac{\mathbf{j}(\mathbf{k}, z)}{|\psi(\mathbf{k}, z)|^2} = \frac{i\hbar}{2m^*} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi) / |\psi(\mathbf{k}, z)|^2. \quad (2.43)$$

З урахуванням того, що струм протікає вздовж осі $0z$ для різних знаків z -проекцій хвильового вектору єдина ненульова проекція струму $j_z(k_z, z) \equiv j$ прийме вигляд:

$$j(k_z) \equiv \begin{cases} j_{12} = \frac{i\hbar}{2m^*} \left(\psi_L \frac{d\psi_L^*}{dz} - \psi_L^* \frac{d\psi_L}{dz} \right), & \text{якщо } k_z > 0; \\ j_{21} = \frac{i\hbar}{2m^*} \left(\psi_R \frac{d\psi_R^*}{dz} - \psi_R^* \frac{d\psi_R}{dz} \right), & \text{якщо } k_z < 0. \end{cases} \quad (2.44)$$

Враховуючи (2.42) та (2.43) та провівши в (2.41) інтегрування за латеральними проекціями хвильового числа k_x та k_y , а також замінивши інтегрування по k_z на інтегрування по E_z , отримаємо:

$$J(z) = J_{12}(z) + J_{21}(z), \quad (2.45)$$

де

$$J_{12} = \frac{\sqrt{2}(m^*)^{3/2} e k_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3} \int_{U_{i0}}^{\infty} \frac{j_{12}(E_z(k_z), z)}{\sqrt{E_z - U_{i0}}} \ln \left(1 + \exp \left(-\frac{E_z - (E_\Phi + U_1)}{k_B T} \right) \right) dE_z, \quad (2.46)$$

$$J_{21} = \frac{\sqrt{2}(m^*)^{3/2} e k_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3} \int_{U_{i5}}^{\infty} \frac{j_{21}(E_z(k_z), z)}{\sqrt{E_z - U_{i5}}} \ln \left(1 + \exp \left(-\frac{E_z - (E_\Phi + U_N)}{k_B T} \right) \right) dE_z, \quad (2.47)$$

З огляду на виконання закону збереження заряду в квантовій механіці

$$\frac{\partial e|\psi|^2}{\partial t} + \text{div}(\mathbf{j}(k_z, z)) = 0,$$

виконується також і закон збереження заряду в класичній електродинаміці, бо він є ніщо інше як усереднення першого по всьому ансамблю:

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \text{div} \mathbf{J} = 0. \quad (2.48)$$

Для стаціонарних процесів та транспорту вздовж осі $0z$ (2.48) зводиться до рівняння $dJ/dz = 0$. Таким чином, підтверджується, що (2.46) та (2.47) забезпечують виконання законів збереження та

відкривається можливість розрахунку струму в будь-якій іншій точці структури, якщо відомі хвильові функції. Нагадаємо, при виводі формули Цу-Есакі (1.2) ми уникали розгляду квантової області.

З (2.46) та (2.47) слідує звичайна формула Цу-Есакі. Для цього знайдемо j_{12} в точці $z = z_5$ та j_{21} в точці $z = z_0$. Відмітимо, що для $z \geq z_5$ $\Psi_L = t_L \exp(ik_R z)$, а для $z \leq z_1$ $\Psi_R = t_R \exp(ik_L z)$. У таких позначеннях, скориставшись (2.44), маємо:

$$j_{12}(z_5) = \frac{\hbar k_R}{m^*} |t_L|^2, \quad (2.49)$$

$$j_{21}(z_0) = -\frac{\hbar k_L}{m^*} |t_R|^2. \quad (2.50)$$

Можна помітити, що в (2.46) та (2.47)

$$\frac{j_{12(21)}}{\sqrt{E_z - U_{i0(i5)}}} = \pm \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{m^*}} \frac{k_{R(L)}}{k_{L(R)}} |t_{L(R)}|^2 = \pm \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{m^*}} T, \quad (2.51)$$

де $T = \frac{k_{L(R)}}{k_{R(L)}} |t_{R(L)}|^2$ за визначенням коефіцієнту проходження (див.

(1.28) при рівних ефективних масах m_L та m_R).

Підставляючи (2.51) до (2.46) і (2.47) та додаючи останні, отримаємо формулу Цу-Есакі:

$$J = \frac{2m^* e k_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3} \int_{\max(U_{i5}, U_{i0})}^{\infty} T(E_z) D(E_z) dE_z = \frac{2m^* e k_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3} \int_{\max(U_{i5}, U_{i0})}^{\infty} \frac{k_R}{k_L} |t_L(E_z)|^2 D(E_z) dE_z,$$

яка співпадає з (1.2). Для чисельного обчислення краще за все скористатися тим, що $|t_L(E_z)|^2 = |\Psi_N|^2$.

2.3. Чисельна дводолинна модель

Однодолинна модель, розглянута в розд. 2.2, базувалася на припущенні про те, що участь в електронному транспорті приймають виключно електрони з найнижчої Γ -долини.

Міждолинні переходи в напівпровідниках стають суттєвими у сильних полях [90], однак вони переважно не мають місця в резонансно-тунельних діодах, тому не розглядаються в даному розділі. Натомість у напівпровідникових гетероструктурах за певних умов можливий інший тип міждолинних переходів – *пружне міждолинне розсіювання на гетерограницях* [102, 103], на яких відбувається змішування електронних станів з різних долин. Поточний підрозділ присвячений створенню дводолинної моделі шляхом узагальнення однодолинної моделі на випадок міждолинного інтерфейсного розсіювання.

Для найважливіших гетероструктур у бар'єрних шарах найнижчою долиною може стати не Γ , а, наприклад, X долина. Щоб судження були більш конкретні, в подальшому розглянемо приклад, коли бар'єрні шари складаються з потрійної сполуки $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, де $x \in [0; 1]$ – молярна доля Al у сполуці. Залежність взаємного положення долин від молярної долі Al зображено на рис. 2.4, а. На ньому видно, що при $x > 0.4$ найнижчою долиною в бар'єрних шарах є не Γ , а X -долина. Таким чином, для двобар'єрної квантової системи AlAs/GaAs резонансно-тунельного діоду потенціальний рельєф кожної з долин набуде вигляду, що показаний на рис. 2.5. Величини міждолинних відстаней та розривів зон подано в табл. 2.1. Позначення взяті з рис. 2.4, б.

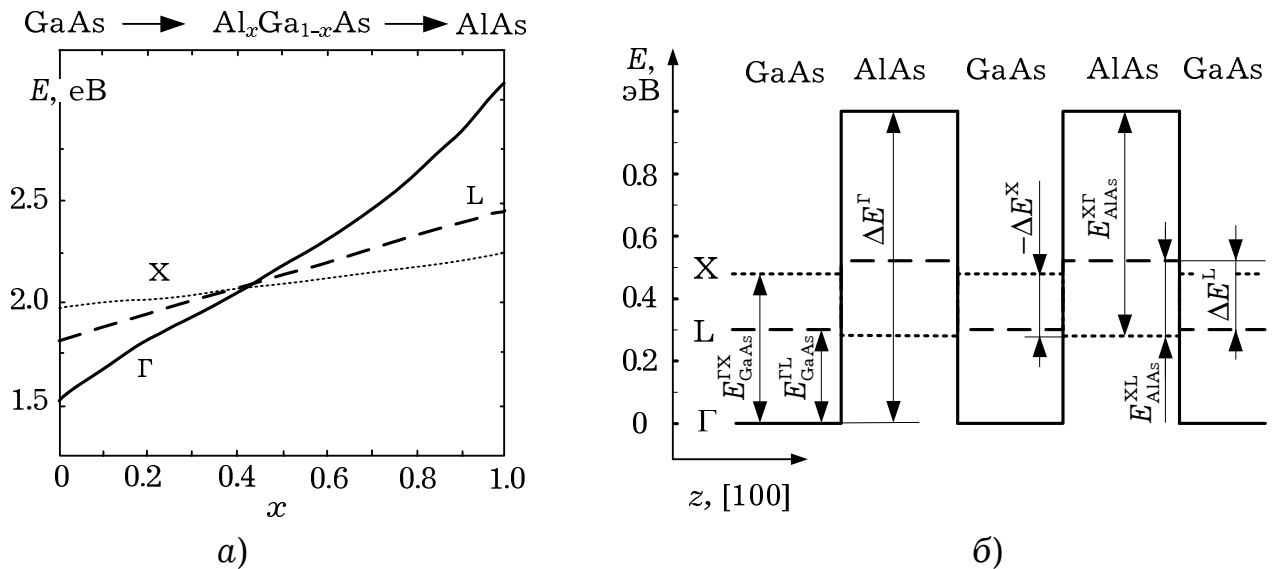


Рис. 2.4. Зонна структура гетеропереходів AlAs/GaAs: а) залежність положення долин від молярної долі x в $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$; б) параметри зони провідності AlAs/GaAs РТД.

Найбільш важливим кристалографічним напрямком, у якому вирощується активна частина AlAs/GaAs РТД є напрямок [100]. Зовнішнє поле, що діє на електрони, прискорює їх саме в цьому напрямку, тобто збільшує імпульс $k_{[100]}$, який в наших позначеннях співпадає з k_z .

Таблиця 2.1

Параметри зонної структури переходу гетеропереходу AlAs/GaAs, взяті переважно з [92] та [93]

Розриви зон, eВ	Міждолинні відстані, eВ	
	GaAs	AlAs
$\Delta E_{\Gamma} = 1$		
$\Delta E_{\text{X}} = -0.24$	$E_{\text{GaAs}}^{\Gamma\text{X}} = 0.49$	$E_{\text{AlAs}}^{\text{X}\Gamma} = 0.73$
$\Delta E_{\text{L}} = 0.21$	$E_{\text{GaAs}}^{\Gamma\text{L}} = 0.29$	$E_{\text{AlAs}}^{\text{X}\text{L}} = 0.23$

З рис. 2.5, б видно, що на гетерограницях найбільш сприятливі умови створюються для переходу електронів з Γ -долини GaAs до X-

долини AlAs, але не в усі, а лише у дві з них, які орієнтовані вздовж кристалографічного напрямку $[100]$ (кожна з цих X-долин лише наполовину знаходиться в першій зоні Брілюена). Перехід до X-долин, які орієнтовані в напрямках $[001]$ та $[010]$ малоймовірний, оскільки розподіл електронів за імпульсами $\hbar k_{[001]}$ та $\hbar k_{[010]}$ залишається рівноважним (конструкція РТД виключає латеральне поле). З тих же причин не вигідні також переходи до L-долин, що орієнтовані в напрямку $[111]$ та еквівалентних до нього напрямках. Наведені судження підтверджуються більш точними розрахунками, що ґрунтуються на *напівемпіричному методі сильного зв'язку* [102, 103] та свідчать на користь нехтування усіма міждолинними переходами окрім Γ -X, причому тут і далі під X-долинами будемо розуміти лише X-долину, що орієнтована в напрямку $[100]$ чи в еквівалентному.

Основні припущення, що прийняті для однодолинної моделі в розд. 2.2, залишаються в силі і для дводолинної моделі. Відмінність полягає у включенні до розгляду електронів з X-долини. Для спрощення вважається, що X-долини в резервуарах незаселені. Електрони з X-долини, що потрапляють в резервуари з квантової області миттєво переходять в Γ -долину та термалізуються.

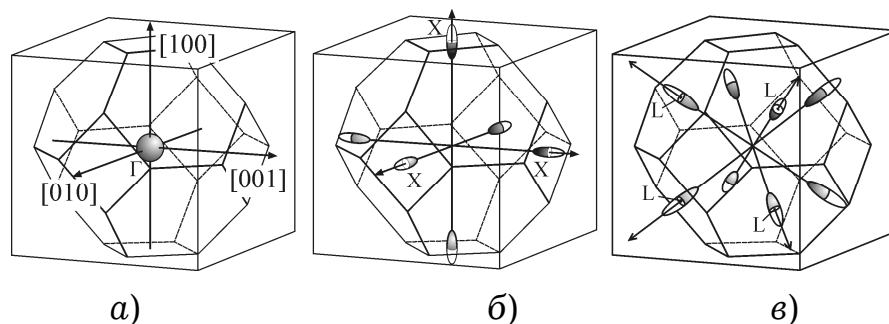


Рис. 2.5. Ізоенергетичні поверхні GaAs та AlAs, що відповідають Γ - (а), X- (б) та L-долинам (в).

Припустимо, що хвильові функції електронів з Γ - та X - долин, Ψ_Γ та Ψ_X , уже знайдені, та спробуємо побудувати самоузгоджену модель, аналогічну описаній в розд. 2.2.

З'ясуємо, як змінюються формули для знаходження концентрації електронів у активній частині РТД та струму через нього (формули (2.10) та (1.2)) з урахуванням можливості руху електронів як в Γ -, так і в X долинах.

Очевидно, що концентрація усіх електронів у квантовій області є сумою концентрацій електронів в Γ - та X -долинах (n_Γ та n_X відповідно), які знаходяться за формулами, цілком аналогічними (2.10):

$$n = n_\Gamma + n_X, \quad (2.52)$$

де

$$n^{\Gamma(X)} = \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi^{\Gamma(X)}(\mathbf{k})|^2 N(\mathbf{k}) dk_x dk_y dk_z. \quad (2.53)$$

Тут $N(\mathbf{k}) = N^\Gamma(\mathbf{k}) + N^X(\mathbf{k})$, де $N^{\Gamma(X)}(\mathbf{k})$ – функція розподілу електронів у $\Gamma(X)$ долині лівого (якщо $k_z > 0$) та правого (якщо $k_z < 0$) резервуарів. Згідно прийнятих припущень $N^X = 0$.

Проводячи тривіальні узагальнення формули для концентрації та струму через РТД для однодолинної моделі (див. розд. 2.2.1) на випадок двохдолинної моделі отримаємо:

$$n = n_L^\Gamma + n_R^\Gamma + n_L^X + n_R^X, \quad (2.54)$$

де:

$$n_{L(R)}^\Gamma = N'_c \int_{U_{i0}(U_{i5})}^{\infty} \frac{|\Psi_{L(R)}^\Gamma|^2}{\sqrt{E_z - U_{i0}^\Gamma}} \ln \left(1 + \exp \left(- \frac{E_z - (E_\Phi + U_{1(N)}^\Gamma)}{k_B T} \right) \right) dE_z, \quad (2.55)$$

$$n_{L(R)}^X = N'_c \int_{U_{i0}(U_{i5})}^{\infty} \frac{|\Psi_{L(R)}^X|^2}{\sqrt{E_z - U_{i0(i5)}^\Gamma}} \ln \left(1 + \exp \left(-\frac{E_z - (E_\Phi + U_{1(N)}^\Gamma)}{k_B T} \right) \right) dE_z, \quad (2.56)$$

$$J = \frac{2m^* e k_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3} \int_{\max(U_{i5}, U_{i0})}^{\infty} T(E_z) D(E_z) dE_z, \quad (2.57)$$

де $T(E_z)$ – поки що невідомий коефіцієнт проходження, що має смисл ймовірності проходження електрона з поперечною енергією E_z з лівого резервуару до правого. Таким чином, невідомими поки що є хвильові функції Ψ_L^Γ , Ψ_R^Γ , Ψ_L^X , Ψ_R^X та коефіцієнт передачі.

Враховуючи незаселеність X-долини в резервуарах, для електронів з лівого резервуару маємо:

$$\Psi_I^X = 0, \text{ якщо } z < z_1,$$

де z_1 – ліва границя квантової області (праву будемо позначати через z_5). Індексми I, II, III будемо позначати, відповідно, лівий резервуар, квантову область та правий резервуар. Під ψ тут і далі слід розуміти хвильову функцію електронів, що налітають на квантову область з лівого резервуару (доки не буде зазначено інше), яку ми раніше позначали Ψ_L .

Електрону, що походить з лівого резервуару, у I області відповідає суперпозиція плоских хвиль:

$$\Psi_I^\Gamma = \exp(ik_L^\Gamma z) + r \exp(-ik_R^\Gamma z),$$

перша з яких зображує електрон, що налітає на квантову систему, а друга – відбитий.

Якщо у квантовій системі відбулося змішування станів, на виході з неї точці $z = z_5$ електрону буде відповідати уже дві хвилі:

$$\Psi_{\text{III}}^{\Gamma} = t_{\Gamma\text{X}\Gamma} \exp(ik_{R,\Gamma}z), \quad (2.58)$$

$$\Psi_{\text{III}}^{\text{X}} = t_{\Gamma\text{X}} \exp(ik_{R,\text{X}}z), \quad (2.59)$$

де $k_R^{\Gamma(\text{X})} = \sqrt{2m_{\text{III}}^{\Gamma(\text{X})}(E_{\Gamma(\text{X})} - U_{\Gamma(\text{X})})}/\hbar$ – хвильовий вектор електрона в $\Gamma(\text{X})$ -долині, $m_{\text{III}}^{\Gamma(\text{X})}$ – ефективна маса електрона в $\Gamma(\text{X})$ -долині в III області в напрямку [001], $t_{\Gamma\text{X}\Gamma}$, $t_{\Gamma\text{X}}$ – сталі інтегрування, що мають сенс, аналогічний комплексному коефіцієнту проходження, $U_{\Gamma(\text{X})}$ – профіль зони провідності у $\Gamma(\text{X})$ -долині (сума потенціальної енергії електрона в полі кристалічної решітки та просторового заряду).

Ймовірність того, що електрон, пройшовши через квантову систему, опиниться на виході (в точці z_5) в Γ -долині вже розраховувалася раніше (див. (1.28)); в однозонній моделі ми називали її просто «коефіцієнт проходження». В прийнятих тут позначеннях означена формула запишеться так:

$$T_{\Gamma\text{X}\Gamma} = |t_{\Gamma\text{X}\Gamma}|^2 \frac{|k_{\text{III}}^{\Gamma}|}{|k_{\Gamma}^{\Gamma}|} \frac{m_{\Gamma}^{\Gamma}}{m_{\text{III}}^{\Gamma}}. \quad (2.60)$$

Ймовірність того, що електрон, пройшовши через квантову систему, вийде через X-долину, розраховується як відношення відповідних густин потоків ймовірності (див. (1.27)). Прості обчислення дають:

$$T_{\Gamma\text{X}} = |t_{\Gamma\text{X}}|^2 \frac{|k_{\text{III}}^{\text{X}}|}{|k_{\Gamma}^{\Gamma}|} \frac{m_{\Gamma}^{\Gamma}}{m_{\text{III}}^{\text{X}}}. \quad (2.61)$$

Оскільки дві події «налітаючий електрон вийде через Γ -долину» та «налітаючий електрон вийде через X-долину» є взаємовиключними, відповідні ймовірності підсумовуються:

$$T = T_{\Gamma X \Gamma} + T_{\Gamma X}.$$

Саме цей коефіцієнт має бути використаний у формулі Цу-Есакі (2.57) для розрахунку струму.

У формулах (2.60) та (2.61) залишаються невідомими сталі інтегрування рівняння Шредінгера, пошук яких є основною проблематикою двохдолинного моделювання. Крім того невідомими залишаються хвильові функції, які необхідні для розрахунку концентрації.

В роботі [49], базуючись на експериментальних даних та теоретичних розрахунках, які здійснені в рамках моделі сильного зв'язку [102], запропоновано спосіб розрахунку огинаючих одноелектронних хвильових функцій Ψ_{Γ} та Ψ_X з врахування Γ - X розсіювання. Подальшого розвитку він набув у [50], був теоретично обґрунтованим у [103] та в подальшому застосовувався в комбінованих моделях РТД [8]. Означений метод зводиться до того, що в звичайне рівняння Шредінгера для $\Psi_{\Gamma(X)}$

$$\hat{H}_{\Gamma(X)} \Psi_{\Gamma(X)} = E_{z, \Gamma(X)} \Psi_{\Gamma(X)} \quad (2.62)$$

праворуч вводиться член $\alpha^{(*)} \cdot \delta(z_k) \cdot \Psi_{\Gamma(X)}$, що дає:

$$\hat{H}_{\Gamma(X)} \Psi_{\Gamma(X)} + \alpha^{(*)} \delta(z_k) \Psi_{\Gamma(X)} = E_{z, \Gamma(X)} \Psi_{\Gamma(X)}, \quad (2.63)$$

де $\hat{H}_{\Gamma(X)} = U_{\Gamma(X)} - \left(E - \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_{\Gamma(X)}^*} \right) \equiv U_{\Gamma(X)} - E_{z, \Gamma(X)}$; $k_{\parallel}^2 = k_x^2 + k_y^2$, $m_{\Gamma(X)}^*$ –

ефективна маса електрона в Γ -долині (поздовжня ефективна маса в X -долинах, що орієнтовані в напрямках); z_k – координати гетерограниць, δ – дельта-функція Дірака; α – стала міждолинного

зв'язку, в загальному випадку комплексна величина. Для пари GaAs/AlAs значення α , що узгоджується з розрахунками методом псевдопотенціалів складає: $\alpha = 0.1 \text{ eV}\cdot\text{\AA}$ [49]. Також використовувалися (1.64) значення $\alpha = 0.15 \text{ eV}\cdot\text{\AA}$ [50] та $\alpha = 0.45 \text{ eV}\cdot\text{\AA}$ [8]; при цьому об'єктивні причини вибору саме таких значень параметру α не вказувалися.

У розкритому вигляді (2.63) перепишеться:

$$\begin{aligned} & \begin{bmatrix} -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m_{\Gamma}^*} \frac{d}{dz} & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m_{\text{X}}^*} \frac{d}{dz} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi_{\Gamma} \\ \Psi_{\text{X}} \end{bmatrix} + \\ & + \begin{bmatrix} U_{\Gamma} - E + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_{\Gamma}^*} & \alpha \delta(z_k) \\ \alpha^* \delta(z_k) & U_{\text{X}} - E + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_{\text{X}}^*} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi_{\Gamma} \\ \Psi_{\text{X}} \end{bmatrix} = 0. \end{aligned} \quad (2.65)$$

Видно, що при $\alpha = 0$ система (2.65) зводиться до двох незалежних рівнянь Шредінгера для X- та Γ -долин. Натомість при $\alpha \neq 0$ на гетерограницях «вмикається» взаємодія між X- та Γ -долинами та відбувається змішування електронних станів.

Рівняння (2.65) можна розглядати як узагальнення граничних умов, що накладаються на хвильову функцію на гетерограницях. Еквівалентний запис рівняння (2.65) проголошує [103]:

$$\Psi_{\Gamma(\text{X})}(z_{k-}) = \Psi_{\Gamma(\text{X})}(z_{k+}); \quad (2.66)$$

$$\frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{1}{m_{\Gamma(\text{X})}^*} \Psi'_{\Gamma(\text{X})}(z_{k-}) - \frac{1}{m_{\Gamma(\text{X})}^*} \Psi'_{\Gamma(\text{X})}(z_{k+}) \right] + \alpha^{(*)} \Psi_{\text{X}(\Gamma)}(z_k) = 0, \quad (2.67)$$

де штрихом позначено диференціювання по z . Рівняння (2.66) та (2.67) при $\alpha = 0$ зводяться до звичайних граничних умов окремо для ψ_Γ та ψ_X (див. (1.12) та (1.13)).

Використовуючи (2.66) та (2.67), можна побудувати метод матриць передачі та деякі інші умовно-аналітичні методи знаходження коефіцієнту проходження так само, як це було зроблено за допомогою (1.12) та (1.13) в розд. 1.3.1. Це питання винесено в додаток Г.

Крім того, в додатку Б описано трьохточкову скінченно-різницеvu схему, що відповідає системі (2.65) для всіх внутрішніх точок. Рівняння, що замикають схему, для ψ_Γ такі ж, як для однодолинної моделі (див. додаток В). Для ψ_X спосіб отримання замикаючих рівнянь схеми аналогічний, слід лише врахувати, що в X-долині амплітуда хвилі, що відповідає налітаючому електрону, нульова, що відображає припущення про незаселеність X-долини в резервуарах.

Невідомі сталі інтегрування $t_{\Gamma X}$ та $t_{X\Gamma}$, що використовуються для розрахунку коефіцієнту проходження, знаходять, виходячи з того, що $|t_{\Gamma X}(E_z)|^2 = |\psi_N^\Gamma|^2$, $|t_{X\Gamma}(E_z)|^2 = |\psi_N^X|^2$, де $\psi_N^{\Gamma(X)}$ – хвильові функції електрону з лівого резервуару на границі квантової області та правого резервуару.

Процес знаходження самоузгодженого потенціалу для дводолинної моделі нічим не відрізняється від алгоритму, що описаний для однодолинної (розд. 2.2.3). Слід лише у рівнянні Пуассона для концентрації n використовувати вираз (2.54).

2.4. Розробка методів підвищення адекватності моделей шляхом врахування додаткових ефектів

Описані вище чисельні однодолинна та дводолинна моделі враховують основні квантово-розмірні ефекти, однак їх точність та (або) адекватність залишається низькою (це буде показано в розд. 4), оскільки не враховано ряд другорядних, однак важливих факторів, що впливають на електронні процеси та квантово-розмірні ефекти. В даному підрозділі кожен пункт описує включення у створені моделі явищ, врахування яких дозволяє проводити реалістичне моделювання квантово-розмірних ефектів та процесів струмопереносу в РТД.

2.4.1. Методика врахування розсіювання у квантовій ямі РТД

У квантовій області РТД для опису руху електронів використовується наближення огинаючих одноелектронних хвильових функцій, в рамках якого врахування процесів розсіювання можливий лише у феноменологічний спосіб.

Відштовхуючись від того, що частина електронів в активній частині зазнає розсіювання, струм, що протікає через вказану область, ділять на струм електронів, що не зазнали розсіювання, так звана *когерентна складова*, та струм електронів, що таких зіткнень зазнали, – *некогерентна* (іноді «*послідовна*») *складова*:

$$J_{tot} = J_{coh} + J_{incoh}. \quad (2.68)$$

Явище переходу з когерентного у послідовний канал полягає в тому, що когерентна складова струму має зменшуватися в напрямку

протікання струму. Скажімо, якщо електрони рухаються у додатному напрямку осі $0z$, то має виконуватися умова:

$$dJ_{coh}/dz < 0, \quad (2.69)$$

для виконання якої необхідно, щоб було:

$$dj_{12}/dz < 0, \quad (2.70)$$

$$dj_{21}/dz > 0, \quad (2.71)$$

що можливо лише, якщо оператор Гамільтона не є ермітовим, оскільки саме ермітовість оператора Гамільтона забезпечує виконання закону збереження потоку густини ймовірності та закону неперервності заряду (2.48).

Щоб зробити з ермітового оператора неермітовий достатньо ввести до нього уявну величину – так званий *оптичний потенціал* $-iW$, після чого оператор Гамільтона рівняння Шредінгера для огинаючої запишеться:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m^*(z)} \frac{d}{dz} + U(z) - iW. \quad (2.72)$$

Для з'ясування суті введеної величини $-iW$, яка називається оптичний потенціал, розглянемо максимально просту задачу, а саме випадок вільного електрона: $U(z) = U = \text{const}$. Якщо згадати, що будь-який потенціальний рельєф може бути описаний кусково-сталими функціями, то результати, які ми отримуємо можна вважати універсальними та застосовними до довільної форми $U(z)$.

Розв'язком рівняння Шредінгера в означеному випадку є суперпозиція плоских хвиль:

$$\psi(z) = \underbrace{A \exp\{i\gamma z\}}_{\psi_{\rightarrow}} + \underbrace{B \exp\{-i\gamma z\}}_{\psi_{\leftarrow}}, \quad (2.73)$$

де $\pm\gamma = \pm(k + i\alpha) \equiv \frac{\sqrt{2m^*(E - U + iW)}}{\hbar}$, тобто k – це дійсна частина хвильового вектора; α – уявна. Для електрона, що рухається в додатному напрямку осі $0z$ $\psi_{\rightarrow} = A \exp\{i\gamma z\}$, – для падаючого електрона, $\psi_{\leftarrow} = B \exp\{-i\gamma z\}$, для електрона, який зазнав відбиття.

Прості обчислення дають такий вираз густини ймовірності для падаючої $\psi_{\rightarrow}(z)$ та відбитої $\psi_{\leftarrow}(z)$ хвилі, а також для хвильової функції $\psi(z)$:

$$j_{\rightarrow} = \frac{\hbar |A|^2}{m^*} e^{-2\alpha z}, \quad j_{\leftarrow} = \frac{\hbar |B|^2}{m^*} e^{+2\alpha z}, \quad (2.74)$$

$$j = \frac{\hbar}{m^*} \left\{ |A|^2 e^{-2\alpha z} + |B|^2 e^{+2\alpha z} \right\}. \quad (2.75)$$

Елементарний електричний струм, що його створює падаючий та відбитий електрон в напрямку руху відповідної частинки зменшуються, що засвідчують знаки відповідних похідних:

$$\frac{dj_{\rightarrow}}{dz} = -2\alpha j_{\rightarrow}, \quad \frac{dj_{\leftarrow}}{dz} = +2\alpha j_{\leftarrow}. \quad (2.76)$$

Таким чином, отримано бажаний характер просторової залежності струму (див. (2.69)). На відстані $L = 1/(2\alpha)$ елементарний струм хвиль, що відповідають падаючій та відбитій частинці, в напрямку їх розповсюдження зменшується в $e \approx 2.7$ разів. Цю довжину можна охарактеризувати як *час релаксації фази*.

Уявна частина хвильового вектора

$$\alpha(W) = \sqrt[4]{a^2 + b^2} \sin\left(\frac{\text{Arcsin}(b / \sqrt{a^2 + b^2})}{2}\right),$$

де $a = \sqrt{2m^*(E_z - U)} / \hbar$; $b = \sqrt{2m^*W} / \hbar$, монотонно зростає зі зростанням оптичного потенціалу W , що слідує з наведеної формули.

Метод розрахунку W ґрунтується на тому, що цьому оптичному потенціалу зіставляють деякий характерний час (частіше за все – час релаксації імпульсу) по формулі: $W = \hbar / 2\tau_p$. Таким чином, зі збільшенням швидкості розсіювання $v \equiv 1 / \tau_p$ оптичний потенціал також зростає, що зменшує довжину L , тобто підвищує інтенсивність процесів переходу електронів з когерентного каналу в некогерентний.

Для оцінки часу релаксації імпульсу електрона в активній області пристрою з поперечним транспортом можна використовувати час релаксації імпульсу в тривимірному напівпровіднику, який для полярного оптичного розсіювання розраховується за формулою (2.5), або ж користуватися формулою [7]:

$$\frac{1}{\tau} = S_{op} \left[1 + \frac{1}{\exp(\hbar\omega_{op} / k_B T) - 1} \right] \quad (2.77)$$

де $\hbar\omega_{op}$ – енергія полярних оптичних фононів в; S_{op} – швидкість розсіювання. Останній параметр в силу грубості наближення тривимірного часу релаксації до даної задачі є відверто припасувальним, причому є думка, що послідовно ця задача найближчим часом розв'язана не буде [4].

Закон збереження струму вимагає виконання рівності $j = j_{incoh}(z) + j_{coh}(z)$ у кожній точці пристрою, де j , $j_{incoh}(coh)$ – елементарний струм (його некогерентна та когерентна складові), що

відповідає електрону. Однак знайти спосіб знаходження $j_{incoh}(z)$, який би задовольняв цій умові, поки що нікому не вдалося. Натомість склався підхід, що базується на моделі одиничного розсіювання [47], який згодом був розвинений у роботах [45, 46, 7]. Згідно з цим підходом при розрахунку струму вважається, що в ямі резонансно-тунельного діода міститься один єдиний центр розсіювання, при проходженні якого частка когерентного струму стрибкоподібно зменшується на величину A :

$$A = 1 - T_{coh} - R_{coh}, \quad (2.78)$$

де R_{coh} – коефіцієнт відбивання від квантової системи. Зауважимо, що при $W \neq 0$ $T_{coh} < 1 - R_{coh}$, що завжди має місце для дисипативних систем; натомість, якщо розсіювання відсутнє ($W = 0$) $T_{coh} = 1 - R_{coh}$ і $A = 0$, що справедливо для систем без втрат.

Вважають, що кожний електрон, що зазнав розсіювання, буде деякий час рухатися у квантовій ямі, доки не вийде через один із бар'єрів. Ймовірність його виходу через правий бар'єр дорівнює $T_R/(T_L + T_R)$, де $T_{R(L)}$ – коефіцієнт проходження правого (лівого) бар'єру. Положення центру розсіювання частіше за все вибирають посередині квантової ями. Ця точка розділяє квантову систему на ліву та праву частини. Коефіцієнти проходження $T_{R(L)}$ суть коефіцієнти проходження лівої та правої частини квантової системи окремо. Вони знаходяться за допомогою чисельних методів, розглянутих в розд. 2.2.

Таким чином, для електрона, що інжектується з лівого резервуару, ймовірність досягти правого за умови розсіювання в некогерентний канал складає $AT_R/(T_L + T_R) \equiv T_{incoh}$. Ймовірність того, що електрон досягне правого резервуару через когерентний канал дорівнює T_{coh} . Оскільки ці дві події взаємовиключні, то

ймовірність досягнути правого резервуару будь-яким із двох способів, тобто повний коефіцієнт проходження, визначаються рівнянням:

$$T = T_{coh} + (1 - R_{coh} - T_{coh}) \frac{T_R}{T_R + T_L}. \quad (2.79)$$

У розд. 4.4 буде показано, що врахування розсіювання призводить до збільшення струму в «долині» ВАХ РТД, розмиття метастабільних рівнів енергії в квантовій ямі.

2.4.2. Моделювання опору пасивних областей РТД

Високолеговані приконтактні області та самі контакти вище вважалися ідеально провідними, що є достатньо обґрунтованою абстракцією при розгляді процесів у квантовій області.

Однак, навіть поверхневий аналіз експериментальних вольт-амперних характеристик резонансно-тунельних діодів засвідчує, що опір пасивних областей РТД, включаючи опір високолегованих шарів та контактів суттєво впливає на вид ВАХ. Зокрема, пік струму на експериментальних ВАХ спостерігається при значно вищих значеннях напруги, ніж це допускають будь-які оцінки, що здійсненні при нехтуванні впливу вказаного фактору [104, 105]. Так, Цу відмічав [77], що перший пік ВАХ має спостерігатися за напруги $V = 2E_1 / e$, де E_1 – положення першого метастабільного рівня в квантовій ямі. Застосовуючи наближену формулу до РТД, описаного в [104], яма та бар'єри якого виготовлено з шару GaAs шириною 45 Å та шарів AlAs шириною 17 Å, відповідно, отримуємо оцінку пікової напруги порядку $2 \cdot E_1 / e \approx 0.3$ В у той час як експериментальна ВАХ засвідчує наявність такого піку при нарузі 2.5 В при одній полярності напруги та близько 1 В – при іншій, що

підтверджує тезу про необхідність врахування особливостей топології, які впливають на опір контактних та приконтактних областей.

Оскільки опір самих контактів залежить від топології конкретного РТД та особливостей їх нанесення та хімічного складу, то методика його розрахунку має розроблятися і конкретний пристрій, а відповідна задача *виходить за межі цієї дисертації*. Загальним чином можна описати лише приконтактні високолеговані області, чим і обмежимося.

Зазвичай можна вважати, що високолеговані області мають таку ж площу як і шари РТД. Нехай маємо всього M таких областей, у i -й з яких концентрація іонізованих донорів складає N_i , а ширина – L_i . Тоді падіння напруги на ній може бути розраховано за формулою:

$$V_i = J \cdot R_{s,i},$$

де $R_{s,i}$ – погонний опір; $R_{s,i} = \rho_i L_i$, J – густина струму через РТД, яка однакова як для активної, так і для пасивних частин в силу послідовного їх увімкнення.

Питомий опір однорідного масивного напівпровідника може бути визначений за відомою формулою:

$$\rho_i = (e\mu_i N_{d,i})^{-1},$$

де μ_i – рухливість електронів в i -му шарі. Скориставшись нею, отримаємо рівняння, за яким слід перераховувати теоретичні криві ВАХ для врахування впливу високолегованих областей:

$$V_\Sigma = V_{\text{DBQS}}(J) + J \sum_{i=1}^M R_s, \quad (2.80)$$

де V_{Σ} – напруга, яка вимірюється в експерименті, $V_{\text{DBQS}}(J)$ – розрахована ВАХ активної частини РТД.

У розд. 3.4 буде показано, що врахування опору пасивних областей призводить до збільшення від'ємної диференціальної провідності (ВДП) у відповідній ділянці ВАХ та інших ефектів, що експериментально спостерігаються.

2.4.3. Фізична модель реальної форми розривів зон

Вище приймалося припущення про те, що потенціальна енергія електрона в зоні провідності зазнає стрибкоподібної зміни на гетерограницях, що призводить до формування прямокутних потенціальних ям та бар'єрів. Таке припущення є досить добре обґрунтованим, якщо розміри шарів значно більші за період кристалічної решітки [106]. Однак, ця умова не виконується для структур, що розглядаються. Тому намагаються врахувати відмінність реальної форми бар'єрів від прямокутної різними способами, наприклад, апроксимувати потенціальний рельєф у кожному шарі формулою [7]:

$$U_i(z) = U_i^* + \beta \frac{a_i^2}{z(a_i - z)}, \quad (2.81)$$

де U_i^* – ефективний потенціальний рельєф у i -й області, a_i – ширина потенціального бар'єру, β – деякий коефіцієнт.

Поблизу гетерограниць для досягнення бажаної гладкості апроксимації замість формули (2.81) використовують лінійну апроксимацію. На рис. 2.6, а показана апроксимація бар'єру

шириною 1.7 нм, висотою 1 еВ. Параметри вибиралися: $U_i^* = 1.05$ еВ, $\beta = 0.01$. Часто їх використовують в якості «узгоджувальних» [7].

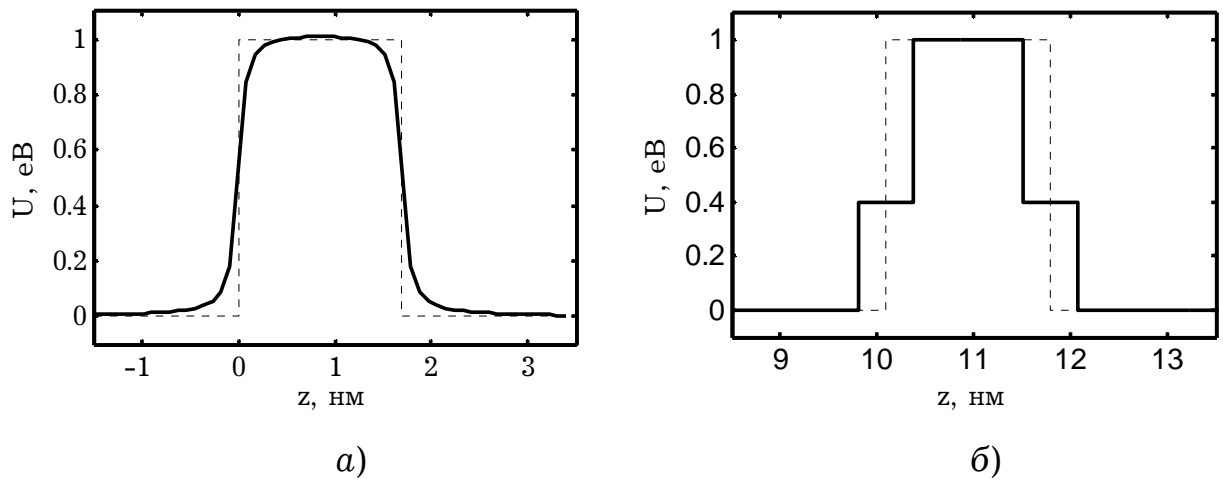


Рис. 2.6. Апроксимація форми бар'єру: а) плавний гетероперехід (формула (2.81)), б) «надрешіткова» модель гетерограниці [85].

Інший спосіб апроксимації розривів зон можна запропонувати, виходячи з результатів, що отримані при розрахунках зонної структури гетероструктур методом псевдопотенціалів [85]. У вказаній роботі було показано, що насправді ступінчаста апроксимація є найбільш фізичною, але більш коректно вважати, що потенціал змінюється різко, однак в два етапи – як показано на рис. 2.6, б. Така апроксимація, ймовірно, є більш коректною, оскільки базується на більш адекватних методах розрахунку зонної структури, аніж метод огинаючої хвильових функцій дозволяє *в принципі*.

У розд. 3.4 показано, що врахування реальної форми бар'єрів будь-яким із вказаних методів зокрема призводить до збільшення густини струму через резонансно-тунельний діод за рахунок підвищення проникності бар'єрів.

2.4.4. Фізична модель електронного транспорту через метастабільні стани в емітерній квантовій ямі

В області ВДП на вольт-амперній характеристиці РТД майже завжди спостерігаються так звані області «плато» або «артефакти». Вони представляють собою одну чи декілька ділянок ВАХ, в межах яких струм майже не змінюється або зростає повільніше, ніж до цього (рис. 2.7).

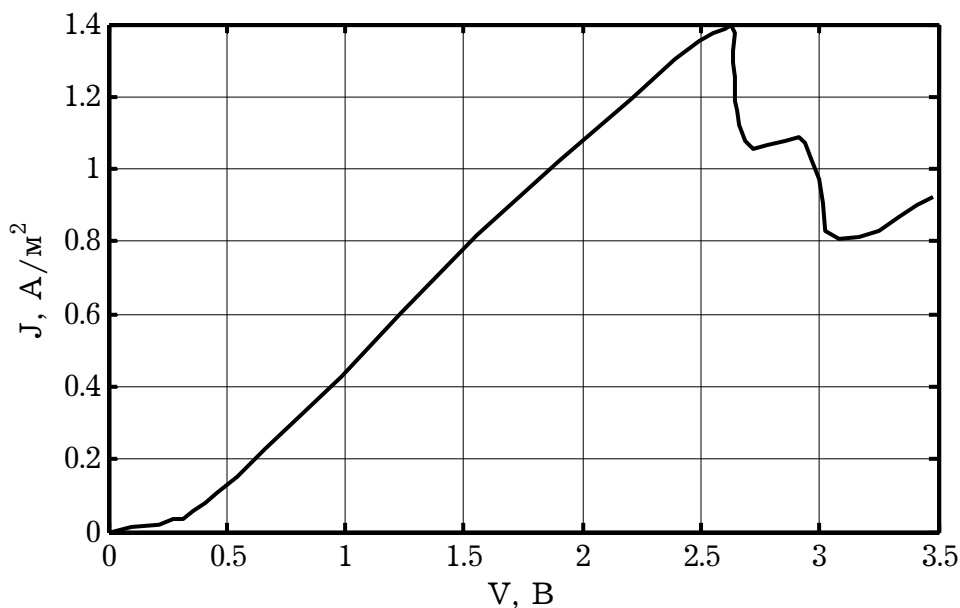


Рис. 2.7. Вольт-амперна характеристика РТД при температурі 77 К. Адаптовано з [104].

Походження артефактів було і залишається предметом активної дискусії. Висловлювалися думки про те, що артефакти пов'язані з внутрішньою [104] або зовнішньою [88] нестабільністю, з Γ -X- Γ переносом в рамках дводолинної моделі [8]. У той же час в [86] було отримано експериментальні підтвердження того, що за формування артефактів відповідальні метастабільні стани в квазітрикутній емітерній квантовій ямі (ЕКЯ).

З виявленням справжньої природи артефактів з'явилася можливість їх реального передбачення в рамках моделей РТД.

Моделі, що описані в розд. 2.2–2.3, не спроможні відобразити процеси розсіювання електронів у ЕКЯ та можливого подальшого тунелювання до колектора через основну квантову яму (ОКЯ), оскільки рух електронів вважається квазібалістичним. В той же час, для опису згаданих процесів необхідно, щоб модель в явному вигляді описувала процеси непружного розсіювання.

Автором вперше запропоновано прийом, який в рамках моделі огинаючої хвильових функцій, дозволяє моделювати транспортні явища та квантові ефекти, що пов'язані зі струмопереносом через ЕКЯ. Він полягає в наступному.

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. Дно резервуара співпадає з дном ЕКЯ. Висоту та ширину цього бар'єру можна підібрати так, щоб отримати реалістичні значення густини струму. Електрони у віртуальному резервуарі знаходяться в стані термодинамічної рівноваги з емітером (рис. 2.8).

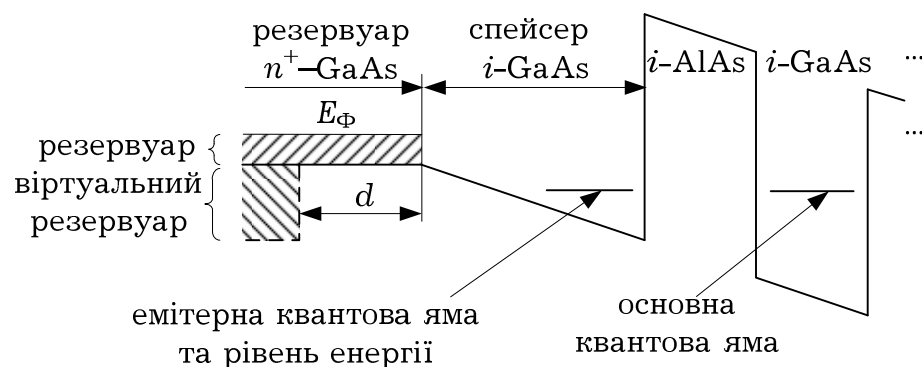


Рис. 2.8. Рельєф зони провідності (суцільна лінія). Штрихова лінія – віртуальний резервуар і бар'єр.

При побудові моделі ми відштовхувалися від суті явищ, що мають спостерігатися при непружному розсіюванні в ЕКЯ. По-

перше, електрони повинні накопичуватися на метастабільних рівнях енергії, ширина яких залежить від швидкості непружного розсіювання з емітера та швидкості їх послідуочого витікання в ОКЯ. По-друге, електрони мають створювати струм. Частина електронів, що пройшла бар'єр на рис. 2.8, моделює процес розсіювання в ЕКЯ. Якщо за даної енергії знайти ймовірність проходження всієї квантової системи, то можна обчислити струм, який створюють електрони, розсіяні в ЕКЯ. Яка б не була ширина бар'єру d , метастабільні рівні завжди будуть мати одну й ту ж енергію; змінюватися буде лише величина їх розширення, яка обернено пропорційна швидкості непружного розсіювання. Таким чином, змінюючи d , ми моделюємо зміну швидкості непружного розсіювання в ЕКЯ.

Фізичні судження, які ми використовуємо для знаходження відповідних параметрів наступні. Як зазначалося при розробці аналітичної моделі РТД (розд. 2.1), вихід електронів унаслідок розсіювання з відповідного когерентного каналу зумовлює розширення рівня енергії, який ці електрони покидають. У ЕКЯ розширення метастабільних рівнів пов'язано з двома факторами: 1) електрони поступово покидають ЕКЯ через правий бар'єр; б) електрони покидають/надходять у ЕКЯ внаслідок непружного розсіювання зі спейсерного шару. Перший фактор автоматично враховується при розв'язанні рівняння Шредінгера. Другий же, як було сказано, враховується введенням віртуального резервуару та бар'єру шириною d . Як підібрати параметри задачі, виходячи з фізичних міркувань? Для цього слід відмітити, що вихід електронів через штучно створений лівий бар'єр моделює вихід електронів внаслідок процесів розсіювання, швидкість яких дорівнює $1/\tau_E$, де τ_E – час релаксації енергії. Йому відповідає «релаксаційне» розширення Γ_E метастабільного рівня у ямі. Разом з тим до такої ж

величини розширення рівня може призвести вихід через лівий бар'єр, якби він був скінченним. Як слідує з формули (1.40), проникність через такий бар'єр $T_{\text{теор}}$ має бути:

$$T_{\text{теор}} = \frac{\sqrt{2E_z / m^*}}{2a(E_z)} \frac{1}{\tau_E}, \quad (2.82)$$

де $a(E_z)$ – ширина ЕКЯ при енергії E_z .

Однак насправді, якщо ми будемо визначати коефіцієнт проходження через бар'єр, що зображений на рис. 2.8, отримаємо деяке значення коефіцієнту проходження $T_{\text{практ}}$, яке, взагалі кажучи, не буде співпадати з $T_{\text{теор}}$, вони будуть відрізнятися в M разів: $M = T_{\text{практ}} / T_{\text{теор}}$. Поставимо завдання отримати необхідне значення $T_{\text{практ}}$ при даній конфігурації бар'єру, яке визначається формулою $T_{\text{практ}} = |j_2^{\rightarrow}| / |j_1^{\rightarrow}|$, де j_2^{\rightarrow} – густина потоку ймовірності для хвилі, що пройшла через бар'єр, j_1^{\rightarrow} густина потоку ймовірності для хвилі, яка падає на бар'єр. Для цього слід пронормувати хвильову функцію віртуального резервуару таким чином: $\psi_{1,\text{теор}}^{\rightarrow} \equiv m \exp(ik_1 z)$, де $m \equiv \sqrt{M}$. Тоді $|j_1^{\rightarrow}| \sim |\psi_{1,\text{теор}}^{\rightarrow}|^2$ збільшиться в M разів. А наново розрахований коефіцієнт проходження через бар'єр $T'_{\text{практ}} = |j_2^{\rightarrow}| / |j_1^{\rightarrow}| = 1 / M \cdot T_{\text{практ}} = T_{\text{теор}}$, чого й треба було досягти.

Нормована таким чином хвильова функція має бути використана для переформулювання граничних умов за енергій, нижчих дна зони провідності на лівій границі квантової області. Практично, це вплине на одне з чотирьох граничних умов, а саме на (2.16), яке перепищеться так:

$$(ik_L \Delta - 1)\psi_1 + \psi_2 = 2mik_L \Delta.$$

При самоузгодженому моделюванні слід обнуляти значення хвильової функції у забороненій зоні лівіше лівої границі ЕКЯ, оскільки там можливе нефізичне зростання ймовірності, яке викличе, відповідно, нефізичне збільшення концентрації електронів, що може спотворити значення самоузгодженого потенціалу та, за його посередництва, всіх розрахованих величин. Згадане застереження зумовлено застосованим підходом, який штучно вводить резервуар, якого насправді не існує. Хвильові функції електронів, що емітуються з цього резервуару, швидко затухають в глибині бар'єру, і в ЕКЯ суттєву ймовірність знаходження мають лише електрони, енергія яких близька до енергії відповідних метастабільних рівнів енергії.

Результати моделювання, що наведені в розд. 3.4, показують, що метастабільний рівень ЕКЯ за деякої напруги, більшої за пікову, спочатку співпадає з рівнем в ОКЯ, а потім буде синхронно з ним опускатися у деякому діапазоні напруг, що обумовлює появу області «плато» на ВАХ.

2.5. Висновки

Вдосконалено аналітичну модель резонансно-тунельного діоду шляхом врахування зміни ефективної маси вздовж активної частини РТД, чого не було зроблено в [16, 17]. Вперше в явному вигляді встановлено *аналітичні* причинно-наслідкові зв'язки між фізико-топологічними параметрами та квантово-розмірними параметрами, які впливають на явища переносу в РТД, що дають можливість проектувальнику без залучення чисельних ресурсів прогнозувати основні властивості пристрою, що проектується.

Побудовано однодолинну модель, яка відрізняється від сучасних аналогів тим, що з розгляду виключено параметри, що

носили чисто «припасувальний» характер: поверхневий заряд на гетерограницях [7, 8], положення границі зшивки квантової та класичної області [11, 10]. Натомість, границі фіксовано на границі між спейсерами та резервуарами, що є фізично обґрунтованим наближенням. На відміну від [95, 7, 8], в резервуарах вважалося, що електронний газ підпорядкований статистиці Фермі-Дірака, що мусить бути використана, оскільки електронний колектив там суттєво вироджений.

Порівняно існуючі методи самоузгодженого розв'язання системи рівнянь «Шредінгера-Пуассона». Для знаходження самоузгодженого потенціалу використано чисельно ефективний лінеаризований метод Гумеля.

На відміну від ряду сучасних робіт [11, 10], дводолинна модель враховує змішування станів з двох найнижчих долин на гетерограницях, без якого кількісне моделювання ряду РТД неможливе. В тих же роботах, де змішування станів враховується, присутні інші суттєві недоліки.

Вперше було враховано транспортні ефекти, що зумовлені непружним розсіюванням електронів у емітерну квантову яму. Це було здійснено шляхом оригінального методу, що базувався на введенні «віртуального» резервуару. Вперше для апроксимації форми бар'єру використано результати, що отримані в рамках методу псевдопотенціалів, який дає результати, принципово недосяжні в рамках методу огинаючої функції. Розсіювання та опір резервуарів враховано стандартним чином; при цьому однак проведено теоретичний аналіз, який показав фізичні та нефізичні аспекти врахування розсіювання за допомогою оптичного потенціалу.

РОЗДІЛ 3

ВИКОРИСТАННЯ РОЗРОБЛЕНИХ МОДЕЛЕЙ ДЛЯ АНАЛІЗУ КВАНТОВО-РОЗМІРНИХ ЕФЕКТІВ ТА ЕЛЕКТРОННОГО ТРАНСПОРТУ В РТД

3.1. Функціональність спрощеної аналітичної моделі

У розд. 3.1 на основі методу лоренцевої модельної функції (розд. 2.3.5) було побудовано аналітичну модель РТД. В даному розділі за допомогою побудованої моделі аналізується характер встановлених причинно-наслідкових зв'язків, та досліджуються закономірності основних квантово-розмірних ефектів.

Принцип роботи РТД. Аналітична модель дозволяє найбільш зрозумілим чином пояснити принцип роботи резонансно-тунельного діоду. Справді, з формули (1.38) слідує, що при $E_z = E_i$ ймовірність проходження електроном ДБКС найвища та у випадку відсутності розсіювання дорівнює одиниці. Ця рівність називається *умовою резонансу*, і спостерігається, коли власна частота коливання квантової системи $\omega_0 = E_i / \hbar$ співпадає з частотою хвилі де Бройля $\omega_{\text{зовн}} = E_z / \hbar$ електрона, що на неї налітає. Коли максимальна кількість електронів мають поперечну складову енергії E_z , що близька до резонансної, на вольт-амперній характеристиці спостерігається максимум – пік. Значення напруги та струму, що відповідають вказаній умові, називається *піковими*. Якщо електронний колектив в емітері вироджений, то піковою є приблизно та напруга, за якої рівень Фермі в емітері співпадає з положенням резонансного рівня в квантовій ямі. При подальшому збільшенні

напруги резонансний рівень опускається нижче дна зони провідності так, що поперечна складова енергії основної частини електронів віддаляється від умови резонансу; струм різко зменшується. Оскільки в квантовій ямі можуть бути вищі рівні, а також можливе надбар'єрне проходження, то за піком слідує мінімальне значення струму – долина, а потім струм знову починає зростати. Кількість піків на ВАХ РТД, як слідує з умови резонансу, рівна кількості рівнів у квантовій ямі.

Методика дослідження моделі. Для визначення впливу фізико-топологічних параметрів (далі – *вхідних* параметрів) на параметри квантово-розмірних ефектів в РТД (далі – *вихідних* параметрів) ми беремо діод з топологією, що зображена на рис. 3.1, та відслідковуємо, як змінюються параметри квантово-розмірних ефектів, якщо проводити варіювання якогось одного або кількох фізико-топологічного параметрів. При цьому решта вхідних параметрів залишаються незмінними. *Вхідні та вихідні та проміжні* параметри для згаданого РТД зведені в табл. 3.1.

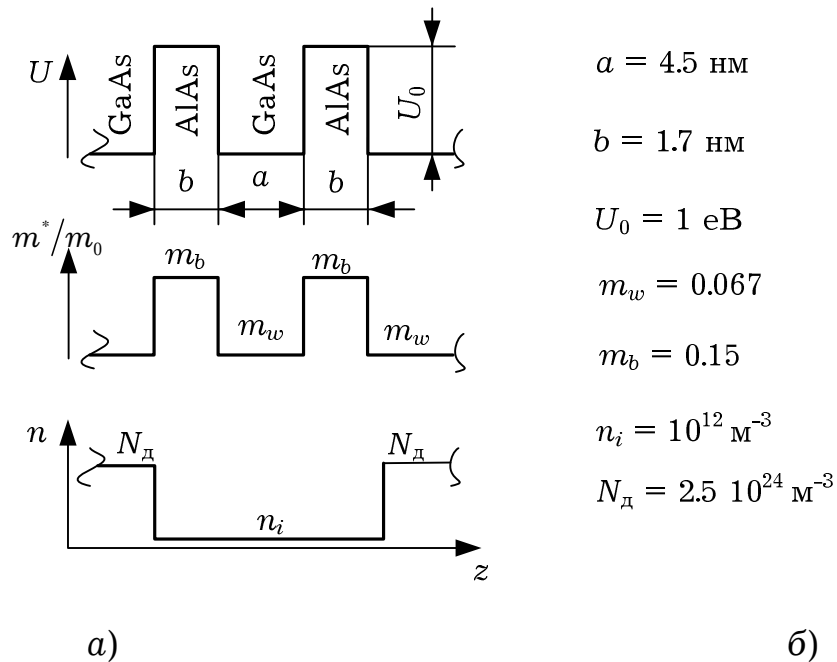


Рис. 3.1. Параметри резонансно-тунельного діоду з прямокутною (а) та параболічною квантовою ямою (б).

Ширина квантової ями a визначає кількість енергетичних рівнів N та їхню енергію E_1, \dots, E_N . Також, посередництвом енергій, ширина ями впливає на природне розширення енергетичних рівнів $\Gamma_1, \dots, \Gamma_N$. Характер цих залежностей для структури з рис. 3.1 зображено на рис. 3.2.

Табл. 3.1

Параметри модельного РТД

Вхідні параметри		Проміжні параметри		Вихідні параметри	
x_w / x_b	0 / 1	U_0 , еВ	1	N	2
a , нм	4.5	m_w / m	0.067	E_i , еВ	0.125, 0.515
b , нм	1.7	m_b / m	0.15	$T_i \cdot 10^{-3}$	9.8, 113
N_D , m^{-3}	$2.5 \cdot 10^{24}$	τ_p , пс	0.63	Γ_i , меВ	1.2, 23.3
$\hbar\omega_{op}$, еВ	0.036	τ_i , пс	0.56, 0.024	Γ_p , меВ	1.0
$\epsilon_\infty / \epsilon_{ст}$	11.6 / 13.1	E_Φ , меВ	94.2	J_{max} , A/m^2	$9.8 \cdot 10^8$
T , К	300				

Позначення: x_w (x_b) – молярна частка Al в сполуці $Al_xGa_{1-x}As$ в квантовій ямі (у бар'єрних шарах); ϵ_∞ ($\epsilon_{ст}$) – високочастотна (статична) відносна діелектрична проникність; N – кількість енергетичних рівнів в квантовій ямі, J_{max} – оцінка максимального струму за нульової температури.

З рис. 3.2 видно, що кількість рівнів у квантовій ямі N лінійно збільшується з розширенням ями a . Справді, як слідує з (2.1), $N_n \sim a$, де N – ціла частина N_n . Натомість ширина природного розширення рівнів Γ_i зменшується зі збільшенням ширини ями за складним законом, що для нижчих рівнів є більш різким за експоненціальний (рис. 3.2, a). Така залежність в основному обумовлена зменшенням невизначеності в енергії електрона за рахунок збільшення часу життя на метастабільних рівнях, що в, свою чергу, витікає з різкої,

в першому наближенні – експоненціальної залежності проникності бар’єрів, що визначається формулою (див. (2.4) та рис. 3.3), від положення цих рівнів. Останні ж монотонно опускаються з розширенням ями (рис. 3.2, а).

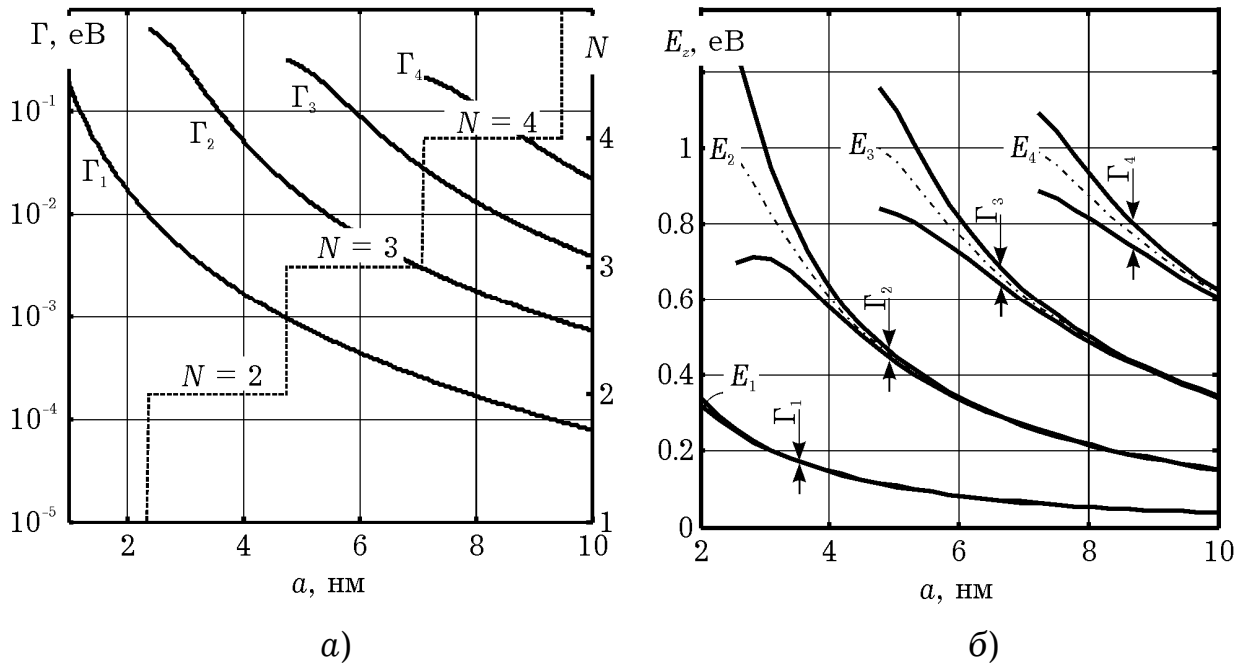


Рис. 3.2. Залежність природного розширення рівнів Γ_i , кількості енергетичних рівнів (а) та енергії енергетичних рівнів, зображених на фоні їх напівширини Γ_i (б) від ширини квантової ями a .

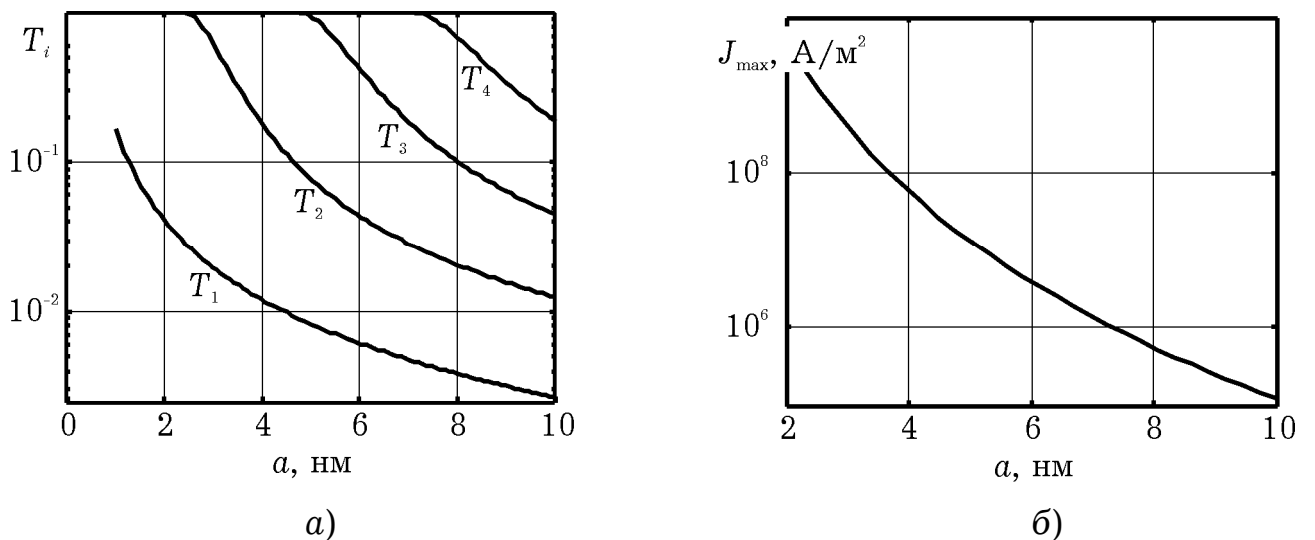


Рис. 3.3. Залежність проникності бар’єру T_i від ширини квантової ями a при резонансних енергіях E_i (а) та оцінка пікової густини струму (б).

При визначеному значенні ширини ями розмиття метастабільного рівня зростає зі зростанням порядкового номера рівня (рис. 3.2). Це пояснюється тим, що проникність бар'єрів зростає зі зростанням енергії (рис. 3.3, а). Експоненціальне зменшення розширення рівнів, яке фактично визначає їх проникність, призводить до різкого падіння пікового струму, що відповідає умові першого резонансу, при розширенні квантової ями (рис. 3.3, б).

Ширина бар'єра b впливає на коефіцієнти проходження бар'єрів $T^{(1)}$ та $T^{(2)}$ згідно з формулою (2.4), та через них на природне розширення i -го енергетичного рівня Γ_i згідно з формулою (1.39). Залежності $T^{(1)}$, Γ_i для структури, фізико-топологічні параметри якої наведено на рис. 3.1 від ширини бар'єрних шарів b показано на рис. 3.4.

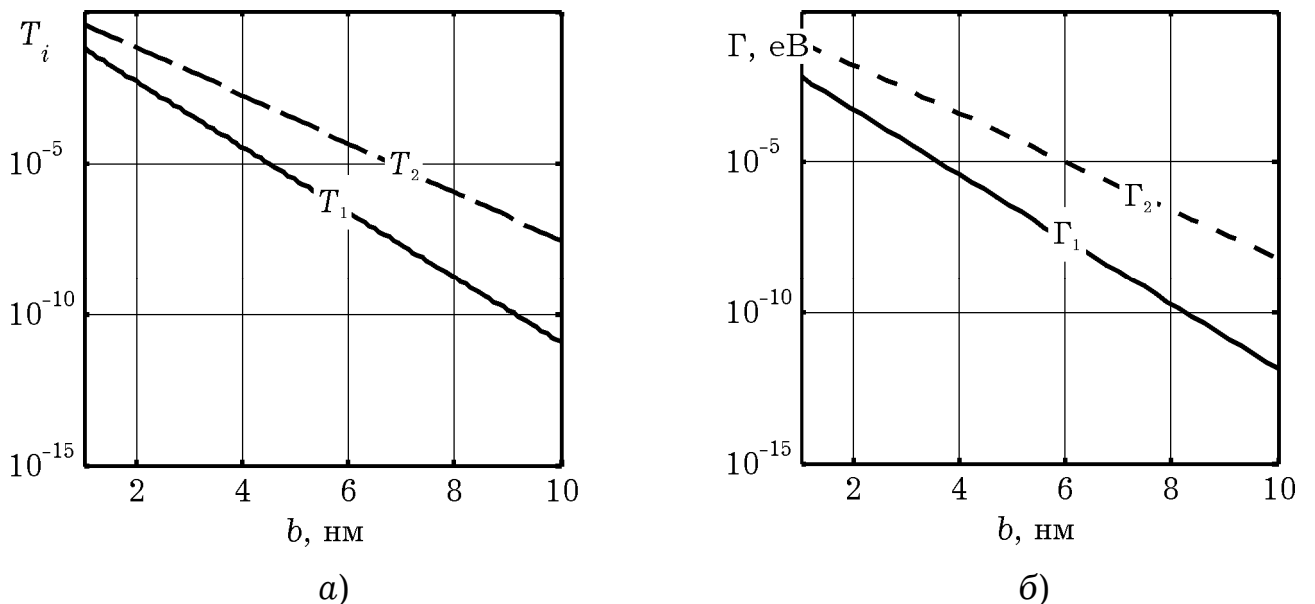


Рис. 3.4. Залежність коефіцієнтів проходження бар'єру T_1 та T_2 електронами, що мають резонансну енергію E_1 та E_2 (а) та ширини «природного» розширення першого та другого енергетичних рівнів Γ_1 та Γ_2 . (б) від його ширини бар'єру.

Як видно з рис. 3.4, збільшення ширини бар'єрів різко (експоненціально) зменшує коефіцієнти проходження бар'єрів, що,

призводить до різкого звуження ширини природного розширення енергетичних рівнів у квантовій ямі. Останній фактор призводить до експоненціального падіння оціночного значення максимального струму J_{\max} (рис. 3.5, а), що підтверджується також розрахованими вольт-амперними характеристиками (рис. 3.5, б). Водночас, контрастність ВАХ при збільшенні ширини бар'єру збільшується.

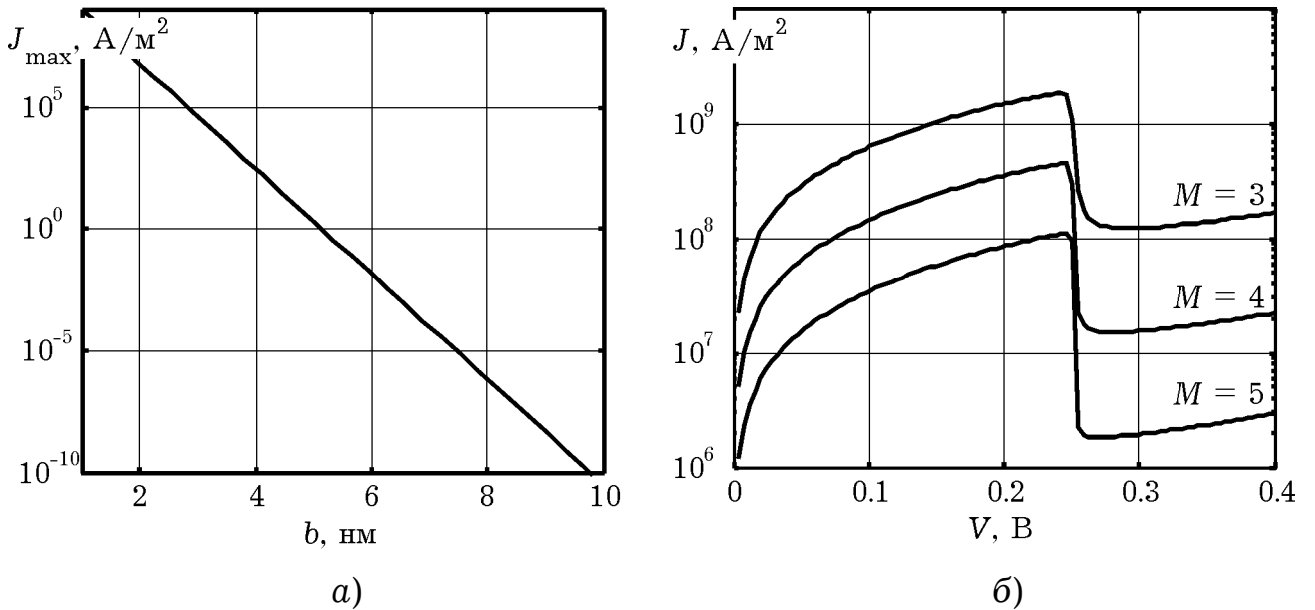


Рис. 3.5. Оцінка максимального струму для діапазону зміни ширини бар'єру b від 1 до 10 нм (а); вольт-амперна характеристика РТД при ширині бар'єрів $M = 3, 4, 5$ моношарів AlAs (б).

Молярна доля Al в сполучі $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ в бар'єрних шарах $x = x_b$ визначає висоту потенціальних бар'єрів, що оточують квантову яму, та ефективну масу електрона в бар'єрних шарах (див. розд. 2.1). Останні параметри впливають як на кількість та положення рівнів у квантовій ямі, так і, завдяки збільшенню проникності бар'єрів, на розширення енергетичних рівнів. Збільшення молярної доли Al «поглиблює» квантову яму від $U_0 = 0$ при $x_b = 0$ до $U_0 = 1$ еВ при $x_b = 1$. По мірі поглиблення в ямі з'являються вищі рівні (рис. 3.6, а), які повільно підіймаються (рис. 3.6, б).

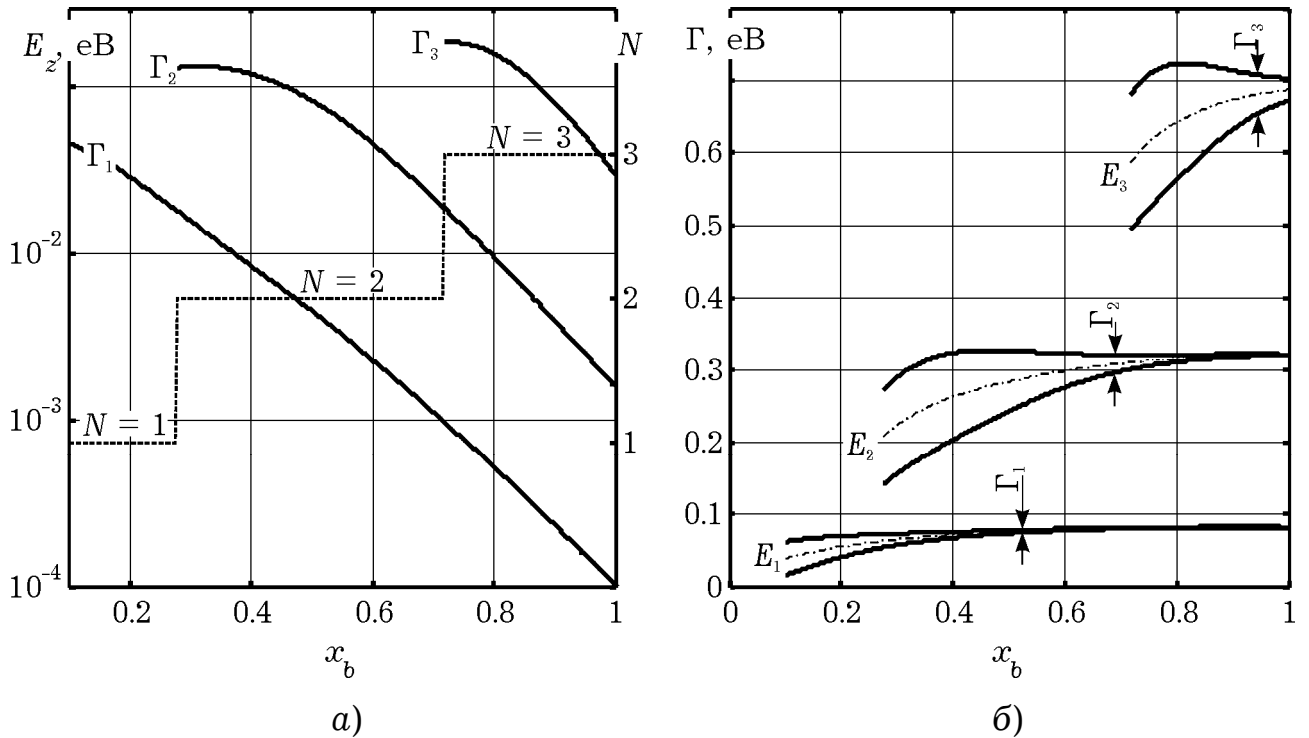


Рис. 3.6. Залежність природного розширення рівнів Γ_i , кількості енергетичних рівнів N (а) та енергії енергетичних рівнів, зображених на фоні їх напівширини Γ_i (б) від молярної долі x_b .

Водночас, поглиблення ями різко зменшує «розмитість рівнів» (рис. 3.6, а, б), адже значення резонансних енергій зростає повільно; висота ж бар'єрів зростає за законом $U_0 \sim x_b^2$ (для $x_b > 0.45$), а прозорість бар'єрів T_i , що обернено пропорційна Γ_i , зменшується за законом: $T_i \sim \exp\{-U(x_b)\} \sim \exp\{-x_b^2\}$, що засвідчує рис. 4.6, а, на якому побудовано залежність $T_i(x_b^2)$ у спрямних координатах.

Температура кристалічної решітки T^0 , як слідує з рис. 2.2, впливає на струм, що протікає в резонансно-тунельному діоді як безпосередньо, так і через час релаксації τ_p та «релаксаційне» розширення Γ_p . Для модельного РТД при кімнатній температурі релаксаційне розширення енергетичних рівнів суттєве лише для першого резонансного рівня (рис. 3.8), де воно має один порядок з «природним» розширенням (рис. 3.8, а).

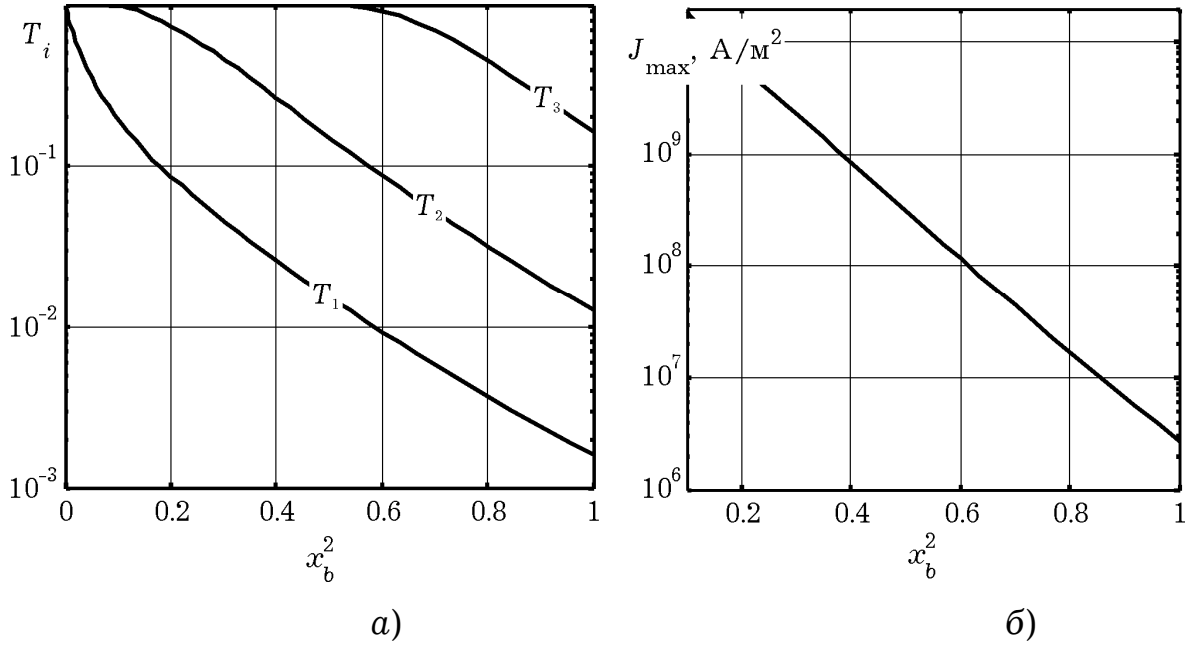


Рис. 3.7. Залежність коефіцієнтів проходження бар'єру T_1 та T_2 електронами, що мають резонансну енергію E_1 та E_2 (а) та пікового струму (б) від квадрату молярної долі x_b .

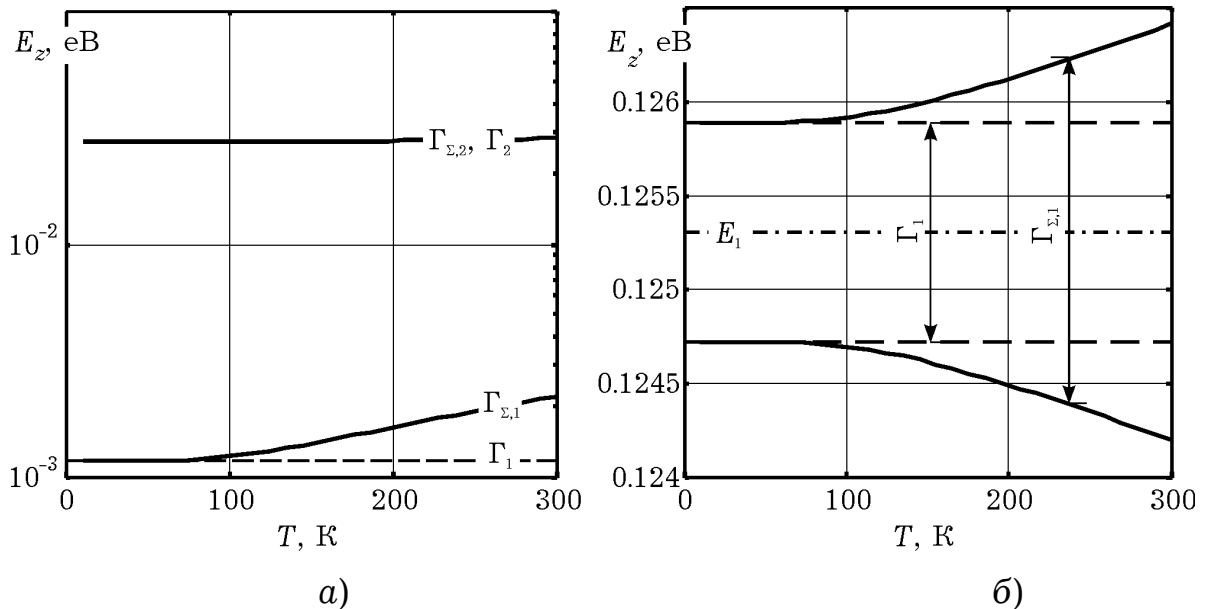


Рис. 3.8. Залежність природного Γ_i та сумарного $\Gamma_{\Sigma,i} = \Gamma_i + \Gamma_p$ розширення 1-го та 2-го рівня (а), та першого рівня на фоні положення рівня E_i (б) від температури T .

Як видно з формули (1.43), формально наявність розсіювання зокрема виявляється в тому, що значення функції $T(E_z)$ при

резонансній енергії: $E_z = E_1$ не дорівнюватиме одиниці. Фізично це означає відмінну від нуля ймовірність електрона бути розсіяним, тобто вийти з когерентного каналу. Це ілюструє рис. 3.9, а де наведено графік залежності $T(E_z)$ для декількох температур. Очевидно, що така зміна у одному з множників підінтегрального виразу в формулі Цу-Есакі призведе до зменшення пікового струму, що демонструє рис. 3.9, б. Інші механізми, зокрема «розмиття» функції розподілу, призводить до незначного підняття струму долини. Особливо вони актуальні для РТД з «низькими» бар'єрами (наприклад $\text{Al}_{0.33}\text{Ga}_{0.77}\text{As}$); такі діоди сьогодні, втім, мають лише історичне значення.

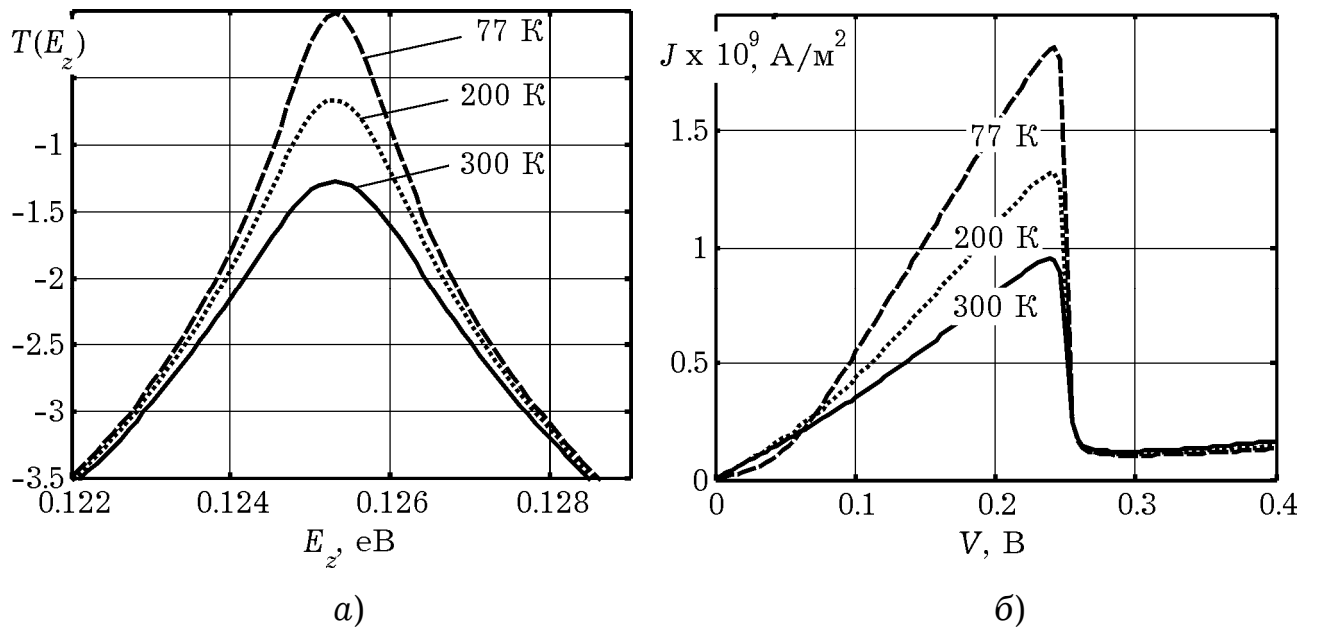


Рис. 3.9. Функція проходження ДБКС $T(E_z)$ (а) та ВАХ резонансно-тунельного діоду (б) за різних температур.

Концентрація донорних домішок N_D в межах прийнятих наближень безпосередньо впливає лише на рівень Фермі електронів в резервуарах E_F , який, в свою чергу, визначає густину струму та форму ВАХ. Для вироджених колективів, що зазвичай має місце в реальних РТД, та для температури, вищої за температуру іонізації

домішок, можна вважати, що $E_F \sim (N_D)^{2/3}$. Користуючись оціночною формулою (2.7), маємо: $J_{\max} \sim E_F \sim (N_D)^{2/3}$. При збільшенні концентрації збільшується також і струм долини (рис. 3.10).

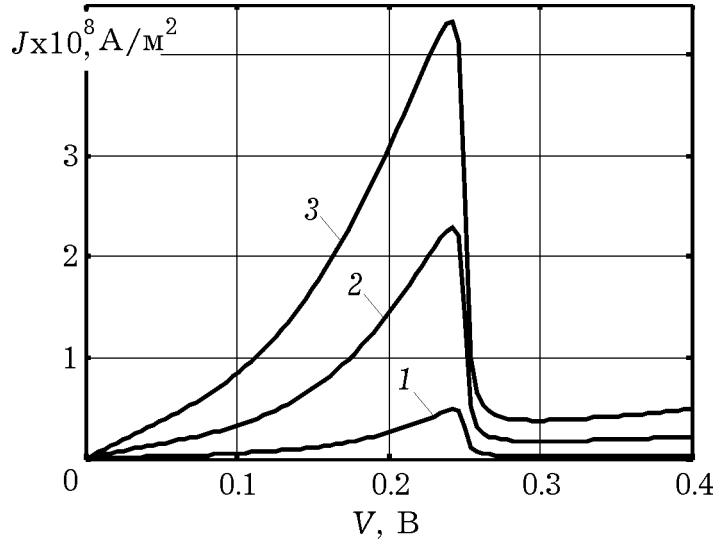


Рис. 3.10. Вольт-амперна характеристика РТД з різними концентраціями донорної домішки N_D :

1 – $N_D = 10^{23} \text{ м}^{-3}$, 2 – $N_D = 5 \cdot 10^{23} \text{ м}^{-3}$, 3 – $N_D = 5 \cdot 10^{23} \text{ м}^{-3}$.

3.2. Імітаційне моделювання за допомогою чисельної однодолинної моделі

В даному підрозділі розглядаються можливості однодолинної моделі щодо розрахунку та графічного відображення мікроскопічних величин, що безпосередньо характеризують квантово-розмірні ефекти, а також макроскопічних величин, які розраховуються підсумуванням відповідних мікроскопічних величин за функцією розподілу.

В розд. 2.2 в рамках однодолинної моделі розраховуються такі *мікроскопічні* величини, що мають безпосередній фізичний зміст:

1. *Локальна густина електронних станів* за z -складовою енергії $g(E_z)$, що визначається формулою:

$$g(E_z, z) = \frac{\sqrt{2m^*}}{\hbar} \left(\frac{|\psi_L(E_z, z)|^2}{\sqrt{E_z - U_{i0}}} + \frac{|\psi_R(E_z, z)|^2}{\sqrt{E_z - U_{i5}}} \right).$$

Можна також ввести густину станів окремо для електронів, що походять з лівого (правого) резервуарів:

$$g_{L(R)}(E_z, z) = \frac{\sqrt{2m^*}}{\hbar} \frac{|\psi_{L(R)}(E_z, z)|^2}{\sqrt{E_z - U_{i0(i5)}}}.$$

Фізичний зміст $g(E_z, z)$ аналогічний змісту густині станів у масивних напівпровідниках, однак на відміну від останнього залежить від координати та враховує хвильові властивості електрона в явному вигляді через хвильові функції. Репрезентативною є також величина $\tilde{g}(E_z, z) = |\psi_L(E_z, z)|^2 + |\psi_R(E_z, z)|^2$, фізичний зміст якої полягає в тому, що вона пропорційна кількості електронів з енергією E_z в точці z , якщо вважати, що електрони в цю точку можуть потрапити як лівого, так і з правого резервуару, де вони розподілені однаково.

2. *Повна функція розподілу електронів за z -складовою енергією:*

$$N(z, E_z) = g_L(E_z, z)f_L(E_z) + g_R(E_z, z)f_R(E_z) \equiv N_L(E_z, z) + N_R(E_z, z),$$

де $f_{L(R)}$ – розподіл електронів у лівому (правому) резервуарі, який там, згідно припущень, є рівноважним; $N_{L(R)}$ – це підінтегральні вирази у правій частині (2.12), включаючи N'_c .

3. *Коефіцієнт проходження квантової системи $T(E_z)$, що визначає ймовірність проходження всієї квантової системи*

електроном, що має z -складову енергії E_z . Практично $T(E_z)$ в чисельній моделі зручно визначити за формулою

$$T(E_z) = k_R / k_L \cdot |\Psi_N|^2, \quad (3.1)$$

де Ψ_N – хвильова функція електронів, що походять з лівого резервуару на правій границі квантової та класичної областей.

В розд. 2.2 шляхом підсумування відповідних величин за функцією розподілу $N(E_z)$, було також отримано формули для *макроскопічних* величин:

1. *Концентрація електронів* $n(z) = n_L(z) + n_R(z)$, де $n_{L(R)}(z)$ – концентрація електронів, що походять з лівого (правого) резервуарів та визначаються формулами (2.12).

2. *Густина електричного струму* $J(V)$, що може бути визначена в будь-якій точці квантової області чи резервуарів згідно узагальненої формули Цу-Есакі (2.45); оскільки виконується умова консервативності (2.48). Щоб не робити зайвих операцій ми користувалися фактично звичайною формулою Цу-Есакі (1.2), $T(E_z)$ у якій розраховували за формулою (3.1).

Ще одна важлива величина, що може бути віднесена рівною мірою як до мікроскопічних та макроскопічних – потенціальна енергія електрона у полі всіх інших електронів або *енергія Хартрі* $U_s(z) = -eV_s(z)$ займає важливе місце в усвідомленні перерозподілу заряду, який береться до уваги в рамках самоузгодженої моделі. Більшу наочність має повна потенціальна енергія електрона $U(z) = E_C(z) + U_s(z)$ або «*рельєф [дна] зони провідності*».

Кожна зі згаданих величин окрім густини електричного струму не підлягає безпосередньому вимірюванню; для опосередкованого ж необхідні величезні затрати часу та матеріальних ресурсів. Вказані величини дають надзвичайно важливу інформацію про квантово-

розмірні ефекти для широкого класу резонансно-тунельних пристроїв та дозволяють, не вдаючись до реальних експериментів, натомість проводити чисельні. Аналіз чисельних експериментів становить основу для створення більш досконалих пристроїв; при цьому економляться трудові, матеріальні ресурси та час.

Таким чином, чисельні експерименти, у результаті яких отримуємо зазначені величини, можна назвати імітаційним моделюванням (англ. «*simulation*») згідно з визначенням імітації: «імітація – це збагнення суті явища, не вдаючись до експериментів на реальному об'єкті» [107]. При цьому застосування саме імітаційного моделювання обумовлено тим, що аналітичні моделі задовільної адекватності для об'єкту вимірювання стосовно предмету дослідження не можуть бути побудовані. Недоліком імітаційного моделювання є відсутність чітких аналітичних зв'язків між вхідними та вихідними величинами та характеристиками, тому *імітаційному модулюванню має передувати моделювання з використанням аналітичної моделі, у якій вказаний недолік відсутній.*

Для демонстрації можливостей імітаційного моделювання зімітуємо характеристики активної частини резонансно-тунельного діоду, зображеного на рис. 3.11.

На рис. 3.12, а зображено розподіл концентрації електронів та рельєф зони провідності для так званої «несамоузгодженої» моделі, де не враховано вплив просторового заряду на розподіл електронів за енергією, а падіння напруги в області моделювання задається формулою (2.27). Фактично, такі залежності можна отримати і за допомогою методу функцій Ейрі, який, однак, втрачає стійкість за малих напруг (див. розд. 1.3). З цих графіків видно, що: а) врахування взаємодії електронів на рівні Хартрі суттєво змінює їх просторовий розподіл; б) у квантовій ямі відбувається накопичення заряду, причому максимальна концентрація спостерігається поблизу

центру квантової ями; накопичення заряду спостерігається безпосередньо перед ДБКС зі сторони емітера (лівого резервуару).

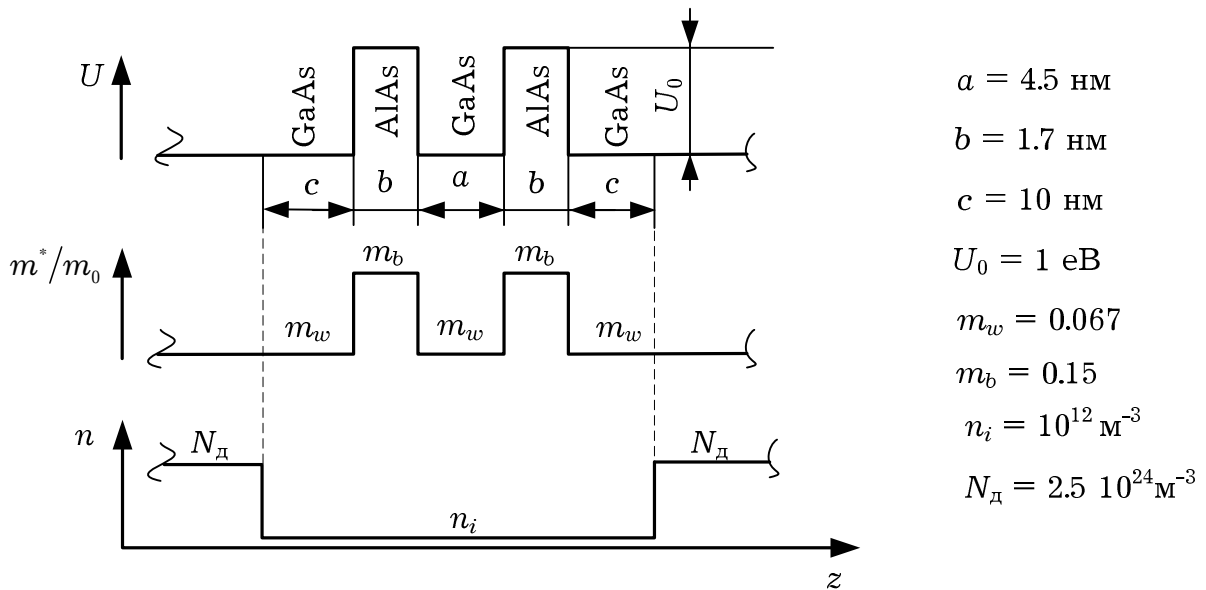


Рис. 3.11. Топологія активної частини модельного резонансно-тунельного діоду.

Пояснити такі особливості розподілу заряду можна, розрахувавши та візуалізувавши залежності $g(E_z)$ та $N(E_z)$ (рис. 3.11).

На рис. 3.13 чітко видно, що в квантовій ямі існують два розмиті – метастабільні рівні енергії, густина станів у яких поводить себе подібно ймовірності знаходження електрона у квантовій ямі з нескінченними бар'єрами, а саме: на першому рівні вона має один максимум, на другому – два і так далі.

З рис. 3.14 видно, що з двох рівнів у квантовій ямі та третього, що частково в ній знаходиться, суттєво заселений при 0.2 В лише перший. Максимум густини станів в цьому рівні знаходиться по центру квантової ями, що й обумовлює відповідний вид $n(z)$.

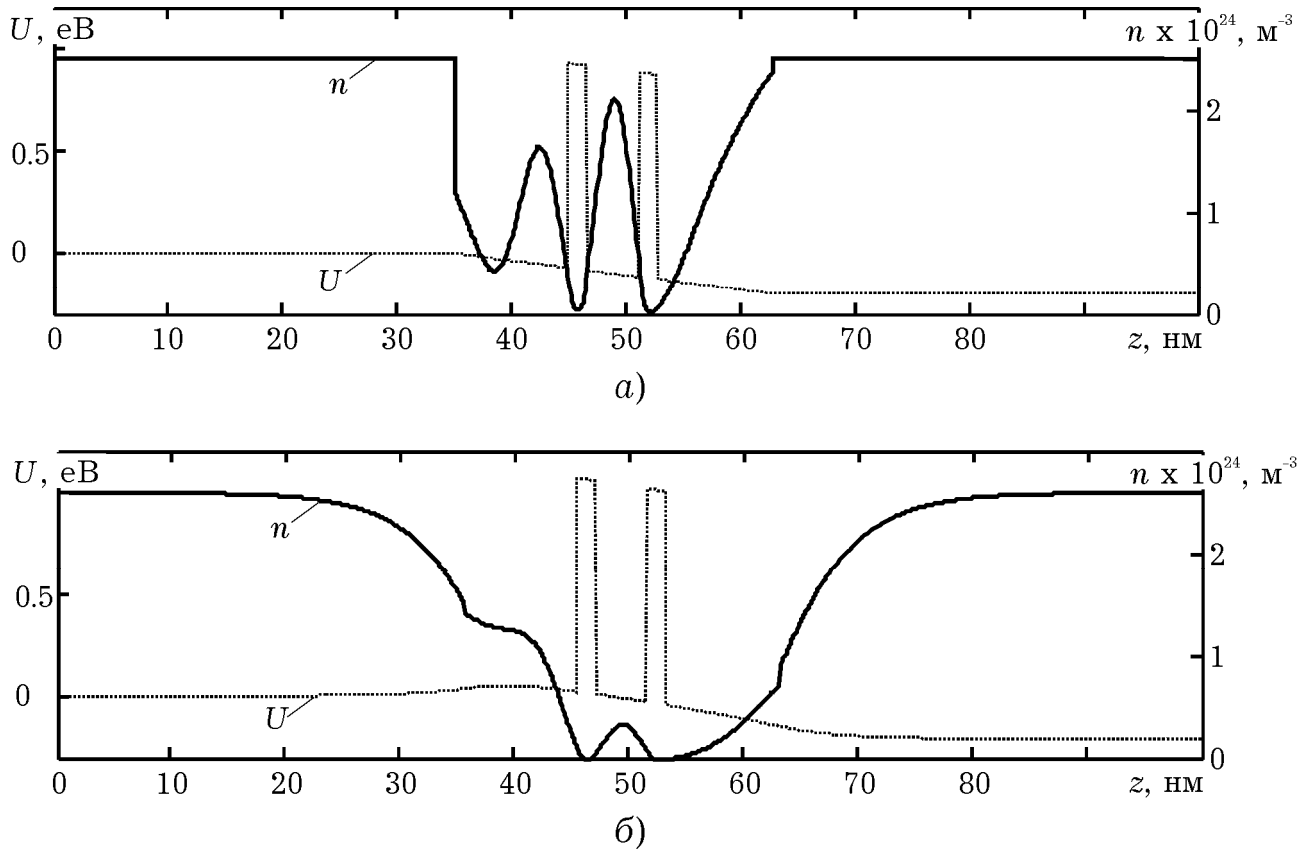


Рис. 3.12. Концентрація електронів в області моделювання, розрахована за допомогою: а) несамоузгодженої моделі; б) самоузгодженої моделі. Прикладена напруга $V = 0.2$ В близька до пікової.

Як видно з порівняння рис. 3.13, а та рис. 3.13, б, врахування міжелектронної взаємодії на рівні Хартрі призводить до збільшення енергії метастабільних рівнів та зменшення падіння напруги на квантовій області.

За рахунок цього густина станів на вищих рівнях суттєво зменшується, а явище резонансного тунелювання має відбуватися при більш високих напругах. Крім того, у випадку самоузгодженого моделювання глибина квазітрикутної потенціальної ями в лівому спейсері («емітерна квантова яма», ЕКЯ) суттєво зменшується.

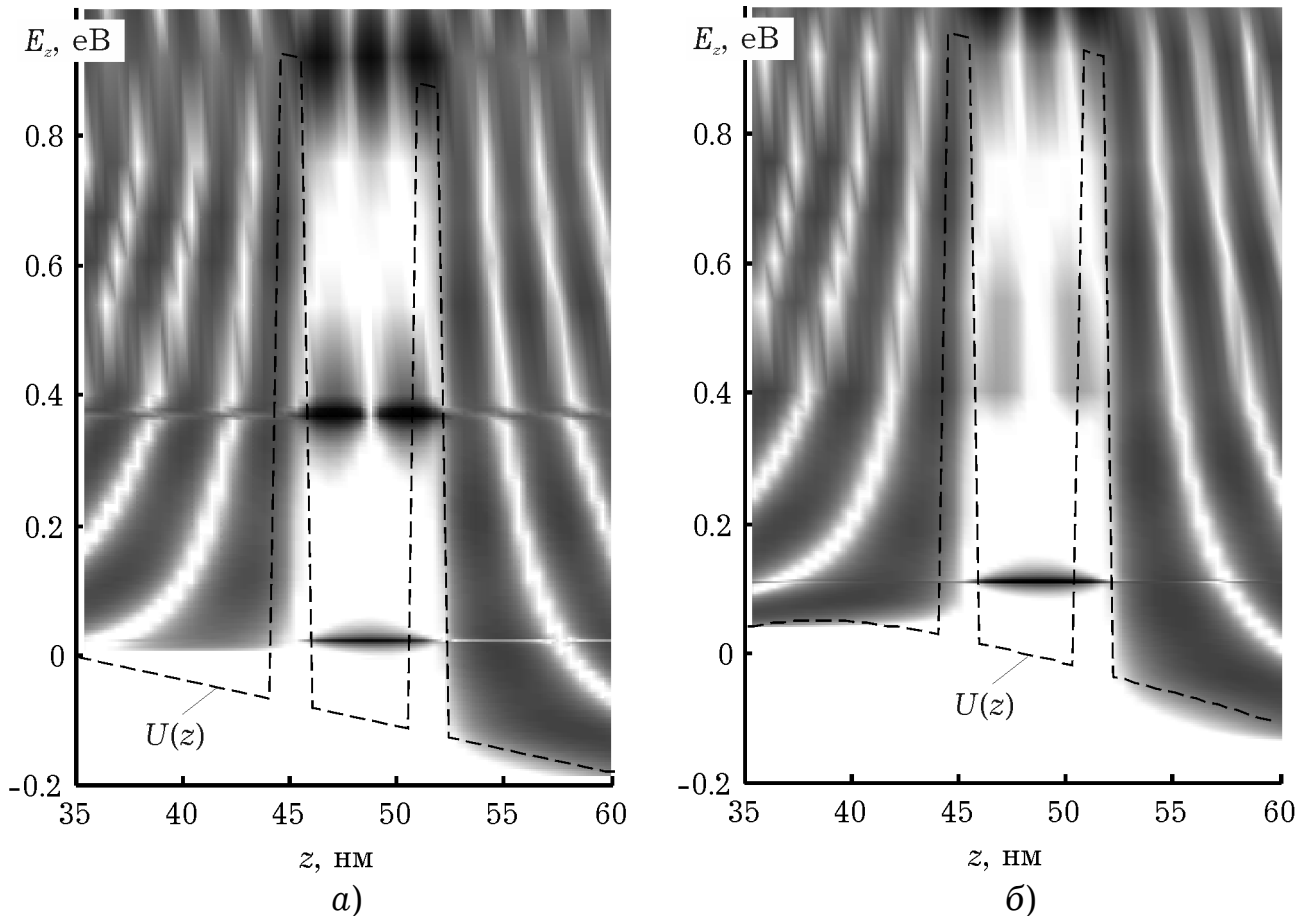


Рис. 3.13. Графіки густини електронних станів: а) наближення лінійного падіння напруги; б) наближення Хартрі. Градації сірого пропорційні логарифму густини електронних станів $\ln \tilde{g}(z, E_z)$. Темнішому кольору відповідає більша густина. Напруга 0.2 В.

З рис. 3.13, стає зрозумілим, чому в лівому спейсері відбувається накопичення заряду з максимумом в точці $z \approx 43$ нм у наближенні лінійного падіння напруги. Дійсно, за рахунок процесів інтерференції електронних хвиль в цій точці утворюється «пучність» стоячої електронної хвилі. У випадку самоузгодженого моделювання цей ефект послаблюється за рахунок модифікації профілю дна зони провідності, що цьому сприяє.

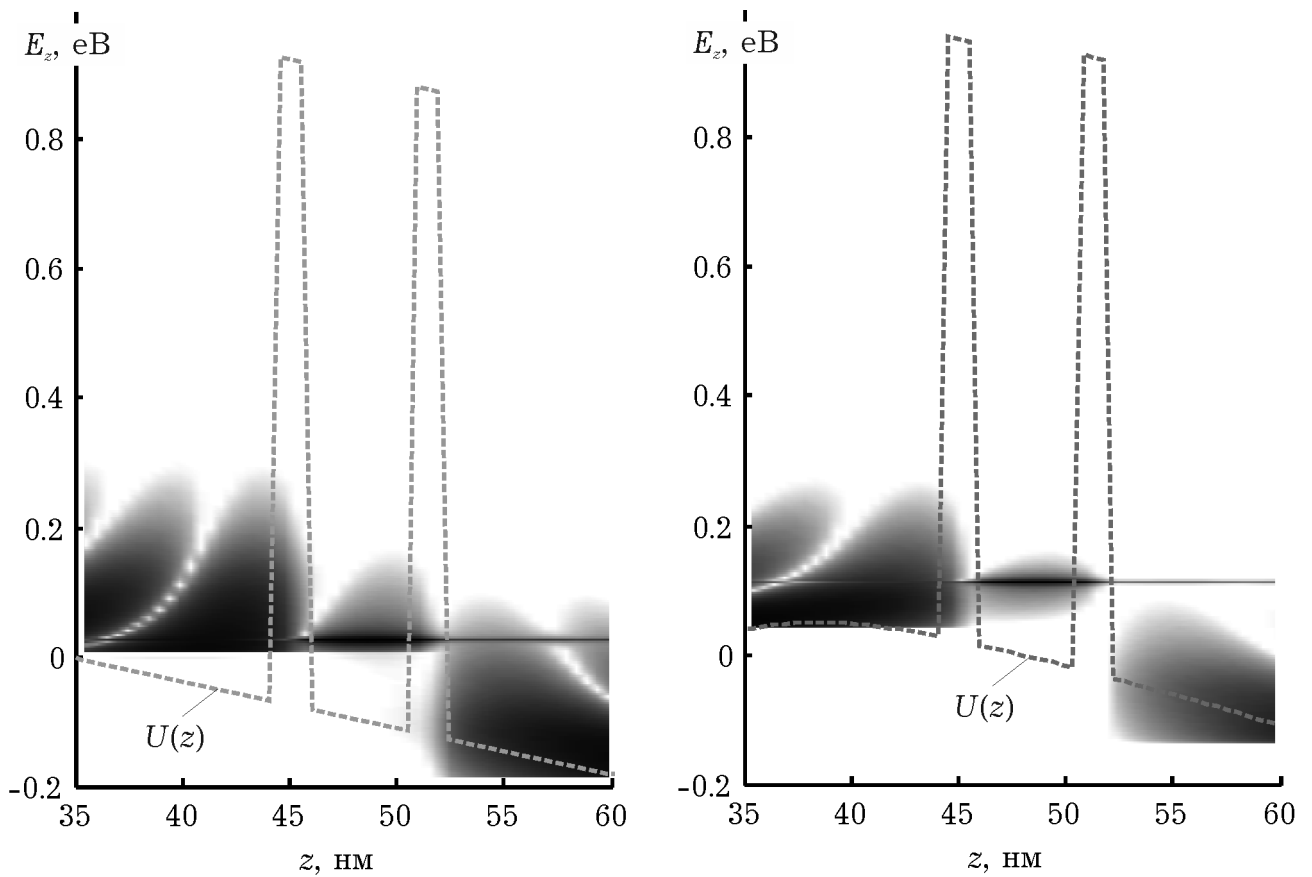


Рис. 3.14. Графіки повної функції розподілу: а) наближення лінійного падіння напруги; б) наближення Хартрі. Градації сірого пропорційні логарифму функції розподілу, $\ln N(z, E_z)$. Темнішому кольору відповідає більше значення N . Напруга 0.2 В.

Підінтегральний вираз у формулі Цу-Есакі (1.2) має дуже різкий резонансний характер за рахунок функції $T(E_z)$, тому інтегрування звичайними чисельними методами вкрай неефективне. Відтак, слід використовувати методи з адаптивним підбором кроку, наприклад алгоритм Сімпсона, що в пакеті *MatLab* реалізується функцією *quad*. Графік функції $T(E_z)$, що розрахована в точках, у яких розраховувались значення підінтегральної функції (1.2) для взяття відповідного інтегралу за допомогою адаптивного алгоритму Сімпсона зображено на рис. 3.15.

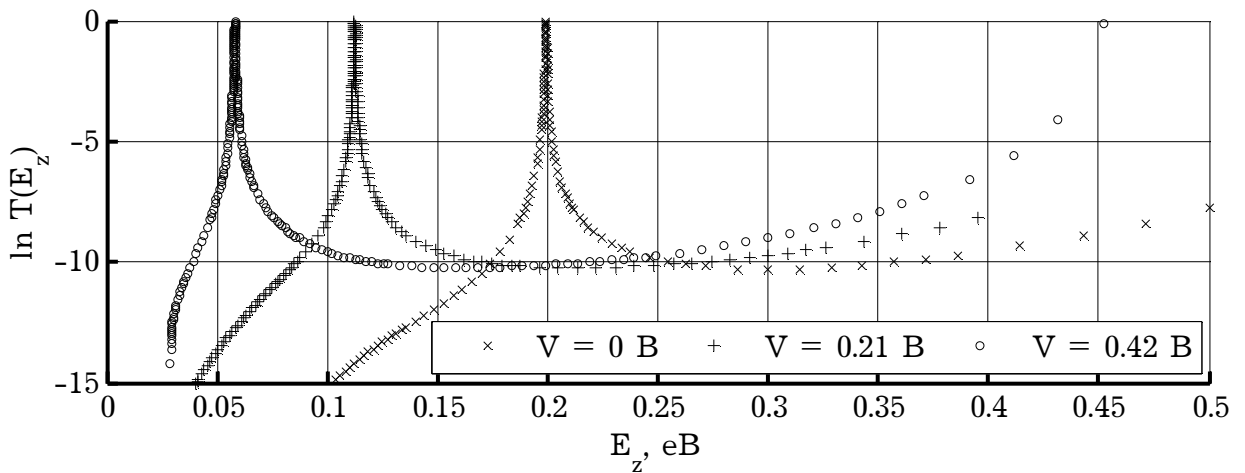


Рис. 3.15. Коефіцієнт проходження через квантову систему в релевантних для розрахунку ВАХ точках.

Вольт-амперна характеристика РТД, що розрахована з самоузгодженням та без нього, зображена на рис. 3.16. Орієнтовний час розрахунку 100 точок ВАХ в *MatLab* без самоузгодження складає 90 с, з самоузгодженням – 3000 с.

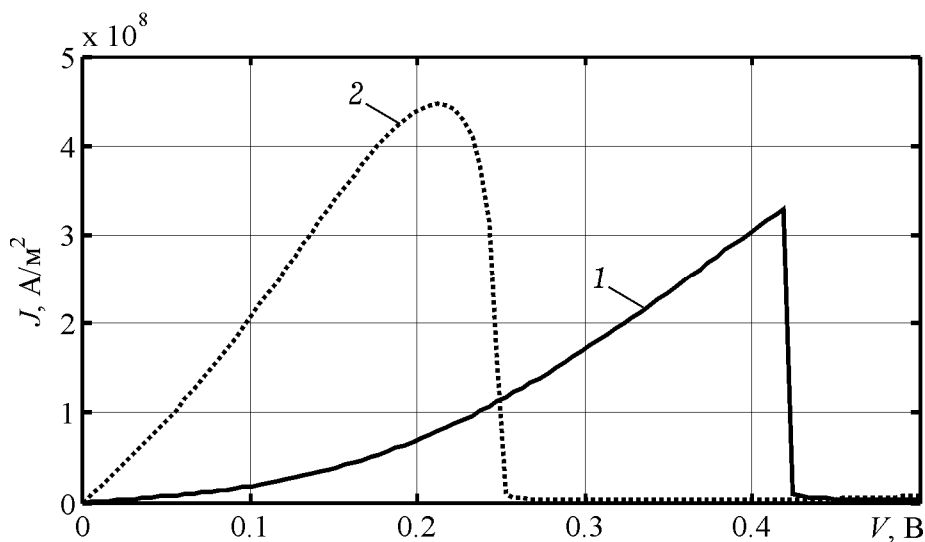


Рис. 3.16. Вольт-амперна характеристика РТД: 1 – з врахуванням; 2 – без врахування просторового заряду.

Як бачимо, врахування просторового заряду призводить до збільшення пікової напруги та зменшення пікового струму. Це пояснюється накопиченням негативного просторового заряду в спейсерах та квантовій ямі, що збільшує потенціальну енергію електрона, тим самим «піднімаючи» всі енергетичні рівні в квантовій ямі, а це зміщує умову резонансу в бік більш високих напруг.

3.3. Вплив найближчої вищої долини на характеристики РТД в рамках дводолинної моделі

При імітаційному моделюванні за допомогою двозонної моделі з'являються як нові вхідні, так і нові вихідні величини. Список вхідних параметрів на рис. 3.11 слід вибрати наступними:

1. Відстані між долинами в AlAs та GaAs, що взяті з табл. 3.1:

$$E_{\text{GaAs}}^{\Gamma\text{X}} = 0.49 \text{ eV}, \quad E_{\text{AlAs}}^{\text{X}\Gamma} = 0.73 \text{ eV}.$$

2. Ефективна маса в X- долині, що орієнтована в напрямку росту, співпадає з кристалографічним напрямком [001], який в свою чергу співпадає з віссю $0z$, вздовж якої відбувається електронний транспорт. В силу орієнтації означених долин, ефективні маси в напрямку [001] дорівнюють поздовжнім ефективним масам у цих долинах [23]: $m_{\text{GaAs}}^{\text{X},*} / m \equiv m_{\text{GaAs}}^{\text{X}} = 1.3$, $m_{\text{AlAs}}^{\text{X},*} / m \equiv m_{\text{AlAs}}^{\text{X}} = 0.97$, значення яких взято з [93, 92].

3. Параметр міжзонної взаємодії $\alpha = 0.15 \text{ eV}\cdot\text{\AA}$ [50].

Вихідними величинами в двозонній моделі є:

1. Густина станів та функція розподілу окремо по кожній із долин: $g^{\Gamma(\text{X})}(E_z, z)$, $N^{\Gamma(\text{X})}(E_z, z)$, що визначаються та мають такий самий смисл, що і в однодолинній моделі.

2. Концентрації електронів в X- та Γ - долині: $n^{\Gamma(\text{X})}(z)$, сума яких становить повну концентрацію $n(z)$.

3. Коефіцієнти проходження квантової системи з Γ в Γ -долину $T^{\Gamma\Gamma}$ та з Γ в X -долину $T^{\Gamma X}$, що визначаються за формулами (2.60) та (2.61).

4. Рельєф зони провідності $U^{\Gamma}(z)$ та $U^X(z)$.

5. Струми, що протікають по каналам $\Gamma X\Gamma$ та ΓX , $J^{\Gamma X\Gamma}$ та $J^{\Gamma X}$, і їх сума J .

Функція проходження електрона через квантову область РТД $T(E_z)$ при врахуванні Γ - X розсіювання (рис. 3.17) зазнає якісних змін, що представляють інтерес як з фундаментальної, так і з прикладної точки зору. Резонансний характер, що властивий однодолинній функції передачі загалом зберігається (рис. 3.18). Однак з'являються додаткові резонанси та антирезонанси з несиметричним профілем. Відомо, що такого типу резонанси можуть проявлятися у фізичних системах різноманітної природи; їх загальна назва – резонанси Фано [108]. Вони виникають, коли має місце інтерференція двох хвильових процесів. В даному випадку йдеться про інтерференцію станів електрона в Γ - та X -долині. В термінах квантової механіки можна сказати, що електрон з енергією E_z знаходиться у стані, що є суперпозицією станів в Γ - та X -долинах.

Ключем до розуміння залежності $T(E_z)$ можуть бути графіки, що зображають розподіл густини електронних станів у Γ - та X -долині, $g_{\Gamma(X)}(E_z)$ – рис. 3.19, а(б). З них видно, що більш широкі максимуми коефіцієнту проходження (1-й та 4-й) відповідають метастабільним станам у квантовій ямі, яка формується в Γ -долині, а вузькі несиметричні резонанси та антирезонанси (2-й та 3-й максимуми та мінімуми, що за ними слідує) спостерігаються при енергіях, що відповідають метастабільним рівням у квантовій ямі, що формується в X -долині.

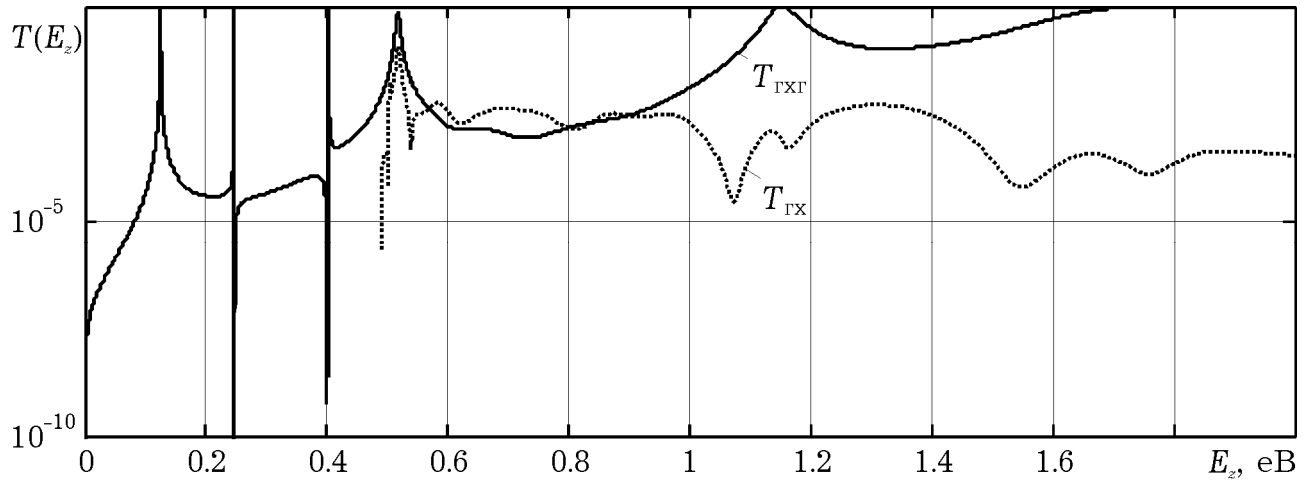


Рис. 4.16. Коефіцієнти проходження $T_{\Gamma\text{X}\Gamma}$ та $T_{\Gamma\text{X}}$, розраховані методом матриць передачі в рамках двозонної моделі за нульової напруги.

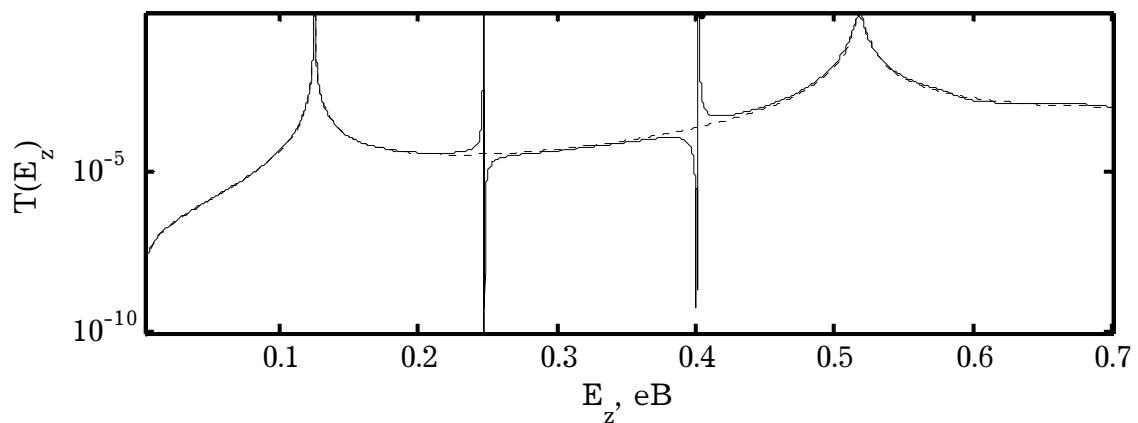


Рис. 3.18. Порівняння коефіцієнту проходження однодолинної T^{Γ} та двохдолинної $T^{\Gamma\text{X}\Gamma}$ моделі (суцільна лінія). Розрахунки здійснювалися методом матриць передачі за нульової напруги.

Виявлені метастабільні рівні є додатковими каналами переносу струму через вказану структуру. Комплексний аналіз графіків на рис. 3.20 показує, що при напрузі, близькій до пікової, електронний транспорт відбувається по каналу $\Gamma\text{X}\Gamma$ через перший основний квантовий рівень, центр якого наблизився до дна зони провідності. Також задіяні перший та другий рівні, яким відповідають резонанси

Фано, та інші рівні. Другий резонансний рівень практично не заселений, тому поведінка коефіцієнтів передачі при вищих напругах не є релевантною. Рис. 3.20, б показує також, що має місце накопичення електронів на метастабільних рівнях в Γ -долині, що, однак, не пов'язано зі струмопереносом, оскільки $T^{\Gamma\chi\Gamma}$ за відповідних енергій значно менший за $T^{\Gamma\chi}$.

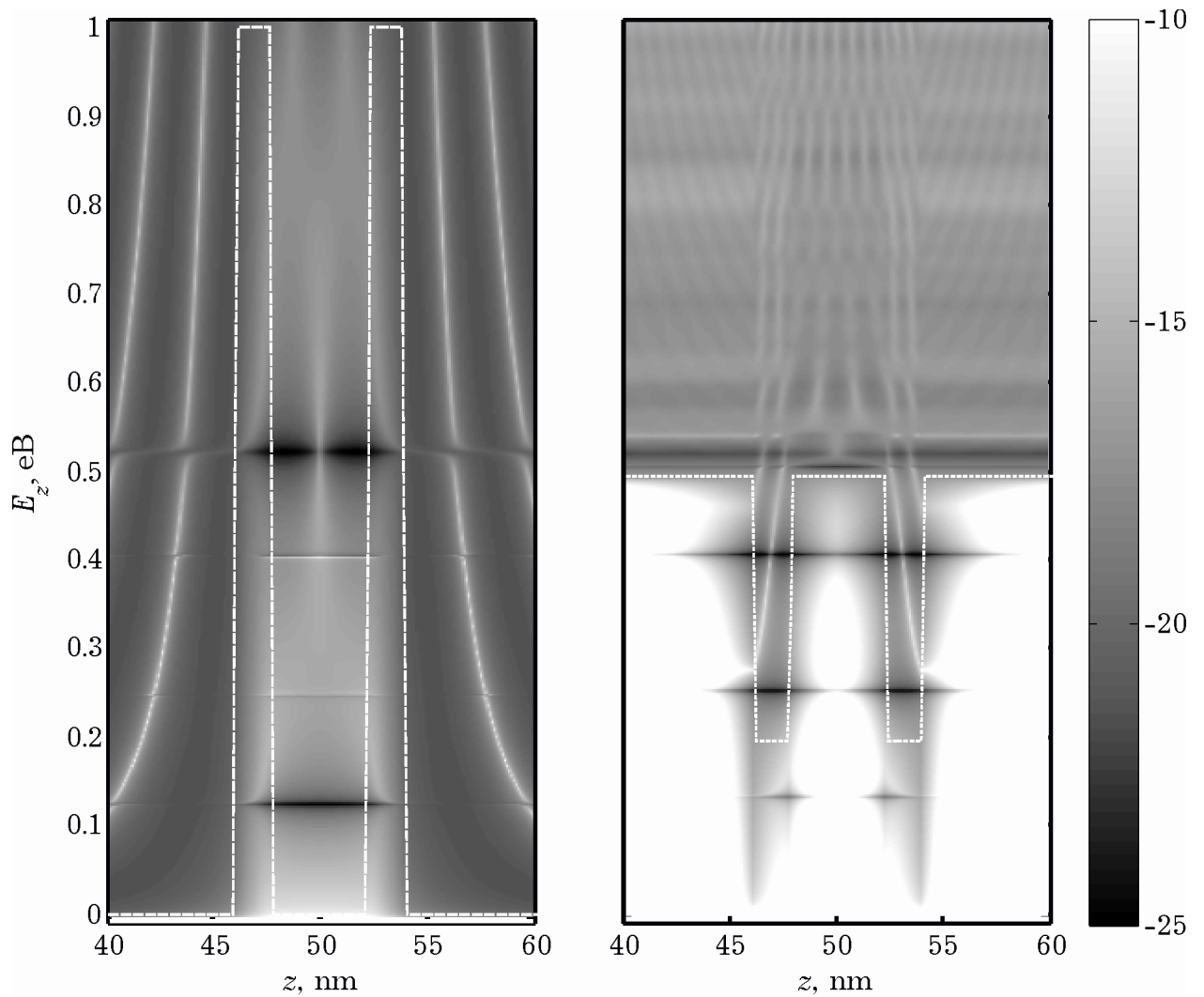


Рис. 3.19. Густина електронних станів у Γ - та χ -долинах (ліворуч та праворуч, відповідно). Темніші градації сірого відповідають більшій густині станів у логарифмічному масштабі.

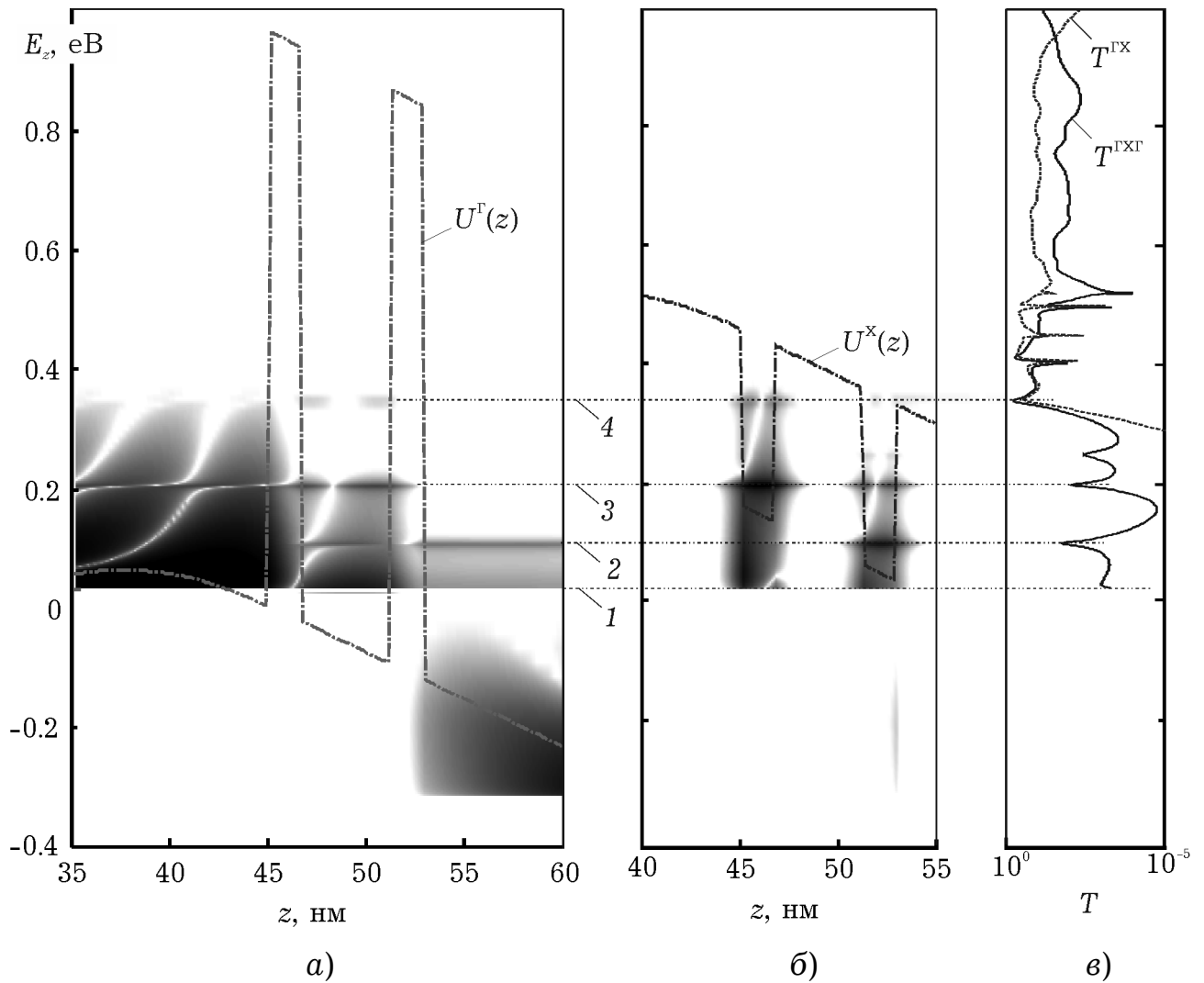


Рис. 3.20. Імітаційне моделювання квантово-розмірних ефектів за допомогою чисельної дводолинної моделі ($V = 0.42$ В): а) $N^\Gamma(z, Ez)$; б) $N^X(z, Ez)$; в) $T^{\Gamma X \Gamma}$ та $T^{\Gamma X}$. Позначення: 1 – дно зони провідності лівому резервуарі, 2,3 – інтерференційні рівні, 4 – другий основний рівень. Принцип забарвлення такий же, як на рис. 3.19.

На вольт-амперній характеристиці врахування Γ - X розсіювання не зумовлює появу додаткових піків, хоча якби параметр α мав більше значення або при іншій геометрії діоду, це цілком могло б спостерігатися, як це показано в [8]. Натомість спостерігається підвищення густини струму як у долині, так і в пікові ВАХ, що наближає результати моделювання до значень струму, що спостерігаються на практиці (рис. 3.21).

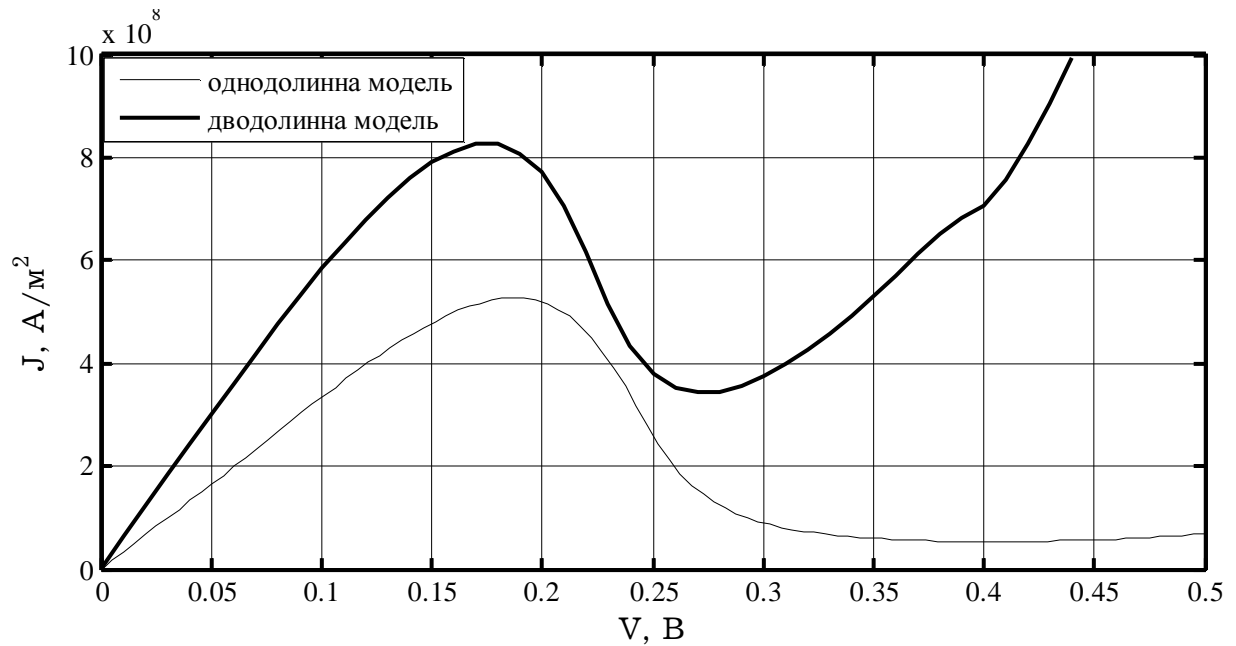


Рис. 3.21. ВАХ РТД при однодолинному та дводинному моделюванні (товста лінія). Параметр $\alpha = 1 \text{ eV \AA}$. Моделювання несамоузгоджене.

3.4. Вплив розсіювання, паразитних опорів, форми бар'єрів та емітерних станів на характеристики РТД

3.4.1. Розсіювання та некогерентний канал переносу

Для моделювання розсіювання в квантовій ямі необхідно додати до вхідних величин: а) енергію оптичних фононів $\hbar\omega_{op}$ та швидкість розсіювання, S_{op} . У тривимірному GaAs ці параметри мають наступні значення: $\hbar\omega_{op} = 0.036 \text{ eV}$ [93], $S_{op} = 36 \cdot 10^{12} \text{ c}^{-1}$ [7].

До вихідних параметрів моделі додаються некогерентна складова коефіцієнту проходження T_{incoh} та некогерентна складова струму J_{incoh} .

На рис. 3.22, *a* зображено, залежність сумарного коефіцієнту проходження $T(E_z)$ та його складових – ймовірності когерентного $T_{coh}(E_z)$ та некогерентного $T_{incoh}(E_z)$ проходження. Час релаксації τ_p розраховувався за формулою (2.77).

На ВАХ, що відповідає вказаним параметрам розсіювання (рис. 3.22, *б*), чітко помітно як збільшення приблизно на порядок стуму долини, так і збільшення приблизно на 20% пікового струму, що пояснюється наявністю провідності в додатковому, некогерентному каналі.

ВАХ, розрахована самоузгоджено, повторює тенденції, які спостерігаються для випадку лінійного падіння напруги. На її графіку (рис. 3.23, *a*) «розпливання» піку ще більш виражене, ніж на попередньому графіку. Це пояснюється збільшення області перекриття заселених рівнів у емітері та ямі за рахунок збільшення ширини метастабільного рівня енергії у ямі. Слід зазначити, що збіжність лінеаризованого методу Гумеля по пошуку самоузгодженого потенціалу значно сповільнюється в області з від'ємною диференціальною провідністю (ВДП) порівняно з областями додатної диференціальної провідності (ДДП). Для досягнення точності 10^{-4} еВ в області ВДП потрібно в середньому 30 ітерацій тоді як в області ДДП середня кількість таких ітерацій складає 10. При цьому, якщо не зменшити абсолютну похибку обчислення інтегралу концентрації до 10^{17} м^{-3} , алгоритм Гумеля взагалі може не зійтися, при цьому одні й ті ж наближення самоузгодженого потенціалу повторюються через одну (іноді – дві, три) ітерації, так і не досягаючи заданої точності. Це означає, що незначні зміни концентрації електронів у активній області РТД призводять до значних змін самоузгодженого потенціалу, який визначає струм. Звідси можна зробити висновок, що в перехідних процесах, де розподіл об'ємного заряду в часі змінюється, область

ОДП буде областю *нестабільності*, оскільки за однієї і тої самої напруги при майже однакових концентраціях струму може сильно відрізнятись. Описане явище дійсно спостерігається на практиці [109].

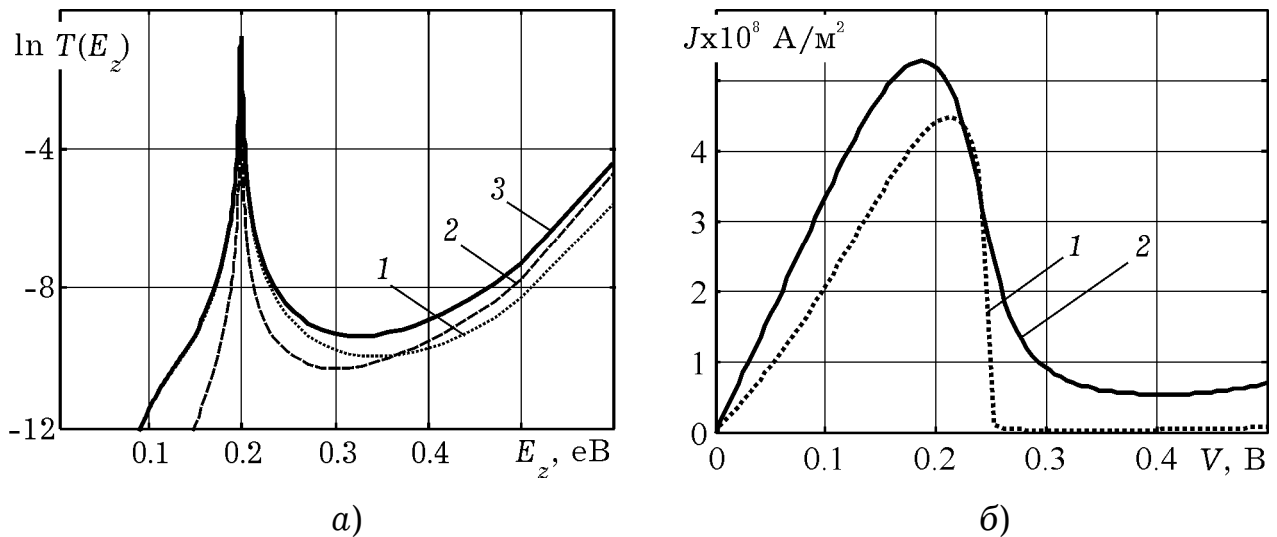


Рис. 3.22. Вплив розсіювання на характеристики РТД: а) коефіцієнти проходження ($V = 0$): 1 – T_{incoh} , 2 – T_{coh} , 3 – $T \equiv T_{incoh} + T_{coh}$; б) вольт-амперна характеристика: 1 – без, 2 – з врахування розсіювання. Моделювання проводилося несамоузгоджено.

3.4.2. Вплив паразитного опору на вольт-амперну характеристику

З формули (2.80) випливає, що зі збільшення опору високолегованих областей пікова напруга зміститься у область більш високих напруг. При цьому напруга долини зменшиться на меншу величину, що призводить до зростання значення від'ємного диференціального опору. Це може також призвести до нестабільності, якщо величина паразитного опору перевищить певне значення. Слід відзначити, що нестабільність підтверджена експериментальними даними [110, 15] та проявляється на практиці

як гістерезис на ВАХ та іноді також називається „тристабільністю” [110]. Вплив паразитних опорів на вольт-амперну характеристику РТД відображено на рис. 3.23, б.

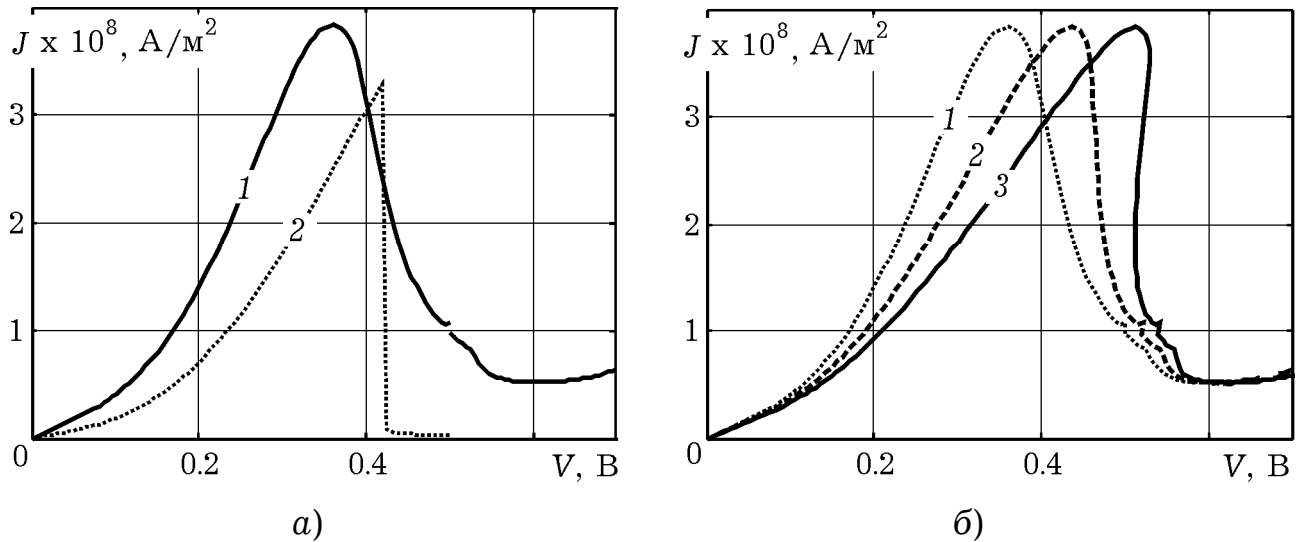


Рис. 3.23. Вольт-амперні характеристики РТД: а) порівняння ВАХ, розрахованих з врахуванням (1) та без врахування просторового заряду (2); б) ВАХ з урахуванням самоузгодження та за різних значень сумарного погонного паразитного опору:

$$1 - R_s = 0, 2 - R_s = 2 \cdot 10^{-11} \text{ Ом} \cdot \text{м}^2, 3 - R_s = 4 \cdot 10^{-11} \text{ Ом} \cdot \text{м}^2.$$

При поганій якості контактів опір паразитних областей може виявитися нелінійним, що, згідно з експериментальними даними має місце, наприклад в [105], [104]; при цьому в [104] пікова напруга для РТД з рис. 3.24 при одній з полярностей напруги джерела живлення на 1.4 В перевищила вказану напругу при іншій полярності та досягала 2.5 В. Характер такої залежності не може бути пояснений, якщо користуватися припущенням про лінійність опору контактних областей.

3.4.3. Врахування реальної форми бар'єрів

Врахування реальної форми бар'єрів за допомогою «надрешіткової» моделі [85] призводить до збільшення густини струму через резонансно-тунельний діод за рахунок підвищення проникності бар'єрів (рис. 3.24, б). Параметри згаданої моделі, які було взято з [92, 93], показані на рис. 3.24, а. Положення рівня $\Gamma_1^{(1)}$ $E_{\Gamma_1} = 0.3406$ еВ, положення рівня $\Gamma_1^{(2)}$ $E_{\Gamma_2} = 0.3864$ еВ; ширина $a = 0.5653$ нм – стала решітки GaAs. Сірим кольором зображена область бар'єрних шарів. Стала міждолинної взаємодії $\alpha = 0.15$ еВ·Å.

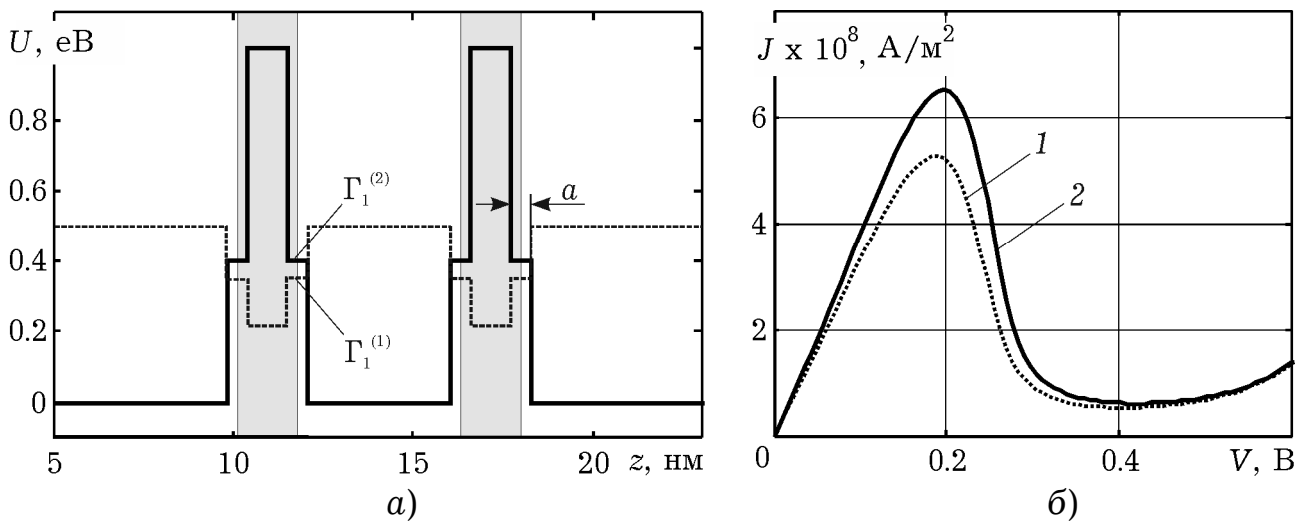


Рис. 3.24. «Надрешіткова» модель гетерограниці (а) та результати моделювання ВАХ з її використанням (б): 1 – стандартна модель, 2 – «надрешіткова» модель гетерограниці. Моделювання несамоузгоджене з урахуванням розсіювання.

3.4.4. Вплив емітерних станів на квантово-розмірні та транспортні явища в РТД

Згідно моделі, запропонованої в розд. 2.4.4, електронний транспорт через метастабільні стани, що формуються в емітерній квантовій ямі (ЕКЯ) може бути описаний завдяки введенню так

званого «віртуального резервуара», який моделює ті електрони, які розсіюються в ЕКЯ. Додаткові параметри модельної конструкції (рис. 3.11) такі: час релаксації енергії $\tau_E = 1$ пс, ширина віртуального бар'єру $d = 1$ нм. Моделювання здійснювалося *несамоузгоджено* з урахуванням розсіювання в квантовій ямі, швидкість якого $S_{op} = 24 \cdot 10^{12} \text{ с}^{-1}$ (див. (2.77)) Шляхом проведення чисельного експерименту було визначено, що основний пік спостерігається за напруги $V = 0.2$ В, область плато простирається від 0.26 В до 0.31 В, а при $V = 0.46$ В спостерігається мінімум залежності $J(V)$ – «долина» (рис. 3.25, а).

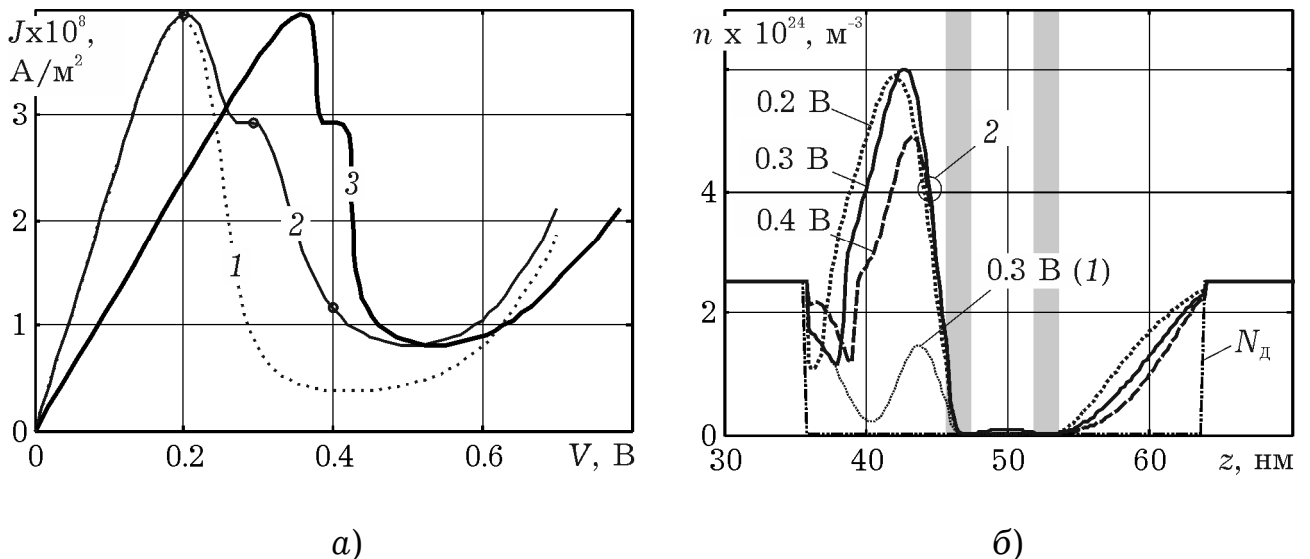


Рис. 3.25. Формування області плато: а) ВАХ резонансно-тунельного діоду 1 – без врахування транспорту через стани в ЕКЯ, 2 – з врахуванням транспорту через ЕКЯ, а також 3 – паразитного опору при $R_s = 4 \cdot 10^{-11} \text{ Ом} \cdot \text{м}^2$; б) концентрація електронів за різних напруг для випадку (1) та (2). Сірим кольором позначені бар'єрні шари.

Струм через емітерну квантову яму суттєвий лише в області від'ємної диференціальної провідності та «долини». Зі збільшенням напруги вище «долинної» його вплив згаданої компоненти струму послаблюється. Концентрація електронів в ЕКЯ при врахуванні

накопичення електронів, що потрапляють туди внаслідок непружного розсіювання (термалізації) з області емітера, зростає у кілька разів (рис. 3.25, б). Найбільш вагомими процеси електронного транспорту за участю емітерних електронних станів стають, коли метастабільні рівні у ЕКЯ та основній квантовій ямі (ОКЯ) максимально перекриваються (рис. 3.26, а). Для цього випадку коефіцієнт проходження має максимум за енергії, що нижча дна зони провідності в лівому резервуарі (рис. 3.26, б). Саме за рахунок наявності цього різкого максимуму інтеграл у формулі Цу-Есакі суттєво збільшується, призводячи до появи артефактів на ВАХ.

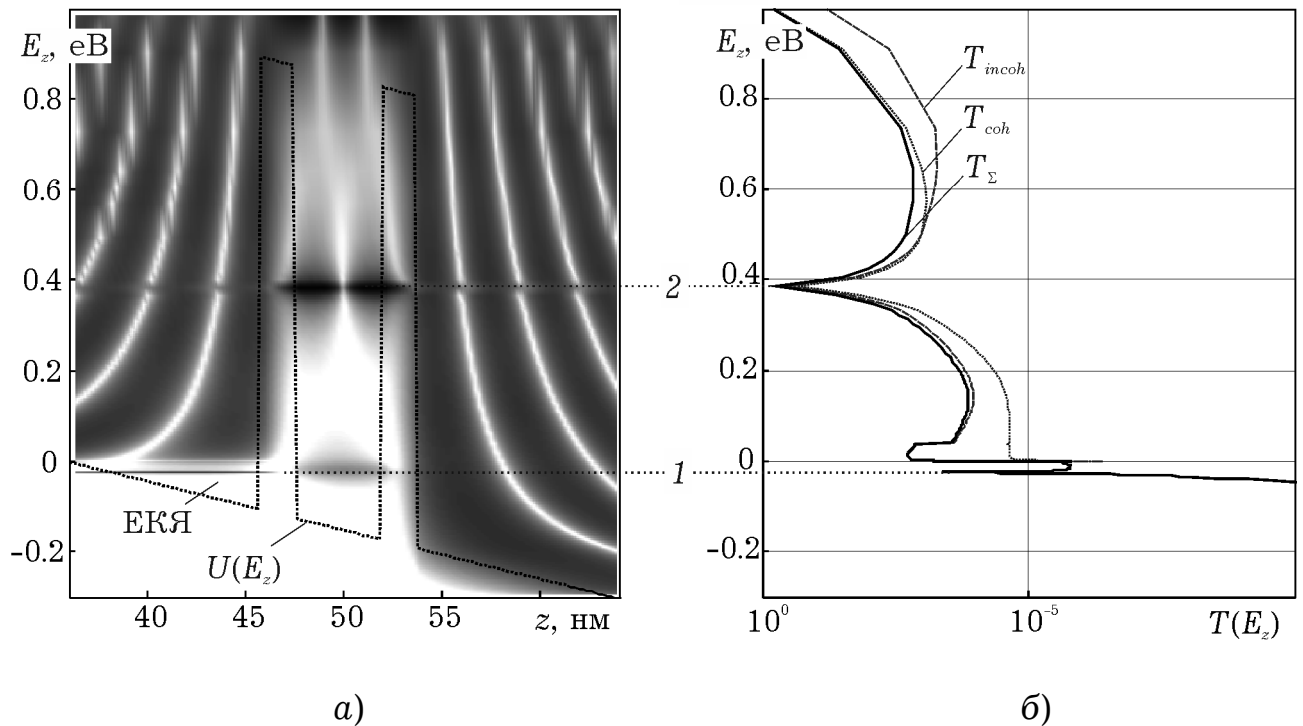


Рис. 3.26. Рівень енергії в ЕКЯ співпадає з рівнем енергії в основній квантовій ямі (область плато, $V = 0.3$ В): а) локальна густина станів $g(z, E_z)$; б) коефіцієнт проходження всієї квантової системи. Цифри «1» та «2» позначають рівні енергії, які відповідають положенню метастабільного рівня в ЕКЯ та другого енергетичного рівня в основній квантовій ямі.

Механізми утворення на ВАХ основного піку та долини при врахуванні ЕКЯ ілюструє рис. 3.27. З нього випливає, що основний пік виникає, коли перший рівень в основній квантовій ямі максимально перекривається з заповненими електронними станами в лівому резервуарі (рис. 3.27, а). Долина ж виникає, коли рівень в ОКЯ опускається нижче, ніж рівень в ЕКЯ (рис. 3.27, б). Цьому передує максимальне перекриття рівнів ЕКЯ та ОКЯ, яке обговорювалося вище.

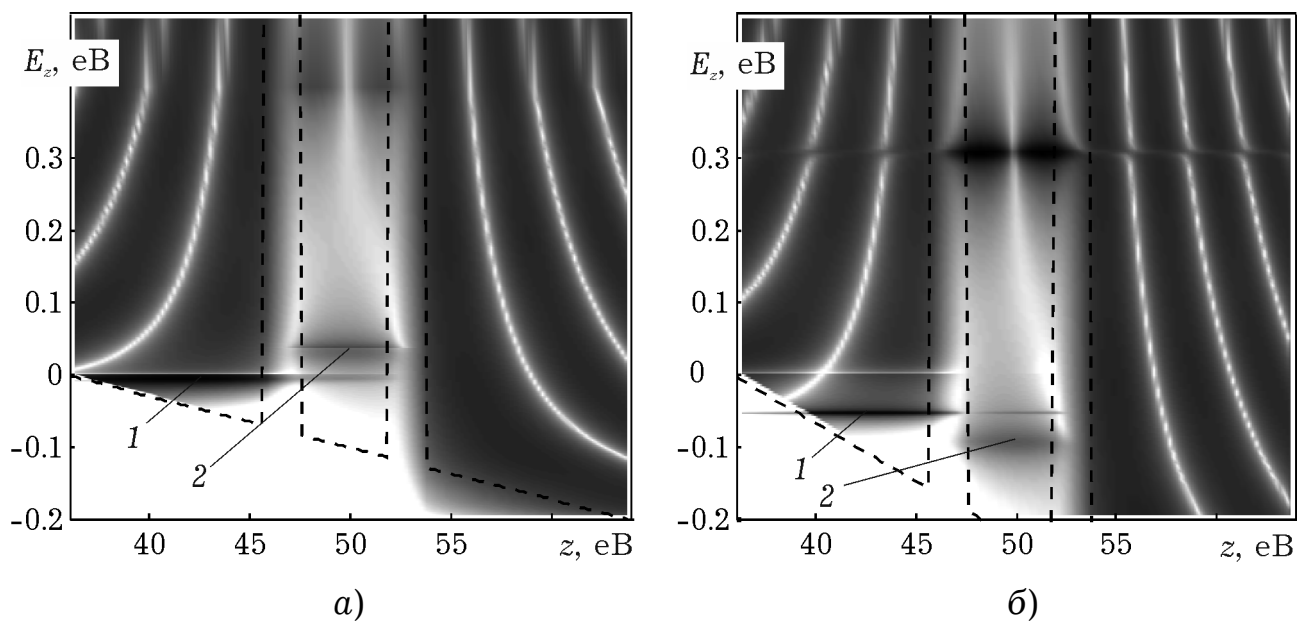


Рис. 3.27. Густина електронних станів $g(z, E_z)$ за межами області «плато»: а) «пікова» напруга, $V = 0.2$ В, б) напруга, що відповідає «долині», $V = 0.46$ В. Позначено: 1 (2)– метастабільний рівень в ЕКЯ (ОКЯ).

3.5. Висновки

Аналітична модель дозволяє отримувати наочну інформацію про основні параметри квантово-розмірних ефектів, як-то: залежність енергії, природного та релаксаційного розширення енергетичних рівнів у квантовій ямі від будь-якого вхідного

параметру, якими є температура, спрощена геометрія пристрою, хімічний склад шарів. Аналітична модель майже не потребує комп'ютерних ресурсів та може бути досліджена методами математичного аналізу.

Можливості з отримання мікроскопічної та макроскопічної інформації про квантово-розмірні ефекти за допомогою розроблених чисельних моделей значно переважають той арсенал графічного відображення, що будь-коли використовувався в рамках методу огинаючої хвильових функцій чи функцій Вігнера. Це дозволяє назвати таке моделювання «імітаційним». Аналіз електронних процесів за допомогою імітаційного моделювання дозволяє відслідковувати навіть ті процеси, спостереження яких на практиці являє собою серйозну наукову проблему, як-от: розподіл електронів між долинами, заселеність долин за різних напруг, тощо. Це вирішує проблему візуалізації квантових процесів, для яких важко знайти наглядні аналоги.

Перерозподіл електронів, як показало самоузгоджене моделювання, призводить до характерних змін ВАХ: зростає пікова напруга, а також підвищується значення ВДП. Це пояснюється «підйомом» потенціального рельєфу в області ДБКС, що зміщує умову резонансу в бік більш високих поперечних енергій та підсилює резонансний характер функції $T(E_z)$. Процес розрахунку самоузгодженого потенціалу збільшує загальний час розрахунку ВАХ приблизно на порядок. Ітераційний процес гірше сходиться поблизу області ВДП.

Моделювання впливу пасивних областей показало подальше зменшення від'ємного диференціального опору аж до формування Z-подібної характеристики (бістабільність ВАХ). Існування цього явища підтверджується численними експериментами, однак в ряді робіт з моделювання уникають розгляду пасивних областей.

Використання розробленої автором «надрешіткової» моделі гетерограниці, показало, як і очікувалося, збільшення пікового струму приблизно на 20% для модельного РТД. Це наближає ВАХ РТД до експериментальних, оскільки усі існуючі моделі дають переважно занижену густину струму.

Моделювання розсіювання електронів в емітерній квантовій ямі показало, що внаслідок непружного розсіювання в метастабільних станах квантової ями накопичуються електрони. Вони мають відмінну від нуля ймовірність тунелювати до основної квантової ями, а звідти – до колектора. Квazідискретність спектру електронів в ЕКЯ призводить до резонансного характеру коефіцієнту проходження розсіяних електронів, що в свою чергу призводить до формування помітної області «плато» на ВАХ РТД. Такі уявлення цілком узгоджуються з нещодавно отриманими експериментальними даними та спростовують декілька раніше висунутих гіпотез про механізм утворення області «плато» на ВАХ РТД.

РОЗДІЛ 4

ІЄРАРХІЧНИЙ ПІДХІД ДО МОДЕЛЮВАННЯ РТД

4.1. Взаємозв'язки між розробленими моделями та формування ієрархічного ряду

4.1.1. Класифікація моделей ієрархічного ряду

Серед розроблених моделей можна виділити три основні типи: аналітичну, чисельні одно- та дводолинну (рис. 4.1). Вони формують основу ієрархічного ряду. Аналітична модель є апроксимацією чисельної однодолинної несамоузгодженої моделі, що справедлива для малих напруг та достатньо широких бар'єрів. Однодолинна модель є апроксимацією дводолинної, коли нехтують міждолинним розсіюванням на гетерограницях, що відповідає нульовому параметру міждолинної взаємодії α , причому це відноситься як до самоузгодженої, так і до несамоузгодженої моделей. Несамоузгоджена модель є апроксимацією самоузгодженої, коли вважається, що потенціал вздовж активної частини РТД спадає лінійно.

В рамках двох ієрархічних типів та, в сумі, чотирьох класів моделей можна виділити моделі підвищеної адекватності, яка досягається чотирма способами: врахуванням розсіювання, опору пасивних областей РТД, реальної форми бар'єрів, а також електронного транспорту через емітерні метастабільні стани.

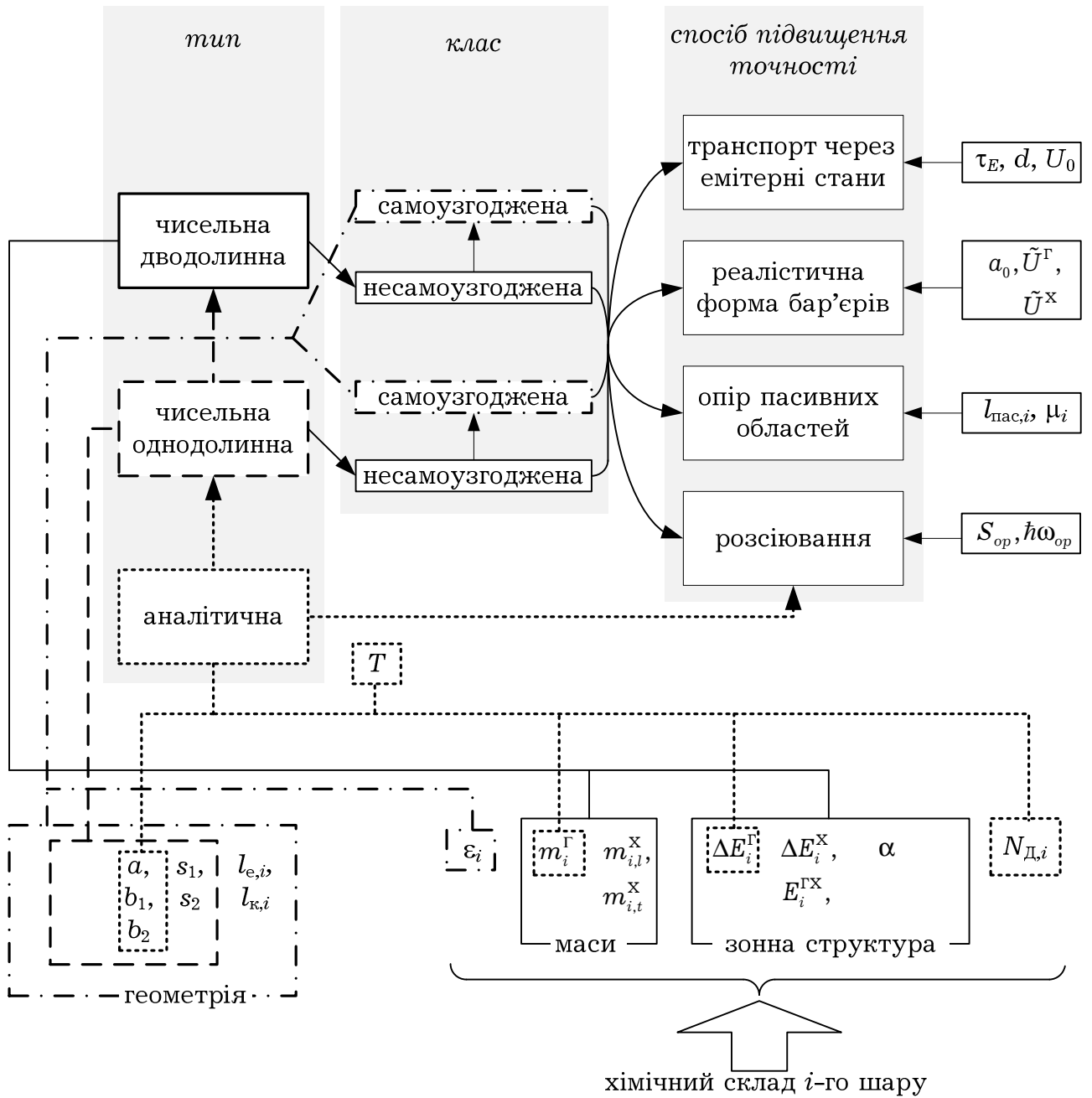


Рис. 4.1. Структура ієрархічного ряду моделей. Праворуч та внизу позначено «вхідні» параметри кожної з моделей. Напрямок стрілок вказує на підвищення адекватності.

4.1.2. Система вхідних та вихідних параметрів моделей ряду

Вхідні параметри.

Як видно на схемі вхідних параметрів (рис. 4.1), моделі, які стоять в ньому вище, включають у себе, крім усіх вхідних параметрів моделі нижчого класу, також деякі додаткові дані. Так, модель найвищого ієрархічного рівня – дводолинна самоузгоджена підвищеної точності з використанням усіх чотирьох способів є вершиною ієрархії та потребує на вході такої інформації:

1. Геометричні розміри шарів гетероструктури: ширина квантової ями a , лівого (правого) бар'єрів/спейсерів $b_1(b_2) / s_1(s_2)$, ширини легованих областей зі сторони емітера (колектора), якщо вони достатньо короткі, а профіль їх легування нерівномірний $l_{e,i}$ ($l_{k,i}$). Цей перелік може бути довшим, якщо РТД складається з більшої кількості бар'єрів або має інші особливості.

2. Хімічний склад напівпровідника та кристалографічна орієнтація підкладки, з якої формуються шари гетероструктури та концентрації донорних домішок в ній N_D , що дають змогу визначити відносні ефективні маси m_i^Γ , $m_{l(t),i}^X$ (індекс « l » (« t ») позначає поздовжню (поперечну) масу), розриви зон $\Delta E_i^{\Gamma(X)}$ та міждолинні відстані $E_i^{\Gamma X}$, діелектричні проникності ϵ_i у кожному i -му шарі, а також параметр міжзонної взаємодії α . Усі загадані параметри є, фактично, емпіричними та залежать, зокрема, від молярної долі x елемента, який визначає потенціальний рельєф.

3. Параметри, які необхідні для використання в методах, що дозволяють підвищити точність та/або адекватність моделювання: швидкість розсіювання S_{op} та енергія полярних оптичних фононів $\hbar\omega_{op}$ – для врахування розсіювання; довжини $l_{пас,i}$ та рухливості

електронів μ_i у кожній i -й пасивній області – для врахування паразитного опору; стала решітки a_0 та проміжні значення розривів зон $\tilde{U}_i^{\Gamma(X)}$ – для більш реалістичного опису розривів зон; час релаксації енергії τ_E , ширину віртуального бар'єру d та його висоту U_0 – для врахування електронного транспорту через ЕКЯ.

Вхідні параметри аналітичної моделі обмежені тими, що обведені пунктирними лініями на рис. 4.27. Їх список найкоротший. Для чисельної однодолинної моделі до згаданих параметрів додаються обведені пунктирною та штрихпунктирною лініями. У всіх моделях фігурує також температура T .

Вихідні параметри та характеристики.

Радикально несхожою на чисельні моделі за характером вихідних характеристик та параметрів є *аналітична модель*. Її функціональність можна назвати найвищою, оскільки вона дозволяє отримувати залежності в аналітичному вигляді, які мають чіткий фізичний смисл та зручні для інтерпретації. Наприклад, це залежності напівширини енергетичних рівнів у ямі та їх положення від будь-якого конструктивного параметру; залежність пікового струму від концентрації донорів та інші характеристики, повний перелік яких подано на рис. 2.2.

Чисельні моделі побудовано так, що до переліку вихідних величин входять найважливіші макроскопічні та мікроскопічні величини, виключний перелік яких наведено в розд. 3.2–3.4. Інтерпретуючи графіки цих величин, що побудовані як функції однієї чи декількох змінних різними способами, можна отримувати дуже важливу та наочну інформацію про квантово-розмірні ефекти та транспортні явища. Однак, інструментів, що дозволяли б отримувати такі графіки, розроблено не було, адже їх отримання на звичайній ЕОМ займало б час, який виходить за межі комфортного часу очікування користувача. Саме тому *перед імітаційним*

моделюванням слід користуватися аналітичною моделлю, щоб розуміти основні тенденції залежностей. А вже потім уточнювати отриману інформацію, користуючись чисельними моделями. Саме в цьому полягає цінність запропонованого методу: *використовувати кращі риси кожної з моделей для досягнення поставленої мети.*

4.1.3. Взаємозв'язки між моделями ієрархічного ряду

Конкретним виявом взаємозв'язків між моделями є співвідношення між характеристиками, які можна розрахувати в рамках кожної з трьох базових моделей: функція проходження електроном ДБКС та вольт-амперна характеристика.

Коефіцієнт проходження. З рис. 4.2 видно, що лоренцеві функції задовільно апроксимують функцію $T(E_z)$, розраховану методом Цу-Есакі, в релевантній області поперечних енергій при нульовій напрузі. Причому максимумами згаданих функцій співпадають з точністю не менше 99,9%. При зростанні напруги апроксимація лоренцевими функціями стає більш грубою, однак тенденції, які характерні для методу функцій Ейрі, зберігаються (рис. 4.3). А більшого від аналітичної моделі й не потрібно.

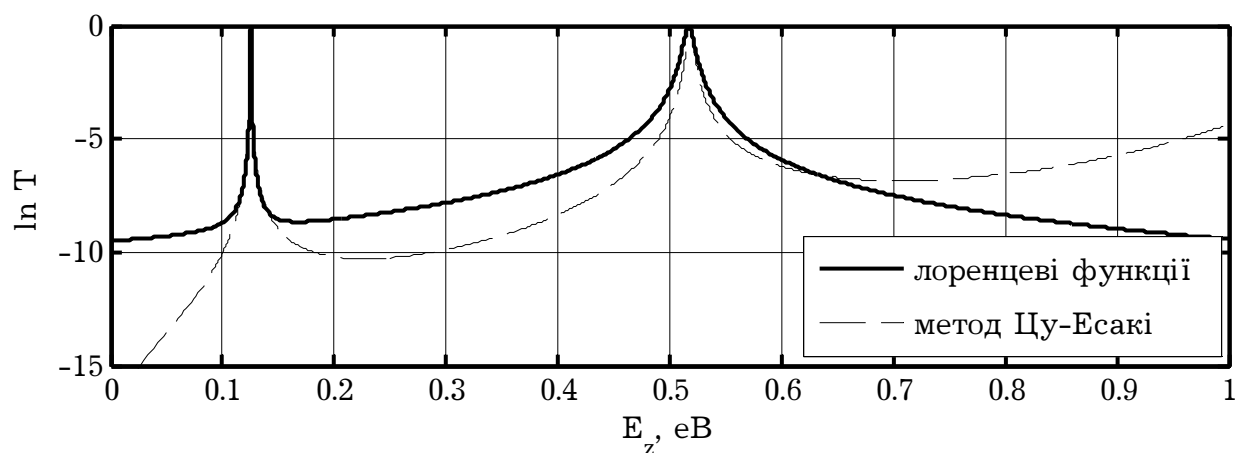


Рис. 4.2. Коефіцієнт проходження РТД $T(E_z)$, розрахований методом Цу-Есакі та методом лоренцевих модельних функцій за нульової напруги для структури з рис. 3.1.

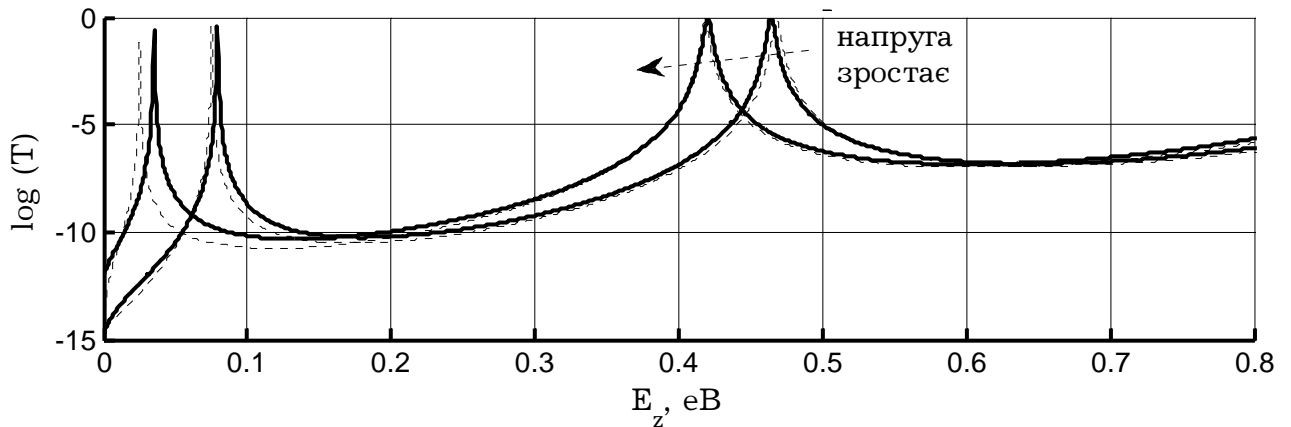


Рис. 4.3. Коефіцієнт передачі за напруги 0.1, 0.2 В, розрахований методом функцій Ейрі (суцільна лінія) та методом Цу-Есакі (пунктирна лінія) для структури, що показана на рис. 3.1.

Використання різноманітних методів підвищення точності впливає на характеристику $T(E_z)$ впливає як зображено на рис. 4.4 для випадку несамоузгодженої моделі. Розглянемо цей вплив по кожному з методів:

1. Врахування розсіювання суттєво розширює резонансний рівень енергії та створює додатковий канал переносу – некогерентний, який для даних параметрів розсіювання ($S_{op} = 36 \cdot 10^{-12} \text{ c}^{-1}$, $\hbar\omega_{op} = 0.036 \text{ eV}$) є домінуючим.

2. Врахування реальної форми гетеропереходів в рамках «надрешіткової» моделі гетерограниці у декілька разів збільшує як проникність ДБКС в когерентному каналі, так і в некогерентному каналі. Це пояснюється збільшенням проникності кожного окремо взятого бар'єру в рамках згаданого методу апроксимації. Також спостерігається незначний зсув резонансу в бік більших енергій, що

легко пояснити в рамках аналітичної моделі: яма стає ефективно менш глибокою, і це «виштовхує» рівні вгору по шкалі енергії.

3. Врахування електронного переносу через енергетичні рівні в ЕКЯ не змінює форму $T(E_z)$ за виключенням енергій, нижчих за дно зони провідності в лівому резервуарі, де ймовірність стає відмінною від нуля (рис. 4.4), а при деякій енергії має різкий максимум (рис. 3.26, б).

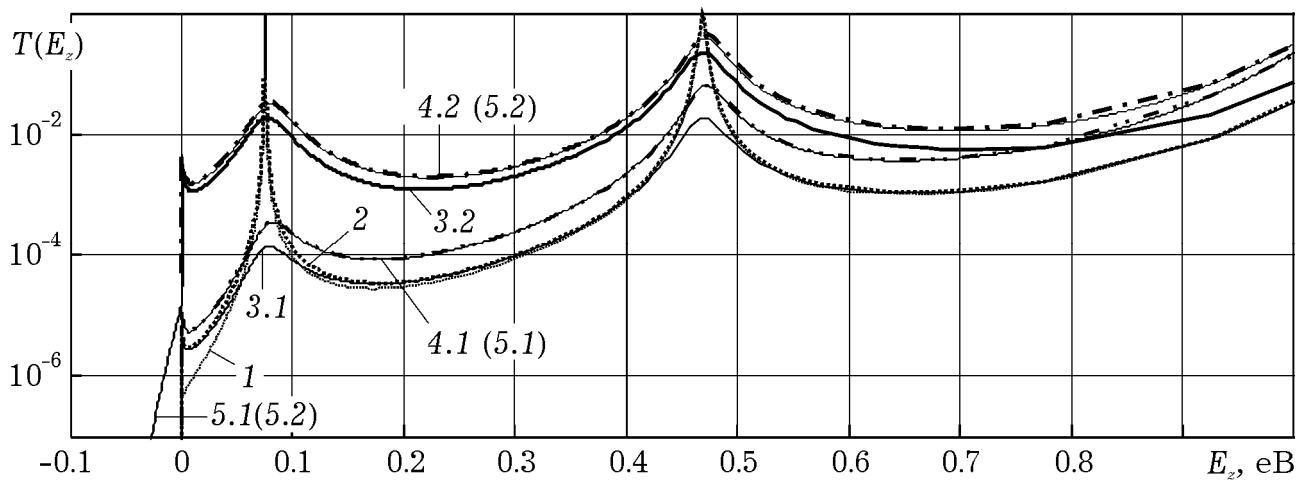


Рис. 4.4. Коефіцієнт проходження, розрахований за допомогою несамоузгоджених однодолинних моделей: 1 – методом функцій Ейрі; 2 – за допомогою базової моделі; 3.1(2) – когерентна (послідовна) складова $T(E_z)$, розрахована в рамках моделі «2» з врахуванням розсіювання, 4.1(2) – з урахуванням реальної форми гетеропереходів в рамках «надрешіткової» моделі, 5.1(2) – з урахуванням транспорту через стани в ЕКЯ.

Розрахована форма вольт-амперної характеристики в рамках моделей різного рівня ієрархії зазнає змін (рис. 4.5), обумовлених, насамперед, відповідними змінами в характеристиці $T(E_z)$. Крім того, відмітимо вплив факторів підвищення точності на ВАХ резонансно-тунельного діоду (див. рис. 4.5):

1. Розсіювання призводить до збільшення струму долини та зміни форми ВАХ на більш пологі, що пояснюється розширенням області резонансу функції $T(E_z)$.

2. Урахування реальної форми бар'єру за допомогою «надрешіткової» моделі призводить до підвищення майже вдвічі пікового струму, а також наполовину збільшує струм долини, залишаючи форму ВАХ практично незмінною.

3. Урахування транспорту через стани в ЕКЯ призводить до появи характерної області «плато», а також до майже стовідсоткового збільшення струму долини.

4. Урахування опору пасивних областей зміщує пік та інші точки ВАХ праворуч та збільшує величину від'ємної диференціальної провідності.

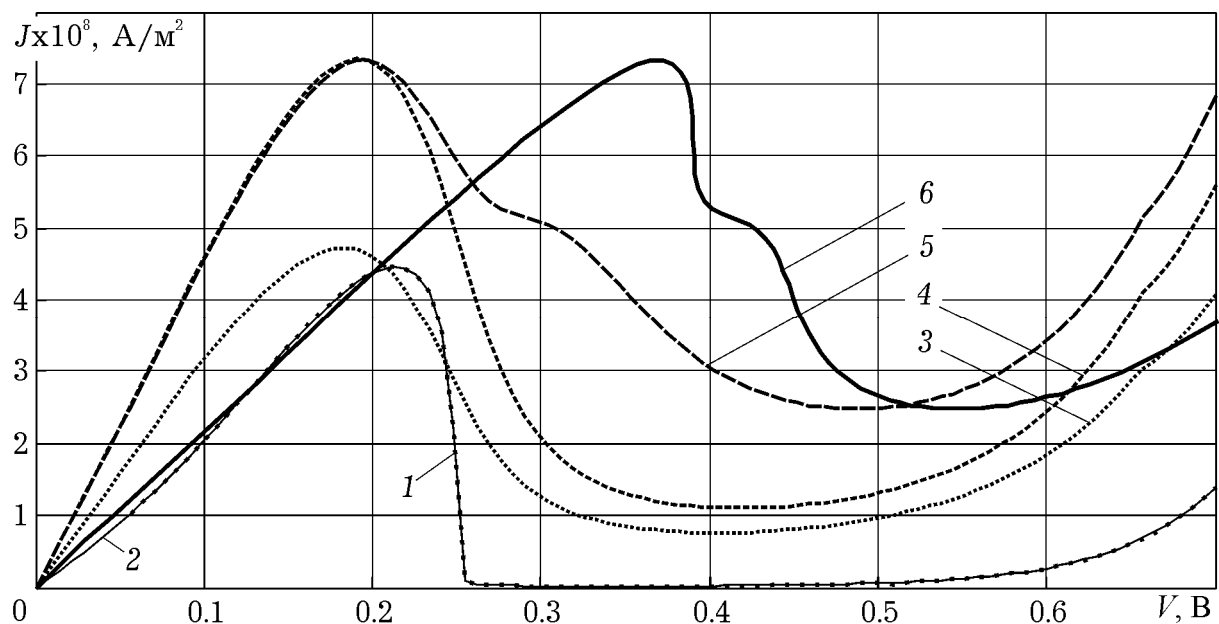


Рис. 4.5. Вольт-амперна характеристика, розрахована за допомогою несамоузгоджених однодолинних моделей: 1 — з використанням методу функцій Ейрі; 2 — базова модель, 3 — «2» з урахуванням розсіювання, 4 — «3» з урахуванням реальної форми гетеропереходів в рамках «надрешіткової» моделі; 5 — «4» з урахуванням транспорту

через стани ЕКЯ, 6 – «5», якщо погонний опір пасивних областей складає $R_s = 24 \cdot 10^{-10} \text{ Ом} \cdot \text{м}^2$.

4.2. Порівняння моделей за універсальністю та якісною адекватністю

Універсальність.

Аналітична модель, як і належить моделі найнижчого рівня ієрархії, є найменш універсальною. Її застосовність обмежена діодами, що мають два достатньо високі та широкі бар'єри (щоб могла бути застосована теорія збурень) та спейсери з однорідним хімічним складом. Крім того, необхідно, щоб всюди в РТД найнижчою долиною була Γ -долина, так, щоб впливом вищої долини можна було знехтувати.

Чисельна однодолинна модель обмежується більш широким колом резонансно-тунельних діодів та інших резонансно-тунельних структур. На відміну від аналітичної моделі, вона застосовна для будь-якої форми потенціального рельєфу, тобто n -бар'єрних РТД, і з деякими обмеженнями – для надрешіток. Спейсери РТД можуть складатися з довільної кількості різнорідних областей в тому числі з варізонних напівпровідників. Якщо в рамках однодолинної моделі потенціал обраховується самоузгоджено, то вона застосовна також для РТД, у яких резервуари складаються з декількох шарів з різною концентрацією домішок, що зазвичай має місце. Застосовність чисельної однодолинної моделі для моделювання РТД, в якому не Γ -, а X -долина (чи будь-яка інша) є найнижчою (або близькою до Γ -долини) в одному чи більшій кількості шарів, має бути перевірена лише шляхом порівняння з результатами моделювання з використанням двозонної моделі.

Чисельна дводолинна модель може бути застосована для тих же структур, що й однодолинна, плюс структури, де в електронному

транспорті беруть участь електрони з двох долин. Принциповим випадком, де потрібно застосовувати чисельну однодолинну модель, є одnobар'єрний GaAs/AlAs/GaAs РТД, резонансне тунелювання в якому можливе виключно посередництвом Г-Х змішування на гетерограницях, та споріднені структури [49].

Якісна адекватність.

Під *якісною адекватністю* будемо розуміти здатність моделі до такого відтворення фізичного ефекту, що спостерігається експериментально, коли з'являється відповідна йому фізично обґрунтована зміна на модельних характеристиках.

Аналitична модель, як було показано в розд. 4.1, відображає основні квантово-розмірні ефекти та явища: наявність ділянки від'ємного диференціального опору на ВАХ РТД за рахунок резонансного тунелювання. Вірно вона описує також і основні залежності вихідних величин та характеристик від конструктивних параметрів та зовнішніх факторів, перелік яких для аналітичної моделі найвужчий (див. рис. 4.1).

Базова *чисельна однодолинна модель*, у випадку ігнорування просторовим зарядом («несамоузгоджена») за якісною адекватністю практично не відрізняється від аналітичної. При застосуванні методів підвищення адекватності, з'являється можливість передбачення раніше недоступних ефектів, таких як:

- а) поява некогерентної складової струму при врахуванні розсіювання;
- б) поява артефактів на ВАХ при врахуванні станів у ЕКЯ;
- в) зміщення пікових значень струму та від'ємної диференціальної провідності при врахуванні опору пасивних областей.

При використанні методу Хартрі для розрахунку самоузгодженого потенціалу, можна відслідковувати вплив

просторового заряду на характеристики РТД, чого позбавлена аналітична та чисельна несамоузгоджена модель.

Чисельна дводолинна модель здатна відобразити додаткові канали переносу, які з'являються, якщо враховувати розсіювання на гетеропереходах, яке виявляється в появі резонансів Фано на характеристиці $T(E_z)$, а на характеристиках $g(z, E_z)$ – у накопиченні електронів на вузьких енергетичних рівнях в Γ - та X -долинах, які пов'язані з міждолинним інтерфейсним розсіюванням.

Самоузгоджене знаходження заряду та потенціалу в рамках дводолинної моделі дозволяє врахувати перерозподіл просторового заряду не тільки в рамках однієї долини, але й поміж різними долинами.

4.3. Чисельна верифікація та адаптація математичних моделей

Інтегро-диференціальні системи рівнянь, що складають основу чисельних моделей ((2.25), (2.26) і (2.13) або (2.65)) досить складні та мають особливості чисельної реалізації, які пов'язані з розривністю коефіцієнтів рівнянь Шредінгера та Пуассона. Інтегрування рівняння (2.26) звичайними методами вкрай неефективне, оскільки підінтегральна функція має яскраво виражений резонансний характер. Обчислення хвильових функцій в вузлах координатної сітки потребує розв'язання системи лінійних алгебраїчних рівнянь, які відповідають (2.13) або (2.65). Матриця вільних членів для згаданих рівнянь три- та п'ятидіагональна, відповідно.

Складність математичних моделей викликає необхідність перевірки програмних кодів на коректність – «чисельну верифікацію», а особливості рівнянь та функцій – використання або розробку адаптивних алгоритмів для їх розв'язання.

Перевірка програмного коду була проведена шляхом співставлення результатів несамоузгодженого чисельного моделювання з модулюванням методом матриць передачі.

Усі моделі було реалізовано в середовищі *Matlab*. Для чисельної верифікації аналітичної моделі $T(E_z)$, розрахована методом лоренцевих модельних функцій, співставлялася з $T(E_z)$, розрахованою методом Цу-Есакі (плоских хвиль) за нульової напруги. Ці методи є принципово різними: метод лоренцевих функцій є продуктом теорії збурень, а метод Цу-Есакі заснований на розв'язанні рівняння Шредінгера за допомогою матриць передачі. Відтак, збіг максимумів функцій (рис. 4.2) свідчить про коректність виведення та програмування рівнянь.

Для знаходження ВАХ в рамках усіх моделей ряду було використано стандартну процедуру *quad*, яка реалізує алгоритм Сімпсона, адаптованим до поведінки підінтегральної функції підбором кроку інтегрування.

Для верифікації чисельної несамоузгодженої однодолинної моделі було використано метод функцій Ейрі, результати використання якого по пошуку $T(E_z)$ та $J(V)$ співпадають з результатами, що отримані чисельними методами. Це підтверджується графіками (рис. 4.4 та рис. 4.5), де відповідні криві візуально збігаються. Метод функцій Ейрі втрачає стійкість за малих напруг, однак за малих напруг метод Цу-Есакі є його хорошою апроксимацією, і за певної напруги методи дають майже однаковий результат, що демонструє рис. 4.6. Оскільки метод функцій Ейрі – це різновид методу метод матриць передачі, а чисельна модель використовує для пошуку $T(E_z)$ чисельні методи, такий збіг свідчить про коректність побудованої СРС та самого програмного коду, який реалізує чисельну однодолинну модель.

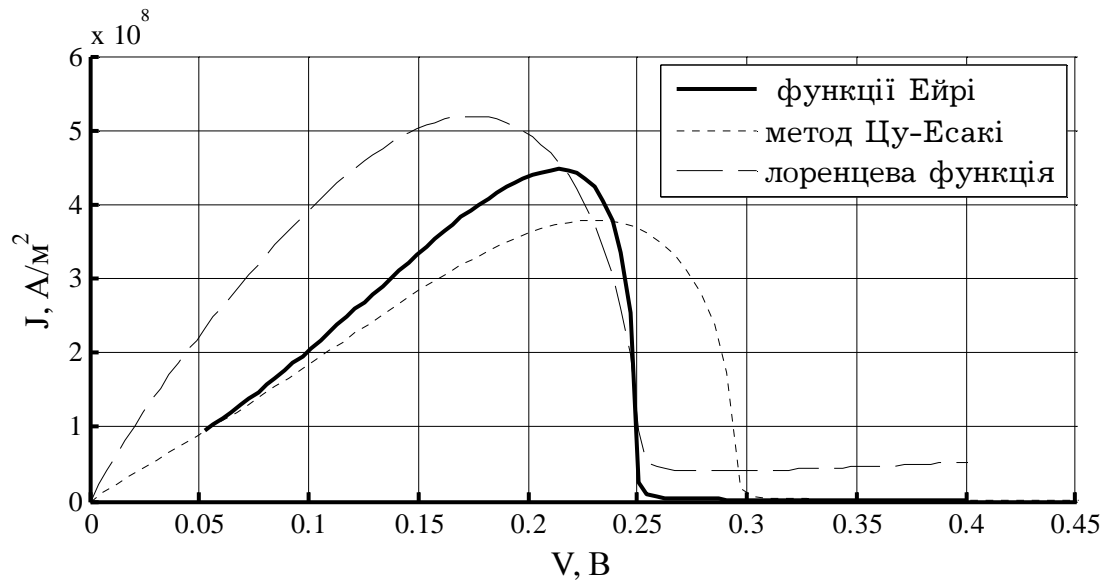


Рис. 4.6. ВАХ РТД, розрахована методом функцій Ейрі для структури, що показана на рис. 3.1 на фоні характеристик, розрахованих іншими методами.

Для чисельної верифікації дводолинної моделі використовувалося співставлення характеристики $T(E_z)$ з аналогічною характеристикою, розрахованою спеціально розробленим методом матриць передач для зв'язаних рівнянь Шредінгера (див. Додаток Г). Результати порівняння показали збіг кривих, що розраховані обома методами. Крім того, було встановлено, що $T(E_z)$, яка розрахована методом матриць передач, співпадає з $T(E_z)$, яка розрахована в рамках однодолинної моделі за виключенням появи максимумів, що відповідають резонансам Фано (див. рис. 3.18).

Для розв'язання СРС, яка відповідає зв'язаним рівнянням Шредінгера в дводолинній моделі використовувалася QR-факторизація, що реалізується стандартною функцією *Matlab*. На додачу до цього, матриця вільних членів задавалася як розріджена матриця (функція *sparse* в *Matlab*). Це дало можливість оптимально використовувати ресурси процесора та фізичної пам'яті.

Відмітимо, що така якість перевірки чисельних алгоритмів та рівень їх адаптивності найвищі з-поміж існуючих моделей. Це дозволяє говорити про достовірність математичних моделей.

4.4. Експериментальна верифікація моделей ряду

Для верифікації моделей, тобто співставлення з експериментальними даними, фактично можна використовувати лише порівняння вольт-амперних характеристик, оскільки інші експериментальні дані зустрічаються вкрай рідко. Головні параметри ВАХ – це густина пікового (долинного) струму J_p (J_v), та напруги, що їм відповідають – V_p (V_v). Також для верифікації важлива форма ВАХ, зокрема наявність чи відсутність області «плато».

З метою верифікації усього ієрархічного ряду моделей використовувалося порівняння експериментальних ВАХ, адаптованих з публікацій [111], [112]. Відповідні резонансно-тунельні діоди будемо в подальшому називати РТД1 та РТД2. Структура, фізико-топологічні та конструктивні параметри трьох діодів вказані на рис. 4.7 та в табл. 4.1. Результати порівняння експериментальних даних по РТД1 та РТД2 для деяких типів моделей подано в табл. 4.2, 4.3.

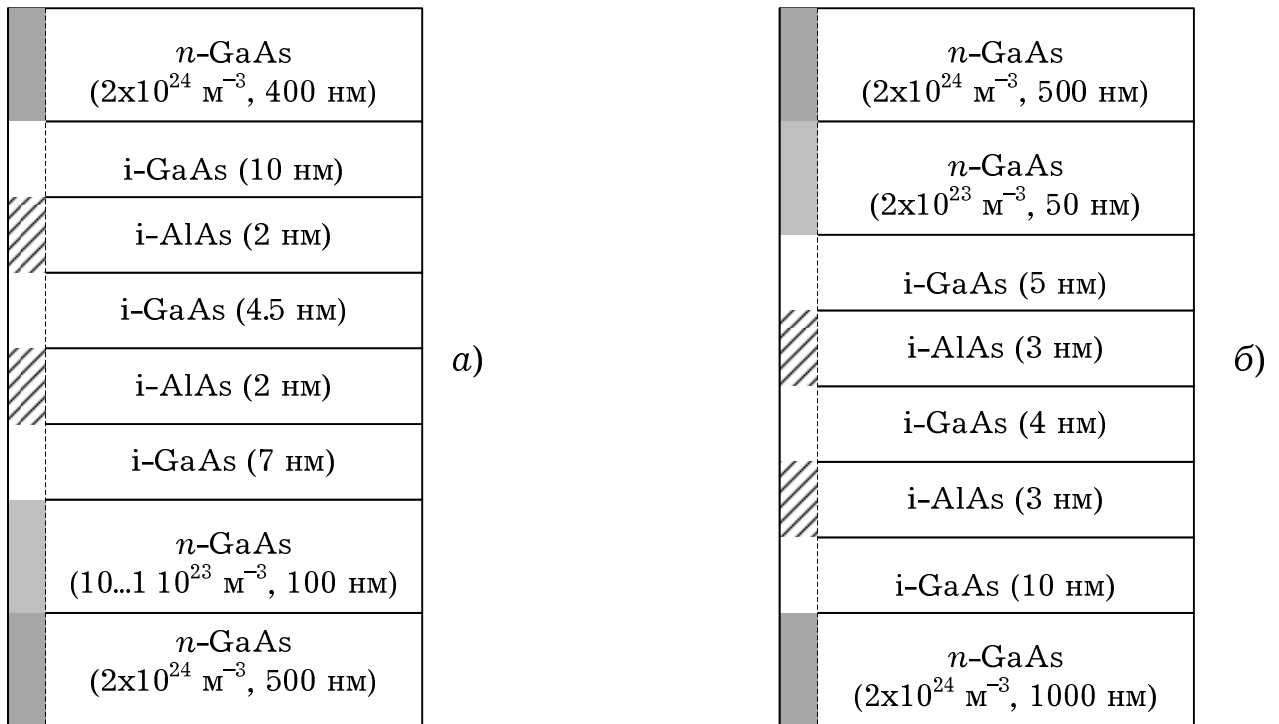


Рис. 4.7. Релевантна частина структури реальних резонансно-тунельних діодів: а) РТД1, б) РТД2.

Табл. 4.1

Фізико-топологічні параметри РТД1,2

параметр	значення	параметр	значення
T, K	300 (77)	m_{GaAs}^{Γ}	0.067
$\hbar\omega_{op}, eV$	0.036	m_{GaAs}^X	1.3
$S_{op}, \text{пс}^{-1}$	36	m_{AlAs}^{Γ}	0.15
ϵ_{GaAs}	12.9	m_{AlAs}^X	0.97
ϵ_{AlAs}	10.06	$\alpha, eV \cdot \text{Å}$	0.15

Табл. 4.2

Порівняння експериментальних та розрахованих ВАХ для РТД1.

Тип	Клас	СПТ	$J_p,$ 10^8 А/м^2	$J_v,$ 10^8 А/м^2	PVR	$V_p,$ мВ	$V_v,$ мВ
Експеримент			2.81	0.84	3.35	581	770
Аналітична		Б	7.20	0.29	24.8	247	287
		+P	2.50	0.29	8.62	242	287
О/д	нс/у	Б	2.38	10^{-3}	2380	276	380
		+P	1.84	0.123	15	243	500
		+Ф	2.97	0.179	13.2	243	514
		+П	2.97	0.179	16.6	243	514
		+А	2.97	0.179	16.6	245	514
	с/у	усі	1.75	0.37	4.73	388	705
Д/д	нс/у	усі	2.89	0.294	9.83	236	466
	с/у	усі	2.80	0.70	4.0	589	880

Позначення: О(Д)/д – одно- (дво-) долинна; (нс) с/у несамоузгоджена (самоузгоджена) «СПТ» – метод підвищення точності/адекватності, «Б» – базова модель, «+P» – враховується розсіювання, «+Ф» – неідеальність форми бар'єрів, «+П» – опір пасивних областей, «+А» – врахування емітерних станів, що дозволяє моделювати артефакти на ВАХ; J_p, J_v – густина «пікового» струму та струму «долини», PVR – відношення струму піку до струму долини (від англ. «*peak-to-valley ratio*»), V_p та V_v – напруги, що відповідають «піку» та «долині» ВАХ.

Табл. 4.3.

Порівняння експериментальних та розрахованих ВАХ для РТД2.

Тип моделі	$J_p,$ 10^6 A/m^2	$J_v,$ 10^6 A/m^2	PVR	$V_p, \text{ мВ}$	$V_v, \text{ мВ}$
Експеримент	2.34	0.996	2.35	436	517
Аналітична	84.7	2.58	32.8	291	311
Однодолинна:					
а) нс/у	7.65	0.52	14.7	210	414
б) с/у	8.65	0.55	15.7	352	600
Дводолинна самоузгоджена	2.38	0.98	2.43	450	513

На рис. 4.7 показано порівняння ВАХ, розрахованої за допомогою дводолинної самоузгодженої моделі з експериментальними даними по РТД1, 2. При порівнянні використовувалося узгодження за струмом, для чого для РТД1 розрахований струм помножувався на 1.8, для РТД2 – ділився на 4.3. Це звичайна практика, оскільки достеменно невідомо, яка ефективна площа перерізу активної частини. Крім того, обидва графіки зсунуто на 0.14 та 0.1 В праворуч, оскільки експериментальні ВАХ показують приблизно такі ж відмінності в прямій та зворотній ВАХ, які, ймовірно, зумовлені сильно нелінійним послідовно увімкненим опором.

Як видно з порівняння, при одних і тих же вхідних параметрах, включаючи параметри розсіювання, відбувається відмінне узгодження ВАХ за величиною контрастності, а також задовільне узгодження за густиною струму та напругою. У випадку РТД2 спостерігається майже повне якісне повторення експериментальної кривої, що рідко вдається досягти в рамках

існуючих моделей. Якщо врахувати, що для розрахунку величини контрастності не були залучені «припасувальні» параметри (в роботі [8] їх п'ять (!)), такі дані можна попередньо вважати найкращими з опублікованих. Відмінності ж при розрахунку пікових значень струму та напруги можна пояснити недостатньою інформацією про структуру пристрою. На користь цього припущення свідчить якісна схожість їх форми при відповідному масштабуванні, яке має під собою фізичні основи.

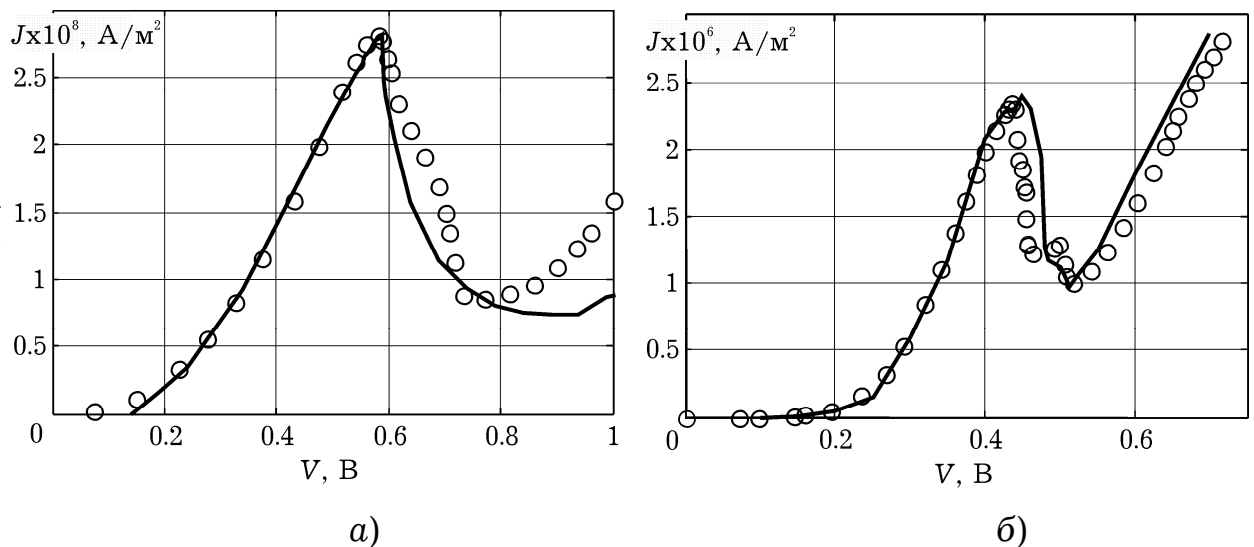


Рис. 4.8. Порівняння експериментальних та розрахованих ВАХ: *а* – РТД1, *б* – РТД2. Суцільними лініями показано розраховані криві. Експериментальні ВАХ адаптовано з [111], [112].

За допомогою моделей створеного ієрархічного ряду можна адекватно передбачити форму ВАХ РТД зі складним профілем спейсерів. Було змодельовано резонансно-тунельні діоди з так званим «ступінчастим» емітером – РТД3 та РТД4, топологічна структура яких взята з [113] та [6] та зображена на рис. 4.9.

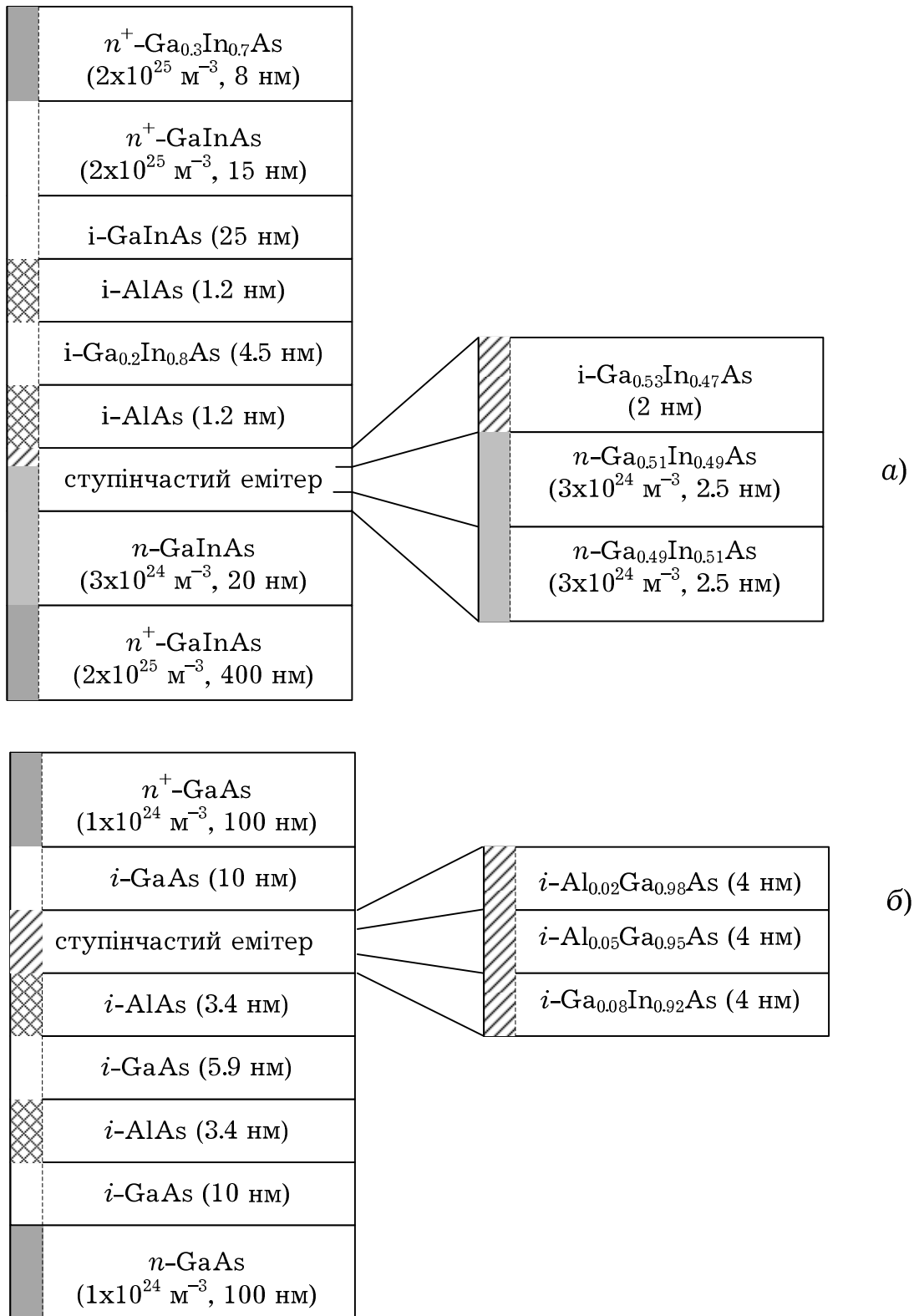


Рис. 4.9. Релевантна частина структури резонансно-тунельних діодів:
а - РТД3, б - РТД4.

Параметри матеріалів, з яких складається РТДЗ, такі ж, як і для РТД2 (див. табл. 4.1). Параметри шарів РТД4, який вирощений на підкладці InP та містить переходи GaInAs/AlAs та $Ga_xIn_{1-x}As/Ga_yIn_{1-y}As$, розраховано з використанням даних, що наведені в [92, 93, 114].

Табл. 4.4.

Параметри шарів РТД4

Верхній контакт («cap»)		
	m^*/m_0	ΔE_c , eВ
n^+ -Ga _{0.3} In _{0.7} As	0.074	-0.96
n^+ -GaInAs	0.074	-0.91
<i>i</i> -GaInAs	0.041	-0.85
<i>i</i> -AlAs	0.15	0
<i>i</i> -Ga _{0.2} In _{0.8} As	0.0305	-0.9
<i>i</i> -AlAs	0.15	0
<i>i</i> -Ga _{0.53} In _{0.47} As	0.0435	-0.82
<i>n</i> -Ga _{0.51} In _{0.49} As	0.074	-0.86
<i>n</i> -Ga _{0.49} In _{0.51} As	0.074	-0.87
<i>n</i> -GaInAs	0.074	-0.88
n^+ -GaInAs	0.074	-0.91
Підкладка		

Крім того, для РТД4 з [93] було взято таке значення діелектричної проникності: для GaInAs – 13.9, для $Ga_xIn_{1-x}As$ ϵ визначається за формулою:

$$\epsilon(x) = 15.1 - 2.87x + 0.67x^2.$$

Частота полярних оптичних фононів $\hbar\omega_{op}$ та швидкість розсіювання S_{op} взяті рівними 0.034 eВ та $62 \cdot 10^{12} \text{ c}^{-1}$. Температура кристалічної решітки – 300 К.

Співставлення ВАХ РТДЗ, розрахованої за допомогою несамоузгодженої однодолинної моделі з експериментальною, подано

на рис. 4.10. З нього видно, що якісний характер залежності струму від прикладеної напруги відтворюється задовільно. Також фактично збігається з експериментальними даними значення контрастності ВАХ. Розрахована ВАХ для кращої демонстрації вказаних фактів зміщена на 0.03 В праворуч, а значення струму відмасштабовані так, щоб пікові струми моделі та експерименту збігалися. Для цього розраховане значення струму помножувалося на 1.3.

Для моделювання РТД4 була використана однодолинна самоузгоджена модель, оскільки майже відсутні дані щодо параметрів носіїв для Х-долини. Для кращого співставлення з експериментальними даними вважалося, що в експерименті був присутній послідовний опір, такий, щоб пікова напруга змодельованої ВАХ дорівнювала експериментальній. Струм також масштабувався на 1.5, щоб отримати збіг по піковому струму.

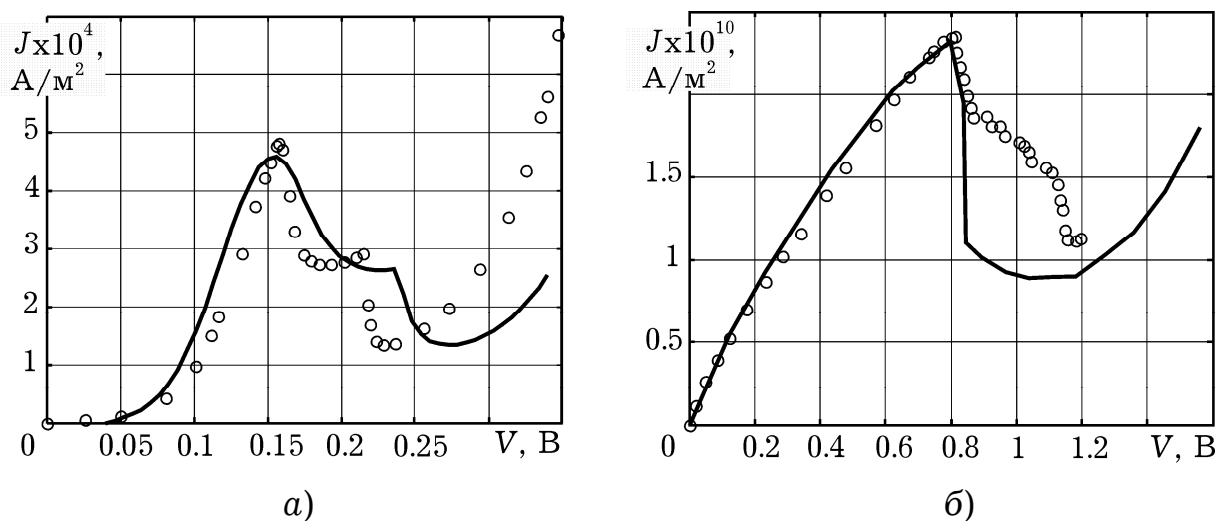


Рис. 4.10. Порівняння експериментальних та розрахованих ВАХ: а – РТД3, б – РТД4. Суцільними лініями показано розраховані криві. Експериментальні ВАХ адаптовано з [113, 6].

4.5. Автоматизація проектування РТД за допомогою застосунку з графічним інтерфейсом користувача

Кількість вхідних параметрів для моделювання РТД за допомогою чисельних моделей, як видно з рис. 4.1 складає мінімум 12. Якщо ж враховувати додаткові фактори, що підвищують точність моделювання, або моделювати багатобар'єрні РТД зі складним профілем легування чи хімічним складом спейсерів, то кількість вхідних параметрів може сягати сотні і більше. Варіантів моделювання за допомогою чисельних моделей всього 20. Крім того, з-поміж вихідних величин можна обрати також близько десяти. Ці цифри переконливо свідчать про те, що користувач буде витратити величезну кількість часу та зусиль, щоб провести відповідні зміни в програмному коді задля проведення конкретного чисельного експерименту. Крім того, необхідне розуміння самої програми та лексики *Matlab*. Такі чисто практичні проблеми, з якими зіштовхнувся сам автор, були мотивацією до розробки застосунку, що має робочу назву «*QuanT*», і в своїй поточній версії дозволяє проводити моделювання за допомогою чисельної однодолинної моделі [115].

На рис. 4.11 зображено розроблений інтерфейс прикладної програми, у якому відкрита вкладка «Квантовая область».

Усі три вкладки «Эмиттер» (тобто лівий резервуар); «Квантовая область», та «База» (тобто правий резервуар) організовані однаково. У них вказуються параметри кожного шару:

1. Молярна доля відповідного елемента у потрійних структурах (до прикладу, частка Al у сполуці $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$);
2. Сама матеріальна основа – «Выбор материала» (зазвичай це потрійні сплави, тому позначаються як AlGaAs, AlGaIn, InGaAs і т.д.);

3. Ширина кожного шару, d ;
4. Концентрація електронів у кожному з шарів;
5. Параметр розсіювання W_{op} ,

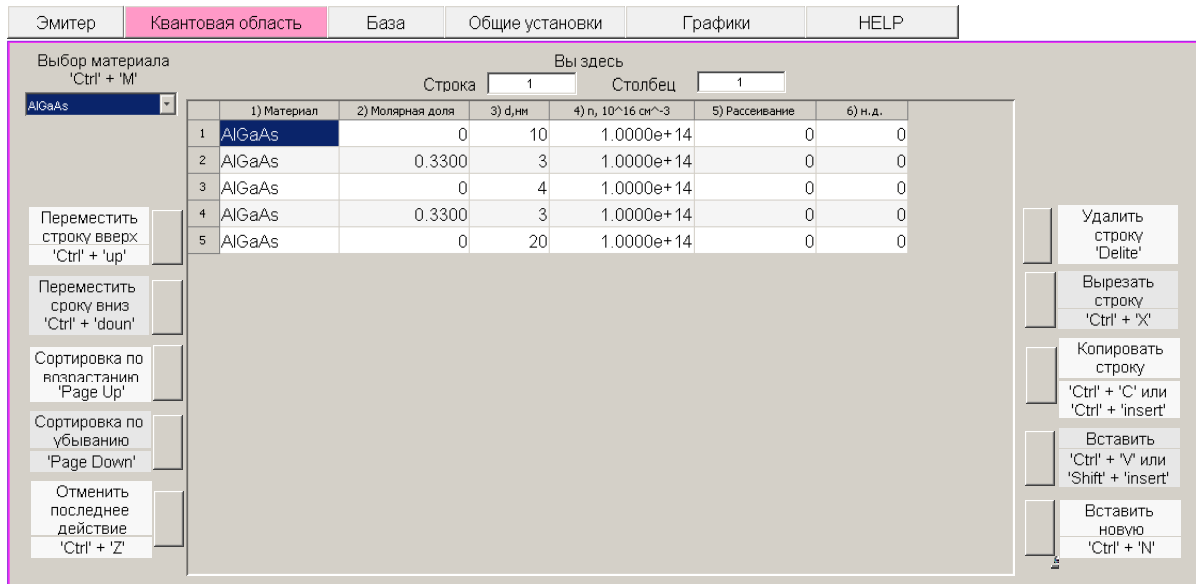


Рис. 4.11. Відкрита вкладка «Квантова область».

Для зручності створення багатошарових структур вкладки забезпечені кнопками «видалити рядок», «додати рядок» і т.д.

Матеріальна основа структури та молярна доля відповідного елемента в ній визначає фізичні та електричні властивості кожного шару. В однодолинній моделі це такі параметри:

- ефективна маса електрона в Γ -долині; діелектрична проникність відповідної сполуки;
- розриви зони провідності в Γ -долині;
- параметр розсіювання.

У дводолинній моделі до вищевказаних параметрів додаються такі:

- ефективна маса електрона в X -долині;
- відстань між X - та Γ -долинами;
- параметр міждолинної взаємодії.

Ці файли являють собою файли типу **.dat*, з яких відбувається зчитування параметрів основною програмою. Слід зазначити, що користувач може сам створювати такі файли для потрібних сполук.

Вкладка «Общие установки» визначає параметри чисельного алгоритму та величини, які буде розраховано та відображено, діапазон їх зміни та ін.

Результати роботи програми відображуються у вкладці «Графики». Доступні для відображення наступні величини:

а) розподіли в просторі:

- потенціалу;
- концентрації;
- густини електронних станів за енергією;
- повної функції розподілу за енергією;

б) розподіл за енергією:

- коефіцієнту проходження при певних значеннях напруги;

в) вольтамперна характеристика.

Вигляд такої вкладки за умови розрахунку всіх параметрів показано на рис. 4.12.

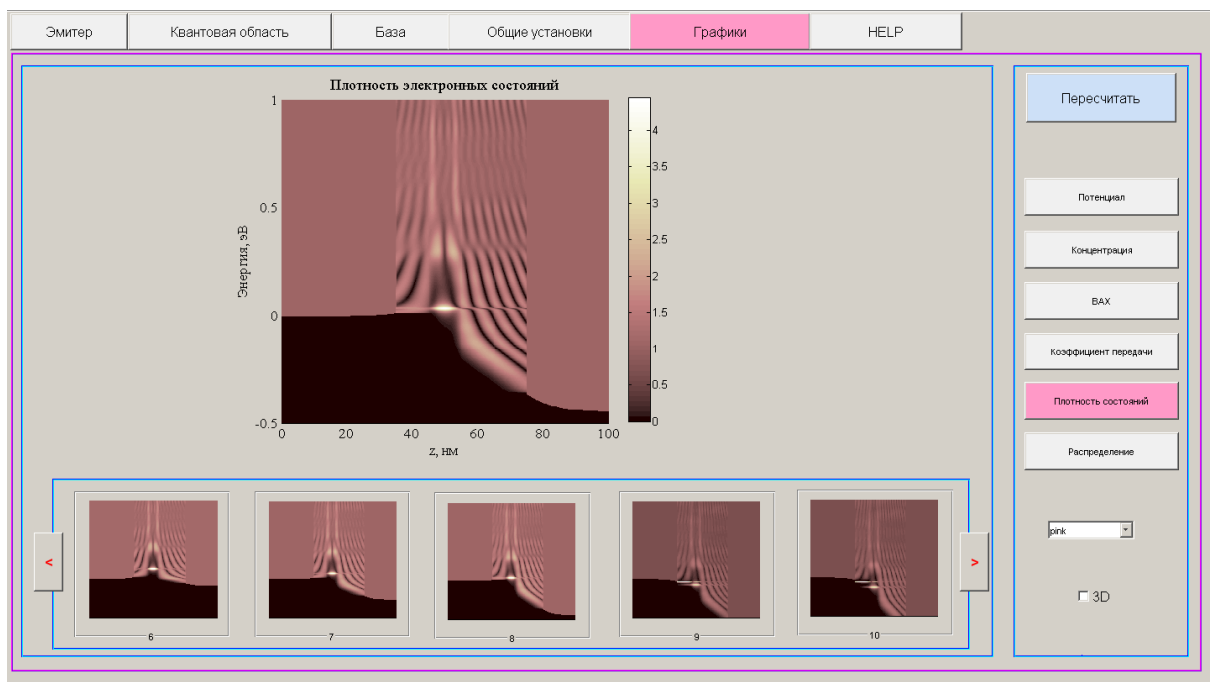


Рис. 4.12. Відкрита вкладка «Густина електронних станів».

Як бачимо, у верхній частині показано у крупному масштабі відповідний графік (густина станів у резонансно-тунельному діоді, в даному випадку), а нижче в дрібному масштабі – сусідні з ним за напругою графіки для того, щоб можна було оцінити динаміку зміни величини зі зміною напруги. Подібну структуру мають також інші графіки.

Описаний вище застосунок розповсюджується колективом авторів безкоштовно, коди ми лишили відкритими, щоб залучати дослідників до його вдосконалення. Відбувається постійний процес модернізації програми, що наразі включає в себе, зокрема, включення можливості дводолинного моделювання та використання методів підвищення точності.

4.6. Висновки

Розроблені моделі формують систему для проектування та моделювання РТД, що названа ієрархічним рядом. Базовими моделями розробленого ієрархічного ряду є моделі трьох типів: одна аналітична та дві чисельні – одно- та дводолинна. В рамках останніх моделей можна враховувати або ні перерозподіл просторового заряду, в залежності від чого така модель відноситься до класу «самоузгоджених» або «несамоузгоджених». В рамках цих класів можна також виділити моделі підвищеної адекватності.

Використання аналітичної моделі рекомендовано на початковому етапі проектування. Вона призначена для швидкої оцінки впливу конструктивних параметрів на характеристики РТД. Її адекватність та універсальність найнижча. Водночас, згадана модель дозволяє встановити *аналітичні* зв'язки між фізико-топологічними параметрами та параметрами, які характеризують квантово-розмірні ефекти і електронний транспорт, відтак є

найбільш зручною з усього ряду. Модель не потребує суттєвих обчислювальних ресурсів.

Як тільки за допомогою аналітичної моделі знайдено орієнтовні значення потрібних параметрів, можна переходити до уточнення. В залежності від мети моделювання (тобто направленості на вивчення якогось одного ефекту, кількох чи усіх разом) слід використовувати ряд чисельних моделей, базовими серед яких є однодолинна та дводолинна, для кожної з яких можливе застосування самоузгодженого пошуку потенціалу та методів підвищення точності.

Чисельні моделі як уточнюють аналітичну модель, так і враховують ряд факторів, які не входять до переліку вхідних величин аналітичної моделі: ширину та хімічний склад спейсерів, некогерентний канал переносу, перерозподіл заряду, електронний транспорт через ЕКЯ, ГХГ-розсіювання та інше.

Встановлено умови, за яких моделі ієрархічного ряду переходять одна в одну. Кожна базова модель ряду була верифікована посередництвом порівняння з характеристиками $T(E_z)$ та $J(V)$, що знайдені іншими відомими методами (метод Тсу-Есакі, функцій Ейрі, узагальнений метод Цу-Есакі для дводолинної моделі, теорія збурень). Результати порівняння співпадають, що свідчить про коректність фізичної основи, алгоритму та програмного коду розробленого ієрархічного ряду моделей.

Значну увагу приділено формулюванню та реалізації чисельних алгоритмів. Для всіх диференціальних рівнянь моделей виведено скінченно-різницевої схеми та показано, що вони задовольняють другому порядку точності та є консервативними, що особливо важливо, оскільки відповідне диференціальне рівняння має розривні коефіцієнти. Для розв'язання систем лінійних алгебраїчних рівнянь, до яких звелися СРС, використані методи, що враховують

вид матриці коефіцієнтів, в тому числі її розрідженість, наприклад, метод Томаса для однодолинної моделі. Для дводолинної моделі в *Matlab* матриця коефіцієнтів задавалася розрідженою, що забезпечило економію фізичної пам'яті. Інтегрування проводилося адаптованим методом Сімпсона, що необхідний, зважаючи на яскраво виражений резонансний вигляд підінтегрального виразу.

Верифікація моделей ієрархічного ряду показала, що результати моделювання за допомогою моделей більш низького ієрархічного рівня гірше співпадають з експериментальними даними. Моделі найвищого ієрархічних рівнів можуть претендувати на кількісне моделювання навіть без залучення припасувальних параметрів, як це робилося в [7, 8]. При цьому видно, на які параметри ВАХ впливає конкретне підвищення рівня моделі, а отже розкрито питання застосування тієї чи іншої моделі для кожної конкретної мети.

ВИСНОВКИ ПО РОБОТІ

1. Теорія квантово-розмірних ефектів та електронного транспорту в РТД достатньо розвинута, а моделюванню присвячена велика кількість робіт. Однак, моделі, що розроблені до теперішнього часу, мають суттєві недоліки. Так, найбільш адекватні способи врахування окремих фізичних явищ розосереджені по різних роботах; моделі переобтяжені чисто «припасувальними» параметрами; відсутня єдина теорія щодо природи окремих ефектів та характеристик. Невстановленими залишаються співвідношення між моделями різного рівня складності та межі їх застосовності. Формалізм хвильових функцій, на відміну від методу функцій Гріна та Вігнера, дозволяє мінімізувати використання чисельних ресурсів. Однак, в рамках цього методу слабо розвинуті адаптивні чисельні методи, а засоби автоматичного проектування з графічним інтерфейсом користувача відсутні.

2. 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.

3. 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.

4. 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 формування «артефактів» нещодавно була підтверджена експериментально. Відтак, вперше

вдалося отримати адекватні уявлення про важливу для функціонування ділянку ВАХ РТД.

5. 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 по ВАХ без «припасувального» параметру, що описує форму гетеропереходів.

6. 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.

7. 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 вдалося. 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 відрізняються на 3–4% від експериментальних даних. Також відмінно узгоджується з

експериментом форма ВАХ. Загалом, отримано найкраще узгодження з експериментом порівняно з відомими публікаціями.

8. 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*.

9. Результати роботи використано в курсах «основи наноелектроніки» та «надшвидкодючі 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.).

10. Розроблений ієрархічний ряд може бути продовжений створенням моделей вищого рівня адекватності, які можуть включати в себе можливість врахування оптичних переходів, вплив магнітного поля та інших факторів.

Подальше розширення функціональності ряду має включати створення динамічної моделі РТД як узагальнення існуючих моделей на випадок змінних у часі процесів.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Technology Roadmap for Nanoelectronics / Editor: R. Compano. – Second Edition. – Belgium, 2000. – 104 P.
2. Алферов Ж.И. Наноматериалы и нанотехнологии / Ж.И. Алферов, А.Л. Асеев, С.В. Гапонов и др. // Микросистемная техника. – 2003. – № 8. – С. 3–13.
3. Figueiredo M. L. Ultralow voltage resonant tunnelling diode electroabsorption modulator / M.L. Figueiredo, C.N. Ironside, C.R. Stanley // Journal of Modern Optics. – 2002. – Vol. 49. – P. 939–945.
4. Обухов И.А. Моделирование переноса заряда в мезоскопических структурах / И.А. Обухов. – Севастополь: «Вебер», 2005. – 226 С.
5. Roco M.C. Nanotechnology Research Directions: IWGN Workshop Report. Vision for Nanotechnology R&D in the Next Decade / M.C. Roco, S. Williams, P. Alivisatos. – London: Kluwer Academic Publishers, 1999. – 318 P.
6. Suzuki S. Fundamental oscillation of resonant tunneling diodes above 1 THz at room temperature / S. Suzuki, M. Asada, M. Teranish et.al. // Appl. Phys. Lett. – 2010. – Vol. 97. P. 242102-1–3.
7. Абрамов И.И. Комбинированная модель резонансно-туннельного диода / И.И. Абрамов, И.А. Гончаренко, Н.В. Коломейцева // Физика и техника полупроводников. – 2005. – Том 39, Вып. 9. – С. 1138–1145.
8. Абрамов И.И. Комбинированная двухзонная модель резонансно-туннельного диода / И.И. Абрамов,

- И.А. Гончаренко // Физика и техника полупроводников. – 2007. – Т. 41, № 11. – С. 1395–1400.
9. Bowen R.C. Quantitative simulation of resonant tunneling diode / R.C. Bowen, G. Klimeck, R.K. Lake, W.R. Frensley, T. Moise // J. Appl. Phys. – 1997. – Vol. 81. – 3207–3213.
 10. Pinaud O. Transient simulations of a resonant tunneling diode / O. Pinaud // Journal of Applied Physics. – 2002. – Vol. 92. P. 1987–1994.
 11. Baro M. A. 1D coupled Schrodinger drift-diffusion model including collisions / M. Baro, N. Ben Abdallah, P. Degond, A. El Ayyadi // Journal of Computational Physics. – 2005. – Vol. 203. – P. 129–153.
 12. Lake R. Single and multiband modeling of quantum electron transport through layered semiconductor devices / Lake R., Klimeck G., Bowen R.C., Jovanovic D // J. Appl. Phys. – Vol. 81. – P. 7845–7869.
 13. Lake R. Interface roughness, polar optical phonons and the valley current of a resonant tunneling diode / R. Lake, G. Klimeck, R.C. Bowen et.al. // Superlattices and Microstructures. – 1996. – Vol. 20, No .3. – 279–285.
 14. Lake R. Rate equations for the phonon peak in resonant-tunneling structures / R. Lake, G. Klimeck, M.P. Anantram, S. Datta // Phys. Rev. B. – 1993. – Vol. 48. – P. 15132–15137.
 15. Wei T. Capacitance and hysteresis study of AlAs/GaAs resonant tunneling diode with asymmetric spacer layers / T. Wei, S. Stapleton // J. Appl. Phys. – 1995. – Vol. 77. – P. 4071–4076.
 16. Тагер А.С. Размерные эффекты в субмикронных полупроводниковых структурах и перспектива их использования в электронике СВЧ / А.С. Тагер // Электронная техника. Сер. „Электроника СВЧ”. – 1987. – Вып. 9. – С. 21–33.

17. Москалюк В.А. Статическая модель резонансно-туннельного диода / В.А. Москалюк, Н.Л. Медяный // Н.-техн. сб. «Электроника и связь». – 2002. – № 15. – С. 172–175.
18. 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.
19. Федяй А.В. Моделі резонансно-тунельних діодів (аналітичний огляд). Когерентні моделі / А.В. Федяй // Н.-техн. Ж. «Электроника и связь» – 2007. – №4. – С. 17–29.
20. Федяй А.В. Моделі резонансно-тунельних діодів (аналітичний огляд). Кінетичні моделі / А.В. Федяй // Н.-техн. Ж. «Электроника и связь». – 2007. – №5. – С. 11–16.
21. 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.
22. 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.
23. 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.
24. 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.
25. 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.
26. Москалюк В.А. Проблемы моделирования компонентов наноэлектроники 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.
27. Moskaliuk V.A. Simulation of transverse electron transport in resonant tunneling diode / V.A. Moskaliuk, V.I. Timofeev, A.V. Fedyay // Proceedings of 33rd International Spring Seminar on Electronics Technology. – Warsaw, Poland, 2010. – P. 210–211.
28. 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.
29. 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.
30. Tsu R. Tunneling in a finite superlattice / R. Tsu, L. Esaki // Appl. Phys. Letters. – 1973. – Vol. 22. – P. 562–564.

31. Chang L.L. Resonant tunneling in semiconductor double barriers / L.L. Chang, L. Esaki, R. Tsu // Appl. Phys. Lett. – 1974. – Vol. 24. P. 593–595.
32. Grubin H.L. Density matrix simulations of semiconductor devices / H.L. Grubin // NATO ASI Series B: Physics. – 1995. – Vol. 342. – P. 241–245.
33. Lake R. Nonequilibrium Green's function method applied to double barrier resonant tunneling diodes / R. Lake, S. Datta // Physical Review B. – 1992. – Vol. 45. – P. 6670–6685.
34. Klimeck G. Quantum Device Simulation with a Generalized Tunneling Formula / G. Klimeck, R. Lake, R.C. Bowen et. al. // Applied Physics Letters. – 1995. – Vol. 67. – P. 2539–2541.
35. Do V.N. Shot noise in resonant tunneling diodes using the non-equilibrium Green's functions calculation / V.N. Do, P. Dollfus, V.L. Nguyen // J. Comput. Electron. – 2007. – Vol. 6. – P. 125–128.
36. Frensley W.R. Wigner-function model of a resonant-tunneling semiconductor device / W.R. Frensley // Physical Review B. – 1987. – Vol. 36. – P. 1570–1580.
37. Jensen K.L. / K.L. Jensen, F.A. Buot // Effects of spacer layers on the Wigner function simulation of resonant tunneling diodes // Journal of Applied Physics. – 1989. – Vol. 65. – P. 5248–8061.
38. Biegel B.A. Comparison of self-consistency iteration options for the Wigner function method of quantum device simulation / B.A. Biegel, J.D. Plummer // Physical Review B. -1996. – Vol. 54. P. 8070 8082.
39. Yoder P.D. Demonstration of intrinsic tristability in double-barrier resonant tunneling diodes with the Wigner transport

- equation / P.D. Yoder, M. Grupen, R.K. Smith // IEEE Trans. Electron Dev. – 2010. – Vol. 57. – P. 3265–3274.
40. Mizuta H. The Physics and Applications of Resonant Tunnelling Diodes / H. Mizuta, T. Tanoue. – New York: Cambridge University Press, 1995. – 256 P.
 41. Schulman J.N. Extension of Tsu-Esaki model for effective mass effects in resonant tunneling / J.N. Schulman // Appl. Phys. Lett. – 1998. – Vol. 72. – P. 2829–2831.
 42. Coon D.D. Tunneling currents and two-body effects in quantum well and superlattice structures / D.D. Coon, H.C. Liu // Appl. Phys. Letters. – 1985. – Vol. 47. – P. 172–174.
 43. Ohnishi H. Self-consistent analysis of resonant tunneling devices / H. Ohnishi, T. Inata, Muto S. et. al. // Appl.Phys. Lett. – 1986. – Vol. 49. – P. 1248–1250.
 44. Cahay M. Importance of space charge effects in resonant tunneling devices / M. Cahay, M. McLennan, S. Datta, M.S. Landstrom // Appl. Phys. Lett. – 1987. – Vol. 50. – P. 612–614.
 45. Zohta Y. Improved optical model for resonant tunneling diode / Y. Zohta, T. Tanamoto // J. Appl. Phys. – 1993. – Vol. 74. – P. 6996–6998.
 46. Sun J.P. Self-consistent scattering calculation of Resonant Tunneling Diode Characteristics / J.P. Sun, G.I. Haddad // VLSI Design. – 1998. – Vol. 6. – P. 83–86.
 47. Buttiker M. Coherent and sequantial tunneling in double barrier / M. Buttiker // IBM. J. Res. Develop. – 1988. – Vol. 32. – P. 63–75.
 48. Ando T. Connection of envelope functions at semiconductor heterointerfaces. II. Mixing of Γ and X valleys in GaAs/Al_xGa_{1-x}

- xAs / T. Ando, H. Akera // Phys. Rev. B. – 1989. – Vol. 40. – 11619–11633.
49. Liu H.C. Resonant tunneling through single layer heterostructure / H.C. Liu // Appl. Phys. Lett. – 1987. – Vol. 51 – P. 1019–1021.
50. Sun J.P. A self-consistent model of Γ -X mixing in GaAs/AlAs/GaAs quantum well using quantum transmitting boundary method / J.P. Sun, R.K. Mains, K. Yang, G.I. Haddad // J. Appl. Phys. – 1993. – Vol. 74. – P. 5053–5060.
51. Sun J.P. Resonant tunneling diodes: models and properties / J.P. Sun, R.K. Mains, G.I. Haddad // Proc. of IEEE. – 1998. – Vol. 86. – P. 641–661.
52. Kluksdahl N.C. Self-consistent study of the resonant-tunneling diode / N.C. Kluksdahl, A.M. Kriman, D.K. Ferry // Phys. Rev. B. – 1989. – Vol. 39. – P. 7720–7735.
53. Татарский В.И. Вигнеровское представление квантовой механики / В.И. Татарский // Успехи физических наук. – 1983. – Т. 139, вып. 4. – С. 587–619.
54. Ландау Л.Д. Теоретическая физика: учеб. пособ. для вузов в 10 томах. Том 3. Квантовая механика (нерелятивистская теория) / Лев Давыдович Ландау, Евгений Михайлович Лифшиц. – 5-е изд. стереот. – М.: Физматлит, 2002. – 808 С.
55. Zhao P. Creation and quenching of interface-induced emitter-quantum wells within double-barrier tunneling structures / P. Zhao, D.L. Woolard, B.L. Gelmont, H.L. Cui // J. Appl. Phys. – 2003. – Vol. 94. – P. 1833–1849.
56. Frensley W.R. Boundary conditions for open quantum systems driven far from equilibrium // Rev. of modern physics. – 1990. – Vol. 62. – P. 745–791.

57. Buot F.A. Lattice Weil-Wigner formulation of exact many-body quantum-transport theory and application to novel solid-state quantum-based devices / F.A. Buot, K.L. Jensen // Phys. Rev. B. – 1990. – Vol. 42. – P. 9429–9457.
58. Wang J.-S. Nonequilibrium Green's function method for thermal transport in junctions / J.-S. Wang, N. Zeng, J. Wang, C.K. Gan // Phys. Rev. B. – 2006. – Vol. 7. – P. 033408-033411.
59. Mahan G.D. Quantum transport equation for electric and magnetic fields / G.D. Mahan // Phys. Rev. B. – 1987. – Vol. 145. – P. 251–318.
60. Datta S. Steady state quantum kinetic equation / S. Datta // Phys. Rev. B. – 1989. – Vol. 40. – P. 5830–5833.
61. Lake R. Nonequilibrium Green's function method applied to double barrier resonant tunneling diodes / R. Lake, S. Datta // Phys. Rev. B. – 1992. – Vol. 45. – P. 6670–6685.
62. Danielewicz P. Quantum theory of nonequilibrium processes / P. Danielewicz // Annals of Physics. – 1984. – Vol. 152. – P. 239–304.
63. Келдыш Л.В. Диаграммная техника для неравновесных процессов / Л.В. Келдыш // ЖЭТФ. – 1964. – Т. 47, вып. 4. – С. 1515–1527.
64. Ogawa M. Full multiband simulation of quantum electron transport in resonant tunneling devices // Solid-State Electron. – 2000. – Vol. 44. – P. 1939–1947.
65. Пакет для моделирования наноструктур "WinGreen". Режим доступа до ресурсу: <http://www2.fz-juelich.de/ibn/index.php?index=341>.
66. Абрамов И.И. Проблемы и принципы физики и моделирования приборных структур микро- и наноэлектроники. V. Резонансно-

- туннельные структуры / И.И. Абрамов // Нано- и микросистемная техника. – 2007. – № 3. – С. 57–70.
67. Lake R. Single and multiband modeling of quantum electron transport through layered semiconductor devices / R. Lake, G. Klimeck, R.C. Bowen, D. Jovanovic // J. Appl. Phys. – 1997. – Vol. 81. – 1997. – P. 7845–7869.
68. Datta S. A simple kinetic equation for steady-state quantum transport // J. Phys. Cond. Matter. – 1990. – Vol. 2. – P. 8023–8052.
69. Зейман Дж. Современная квантовая теория / Дж. Зейман. – М.: Мир, 1971. – 288 С.
70. Fransson J. Non-orthogonality and electron correlations in nanotransport. Spin- and time-dependent currents / J. Fransson // Dissertation for the Degree of Doctor of Philosophy in Physics. – Uppsala, Sweden, 2002. – 101 P.
71. Шалимова К.В. Физика полупроводников. Учебное пособие для вузов / Клавдия Васильевна Шалимова. – М.: Энергоатомиздат, 1985. – 392 с.
72. Davis J.S. The physics of low-dimensional semiconductors: an introduction / John H. Davis. – Cambridge University Press, 2005. – 438 p.
73. Bastard G. Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures / G. Bastard. – New York: Halsted Press, 1988. – 357 p.
74. Brennan K.F. Theory of resonant tunneling in a variably spaced multiquantum well structure: An Airy function approach / K.F. Brennan, C.J. Summers // J. Appl. Phys. – 1987. – Vol. 61. – P. 614–623.

75. Wang H. A theoretical study of resonant tunneling characteristics in triangular double-barrier diodes / H. Wang, H. Xu, Y. Zhang // *Phys. Lett. A* 355. – 2007. – p. 481–488.
76. Блохинцев Д.И. Основы квантовой механики, учебное пособие, изд. 5-е переработанное / Д.И. Блохинцев. – М.: Наука, 1976. – 664 с.
77. Tsu R. Superlattice to nanoelectronics / Ralf Tsu // London: Elsevier, 2005. – 325 P.
78. Vallee O. Airy functions and application to physics / O. Vallee, M. Soares. – London: Imperial College Press, 2004. – 194 p.
79. Araki K. Analysis of barrier transmission in resonant tunneling diodes / Kinichiro Araki // *Journal of Applied Physics*. – Vol. 62, No. 3, P. 1059–1069.
80. Gehring A. Simulation of tunneling in semiconductor devices : dissertation / Anreas Gehring. – Wien, Austria, 2003. – 200 P. .
81. Luryi S. Mechanism of operation of double-barrier resonant-tunneling oscillators / S. Luryi // *Electron Devices Meeting, 1985 International*. – 1985. – Vol. 31. – P. 666–669.
82. Алкеев Н.В. Последовательный механизм транспорта электронов в резонансно-туннельном диоде с толстым барьером / Н.В. Алкеев, С.В. Аверин, А.А. Дорофеев и др. // *Физика и техника полупроводников*. – 2007. – Том. 41, Вып. 1, с. 233–237.
83. Cai W. Model of phonon-assosiated electron tunneling through a semiconductor double barrier / W. Cai, T.F. Zheng, P. Hu et. al. // *Phys. Rev. Lett.* – 1989. – Vol. 63. – P. 418–421.
84. Datta S. Electronic transport in mesoscopic systems / Supriyo Datta. – Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2001. – 378 P.
85. Караваев Г.Ф. "Сверхрешеточная" модель плавной гетерограницы GaAs/AlAs (001) / Г.Ф. Караваев,

- С.Н. Гриняев // Физика твердого тела. – 2006. – Том. 48, Вып. 5. – С. 893–901.
86. Qiu Z.J. Experimental verification of origin of plateau-like current-voltage characteristics of resonant tunneling diodes / Z.J. Qiu, Y.S. Gui, S.L. Guo et. al. // Appl. Phys. Lett. – 2007. – Vol. 4. – P. 1961–1963.
87. Goldman V.J. Observation of intrinsic bistability in resonant tunneling structures / V.J. Goldman, D.C. Tsui, J.E. Cunningham // Phys. Rev. Lett. – 1987. Vol. 58. P. 1256–1259.
88. Young J.F. Effect of circuit oscillations on dc current-voltage characteristics of double barrier resonant tunneling structures / J.F. Young, B.M. Wood, H.C. Liu et. al. // Appl. Phys. Lett. – 1988. – Vol. 52.– P. 1398–1400.
89. Поздняков Д.В. Расчет вольт-амперных характеристик симметричных двухбарьерных резонансно-туннельных структур на основе арсенида галлия с учетом процессов разрушения когерентности электронных волн /. Д.В. Поздняков, В.М. Борздов, Ф.Ф. Комаров // ФТП. — 2004. — Т. 38, № 9. — С. 1097–1100.
90. Москалюк В.О. Фізика електронних процесів. Динамічні процеси / В.О. Москалюк. Київ.: "Політехніка", 2004. – 180 с.
91. Менский М.Б. Квантовые измерения и декогеренция / М.Б. Менский. М: Физматлит, 2001. – 232 с.
92. Vurgaftman I. Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys / I. Vurgaftman, J.R. Meyer // J. Appl. Phys. – 2001. – Vol. 89, №11. – P. 5815–5862.
93. Электронный архив «Новые полупроводниковые материалы: Характеристики и свойства». Режим доступа до ресурсу: <http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/rintroduction.html>.

94. Хьюеу Н.В. Основы метода вторичного квантования / Нгуен Ван Хьюеу. – М.: Энергоатомиздат, 1984. – 208 с.
95. Mohan S. Device and circuit simulation of quantum electronic devices / S. Mohan; J.P. Sun; P. Mazumder; G.I. Haddad // IEEE Transactions on Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems. – 1995. – Vol. 14. – P. 653-662.
96. Самарский А.А. Введение в численные методы / А.А. Самарский. – М.: «Наука», 1987. – 271 с.
97. Самарский А.А. Введение в теорию разностных схем / А.А. Самарский. – М.: «Наука», 1971. – 553 с.
98. Lent C. S. The quantum transmitting boundary method / C.S. Lent, D.J. Kirkner // Journal of Applied Physics. 1990. – Vol. 67. – P. 6353–6359.
99. Хокни Р. Численное моделирование методом частиц: Пер. с англ. / Р. Хокни, Дж. Иствуд. – М.: Мир, 1987. – 640 с.
100. Anantram M.P. Modeling of Nanoscale Devices / M.P. Anantram, M.S. Lundstrom, D.E. Nikonov // Proceedings of the IEEE. – 2008. – Vol. 96, P. 1511–1550.
101. Gummel H.K. A self-consistent iterative scheme for one-dimensional steady state transistor calculation / H.K. Gummel // IEEE Transactions on Electron Devices – 1964. – Vol. 11, P 455–465.
102. Stovneng A., P. Lipavsky. Multiband tight-binding approach to tunneling in semiconductor heterostructures: Application to ГХ transfer in GaAs / A. Stovneng, P. Lipavsky // Physical Review B. – 1994. – Vol. 49. P. 16494–16504.
103. Васько Ф.Т. Электронные состояния и оптические переходы в полупроводниковых гетероструктурах / Федор Трофимович Васько. – К.: Наукова Думка, 1993. – 181 с.

104. Wolak E. The design of GaAs/AlAs resonant tunneling diodes with peak current densities over 2×10^5 A cm⁻² / E. Wolak, E. Ozbay, B.G. Park et. al. // J. Appl. Phys. – 1991. – Vol. 69. – P. 3345–3350.
105. Diamond S.K. Fabrication of 200-GHz f_{max} Resonant-Tunneling Diodes for Integrated Circuit and Microwave Applications / S. Diamond, E. Ozbay, M.J.W. Rodwell et. al. // IEEE Electron device letters. – 1989. – Vol. 10, No. 3. – P. 104–106.
106. Андо Т. Электронные свойства двумерных систем / Т. Андо, А. Фаулер, Ф. Стерн. – М.: Мир, 1985. – 416 с.
107. Строгалев В.П. имитационное моделирование: учеб. пособие / В.П. Строгалев, И.О. Толкачева. – М.:Изд. МГТУ им. Баумана, 2008. – 280 с.
108. Резонанси Фано (матеріал з Вікіпедії). Режим доступу до ресурсу: http://ru.wikipedia.org/wiki/Резонанс_Фано.
109. Mains R.K. Observation of intrinsic bistability in resonant tunneling diode modeling / R.K. Mains, J. P. Sun, G.I. Haddad // Appl. Phys. Lett. – 1988. – Vol. 55, P. 371–373.
110. Martin A.D. Observation of intrinsic tristability in a resonant tunneling structure / A.D. Martin; M.L.F. Lerch; P.E. Simmonds; L. Eaves // Applied Physics Letters . – 1994. – Vol. 64. – P. 1248–1250.
111. Boykin T.B. Resonant tunneling diodes with emitter prewells / T.B. Boykin, R.C. Bowen, G. Klimeck // Appl. Phys. Lett. – 1999. – Vol. 75. – P. 1302–1304.
112. Evstigneev S.V. Multiple-barrier resonant tunneling structures for application in a microwave generator stabilized by microstrip resonator / S.V Evstigneev, A.L. Karuzskii, Yu.A. Mityagin et.al. / 8th Int. Symp. "Nanostructures: Physics and Technology". St Peterburg, Russia, June 19–23, 2000.:2000. – P. 494–497.

113. Yatskiv R. Analysis of the resonant tunneling diode with the stepped pre-barrier / R. Yatskiv, J. Voves // Journal of physics: conference series. – 2009. – Vol. 193. – P. 1–4.
114. Dongmin L. Design, fabrication and characterization of InAlAs/InGaAs/InAsP composite channel HEMTs // Dissertation for the Degree Doctor of Philosophy. – Ohio, USA, 2008. – 194 P.
115. Пакет для імітаційного моделювання напівпровідникових гетероструктур "QuanT". Режим доступу до ресурсу: <http://phbme.ntu-kpi.kiev.ua/~feduay/QuanT.html>.

ДОДАТОК А

Отримання формули для концентрації електронів у квантовій області

Якщо вважати електронний транспорт когерентним, то концентрацію електронів у квантовій області можна розрахувати за формулою

$$n = \int_{-\infty}^{\infty} N(\mathbf{k}, z) dk_x dk_y dk_z,$$

де

$$N(\mathbf{k}, z) = \begin{cases} N_L(\mathbf{k}) \cdot |\psi_L(\mathbf{k}, z)|^2, & \text{якщо } k_z > 0; \\ N_R(\mathbf{k}) \cdot |\psi_R(\mathbf{k}, z)|^2, & \text{якщо } k_z < 0, \end{cases}$$

що подібна формулі для концентрації в класичній статистичній фізиці за виключенням множення на $|\psi|^2$. Тут $N_{L(R)}(\mathbf{k})$ – функція розподілу електронів у лівому (правому резервуарі). З останньої формули слідує, що $n(z)$ можна шукати у вигляді суми $n_L(z) + n_R(z)$, де

$$n_L(z) = \int_0^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_L(E_z(k_z), z)|^2 N_L(k, E_{\Phi}) dk_z dk_x dk_y;$$

$$n_R(z) = \int_0^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_R(E_z(k_z), z)|^2 N_R(k, E_{\Phi}) dk_z dk_x dk_y.$$

Проінтегруймо ці вирази за x - та y -складовими \mathbf{k} :

$$\begin{aligned}
n_L(z) &= \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty |\psi_L(E_z(k_z), z)|^2 g(\mathbf{k}) f_{\Phi-\Pi}(\mathbf{k}, E_\Phi) dk_z dk_x dk_y = \\
&= \frac{2}{(2\pi)^3} \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty \frac{|\psi_L(E_z(k_z), z)|^2 dk_z dk_x dk_y}{\exp\left(\left(\hbar^2(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) / 2m^* + U_{i0} - (E_\Phi + U_1)\right) / k_B T\right) + 1} = \\
&\left| \begin{aligned} dk_z dk_x dk_y &= k_r dk_z dk_r dk_\phi \\ k_r &= \sqrt{k_x^2 + k_y^2} \end{aligned} \right| = \\
&\frac{2}{(2\pi)^3} \int_0^\infty |\psi_L|^2 dk_z \int_0^\infty \frac{k_r dk_r}{\exp\left(\left(\hbar^2(k_r^2 + k_z^2) / 2m^* + U_{i0} - (E_\Phi + U_1)\right) / k_B T\right) + 1} \int_0^{2\pi} dk_\phi = \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\infty |\psi_L|^2 dk_z \int_0^\infty \frac{dk_r^2}{\exp\left(\left(\hbar^2(k_r^2 + k_z^2) / 2m^* + U_{i0} - (E_\Phi + U_1)\right) / k_B T\right) + 1} = \\
&\left| \begin{aligned} u &= \left(\hbar^2(k_r^2 + k_z^2) / 2m^* + U_{i0} - (E_\Phi + U_1)\right) / k_B T, \\ du &= \frac{\hbar^2}{2m^* k_B T} dk_r^2, \quad E_z = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} + U_{i0} \end{aligned} \right| = \\
&\frac{2m^* k_B T}{(2\pi\hbar)^2} \int_0^\infty |\psi_L(E_z(k_z), z)|^2 dk_z \int_{\frac{E_z - (E_\Phi + U_1)}{k_B T}}^\infty \frac{du}{e^u + 1} = \left| \int \frac{du}{e^u + 1} = \ln(e^{-u} + 1) \right| = \\
&= \frac{2m^* k_B T}{(2\pi\hbar)^2} \int_0^\infty |\psi_L(E_z(k_z), z)|^2 \ln\left(\exp\left(-\frac{E_z - (E_\Phi + U_1)}{k_B T}\right) + 1\right) dk_z = \\
&\left| dk_z = \frac{\sqrt{m^*}}{\sqrt{2\hbar}} \frac{dE_z}{\sqrt{E_z - U_{i0}}} \right| = \\
&= \frac{\sqrt{2}(m^*)^{3/2} k_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3} \int_{U_{i0}}^\infty \frac{|\psi_L(E_z(k_z), z)|^2}{\sqrt{E_z - U_{i0}}} \ln\left(1 + \exp\left(-\frac{E_z - (E_\Phi + U_1)}{k_B T}\right)\right) dE_z;
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
n_R(z) &= \int_{-\infty}^0 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi_R(E_z(k_z), z)|^2 g(\mathbf{k}) f(\mathbf{k}, E_\Phi) dk_z dk_x dk_y = \\
&= \frac{2}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^0 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{|\Psi_R(E_z(k_z), z)|^2 dk_z dk_x dk_y}{\exp\left(\left(\hbar^2(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) / 2m^* + U_{i5} - (E_\Phi + U_N)\right) / k_B T\right) + 1} = \\
&\left| \frac{dk_z dk_x dk_y = k_r dk_z dk_r dk_\phi}{k_r = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}} \right| = \\
&\frac{2}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^0 |\Psi_R|^2 dk_z \int_0^{\infty} \frac{k_r dk_r}{\exp\left(\left(\hbar^2(k_r^2 + k_z^2) / 2m^* + U_{i5} - (E_\Phi + U_N)\right) / k_B T\right) + 1} \int_0^{2\pi} dk_\phi = \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^0 |\Psi_R|^2 dk_z \int_0^{\infty} \frac{dk_r^2}{\exp\left(\left(\hbar^2(k_r^2 + k_z^2) / 2m^* + U_{i5} - (E_\Phi + U_N)\right) / k_B T\right) + 1} = \\
&= \left| \begin{aligned} u &= \left(\hbar^2(k_r^2 + k_z^2) / 2m^* + U_{i5} - (E_\Phi + U_N)\right) / k_B T, \\ du &= \frac{\hbar^2}{2m^* k_B T} dk_r^2, \quad E_z = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} + U_{i5} \end{aligned} \right| = \\
&\frac{2m^* k_B T}{(2\pi\hbar)^2} \int_{-\infty}^0 |\Psi_R(E_z(k_z), z)|^2 dk_z \int_{\frac{E_z - (E_\Phi + U_N)}{k_B T}}^{\infty} \frac{du}{e^u + 1} = \left| \int \frac{du}{e^u + 1} = \ln(e^{-u} + 1) \right| = \\
&= \frac{2m^* k_B T}{(2\pi\hbar)^2} \int_{-\infty}^0 |\Psi_R(E_z(k_z), z)|^2 \ln\left(\exp\left(-\frac{E_z - (E_\Phi + U_N)}{k_B T}\right) + 1\right) dk_z = \\
&\left| dk_z = -\frac{\sqrt{m^*}}{\sqrt{2}\hbar} \frac{dE_z}{\sqrt{E_z - U_{i5}}} \right| = \\
&= \frac{\sqrt{2}(m^*)^{3/2} k_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3} \int_{U_{i5}}^{\infty} \frac{|\Psi_R(E_z(k_z), z)|^2}{\sqrt{E_z - U_{i5}}} \ln\left(1 + \exp\left(-\frac{E_z - (E_\Phi + U_N)}{k_B T}\right)\right) dE_z.
\end{aligned}$$

Таким чином, формула для концентрації $n(z)$ набуде вигляду:

$$\begin{aligned}
n &= \frac{\sqrt{2}(m^*)^{3/2} k_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3} \int_{\min\{U_{i0}, U_{i5}\}}^{\infty} \left\{ \frac{|\Psi_L(E_z(k_z), z)|^2}{\sqrt{E_z - U_{i0}}} \ln\left(1 + \exp\left(-\frac{E_z - (E_\Phi + U_1)}{k_B T}\right)\right) + \right. \\
&+ \left. \frac{|\Psi_R(E_z(k_z), z)|^2}{\sqrt{E_z - U_{i5}}} \ln\left(1 + \exp\left(-\frac{E_z - (E_\Phi + U_N)}{k_B T}\right)\right) \right\} dE_z.
\end{aligned}$$

ДОДАТОК Б

Скінченно-різницева схема для системи рівнянь огинаючої хвильової функції (внутрішні точки)

За умови, коли участь в переносі заряду беруть електрони з двох долин (для певності „Г” та „Х”) для врахування перемішування електронних станів на гетерограницях необхідно розв’язувати наступну систему рівнянь відносно огинаючої хвильових функцій ψ_Γ та ψ_X [49, 50, 8]:

$$\left\{ \begin{array}{l} -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{mm_\Gamma} \frac{d\psi_\Gamma}{dz} + \left(V_\Gamma(z) - \underbrace{E + \frac{\hbar^2 k_\parallel^2}{2mm_\Gamma}}_{-E_z^\Gamma} \right) \psi_\Gamma + \alpha \delta(z_k) \psi_X = 0 \\ -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{mm_X} \frac{d\psi_X}{dz} + \left(V_X(z) - \underbrace{E + \frac{\hbar^2 k_\parallel^2}{2mm_X}}_{-E_z^X} \right) \psi_X + \alpha \delta(z_k) \psi_\Gamma = 0 \end{array} \right. \quad (\text{Б.1})$$

Тут $m_{\Gamma(X)}$ – відносна ефективна маса в $\Gamma(X)$ -долині, m – маса спокою електрона, $k = i_1, i_2, \dots, i_{N_b}$ – номери точок, що належать гетеро границям (N_b – кількість таких границь); α – стала міждолинної взаємодії [eV·Å]; $\delta(z)$ – дельта-функція Дірака.

Для більшої наочності викладок будемо вважати, що $k_\parallel^2 = 0$, так що $E_z^\Gamma = E_z^X \equiv E_z$ (як позначено в (Б.1)), з таким припущенням $\psi_{\Gamma(X)}$ є функціями лише координати z та поперечної енергії E_z .

На гетерограницях ці рівняння мають задовольняти узагальненим граничним умовам, що накладаються на огинаючі хвильових функцій Ψ_Γ (Ψ_X) [49, 50, 8]:

$$\Psi_\Gamma|_{z_k^-} = \Psi_\Gamma|_{z_k^+}, \quad (\text{Б.2})$$

$$\frac{\hbar^2}{2} \left[\left(\frac{1}{mm_\Gamma} \frac{d\Psi_\Gamma}{dz} \right)_{z=z_k^+} - \left(\frac{1}{mm_\Gamma} \frac{d\Psi_\Gamma}{dz} \right)_{z=z_k^-} \right] + \alpha \Psi_X|_{z=z_k} = 0. \quad (\text{Б.3})$$

Перепишемо перше з рівнянь системи (Б.1) у вигляді:

$$\frac{d}{dz} \frac{1}{m_\Gamma} \frac{d\Psi_\Gamma}{dz} + \frac{2m(E_z - V_\Gamma(z))}{\hbar^2} \Psi_\Gamma - \frac{2m}{\hbar^2} \alpha \delta(z_k) \Psi_X = 0, \quad (\text{Б.4})$$

та будемо шукати для нього кінцево-різницеву схему на нерегулярній сітці $\{z_i, i = 1, 2, \dots, N\}$, де N – кількість вузлів дискретної сітки.

Введемо позначення:

$$\begin{aligned} k(z) &\equiv \frac{1}{m_\Gamma(z)}; \\ q(z) &\equiv \frac{2m}{\hbar^2} (V_\Gamma - E_z); \\ f(x) &\equiv -\frac{2m}{\hbar^2} \alpha \delta(z_k) \Psi_X(z). \end{aligned} \quad (\text{Б.5})$$

В них (Б.4) перепишеться так:

$$\frac{d}{dz} k(z) \frac{d\Psi_\Gamma(z)}{dz} - q(z) \Psi_\Gamma(z) = -f(z). \quad (\text{Б.6})$$

Будь-яке трьохточкове рівняння, що відповідає (Б.6) може бути записане у вигляді [96]:

$$\frac{1}{\bar{h}_i} \left(b_i(z) \frac{\Psi_{i+1} - \Psi_i}{h_{i+1}} - a_i(z) \frac{\Psi_i - \Psi_{i-1}}{h_i} \right) - d_i(z) \Psi_i(z) + \varphi_i(z) = 0, \quad (\text{Б.7})$$

де $a_i(z)$, $b_i(z)$, $d_i(z)$, $\varphi_i(z)$ – шукані різницеві функції, що можуть в загальному випадку залежати від трьох значень координати: z_{i-1} , z_i та z_{i+1} ; $h_i = z_i - z_{i-1}$; $\bar{h}_i = (h_i + h_{i-1}) / 2$.

Для того, щоб кінцево-різницева схема (Б.7) задовольняла умові консервативності та самоспряженості кінцево-різницевого оператора, необхідно, щоб $b_i(z) = a_{i+1}(z)$. Тоді вона буде описувати рівняння збереження деякої фізичної величини ω в діапазоні $z \in \Omega$, де $\Omega: [z_{i-1/2}; z_{i+1/2}]$:

$$\omega_{i+1/2} - \omega_{i-1/2} - \int_{z_{i-1/2}}^{z_{i+1/2}} q(z) \Psi(z) dz = - \int_{z_{i-1/2}}^{z_{i+1/2}} f(z) dz, \quad (\text{Б.8})$$

де $\omega = k(z)u'(z)$; рівняння (Б.8) еквівалентне закону збереження потоку ймовірності. Легко бачити, що, стягуючи область Ω в точку, із (Б.8) отримаємо (Б.3).

Усю сукупність кінцево-різницевих схем другого порядку точності, що відповідають (Б.6), можна записати у вигляді [96]:

$$\frac{1}{\bar{h}_i} \left(a_{i+1}(z) \frac{\Psi_{i+1} - \Psi_i}{h_{i+1}} - a_i(z) \frac{\Psi_i - \Psi_{i-1}}{h_i} \right) - d_i(z) \Psi_i(z) + \varphi_i(z) = 0, \quad (\text{Б.9})$$

$$\text{де } a_i = \left(\frac{1}{h_i} \int_{z_{i-1}}^{z_i} \frac{dz}{k(z)} \right)^{-1}, \quad \varphi_i = \frac{1}{h_i} \int_{z_{i-1/2}}^{z_{i+1/2}} f(z) dz, \quad d_i = \frac{1}{h_i} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} q(z) dz.$$

Далі, застосовуючи інтегро-інтерполяційний метод [96], можна замінити відповідні інтеграли їх кінцево-різницевиими апроксимаціями. В даному випадку важливо, щоб усі точки z_k потрапляли у вузли сітки, оскільки функція $f(z)$ містить у собі δ -функцію, яка перетворюється в нуль всюди крім точок z_k . Розглянемо апроксимацію по трьохточковій схемі у випадку, якщо центральна точка схеми в точності співпадає з гетерограницею: $z_i = z_k$.

Враховуючи, що ефективна маса в цій точці зазвичай змінюється стрибкоподібно (функція $k(z)$ зазнає розрив I роду), а в інтервалах $z \in [z_{i-1}; z_i]$ і $z \in [z_i; z_{i+1}]$ достатньо гладка (зазвичай – просто стала), найкращим наближенням для інтегралу a_i є:

$$a_i = k_{i-1/2}. \quad (\text{Б.10})$$

У випадку, якщо ефективна маса в лівому та правому інтервалі не змінюється, можна точно покласти:

$$a_i = k_{i-1}. \quad (\text{Б.11})$$

Аналогічно, можна покласти:

$$a_{i+1} = k_{i+1}. \quad (\text{Б.12})$$

Інтеграл φ_i , очевидно, дорівнюватиме:

$$\varphi_i = \varphi_k = \frac{1}{\bar{h}_i} \int_{z_{i-1/2}}^{z_{i+1/2}} \varphi(z) dz = -\frac{1}{\bar{h}_i} \frac{2m}{\hbar^2} \alpha \psi_X(z); \quad (\text{Б.13})$$

$$d_i = \int_{z_{i-1/2}}^{z_{i+1/2}} q(z) dz \approx q_i \equiv (q_{i+1} + q_{i-1}) / 2. \quad (\text{Б.14})$$

Усі разом формули (Б.9)-(Б.14) задовольняють другому порядку точності апроксимації диференціального рівняння кінцево-різницевою схемою. Підставляючи апроксимації інтегралів (Б.10)–(Б.14) в (Б.9), отримаємо:

$$\frac{1}{\bar{h}_i} \left(\frac{1}{m_{i+1}} \frac{(\Psi_{\Gamma,i+1} - \Psi_{\Gamma,i})}{h_{i+1}} - \frac{1}{m_{i-1}} \frac{(\Psi_{\Gamma,i} - \Psi_{\Gamma,i-1})}{h_i} \right) - q_i \Psi_{\Gamma,i} + \varphi_i = 0. \quad (\text{Б.15})$$

Провівши еквівалентні перетворення, (Б.15) можна переписати у вигляді:

$$\Psi_{\Gamma,i+1} + \beta \Psi_{\Gamma,i-1} - (1 + \beta + h_{i+1} \bar{h}_i m_{i+1} q_i) \Psi_{\Gamma,i} + h_{i+1} \bar{h}_i m_{i+1} \varphi_i = 0 \quad (\text{Б.16})$$

де $\beta = \frac{h_{i+1} m_{i+1}}{h_i m_{i-1}}$.

Повертаючись повністю до початкових позначень у відповідності з (Б.5), отримаємо кінцево-різницеву схему для всіх точок $i = k$:

$$a_k \Psi_{\Gamma,k-1} + b_k \Psi_{\Gamma,k} + c_k \Psi_{\Gamma,k+1} = d_k \Psi_{X,k}, \quad (\text{Б.17})$$

де:

$$a_{\Gamma,k} = \frac{h_{k+1} m_{k+1}}{h_k m_{k-1}};$$

$$b_{\Gamma,k} = -1 - \frac{h_{k+1}}{h_k} \frac{m_{k+1}}{m_{k-1}} + \frac{h_{k+1} \bar{h}_k m_{k+1} 2m(E - V_{\Gamma,k})}{\hbar^2};$$

$$c_{\Gamma,k} = 1;$$

$$d_{\Gamma,k} = -\frac{2n_{k+1} m_{k+1} m\alpha}{\hbar^2}.$$

Ще раз підкреслимо, що схема (Б.17) з коефіцієнтами, що наведені під нею, має використовуватися лише для точок з індексами $i \in \{i_1, i_2, \dots, i_{N_b}\}$, тобто для гетерограниць. Ми індексуємо ці точки через k , щоб не плутати зі «звичайними» внутрішніми точками.

Для усіх інших точок (тобто для $i \notin \{i_1, i_2, \dots, i_{N_b}\}$) у випадку, якщо ефективна маса в межах шарів залишається незмінною, необхідно покласти в рівнянні (Б.17) $m_{i+1} = m_{i-1} = m_i$, що призведе до виразу:

$$a_i \psi_{\Gamma,i-1} + b_i \psi_{\Gamma,i} + c_i \psi_{\Gamma,i+1} = 0, \quad (\text{Б.18})$$

$$\text{де } a_i = \frac{h_{i+1}}{h_i}; \quad b_i = -1 - \frac{h_{i+1}}{h_i} + \frac{h_{i+1} h_i m_i 2m(E - V_{\Gamma,i})}{\hbar^2}; \quad c_i = 1.$$

Наголосимо, що ця схема придатна для всіх точок, крім $i \in \{i_1, i_2, \dots, i_{N_b}\}$.

Формули (Б.17) та (Б.18) дозволяють зіставити першому з рівнянь (Б.1) його кінцево-різницеву схему у всіх внутрішніх точках. При її отриманні було виконано всі умови, щоб вона мала другий порядок точності, в чому можна безпосередньо переконатися.

Для того, щоб отримати кінцево-різницеву схему для другого рівняння системи (Б.1), необхідно у формулах (Б.17) та (Б.18) скрізь поміняти місцями індекси „X” та „Г”.

Для того, щоб отримати кінцево-різницеву схему з регулярною сіткою, що має крок h , необхідно в рівняннях (Б.17) та (Б.18) покласти $h_{i-1} = h_i = h_{i+1} \equiv h$.

Нарешті, якщо в (Б.17) покласти $\alpha = 0$, то це рівняння буде описувати кінцево-різницеву схему для $\Gamma(X)$ -долини однодолинної моделі (формула (Б.17) при цьому не зміниться).

ДОДАТОК В

Рівняння, що замикають кінцево-різницеву схему

Рівняння, що замикають кінцево-різницеву схему, що відповідає рівнянню Шредингера для огинаючої хвильової функції, можуть бути отримані з умов неперервності хвильової функції та її першої похідної в точках, що є лівою та правою границею «квантової» області пристрою, z_0 та z_5 відповідно (такий метод отримання рівнянь, що замикають кінцево-різницеву схему має свою назву в англійській літературі – *Quantum Transmitting Boundary Method (QTBМ)* [98]):

$$\begin{cases} \psi^I(z_0) = \psi^{II}(z_0), \\ \frac{1}{m^I(z_{0-})} \frac{d\psi^I(z_0)}{dz} = \frac{1}{m^{II}(z_{0+})} \frac{d\psi^{II}(z_0)}{dz}, \end{cases} \quad (B.1)$$

$$\begin{cases} \psi^{II}(z_5) = \psi^{III}(z_5), \\ \frac{1}{m^{II}(z_{5-})} \frac{d\psi^{II}(z_5)}{dz} = \frac{1}{m^{III}(z_{5+})} \frac{d\psi^{III}(z_5)}{dz}, \end{cases} \quad (B.2)$$

де $\psi^{I,II,III}$, $m^{I,II,III}$ – хвильові функції та ефективні маси у лівому резервуарі, квантовій області та правому резервуарі. Надалі ми не будемо вказувати, в якій точці береться ефективна маса, оскільки це й так зрозуміло.

У резервуарах вид хвильової функції відомий: це суперпозиція хвиль де Бройля; у квантовій області хвильова функція позначається через ψ^{II} , саме вона шукається за допомогою кінцево-різницевої схеми, рівняння для крайніх точок якої тут виводяться.

Для електронів з *лівого резервуару*:

$$\Psi_L(z) = \begin{cases} \Psi^I(z) = \exp\{ik_L(z - z_0)\} + r_L \exp\{-ik_L(z - z_0)\}, z < z_0, \\ \Psi^{II}(z), z \in [z_0; z_5], \\ \Psi^{III}(z) = t_L \exp\{ik_R(z - z_5)\}, z > z_5. \end{cases} \quad (\text{B.3})$$

$$\text{де } k_{L(R)} = \sqrt{2m_{L(R)}^*(E_z - U_{i0(i5)})} / \hbar.$$

При цьому $\Psi^{II}(z)$ визначається в дискретних точках $\psi_i = \Psi^{II}(z_i) = \Psi^{II}\{\Delta(i - 1)\}$ чисельним методом.

Знайдемо рівняння для *лівої границі* для електронів з *лівого резервуару*.

Після врахування (B.3), (B.1) переписеться:

$$\begin{cases} 1 + r_L = \psi_1, \\ ik_L(1 - r_L)\alpha = (\psi_2 - \psi_1) / \Delta, \end{cases} \quad (\text{B.4})$$

де $\alpha = m_{II}/m_I$. В другому рівнянні (B.4) було використано апроксимацію похідної:

$$\frac{d\psi^{II}(z_0)}{dz} \approx \frac{\psi_2 - \psi_1}{\Delta}.$$

Виключаючи з (B.4) r_L , знаходимо рівняння, що замикає кінцево-різницеву схему для Ψ_L ліворуч:

$$(i\alpha k_L \Delta - 1)\psi_1 + \psi_2 = 2i\alpha k_L \Delta, \quad (\text{B.5})$$

а також вираз для «комплексного коефіцієнта відбивання» r_L :

$$r_L = \psi_1 - 1.$$

Коефіцієнт відбивання (ймовірність відбивання) електрона від лівої границі активної області дорівнює [54]:

$$R_{LR} = \frac{|j_{\leftarrow}^I|}{|j_{\rightarrow}^I|},$$

де $j_{\rightarrow(\leftarrow)}^I$ – густина потоку ймовірності, що відповідає падаючій: $\psi_{\rightarrow}^I(z) = \exp\{ik_L(z - z_0)\}$ (відбитій: $\psi_{\leftarrow}^I(z) = -r_L \exp\{-ik_L(z - z_0)\}$) хвилям в першій області, та визначається [76]:

$$j = \frac{i\hbar}{2m^*} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi). \quad (\text{B.6})$$

Для знаходження $j_{\rightarrow(\leftarrow)}^I$ під ψ в (B.6) слід розуміти $\psi_{\rightarrow(\leftarrow)}^I$. Провівши обчислення, отримаємо:

$$R_{LR} = |r_L|^2 = |\psi_1 - 1|^2. \quad (\text{B.7})$$

Знайдемо рівняння для *правої границі* для електронів з *лівого резервуару*. Враховуючи (B.3), (B.2) перепишеться:

$$\begin{cases} \psi_N = t_L, \\ \frac{m_{III}}{m_{II}} \frac{(\psi_N - \psi_{N-1})}{\Delta} = t_L i k_R, \end{cases},$$

де було використано апроксимацію похідної

$$\frac{d\psi^{II}(z_5)}{dz} \approx \frac{\psi_N - \psi_{N-1}}{\Delta}.$$

З цієї системи отримаємо рівняння, що замикає кінцево-різницеву схему для ψ_L праворуч:

$$(ik_R\Delta - \alpha)\psi_N = \alpha\psi_{N-1} = 0, \quad (\text{B.8})$$

де $\alpha = m_{\text{III}}/m_{\text{II}}$.

Коефіцієнт проходження (ймовірність проходження) електрона через активну область дорівнює [54]:

$$T_{LR} = \frac{|j_{\rightarrow}^{\text{III}}|}{|j_{\rightarrow}^{\text{I}}|}, \quad (\text{B.9})$$

де $j_{\rightarrow}^{\text{I(III)}}$ – густина потоку ймовірності, що відповідає хвилі, яка падає на активну область $\psi_{\rightarrow}^{\text{I}}(z) = \exp\{ik_L(z - z_0)\}$ (пройшла через активну область $\psi_{\rightarrow}^{\text{III}} = \psi^{\text{III}} = t_L \exp\{ik_R(z - z_5)\}$) та визначається відповідно до (B.6). Обчислення дають:

$$T_{LR} = \frac{k_R}{k_L} \frac{m_L}{m_R} |t_L|^2 = \frac{k_R}{k_L} \frac{m_L}{m_R} |\psi_N|^2 \quad (\text{B.10})$$

Для електронів з правого резервуару:

$$\psi_R(z) = \begin{cases} \psi^{\text{I}}(z) = t_R \exp\{-ik_L(z - z_0)\}, & z < z_0, \\ \psi^{\text{II}}(z), & z \in [z_0; z_5], \\ \psi^{\text{III}}(z) = r_R \exp\{ik_R(z - z_5)\} + \exp\{-ik_R(z - z_5)\}, & z > z_5 \end{cases} \quad (\text{B.11})$$

Рівняння, що замикають кінцево-різницеву схему для ψ_R можуть бути отримані з (B.1), (B.2) та (B.11).

Знайдемо рівняння, що замикає кінцево-різницеву схему для *лівої границі* для електронів, що інжектуються з *правого резервуару*. Враховуючи (В.11), (В.1) перепишеться:

$$\begin{cases} t_R = \psi_1, \\ \frac{m_I}{m_{II}} \frac{\psi_2 - \psi_1}{\Delta} = -ik_L t_R, \end{cases}$$

звідки можна отримати рівняння, яке замикає кінцево-різницеву схему для ψ_R зліва:

$$(ik_L \Delta - \alpha) \psi_1 + \alpha \psi_2 = 0, \quad (\text{В.12})$$

де $\alpha = m_I/m_{II}$.

Аналогічно до того, як було отримано (В.10), можна отримати вираз для ймовірності проходження електрона через активну область зліва направо:

$$T_{RL} = \frac{k_L}{k_R} \frac{m_R}{m_L} |t_R|^2 = \frac{k_L}{k_R} \frac{m_R}{m_L} |\psi_1|^2. \quad (\text{В.13})$$

Після врахування (В.11), (В.2) перепишеться:

$$\begin{cases} \psi_N = 1 + r_R, \\ \frac{m_{III}}{m_{II}} \frac{\psi_N - \psi_{N-1}}{\Delta} = ik_R (r_R - 1), \end{cases}$$

де $\alpha = m_{III}/m_{II}$. Виключаючи r_R , отримаємо рівняння, що замикає кінцево-різницеву схему для ψ_R праворуч:

$$\alpha\psi_{N-1} + (ik_R\Delta - \alpha)\psi_N = 2ik_R\Delta. \quad (\text{B.14})$$

Ймовірності відбиття електрона від правої границі квантової області:

$$R_{RL} = |r_R|^2 = |\psi_N - 1|^2. \quad (\text{B.15})$$

Для подальшого викладу результатів роботи необхідно зробити зауваження стосовно коефіцієнтів проходження та відбивання від границь квантової області. У [54] для ще ширшого класу систем, ніж та, що нами розглядається, показано, що:

$$T_{RL} = T_{LR} \equiv T, \quad R_{RL} = R_{LR} \equiv R.$$

Це випливає з того, що вирази для хвильової функції в I та III областях є формами розв'язання одного й того ж диференціального рівняння (Шредінгера).

Зауважимо, що з (B.7), (B.10) та (B.13), (B.15) слідують наступні корисні співвідношення:

$$|t_R|^2 = \frac{k_R}{k_L} T = \frac{k_R}{k_L} (1 - R), \quad (\text{B.16})$$

$$|t_L|^2 = \frac{k_L}{k_R} T = \frac{k_L}{k_R} (1 - R). \quad (\text{B.17})$$

ДОДАТОК Г

Метод матриць передачі для Γ -X-розсіювання в незміщеній гетероструктурі

Для довільної границі між будь-яким i -м та $i+1$ -м шаром гетероструктури, що показана на рис. Г.1, можна записати умови, що накладаються на хвильову функцію в $\Gamma(X)$ -долині (позначимо її через $\Psi^{\Gamma(X)}$), у вигляді [49]:

$$\Psi^{\Gamma(X)} \Big|_{z_{i,i+1}-0} = \Psi^{\Gamma(X)} \Big|_{z_{i,i+1}+0}, \quad (\Gamma.1)$$

$$\frac{1}{m^{\Gamma(X)}} \frac{d\Psi^{\Gamma(X)}}{dz} \Big|_{z=z_{i,i+1}-0} = \frac{1}{m^{\Gamma(X)}} \frac{d\Psi^{\Gamma(X)}}{dz} \Big|_{z=z_{i,i+1}+0} + \frac{2}{\hbar^2} \alpha \Psi^{\Gamma(X)} \Big|_{z=z_{i,i+1}}, \quad (\Gamma.2)$$

де $m_i^{\Gamma(X)}$ – ефективна маса електрона в i -му шарі $\Gamma(X)$ -долини, \hbar – стала Планка, $z_{i,i+1}$ – координата межі i -го та $i+1$ -го шарів.

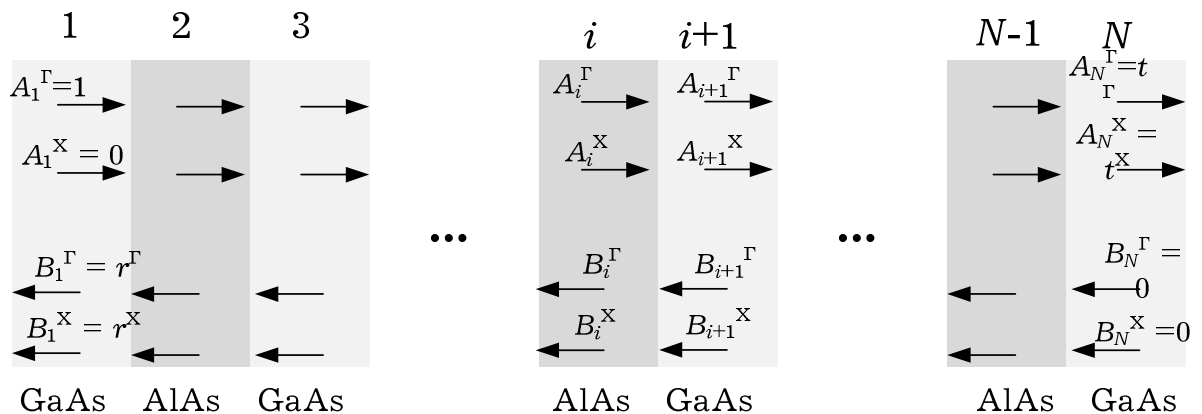


Рис. Г.1. Амплітуди падаючих та відбитих плоских електронних хвиль у багатобар'єрній гетероструктурі.

Рівняння (Г.1) виражають умови неперервності хвильової функції електрона для $\Gamma(X)$ -долин. Рівняння (Г.2) виражають умови неперервності потоку густини ймовірності з врахуванням перемішування станів, яке відбувається на межі двох шарів гетероструктури $z_{i,i+1}$.

У разі, коли потенціальна енергія електрона в межах кожного шару гетероструктури не змінюється (наближення «плоских зон»), розв'язком рівняння Шредінгера у кожному шарі буде суперпозиція плоских хвиль. За цих умов можна переписати умови (Г.1) та (Г.2) наступним чином:

$$A_i^\Gamma e^{ik_i^\Gamma z_{i,i+1}} + B_i^\Gamma e^{-ik_i^\Gamma z_{i,i+1}} = A_{i+1}^\Gamma e^{ik_{i+1}^\Gamma z_{i,i+1}} + B_{i+1}^\Gamma e^{-ik_{i+1}^\Gamma z_{i,i+1}}, \quad (\Gamma.3)$$

$$A_i^X e^{ik_i^X z_{i,i+1}} + B_i^X e^{-ik_i^X z_{i,i+1}} = A_{i+1}^X e^{ik_{i+1}^X z_{i,i+1}} + B_{i+1}^X e^{-ik_{i+1}^X z_{i,i+1}}, \quad (\Gamma.4)$$

$$\frac{ik_i^\Gamma}{m_i^\Gamma} \left(A_i^\Gamma e^{ik_i^\Gamma z_{i,i+1}} - B_i^\Gamma e^{-ik_i^\Gamma z_{i,i+1}} \right) = \frac{ik_{i+1}^\Gamma}{m_{i+1}^\Gamma} \left(A_{i+1}^\Gamma e^{ik_{i+1}^\Gamma z_{i,i+1}} + B_{i+1}^\Gamma e^{-ik_{i+1}^\Gamma z_{i,i+1}} \right) - \frac{2\alpha}{\hbar^2} \psi^X \Big|_{z_{i,i+1}}, \quad (\Gamma.5)$$

$$\frac{ik_i^X}{m_i^X} \left(A_i^X e^{ik_i^X z_{i,i+1}} - B_i^X e^{-ik_i^X z_{i,i+1}} \right) = \frac{ik_{i+1}^X}{m_{i+1}^X} \left(A_{i+1}^X e^{ik_{i+1}^X z_{i,i+1}} + B_{i+1}^X e^{-ik_{i+1}^X z_{i,i+1}} \right) - \frac{2\alpha}{\hbar^2} \psi^\Gamma \Big|_{z_{i,i+1}}, \quad (\Gamma.6)$$

де $k_i^{\Gamma(X)} = \frac{\sqrt{2m_i^{\Gamma(X)}(E - U_i^{\Gamma(X)})}}{\hbar}$, $U_i^{\Gamma(X)}$ – потенціальна енергія електрона в

$\Gamma(X)$ -долині i -го шару; E – поперечна енергія електрона; $A_i^{\Gamma(X)}$ – амплітуди, відповідно, падаючої та відбитої хвилі в $\Gamma(X)$ -долині i -го шару; α – константа взаємодії між Γ та X долинами.

В якості значення $\psi^{\Gamma(X)} \Big|_{z_{i,i+1}}$ можна взяти будь-яку з хвильових функцій $\psi_i^{\Gamma(X)}$ та $\psi_{i+1}^{\Gamma(X)}$ чи середнє між ними, бо вони рівні між собою в силу (Г.3) та (Г.4). В подальших розрахунках будемо вважати, що:

$$\Psi^{\Gamma(X)} \Big|_{z_{i,i+1}} = A_i^{\Gamma(X)} e^{ik_i^{\Gamma(X)} z_{i,i+1}} + B_i^{\Gamma(X)} e^{-ik_i^{\Gamma(X)} z_{i,i+1}}. \quad (\Gamma.7)$$

Рівняння (Г.3)–(Г.6) можна переписати у матричному вигляді:

$$\mathbf{M}_i \times \mathbf{a}_i = \mathbf{M}_{i+1} \times \mathbf{a}_{i+1}, \quad (\Gamma.8)$$

де

$$\mathbf{M}_i = \begin{bmatrix} e^{ik_i^{\Gamma} z_{i,i+1}} & e^{-ik_i^{\Gamma} z_{i,i+1}} & \wp_i^{\Gamma} e^{ik_i^X z_{i,i+1}} & \wp_i^{\Gamma} e^{-ik_i^X z_{i,i+1}} \\ \kappa_i^{\Gamma} e^{ik_i^{\Gamma} z_{i,i+1}} & -\kappa_i^{\Gamma} e^{-ik_i^{\Gamma} z_{i,i+1}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{ik_i^X z_{i,i+1}} & e^{-ik_i^X z_{i,i+1}} \\ \wp_i^X e^{ik_i^{\Gamma} z_{i,i+1}} & \wp_i^X e^{-ik_i^{\Gamma} z_{i,i+1}} & \kappa_i^X e^{ik_i^X z_{i,i+1}} & -\kappa_i^X e^{-ik_i^X z_{i,i+1}} \end{bmatrix}, \quad (\Gamma.9)$$

$$\mathbf{M}_{i+1} = \begin{bmatrix} e^{ik_{i+1}^{\Gamma} z_{i,i+1}} & e^{-ik_{i+1}^{\Gamma} z_{i,i+1}} & 0 & 0 \\ e^{ik_{i+1}^{\Gamma} z_{i,i+1}} & -e^{-ik_{i+1}^{\Gamma} z_{i,i+1}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{ik_{i+1}^X z_{i,i+1}} & e^{-ik_{i+1}^X z_{i,i+1}} \\ 0 & 0 & e^{ik_{i+1}^X z_{i,i+1}} & -e^{-ik_{i+1}^X z_{i,i+1}} \end{bmatrix}, \quad (\Gamma.10)$$

$$\mathbf{a}_i = [A_i^{\Gamma} \ B_i^{\Gamma} \ A_i^X \ B_i^X]^T, \quad \mathbf{a}_{i+1} = [A_{i+1}^{\Gamma} \ B_{i+1}^{\Gamma} \ A_{i+1}^X \ B_{i+1}^X]^T \quad (\Gamma.11)$$

У (Г.9) для скорочення запису використано позначення:

$$\kappa_i^{\Gamma(X)} \equiv \frac{m_{i+1}^{\Gamma(X)} k_i^{\Gamma(X)}}{m_i^{\Gamma(X)} k_{i+1}^{\Gamma(X)}}, \quad \wp_i^{\Gamma(X)} \equiv \alpha \frac{2 m_{i+1}^{\Gamma(X)}}{\hbar^2 ik_{i+1}^{\Gamma(X)}}.$$

З (Г.8) можна віднайти зв'язок амплітуд хвильової функції ліворуч та праворуч від границі поділу:

$$\mathbf{a}_{i+1} = \mathbf{T}_{i+1,i} \times \mathbf{a}_i.$$

де $\mathbf{T}_{i+1,i} \equiv \mathbf{M}_{i+1}^{-1} \mathbf{M}_i$ – так звана матриця передачі електронних хвиль.

З тих самих суджень можна отримати:

$$\mathbf{a}_{i+2} = \mathbf{T}_{i+2,i+1} \times \mathbf{a}_{i+1} = \mathbf{T}_{i+2,i+1} \times \mathbf{T}_{i+1,i} \times \mathbf{a}_i$$

і так далі. Врешті, можна показати, що зв'язок між усіма падаючими та відбитими хвилями у першому та останньому шарах можна визначити за допомогою виразу:

$$\mathbf{a}_N = \underbrace{\mathbf{T}_{N,N-1} \times \mathbf{T}_{N-1,N-2} \times \dots \times \mathbf{T}_{3,2} \times \mathbf{T}_{2,1}}_{N-1 \text{ множників}} \times \mathbf{a}_1 = \prod_{i=1}^{N-1} \mathbf{T}_{i,i+1} \mathbf{a}_1.$$

Увівши позначення: $\mathbf{T} = \prod_{i=1}^{N-1} \mathbf{T}_{i,i+1}$, можна записати:

$$\mathbf{a}_N = \mathbf{T} \mathbf{a}_1,$$

або (позначивши елементи матриці \mathbf{T} через t_{ij}) в розкритому вигляді:

$$\begin{bmatrix} A_N^\Gamma \\ B_N^\Gamma \\ A_N^X \\ B_N^X \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} t_{11} & t_{12} & t_{13} & t_{14} \\ t_{21} & t_{22} & t_{23} & t_{24} \\ t_{31} & t_{32} & t_{33} & t_{34} \\ t_{41} & t_{42} & t_{43} & t_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_1^\Gamma \\ B_1^\Gamma \\ A_1^X \\ B_1^X \end{bmatrix}. \quad (\Gamma.12)$$

Принципово невідомими при цьому є хвилі, що розходяться від гетероструктури, тобто A_N^Γ , A_N^X , B_1^Γ , B_1^X . Перетворимо (Г.12), щоб виокремити вектор невідомих хвиль. Дістанемо:

$$\begin{bmatrix} 1 & -t_{12} & 0 & -t_{14} \\ 0 & -t_{22} & 1 & -t_{24} \\ 0 & -t_{32} & 0 & -t_{34} \\ 0 & -t_{42} & 0 & -t_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_N^\Gamma \\ B_1^\Gamma \\ A_N^X \\ B_1^X \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} t_{11}A_1^\Gamma + t_{13}A_1^X \\ t_{21}A_1^\Gamma + t_{23}A_1^X - B_N^\Gamma \\ t_{31}A_1^\Gamma + t_{33}A_1^X \\ t_{41}A_1^\Gamma + t_{43}A_1^X - B_N^X \end{bmatrix}. \quad (\Gamma.13)$$

Очевидно, що:

$$\begin{bmatrix} A_N^\Gamma \\ B_1^\Gamma \\ A_N^X \\ B_1^X \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -t_{12} & 0 & -t_{14} \\ 0 & -t_{22} & 1 & -t_{24} \\ 0 & -t_{32} & 0 & -t_{34} \\ 0 & -t_{42} & 0 & -t_{44} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} t_{11}A_1^\Gamma + t_{13}A_1^X \\ t_{21}A_1^\Gamma + t_{23}A_1^X - B_N^\Gamma \\ t_{31}A_1^\Gamma + t_{33}A_1^X \\ t_{41}A_1^\Gamma + t_{43}A_1^X - B_N^X \end{bmatrix} \quad (\Gamma.14)$$

Для електрона, що налітає на таку гетероструктуру з Γ -долини зліва, слід покласти:

$$A_1^\Gamma = 1, B_N^\Gamma = 0, A_1^X = 0, B_N^X = 0 \quad (\Gamma.15)$$

(для того, щоб відобразити налітання електрона, що перебуває у змішаному стані (частково – в Γ , частково – в X -долині) треба задати A_1^Γ , A_1^X , для багаточастинкової задачі в одночастинковому наближенні, виходячи з заселеності долин у прилеглому зліва до гетероструктури шару).

Позначимо невідомі поки що амплітуди хвиль таким чином:

$$A_N^\Gamma = t^\Gamma, A_N^X = t^X, B_1^\Gamma = r^\Gamma, B_1^X = r^X. \quad (\Gamma.16)$$

Враховуючи (Г.15) та (Г.16), (Г.14) спрощується:

$$\begin{bmatrix} t^\Gamma \\ r^\Gamma \\ t^X \\ r^X \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -t_{12} & 0 & -t_{14} \\ 0 & -t_{22} & 1 & -t_{24} \\ 0 & -t_{32} & 0 & -t_{34} \\ 0 & -t_{42} & 0 & -t_{44} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} t_{11} \\ t_{21} \\ t_{31} \\ t_{41} \end{bmatrix}. \quad (\Gamma.17)$$

З (Г.17) можна визначити коефіцієнти проходження електрона:

– в Γ -долину з Γ -долини

$$T^{\Gamma\Gamma} = \frac{|J_{\Gamma,N}^{\rightarrow}|}{|J_{\Gamma,1}^{\rightarrow}|} = |t^\Gamma|^2$$

– в X -долину з Γ -долини

$$T^{\Gamma X} = \frac{|J_{X,N}^{\rightarrow}|}{|J_{\Gamma,1}^{\rightarrow}|} = |t^X|^2,$$

де $J_{\Gamma(X),N}^{\rightarrow(\leftarrow)}$ – потік густини ймовірності у падаючій (відбитій) хвилі для електрона, що належить до $\Gamma(X)$ долині.