

СОДЕРЖАНИЕ

Краткое содержание первой части

ВВЕДЕНИЕ

1. СРЕДСТВА МОДЕЛИРОВАНИЯ

- 1.1. Метод кинетического уравнения
- 1.2. Метод Монте-Карло
- 1.3. Релаксационные уравнения
- 1.4. Уравнения дрейфово-диффузионной модели
- 1.5. Квантовые модели переноса заряда
- 1.6. Моделирование субмикронных структур

2. ПОЛУПРОВОДНИКОВЫЕ МАТЕРИАЛЫ

- 2.1. Зонная структура полупроводников
- 2.2. Механизмы и скорости рассеяния
- 2.3. Средние времена релаксации
- 2.4. Подвижность электронов

3. ГОРЯЧИЕ НОСИТЕЛИ В СИЛЬНОМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

- 3.1. Разогрев электронного газа
- 3.2. Насыщение дрейфовой скорости
- 3.3. Динамическая проводимость
- 3.4. «Всплеск» дрейфовой скорости
- 3.5. Диффузия горячих электронов

4. СУБМИКРОННЫЕ ПОЛЕВЫЕ ТРАНЗИСТОРЫ

- 4.1. Общие свойства
- 4.2. Квазидвумерная модель ПТШ
- 4.3. Схемные модели ПТШ
- 4.4. Модели ПТШ для режима большого сигнала
- 4.5. Двумерное моделирование субмикронных ПТШ
- 4.6. Моделирование эффектов третьего измерения

Содержание второй части

5. ГЕТЕРОСТРУКТУРНЫЕ ПОЛЕВЫЕ ТРАНЗИСТОРЫ	3
5.1. Общие свойства	3
5.2. Кинетическое моделирование ГСПТ	8
5.3. Двумерное моделирование ГСПТ	18
5.4. Гетеротранзисторы с двумя потенциальными ямами	23
5.4.1. Численное моделирование	24
5.4.2. Аналитическая модель статических характеристик.....	27
5.4.3. Схемные модели и шумовые параметры	31
5.5. Гетероструктурные транзисторы с квантовыми точками	34
Литература к разделу 5	46
6. МОЩНЫЕ СВЧ ТРАНЗИСТОРЫ	51
6.1. Мощные субмикронные ПТШ	51
6.2. Мощные гетероструктурные полевые транзисторы	59
6.3. Гетеробиполярные транзисторы	63
6.3.1. Двумерное моделирование транзисторов	64
6.3.2. Моделирование разогревных эффектов	69

6.3.3. Схемное моделирование процессов саморазогрева	73
6.3.4. Электротепловой анализ монолитных интегральных схем на субмикронных транзисторах	82
6.3.5. Шумовые свойства субмикронных гетеробиполярных транзисторов.....	84
6.4. Мощные МОП-транзисторы	90
Литература к разделу 6	99
7. РЕЗОНАНСНО-ТУННЕЛЬНЫЕ ДИОДЫ.....	105
7.1. Основные представления.....	105
7.1.1. Структурные составляющие РТД.....	105
7.1.2. Принцип работы резонансно-туннельного диода.....	106
7.1.2. Механизм токопереноса.....	110
7.2. Условно-аналитические модели.....	115
7.2.1. Метод плоских волн.....	119
7.2.2. Использование лоренцевой модельной функции.....	122
7.2.3. Полуаналитическая упрощенная модель РТД.....	126
7.2.4. Другие условно-аналитические методы.....	131
7.3. Численные модели.....	133
7.3.1. Концентрация и волновые функции.....	133
7.3.2. Влияние пространственного заряда.....	140
7.3.3. Обобщенная формула Цу-Эсаки.....	147
7.3.4. Рассеивание в квантовой яме РТД.....	151
7.3.5. Влияние вторичных факторов на характеристики	158
7.4. Двухдолинное моделирование.....	162
7.5. Экспериментальная верификация моделей	171
Литература к разделу 7	180
ПРИЛОЖЕНИЯ	187
П5. Алгоритм численного моделирования гетероструктурных транзисторов	187
П7.1. Вывод формулы Цу-Эсаки	197
П7.2. Конечно-разностная схема для системы уравнений оггибающей волновой функции	198
П7.3. Уравнения, замыкающие конечно-разностную схему	204

5. ГЕТЕРОСТРУКТУРНЫЕ ПОЛЕВЫЕ ТРАНЗИСТОРЫ

5.1. ОБЩИЕ СВОЙСТВА

Улучшение параметров ПТШ может быть достигнуто увеличением концентрации носителей в канале за счет повышения уровня легирования. Но при этом из-за примесного рассеяния падает подвижность и соответственно скорость носителей. Выход из этой ситуации может дать использование гетеропереходов. Основная идея при этом состоит в том, чтобы пространственно разделить области легирования с ионизированными донорными атомами и порожденных ими электронов, что должно существенно снизить примесное рассеяние и повысить подвижность. Одним из способов реализации этой идеи является использование гетероконтакта широкозонного высоколегированного полупроводника с нелегированным узкозонным. Различие энергий электронного сродства приводит к появлению разрыва дна зоны проводимости и, как следствие, к переходу электронов из широкозонного материала в нелегированный узкозонный. Наличие пространственного заряда электронов вызывает изгиб зоны проводимости и повышение концентрации электронов в образовавшейся потенциальной яме. Наиболее изученными и технологически отработанными являются гетероструктуры GaAs/AlGaAs. Подвижность электронов, перешедших в слой узкозонного материала и образующих там двумерный электронный газ, достигает при комнатной температуре значений, характерных для чистого материала (рис. 5.1).

Большая концентрация электронов в тонком слое, высокая подвижность, а также возможность управления концентрацией носителей в канале способствовали быстрой разработке нового типа полевых транзисторов на двумерном электронном газе. Первые полевые транзисторы, использующие гетеропереход GaAs/AlGaAs, с крутизной почти в три раза большей, чем крутизна аналогичного GaAs ПТШ, были описаны в

1980 г. [5.2]. Эти транзисторы получили название *HEMT* (*High Electron Mobility Transistor*). В литературе встречаются также названия: *TEGFET* (*Two Dimensional Electron FET*) или *SDH-FET* (*Selectively Doped Heterostructure FET*). Последнее время чаще используется более общее название полевых транзисторов на основе гетероструктур ГСПТ (гетероструктурный полевой транзистор) или *HFET* (*Heterostructure Field Effect Transistor*). Схематическое изображение такого транзистора дано на рис. 5.2.

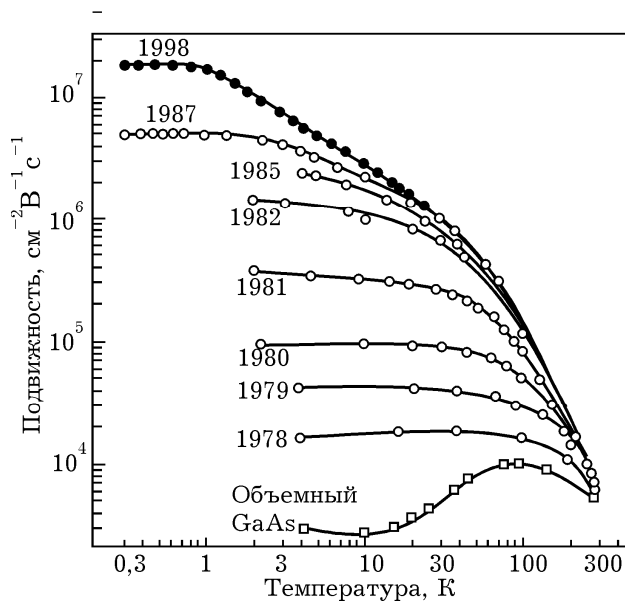


Рис. 5.1. Прогресс, достигнутый за 20 лет в повышении подвижности электронов в двумерной электронной системе модулированно-легированных гетероструктур GaAs/AlGaAs [5.1].

Основным структурным «элементом» в ГСПТ на основе GaAs является область двумерного электронного газа (ДЭГ). Она формируется в зоне гетероперехода между барьерным $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ -слоем и нелегированным канальным GaAs-слоем. Ширина запрещенной зоны у $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ выше, чем у GaAs (рис. 2.14), и в области гетероперехода граница зоны проводимости GaAs может оказаться ниже уровня Ферми – образуется потенциальная яма (рис. 5.2, з).

В ГСПТ на основе GaAs барьерный слой легируют кремнием (т.е. получают высоколегированный $n\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ -слой), чтобы обеспечить источник свободных электронов. Переход электронов в потенциальную яму из области барьерного слоя вызван тем, что из-за различной энергии электронного сродства GaAs и AlGaAs в области их контакта образуется доста-

точно сильное электрическое поле, моделируемое обычно разрывом запрещенной зоны ΔE_c , инициирующее переход свободных электронов из $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ в потенциальную яму. Зачастую выбирают долю Al $x \approx 0,3$, при которой $\Delta E_c \approx 0,3$ эВ. Таким образом, в канальном GaAs-слое непосредственно под гетеропереходом образуется тонкий слой пространственного заряда с высокой плотностью и подвижностью свободных электронов, который и называют двумерным электронным газом.

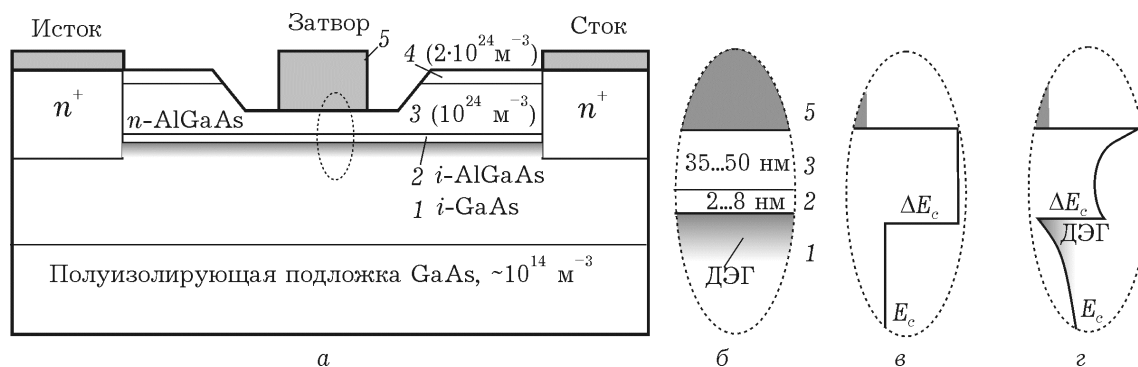


Рис. 5.2. Поперечное сечение ГСПТ (а) с характерными толщинами слоев (б): 1 – нелегированный GaAs, 2 – спейсер – нелегированный слой AlGaAs, 3 – барьерный слой – n AlGaAs, 4 – контактный слой – n^+ GaAs. Потенциальный профиль дна зоны проводимости исходных материалов (в) и в равновесном состоянии (г).

Между барьерным и канальным слоем формируют так называемый спейсер (*spacer*) – слой высокоомного нелегированного AlAs или $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Основное назначение этого тонкого (1–3 нм) слоя – предотвратить рассеяние носителей в канале на границе с гетеропереходом. Верхняя часть барьерного слоя образует с металлом затвора барьер Шоттки, который, как и в обычном ПТШ, управляет проводимостью канала. Иногда в барьерном слое формируют область с высокой концентрацией кремния (так называемое δ -легирование), n^+ - $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ -слой для улучшения омических контактов стока и истока и увеличения концентрации носителей в канале.

Структуры современных ГСПТ весьма разнообразны, они могут существенно различаться по числу слоев, типу их материала, степени легирования и другим параметрам. На рис. 5.3, а изображена структура двухпереходного транзисто-

ра, в котором канал образуется в слое нелегированного арсенида галлия толщиной 30...50 нм между двумя слоями более широкозонного n^+ - $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. В электронном газе, ограниченном потенциальными барьерами с двух сторон, квантовые свойства ДЭГ проявляются еще в большей степени, чем в предыдущей конструкции.

Перспективными для использования в последнее время считаются нитриды галлия и алюминия. Наиболее технологически освоены структуры на гетеропереходах $\text{GaN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$. В монокристаллическом нелегированном GaN подвижность электронов проводимости оказывается весьма высокой – около $0,2 \text{ м}^2/(\text{В}\cdot\text{с})$ при комнатной температуре. Разрыв дна зоны проводимости пары GaN и $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ существенно больше, чем в гетеропереходе $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, и составляет около 0,8 эВ. Поэтому электростатическое поле в области контакта еще более сильное, а концентрация свободных электронов, перешедших из $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ в потенциальную яму GaN , может быть существенно выше. Кроме того, в области контакта GaN и $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ (или AlN) из-за несовпадения периода их кристаллических решеток образуются механические напряжения. А поскольку кристаллы AlN и GaN обладают сильной степенью поляризации, возникает пьезоэффект, стимулирующий дополнительный переход носителей в канал. В результате концентрация электронов проводимости в области ДЭГ может превышать 10^{13} см^{-2} . Отметим, что пьезоэффект столь велик, что его одного зачастую достаточно для обеспечения необходимой концентрации носителей в канале. Так, если в ГСПТ на основе GaAs барьерный слой обязательно легируют, чтобы обеспечить источник свободных электронов, то в случае нитрида галлия возможно использовать и нелегированный барьерный слой. Однако обычно барьерный слой в большинстве GaN -структур легирован. Сочетание высоких подвижности и концентрации носителей в канале при широкой запрещенной зоне (около 3,4 эВ при комнатной температуре) обуславливает уникальные частотные и мощностные свойства GaN ГСПТ.

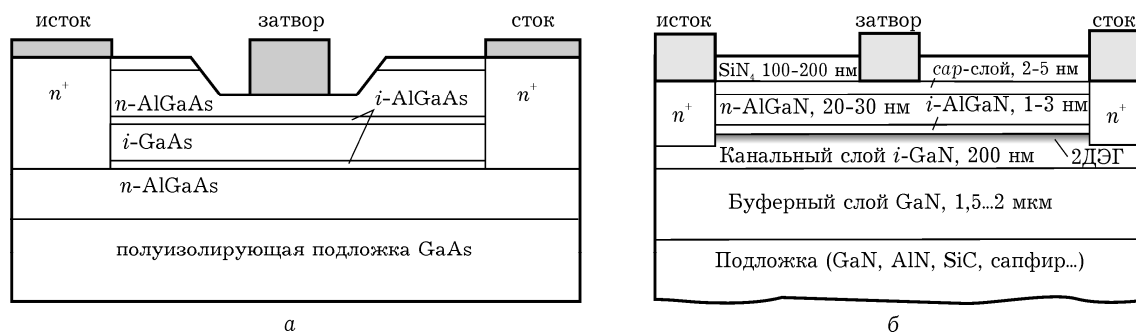


Рис. 5.3. Варианты структур двухпереходного арсенидгаллиевого ГСПТ (а) и гетероструктурного GaN/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ (б) транзистора.

Различных вариантов действующих транзисторов достаточно много. Обобщенная структура GaN ГСПТ представлена на рис. 5.3, б. Для минимизации влияния поверхностных состояний на ГСПТ поверх барьерного слоя формируют так называемый *cap*-слой (легированный либо нелегированный GaN, AlN, AlGaN), а также пассивирующий слой, например Si_3N_4 (последний характерен для любых полевых транзисторов). Канальный слой выращивают на толстом нелегированном или компенсированном буферном слое – высокоомном GaN-слое, в котором концентрация свободных носителей составляет менее 10^{13} см^{-3} , практически, как и в собственном полупроводнике. С технологической точки зрения, буферный слой обеспечивает при эпитаксии плавный переход от подложки к совершенной структуре канала. Зачастую структура буферного слоя оказывается достаточно сложной – в ней формируют несколько различных слоев с обратными переходами, сверхрешетками и т.п. Основное требование к подложке, особенно для мощных транзисторов, – низкая электропроводность и высокая теплопроводность при приемлемых механических и структурных свойствах. Наиболее распространенные материалы подложек – сапфир, карбид кремния, кристаллический кремний с ориентацией решетки (111), а также GaN и AlN.

Возможности нитридгаллиевых транзисторов иллюстрирует рис. 5.4, на котором представлены стоковые характеристики [5.3], отличающиеся более высоким напряжением и плотностью тока стока.

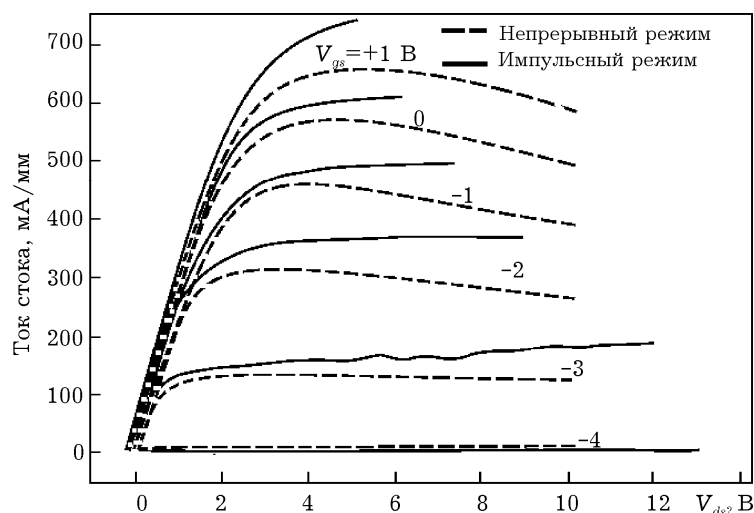


Рис. 5.4. Вольтамперные характеристики нитридгаллиевого ГСПТ, представленного на рис. 5.3,б, измеренные в импульсном (сплошные линии) и непрерывном (штриховые) режиме

5.2. КИНЕТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГСПТ

Моделированию ГСПТ посвящено большое количество работ. Кинетические модели, позволяющие оценить характеристики прибора, рассматривались в [5.4, 5.5], в [5.6] приведена двумерная численная модель без учета квантовых эффектов. В работе [5.7] описана квазидвумерная гидродинамическая модель с учетом квантовых эффектов. Однако для моделирования нестационарных явлений переноса, происходящих на малых расстояниях в области сильного поля, необходим кинетический подход, основанный на самосогласованном решении кинетического уравнения Больцмана (1.12) и уравнения Пуассона.

Здесь приведены некоторые результаты моделирования с помощью программы, описанной в [5.8]. Для моделирования выбрана структура, аналогичная рис. 5.2, с длиной затвора 0,35 мкм. Слой $Al_{0,3}Ga_{0,7}As$ толщиной 50 нм равномерно легирован донорами с концентрацией 10^{14} см^{-3} . Вдоль границы гетероперехода расположен нелегированный спейсер толщиной 5 нм, под электродами стока и истока имеются n^+ -области, с помощью которых осуществляется контакт с двумерным электронным газом. При моделировании методом Монте-

Карло использовалась трехдолинная Γ -L-X модель зонной структуры с параметрами материалов, взятыми из [5.9]. Из видов рассеяния учитывались фононные механизмы и рассеяние на ионизированных примесях в легированных областях. Граница гетероперехода GaAs/AlGaAs принималась резкой с разрывом зоны проводимости 0,3 эВ. Протекающий через электроды ток складывался из тока частиц, поглощаемых или инжектируемых данным электродом, и тока смещения. Ток каждого электрода определялся для всех временных шагов, что дает возможность отслеживать переходные характеристики прибора.

Примеры распределения потенциальной энергии и плотности электронного заряда в моделируемой области представлены на рис. 5.5. На верхнем рисунке следует обратить внимание на изменение вдоль канала формы потенциальной ямы, образованной «стенкой» разрыва дна зоны проводимости и пространственным зарядом электронов, перешедших в слой GaAs из легированного AlGaAs (рис. 5.5, б).

Распределение электронов в истоковой части канала локализовано у границы гетероперехода и, соответственно, в этой части потенциальная яма более крутая. По мере движения электронов к истоку под действием продольного греющего электрического поля их температура увеличивается. Поэтому, начиная с середины затвора, они глубже проникают в слой GaAs, и форма потенциальной ямы становится более полой.

Подобная информация содержится в распределении электронов по поперечному сечению (рис. 5.5, в). Здесь хорошо видна область обеднения под затвором, практически полностью лишенная подвижных носителей, а также обедненные области у границы гетероперехода со стороны AlGaAs. На этом рисунке также можно заметить начало образования параллельного паразитного транзистора в слое AlGaAs, однако протекающий через него ток мал, поскольку в модели нет омического контакта к слою AlGaAs.

С точки зрения понимания особенностей физических процессов, протекающих в канале гетероструктурных транзисторов, интересны результаты моделирования, представлен-

ные на рис. 5.6. Напряженность электрического поля, что также следует из наклона потенциального рельефа (рис. 5.5,а), наибольшая в пространстве между затвором и стоком и превышает значение 80 кВ/см. При этом следует обратить внимание на график дрейфовой скорости. Во-первых, ее максимальное значение в полтора раза превышает статическое значение для GaAs, что является проявлением эффекта «всплеска», более сильного, чем в обычном ПТШ с такой же длиной затвора.

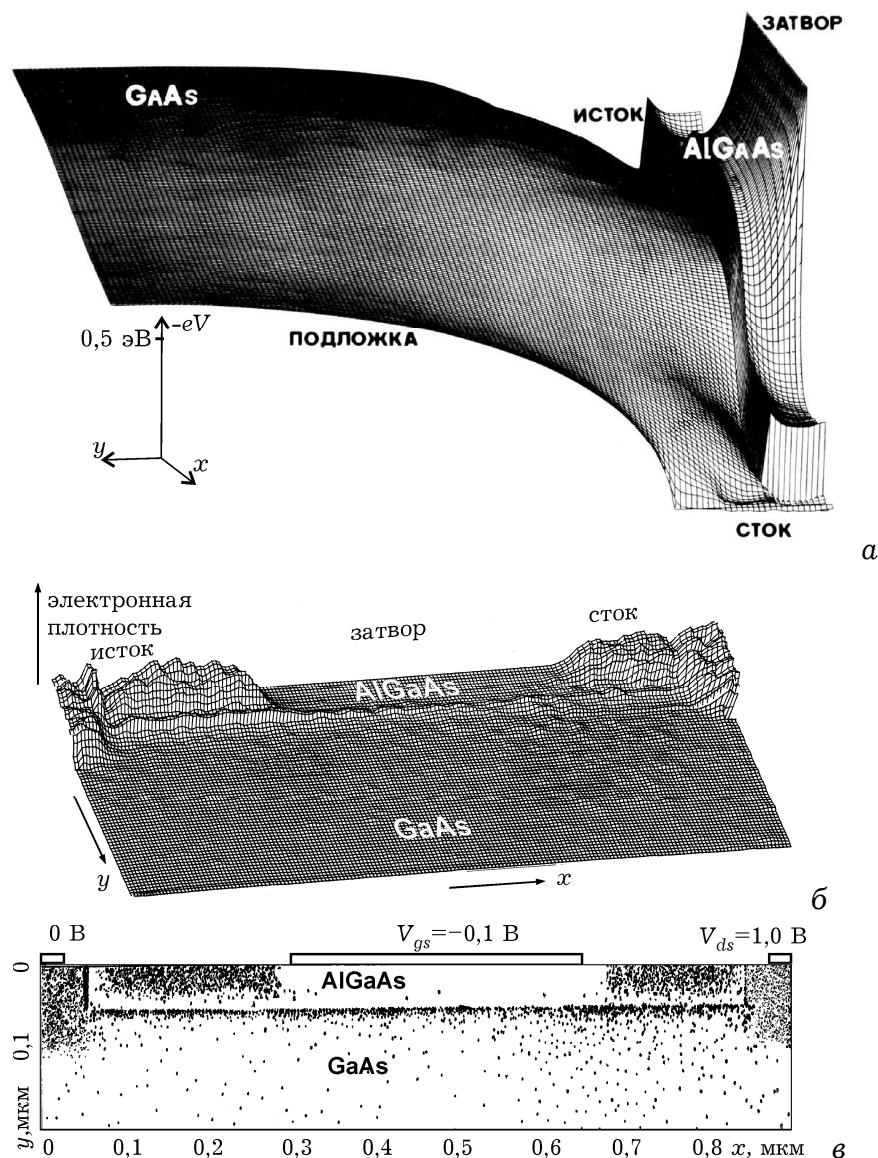


Рис. 5.5. Потенциальный рельеф дна зоны проводимости (а), распределение плотности заряда (б) и электронов (в) в поперечном сечении ГСПТ.

Во-вторых, изменения скорости не следуют за изменением напряженности поля. Вблизи стокового конца затвора скорость начинает падать, несмотря на резко возрастающую напряженность поля. Это объясняется тем, что энергия электронов здесь достигает значений около 0,3 эВ, достаточных для перехода электронов в L-, а затем и в X-долину. Большая эффективная масса электронов в верхних долинах приводит к уменьшению скорости дрейфа при возрастании их энергии. При этом характерно, что из-за большей плотности электронных состояний заселенность верхних долин может существенно превышать заселенность Γ -долины (рис. 5.6,б).

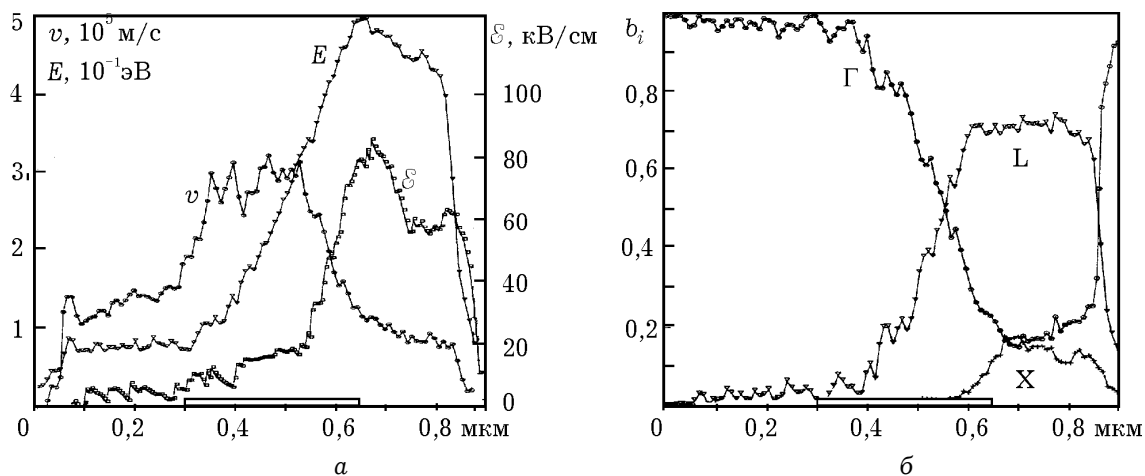


Рис. 5.6. Распределения (а) напряженности тянущего электрического поля (\mathcal{E}), дрейфовой скорости электронов (v) и их энергии (E), а также (б) распределения электронов по долинам вдоль канала транзистора.

У края затвора и напряженность поля и энергия начинают убывать, но заметной релаксации не наблюдается, поскольку электрическое поле, оставаясь сильным, удерживает большую часть электронов в верхних долинах. И лишь в n^+ -области стока происходит интенсивный возврат электронов в Γ -долину, а энергия и скорость уменьшаются до значений, близких к равновесным.

На рис. 5.7 представлены результаты моделирования и эксперимента стоковых характеристик транзистора с длиной затвора 0,35 мкм и шириной 300 мкм.

Малосигнальное значение крутизны прибора при стоковом напряжении 2 В и токе стока 60 мА составляет 137 мСм. На характеристиках незаметно значительного уменьшения крутизны при положительных смещениях на затворе, то есть образования параллельного паразитного транзистора в слое AlGaAs. Это связано, как уже отмечалось, с отсутствием в модели омического контакта к этому слою.

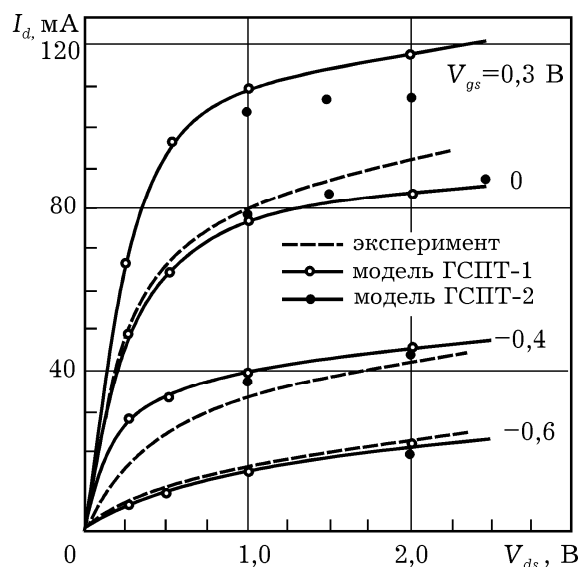


Рис. 5.7. Стоковые вольтамперные характеристики гетероструктурных транзисторов с одним гетеропереходом (ГСПТ-1) и двухпереходного (ГСПТ-2). Штриховая линия — результаты эксперимента для ГСПТ-1

О быстродействии транзистора можно судить по переходным характеристикам тока стока и тока затвора, представленным на рис. 5.8 и полученным при подаче на затвор ступеньки напряжения 0,3 В (а) и ступеньки напряжения на стоке $-1,0$ В (б).

Сам транзистор переключается довольно быстро, переходные процессы заканчиваются за время менее 1 пс. Однако существенное влияние на частотные свойства оказывают паразитные элементы. Для анализа их влияния по переходным характеристикам, используя преобразование Фурье, можно рассчитать параметры матрицы проводимости \mathbf{Y} , а затем и параметры матрицы рассеяния \mathbf{S} . На рис. 5.9 показаны рассчитанные частотные зависимости S -параметров транзистора

в рабочей точке $V_{ds} = 1,5$ В, $I_d = 30$ мА для внутренней активной части транзистора. Частотные метки приведены для частот 1 ГГц, 5 ГГц и далее с шагом 5 ГГц. Там же приведены зависимости S -параметров транзистора с учетом паразитных параметров, значения которых приведены на схемной модели (рис. 5.10).

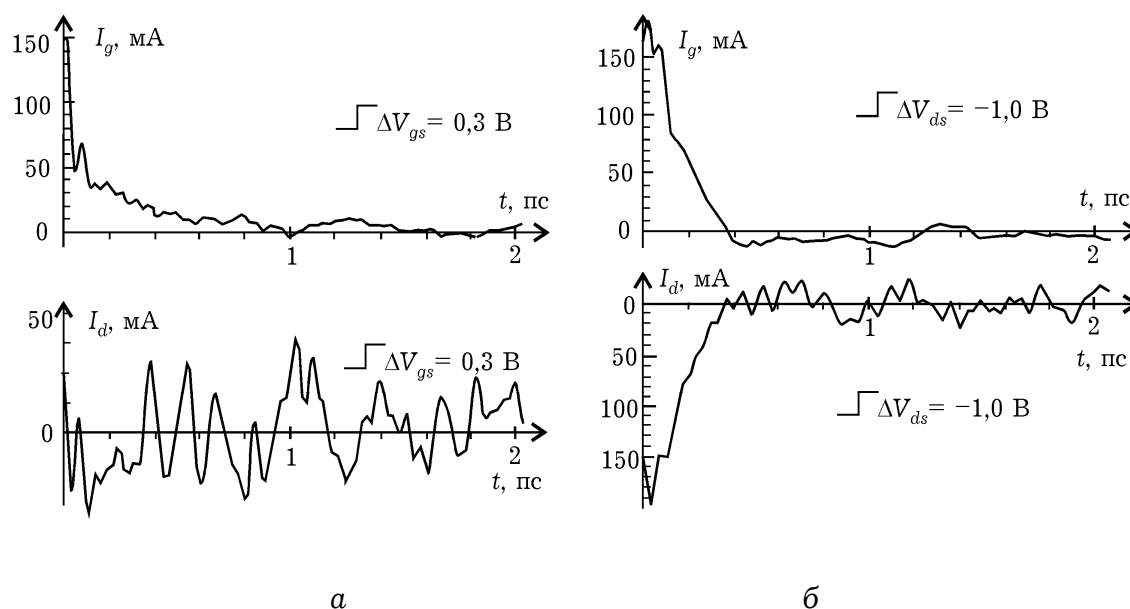


Рис. 5.8. Переходные характеристики токов электродов ГСПТ при ступенчатом изменении напряжения затвора (а) и напряжения стока (б)

Частотные зависимости параметра $|S_{21}|^2$, который определяет максимальный коэффициент усиления по мощности, позволяют оценить максимальную частоту прибора. Для внутреннего транзистора она составляет 62 ГГц, а для прибора с паразитными элементами 48 ГГц.

На рис. 5.7 также представлены результаты моделирования ВАХ с двумя гетеропереходами (рис. 5.3, а) и аналогичными размерами затвора [5.10]. Потенциальный рельеф для такого двухпереходного транзистора представлен на рис. 5.11.

Сравнение вольтамперных характеристик транзисторов показывает, что наличие второго гетероперехода несколько снижает выходную проводимость, что особенно заметно при положительных потенциалах затвора. Это можно объяснить тем, что второй барьер локализует электроны в области узкозонного слоя GaAs, препятствуя их переходу в подложку из широко-зонного AlGaAs и, тем самым, ослабляя ее «охлажда-

ющую» и шунтирующую роль, как это имеет место в обычном ПТШ.

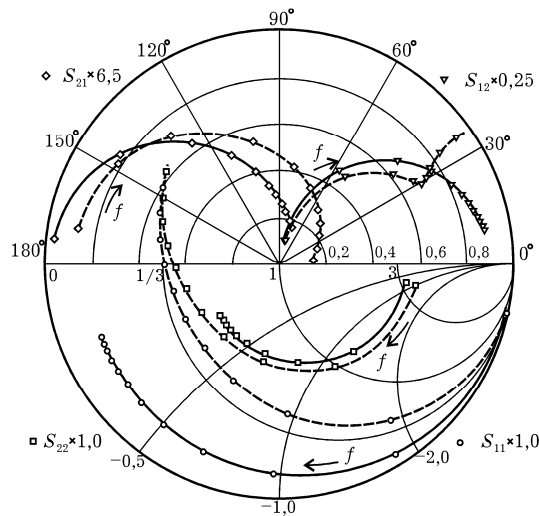


Рис. 5.9. Частотные зависимости S -параметров активной части транзистора (сплошные) и с учетом паразитных элементов (штриховые)

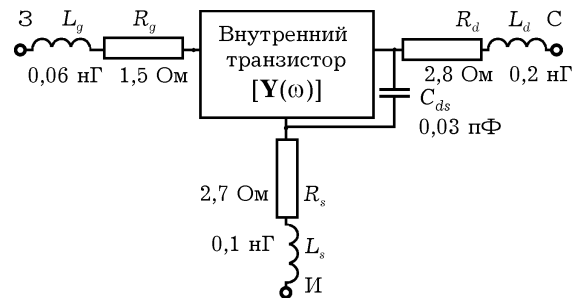


Рис. 5.10. Схемная модель ГСПТ с учетом паразитных элементов

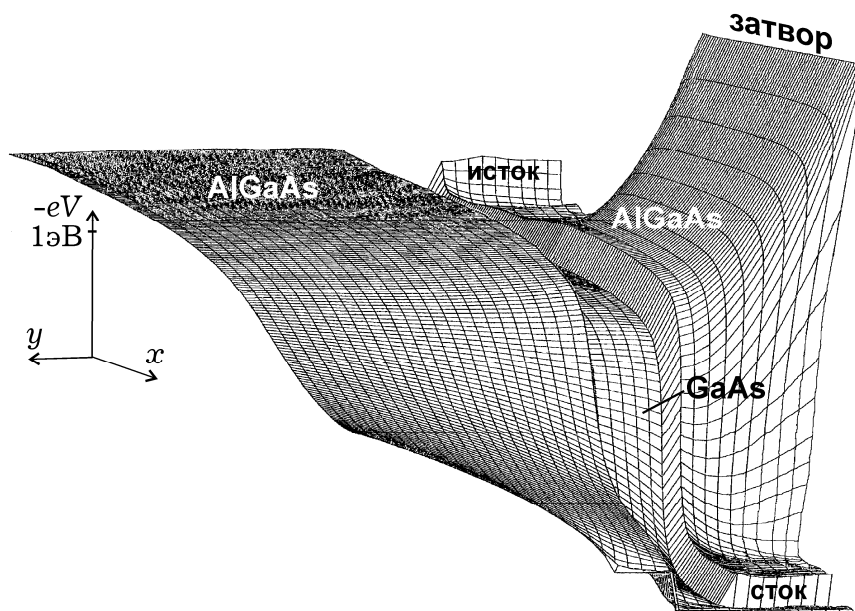


Рис. 5.11. Потенциальный рельеф для транзистора с двумя гетеропереходами, канал которого образован слоем узкозонного GaAs между AlGaAs

Квантовые эффекты. Из-за разрывов зоны проводимости и стимулированного этим накопления электронов и изгиба

зоны у границы барьера образуется потенциальная яма (рис. 5.5). В двухпереходном транзисторе такая яма образуется между «стенками», образованными двумя переходами (рис. 5.11). В результате энергия электронов в таких ямах квантуется в направлении, нормальном к гетеропереходу (рис. 5.12), и образуются энергетические подзоны для продольного движения.

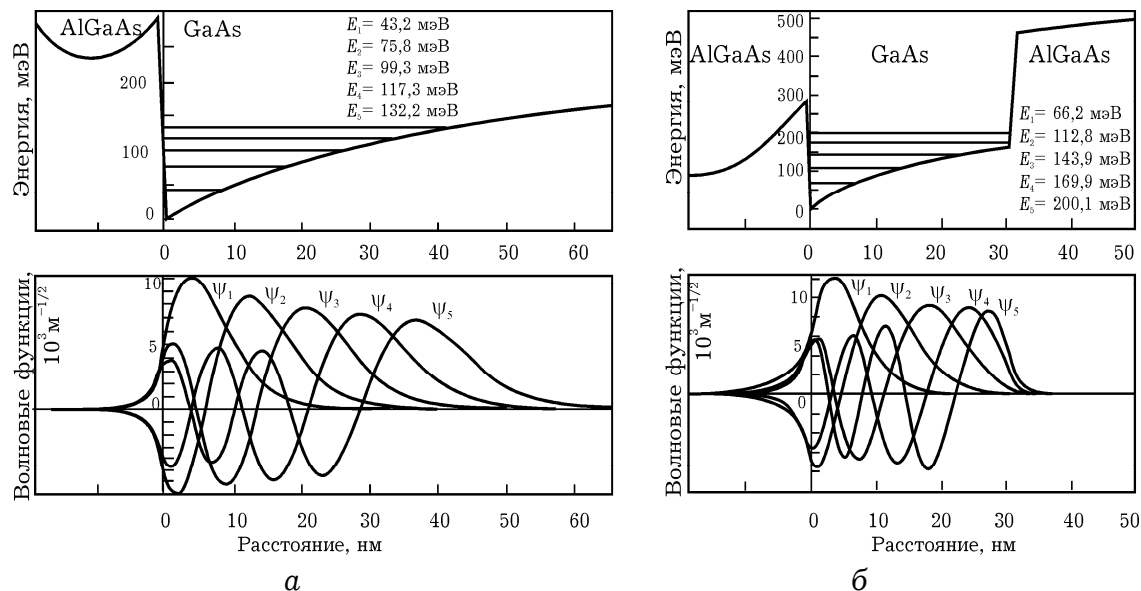


Рис. 5.12. Квантование энергетических состояний (верхний ряд) и соответствующие огибающие волновых функций (нижний ряд) для транзистора с одним (а) и двумя (б) гетеропереходами.

Поскольку математический аппарат квантовой теории переноса пока не позволяет моделировать реальные устройства, то наиболее часто для решения подобного рода задач используется приближение огибающей волновой функции. В соответствии с ним волновая функция двумерных электронов для m -ого состояния представляется в виде произведения плоской волны, параллельной гетеропереходу, и огибающей волновой функции $F_m(y)$ для поперечного направления:

$$\psi(\vec{r}) = F_m(y) A^{-1/2} \exp i(k_x x + k_z z). \quad (5.1)$$

Здесь A – нормировочная константа для плоскости xz . На рис. 5.12 представлены результаты решения уравнения Шредингера для огибающей волновой функции для потенциальных ям, характерных для подзатворной части в рассматриваемых транзисторах. Расстояния между рассчитанными

уровнями существенно превышают $k_B T$, что говорит о необходимости анализа квантовых эффектов в ГСПТ.

В рамках приближения огибающей волновой функции система уравнений для кинетического моделирования выглядит следующим образом:

кинетическое уравнение

$$\frac{\partial N(\vec{r}, \vec{k}, t)}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial N(\vec{r}, \vec{k}, t)}{\partial \vec{r}} - \frac{e\vec{\mathcal{E}}}{\hbar} \cdot \frac{\partial N(\vec{r}, \vec{k}, t)}{\partial \vec{k}} = \left[\frac{\partial N}{\partial t} \right]_c, \quad (5.2)$$

уравнение Пуассона

$$\nabla^2 V(\vec{r}) = -\rho(\vec{r}) / \epsilon \epsilon_0 \quad (5.3)$$

и уравнение Шредингера для огибающей волновой функции

$$\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2 F_m(x, y)}{dy^2} + [U(x, y) - E_m(x)] F_m(x, y) = 0, \quad (5.4)$$

Здесь

$$\rho(\vec{r}) = e \left[N_d(x, y) - n(x, y) - \sum_{i=1}^k N_i(x, y) F_i^2(x, y) \right] \quad (5.5)$$

– объемная плотность заряда, включающая распределение концентрации ионизированных доноров $N_d(x, y)$, концентрацию «трехмерных» электронов $n(x, y)$ и в третьем слагаемом – заселенность i -го уровня $N_i(x, y)$, k – число учитываемых двумерных подзон; $U(x, y) = \Delta E_c(x, y) - eV(x, y)$ – потенциальная энергия электронов, определяемая распределением потенциала $V(x, y)$ и разрывом дна зоны проводимости $\Delta E_c(x, y)$.

В выражении (5.5) заряд «двумерных» электронов определяется пропорционально пространственной плотности вероятности, т.е. квадрату амплитуд огибающих волновых функций, и заселенности уровней.

При решении такой системы либо на каждом шаге, либо через небольшое количество временных шагов самосогласованно решается система уравнений Шредингера и Пуассона, а затем кинетическое уравнение методом Монте-Карло, то есть интегрируются уравнения движения частиц в найденном электрическом поле. «Двумерные» электроны могут двигаться только в плоскости, параллельной гетеропереходу. Кроме системы уравнений (3.2) – (3.5) необходимо учитывать граничные условия при прохождении частицей гетероперехода. Классические (без учета туннелирования) граничные условия следуют из закона сохранения импульса, параллельного гетеропереходу, и энергии:

$$k'_{\parallel} = k''_{\parallel}, \quad (5.6)$$

$$\frac{(\hbar k'_{\parallel})^2}{2m^{*'}} + \frac{(\hbar k'_{\perp})^2}{2m^{*'}} = \frac{(\hbar k''_{\parallel})^2}{2m^{*''}} + \frac{(\hbar k''_{\perp})^2}{2m^{*''}} + \Delta E_c, \quad (5.7)$$

где $m^{*'}$ – эффективная масса электрона, k'_{\parallel} и k'_{\perp} – нормальная к гетеропереходу и ему параллельная составляющие волнового вектора в широкозонном материале; $m^{*''}$, k''_{\parallel} , k''_{\perp} – соответствующие величины в узкозонном материале.

При реализации полностью самосогласованной модели полевого гетеротранзистора возникают две основные трудности.

а) Форма потенциальной ямы $V(y)|_{x = \text{const}}$ меняется вдоль канала и, следовательно, волновые функции будут зависеть от координаты x , что усложняет решение системы уравнений Пуассона и Шредингера.

б) В двумерных ямах необходимо использовать соотношения для скоростей двумерного рассеяния. При этом имеется вероятность как внутриподзонного, так и межподзонного рассеяния, что значительно увеличивает размер матрицы скоростей рассеяния. Хотя для большинства механизмов рассеяния вероятность межподзонных переходов мала, для преобладающего при средних электрических полях полярного оп-

тического рассеяния ей пренебречь нельзя. Еще одна трудность при учете двумерного рассеяния связана с тем, что матричные элементы зависят от формы огибающей волновой функции и определяются численным интегрированием. Это приводит к дополнительным вычислительным затратам, так как форма огибающей меняется в процессе решения задачи.

Однако при комнатных температурах и в сильных электрических полях, возникающих в реальных структурах в области затвор-сток, при напряжениях на стоке более 1 В, двумерные квантовые эффекты проявляются слабо [5.10]. К тому же при больших отрицательных напряжениях на затворе квантовая яма становится настолько широкой, что расстояние между уровнями квантования может стать меньше величины $k_B T$. Тем более, что разогрев электронов в сильном поле усиливает это неравенство и ослабляет проявление квантовых эффектов.

5.3. ДВУМЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГСПТ

Известны различные подходы к моделированию физических процессов в субмикронных гетеротранзисторах [5.11-5.14], составляющие часть иерархического ряда моделей – упрощенные аналитические модели [5.11] (учитывающие, например, бесстолкновительный дрейф носителей заряда при длинах затвора 0,15 мкм и температуре кристаллической решетки 77 К), одномерные для схемотехнических расчетов [5.12] и модели [5.13, 5.14], содержащие релаксационные уравнения сохранения энергии и импульса в квазидвумерном приближении. В последнем случае все уравнения интегрируются вдоль одной координаты в направлении тянущего поля, а размер области обеднения в приближении резкой границы на каждом шаге рассчитывается в зависимости от текущего значения потенциала в канале.

В упрощенных моделях гетероструктур используют аппроксимации зависимостей подвижности электронов от напряженности электрического поля. Эти уравнения представляют собой локальную модель токопереноса, в

которой скорость (подвижность) носителей «локально» следует за изменениями напряженности электрического поля. В такой системе невозможно описывать нелокальные эффекты «всплеска» дрейфовой скорости электронов и дырок, эффекты накопления носителей вследствие изменения их энергии и эффективной массы при переходе в верхние долины. В гетероструктурах, изготовленных на основе многодолинных полупроводников, несмотря на преимущественный дрейф электронов в двумерной потенциальной яме необходимо учитывать существенное влияние в сильных электрических полях междолинного рассеяния и различные условия разогрева и релаксации носителей в долинах [5.15, 5.16].

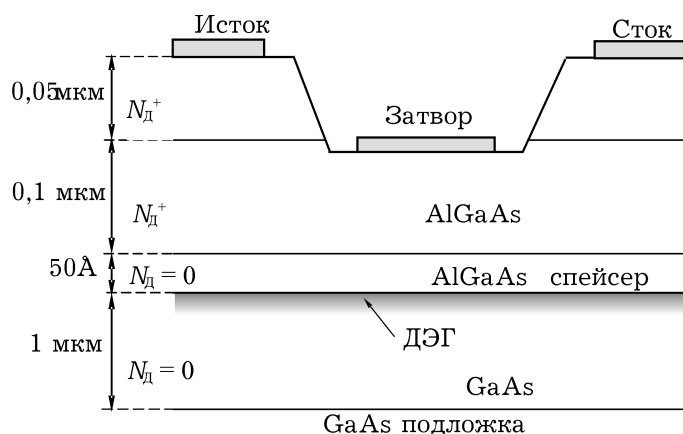


Рис. 5.13. Топологическая структура гетеротранзистора с двумерным электронным газом (ДЭГ)

Структура моделируемого гетеротранзистора представлена на рис. 5.13. и характеризуется следующими физико-топологическими параметрами: длиной затвора 0,2 мкм, слоем широкозонного легированного $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ($x = 0,3$) под затвором, эффективной толщиной 0,1 мкм, слоем нелегированного спейсера $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ толщиной 50 Å, слоем нелегированного GaAs на полуизолирующей подложке, толщиной в несколько десятков микрометров, в поверхностном слое которого в результате разрыва зон образуется потенциальная яма. Поскольку все электронные процессы связаны с поверхностным слоем и двумерным электронным газом (ДЭГ) в потенциальной яме, то для

моделирования можно ограничиться эффективной толщиной транзистора 1-2 мкм.

Алгоритм моделирования и особенности его реализации приведены в приложении П5. На рисунках 5.14-5.17 приведены результаты двумерного моделирования основных физических характеристик в канале субмикронного гетеротранзистора. Затвор располагается симметрично относительно координаты $x = 0$.

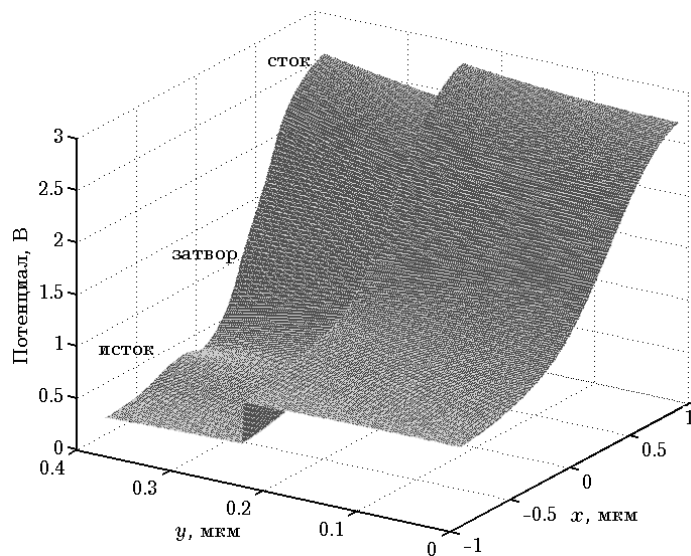


Рис. 5.14. Распределение потенциала в структуре гетеротранзистора

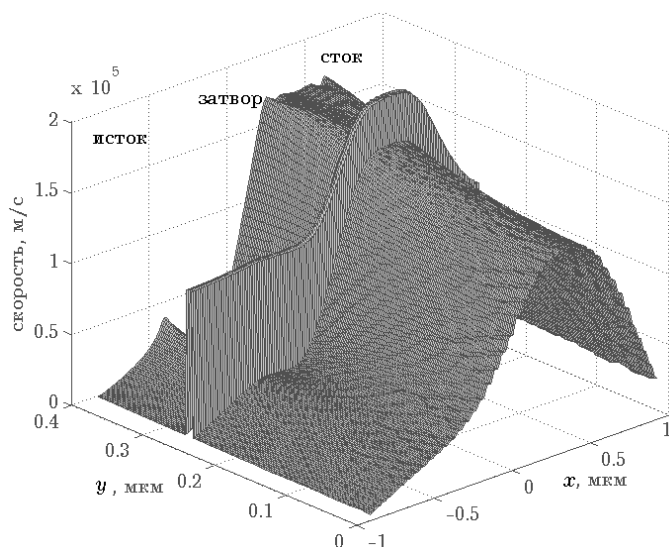


Рис. 5.15. Распределение дрейфовой скорости

Приведенные характеристики рассчитаны при электрическом смещении на электродах истока, затвора и стока, соответственно, 0 В, -0,5 В, 3,0 В. Разрыв зон на

границе гетероперехода задавался при решении уравнения Пуассона как встроенный потенциал высотой около 0,4 В в предположении отсутствия квантовых эффектов для электронов в потенциальной яме.

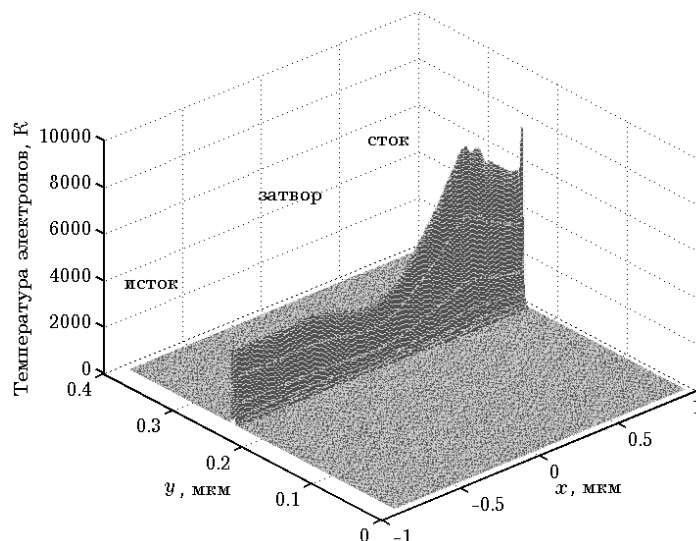


Рис. 5.16. Распределение температуры электронного газа

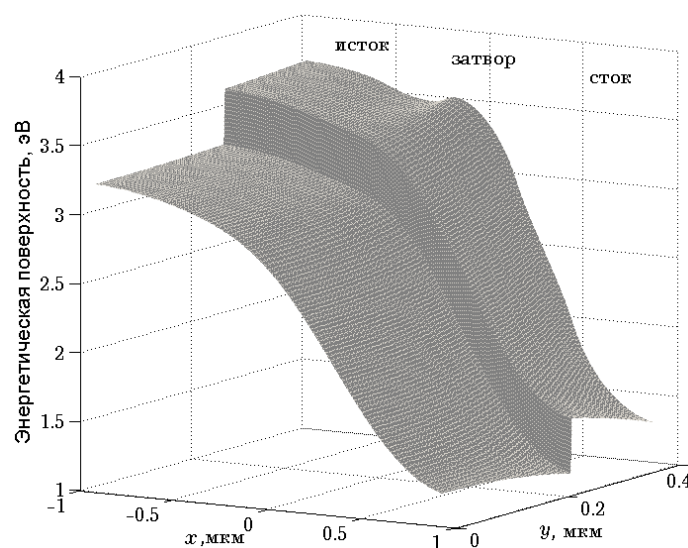


Рис. 5.17. Потенциальная энергетическая поверхность

Как показывают результаты моделирования, разогрев электронного газа и рост температуры электронов в большей степени связан с электронами, дрейфующими в потенциальной яме на границе гетероперехода. Эффект «всплеска» дрейфовой скорости заметен как для электронов гетероперехода, так и электронов, дрейфующих в

высоколегированном слое $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Однако, поскольку область за затвором обеднена носителями заряда, лишь незначительное их количество имеет высокие значения скорости.

На рис. 5.18 показаны результаты сравнения моделируемых характеристик субмикронных гетеротранзисторов с длиной затвора 0,25 и 0,5 мкм, рассчитанных по двумерной модели с учетом релаксационных уравнений и кинетической модели Монте-Карло [5.17].

Наиболее существенно результаты моделирования отличаются на пологом участке характеристик. Отличие в наклоне характеристики, а значит и в выходной малосигнальной проводимости, может быть в большей степени связано с погрешностью определения времен релаксации при двумерном моделировании, в то время как в кинетической модели процессы рассеяния моделируются вероятностными методами на более высоком физическом уровне.

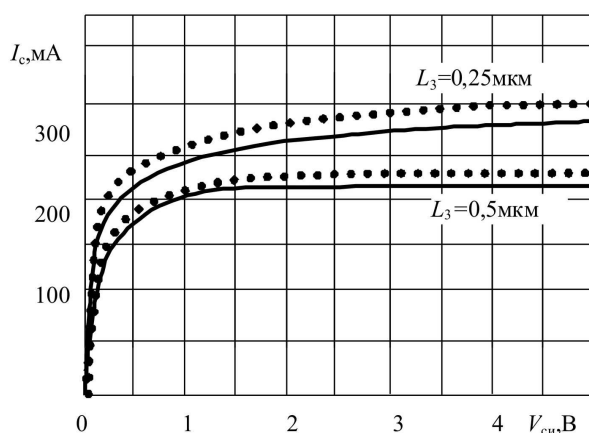


Рис. 5.18. Вольтамперные характеристики транзисторов с гетероселективным легированием с длиной затвора 0,25 и 0,5 мкм, рассчитанные по двумерной (сплошные линии) и кинетической модели (Монте-Карло).

Таким образом, модели процессов дрейфа в субмикронных транзисторах с селективным легированием на основе системы релаксационных уравнений в двумерном приближении позволяют сделать вывод о том, что эффектами, которые определяют работу субмикронных гетероструктур, является дрейф и разогрев электронов в условиях преимущественно

междолинного и оптического рассеяния носителей заряда. Важной особенностью является то, что области сильного поля и разогрева электронного газа связаны с большими градиентами характеристик в подзатворной области и локализуются в ограниченной области за затвором.

Подобные модели пригодны для расчета субмикронных гетероструктур на основе широкого спектра соединений $A^{III}B^V$ с междолинным переносом электронов, а также для определения параметров активных и пассивных областей транзистора, аппроксимаций характеристик для упрощенных моделей транзисторов и их схемотехнического анализа.

5.4. ГЕТЕРОТРАНЗИСТОРЫ С ДВУМЯ ПОТЕНЦИАЛЬНЫМИ ЯМАМИ

Рассмотрим модели и результаты моделирования субмикронных гетеротранзисторов с двумя потенциальными ямами (с двумя каналами с двумерным электронным газом). В подобных структурах более высокие значения дрейфовой скорости электронов достигаются за счет дрейфа носителей в двух потенциальных ямах в условиях перераспределения их скоростей и энергий.

Повышение быстродействия транзисторов может быть также связано с созданием структур с субмикронными продольными и нанометровыми поперечными размерами, в том числе многослойными наноструктурами низкой размерности [5.18-5.20].

Характерные размеры затвора таких гетероструктурных транзисторов составляют 0,1-0,2 мкм при размерах высоколегированных слоев в активной области транзистора менее 0,1 мкм. Моделирование гетеротранзистора с двумя потенциальными ямами представляет интерес в связи с перераспределением носителей между двумя «каналами» и, несмотря на увеличение эффективной толщины транзистора (что может приводить к уменьшению крутизны транзистора), приводит к уменьшению разогрева электронов, что связано с

уменьшением вероятности их междолинного рассеяния и приводит к повышению средней дрейфовой скорости электронного газа.

5.4.1. Численное моделирование

Как и в традиционных гетеротранзисторах, в субмикронных структурах с несколькими гетеропереходами преобладают эффекты сильного поля и субмикронные эффекты: квазибаллистический перенос, разогрев в условиях преобладания междолинного и оптического рассеяния носителей заряда, эффект «всплеска» дрейфовой скорости электронов и др. Область сильного поля и нестационарные процессы связаны с двумерной областью под затвором и двумерными распределениями характеристик электронного газа – электронной температуры (энергии), импульса (скорости), эффективной массы и др. Особенностью процессов в таких структурах является перераспределение носителей между потенциальными ямами, когда расстояние между ними не превышает длину свободного пробега электронов.

Моделирование субмикронных многослойных структур со сложной топологией связано с применением численных методов с заданным шагом дискретизации и адаптивной процедурой выбора шага, а также с неоднородными граничными условиями между слоями структуры.

Тестовая структура моделируемого гетеротранзистора представлена на рис. 5.19. Структура характеризуется следующими физико-топологическими параметрами: длиной затвора 0,2 мкм, слоем широкозонного легированного $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ($x = 0,3$) под затвором с эффективной толщиной 0,1 мкм, слоем нелегированного $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ толщиной 50 Å (спейсер), слоем нелегированного GaAs на полуизолирующей подложке, толщиной несколько десятков микрометров, в поверхностном слое которого в результате разрыва зон образуется потенциальная яма. Параметры второго канала ГСПТ аналогичны и показаны на рис. 5.19 (ось x направлена

вдоль канала транзистора, ось y – перпендикулярно каналу от поверхности затвора).

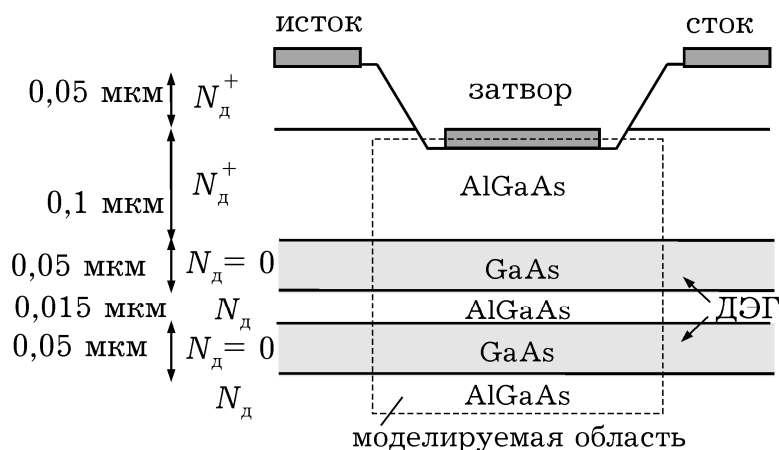


Рис. 5.19. Структура гетеротранзистора с двумя гетероканалами

Поскольку все электронные процессы связаны с поверхностным слоем и двумерным электронным газом (ДЭГ) в потенциальных ямах, то область моделирования ограничивается эффективной толщиной транзистора до 1 мкм.

На рис. 5.20-5.22 приведены двумерные распределения потенциальной энергии, электронной температуры и дрейфовой скорости в канале ГСПТ.

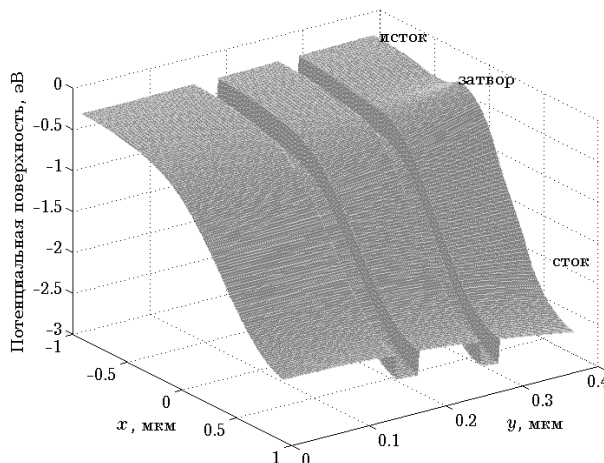


Рис. 5.20. Потенциальная рельеф в структуре гетеротранзистора с двумя гетероканалами

Выходной ток транзистора рассчитывается как нормальная составляющая тока к контакту стока по известным двумерным распределениям концентрации электронов, напряженности электрического поля и скорости

по результатам решения исходной системы уравнений при достижении заданной точности решений в узлах сетки.

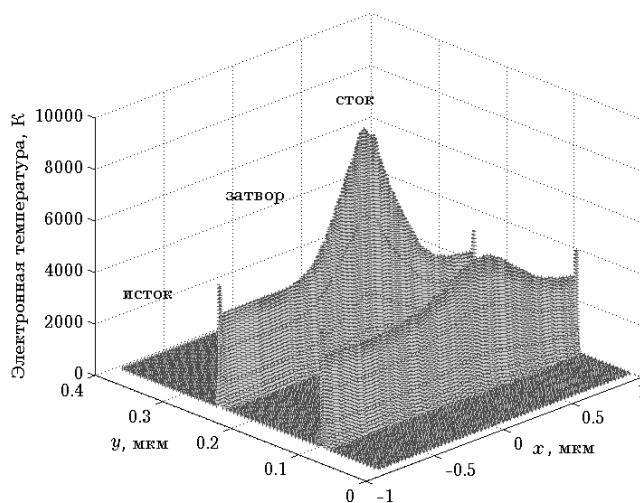


Рис. 5.21. Распределение электронной температуры

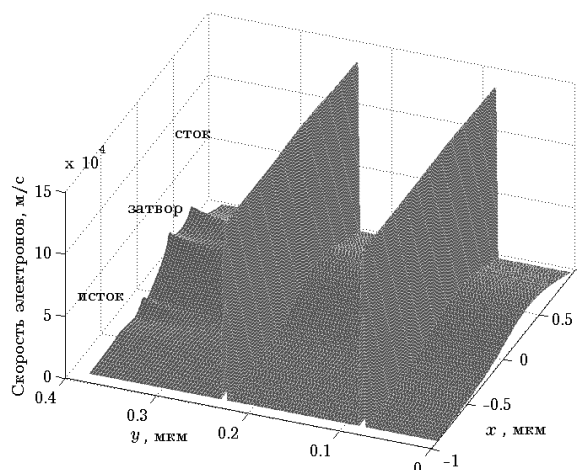


Рис. 5.22. Распределение дрейфовой скорости

Приведенные характеристики рассчитаны при электрическом смещении на электродах истока, затвора и стока, соответственно, 0, -0,5, 3,0 В. Разрыв зон на границе гетеропереходов задавался при решении уравнения Пуассона как встроенный потенциал высотой около 0,4 В в предположении отсутствия квантовых эффектов для электронов в обеих потенциальных ямах.

Как показывают результаты моделирования, разогрев электронного газа и рост температуры электронов в большей степени связан с электронами, дрейфующими в потенциальной яме на границе гетеропереходов. Пиковые значения температуры электронов (рис.5.21) в первом гетеропереходе (примыкающем к затвору) несколько выше,

чем во втором, что свидетельствует о перераспределении электронов по энергиям. Эффект «всплеска» дрейфовой скорости заметен для электронов обоих гетеропереходов. Результаты моделирования электронной температуры (рис. 5.21) и дрейфовой скорости (рис. 5.22) [5.21.-5.24] свидетельствуют о меньшей степени разогрева носителей электрическим полем и более высоких значениях дрейфовой скорости, чем в аналогичном гетеротранзисторе с одной потенциальной ямой примерно на 30-40 %. Это может быть связано с запаздыванием процессов разогрева носителей электрическим полем, так как дрейф носителей связан, в основном, с электронами в потенциальных ямах, а также «охлаждением» носителей при их вытеснении полем затвора из одной потенциальной ямы в другую и преодолением второго потенциального барьера с уменьшением энергии. При этом расстояние между гетеропереходами, как показывают результаты численных экспериментов, должно быть меньше длины свободного пробега электронов. Максимальные значения дрейфовой скорости для приведенной структуры достигаются при отрицательных смещениях на затворе 0,5–0,6 В.

Показано, что средние значения дрейфовой скорости в приведенной структуре выше, чем в ГСПТ с одной потенциальной ямой, при этом транзисторы с двумя гетеропереходами обладают более высокими значениями тока и мощности.

Приведенные модели пригодны (при соответствующей аппроксимации времен релаксации) для расчета субмикронных гетероструктур на основе широкого спектра соединений полупроводников $A^{III}B^V$ с междолинным переносом электронов, включая перспективные соединения на основе InP, GaN и др.

5.4.2. Аналитическая модель статических характеристик

Для получения аналитических соотношений в структуре моделируемого транзистора предполагаются резкие границы гетерослоев с конечной толщиной Δd (рис. 5.23).

Для анализа статических характеристик необходимо описать зависимость концентрации электронов в двумерном канале от напряжений на затворе и на стоке транзистора [5.25].

С учетом наличия двух слоев с двумерным электронным газом можно записать:

$$n_s = \frac{\epsilon\epsilon_0}{e(2d_i + d_d + 2\Delta d)} [V_g - V_{t_0} - V(x)], \quad (5.11)$$

где $(2d_i + d_d)$ – общая толщина слоя AlGaN, как показано на рис. 5.23, где V_{t_0} – пороговое напряжение, $2\Delta d \approx 100 \text{ \AA}$. Координата x отсчитывается от истока к стоку вдоль канала транзистора.

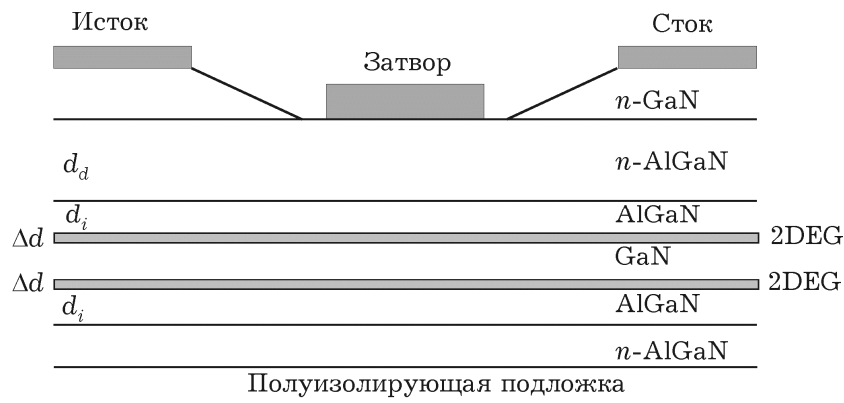


Рис. 5.23. Структура AlGaN/GaN транзистора с высокой подвижностью электронов с двумя гетероканалами

Для расчёта зависимости дрейфовой скорости электронов от напряжённости воспользуемся аппроксимацией работы [5.26]. Данная зависимость учитывает многодолинную структуру энергетических зон нитрида галлия, поэтому такая зависимость имеет максимум и, соответственно, участок с отрицательным сопротивлением. При подборе коэффициентов была использована экспериментальная зависимость дрейфовой скорости от электрического поля [5.27]. Ее аппроксимация может быть представлена соотношением:

$$v(x) = \frac{v_0 \mathcal{E}(x)/\mathcal{E}_0 + v_s [\mathcal{E}(x)/\mathcal{E}_0]^2}{1 + [\mathcal{E}(x)/\mathcal{E}_0]^2}, \quad (5.12)$$

где $v_0 = \mu_0 \mathcal{E}_0$, \mathcal{E}_0 - пороговое значение электрического поля (для GaAs равно 5 кВ/см, а для GaN – 100 кВ/см), μ_0 - низкополевое значение подвижности, v_s - скорость насыщения.

Для анализа температурных зависимостей и учета уровней легирования может использоваться более универсальная формула. При моделировании двухканального гетеротранзистора на основе нитрида галлия необходимо учитывать особенности его поле-скоростной характеристики. Следует отметить, значение запрещенной зоны нитрида галлия существенно больше (3,39 эВ) по сравнению с арсенидом галлия (1,42 эВ). Ток стока описывается выражением:

$$I_{ds} = en_s(x) v(x) W, \quad (5.13)$$

где W - ширина транзистора.

Совместно решая уравнения (5.11)-(5.13), а также уравнение для потенциала, можно получить следующее аналитическое выражение для вольт-амперной характеристики [5.25]:

$$I_{ds} = \beta \frac{(V_g - V_0) V_{ds} - V_{ds}^2/2}{1 + \alpha V_{ds}}, \quad (5.7)$$

где $\beta = \epsilon \epsilon_0 \mu W / (2d_i + d_d + 2\Delta d) L_g$; μ - подвижность электронов, L_g - длина затвора; $\alpha = \frac{v(x)/v_0}{\mathcal{E}_0 L_g} + \beta R_s$; R_s - сопротивление истока.

В данной модели для расчета поверхностной концентрации и дрейфовой скорости электронов могут использоваться усредненные значения двумерного распределения концентрации и электрического поля,

полученные при двумерном моделировании при заданных значениях потенциалов затвора и стока:

$$n_{cp} = \frac{\iint n(x, y) dx dy}{a_x a_y}, \quad \mathcal{E}_{cp} = \frac{\iint \mathcal{E}(x, y) dx dy}{a_x a_y},$$

где a_x и a_y размеры области двумерного моделирования.

Возможно также использование приведенной ниже аналитической модели гетеротразистора при известном из двумерного моделирования значении дрейфовой скорости насыщения и расстоянии в канале, при котором происходит насыщение скорости.

Для получения тока и напряжения насыщения, вычислим производную $g_d = \partial I_d / \partial V_d$ и примем $g_d = 0$ получим:

$$V_{dSat} = \frac{\sqrt{1 + 2\alpha(V_g - V_{t_0})} - 1}{\alpha}.$$

Когда ток в канале достигает насыщения, уравнение Пуассона можно записать в виде [5.22]:

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} = \frac{1}{\epsilon_0 \epsilon} \cdot \frac{J}{v_s},$$

где плотность тока $J = I_{dSat} / W \Delta d$; а v_s - дрейфовая скорость носителей в точке насыщения.

Используя граничные условия:

$$V(0) = V_{dSat} \text{ и } \partial V(0) / \partial x = \mathcal{E}_{dSat} \approx V_{dSat} / L_g,$$

можно получить аналитическое выражение для длины перекрытого канала в следующем виде [5.26]:

$$L_S = \gamma \left[\sqrt{1 + 2(V_{dS} - V_{dSat}) / \gamma \mathcal{E}_{dSat}} - 1 \right].$$

При напряжениях затвора, превышающих напряжение насыщения, ток в канале может рассчитываться по формуле (5.7), но вместо V_{ds} следует подставлять V_{dSat} , а вместо $L_g - (L_g - L_s)$.

Известны также и другие подходы к получению аналитических соотношений для расчета статических характеристик гетеротранзистора, в частности на соединениях AlGaAs [5.27, 5.28].

5.4.3. Схемные модели и шумовые параметры

Для расчёта малосигнальных крутизны, выходной проводимости, входной и проходной ёмкостей может использоваться подход, приведенный для расчета аналогичных параметров для субмикронного ПТШ, при известных статических выходных и проходных характеристиках, с учётом приращений заряда под затвором, как реакции на изменение входного и выходного напряжений транзистора.

При определении паразитных СВЧ элементов субмикронного полевого транзистора, как правило, используются малосигнальные S -параметры или параметры, измеренные при напряжении сток-исток $V_{ds} = 0$. Основной причиной этого является то, что при данных условиях схемную модель можно значительно упростить. Кроме того, одним из факторов, позволяющих осуществить такое упрощение, является относительная симметрия активного канала, определяемая симметрией обедненной области под затвором. Геометрическая асимметрия, обычно существующая между истоковым и стоковым контактами, связана с доменом сильного поля. В случае субмикронных длин затвора (порядка 0,1-0,2 мкм), когда длина затвора сравнима с толщиной канала, распределения физических величин под затвором – электрического поля, концентрации носителей, их энергии и других имеют двумерный характер и асимметрия области пространственного заряда становится менее ярко выраженной. Это относится также к субмикронным гетероструктурам. Идентификация схемных

малосигнальных и паразитных параметров, как правило, основывается на вычислительных процедурах оптимизации импедансов по экспериментальным S -параметрам в рабочем диапазоне частот. Элементы активной области определяются с помощью малосигнальной схемной модели транзистора.

Расчет минимального коэффициента шума в субмикронных гетеротранзисторах с двумя каналами также как и для субмикронных ПТШ основывается на применении схемной модели с различного рода локальными источниками шума. При этом методика расчета минимального коэффициента шума в субмикронных ПТШ может быть адаптирована для расчета гетероструктур после получения усредненных значений энергии, скорости, напряженности электрического поля и других характеристик активной области транзистора.

В гетеротранзисторах с двумя гетеропереходами присутствуют практически все составляющие шума, приведенные для короткоканальных транзисторов с затвором Шоттки. Главное отличие заключается в учете шума токораспределения. Для двухканального гетеротранзистора шум токораспределения, кроме составляющей тока через подложку, связан также со случайным характером перераспределения электронов между гетеропереходами. Это должно приводить к дополнительной составляющей шума. Минимизация этой составляющей шума также связана с оптимальным выбором электрического смещения на затворе.

Для гетеротранзистора с двумя гетеропереходами при допущении об отсутствии тока через подложку шум токораспределения между двумя каналами (потенциальными ямами с двумерным электронным газом) запишется как:

$$\overline{|i_{\text{ТНЕМТ}}|^2} = 2e(I_{\text{к1}}I_{\text{к2}} / I_{\text{с}}) \Delta f,$$

где $I_{\text{к1}}$, $I_{\text{к2}}$, $I_{\text{с}}$ – составляющие тока соответственно первого и второго каналов и полный ток стока. Как видно из последнего

соотношения, максимальный шум токораспределения имеет место при $I_{к1} \approx I_{к2}$.

Учитывая тот факт, что полного перекрытия гетероперехода не происходит, шум токораспределения в гетеротранзисторах с двумя каналами, в отличие от традиционного субмикронного ПТШ, вносит большой вклад в суммарный шум транзистора.

Из анализа составляющих шума можно сделать следующие выводы. Малошумящий режим в гетеротранзисторах с двумя каналами связан с напряжением на затворе, существенно меньшим значений потенциала отсечки тока стока (в традиционных субмикронных ПТШ этот режим достигается при малых токах стока при потенциалах, близких к отсечке тока), когда носители первого канала за счет разогрева электрическим полем преодолевают потенциальный барьер и потеряв часть энергии попадают во второй гетеропереход. Это приводит к уменьшению вероятности междолинного рассеяния и уменьшению шума, связанного с разогревом носителей, который является преобладающим в субмикронных транзисторах. В случае гетеротранзистора с двумя гетеропереходами процессы, связанные с междолинными переходами, как уже было показано, ослабляются, что уменьшает среднюю температуру электронного газа и, соответственно, разогревный шум канала. Таким образом, в гетеротранзисторах с двумя каналами малошумящий режим достигается при больших значениях тока стока, что позволяет обеспечить более высокие уровни мощности транзистора.

Минимальный коэффициент шума обеспечивается как выбором электрического режима, так и условиями согласования. Представляет также интерес исследование гетеротранзистора с двумя потенциальными ямами и встроенными одномерными системами – квантовыми точками (рис. 5.24).

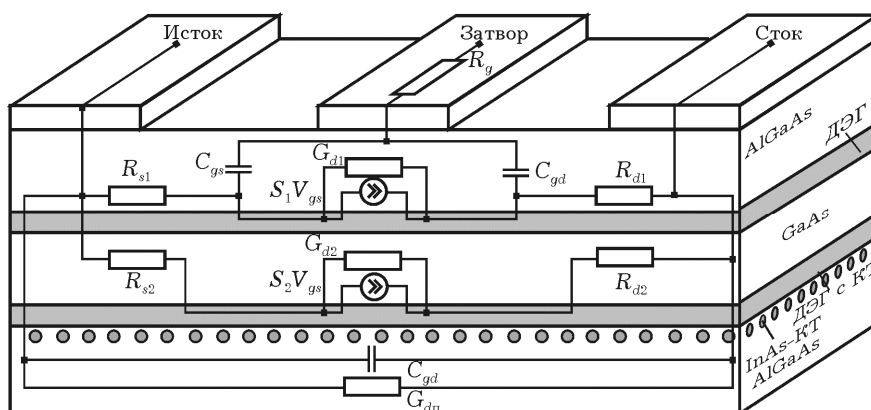


Рис. 5.24. Топология и схемная модель двухканального гетеротранзистора с квантовыми точками (КТ)

Представленные модели субмикронного гетеротранзистора с двумя гетеропереходами, учитывающие дополнительные источники шума за счет токораспределения между потенциальными ямами, пригодны для расчета сигнальных и шумовых характеристик.

5.5. ГЕТЕРОСТРУКТУРНЫЕ ТРАНЗИСТОРЫ С КВАНТОВЫМИ ТОЧКАМИ

В качестве перспективных гетероструктур с КТ представляют интерес структуры на основе нитрида галлия. Как показывают результаты физико-топологического моделирования субмикронного полевого гетеротранзистора с квантовыми точками (КТ), в них скорость носителей выше, чем в обычном полевом транзисторе Шоттки.

Способ получения КТ основан на способности самоорганизации наноструктур. Важнейшими факторами, определяющими направление и конечный результат самоорганизации являются рассогласования постоянных решетки (создающие упругие напряжения в системе и повышающие её внутреннюю энергию), толщина слоя, границы раздела и т. д. Но на сегодняшний день возможности технологии еще не позволяют сделать выращивание КТ полностью контролируемым и воспроизводимым. Поэтому неоднородность островков квантовых точек и их параметров

приводит к необходимости учета случайного характера расположения, размеров, энергетических и других характеристик КТ.

КТ из арсенида индия формируются вблизи гетероперехода в слое нитрида галлия [5.29]. Они захватывают часть электронов проводимости канала, которые с увеличением напряжённости электрического поля в канале инжектируются из КТ и увеличивают ток в канале транзистора. За счёт малой начальной энергии вероятность рассеяния таких электронов на оптических фононах практически равна нулю [5.30]. В итоге, общая энергия коллектива электронов в канале понижается, и скорость насыщения становится выше. Причем достигается это не предельными возможностями субмикрометровой литографии, а за счет преобладания двух физических факторов: безынерционной ударной ионизации КТ в сильном электрическом поле и существенного повышения дрейфовой скорости электронов в канале транзистора.

В работе [5.31] показано, что максимальные значения дрейфовой скорости в транзисторе с КТ в два раза выше, чем в традиционных ГСПТ, при этом необходимо учитывать трехмерный характер физических процессов в гетеротранзисторах с КТ, что связано как с особенностями топологии (ширина транзистора сравнима с размерами вдоль координаты x , связанной с тянущим электрическим полем), так и случайным характером параметров КТ. На рис. 5.25, *a* приведена структура моделируемого транзистора. На рис. 5.25, *б* приведено зафиксированное на атомно-силовом микроскопе изображение слоя с самоорганизованными КТ [5.32].

При моделировании субмикронных приборов, имеющих многослойную структуру и содержащих искусственные неоднородности и дефекты, возникает ряд трудностей из-за наличия больших градиентов электрического поля, поэтому значительно повышаются вычислительные затраты за счет дополнительного дробления шага при использовании итерационных методов, сгущения сетки и т.д.. Еще более

актуальной становится задача адаптации численных методов к решению системы двумерных дифференциальных уравнений в частных производных для моделирования физических эффектов в канале ГСПТ с КТ.

В структурах со встроенными КТ, в которых движение частиц квантовано по всем трем координатам, спектр плотности состояний представляет собой набор δ -функций [5.33].

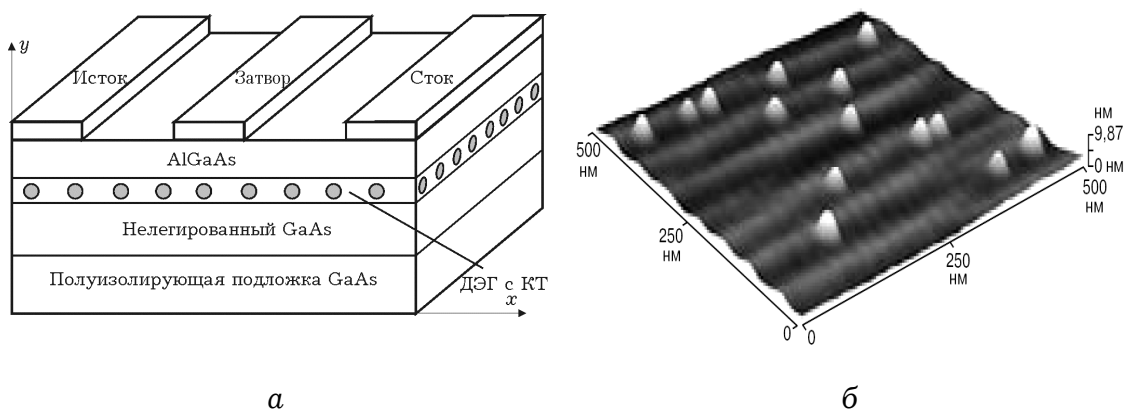


Рис. 5.25. Схематическое изображение *а* – гетероструктурного полевого транзистора с КТ, где ДЭГ – двумерный электронный газ; *б* – структура с самоорганизованными квантовыми точками.

Субмикронный гетеротранзистор с квантовыми точками моделируется на основе системы релаксационных уравнений с учетом преобладающих механизмов рассеяния. Для получения распределения потенциала с учетом квантовой ямы гетероперехода и квантовых точек в потенциальный рельеф соответственно встраиваются «ступеньки» потенциала 0,3 В и 0,7 В в отдельные узлы сетки без учета в них квантовых эффектов

Моделировалась структура GaN гетеротранзистора с КТ со следующими параметрами: длина затвора 0.4 мкм, напряжение на затворе -0.2 В, напряжение на стоке 4 В. Канал и КТ получены путем встраивания в потенциальный рельеф ступенек потенциала: 0.3 В для квантовой ямы гетероперехода и 0,7 В для КТ с учетом того, что плотность

квантовых точек в реальной структуре составляет $\sim 10^{10} \text{ см}^{-2}$ [5.34].

Из распределения потенциала в моделируемой структуре (рис. 5.26) видно, что нахождение носителей в квантовой точке является энергетически выгодным. Это объясняет факт перераспределения носителей в канале между квантовой ямой и точками. При встраивании потенциальной КТ в гетеропереход меняется и картина распределения напряженности поля в транзисторе – в потенциальной яме с КТ напряженность максимальна, что приводит к росту дрейфовой скорости.

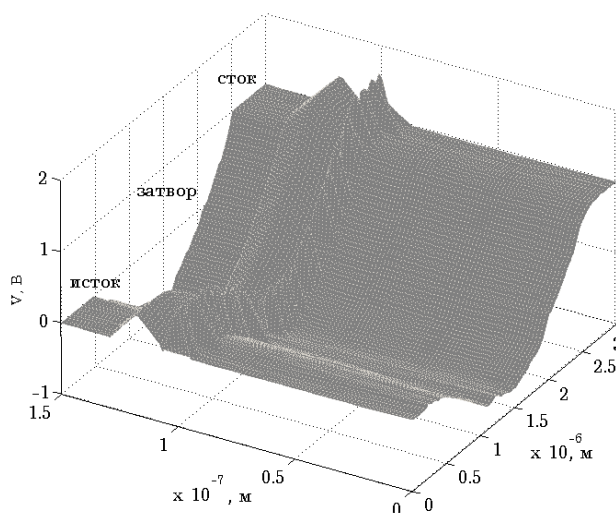


Рис. 5.26. Распределение потенциала в гетероструктурном транзисторе с КТ

Как видно из рис. 5.27, дрейфовая скорость носителей в гетеротранзисторе с КТ почти на порядок выше, чем в ПТШ без встроенных неоднородностей. Во-первых, это связано с тем, что носители движутся в квантовой яме практически без столкновений, во-вторых, рост средней скорости электронов связан с ионизацией КТ и инжекцией электронов в канал. Инжектированные из КТ электроны имеют меньшую начальную энергию, что приводит к понижению энергии всего коллектива носителей. Кроме того, наличие КТ приводит к квантованию оптических фононов, понижая вероятность оптического рассеяния. Описанные факторы приводят к росту

дрейфовой скорости. Это связано с тем, что при малом количестве КТ не все оптические фононы квантуются, поэтому насыщение скорости наступает быстрее.

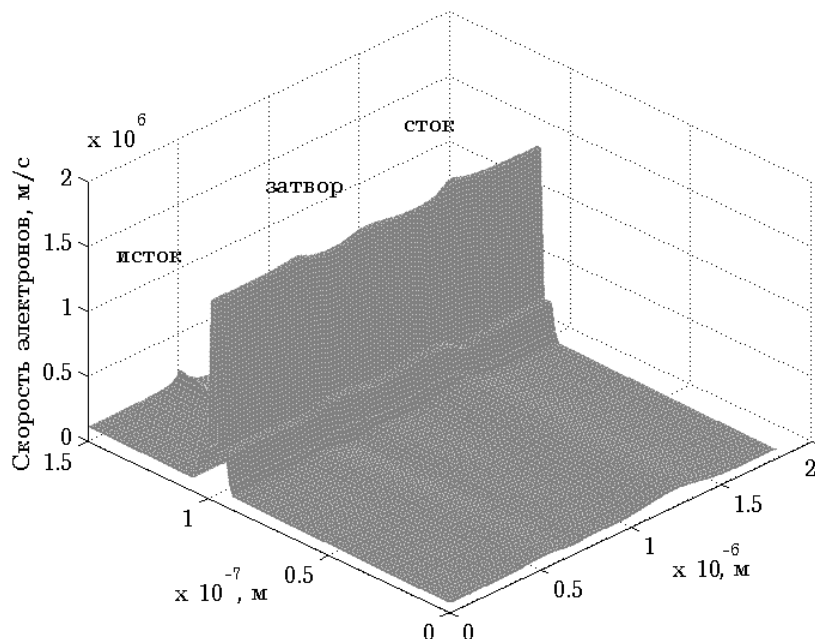


Рис. 5.27. Дрейфовая скорость носителей в гетеротранзисторе с КТ

Приведенные результаты позволяют описать механизм повышения дрейфовой скорости электронов. Полученные характеристики для поля, скорости и концентрации носителей позволяют судить как о распределении этих характеристик в структуре транзистора, так и об их количественных показателях. Анализ результатов моделирования показывает, что встраивание в гетеротранзистор даже небольшого количества КТ приводит к заметному росту скорости дрейфа носителей в канале транзистора.

Решение системы уравнений позволяет также определить распределения электронной температуры (рис. 5.28) и концентрации носителей заряда (рис. 5.29). При расчетах времен релаксаций учитывались следующие механизмы рассеяния: для времени релаксации импульса τ_p – акустическое, примесное, оптическое, полярное оптическое и междолинное рассеяния, а для времени релаксации энергии τ_E – те же, что и для времени релаксации импульса, но без учета примесного рассеяния. Известно [5.15], что из всех

механизмов рассеяния в многодолинных полупроводниках наибольшую роль играют оптическое полярное и междолинное рассеяния. В области повышения электронной температуры время релаксации импульса при полярном оптическом рассеянии существенно превышает время релаксации импульса при междолинном. Обратное время релаксации энергии при полярном оптическом рассеянии уменьшается с ростом T_e , так как рассеяние энергии связано преимущественно с междолинными переходами.

Анализ распределений температуры электронного газа (рис. 5.28) и обратного времени релаксации импульса и энергии при междолинном рассеянии позволяют сделать вывод о том, что области сильного разогрева носителей (максимумы T_e) и области максимальных значений $1/\tau_p$ и $1/\tau_E$ совпадают.

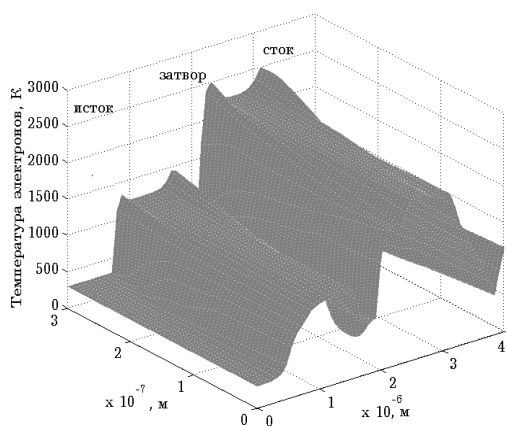


Рис. 5.28. Распределение электронной температуры

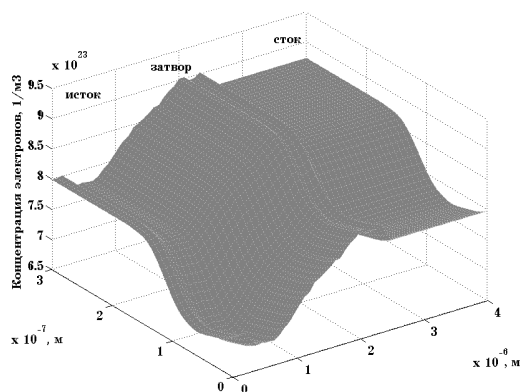


Рис. 5.29. Распределение концентрации носителей заряда

При встраивании в канал гетеротранзистора квантовых точек часть носителей вытесняется из канала (рис. 5.29) и пространственная локализация носителей в гетеротранзисторе с КТ происходит в области, примыкающей к стоку и в подложке. Область максимальных значений дрейфовой скорости у стока совпадает с областью максимальных значений концентрации подвижных носителей, что может объяснить эффект роста дрейфовой скорости носителей в

гетеротранзисторах с КТ по сравнению с традиционными структурами.

В структурах с тонкими функциональными слоями также следует учитывать дискретизацию энергетического спектра и фермиевский характер заполнения соответствующих двумерных энергетических подзон квантования. Это возможно с помощью самосогласованного решения уравнений Пуассона и Шредингера:

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} = -\rho / \epsilon \epsilon_0$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta \psi(x, y) + [U(x, y) - E_0] \psi(x, y) = 0,$$

где E_0 – энергия основного уровня квантования.

Для расчета концентрации носителей заряда в области квантовой ямы необходимо принимать во внимание, что в двух других направлениях электроны двигаются свободно, формируя подзоны размерного квантования. Концентрация подвижных носителей заряда без учета изгиба зон находится интегрированием по состояниям подзоны с учетом распределения Ферми-Дирака:

$$n(x, y) = \frac{m^* k_B T}{\pi \hbar^2} \ln \left[1 + \exp \left(\frac{E_\Phi - E_i}{k_B T} \right) \right] |\psi(x, y)|^2.$$

Энергии подзон размерного квантования в приближении прямоугольной симметричной квантовой ямы можно определить по формуле [5.35]:

$$\arcsin \frac{\hbar k}{\sqrt{2mU_0}} = \frac{n\pi - ka}{2}.$$

При использовании замены $\cos(\xi) = \pm \gamma \xi$, при n – нечетном, а $\sin(\xi) = \pm \xi \gamma$, когда n – четное, получим для равных значений энергий соотношение:

$$E = 2\xi^2 \hbar^2 / ma^2.$$

Для достижения большей точности нужно решать уравнение Шредингера численными методами. Но для оценки положения основного энергетического уровня, можно воспользоваться предположением о «мелкой» квантовой яме, для которой положение основного уровня оценивается по формуле:

$$E_0 \approx U_0 - \frac{ma^2}{2\hbar^2} U_0^2.$$

Для произвольной доли Al в соединении $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ энергия сродства к электрону будет равняться: $4,07 - 1,1x$ эВ (при $x < 0,45$) и $3,64 - 0,14x$ эВ (при $x > 0,45$), и разрыв зон проводимости равняется $\Delta E_c = \chi_{\text{GaAs}} - \chi_{\text{AlGaAs}} \approx 0,4$ эВ при $x = 0,35$.

Если гетероструктура включает неоднородность в виде квантовых точек, то квантование спектра электронов в них должно учитываться отдельно путем вычисления положений энергетических уровней в соответствующей КТ.

Для определения энергетических уровней в сферически симметричной квантовой точке из арсенида индия воспользуемся методом, предложенным в [5.36].

Глубина потенциальной ямы в зоне проводимости $\Delta E_c = \chi_{\text{InAs}} - \chi_{\text{GaAs}} = 0,83$ эВ. Рассмотрим уравнение:

$$\sqrt{X - Y} = -\sqrt{Y} \operatorname{ctg} \left(\frac{\pi}{2} \sqrt{Y} \right),$$

где $X = E / E^*$, $E^* = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\pi}{2a} \right)^2 n^2$; a – ширина потенциальной ямы; $n = 1, 2, 3, \dots$; $X = U_0 / E^*$, U_0 – высота стенок ямы.

Анализ данного уравнения показывает, что оно может иметь решение при $(n - 0,5) \leq \sqrt{Y}$. Тогда в КТ с такими параметрами будет один уровень энергии, который равняется $E_{\text{КТ}} = 0,036$ эВ.

На рис. 5.31 приведена энергетическая диаграмма для гетеротранзистора с квантовыми точками для проекции, поперечной к плоскости канала.

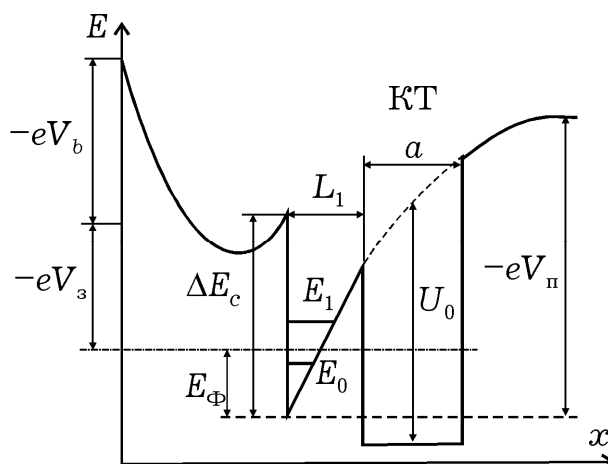


Рис. 5.30. Диаграмма зоны проводимости структуры гетеропереходного транзистора с КТ (U_0 – высота потенциального барьера квантовой точки, a – ее ширина)

В продольной проекции квантовые точки в канале могут представляться в виде чередующихся квантовых ям, т.е. структурой, аналогичной сверхрешетке. Отличие заключается в степени ограничений носителей заряда. Здесь может использоваться приближение о прямоугольной форме квантовых точек, хотя более вероятно, что в процессе роста, в том числе и по механизму Странски-Крастанова, на границе гетероперехода образуются КТ сферической формы. В условиях сильных полей, как показывают расчеты, отличия положений энергетических уровней в КТ в прямоугольном и сферическом приближении не являются существенными.

Эмиссия электронов из квантовых точек возможна при ударной ионизации, туннелировании носителей с КТ в квантовую яму (КЯ) и в результате тепловых выбросов носителей. Вероятность тепловых выбросов носителей из-за взаимодействия с колебаниями кристаллической решетки оценивалась с помощью больцмановского фактора [5.37]: $\delta = \exp(-\Delta E_a / k_B T)$, где $E_a = U_0 - E_i$.

Ускорение электронов до порога ударной ионизации квантовых точек зависит от соотношения двух факторов – ускорения во внешнем электрическом поле и рассеянии при столкновении с фононами, преимущественно с полярными оптическими и междолинными. Полученный с помощью решения системы релаксационных уравнений распределение электронной температуры учитывает эти факторы, и событие ионизации происходит, если значение электронной температуры достаточно в месте расположения КТ. При расчетах ионизация КТ учитывается в предположении, что энергия, которая передана локализованному в КТ носителю заряда, тратится на преодоление потенциального барьера и выбросы этого носителя из КТ, а в канал транзистора электрон инжектируется с начальной энергией, которая равняется энергии основного уровня КТ, с которого состоялась эмиссия.

С увеличением размеров КТ расстояние между энергетическими уровнями становится соизмеримым или меньше $k_B T$ и энергетический спектр квантовой ямы становится квазинепрерывным. Квантовую точку с площадью 1 мкм^2 уже можно рассматривать с точки зрения классической теории. Тогда на движение носителей влияет форма изменения потенциала в области КТ. В этом случае увеличение дрейфовой скорости связано с тем, что носители на время все равно захватываются квантовой точкой и теряя энергию эмиттируются «охлажденными».

Для учета влияния туннелирования необходима оценка коэффициента туннелирования, например, для треугольного барьера, при переходе электронов из КТ в КЯ (рис. 5.31). Также, необходимым условием (пренебрегая влиянием рассеяния на расширение квантовых уровней) является совпадение уровней по энергии. Вычисленные положения уровней для КТ и квантовой ямы в одномерном приближении дают совпадение лишь верхних уровней, для которых коэффициент прохождения практически равняется единице. Для потенциального барьера с шириной a и при условии:

$(2m^*E/\hbar^2)a \gg 1$, $(2m^*E/\hbar^2)a|1 - E/U_0| \gg 1$ для коэффициента прохождения можно использовать выражение при $E < U_0$:

$$D(E) \approx 4\sqrt{\alpha(1-\alpha)} \exp\left[-\frac{4}{3}\sqrt{\gamma(1-\alpha)^3}\right],$$

где U_0 – высота потенциального барьера; E – уровень, с которого происходит туннелирование; $\alpha = E/U_0$; $\gamma = U_0/E_1$; $E_1 = \hbar^2/(2m^*a)$.

Вероятность туннелирования с других уровней КТ является незначительной. В плоскости расположения КТ, параллельной плоскости канала, туннелирование между КТ может быть учтено в случае связанных квантовых точек или при наличии вертикально связанных слоев КТ. В случае изолированных КТ коэффициент прохождения также стремится к нулю. При подаче на затвор отрицательного напряжения ширина треугольного барьера между квантовой ямой и КТ будет расти, следовательно, все меньше электронов смогут туннелировать сквозь него, тогда решающим фактором ионизации КТ становится ударная ионизация.

Как было показано в [5.38], введение слоя КТ в канал гетеротранзистора способствует квантованию фононного спектра в трех направлениях, тогда как на гетерограницах происходит разделение полярных оптических фононов лишь в направлении, поперечном движению электронов, а дополнительное рассеяние на интерфейсных фононах приводит к практически одинаковым скоростям рассеяния и в объемных, и в слоистых структурах.

Рост тока при учете влияния КТ составляет 10 – 15%, что в большей степени достигается не за счет увеличения концентрации подвижных носителей, эмитированных из КТ, а за счет увеличения средней дрейфовой скорости потока носителей. Это объясняется тем, что эмитированные из КТ электроны проводимости будут иметь большие начальные скорости, по сравнению с электронами в канале. Поскольку в процессе самоорганизации КТ в плоскости канала транзистора могут располагаться неравномерно и случайно, это можно

учесть при исследовании воспроизводимости характеристик гетеротранзисторов с КТ. На рис. 5.31 приведены распределения средней дрейфовой скорости носителей при одинаковой концентрации КТ, но при разном расположении [5.40].

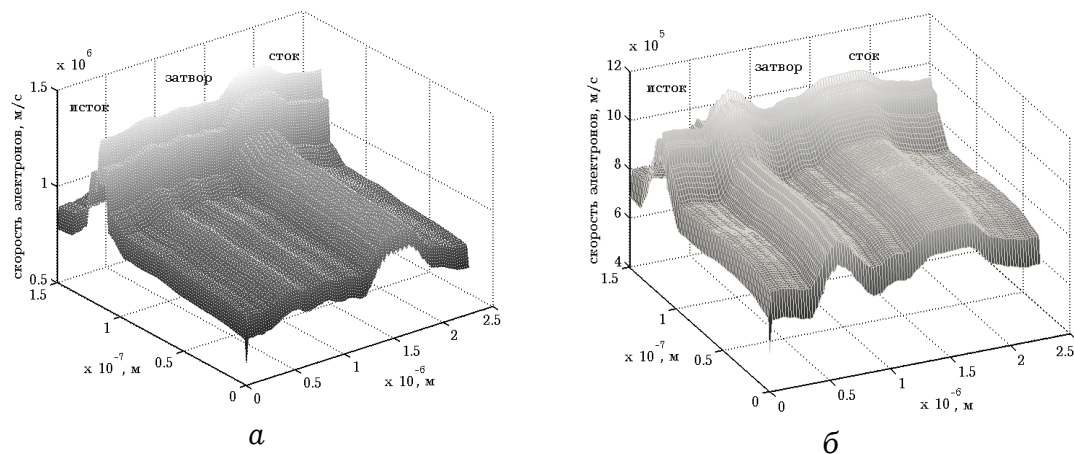


Рис. 5.31. Распределение средней дрейфовой скорости носителей для гетеротранзисторов с КТ при локализации КТ в канале у стокового (а) и у истокового (б) края затвора

Случайное расположение КТ в канале транзистора приводит к локальной неоднородности распределений концентрации носителей, электрического поля, а также средних значений дрейфовой скорости.

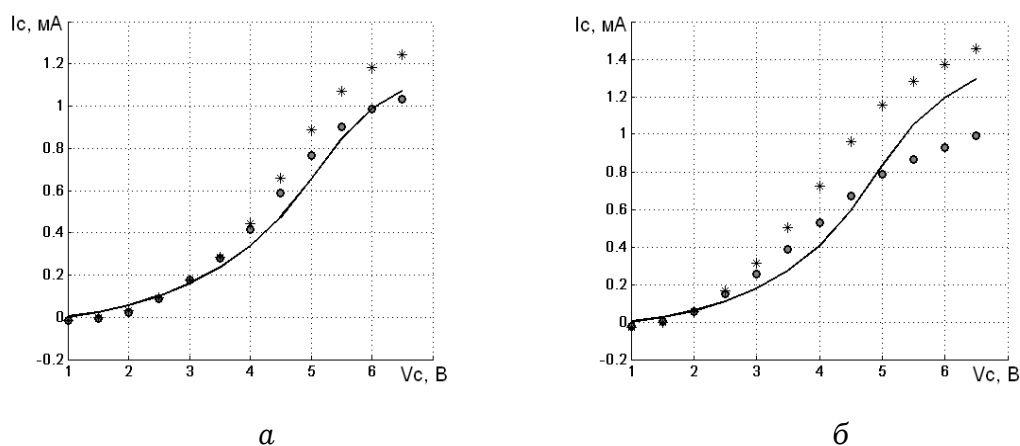


Рис. 5.32. ВАХ гетеротранзистора с КТ. Сплошная линия – эксперимент, точки – результаты расчетов для концентрации КТ $3 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$; а) $V_s = 0 \text{ В}$, б) $V_s = -0,8 \text{ В}$.

На рис. 5.32 приведены результаты расчета выходного тока транзистора с концентрацией квантовых точек в канале

$3 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$ и их сравнение с экспериментом [5.41]. Размеры и форма КТ считались одинаковыми, изменялся лишь способ их расположения в канале.

При той же концентрации КТ в канале способ их расположения заметно влияет на значение исходного тока. Таким образом, подтверждается влияние неопределенности в расположении КТ на исходные характеристики транзистора, что, очевидно, является одной из причин их отклонения от экспериментальных данных.

Литература к разделу 5

5.1. *Х. Штёрмер* Дробный квантовый эффект Холла, Нобелевская лекция. Стокгольм, 10 декабря 1998 г., Успехи физических наук, 2000, т.170, № 3 с.303-319.

5.2. *Minura T., Hiyamizu S., Fujii T, Nanbu K.*, Jap. Appl.Phys., 19, 5, L225 (1980).

5.3. *Lee J.S., Kim J.W., Lee J.H. et al.* Reduction of current collapse in AlGaN/GaN heterostructure FETs. – Electron. Lett., 2003, v.39, N9, p.750–752.

5.4. *Delagebeaudeuf D., Nuyen T., Linh* Metal-(n) GaAlAs-GaAs two-dimensional electron gas FET// IEEE Trans. on Electron Dev.-1982.-Vol.29.-N6.-P.955-960.

5.5. *Lee K., Shur M.S.* Design and fabrication of high transconductance modulation-doped (Al, Ga)As/GaAs FETs // J. of Vac. Sci. Technol. B.-1983.-Vol.1.-N2.-P.186-189.

5.6. *Yoshida J., Kazata M.* Analysis of high electron mobility transistors based on two-dimensional numerical model // IEEE Trans. on Electron Dev. Lett.-1984.-Vol.5.-N12.-P.508-510

5.7. *Widiger D.Y., Kizilyalli I.C., Hess K., et. al.* Two dimensional transient simulation of an idealised high electron mobility transistor IEEE Trans. on Electron Dev.-1985.-Vol.32.-N6.-P.1092-1102.

5.8. *Минаков В. В., Москалюк В.А.* Моделирование гетероструктурных полевых транзисторов методом частиц \ \

Электронная техника, сер I, электроника СВЧ, 1989, вып.2 (416), с.29-36.

5.9. *Adachi Sadao*. GaAs, AlAs and AlGaAs material parameters for use in research and devices applications // J.Appl. Phys. - 1985. - Vol.58.- N3. P.R1-R29.

5.10. *Минаков В. В., Москалюк В.А.* Моделирование гетероструктурных полевых транзисторов с односторонним и двойным барьером методом частиц \ \ „Автоматизация проектирования в электронике”, „Техника”, вып. 41, с.44-50.

5.11. *Shur M.S.* Low Ballistic Mobility in Submicron HEMT's // IEEE Electron Device Letters.-Vol.23, №9.-2002.-P.511-513.

5.12. *Kasemsuwan V., Nikali A.* A Microwave Model for High Electron Mobility Transistors // IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques.-Vol.45, №3.-1997.-P.420-427.

5.13. *Rudge P., Miles R., Steer M., Snowden C.* Investigation Into Intermodulation Distortion in HEMT's Using a Quasi-2-D Physical Model // IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques.-Vol.49, №12.-2001.-P. 2315-2320.

5.14. *Verzelesi G., Mazzanti A., Basile A., Boni A., Zanoni E., Canali C.* Experimental and numerical assessment of gate-lag phenomena in AlGaAs-GaAs heterostructure field-effect transistors (FETs) // IEEE Transactions on Electron Devices.-Vol.50, № 8.-2003.-P.1733-1740.

5.15. *Москалюк В.О.* Фізика електронних процесів. Динамічні процеси. Київ: “Політехніка”.-2004. - 180 с.

5.16. *Москалюк В.А., Тимофеев В.И., Иващук А.В.* Расчет релаксационных параметров GaAs в сильных полях // Технология и конструирование в электронной аппаратуре. -2003.-№3.-С.61-64.

5.17. *Morton C., Rosa S., Snowden C.* Comparison of quasi-2D and ensemble Monte-Carlo simulations for deep submicron HEMTs // Proc. MTT-S International Microwave Symposium Digest.-1998.-Vol.1.-P.153-156.

5.18. *A.Akturk, G.Pennington, N.Goldsman.* Quantum Modelling and Proposed Design of CNT-Embedded Nanoscale

MOSFET's // IEEE Transactions on Electron Devices.-2005. – V.52, №4 – P.577-584.

5.19. *R.Chu, Y.Zhou, J.Liu et al.* AlGaN-GaN Double-Channel HEMTs // IEEE Transactions On Electron Devices. – 2005.– V.52, №4 – P.438–445.

5.20. *Yu.G. Sadofyev, S.E. Yevstigneev, Yu.V.Kopaev, D.S. Shipitsin, S.S. Shmelev.* New approach to the independent ohmic contact formation in the structures with two parallel isotype quantum wells // J. Vac. Sci. Technol. B.2000.18(3). – P.1668–1671.

5.21. *Тимофеев В.И., Мохсен Амини* Моделирование нестационарных эффектов дрейфа в субмикронных гетеротранзисторах с двумя каналами // Вісник ДУІКТ. – 2005, Т.3, №3-4, с.143–146.

5.22. Тимофеев В. И., Амини Мохсен. Моделирование нестационарных эффектов дрейфа в субмикронных гетеротранзисторах с двумя каналами // Вісник державного університету інформаційно-комунікаційних технологій. 2005.- Том 3.- № 3-4.- С.143 – 146.

5.23. *Тимофеев В. И., Амини Мохсен.* Нестационарный дрейф электронов в субмикронных гетеротранзисторах с двумя гетеропереходами // Электроника и связь. 2006.- Часть.1. - С. 5-8.

5.24. *V.I.Timofeyev, M.Amini, E.M.Faleeva.* Non-stationary Drift Of Electrons in Submicron High Electron Mobility Transistor with two Heterojunctions // Electronics and Electrical Engineering, 2007, №4(76), P.33-36.

5.25. *K.H.G.Duh et al.* A super low-noise 0,1 micron T-gate InAlAs-InGaAs-InP HEMT // IEEE Microwave Guided Wave Letter. – 1991.- – №5. – P.114–116.

5.26. *Di-Hui Hung C. Lin.* DC and transmission line models for s high electron mobility transistor // IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques. – 1989 – Vol.37, № 9 – P.1361–1369.

5.27. *Chang C.S., Fetterman H.R.* Analytical model for HEMT's using new velocity – field dependence // IEEE Transactions on Electron Devices. – 1987 – Vol.34. – P. 1456–1462.

5.28. *Chey A.J., Walter H.K.* An Analytical Current-Voltage Characteristics Model for High Electron Mobility Transistor Based on Nonlinear Charge- Control Formulation // IEEE Transactions on Electron Devices.-1989.-Vol.37.№ 4-P.908-919.

5.29. *Мокеров В. Г., Фёдоров Ю. В., Великовский Л. Э., Щербакова М. Ю.* Новый гетероструктурный транзистор на квантовых точках // Докл. РАН - 2000 - Т. 375, №6 - с. 754-747.

5.30. *Тимофеев В. И., Фалеева Е. М.* Моделирование транзистора со встроенными квантовыми точками // 16-я Международная крымская конференция: СВЧ техника и телекоммуникационные технологии. – Материалы конф. – 11-14 сентября 2006 г. Севастополь – с.222-224.

5.31. *Тимофеев В.И., Фалеева Е.М.* Численное моделирование субмикронных гетеротранзисторов с квантовыми точками на основе соединения нитрида галлия // Электроника и связь 2007, тематический выпуск, ч.1, С.62-65.

5.32. *Карпович И. А.* Квантовая инженерия: самоорганизованные квантовые точки. Соросовский образовательный журнал, 2001, Т. 7, №11. С.102-108.

5.33. *Брунков П. Н., Конников С. Г., Устинов В. М., Жуков А. Е., Егоров А. Ю., Максимов М. В., Леденцов Н. Н., Копьев П. С.* Емкостная спектроскопия электронных уровней в квантовых точках InAs в матрице GaAs // Физика и техника полупроводников - 1996. - Т. 30, №5 - с. 924-933.

5.34. *Пожела Ю. К., Мокеров В. Г.* Большое повышение максимальной дрейфовой скорости электронов в канале полевого гетеротранзистора // Физика и техника полупроводников – 2006. – Т. 40, №3. – с. 362-366.

5.35. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теоретическая физика. Том 3. Квантовая механика. Нерелятивистская теория – М. : Наука, 1989. – 766 с.

5.36. *Драгунов В.П., И.Г. Неизвестный, В.А. Гридчин.* Основы наноэлектроники : уч. пособие. – М. : Логос, 2006. – 496 с.

5.37. Смирнов М.Б, Талалаев, Б.В. Новиков, С.В. Сарангов, Г.Э. Цирлин, Н.Д. Захаров, М.Б. Смирнов, В.Г. Численное моделирование температурной зависимости спектров фотолюминесценции квантовых точек InAs/GaAs // Физика твердого тела. – 2007. – Т. 49, вып. 6. – С. 1126-1131.

5.38. Мокеров В.Г., Ю.В. Федоров, Л.Э. Великовский, М.Ю. Щербакова. Новый гетероструктурный транзистор на квантовых точках // ДАН: (доклады РАН). – М. : Наука/Интерпериодика, 2000.– Т. 375 №6. – С. 754-747.

5.39. Поздняков В.Д., В.М. Борздов, Ф.Ф. Комаров. Расчет вольт-амперных характеристик симметричных двухбарьерных резонансно-туннельных структур на основе арсенида галлия с учетом процессов разрушения когерентности электронных волн в кантовой яме // Физика и техника полупроводников. – СПб. : ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, 2004. – Т. 38, вып. 9. – С. 1097– 1100.

5.40. Timofeyev V.I., E.M.Faleeva Model of Heterotransistor with Quantum Dots // Semiconductor Physics, Quantum Electronics and Optoelectronics. – 2010. – Vol. 13. – №2. – p. 186–188.

5.41. Тимофеев В.И., Е.М.Фалеева. Моделирование двухканального гетеротранзистора с квантовыми точками // СВЧ техника и телекоммуникационные технологии: 20-я Международная крымская конференция, 13-17 сент. 2010 г.: материалы конф. – Севастополь: Вебер, 2010. – С. 846–847.

5.42. Мокеров В.Г., Ю.Пожела, К.Пожела, В.Юцене. Гетероструктурный транзистор на квантовых точках с повышенной максимальной дрейфовой скоростью электронов // Физика и техника полупроводников. – СПб. : ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, 2006. – Т. 40, вып. 40. – С. 367-371.

6. МОЩНЫЕ СВЧ ТРАНЗИСТОРЫ

Повышение мощности СВЧ транзисторов обычно обеспечивается увеличением тока стока, что достигается за счет увеличения ширины затвора [6.1, 6.2]. При этом транзистор секционирован и отдельные секции включаются параллельно. В работе [6.1] описана конструкция и характеристики гетероструктурного полевого транзистора с выходной мощностью 110 Вт, созданного на основе соединений AlGaN/GaN на подложке из карбида кремния. Увеличение мощности достигается, во-первых, «меандровой» конструкцией затвора с его общей длиной 5,52 мм. При этом размер чипа составляет 2,7 мм × 0,6 мм × 0,1 мм (рис. 6.1, а). Во-вторых, каждый транзистор включает четыре чипа, включенных параллельно, и согласующие элементы (рис. 6.1, б). Одной из главных проблем при их конструировании является обеспечение необходимого теплоотвода для создания безопасного температурного режима.

6.1. МОЩНЫЕ СУБМИКРОННЫЕ ПТШ

В мощных полевых транзисторах СВЧ с барьером Шоттки, а также транзисторах, работающих в режиме большого сигнала, при некоторых значениях питающих напряжений разогрев может достигать достаточно высоких температур. Это приводит к саморазогреву транзистора и, как следствие, к изменению его электрических характеристик. Кроме того, в субмикронных полевых транзисторах имеет место разогрев электронов сильным электрическим полем и в результате температура электронного газа может достигать нескольких тысяч кельвинов. Распределение электронов по энергиям (и, следовательно, по температурам) вдоль структуры транзистора имеет ярко выраженный максимум у стокового края затво-

ра, что связано с разогревом электрическим полем и преимущественно междолинным рассеянием с последующей релаксацией в межэлектродном пространстве затвор-сток. Поэтому представляет интерес исследование взаимного влияния электродинамических и тепловых параметров, а также распределение тепловых полей по структуре транзистора.

Хотя влияние температуры на параметры полевых приборов не так существенно, как в биполярных приборах, для мощных субмикронных транзисторов СВЧ многие предельные параметры связаны с перегревом, вызванным протекающим током. На экспериментальном уровне такой анализ практически не реализуем, но необходим для оптимального проектирования, как отдельных транзисторов, так и монолитных СВЧ устройств. Самосогласованный анализ тепловых и электронных процессов в транзисторных структурах практически невозможен из-за различного масштаба моделируемых явлений: электронные процессы протекают в активной области транзистора с размером порядка $0,1 \dots 1$ мкм, а анализ тепловых явлений связан с областью моделирования до 100 мкм.

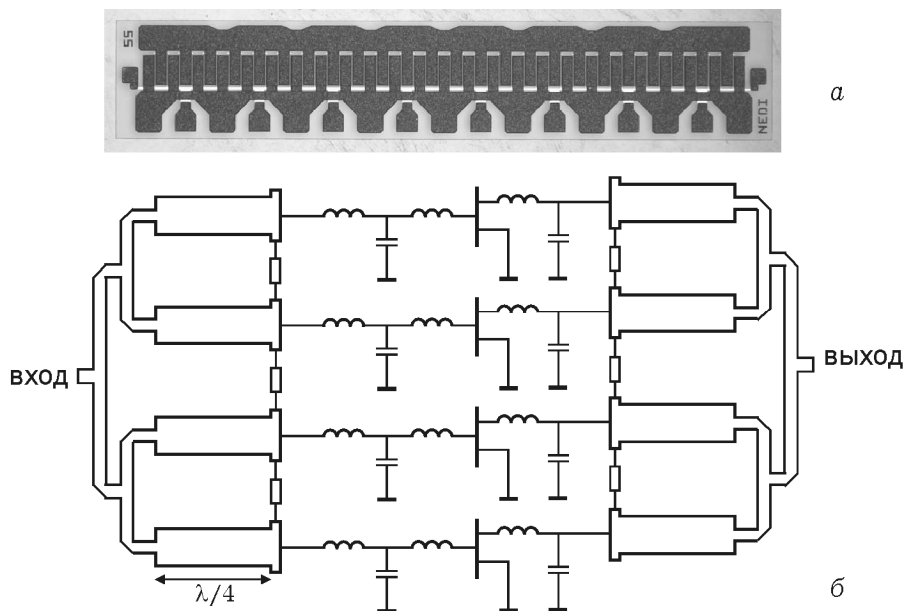


Рис. 6.1. Фотография отдельного чипа AlGaIn/GaN HEMT (а) и схема соединения четырех чипов (б) в конструкцию транзистора с согласующими элементами [6.1]

Для учета влияния саморазогрева протекающим током на параметры мощного полевого транзистора необходимо провести предварительный анализ общих тепловых полей всей транзисторной структуры. Результаты этого анализа позволяют в дальнейшем провести расчет теплового состояния в активной области транзистора и промоделировать их влияние на электронные процессы в канале и, соответственно, на параметры транзистора.

Для предварительного теплового анализа используется ряд допущений. Так, рассматривается лишь монокристаллическая пластина полупроводника (рис. 6.2,а) с заданием на ее поверхности контакта с подложкой граничных условий I рода (температура принимается постоянной и равной 20°C). Поскольку основное тепловыделение реализуется в весьма тонком слое, составляющем $\approx 0,2$ мкм, то полагается, что тепловой поток подводится к участку наружной поверхности, соответствующему зоне тепловыделений. Прочие ограничивающие поверхности считаются адиабатичными.

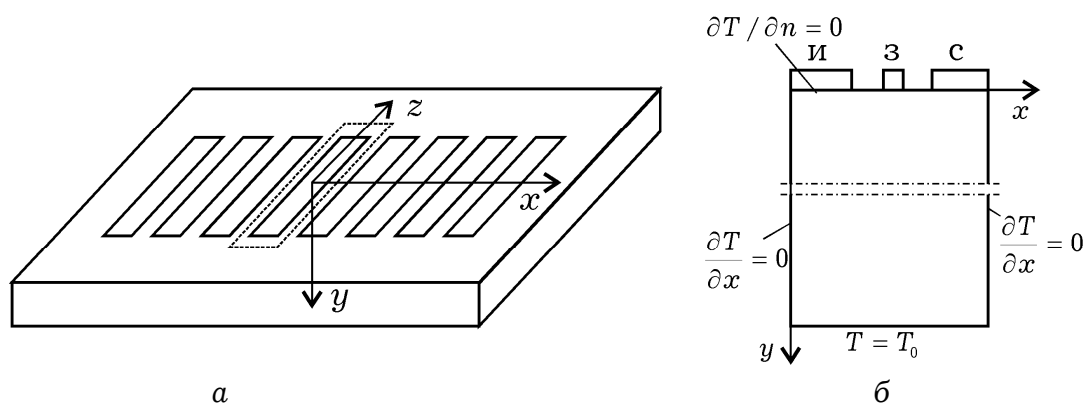


Рис. 6.2. Структурная схема (а) многосекционного транзистора и поперечное сечение моделируемого фрагмента (б)

Принимается, что материал пластины (GaAs) изотропен, теплофизические параметры материала считаются постоянными и не зависящими от температуры. Для упрощения задачи исследования необходимо обратить внимание на следующие особенности рассматриваемого объекта. Верхняя ограничивающая поверхность ($y = 0$) рассматриваемой пластины может быть условно разделена на две зоны - центральную, в которой расположены электроды и реализуются дис-

сипативные тепловыделения, и периферийную, где таковые отсутствуют. В связи с этим представляет интерес оценить величины возможных теплоперетоков в периферийную зону и их влияние на максимальную температуру транзистора.

Обращает на себя внимание определенная повторяемость (периодичность) в расположении электродов и зон тепловыделений. Ввиду этого наблюдается и соответствующая повторяемость, пространственная периодичность температурных полей. Такая картина дает возможность при решении тепловой задачи в первом приближении учитывать не всю область, а ограничиться рассмотрением лишь отдельного, специальным образом выделенного в ней элемента. Схему выделения такого элемента иллюстрирует рис. 6.2,б, где представлен фрагмент продольного сечения ($z = 0$), проходящего через середину центральной зоны. Область исследования может быть уменьшена еще вдвое, если принять во внимание, что в рамках выделенного элемента имеет место геометрическая и тепловая симметрия. Заметим, что ввиду оттоков теплоты вдоль оси абсцисс в периферийную зону, указанная тепловая симметрия выполняется, строго говоря, только для одного центрального элемента. Однако, именно этот элемент и представляет наибольший интерес, ибо здесь реализуется максимальное значение температуры.

В самом общем случае уравнение теплопроводности относится к дифференциальным уравнениям в частных производных параболического типа:

$$\rho C \frac{\partial T}{\partial t} - \nabla \cdot (k \nabla T) + h(T - T_{ext}) = f$$

в области Ω с начальными условиями $T(x, 0) = T_0(x)$ для $x \in \Omega$.

В стационарном случае первое слагаемое равно нулю и уравнение сводится к уравнениям эллиптического типа:

$$-\nabla \cdot (k \nabla T) + h(T - T_{ext}) = f .$$

Граничные условия определены как условия Дирихле на контактах и однородные условия Неймана на свободных границах.

Решая уравнение теплопроводности в стационарном приближении, находим распределение температуры в структуре, где ρ – плотность теплового потока ($\text{Вт}/\text{м}^2$); C – теплоемкость ($\text{Дж}/\text{К}$); k – коэффициент теплопроводности ($30 \text{ Вт}/\text{мК}$); h – коэффициент конвективного теплообмена ($\text{Вт}/\text{м}^2\cdot\text{К}$); T_{ext} – внешняя температура (К); f – источник подводимого тепла ($\text{Вт}/\text{м}^2$) [6.3-6.6].

При такой постановке задачи решение уравнения теплопроводности может быть получено аналитическим методом разделения переменных Фурье. Так как основное тепловыделение происходит в очень тонком слое, порядка $0,2 \text{ мкм}$, то принимается, что этот слой является источником тепла со стороны затвора.

Как видно из рис. 6.3, в транзисторе имеют место заметные продольные и поперечные тепловые потоки из высокотемпературной области в периферийные области кристалла, где тепловыделения отсутствуют. Вблизи затвора высокотемпературная область имеет многомерный характер, а вдали от этой зоны и в глубине кристалла почти одномерный характер.

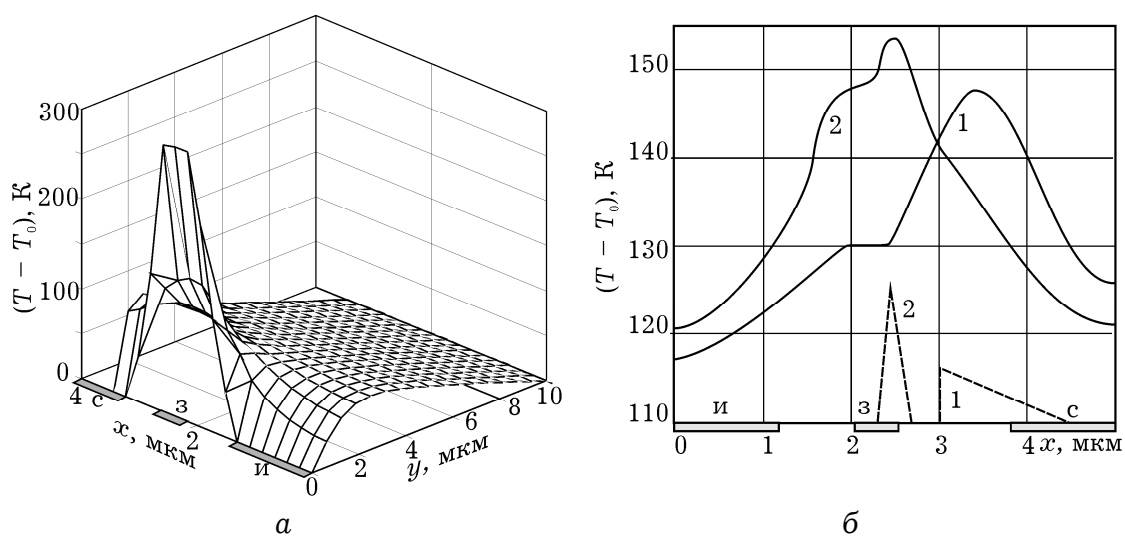


Рис. 6.3. Распределение температуры в субмикронном ПТШ

Таким образом, тепловой поток преимущественно направлен по толщине кристалла (вдоль оси y), распространение теплового потока вдоль оси x пренебрежимо мало. Область с повышенной температурой непосредственно примыкает к проводящему каналу транзистора.

Отмеченная особенность позволяет, используя *метод локализации граничных условий*, существенно упростить дальнейшее решение задачи за счет поэтапного уточнения результатов [6.7]. На втором этапе рассматривается не вся исходная область, а лишь ее часть - зона локализации, включающая активную область транзистора с ближайшим окружением. Поскольку зона локализации относительно невелика, то возможно использовать достаточно мелкую ее дискретизацию, обеспечивающую высокую точность получаемых результатов. При этом на нижней границе области задается температура, определенная на первом этапе, а на верхней - диссипативные тепловыделения задаются в виде некоторой эпюры распределения плотности мощности, в той или иной мере имитирующей распределения джоулева тепла в канале транзистора. Результаты расчетов для разных эпюр приведены на рис. 6.3,б. Форма эпюр теплоподвода существенным образом влияет на распределение температуры лишь в некоторой подобласти, непосредственно примыкающей к месту их задания. По мере же удаления вглубь кристалла это различие все более сглаживается, многомерные поля, отвечающие разным эпюрам, становятся практически одинаковыми, и более того, на достаточно большой глубине многомерный процесс в кристалле трансформируется в одномерный.

Полученные распределения температурных полей показали, во-первых, что в поперечном сечении канала изменение температуры из-за малой толщины эпитаксиального слоя составляет доли градуса. Поэтому распределение температуры вдоль канала можно с хорошим приближением считать одномерным. Во-вторых, слой металлизации затвора «выравнивает» температуру непосредственно в подзатворной части канала. Наибольшие градиенты температуры и соответственно пик ее распределения приходятся на участок канала между сто-

ком и затвором, где преобладают процессы скоростной и энергетической релаксации электронов.

Таким образом, область эффективного управления движением носителей полем затвора и область наибольшего тепловыделения пространственно разделены, а полученные результаты являются хорошим аргументом для использования квазидвумерной модели транзистора (гл. 4), в которой температура канала может быть принята постоянной и зависящей только от мощности диссипативных выделений.

Дальнейшая процедура моделирования влияния саморазогрева на параметры транзистора состоит в расчете статического режима и динамических малосигнальных параметров при комнатной температуре. Затем в зависимости от выделяемой мощности по результатам тепловых расчетов определялась температура канала, для которой проводилось повторное моделирование электрических параметров. Некоторые результаты таких расчетов представлены на рис. 6.4. [6.8].

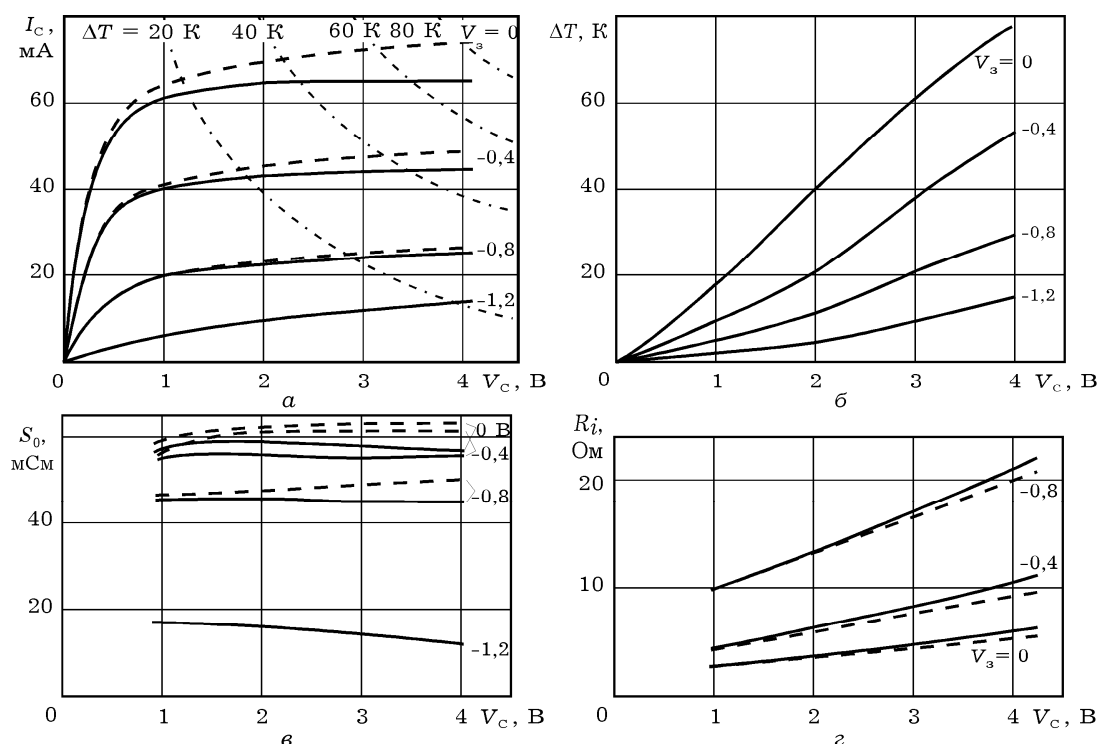


Рис. 6.4. Зависимости тока стока (а), перегрева канала (б), крутизны (в) и внутреннего сопротивления канала (г) от стокового напряжения с учетом саморазогрева (сплошные линии) и без него (штриховые линии). Значения приведены в пересчете на ширину затвора транзистора 300 мкм.

Наиболее заметно сказывается повышение температуры на значениях тока стока и некоторых «резистивных» параметров схемной модели. Уменьшение тока стока (a) и соответствующее уменьшение крутизны (b), особенно заметное в открытом канале, легко объясняется уменьшением подвижности при нагревании и влиянием на времена релаксации и полескоростные характеристики. Фактически по этой же причине увеличивается сопротивление канала (b). Несколько неожиданным оказалось отсутствие заметного влияния саморазогрева на выходную проводимость. Несмотря на заметное уменьшение наклона статических вольтамперных характеристик (рис. 6.4 a) выходная малосигнальная проводимость, определяемая наклоном динамической характеристики, практически не меняется, что вызвано несоизмеримостью времени установления теплового равновесия и периодом СВЧ колебаний. По сути этой же причиной объясняется слабая чувствительность к разогреву динамических емкостных параметров схемной модели транзистора.

Весьма полезными для оценки предельных режимов транзистора являются зависимости перегрева канала от питающих напряжений, представленные на рис. 6.4 b , а также линии постоянной температуры перегрева (штрихпунктирные линии на фоне стоковых вольтамперных характеристик), которые определяют допустимую рассеиваемую мощность.

Как показывают результаты моделирования, имеются области, в которых температура решетки существенно на 50–70 градусов превышает равновесную. Такими областями являются, кроме канала, области контакта истока и стока. Температура электронов под затвором может существенно отличаться от равновесной вследствие разогрева и междолинных переходов. При этом «медленные» электроны верхних долин уменьшают среднюю дрейфовую скорость коллективного движения, что приводит к процессам накопления носителей в области сильного электрического поля под затвором. Это означает, что для моделирования влияния разогрева на электронные процессы в канале транзистора необходимо учитывать

отличные от равновесных значения энергии и скорости носителей.

Кроме того, предложенная модель анализа тепловых процессов позволяют исследовать предельные, с точки зрения рассеиваемой мощности, режимы работы полевых транзисторов с субмикронными размерами активной области.

Полученные распределения температур с экстремумом в приповерхностном слое у затвора свидетельствует о необходимости учета высоких градиентов температур при проектировании и выборе топологии. При этом необходимо учитывать влияние высоких температур на электромеханические свойства затвора и барьерного контакта. Совместное использование физико-топологических и тепловых моделей субмикронных структур позволяет также оптимизировать их структуру, выходные параметры и характеристики.

6.2. МОЩНЫЕ ГЕТЕРОСТРУКТУРНЫЕ ПОЛЕВЫЕ ТРАНЗИСТОРЫ

В субмикронных транзисторных структурах с гетероселективным легированием в сильных полях имеются следующие условия разогрева транзисторной структуры. Общее повышение температуры транзисторной структуры связано с выделяемой мощностью. Это увеличение температуры можно ограничить за счет выбора конструкции, материалов теплоотводов и корпуса с соответствующими значениями тепловых сопротивлений. Вследствие эффектов сильного поля под затвором и локальным разогревом электронного газа до температур, достигающих несколько тысяч кельвинов, перегрев структуры увеличивается. Это увеличение конструктивными приемами устранить невозможно. Таким образом, описание саморазогрева в реальных транзисторных структурах для определения их электротепловых режимов связано как с моделированием тепловых полей, так и с описанием процессов в области сильного поля, где перегрев проявляется наиболее существенно.

Как отмечалось в работах [6.9-6.14], изменение параметров электронного газа вследствие повышения температуры

приводят к возникновению высоких локальных градиентов температуры, которые влияют как на электрические характеристики транзисторной структуры, так и на параметры надежности транзистора. В отличие от типичных полевых структур, гетероструктуры (рис. 6.5) – это многослойные структуры, в которых чередуются слои (гетеропереходы, квантовые ямы и потенциальные барьеры) с высокой электропроводностью и обедненные слои, близкие по своим свойствам к диэлектрику. Моделирование тепловых полей позволяет оценить распределение температурных полей в структуре ГСПТ и выбрать режимы устойчивой работы транзистора с точки зрения температурного диапазона, а также выработать рекомендации по оптимальному выбору конструкции транзистора и обеспечению теплоотвода в монолитных ИС СВЧ. Для учета тепловых эффектов в ГСПТ можно использовать два подхода. В первом случае при моделировании эффект саморазогрева учитывается за счет введения дополнительных слагаемых к параметрам модели, определяемым в стационарных режимах. Эти слагаемые задаются уравнениями, описывающими физические процессы эффектов саморазогрева [6.15].

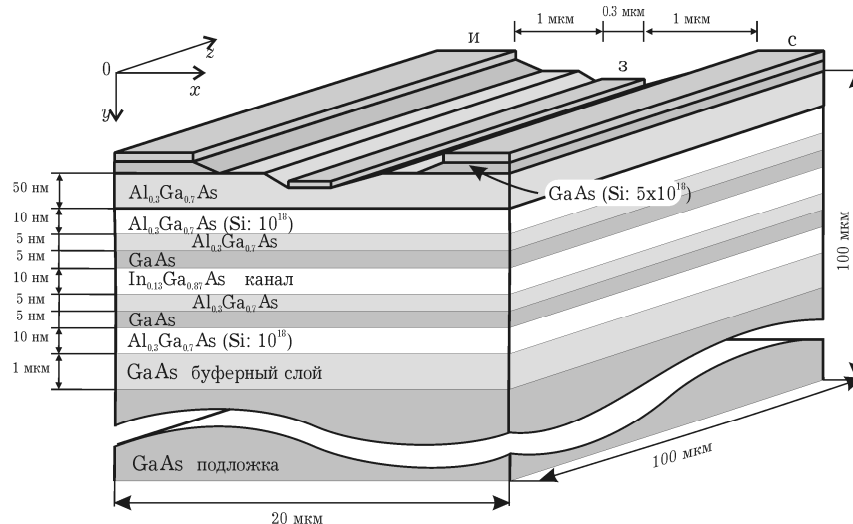


Рис.6.5. Структура транзистора с гетероселективным легированием

Для схемотехнического моделирования в эти модели включают дополнительные, зависящие от температуры источники тока (рис. 6.6). Тогда суммарный ток будет равен: $I_{\Sigma} = I_{дст} + I_{th}$, где $I_{дст}$ – ток канала транзистора, определяемый в

стационарном режиме; I_{th} – тепловой ток, являющийся функцией разности напряжения за счет изменения температуры ΔT , протекающий через «тепловое сопротивление» R_{th} и «тепловую емкость» C_{th} , зависящих от температуры и геометрических параметров прибора.

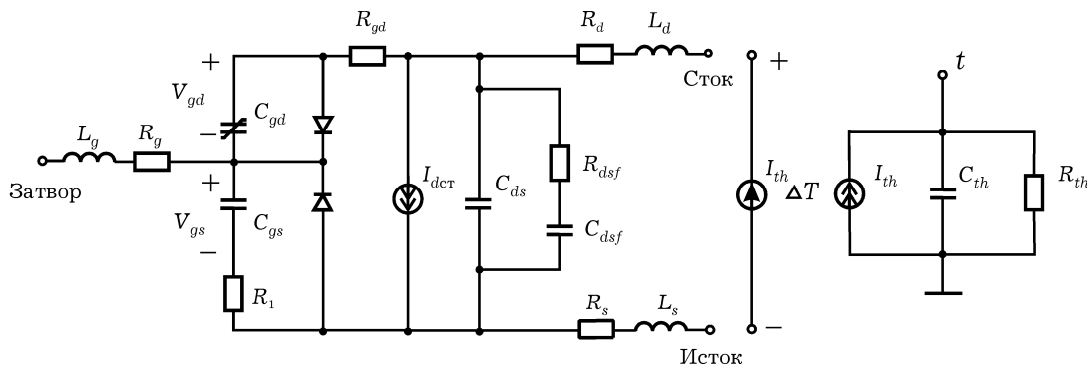


Рис. 6.6. Схемная модель гетеротранзистора с учетом цепей, учитывающих саморазогрев

Достоинством такого моделирования является простота расчета, так как параметры элементов модели определены в стационарном режиме, а выходные характеристики получают путем суммирования напряжений и токов модели, полученных при нормальных условиях, и дополнительных источников тока и напряжения, величины которых аппроксимируют изменения тока или напряжения, в зависимости от температуры транзисторной структуры.

Второй подход связан с учетом эффектов саморазогрева транзисторной структуры уже на стадии постановки вычислительной задачи. Вводятся обратные связи в уравнения модели между напряжениями, токами рассматриваемого элемента и изменением температуры транзисторной структуры, вследствие выделяемой мощности. Тем самым осуществляется интегральная оценка изменения характеристик транзистора в зависимости от физических процессов, вызванных эффектами саморазогрева [6.16].

Однако, введение обратной связи усиливает нелинейные свойства параметров модели, ведет к ее усложнению и к увеличению жесткости системы уравнений, описывающих работу рассматриваемой транзисторной структуры.

Применяя методику расчета распределения температуры из уравнения теплопроводности предыдущего параграфа, получим распределения температуры для транзисторных гетероструктур с длиной затвора 1 мкм и 0,4 мкм как показано на рис. 6.7,а и 6.7,б соответственно.

Особенностью является то, что область разогрева простирается от омического контакта истока, проходит через область сильного поля под затвором и достигает омического контакта стока. В результате такого разогрева нарушается термодинамическое равновесие в приконтактных областях транзистора, что приводит к росту энергии электронов, уменьшению их подвижности и росту паразитных сопротивлений контактов.

Из температурной зависимости подвижности электронов [6.17] и распределения теплового поля транзисторной структуры в плоскости xu (рис. 6.7) видно, что подвижность электронов в подзатворной области по сравнению с подвижностью электронов при 300 К может уменьшаться в несколько раз при типичных уровнях легирования областей ГСПТ.

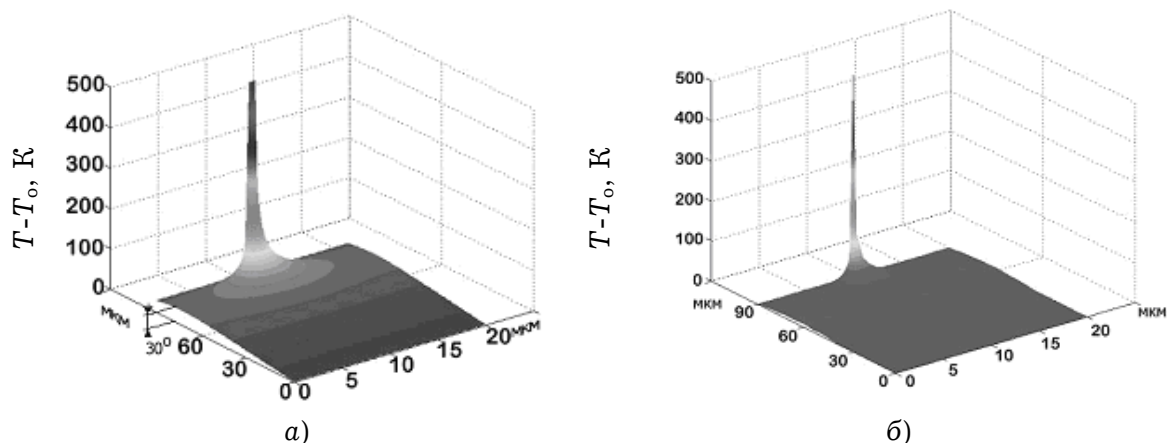


Рис. 6.7. Распределения температуры в гетеротранзисторах с длиной затвора 1 мкм (а) и 0,4 мкм (б).

Кроме того, за счет перераспределения электронов в потенциальных ямах возможно изменение потенциального рельефа, особенно в области проводящих слоев транзистора, что ухудшает управление транзистора полем затвора и приводит к уменьшению крутизны транзистора. Таким образом, рас-

пределе-ние тепловых полей в многослойных гетероструктурах имеет ряд особенностей, которые необходимо учитывать при выборе топологии и конструкции транзистора с гетероселективным легированием. В частности, влияние рассмотренных эффектов можно ослабить при уменьшении активной области транзистора как за счет уменьшения длины затвора, так и толщины активных слоев транзистора.

По результатам двумерного моделирования тепловых полей в транзисторе с селективным легированием и температурных зависимостей подвижности можно оценить скорости дрейфа электронов в стационарном приближении для аппроксимаций и их применения для расчетов в аналитических и одномерных моделях. Кроме того, по распределениям тепловых полей с учетом процедуры усреднения можно оценить величины теплового сопротивления для схемной модели рис. 6.6.

6.3. ГЕТЕРОБИПОЛЯРНЫЕ ТРАНЗИСТОРЫ

Повышение быстродействия биполярных транзисторов возможно при использовании в качестве эмиттера материала с большей шириной запрещенной зоны, чем материал базы. Например, первые гетеротранзисторы имели эмиттер из n -GaAs, а базу из p -Ge. Позже стали использовать гетеропереходы на основе соединений $Al_xGa_{1-x}As$, $Al_xGa_{1-x}N$ и др.

На границе разных полупроводников возникают электрические поля, которые на энергетической диаграмме (рис.6.8) моделируются разрывом дна зоны проводимости, равным разности энергий электронного сродства $\Delta E_c = \chi_1 - \chi_2$, и разрывом потолка валентной зоны $\Delta E_v = (\Delta E_1 + \chi_1) - (\Delta E_2 + \chi_2)$. Совместно с полем контактной разности $V_k = (\Phi_1 - \Phi_2)/e$ эти поля уменьшают высоту потенциального барьера для электронов и увеличивают его для дырок валентной зоны. Асимметрия условий прохождения электронов и дырок через эмиттерный переход приводит к тому, что ток инжекции ды-

рок j_p уменьшается в $\exp(\Delta E_v/kT)$ раз, а ток инжекции электронов j_n увеличивается в $\exp(\Delta E_c/kT)$ раз. В итоге можно получить коэффициент инжекции электронов $\gamma = j_n/(j_n + j_p)$ практически равным единице, что делает процессы рекомбинации дырок в эмиттере несущественными.

В обычном гомопереходе отношение электронной и дырочной составляющих тока эмиттера определяется отношением концентрации доноров в эмиттере и акцепторов в базе, что

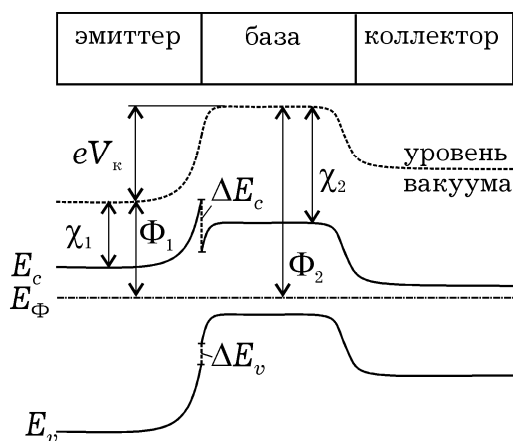


Рис. 6.8. Энергетическая диаграмма типичного *npn*-гетеротранзистора

вынуждает для увеличения коэффициента инжекции ограничивать степень легирования базы. В гетеропереходе возможно сильное легирование базовой области, что приводит к снижению продольного сопротивления базы и постоянной времени заряда коллекторной цепи $\tau_k = R_b C_{кб}$, которая существенно влияет на быстродействие транзистора при сверхтонких базах.

Кроме того, на границе эмиттер-база электроны приобретают дополнительную кинетическую энергию, равную ΔE_c , и при соответствующей толщине базы может быть реализован баллистический, или близкий к нему, режим переноса в узкозонном материале. Это уменьшает время пролета в базе, что является еще одним фактором повышения быстродействия.

6.3.1. Двумерное моделирование транзисторов

Вертикальная структура субмикронного гетеробиполярного транзистора (ГСБТ) показана на рис. 6.9. Предполагается, что такой транзистор размещается на относительно большой подложке, которая существенным образом влияет на распределение тепла.

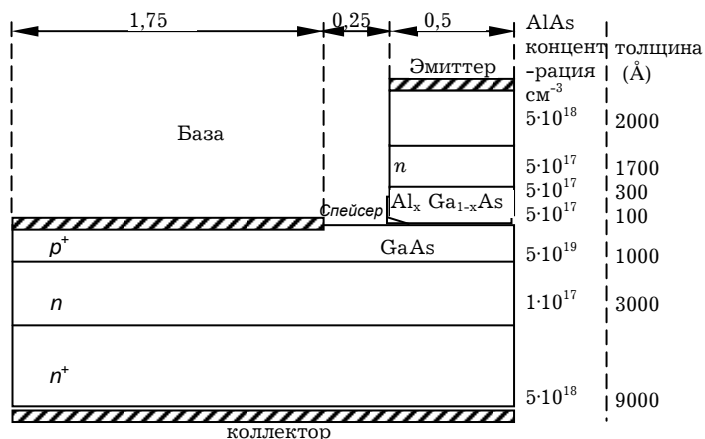


Рис. 6.9. Структура субмикронного гетеробиполярного транзистора (AlGaAs/GaAs)

К особенностям ГСБТ следует отнести наличие разнородных физических процессов в эмиттерном гетеропереходе переходе и коллекторном p - n переходе, а также процессов в области базы, которая в субмикронных транзисторах может составлять несколько десятков нанометров, и, как правило, не превышает 200 нм. Применение в эмиттере $Ga_{1-x}Al_xAs$ n -типа в контакте с p -легированной базой (GaAs) создает потенциальный барьер не менее 0,25 эВ, что практически исключает инжекцию дырок в эмиттере даже при высокой степени легирования базы. Это позволяет уменьшить толщину базы без увеличения ее сопротивления, а также снизить опасность смыкания переходов. Однако, как показывают результаты моделирования, ГСБТ проигрывают полевым субмикронным гетеротранзисторам по уровню шума [6.18], кроме того, в гетеробиполярных транзисторах необходимо учитывать эффекты саморазогрева [6.19], ухудшающие выходные характеристики.

Благодаря новым возможностям технологии, применению новых полупроводниковых материалов и оптимизации топологии субмикронные гетеробиполярные транзисторы достигают предельных частот усиления более 200 ГГц [6.20] и используются в широком спектре устройств миллиметрового диапазона. Детальное моделирование процессов дрейфа и диффузии может быть основано на двумерной модели активной области транзистора в гидродинамическом приближении. Такие моде-

ли позволяют учесть основные эффекты биполярных субмикронных структур: разогрев электронов и дырок сильным электрическим полем и связанное с ним изменение подвижностей, процессы рекомбинации, эффекты сильного легирования – изменение ширины запрещенной зоны и вырождения полупроводников.

В моделируемой структуре транзистора (рис. 6.9) учтена симметрия относительно вертикальной оси реального ГСБТ, что позволяет рассматривать только одну половину структуры для уменьшения вычислительных затрат.

Процессы во внутренней части транзистора в самом общем случае может быть описаны уравнением Пуассона

$$\nabla^2 V = e(n - p - N_d + N_a)/\epsilon\epsilon_0, \quad (6.1)$$

и уравнениями непрерывности тока для электронов и дырок. Если для носителей заряда справедлива статистика Максвелла-Больцмана, то эффекты сильного легирования можно учесть дополнительными слагаемыми в системе диффузионно-дрейфовых уравнений:

$$\operatorname{div}[\mu_n(\nabla n - n\nabla \ln n_{ie} - n\nabla(V + \psi))] = R(p, n), \quad (6.2)$$

$$\operatorname{div}[\mu_p(\nabla p - p\nabla \ln n_{ie} - p\nabla(V + \psi))] = R(p, n). \quad (6.3)$$

Данная система с учетом уравнения Пуассона является полной. Здесь V – электрический потенциал, e – заряд электрона, n , p – концентрации электронов и дырок, $\epsilon\epsilon_0$ – диэлектрическая проницаемость, N_d , N_a – концентрации донорной и акцепторной примесей, μ_n , μ_p – подвижности электронов и дырок соответственно, R – скорость рекомбинации носителей заряда. В уравнениях (6.1) – (6.3) величины n_{ie} и ψ описывают эффекты сильного легирования. С использованием выражения для собственной концентрации носителей заряда $n_i = (N_c N_v)^{1/2} \exp(-E_g/2kT)$ может быть получено выражение

для некоторой эффективной собственной концентрации носителей заряда:

$$n_{ie} = n_i \exp[(q\Omega_n + q\Omega_p)/2kT] = n_i \exp(-\Delta E_g/2kT).$$

В последней формуле величина $e\Omega_n$ трактуется как сужение ширины запрещенной зоны со стороны зоны проводимости, а величина $e\Omega_p$ – со стороны валентной зоны. Тогда величина $\Delta E_g = e\Omega_n + e\Omega_p$ является полным сужением ширины запрещенной зоны. Точное аналитическое определение величин $e\Omega_n$ и $e\Omega_p$ не представляется возможным. В дальнейшем эти величины для моделирования выбираются на основе экспериментальных данных. Параметр ψ определяется как $\psi = e(\Omega_n - \Omega_p)/2$.

Зависимости подвижностей электронов и дырок от напряженности электрического поля рассчитываются в приближении времени релаксации для электронов и дырок.

Для решения системы уравнений используется метод прогонки в сочетании с итерационным многошаговым методом Ньютона. Граничные условия для уравнения Пуассона задавались как условия Дирихле на электродах (при электрических смещениях на эмиттере, базе и коллекторе соответственно 0,0, 1,0 и 5,0 В) и однородные условия Неймана на свободных и боковых границах.

В структуре транзистора использовались некомпенсированные полупроводники с распределением легирующей примеси как показано на рис. 6.10. Эмиттерный гетеропереход моделировался как скачок потенциала высотой около 0,4 эВ без учета квантования энергетических уровней.

Анализ результатов моделирования (рис. 6.11, 6.12) показывает, что область сильного поля в ГСБТ локализуется в межэлектродном промежутке база-коллектор и примыкает к области базы и p - n перехода база-коллектор, а также вблизи эмиттерного гетероперехода. Подвижности электронов и дырок максимальны в межэлектродном промежутке эмиттер-база, что соответствует их низкополевым значениям вблизи

«пороговых» значений напряженности электрического поля и почти не изменяются в сильных полях, что соответствует разогреву и междолинным переходам электронов и появлению горячих дырок.

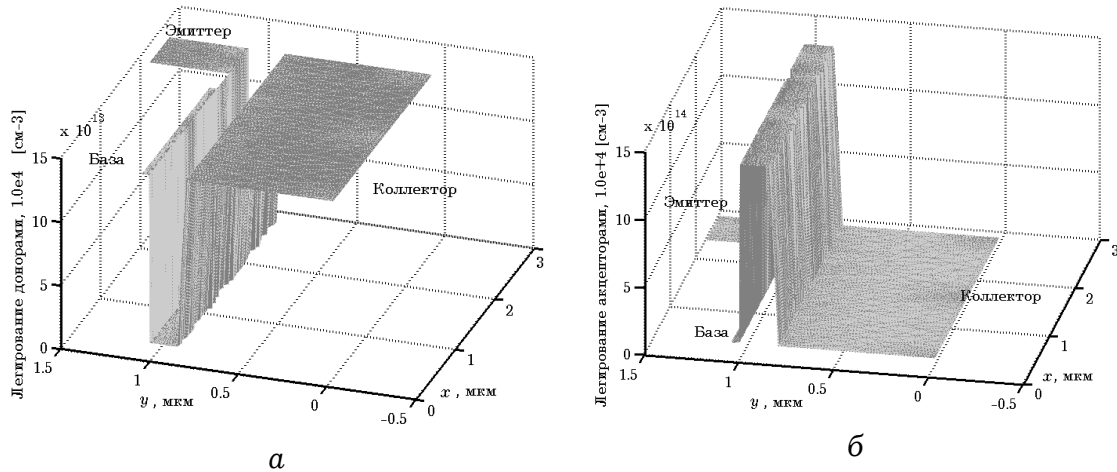


Рис. 6.10. Профиль легирования донорами (а) и акцепторами (б)

Особенности структуры и малые размеры активной области транзистора приводят к относительно высоким значениям напряженности электрического поля в области коллекторного перехода и коллектора (более $4 \cdot 10^7$ В/м), что связано с рассеиванием большой мощности и с необходимостью оптимального выбора толщины области коллектора.

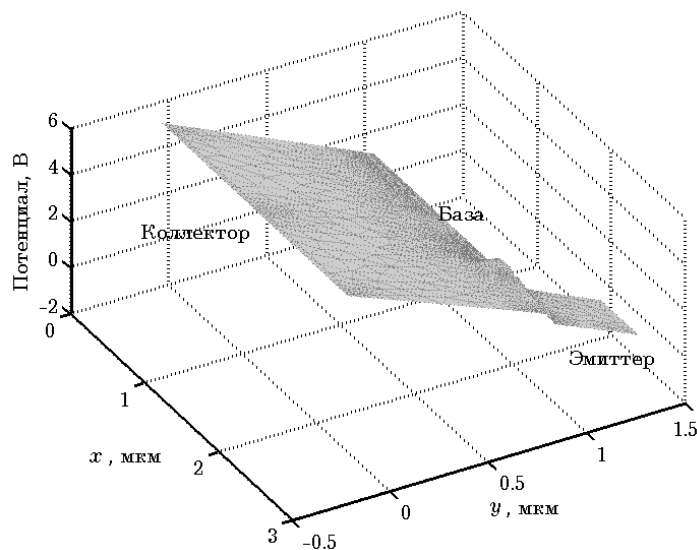


Рис. 6.11. Распределение потенциала в структуре гетеробиполярного транзистора

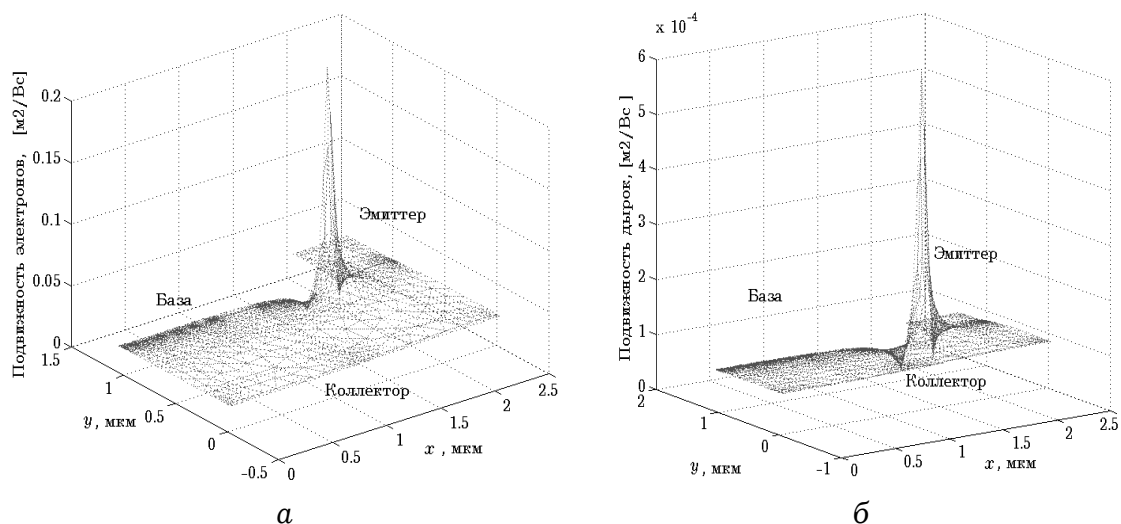


Рис. 6.12. Подвижность электронов (а) и дырок (б) в структуре транзистора

6.3.2. Моделирование разогревных эффектов

Как показывают результаты анализа физических процессов в подзатворной области субмикронных ПТШ и ГСПТ и приколлекторной области ГСБТ существуют области сильного поля и разогрев носителей заряда. Актуальной, особенно для мощных структур, является задача исследования влияния разогревных эффектов. За счет дополнительного разогрева носителей возможно ухудшение параметров транзистора которое обусловлено как повышением температуры кристаллической решетки, так и разогревом электронного газа в канале, что приводит к уменьшению подвижности электронов. Представляет также интерес степень влияния разогревных эффектов на параметры схемных моделей транзисторов и частотные характеристики.

Как правило, мощные транзисторы представляют собой многосекционные структуры. При этом каждая секция может быть представлена в виде тепловых источников на поверхности подложки, которые рассчитываются с учетом функции распределения плотности мощности (потока энергии). Такое исследование возможно лишь при совместном анализе [6.21, 6.22] уравнения Пуассона, уравнений непрерывности тока для электронов и дырок, а также уравнения для потока энергии в

двумерном приближении и учете температурных полей, возникающих в транзисторе за счет протекания тока.

Рассмотрим вертикальную структуру ГСБТ, подобную приведенной выше. Предполагается, что транзистор располагается на относительно большой подложке, которая существенным образом влияет на распределение и отвод тепла. При этом необходимо учитывать тот факт, что размеры температурно-неравновесной области существенно превышают размеры электрически активной области, в которой происходит взаимодействие потоков электронов и дырок с электрическим полем. Эти особенности необходимо учитывать при задании граничных условий в моделируемой области для описания тепловых процессов. Область транзистора с тепловыми полями за границами активной области транзистора может быть, например, рассмотрена как некий дополнительный резистор, рассеивающий мощность. В моделируемой структуре транзистора учтена симметрия относительно вертикальной оси реального ГСБТ, что позволяет рассматривать только одну половину структуры для уменьшения вычислительных затрат.

Активная область транзистора в общем случае может быть описана уравнениями Пуассона:

$$\nabla^2 V = e(n - p - N_d + N_a) / \epsilon \epsilon_0, \quad (6.4)$$

уравнениями непрерывности тока для электронов и дырок

$$\nabla \vec{J}_n = eR_n, \quad (6.5)$$

$$\nabla \vec{J}_p = eR_p, \quad (6.6)$$

а также уравнением для потока тепла

$$\nabla [c(T) \cdot \nabla T] = -P = \Delta \vec{J}_E. \quad (6.7)$$

Здесь \vec{J}_n , \vec{J}_p – плотности электронного и дырочного токов соответственно, $c(T)$ – зависящий от температуры коэффициент теплопроводности, P – мощность, рассеиваемая в единице объема, \vec{J}_E – плотность энергетического потока.

Температурная зависимость коэффициента теплопроводности для полуизолирующего арсенида галлия может быть представлена [6.23] аппроксимацией $c(T) = 0,76 - 0,001 \cdot T$ (Вт/см·К), а для арсенида галлия n -типа с концентрацией $3,5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ аналогичная зависимость может быть представлена как $c(T) = 1/(aT - \epsilon)$, где $a = 9,2 \cdot 10^{-3}$, $\epsilon = 0,44$.

В работе [6.22] кроме традиционных стационарных диффузионно-дрейфовых составляющих токов электронов и дырок предложен способ учета дополнительных составляющих токов. Эти составляющие учитывают эффекты сильного легирования, зависящие от уровня инжекции, и температурную зависимость коэффициента диффузии. С учетом этого уравнения для плотностей электронного и дырочного токов запишутся:

$$\vec{J}_n = \mu_n \beta_n kT \nabla n - n \mu_n \left[\nabla (eV + \chi) + \beta_n kT \frac{\Delta N_c}{N_c} - \alpha_n k \nabla T \right], \quad (6.8)$$

$$\vec{J}_p = -\mu_p \beta_p kT \nabla p - p \mu_p \left[\nabla (eV + \chi + E_g) - \beta_p kT \frac{\Delta N_v}{N_v} + \alpha_p k \nabla T \right]. \quad (6.9)$$

Как показано в работе [6.25], выражение для плотности потока энергии может быть записано как

$$\vec{J}_E = \left\{ - \left[\alpha_n kT + E_c \right] \frac{\vec{J}_n}{e} - c_n \Delta T \right\} + \left\{ \left[\alpha_p kT - E_v \right] \frac{\vec{J}_p}{e} - c_p \Delta T \right\}, \quad (6.10)$$

где коэффициенты c_n и c_p могут идентифицироваться как коэффициенты теплопроводности соответственно для электронов и дырок.

При совместном решении системы уравнений (6.4–6.10) предполагается отсутствие излучения тепла и конвективных

потоков, а также независимость квазиуровней Ферми для электронов и дырок от температуры. Эти допущения позволяют рассматривать полупроводник, включая подсистемы свободных носителей заряда и решетку, как термодинамическую систему.

Для анализа эффекта разогрева возможен также подход, основанный на следующем алгоритме. На первом этапе решаются диффузионно-дрейфовые уравнения структуры транзистора и уравнение Пуассона при комнатной температуре решетки. Далее по результатам моделирования мощность рассчитывается из уравнения:

$$P = -\int_V (\varphi_n \operatorname{div} \vec{J}_n + \operatorname{grad} \varphi_n \vec{J}_n + \varphi_p \operatorname{div} \vec{J}_p + \operatorname{grad} \varphi_p \vec{J}_p) dV.$$

По выделяемой мощности рассчитывается температура активной области транзистора. Так как процессы тепловыделения связаны с областью протекания тока через транзистор, то, как правило, наибольший разогрев происходит в приповерхностных слоях. Для ГСБТ такой областью является область коллектора. Рассчитанное таким образом значение температуры задается как граничное условие Дирихле при моделировании тепловых полей в структуре транзистора при решении уравнения теплопроводности для получения функции $T(x,y)$. На заключительном шаге осуществляется повторный пересчет распределений физических величин по уравнениям Пуассона и уравнениям непрерывности для электронов и дырок, в которых температура кристаллической решетки задается неравновесной функцией $T(x,y)$, что позволяет учесть разогревные эффекты посредством температурных зависимостей коэффициентов диффузии и подвижностей для электронов и дырок.

Для интегрального учета разогрева по известной функции $T(x,y)$ путем усреднения можно рассчитать эквивалентное тепловое сопротивление R_t :

$$-c(T)\Delta T \cdot \vec{n} = \frac{(T - T_0)}{R_t},$$

где \vec{n} – единичный вектор, нормальный к внешней поверхности, T_0 – равновесная температура. Тепловое сопротивление рассчитывается с учетом распределения температурных полей в подложке транзистора и процедуры усреднения:

$$T_{\text{ср}} = \frac{\int T(x, y) dx dy}{l_x l_y}, \quad R_t = \frac{T_{\text{ср}} - T_0}{Q}, \quad \text{где} \quad Q = \frac{\oint \vec{I}_E \cdot \vec{n} \cdot da}{l_x l_y},$$

а l_x и l_y – размеры моделируемой области.

На рис. 6.13 представлен пример расчета тепловых полей для топологической структуры ГСБТ (рис. 6.3), полученных в результате решения уравнения теплопроводности при заданной температуре на электроде коллектора в соответствии с подходами расчета процессов разогрева из работы [6.26].

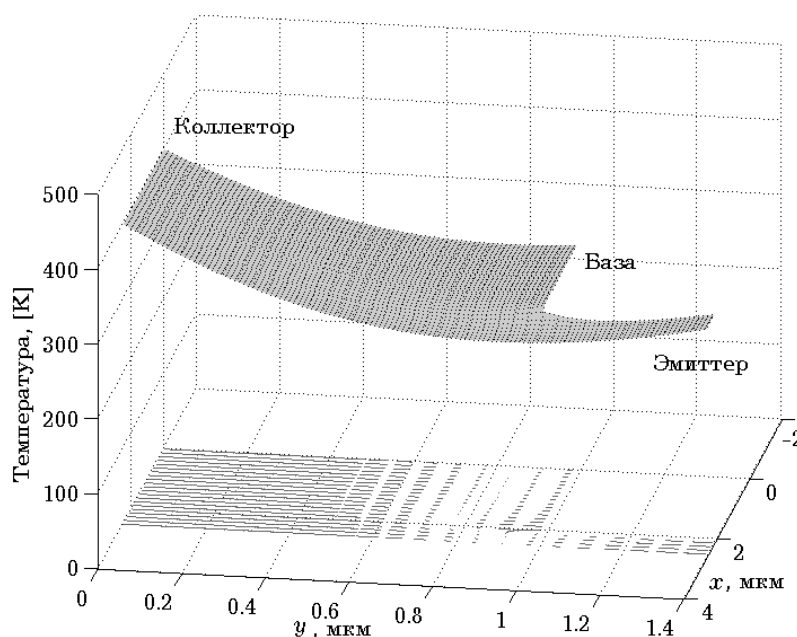


Рис. 6.13. Распределение тепловых полей в структуре ГСБТ (в проекции на горизонтальной плоскости приведено поле градиентов температуры)

6.3.3. Схемное моделирование процессов саморазогрева

При схемотехническом моделировании субмикронных полупроводниковых устройств, в частности, гетероструктурных биполярных транзисторов, одним из важных аспектов является учет влияния эффектов саморазогрева на электри-

ческие характеристики исследуемых устройств. Подобные эффекты обусловлены возрастанием температуры полупроводникового устройства в результате рассеяния мощности при довольно высоких значениях рабочих токов. При этом возрастание напряженности электрического поля в активной области транзистора приводит к возникновению сильнополевых эффектов, связанных с разогревом носителей. Дрейф и диффузия в сильном электрическом поле, особенно в области переходов, может приводить к накоплению носителей, в том числе за счет их междолинных переходов. Кроме того, в области базы могут усиливаться процессы генерации и рекомбинации. Интегрально эти процессы могут приводить к изменению рабочей точки на вольтамперной характеристике и к процессам запаздывания тока при импульсном входном воздействии. Проблема описания эффектов саморазогрева особенно актуальна для транзисторов, которые работают в режиме большого сигнала, если рабочая точка эволюционирует в широком диапазоне значений напряжения питания. В большинстве математических моделей полупроводниковых компонентов, которые входят в состав пакетов схемотехнического моделирования, эти эффекты описываются формально [6.27–6.29].

С позиций схемотехнического моделирования адаптация математической модели полупроводникового устройства для учета эффектов саморазогрева сводится к нахождению отклонения между изотепловым режимом и режимом саморазогрева с последующим определением параметров саморазогрева в зависимости от найденного теплового отклонения рабочих токов.

Для субмикронных гетеробиполярных транзисторов нелинейные отклонения исходных токов, обусловленные саморазогревом, и изменения тока коллектора можно учесть введением дополнительных составляющих уравнения токов базовой или коллекторной области. Однако подобная компенсация не является в полной мере адекватной [6.30].

Более адекватный учет влияния эффекта саморазогрева на электрические параметры субмикронных гетероструктурных транзисторов может быть связан с определением зависи-

мостей параметров устройства от температуры и соответствующим дополнением математических моделей полученными зависимостями [6.31].

Для моделирования рассмотрим гетероструктурный биполярный транзистор, структура которого приведена на рис. 6.14, со следующими электрофизическими параметрами: толщиной базы 0,14 мкм и уровнем легирования бериллием 10^{19} см^{-3} ; толщиной коллектора 0,7 мкм с кремниевым легированием $7,5 \times 10^{15} \text{ см}^{-3}$; омической металлизацией базы – сплава золота с бериллием, эмиттера и коллектора – сплава золота с германием. Верхний слой эмиттера состоит из высоколегированного слоя n^+ -GaAs и нескольких слоев AlGaAs. База представляет собой тонкий сильно легированный акцепторами слой.

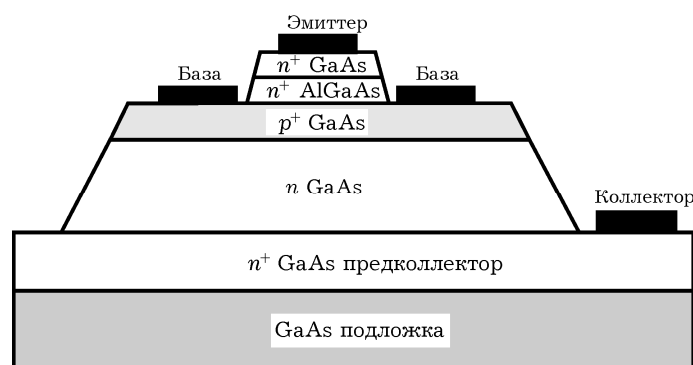


Рис. 6.14. Топологическая структура гетеробиполярного транзистора.

Предлагаемый подход заключается в схемном моделировании и выборе значений балластных сопротивлений в коллекторной и базовой областях транзисторной структуры, которая, в свою очередь, приводит к определению типа обратной связи, а также типа нелинейного зависимого источника. Именно этот источник отображает влияние эффекта саморазогрева.

Введенная в модель обратная связь (ОС) может быть как «положительной» (ПОС), так и «отрицательной» (ООС). ПОС осуществляется в том случае, если в схеме как зависимый источник используется источник напряжения, управляемый напряжением (ИНУН), как показано на рис. 6.15. В этом слу-

чае с увеличением напряжения коллектор-эмиттер $V_{кэ}$ происходит увеличение тока коллектора, ООС осуществляется при использовании зависимого источника тока, управляемого напряжением (ИТУН), и тогда с увеличением напряжения $V_{кэ}$ происходит уменьшение тока коллектора.

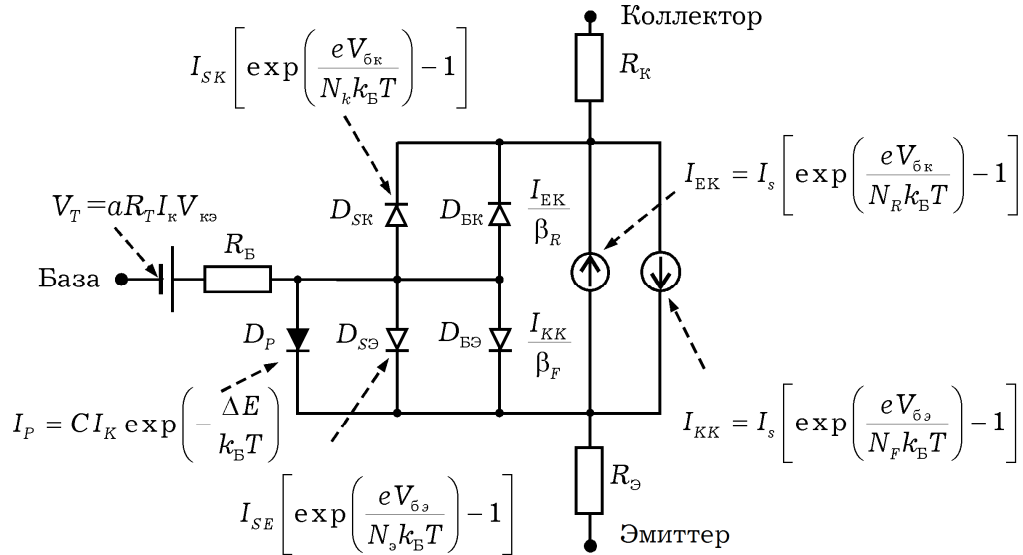


Рис. 6.15. Схемная модель гетероструктурного биполярного транзистора

Сопротивления $R_{к}$, $R_{б}$, $R_{э}$ описывают сопротивления металлизации. Две пары диодов $D_{бэ}$, $D_{сэ}$, $D_{бк}$, $D_{ск}$ описывают нелинейные эффекты в ГСБТ. Первая пара диодов $D_{бэ}$ и $D_{сэ}$ моделирует изменение насыщения тока при изменении тока коллектора, диод $D_{бэ}$ – связан с моделированием инжекции электронов к эмиттеру, а диод $D_{сэ}$ – процессов рекомбинации в базе, образование области накопления пространственного заряда и поверхностную рекомбинацию. Вторая пара диодов $D_{бк}$, $D_{ск}$ моделирует зависимость обратного тока от напряжения смещения, диод $D_{бк}$ – моделирует инжекцию электронов из коллектора в базу или дырок из базы в коллектор, диод $D_{ск}$ – рекомбинацию в базе, образование области пространственного заряда и поверхностную рекомбинацию при инверсном режиме работы. Диод D_p – моделирует дырочную составляющую тока коллектора, а зависимый источник (ИНУН) V_{th} – положительную обратную связь, температурная зависи-

мость которой описывается уравнением: $V_{th} = \alpha R_{th} I_k V_k$, где α – коэффициент электротепловой обратной связи [В/К]; R_{th} – тепловое сопротивление [К/Вт]; I_k – ток коллектора [А]; V_k – напряжение на коллекторе [В].

Ток базы в этой модели описывается двумя парами параллельных диодов, соответственно, для перехода база-эмиттер и перехода база-коллектор. Использование двух параллельных диодов для моделирования каждого перехода позволяет рассчитать зависимость усиления тока от напряжения смещения. Первый диод каждого перехода отвечает току рекомбинации в области пространственного заряда при малых напряжениях смещения. Эта составляющая тока связана с прямосмещенным барьером с коэффициентом неидеальности n , близким к 2. Второй диод описывает составляющую тока перехода между эмиттером и коллектором.

Ток коллектора связан с коэффициентом неидеальности n в прямосмещенном переходе. Так как ток коллектора транзистора является результатом инжекции электронов в базу при диффузии, то коэффициент неидеальности близок к 1.

Наиболее полно учет эффекта саморазогрева достигается при комбинированном использовании ПОС и ООС [6.31 6.32], что позволяет предложить адаптированный подход учета эффекта саморазогрева гетеробиполярной транзисторной структуры.

Так как источник тока, управляемый напряжением, может быть эквивалентно замещен источником напряжения, управляемым напряжением, то можно сделать предположение, что если бы при изменении сопротивления нагрузки ОС непрерывно изменялась от отрицательной к положительной, то при некотором оптимальном значении сопротивления нагрузки $R_{опт}$ глубина ОС сводится к нулю, это означает, что эффект саморазогрева учтен.

С точки зрения электрической цепи ОС, электротепловая ОС внутри ГСБТ может быть количественно описана с помощью коэффициента передачи обратной связи:

$$f = \frac{\partial I_{\kappa}}{\partial T} \cdot \frac{\partial T}{\partial P} \cdot \frac{\partial P}{\partial I_{\kappa}} = \frac{\partial I_{\kappa}}{\partial T} R_{th} V_{\kappa}, \quad (6.11)$$

где P – рассеиваемая мощность [Вт]; T [К] – температура устройства, R_{th} – сопротивление теплового резистора.

Коэффициент ОС принимает положительные и отрицательные значения, которые отвечают положительной и отрицательной обратной связи. Тепловая нестабильность наступает при $f > 1$, а эффект саморазогрева может быть учтен при сведении f к нулю. Но поскольку и R_{th} , и V_{κ} положительные, то из (6.11) видно, что знак коэффициента ОС определяется соотношением $(\partial I_{\kappa}/\partial T)$.

Если в качестве управляемого источника используется ИНУН, расположенный в базовой области, то ток коллектора может быть записан:

$$I_{\kappa} = I_s \exp \left\{ \frac{e}{kT_0} [V_{\text{бэ}} - I_{\text{б}} V_{\text{б}} + \alpha (T - T_0)] \right\}, \quad (6.12)$$

где I_s – ток насыщения [А]; $I_{\text{б}}$ и $V_{\text{бэ}}$ – ток базы и напряжение база-эмиттер, соответственно; T_0 – внешняя температура [К].

Принимая во внимание значение дырочной составляющей тока:

$$I_p = CI_{\kappa} \exp \left(-\frac{\Delta E}{kT} \right), \quad (6.13)$$

ток базы можно выразить через ток коллектора следующим образом:

$$I_{\text{б}} = I_{\kappa} / \beta + I_p = I_{\kappa} \left[1/\beta + C \exp \left(-\frac{\Delta E}{kT} \right) \right]. \quad (6.14)$$

где ΔE – эффективная разность в высоте потенциального барьера для дырок и для электронов [эВ]; C – отношение тока электронов к току дырок для $\Delta E = 0$; β – коэффициент усиления тока.

Подставляя (6.14) в (6.12) получаем:

$$V_{\text{бэ}} = \frac{kT_0}{e} \ln \frac{I_{\text{к}}}{I_{\text{с}}} + I_{\text{к}} R_{\text{б}} \left[\frac{1}{\beta} + C \exp\left(-\frac{\Delta E}{kT}\right) \right] - \alpha(T - T_0), \quad (6.15)$$

дифференцируя (6.15) относительно T и решая относительно $\partial I_{\text{к}}/\partial T$ получаем:

$$\frac{\partial I_{\text{к}}}{\partial T} = \frac{\alpha - \frac{\Delta E}{kT^2} R_{\text{б}} I_{\text{п}}}{\frac{kT_0}{e} + I_{\text{б}} R_{\text{б}}} I_{\text{к}}. \quad (6.16)$$

Коэффициент передачи цепи ОС приобретает вид:

$$f = \frac{\alpha - \frac{\Delta E}{kT^2} R_{\text{б}} I_{\text{п}}}{\frac{kT_0}{e} + I_{\text{б}} R_{\text{б}}} R_{\text{th}} I_{\text{к}} V_{\text{к}}, \quad (6.17)$$

где первая и вторая части числителя описывают положительную и отрицательную ОС в ГСБТ, соответственно.

Приравнявая (6.17) к нулю ($f = 0$) с учетом (6.11) и (6.13), получаем:

$$R_{\text{Т}} = \frac{\alpha T}{C I_{\text{к}} (\Delta E/kT)} \exp\left(\frac{\Delta E}{kT}\right) = \frac{\alpha T}{(\Delta E/kT) I_{\text{п}}}.$$

Если выполняется неравенство $R_{\text{б}} < R_{\text{Т}}$, то мы имеем дело с ПОС, если $R_{\text{б}} > R_{\text{Т}}$ – ООС, если $R_{\text{б}} = R_{\text{Т}}$ – ОС отсутствует.

Коэффициент передачи ОС при наличии дополнительных сопротивлений в области базы и в области эмиттера будет иметь следующий вид:

$$f = \frac{\alpha - \frac{\Delta E}{kT^2} (R_{\text{б}} + R_{\text{э}}) I_{\text{п}}}{\frac{kT_0}{e} + I_{\text{б}} R_{\text{б}} + I_{\text{э}} R_{\text{э}}} R_{\text{th}} I_{\text{к}} V_{\text{к}}.$$

При расчетах использовались следующие значения констант: $\alpha = 1,2$ мВ/К; $\Delta E = 0,28$ эВ; $k = 1,38 \cdot 10^{-23}$ Дж/К; $T_0 = 300$ К; $R_{\text{th}} = 1300$ К/Вт; $I_{\text{к}} = 40$ мА; $V_{\text{к}} = 3$ В; $C = 5$; $\beta = 100$.

На рис. 6.16 приведена схема однокаскадного усилителя СВЧ, которая включает индуктивности L_6 (10 нГн), L_k (10 нГн), L_9 (1.49 нГн), которые обеспечивают согласование входных и выходных цепей усилителя; L_1 (1.97 нГн) и L_2 (1 нГн) – фильтрующие индуктивности в цепях питания; разделительные емкости C_1 (1 пф) и C_2 (1 пФ) на входе и на выходе усилителя. Активным элементом каскада является ГСБТ, схема замещения которого приведена выше.

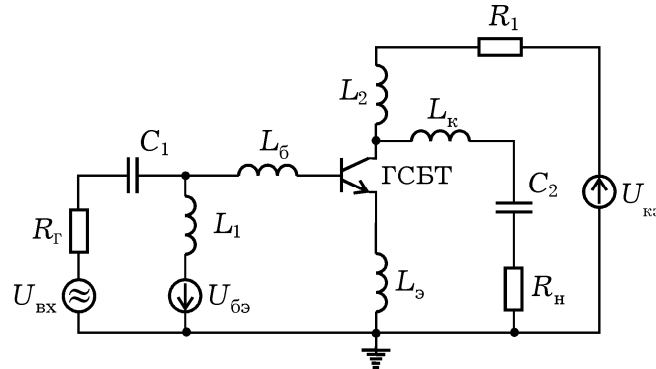


Рис. 6.16. Схема однокаскадного усилителя на гетеробиполярном транзисторе

По результатам моделирования частотных характеристик, приведенных на рис. 6.17,а и 6.17,б, можно сделать вывод, что увеличение толщины базы (то есть увеличение сопротивления базы R_6) приводит к смещению частоты усиления с соответствующим изменением коэффициента усиления по напряжению, а увеличение сопротивления R_9 приводит к увеличению коэффициента усиления по напряжению.

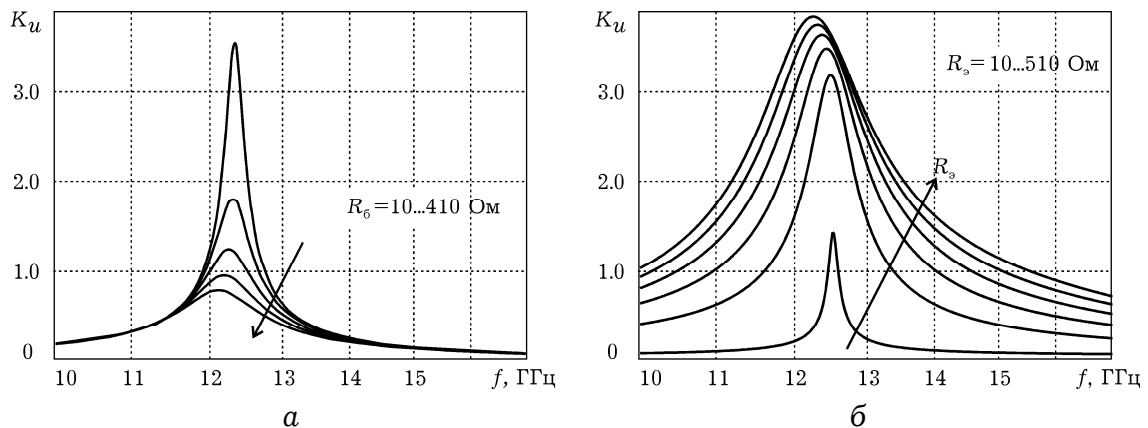


Рис. 6.17. Зависимости коэффициента усиления напряжения от частоты при различных значениях сопротивления базы R_6 и эмиттера R_9 .

Совместное использование приведенной методики и результатов двумерного физико-топологического моделирования позволяет получить уточненные оценки величин сопротивлений базы, эмиттера и коллектора при различных температурах и степени влияния эффекта саморазогрева.

Рассмотренная методика моделирования процессов саморазогрева в субмикронных гетеробиполярных структурах праведлива для широкого спектра полевых структур.

Полученные результаты свидетельствуют об особенностях распределения тепловых полей в подзатворной области транзисторной структуры, связанных с наличием приповерхностного слоя с повышенной температурой, что увеличивает эффект саморазогрева в транзисторе как за счет дополнительного разогрева электронов в канале, так и за счет их разогрева в истоковой и стоковой областях за пределами активной области. При этом повышается температура носителей, инжектированных из истока в активную область, что повышает вероятность их междолинного рассеяния. В области стока это приводит к задержке процессов релаксации энергии.

Ухудшение параметров транзисторной структуры при дополнительном разогреве (уменьшение дрейфовой скорости и подвижности, рост шума) обусловлено как увеличением паразитных сопротивлений, так и разогревом электронного газа в канале, что приводит к уменьшению подвижности электронов.

Из приведенных расчетов и результатов моделирования, видно, что для адекватного моделирования и учета эффекта саморазогрева важным является не только описание зависящего источника, который влияет на нелинейные процессы в транзисторе, но и выбор значения балластного сопротивления, которое учитывает в схемной модели ГСБТ влияние указанных эффектов.

В режимах работы транзистора, когда эффекты саморазогрева более заметны, коэффициент усиления уменьшается во всем диапазоне рабочих частот. Следует ожидать также увеличения коэффициента шума ГСБТ как вследствие влияния эффекта саморазогрева на физические процессы в обла-

сти переходов, так и появлением дополнительных балластных элементов схемной модели пассивных областей базы и эмиттера.

6.3.4. Электротепловой анализ монолитных интегральных схем на субмикронных гетеротранзисторах

Предложенный выше подход может быть распространен для оценки теплового состояния монолитных интегральных микросхем (МИС), включая результаты исследований распределения теплового потока для полевого транзистора с затвором Шоттки и полевого транзистора с гетероселективным легированием [6.10, 6.12, 6.33, 6.34].

Основываясь на результатах электротеплового анализа отдельной структуры транзистора, можно рассчитать тепловые режимы МИС и распределение тепла в кристалле МИС. Для этого необходимо учитывать характеристики отдельных транзисторных структур с учетом топологии интегральной схемы. Разбиение МИС на элементарные блоки, расчет распределения тепла по методике, приведенной в работах [6.33, 6.34], и «сшивание» результатов, позволяют получить полную картину распределения тепла в кристалле МИС, что в дальнейшем может быть использовано для выбора методик теплоотведения.

Как правило, КВЧ МИС включают диоды, транзисторы, резисторы, конденсаторы и другие компоненты, которые могут быть как источниками тепла, так и рассеивающими элементами. Это осложняет процесс построения тепловой модели и определения распределения температуры в МИС. Процедура расчета распределения тепла в МИС состоит из двух этапов.

На первом этапе определяется тепловое сопротивление активных элементов МИС, исходя из данных о геометрических размерах и теплофизических параметрах элементов, по соотношению [6.25] $R_T = R_T^{\Gamma} (h_2 - h_1)(h - h_2)/h^2$, К/Вт, где h , h_1 , h_2 – высоты кристалла и изломов боковой поверхности теплового эквивалента, соответственно, мкм; $R_T^{\Gamma} = h / (S\lambda)$ – геомет-

рический эквивалент теплового сопротивления, $\text{K}/\text{Вт}$; S – площадь вертикального сечения, м^2 ; λ – коэффициент теплопроводности материала, $\text{Вт}/(\text{м}\cdot\text{K})$. Затем, используя принцип электротепловой аналогии, определяется значение температуры каждого элемента: $T_p = T_0 + \Delta t = T_0 - P \cdot R_T$, K , где T_0 – температура теплоотвода, K ; P – рассеиваемая мощность, Вт .

На втором этапе производится физико-топологическое моделирование МИС. Решается уравнение теплопроводности: $-\nabla(\lambda\nabla T) = P + h(T_{ext} - T)$ со смешанными граничными условиями Дирихле $hT = r$ и Неймана $\vec{n}(c\nabla T) + qT = g$, где h – коэффициент конвективного теплообмена с внешней средой, $\text{Вт}/(\text{м}^2\cdot\text{K})$; r , c , q , g – функции, определенные на замкнутой области; \vec{n} – нормаль к границе раздела двух сред.

В качестве моделируемой структуры был выбран широкополосный усилительный каскад на основе AlGaIn/GaN полевых транзисторов с гетероселективным легированием на кремниевой подложке [6.36].

Топология исследуемой структуры приведена на рис. 6.18, а результаты моделирования — на рис. 6.19.

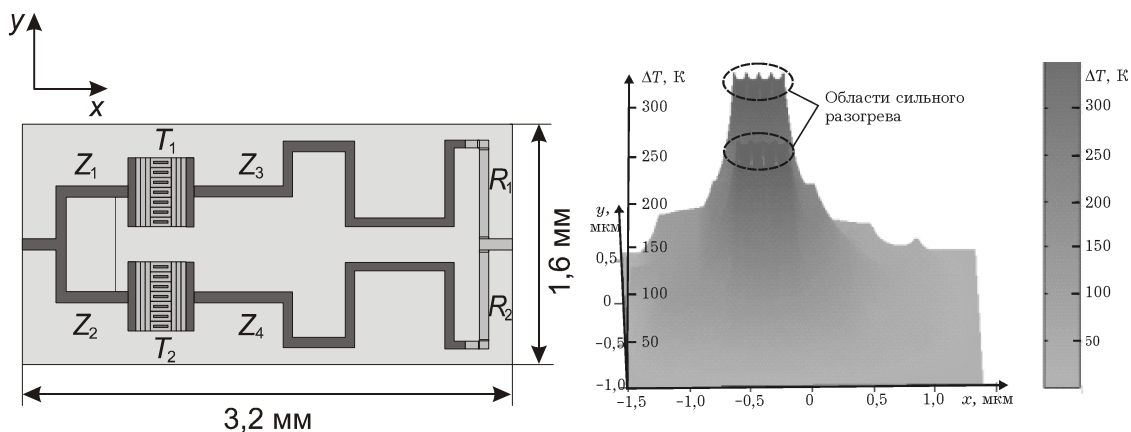


Рис. 6.18. Топология широкополосного усилителя: T_1 , T_2 – транзисторные структуры; Z_1 , Z_2 , Z_3 , Z_4 – линии передачи; R_1 , R_2 – омические контакты.

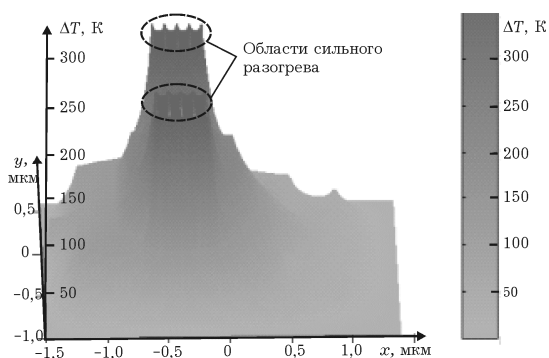


Рис. 6.19. Распределение температурных полей в МИС

Полученные распределения температур с экстремумом в области размещения транзисторных структур свидетельству-

ют о необходимости учета при проектировании и выборе топологии высоких градиентов температур. Совместное использование физико-топологических и тепловых моделей позволяет оптимизировать топологическую структуру МИС с точки зрения рассеиваемой мощности и эффективного теплоотвода.

6.3.5. Шумовые свойства субмикронных гетеробиполярных транзисторов

Уступая по минимальному уровню собственных шумов субмикронным транзисторам с барьером Шоттки и гетероструктурным транзисторам, ГСБТ, имеющие граничные частоты усиления более 200 ГГц, незаменимы при передаче высокочастотных импульсных сигналов, например, в оптоволоконных и беспроводных каналах связи миллиметрового диапазона, требующих сверхширокой рабочей полосы пропускания. При этом актуальной становится задача моделирования шумовых характеристик таких транзисторов [6.3, 6.35].

При моделировании малозумящих устройств, как правило, ищется оптимальное соотношение сигнал/шум. В субмикронных структурах в активной области транзистора преобладают сильные поля, что приводит к эффекту «саморазогрева» структуры. Саморазогрев является дополнительной причиной усиления нелинейных эффектов, что связано в большей степени с дрейфом и диффузией горячих электронов и дырок, а также нарастанием процессов генерации-рекомбинации.

Особенностью ГСБТ является появление участка с отрицательной дифференциальной проводимостью на пологом участке вольтамперной характеристики. В работе [6.37] обсуждается возможность «компенсации» эффекта саморазогрева путем введения некоторых балластных резисторов (порядка нескольких сотен Ом) в области базы и коллектора. Однако, это, как ожидается, может приводить к уменьшению крутизны и коэффициента усиления. Кроме того, можно ожидать увеличения шума омических областей.

Для полноценного анализа и оптимизации шумовых и усилительных характеристик транзистора необходимо использовать методику расчета, как внутренних локальных источников шума, так и суммарных источников на входе и на выходе транзистора, представленного четырехполюсником. Использование волновой шумовой матрицы \mathfrak{t} , элементы которой представляют собой суммарные спектральные плотности мощности шума на входе и на выходе с учетом их корреляционной связи, позволяет при известной матрице рассеяния рассчитать минимальный коэффициент шума и так называемый сопутствующий коэффициент усиления по мощности.

Шумовая схемная ГСБТ модель может быть в общем случае представлена в виде шумовых источников внутренней части транзистора и шумовых источников контактов, которые традиционно описываются соотношением Найквиста:

$$\overline{|U_n|}^2 = 4kT_0\Delta fR.$$

Спектральные плотности рассчитываются в предположении переноса электронов базы за счет процессов диффузии и не связаны с инжекцией через гетеропереход. Это предположение действительно, пока механизмы баллистического переноса электронов не преобладают, что, как правило, выполняется для толщин базы более 50 нм. В случае, когда инжекция через гетеропереход преобладает, то спектральные плотности мощности шума существенно другие.

К особенностям описания шумовых источников ГСБТ следует отнести наличие разнородных физических процессов в двух переходах – гетеропереходе и p - n переходе, а также процессов в области базы, которая в субмикронных транзисторах может составлять несколько десятков нанометров, и, как правило, не превышает 200 нм.

Дробовой шум базы в биполярном транзисторе описывается соотношением [6.36], справедливым на низких частотах для гетеробиполярных транзисторов: $\overline{|i_{шб}|}^2 = 2eI_6C_{66}\Delta f$. Подобное соотношение справедливо для коллектора: $\overline{|i_{шк}|}^2 = 2eI_kC_{kk}\Delta f$. Коэффициенты C_{66} и C_{kk} на низких частотах

близки к единице. На высоких частотах шум за счет протекания тока коллектора практически незаметен, в то время как дробовой шумовой ток базы становится заметным в диапазоне частот 1-40 ГГц и существенно возрастает на частотах выше 40 ГГц. Это может быть связано с тем, что на низких частотах электроны инжектируются из эмиттера в базу, где они собираются коллектором и рекомбинируют. На высоких частотах часть флуктуирующих электронов возвращается на эмиттер до того, как они рекомбинируют или попадут на коллектор. Эти возвращающиеся электроны приводят к повышению тока базы, но мало изменяют шумовой ток коллектора. Как будет показано, частотная зависимость базового шумового тока связана также с корреляцией между базовым и коллекторным шумовыми источниками.

Следует отметить, что в самом общем случае необходимо учитывать также фликкер-шум ($1/f$): $\overline{i_{шбf}}^2 = \kappa_F R_{\text{сб}} I_0^2 / f$ и взрывной шум (шум, имеющий спектр Лоренца): $\overline{i_{шоб}}^2 = \kappa_B R_{\text{сб}}^2 I_0^2 \tau / [1 + (\omega\tau)^2]$. Здесь κ_F – лоренцовый коэффициент, пропорциональный скорости рекомбинации в приконтактном слое базы и зависящий от времени жизни τ свободных носителей на ловушках (центрах захвата): $\tau = (\tau_0/T^2)\exp(E_a/kT)$, где τ_0 – константа, E_a – энергия активации ловушечных состояний. При этом время жизни τ и лоренцевый спектр являются сильно зависимыми от температуры кристаллической решетки.

Принято считать, что фликкер-шум доминирует на низких частотах, взрывной шум – на средних, а дробовой на высоких. При анализе шума на СВЧ фликкер-шумом можно пренебречь. В настоящее время не существует единого физического механизма взрывного шума при прямых и обратных смещениях p - n перехода. Однако, некоторые экспериментальные данные свидетельствуют о случайных процессах в приповерхностном слое канала. При этом энергия активации при обратных смещениях перехода оценивается как близкая к 0,8 эВ. Учитывая современную конструкцию ГСБТ, когда сво-

бодная граница между контактами сведена к минимуму, а также типичную длительность импульса взрывного шума, которая составляет более 100 нс, можно предположить, что данная составляющая шума в СВЧ диапазоне практически не проявляется. Однако, захват носителей на ловушки и изменение вследствие этого энергетических зон в приповерхностном слое может приводить к дополнительному разогреву носителей в области канала из-за его сужения и может изменять сопротивление межконтактных областей и приводить к увеличению теплового шума пассивных областей транзистора.

Одной из наиболее существенных составляющих шума в ГСБТ является дробовой шум, соотношения для которого в области базы и коллектора с учетом приведенных выше рассуждений запишутся, соответственно, для базы [6.39]:

$$\overline{i_{шб}}^2 = 2eI_э \Delta f \left| \frac{C_э}{C_э0} \right|^2 - 2eI_к \Delta f \left| \frac{C_к}{C_к0} \frac{n_э}{n_к} \right| - 2eI_э \Delta f \left| \frac{C_э}{C_э0} - 1 \right|^2 + 2eI_к \Delta f \left| \frac{C_к}{C_к0} \frac{n_э}{n_к} e^{-j\omega\tau_к} - 1 \right|^2$$

где $\tau_к = x_к / (2v_н)$ – время запаздывания фазы тока коллектора, $x_к$ – толщина коллектора, $v_н$ – скорость насыщения носителей, и для коллектора: $\overline{i_{шк}}^2 = 2eI_к \Delta f$, а $n_э = \beta n_к + n_б / (1 + \beta)$, где β – коэффициент передачи тока. Коэффициенты $C_э$ и $C_к$ определяются по формулам: $C_э = \gamma x_б / \text{th}(\gamma x_б)$ и $C_к = \gamma x_б / \text{sh}(\gamma x_б)$, при этом на постоянном токе ($\omega = 0$) эти коэффициенты принимают значения соответственно $C_э0$ и $C_к0$. Постоянная распространения в базе определится как:

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{D_n \tau_n}} \sqrt{1 + j\omega\tau_n},$$

где D_n – коэффициент диффузии, τ_n – время жизни электронов в базе. Следует заметить, что «диффузионный» механизм описания шума в базе справедлив, когда длина свободного пробега носителей в базе меньше толщины базы. При умень-

шении толщины базы и возможном баллистическом движении горячих носителей изменяются механизмы протекания тока и усиливается высокочастотная составляющая шума. Шумовые токи базы и коллектора имеют корреляционную связь, которая описывается соотношением:

$$\overline{i_{шб}^* i_{шк}} = 2eI_k \left(\frac{C_k n_{\text{э}}}{C_{k0} n_k} e^{-j\omega\tau_k} - 1 \right).$$

В случае сильного разогрева носителей необходимо учитывать зависимость подвижности электронов и дырок от напряженности электрического поля, которые определяются в приближении времени релаксации носителей.

В рассматриваемой шумовой модели возможно использование некоторых усредненных значений коэффициента диффузии, определенных для средних значений электрического поля в зависимости от положения рабочей точки на вольтамперных характеристиках.

Получение минимального коэффициента шума ГСБТ связано с обеспечением ряда необходимых факторов. К таким факторам следует отнести оптимальный выбор конструкции и топологии транзистора, его электрического режима, а также обеспечение оптимального режима согласования.

Анализируемая шумовая модель ГСБТ представлена на рис. 6.20. Переход база-эмиттер моделируется RC -цепочкой $R_{дэ}$ и $C_{дэ}$, которая описывает параметры модельного диода база-эмиттер, а также соответствующими шумовыми источниками. При этом емкость представляет собой сумму диффузионной емкости и емкости прямо смещенного перехода. Напряжение база-эмиттер является управляющим для тока коллектора, который моделируется источником тока, управляемым напряжением (ИТУН) с управляющим параметром $g_m = g_{m0} \exp(j\omega\tau_k)$. Параметры второго диода заданы RC -цепочкой $R_{дк}$ и $C_{дк}$. Активная область транзистора моделируется также выходным сопротивлением R_0 и шумовым источником $i_{шк}$.

В работе [6.31] приводится анализ шумовых характеристик типичных структур $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ГСБТ для различных конструкций эмиттера, включающих от 1 до 5 секций. Показано, что при увеличении уровня тока базы минимальный коэффициент шума возрастает во всем диапазоне частот. При этом частотная зависимость коэффициента шума тем существеннее, чем больше ток базы.

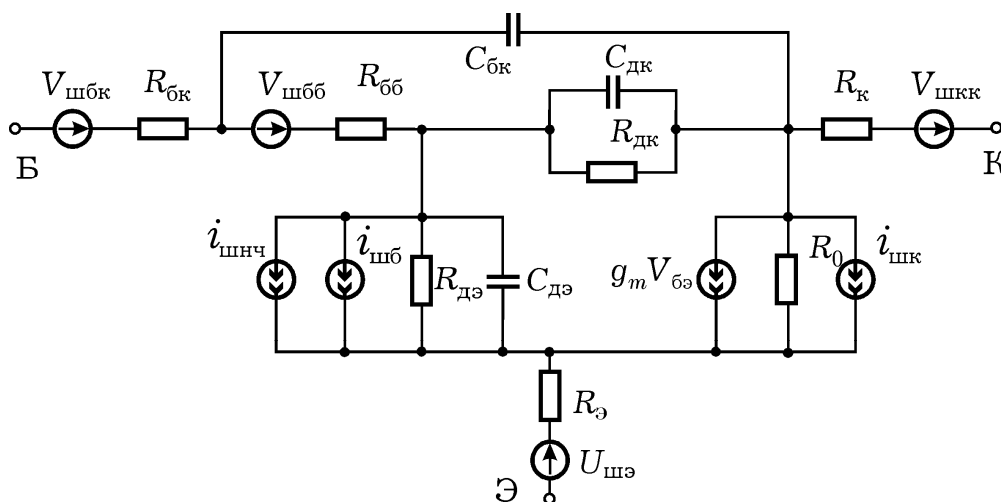


Рис. 6.20. Шумовая схемная модель гетеробиполярного транзистора

Упрощенная шумовая модель транзистора приведена в работе [6.29]. Рассчитан минимальный коэффициент шума для диапазона частот 1–20 ГГц, изменяющийся в пределах от 2 до 3 дБ для транзистора с размерами эмиттера $2 \times 20 \text{ мкм}^2$, коэффициентом передачи тока $\beta = 50$, временем запаздывания 3,5 пс и значением сопротивлений контактов, изменяющихся в пределах от 2 до 14 Ом при токе коллектора 15 мА. По схемной модели рис. 6.20, описывающей подобную структуру и дополненной внешними согласующими индуктивными компонентами для получения минимального значения коэффициента шума, в соответствии с рассмотренным ниже алгоритмом рассчитаны частотные усилительные и шумовые характеристики.

Методика расчета минимального коэффициента шума линейной цепи связана с пересчетом локальных шумовых источников ко входу и выходу четырехполюсника и использова-

нии волновых шумовых параметров для расчета минимального коэффициента шума, рассмотренная ранее.

Одним из путей уточнения модели является более строгий учет эффектов саморазогрева и баллистических эффектов при малых значениях толщины базы (менее 100 нм).

6.4. МОЩНЫЕ МОП-ТРАНЗИСТОРЫ

В последние годы в области мощных кремниевых СВЧ-транзисторов лидируют МОП-транзисторы, изготовленные по так называемой *LDMOS* (*Laterally Diffused Metal Oxide Semiconductors*) технологии на основе кремния. Достоинства кремниевых приборов, прежде всего в низкой стоимости пластин, отработанности технологии и относительной простоте интеграции аналоговых и цифровых схем на одном кристалле [6.40]. Причем благодаря минимизации размеров частотные характеристики кремниевых транзисторов повысились настолько, что, несмотря на более низкую подвижность электронов, успешно конкурируют с гетеробиполярными в диапазонах до 3 ГГц. Еще в 2000 году [6.41] компания *Motorola* представила *LDMOS*-транзистор с длиной затвора 0,6 мкм, толщиной подзатворного окисла 40 нм и пробивным напряжением исток-подложка 65 В. При суммарной ширине затвора 480 мкм транзистор работал в двухтактном режиме с выходной мощностью 220 Вт при рабочем напряжении 28 В с КПД 46 % на частоте 2,12 ГГц.

Принципиальное отличие *LDMOS*-технологии от традиционной МОП-технологии – несимметричная структура транзистора. На p^+ -подложке (рис. 6.21) выращивается относительно слабо легированный эпитаксиальный p -слой, назначение которого – уменьшить выходную емкость сток-исток и увеличить пробивное напряжение. Со стороны истока формируется сильнолегированная p^+ -область, которая соединяет исток с подложкой. Под высоколегированной n^+ -областью истока формируют дополнительную тонкую p -область, под областью стока – n -область. Первая определяет пороговое напряжение и параметры отсечки канала, вторая позволяет увеличить

напряжение пробоя и предотвращает инжекцию горячих электронов в подзатворный окисел. Характерной особенностью *LDMOS*-транзисторов является слой металлизации, соединенный с истоком и нависающий над затвором. Этот слой является экраном, уменьшающим паразитную проходную емкость C_{gd} отрицательной обратной связи. Кроме того, экран существенно изменяет распределение поля между стоком и затвором, ослабляя напряженность поля у стокового края затвора и соответственно увеличивая пробивное напряжение стока.

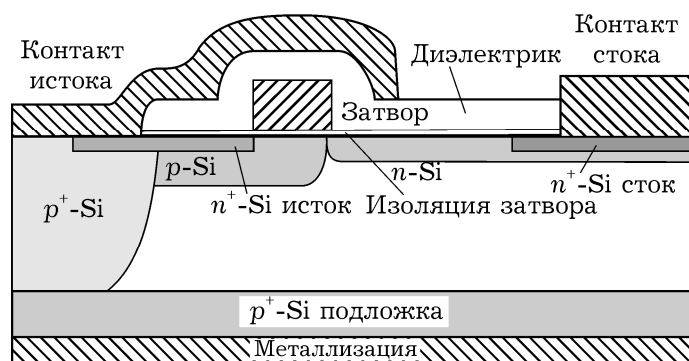


Рис. 6.21. Структура *LDMOS*-транзистора

Особенностью такой конструкции транзистора является то, что при отсутствии смещения на затворе поверхностный слой, представляющий собой планарную n^+pn^+ -структуру, не является проводящим, и транзистор закрыт. Для открывания на затвор необходимо подать некоторое положительное напряжение в несколько вольт. При этом у поверхности p -области под затвором образуется инверсионный слой, представляющий собой проводящий канал с преобладающей электронной проводимостью.

На рис. 6.22 в качестве примера представлены стоковые характеристики транзистора фирмы *Philips Semiconductor* VLA1011-10 [6.42].

В общем, эти характеристики имеют типичный для МОП-транзисторов вид. Однако при субмикронных длинах затвора в режиме насыщения наблюдается существенное увеличение тока стока. Это может быть связано с тем, что при увеличении стокового напряжения возрастает потенциал ка-

нала и в его стоковой части увеличивается степень инверсии. В результате увеличивается толщина проводящего канала и его проводимость. Одновременно с этим напряженность тянущего электрического поля может уменьшаться, что ослабляет степень насыщения дрейфовой скорости электронов, характерной для сильного поля.

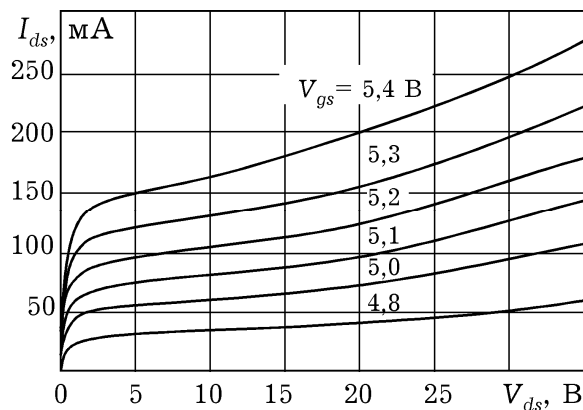


Рис. 6.22. Экспериментальные выходные вольтамперные характеристики МОП (*LDMOS*) транзистора BLA1011-10 [6.42]

Транзистор характеризуется следующими основными параметрами. Предельные значения выходного напряжения сток-исток 75 В, напряжение затвор-исток ± 15 В, максимальный выходной ток 2,2 А. Существенной особенностью данного транзистора является достаточно высокий внутренний встроенный потенциал (около 4 В), а также высокие значения крутизны в рабочем поле выходных вольтамперных характеристик.

Разработкой моделей *LDMOS*-транзисторов занимаются не столько ученые, сколько сами компании-производители, и разработчики САПР. Можно выделить две различных модели мощных *LDMOS*, широко используемых в настоящее время на практике [6.43, 6.44]. Все эти модели являются схемотехническими и могут быть описаны с помощью эквивалентных схем.

Разработчик первой из них компания *STMicroelectronics* (<http://www.st.com>). Схемотехническая модель, описываемая электрической цепью с сосредоточенными параметрами (рис. 6.23, а), имеет типичный для полевых транзисторов вид и включает следующие группы компонентов: паразитные эле-

менты, связанные с устройством; нелинейный генератор тока; сопротивление полевого транзистора с управляющим p - n переходом; диод, моделирующий влияние подложки.

Нелинейный источник тока, управляемый напряжениями (нелинейный ИТУН) – наиболее важный элемент для расчета статических и динамических характеристик устройства. Управляющими являются напряжения V_{gs} и V_{ds} . Кроме того, для вычисления статического тока необходимо также определить рабочий диапазон полевого транзистора.

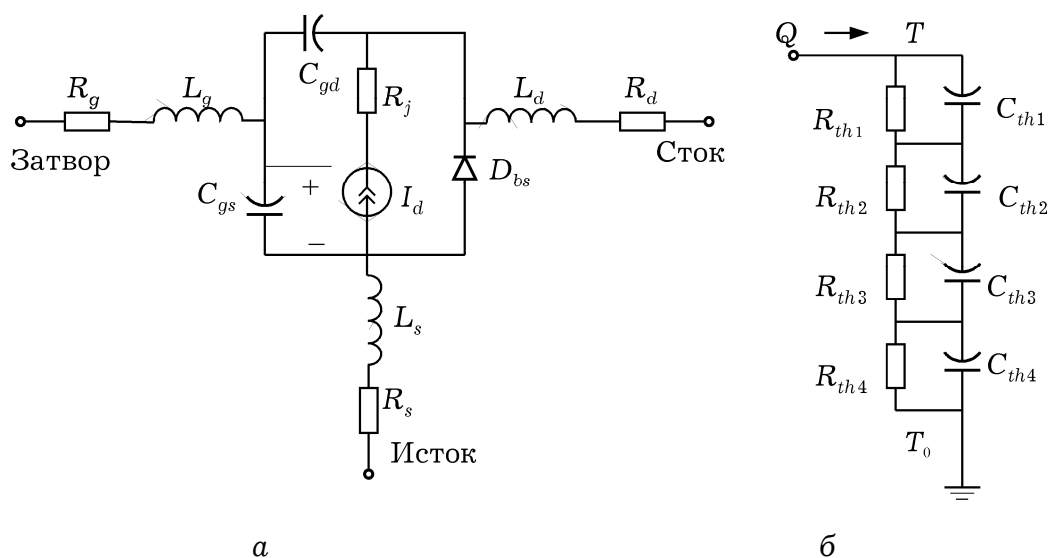


Рис. 6.23. Схемная модель $LDMOS$ -транзистора [6.50].

Для определения уравнений, описывающих нелинейный ИТУН, необходимы 15 параметров, таких, как, например, пороговое напряжение, наведенное стоком снижение барьера, крутизна характеристики прямой передачи, наклон подпорогового тока, длина канала, коэффициент выходной проводимости, коэффициент тепловой проводимости, тепловой коэффициент порогового напряжения, и ряд других, которые идентифицируются из экспериментальных характеристик.

Данная программа позволяет моделировать статические характеристики, описывать транзистор при помощи S -параметров при малом сигнале, рассчитывать параметры схемной модели прибора при большом сигнале. Из особенностей модели – возможность моделирования паразитных эле-

ментов корпуса, а также наличие тепловых элементов в эквивалентной цепи, учитывающих эффекты саморазогрева.

Область квази насыщения моделируется нелинейным сопротивлением R_j , которое может быть найдено из выходных статических характеристик в линейной области изменения тока при высоких напряжениях.

Для моделирования влияния подложки и описания режима пробоя, утечки тока стока и емкости между истоком и стоком в модельную цепь введен диод. Статические и динамические характеристики такого диода описываются обычным образом; моделируется также их зависимость от температуры.

Для учета эффекта саморазогрева вводится тепловой электрод (см. рис. 6.23, б). Напряжение между внешним тепловым электродом и стоком определяет температуру, как описано в [6.45].

Для моделирования паразитного влияния корпуса, производится его электромагнитное моделирование. Диапазон частот, в котором проводилось моделирование, составляет от 1 МГц до 3 ГГц. Результаты моделирования представляются в виде S -параметров. Из рис. 6.24, 6.25 видно, что смоделированные входные и выходные статические характеристики транзистора и динамические характеристики в режиме малого сигнала (S -параметры) находятся в хорошем соответствии с экспериментальными данными.

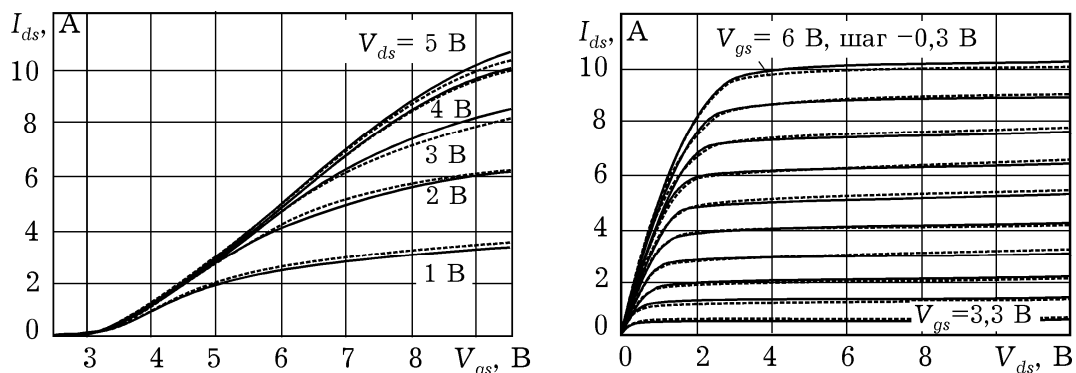


Рис. 6.24. Измеренные (сплошные линии) и смоделированные (штриховые) входные и выходные статические характеристики

Другая модель СМС (*Curtice/Modelics/Cree*) [6.44]. разработана группой компаний: *W.R. Curtice Consulting* (<http://www.curtice.org>), *Modelithics Inc.* (<http://www.modelithics.com>) и *Cree Microwave* (<http://www.cree.com/>) для интеграции в САПР *Agilent EEsof EDA Design & Simulation Software* компании *Agilent Technologies* (<http://www.agilent.com>).

Данная модель имеет следующие возможности: моделирование статических характеристик, динамических параметров в режиме малого сигнала, учет нелинейных эффектов, анализ во временной области. Из особенностей модели – хорошее предсказание интермодуляционных искажений, адекватное моделирование в подпороговом режиме, моделирование динамики процессов саморазогрева, простая процедура извлечения параметров модели. Модель разработана для базовой ячейки, то есть транзистора мощностью 1 Вт и может быть применена к другим *LDMOS* путем специально разработанной процедуры масштабирования.

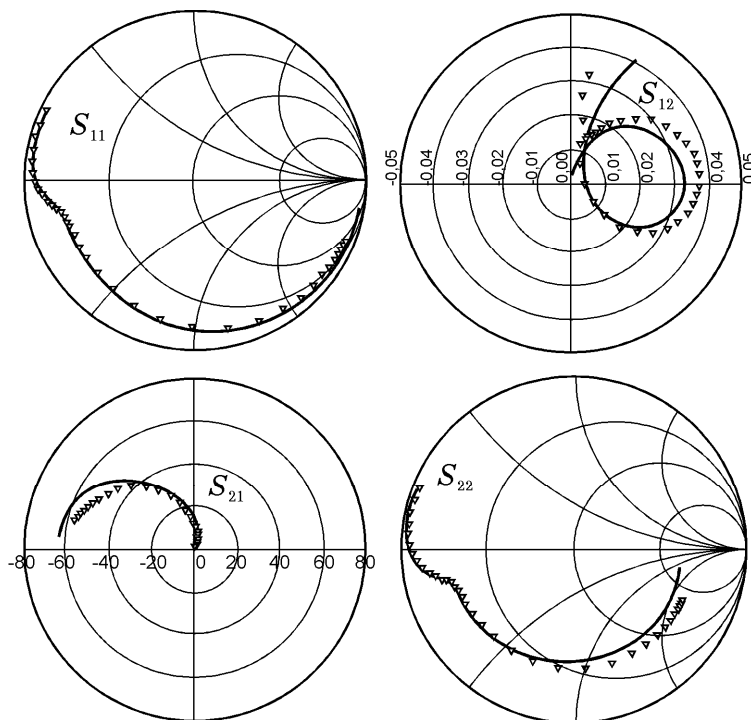


Рис. 6.25. Измеренные и смоделированные S -параметры для частот от 1 МГц до 3 ГГц ($V_{ds} = 7,2$ В, $I_{dq} = 100$ мА)

По сравнению с биполярными транзисторы *LDMOS* обладают лучшими характеристиками по линейности, усилению, тепловым режимам, устойчивости к рассогласованию, имеют

более высокий КПД, запас по рассеиваемой мощности, надежность [6.46]. По этой технологии в настоящее время выпускается большинство мощных высокочастотных транзисторов.

Поскольку размер структуры сток-исток ячейки *LDMOS*-транзистора больше аналогичного размера структуры база-эмиттер, то температура активной области не превышает 200 °С, даже при более высокой, чем у биполярного транзистора, плотности мощности (0,5 Вт/мм). Еще одним преимуществом *LDMOS*-технологии является соединение истока с подложкой. Это обеспечивает, во-первых, низкое значение индуктивности истока, что в сочетании с малой емкостью обратной связи обеспечивает *LDMOS*-транзисторам лучшие усилительные характеристики по сравнению с биполярными аналогами. Во-вторых, такое включение позволяет создать в транзисторе лучшие условия для отвода тепла. В биполярном же транзисторе наибольший объем кремния занимает область коллектора, которая должна быть электрически изолирована от земли (радиатора), что затрудняет отвод тепла.

Еще одна особенность полевых структур вообще и *LDMOS*-транзисторов в частности связана с меньшей нелинейностью характеристик, чем у биполярных приборов (рис. 6.26). Это приводит к тому, что усиление биполярного транзистора сильно изменяется в зависимости от мощности входного сигнала. Очевидно, что использование подобного транзистора скажется отрицательным образом на качестве всего усилителя.

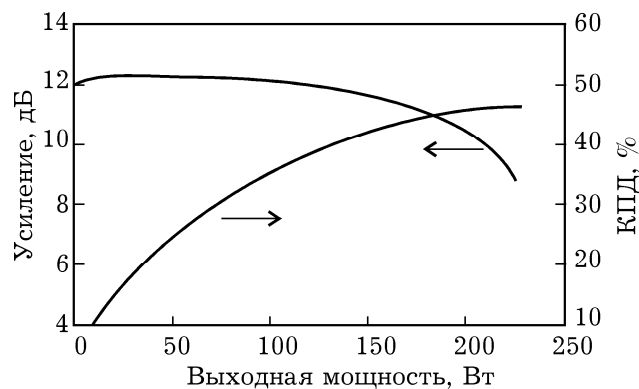


Рис. 6.26. Мощностная зависимость КПД и усиления 220-Вт транзистора компании *Motorola* [6.47]

Сегодня самая масштабная область применения *LDMOS*-приборов – усилители базовых станций сотовой связи. Будучи разновидностью кремниевой технологии, *LDMOS* обладает огромным достоинством – гораздо более низкой по сравнению с остальными материалами себестоимостью. За это рынок «прощает» *LDMOS*-приборам низкую плотность мощности и проблемы с линейностью характеристик.

Передатчики большой мощности используются как в портативных мобильных, так и в стационарных системах сотовой связи. При этом мощность стационарных станций, обеспечивающих соединение «мобильников» с проводными линиями связи, достигает 600 Вт. Сегодня основные приборы, обеспечивающие высокую мощность в диапазоне 900 и 1900 МГц, – кремниевые *LDMOS*-транзисторы, на долю которых приходится 90% рынка мощных СВЧ приборов. Это объясняется самой низкой для транзисторов этого класса плотностью мощности (0,7 Вт/мм), самыми большими размерами кристалла и самой низкой стоимостью.

Перспективная область применения *LDMOS*-транзисторов – системы связи стандарта WiMAX, одного из самых перспективных стандартов связи, для которого необходима высокая линейность и КПД транзисторов.

Успехи в совершенствовании *LDMOS*-технологии не препятствуют дальнейшему развитию GaAs мощных СВЧ-транзисторов. В базовых станциях, где выходная мощность зависит от трафика, усилители мощности на *LDMOS* транзисторах не всегда могут работать с наилучшей эффективностью. Для таких систем более подходят GaAs-транзисторы, имеющие в сравнении с кремниевыми транзисторами более широкий динамический диапазон. Фирма *Freescale Semiconductor*, выпустившая серьезный *LDMOS*-конкурент GaAs *pHEMT* на частоту 3,5 ГГц, тем не менее, разработала арсенидгаллиевые транзисторы на частоту 6 ГГц с выходной мощностью 100 Вт, отвечающие всем требованиям, предъявляемым к WiMAX-системам. Компания *Toshiba America Electronic Components (TAEC)* создала GaAs гетеропереходные полевые транзисторы (*HFET*) диапазона 13,75–14,5 ГГц для усилителей

мощности наземных базовых станций спутниковых систем связи.

Но наиболее перспективными мощными СВЧ-приборами на сегодняшний день можно считать GaN-транзисторы, характеризующиеся, в сравнении с транзисторами на других полупроводниковых материалах, более высокой плотностью тока насыщения, большим напряжением пробоя и большой плотностью мощности в пересчете на единицу ширины затвора (рис. 6.27).

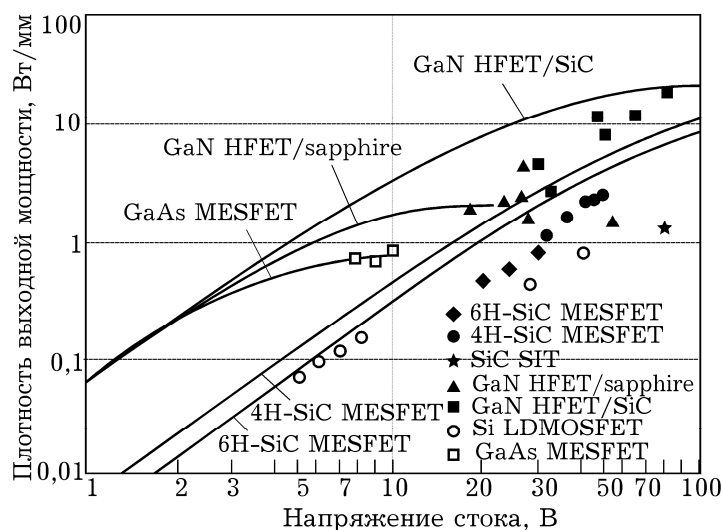


Рис. 6.27. Зависимость выходной мощности на 1 мм ширины затвора от стокового напряжения для различных материалов и структур транзисторов [6.48]

К технологии нитрида галлия обращаются все большее число полупроводниковых компаний. Всего за период с 2000 по 2005 год число компаний и исследовательских центров, занятых разработкой приборов и изучением нитрида галлия, увеличилось с 500 до 2000. Продажи GaN-приборов (не только транзисторов, но и светодиодов) с 3,5–3,6 млрд. долл. в 2006 году возросли до 7,2 млрд. долл. в 2009 году [6.49].

На рынке мощных транзисторов ведущее положение в сравнении с GaAs *pHEMT* и полевыми транзисторами с затвором Шоттки (*MESFET*) занимают GaAs биполярные гетеротранзисторы (*HBT*) и *LDMOS*-транзисторы. Но в дальнейшем их, вероятно, вытеснят SiC и GaN-приборы [6.50].

Литература к разделу 6

6.1. *Shi Chang Zhong, Tangsheng Chen, Chunjiang Ren, Gang Jiao, Chen Chen, Kai Shao, Naibin Yang.* AlGaN/GaN HEMT with over 110 W Output Power. Proceedings of the 3rd European Microwave Integrated Circuits Conference, October 2008, Amsterdam, The Netherlands. P.91-94

6.2. *Eizo Mitani, Makoto Aojima, Arata Maekawa and Seigo Sano,* An 800-W AlGaN/GaN HEMT for S-band High-Power Application, CS MANTECH Conference, May 14-17, 2007, Austin, Texas, USA/ P.213-216.

6.3. *Захаров А.Л., Асвадурова Е.И.* Расчет тепловых параметров полупроводниковых приборов. – М.: Радио и связь, 1983. – 184 с.

6.4. *Могилевский В.М., Чудновский А.Ф.* Теплопроводность полупроводников. М.: Наука, 1972. – 536 с.

6.5. Теплопроводность твердых тел: Справочник / А.С. Охотин, Р.П. Боровикова, Т.В. Нечаева, А.С. Пушкарский; Под ред. А.С. Охотина. М.: Энергоатомиздат, –1984.–320 с.

6.6. *Семеновская Е.В. , Тимофеев В.И.* СВЧ методы измерения температурных полей // Электроника и связь. –2000, – №8. –Т.2. – С. 263–265.

6.7. *Прокопов В.Г., Тариелашвили Г.Т., Шеренковский Ю.В., Юрчук В.Л.* Моделирование мощных полевых транзисторов. Ч.1. Тепловой режим//Сб. докл. междунар. н.-техн. конф. «Проблемы физической и биомедицинской электроники», 18-20 мая 1996 г. Киев.- с. 240-244.

6.8. *Москалюк В.А., Тариелашвили Г.Т., Тимофеев В.И.* Моделирование мощных полевых транзисторов. Ч.2. Электрический режим//Сб. докл. междунар. н.-техн. конф. «Проблемы физической и биомедицинской электроники», 27-30 мая 1996 г. Киев.- с. 366-369.

6.9. *Cai Q., Gerber J., Rohde U., Daniel T.* HBT High-Frequency Modeling and Integrated Parameter Extraction // IEEE Transaction on Electron Devices.–1997.–Vol.45,–№12.– P.2493–2502.

6.10. Семеновская Е.В., Приходько Н.В., Тимофеев В.И. Физико-топологическое моделирование теплового режима мощного субмикронного полевого транзистора СВЧ // Электроника и связь.-2000. – № 9.– С. 140–142.

6.11. Москалюк В.А., Тимофеев В.И. Моделирование процессов переноса электронов в канале и подложке субмикронного полевого транзистора // Электронная техника. Сер.1., Электроника СВЧ.-1990. – Вып.2 (426). – С.22–27.

6.12. Семеновская Е.В., Тимофеев В.И. Моделирование теплового режима в субмикронных транзисторах с гетероселективным легированием // Электроника и связь. –2001.–№13.– С.32–36.

6.13. Семеновская Е.В., Тимофеев В.И. Моделирование тепловых процессов в транзисторах с гетероселективным легированием // Труды междунар. конф. «Физика и технология тонких пленок».-Ивано-Франковск.-2003.-Т.2.-С.127–128.

6.14. Семеновская Е.В., Тимофеев В.И. Схемотехническое моделирование тепловых эффектов и эффекта саморазогрева в субмикронных гетероструктурных транзисторах // Труды 7-го междунард. Форума «Радиоэлектроника и молодежь в XXI веке».- Харьков.-2003.-С.81.

6.15. Семеновская Е.В., Тимофеев В.И., Приходько Н.В. Анализ моделей и тепловых режимов гетеробиполярных субмикронных транзисторов // Электроника и связь.-2001– №10.–С.133–136.

6.16. Mahesh B. Patil New discretization scheme for two-dimensional semiconductor device simulation on triangular grid // IEEE Transactions on computer-aided design of integrated circuits and systems.-1998.-Vol.17, №11.-P.1160–1165.

6.17. Шур М. Современные приборы на основе арсенида галлия: Пер. с англ.- М.: Мир, 1991.-632 с.

6.18. Тимофеев В.И. Шумовые свойства субмикронных гетеробиполярных транзисторов // Электроника и связь.-2002.– №16.–С.112–115.

6.19. Тимофеев В.И. Моделирование процессов токопереноса в субмикронных гетеробиполярных транзисторах // Электроника и связь.- 2004.- №23.- С. 57–60.

6.20. *Bester Y., Scott D., Mensa D. et al.* InAlAs/InGaAs HBTs with Simultaneously High Values of F_t and F_{max} for Mixed Analog/Digital Applications // IEEE Electron Device Letters. – 2001. – Vol. 22, №2. – P.56–58.

6.21. *Liou L.L., Ebel J., Huang C.* Thermal Effects on the Characteristics of AlGaAs/GaAs Heterojunction Bipolar Transistors Using Two-Dimensional Numerical Simulation. // IEEE Transactions on Electron Devices. – 1993. – Vol.40, №1. – P.35–43.

6.22 *Benvenuti A., Coughran W.M., Pinto M.R.* A Thermal-Fully Hydrodynamic Model for Semiconductor Devices and Applications to III-V HBT Simulation // IEEE Transactions on electron devices. – 1997.–Vol.44, №9.–P.1349–1359.

6.23. *Gao G-B, Wang M-Z, Gui X., Morkoc H.* Thermal design studies of high-power heterojunction bipolar transistors // IEEE Transactions on Electron Devices. –1989.–Vol.36, – №5.– P.854–863.

6.24. *Marshak A.H.* Transport equations for highly doped devices and heterostructure // Solid-State Electronics, Vol.30, pp. 1089–1093.–1987.

6.25 *Samelis A., Pavlidis D.* Analysis of the large-signal characteristics of power heterojunction bipolar transistors exhibiting self-heating effects // IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques.–1997.–Vol.45, №. 4.–P.534–541.

6.26. *Тимофеев В.И.* Анализ разогревных эффектов в субмикронных гетеробиполярных транзисторах // Вісник Черкаського державного технологічного університету. Сер. Радіотехніка і приладобудування.–2004.–№4.–С.72–78.

6.27. *Twynam J.K., Yagura M., Kishimoto K., Kinoshita T., Sato H., Shimizu M.* Thermal stabilization of AlGaAs/GaAs power HBT's using $n\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ emitter ballast resistors with high thermal coefficient of resistance // Solid-State Electron. – 1995. – Vol.9, №3. –P.1657–1661.

6.28 *Liu W., Khatibzadeh A., Sweder J., Chau H.* The use of base ballasting to prevent the collapse of current gain in Al-GaAs/GaAs heterojunction bipolar transistors // IEEE Transactions on Electron Devices.–1996.–Vol.43,№2.–P.245–251.

6.29. *Gao G., Unlu M., Blackburn D.* Emitter ballasting resistor design for current handling capability of AlGaAs/GaAs power heterojunction bipolar transistors // IEEE Transactions on Electron Devices. –1991. –Vol.38, №2. –P.185–196.

6.30. *Zhang Q., Hu H., Sitch J., Surridge R., Xu J.* A new large signal HBT model // IEEE Trans. Microwave Theory Tech. –1996.–Vol.44,№5.– P.2001–2009.

6.31. *Zhu Y., Twynam J.K., Yagura M.* Self-heating effect compensation in HBTs and its analysis and simulation // IEEE Transactions on Electron Devices.–2001.–Vol.48, №11. –P. 2640–2645.

6.32. *Andlerstein M.G.* Thermal stability ballasted HBT's // IEEE Transactions on Electron Devices.–1998.–Vol.45, №2–P.1653–1655.

6.33 *Тимофеев В.И., Семеновская Е.В.* Электротепловой анализ монолитных интегральных схем на основе соединений A_3B_5 . „Сучасні інформаційно-комунікаційні технології” /COMINFO`2008/ Лівадія. –2008. –С.111-11

6.34. *Семеновская Е.В., Тимофеев В.И.* Электротепловой анализ субмикронных гетероструктур // Электроника и связь. – 2007. – № 1 – С.57–61.

6.35. *Wei Se-Jun, Hwang J. C. M., Ho Wu-Jing, Higgins J. A.* Large-signal modeling of self-heating, collector, transit-time and RF-breakdown effects in power HBT's. // IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques. –1996.–Vol.44, № 12. –P.2641–2646.

6.36. *Green B.M., Tilak V., Kim H. et.al.* High-power broadband AlGaN/GaN HEMT MMICs on SiC substrates // IEEE Transactions on Microwave Theory sand Techniques. – 2001. – Vol.49, № 12 – P. 2486.

6.37. *Zhu Y., Twynam J.K., Yagura M.* Self-heating effect compensation in HBTs and its analysis and simulation // IEEE Transactions on electron devices. – 2001. –Vol.48, №11. –P. 2640–2645.

6.38. *Huber A., Huber D., Bergamaschi C., Morf T., Jackel H.* Noise model of InP-InGaAs SHBT's for RF circuit design //

IEEE Transactions on microwave theory and techniques.– 2002.–Vol.50,№7. –P.1675–1682.

6.39. *Liou J.J., Jenkins T.J., Liou L.L., Neidhard R., W.Barlage D., Fich R., Barrette J.P., Mack M., Bozada C.A., Lee H.Y., Dettmer R.W., Sewell J.S.* Bias, Frequency and Area Dependencies of High Frequency Noise in AlGaAs/GaAs HBT's // IEEE Transactions on electron devices. – 1996. –Vol.43, №1.– P.116–122.

6.40. *Шахнович И.* Твердотельные СВЧ-приборы и технологии. Состояние и перспективы.–ЭЛЕКТРОНИКА:НТБ, 2005, №5, с.58–64.

6.41. *Wayne R. Berger et al.* RF-LDMOS: A Silicon-Based, High Power, High Efficiency Linear Power Amplifier Technology. – 2000 GaAs MANTECH Conf. Dig. Ppr., 2000.

6.42. <http://www.semiconductors.philips.com>

6.43. *Wood, Pengelly, Dunleavy, Clausen, Weller and Em-madi.* New LDMOS Model Delivers Powerful Transistor Library–Part 2: Library application // High Frequency Electronics. – November, 2004. <http://www.highfrequencyelectronics.com/Archives/Archives2004.shtml>.

6.44. *Curtice, Dunleavy, Clausen and Pengelly.* New LDMOS Model Delivers Powerful Transistor Library–Part 1: The CMC Model // High Frequency Electronics. – October, 2004. <http://www.highfrequencyelectronics.com/Archives/Archives2004.shtml>

6.45. Circuits and System, 2006. MIXDES 2006. Proceedings of the International Conference, June 2006

6.46. Технология мощных СВЧ LDMOS-транзисторов для радарных передатчиков L-диапазона и авиационных применений. Компоненты и технологии, № 10, 2007 с.14-16.

6.47. *Wayne R. Berger et al.* RF-LDMOS: A Silicon-Based, High Power, High Efficiency Linear Power Amplifier Technology. – 2000 GaAs MANTECH Conf. Dig. Ppr., 2000.

6.48. *Okumura H.* Present Status and Future Prospect of Widegap Semiconductor High-Power Devices, Japanese Journal of Applied Physics.Vol. 45, No. 10A, 2006, pp. 7565–7586

6.49. Ресурс: www.eetimes.com/showArticle.jhtml?articleID=190300189.

6.50. *Лебедев А., Сбруев С.* SiC электроника. Прошлое, настоящее, будущее.— Электроника: Наука, Технология, Бизнес. № 5, 2006, с.28.

7. РЕЗОНАНСНО-ТУННЕЛЬНЫЕ ДИОДЫ

7.1. ОСНОВНЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ

7.1.1. Структурные составляющие РТД

Резонансно-туннельный диод (РТД) является одной из самых простых структур с поперечным транспортом. Рассмотрим топологию резонансно-туннельного диода, слои которого изготовлены из $\text{Al}_{0.33}\text{GaAs}_{0.77}/\text{GaAs}$ (рис. 7.1, а).

В плоскости гетерограниц его размеры имеют значение от единиц до нескольких десятков микрометров, что значительно превышает период решетки (который для GaAs составляет $\approx 0,56$ нм), а также длину волны де Бройля $\lambda_{\text{Ф}}$, длину релаксации фазы $L_{\text{Ф}}$ и длину свободного пробега $L_{\text{р}}$.

В структуре РТД можно выделить три подсистемы (рис. 7.1, а): макроскопические области, прилегающие к контактным площадкам, а также микроскопическую область, которая находится между ними. Релевантная часть макроскопической области достаточно сильно легируется примесями n -типа (обычно не меньше 10^{23} м^{-3}), в то время как микроскопическую область оставляют свободной от примесей. Эти области имеют устоявшиеся в литературе названия:

- *резервуары* – это высоколегированные области, которые прилегают к эмиттерному и коллекторному электродам (рис. 7.1, а);
- *квантовая (активная) область* – нелегированная область между двумя резервуарами, часть которой в увеличенном масштабе показана на рис. 7.1, б.

Такое разделение, как будет показано ниже, дает возможность создавать так называемые «комбинированные» модели [7.1], называемые так, поскольку при их построении для раз-

ных участков одного устройства используются разные способы описания электронного коллектива: для резервуаров – полуклассический, а для квантовой области – разнообразные

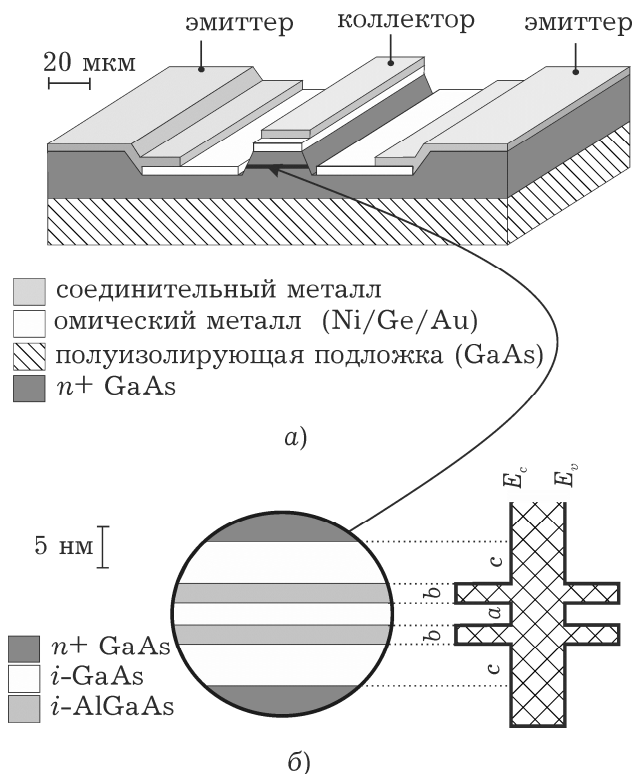


Рис. 7.1. Структура резонансно-туннельного диода (а), активной области и зонная диаграмма (б)

квантово-механические формализмы, в том числе метод волновых функций. Создание комбинированных моделей является альтернативой описания в рамках единственного квантово-механического формализма всего устройства, которое приводит к неоправданно высокой интенсивности использования математических и численных ресурсов без существенного повышения точности модели.

Заметим, что известные на сегодня

устройства нанoeлектроники, включая нанотрубки, одноэлектронные транзисторы и другие перспективные компоненты, непременно содержат классические области. Любой компонент или система нанoeлектроники должны содержать «классическую» область [7.2 стр. 15]. В частности, классическая область необходима для проведения измерения [7.3 стр. 77].

7.1.2. Принцип работы резонансно-туннельного диода

Характерным свойством резонансно-туннельного диода является наличие на ВАХ участка отрицательной дифференциальной проводимости (ОДП), который имеет квантовую природу и определяет особенности его использования. РТД был впервые предложен советским ученым Йогансенем в 1963

году [7.4; 7.5] как аналог резонатора Фабри-Перо для электронных волн (волн де Бройля). В 1974 году Чанг впервые наблюдал участок ОДП на практике при температуре, близкой к абсолютному нулю [7.6]. Наличие участка ОДП недвусмысленно указывало на реализацию в созданном образце резонансного туннелирования. Дальнейшему развитию резонансно-туннельных диодов способствовало совершенствование технологий молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) и химического осаждения из газовой фазы металлоорганических соединений, что позволило Шевчуку [7.7] уже в 1985 году наблюдать участок ОДП на ВАХ РТД при комнатной температуре.

Принцип работы РТД легко понять, следуя объяснением *S. Lurie* [7.8]. При низкой температуре в сильно легированных резервуарах электроны занимают состояния, начиная со дна зоны проводимости E_C , и заканчивая энергией Ферми E_F : $E_C < E < E_F$ (рис. 7.2). Все возможные комбинации волновых чисел, таким образом, находятся в т.н. сфере Ферми радиуса $k_F = \sqrt{2m^*E_F} / \hbar$ (рис. 7.3).

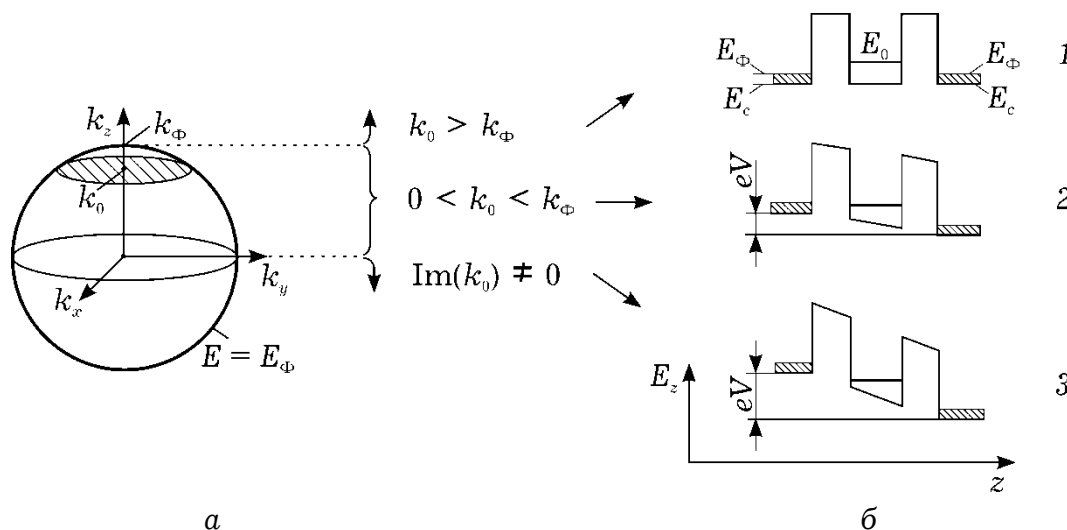


Рис. 7.2. К принципу работы РТД: а) сфера Ферми, внутри которой находятся все возможные значения волнового числа электронов из эмиттера. Заштрихованный круг обозначает состояния электронов, которые способны туннелировать при данном положении уровня в квантовой яме; б) потенциальный рельеф ДБКС при разных смещениях: 1 – $V = 0$, 2 – «пиковое» напряжение; 3 – напряжение, при котором уровень в квантовой яме опустился ниже дна зоны проводимости в эмиттере

В резервуарах, где электронный газ трехмерный, закон дисперсии имеет вид:

$$E_{3D} = E_C + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m^*}, \quad (7.1)$$

где E_C – дно зоны проводимости, $k_{\parallel}^2 = k_x^2 + k_y^2$; $k_{\parallel(z)}$ – «продольное» («поперечное») волновое число электрона, которому соответствует «продольная» («поперечная») энергия.

В квантовой яме поперечная энергия электрона E_z квантуется, и может приобретать дискретные значения E_i . Закон дисперсии для электронов модифицируется, поскольку электронный газ становится двумерным:

$$E_{2D} = E_i + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m^*}. \quad (7.2)$$

В дальнейшем будем считать, что в яме существует всего один уровень энергии $E_z = E_0$. В силу закона сохранения энергии при туннелировании электрона из трехмерного электронного газа эмиттера в двумерный – квантовой ямы должно быть:

$$E_{2D} = E_{3D}. \quad (7.3)$$

Из условия (7.3) и с учетом сохранения волнового числа k_{\parallel} получим условие, которое налагается на поперечное волновое число электронов, туннелирующих из эмиттера:

$$k_z = \sqrt{2m^*(E_0 - E_C)} / \hbar \equiv k_0. \quad (7.4)$$

Условие (7.4) называют *условием резонансного туннелирования*. Количество электронов в эмиттере, для которых оно выполняется, зависит от положения уровня энергии в квантовой яме (рис. 7.2, а). Так, если $k_0 > k_F$ ни один электрон не удовлетворяет условию (7.4); соответственно и ток через ДБКС отсутствует. Начиная с $k_0 = k_F$ и до $k_0 = 0$ количество

электронов, способных к прохождению ДБКС, увеличивается и достигает максимума при $k_0 = 0$. При этом ток растет за счет увеличения количества электронов, для которых выполняется условие резонансного туннелирования. После прохождения экватора сферы Ферми волновое число k_0 , в соответствии с (7.4), становится комплексным, что трактуется как отсутствие электронных состояний с резонансной энергией. Ток при этом резко падает до нуля (рис. 7.3, а).

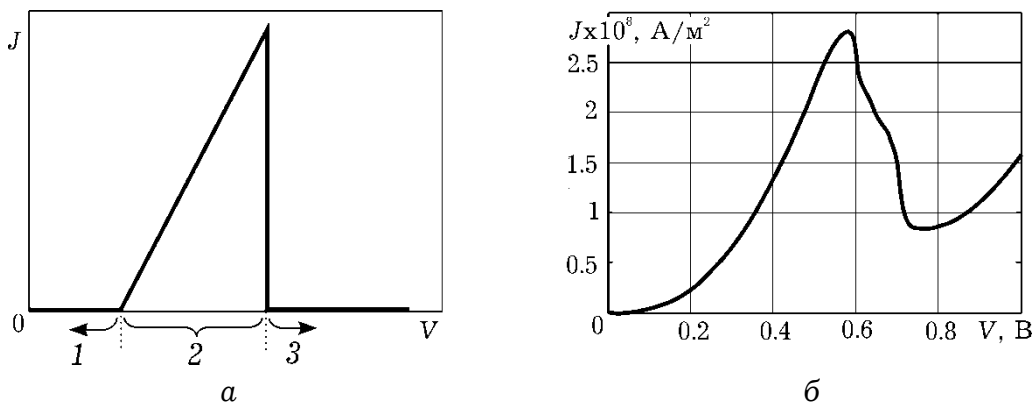


Рис. 7.3. Теоретическая (а) и экспериментальная ВАХ резонансно-туннельного диода (б), адаптированная из (9). Обозначенные участки теоретической ВАХ соответствуют характерным значениям резонансного волнового числа: 1 – $k_0 > k_{\Phi}$; 2 – $0 < k_0 < k_{\Phi}$; 3 – $\text{Im}(k_0) < 0$ (см. также рис. 7.2, а)

Положение уровня поперечной энергии в квантовой яме можно регулировать, прикладывая напряжение (рис. 7.2, б). Пусть при нулевом напряжении единственный уровень энергии лежит выше уровня Ферми. При повышении потенциала коллектора, уровень энергии «опускается» и может пробегать все значения от E_{Φ} к E_c и ниже. Соответственно, ток через диод в зависимости от напряжения принимает значение от нулевого, когда $E_0 > E_{\Phi}$ до некоторого максимального значения, когда $E_0 = 0$. При дальнейшем увеличении напряжения количество электронов резко уменьшается, что приводит к падению тока: так формируется участок отрицательной дифференциальной проводимости G_d , на котором $G_d = dI/dV < 0$.

На рис. 7.3, б приведена ВАХ экспериментального образца РТД, который описан в [7.9]. Принципиальным отличием от

теоретической кривой является то, что с увеличением напряжения ток сразу же начинает расти, и уже не опускается до нуля, а участок отрицательной дифференциальной проводимости имеет конечный размах по напряжению. Такие отличия объясняются прежде всего следующим:

- уровни энергии в квантовой яме в действительности не дискретны, а имеют конечную ширину Γ . Такое уширение происходит оттого, что время жизни τ электрона в яме за счет выхода через барьеры оказывается конечным, а, следовательно, в силу принципа неопределенности для энергии [7.2 р. 185], энергетические уровни «размываются» на величину неопределенности энергии, имеющей порядок $\Gamma \sim \hbar/\tau$. Следовательно, ширина участка ОДП по напряжению конечна, а ВАХ становится более плавной.

- при ненулевой температуре граница между незаселенными и заселенными состояниями в эмиттере размыта (максимальная энергия электрона не ограничивается E_F). Следовательно, при изменении напряжения количество туннелирующих электронов и создаваемый ими ток изменяется плавно;

- процессы рассеивания и хаотизации фазы электрона при туннелировании делают условие резонанса (7.4) не единственным, при котором возможный перенос заряда из левого к правому резервуару. Существуют механизмы нерезонансного переноса, которые существенно увеличивают ток «долины» ВАХ.

7.1.2. Механизм токопереноса

Подход к расчету тока через структуры с поперечным электронным транспортом аналогичен рассмотренному в разд. 1.5: квантовая область, являющаяся по существу микроскопической системой, описывается как центр рассеивания. Описание последнего можно осуществлять, пользуясь волновыми матрицами рассеивания или передачи электронных

волн. Покажем как в рамках формализма Ландауэра, зная матрицу передачи квантовой системы, можно рассчитать ток.

В резервуарах, где концентрация электронов высока, а падение напряжения пренебрежительно мало, принимается предположение о равновесности электронного газа. Считается, что при некотором напряжении V электроны в левом и правом резервуарах подчиняются статистике Ферми-Дирака с параметрами E_{Φ_1} и E_{Φ_2} , соответственно, где $E_{\Phi_2} = E_{\Phi_1} - eV$ (рис. 7.4, а) Кроме того, считается, что резервуары поглощают все электроны, которые в них попадают (то есть отсутствует отражение от границы резервуара и квантовой области).

Поскольку квантовая область является нелегированной (для GaAs концентрация электронов в ней $n_i = 2,1 \cdot 10^{12} \text{ м}^{-3}$ при температуре 300 К), а резервуары легируются сильно ($N_d \sim 10^{24} \text{ м}^{-3}$), основную роль в явлениях переноса играют электроны левого и правого резервуаров, которые попадают в квантовую область и двигаются в ней баллистически. Этот процесс напоминает процесс термоэлектронной эмиссии, имеющей место в вакуумных диодах [7.10 с. 194], однако в данном случае электроны эмитируются не только из «катода», но и с «анода».

Суммарный ток, протекающий через квантовую область, можно рассчитать как суперпозицию токов, которые создаются электронами, попадающих в нее из левого и правого резервуара (далее – «левые» и «правые» электроны). Плотности последних обозначим, соответственно, через J_{12} и J_{21} , а суммарную плотность тока – через J :

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_{12} + \mathbf{J}_{21}.$$

Считается, что потоки «левых» и «правых» электронов между собой не взаимодействуют. Взаимодействие между электронами может быть учтено эффективно, если считать, что каждый электрон движется в поле кристаллической решетки и поле, создаваемого всеми остальными электронами – так называемое приближение Хартри [7.2 с. 311], [7.11 с. 71]. Считается, что площадь слоев гетероструктуры настолько ве-

лика, что ток равномерно распределяется по поперечному сечению площадью S , поэтому плотность тока

$$\mathbf{J}_{12(21)} = \mathbf{e}_z \frac{I_{12(21)}}{S} \equiv \mathbf{e}_z J_{12(21)}.$$

Для токов «левых» и «правых» электронов должны отдельно выполняться законы непрерывности: $dJ_{12(21)}/dz = 0$, поэтому для «левых» электронов можно рассчитать ток в одной точке, а для «правых» — в другой. Удобнее всего рассчитать ток по формуле:

$$J = J_{12}(z_R) + J_{21}(z_L), \quad (7.5)$$

где z_R и z_L — правая и левая граница квантовой области (рис. 7.4). Точки z_L и z_R — это граничные точки классической области, поэтому в них электрон можно рассматривать как квазиклассическую частицу.

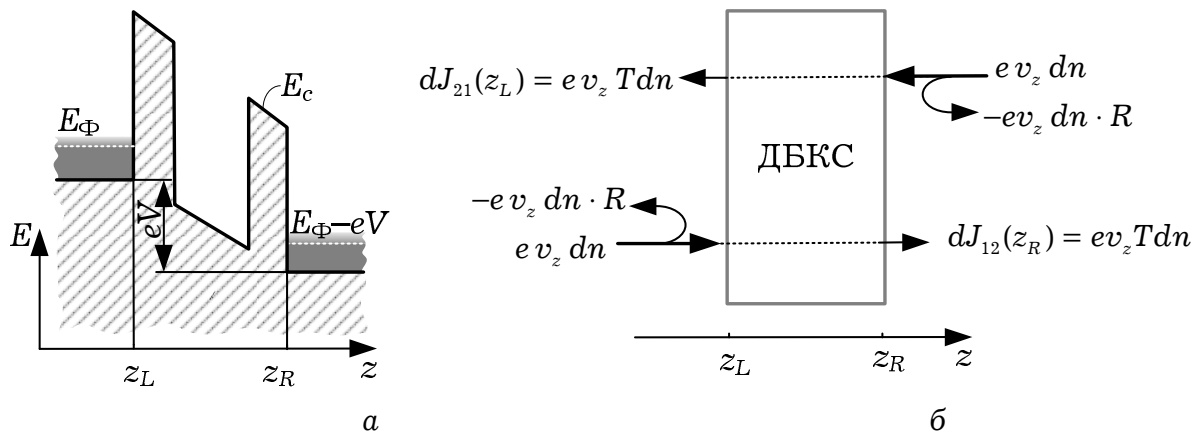


Рис. 7.4. Зонная диаграмма двухбарьерной квантовой системы (а) и составляющие тока через нее (б)

Электрон, который находится в точке z_R и имеет скорость v , создает элементарный ток $j = ev_z$. Плотность тока, создаваемого электронами, скорости которых находятся в пределах от $v_z = \hbar k_z / m^*$ до $v_z + dv_z$, определяется формулой:

$$dJ_{12} = e v_z dn(z_R) = e \frac{\hbar k_z}{m^*} dn(z_R), \quad (7.6)$$

где $dn(z_R)$ – концентрация электронов (скорости которых находятся в вышеупомянутых пределах) в точке z_R .

Предположим, что нам известен коэффициент прохождения электроном квантовой системы $T(E_z)$, который имеет смысл вероятности прохождения. Тогда концентрацию «левых» электронов, достигших правого резервуара, можно определить по формуле $dn(z_R) = dn(z_L) \cdot T(E_z)$ (рис. 7.4). Если электрон преодолевает квантовую систему без рассеивания, вероятность прохождения зависит лишь от поперечной энергии: $T = T(E_z)$.

Именно *нахождение коэффициента прохождения $T(E_z)$ является главной проблематикой моделирования структур с поперечным транспортом, поскольку он определяет электрические свойства микроскопической системы.*

Для нахождения J_{12} воспользуемся тем, что концентрация электронов dn в элементарном объеме волновых чисел $dV_k = dk_x dk_y dk_z$ составляет:

$$dn = g(\mathbf{k})f(\mathbf{k})dV_k, \quad (7.7)$$

где $g(\mathbf{k})$ и $f(\mathbf{k})$ – плотность состояний и функция распределения электронов в k -пространстве в левом резервуаре, соответственно; $g(\mathbf{k}) = 2/(2\pi)^3$; $f(\mathbf{k}) = 1/(1 + e^\varepsilon)$, где, в свою очередь:

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

С учетом (7.7), уравнение (7.6) в раскрытом виде переписывается так:

$$dJ_{12} = \frac{e\hbar k_z}{m^*} g(\mathbf{k})f(\mathbf{k})T(E_z)dV_k = \frac{e\hbar}{m^*} \frac{2}{(2\pi)^3} \frac{k_z T(E_z)}{1 + \exp\{\varepsilon(\mathbf{k}, E_\Phi)\}} dV_k. \quad (7.8)$$

Поскольку коэффициент прохождения зависит лишь от поперечной энергии, в формуле (7.8) удастся провести интегрирование по поперечным проекциям волнового вектора (k_x и k_y). В то же время вид функции $T(E_z)$ даже для самых простых форм квантовой области обычно не позволяет провести интегрирование по k_z аналитически.

Интегрирование (7.8) следует производить по части k -пространства, определяемую неравенством $k_z > 0$:

$$J_{12} = \frac{e\hbar}{m^*} \frac{2}{(2\pi)^3} \int_0^\infty T(E_z) \int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty \frac{k_z}{1 + \exp\{\epsilon(\mathbf{k}, E_\Phi)\}} dk_z dk_x dk_y \quad (7.9)$$

(эти пределы охватывают все электроны, движущиеся слева направо и имеющие произвольные продольные скорости).

Интегрируя (7.9) по k_x и k_y и переходя к интегрированию по энергии, получим (см. приложение П7.1):

$$J_{12} = \frac{2m^* e k_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3} \int_{eV}^\infty T(E_z) \cdot \ln \left(1 + \exp \left(-\frac{E_z - E_\Phi - eV}{k_B T} \right) \right) dE_z, \quad (7.10)$$

где нижний предел интегрирования учитывает отсутствие в левом резервуаре электронов, энергия которых меньше eV .

Аналогично найдем J_{21} , (см. приложение П7.1):

$$J_{21} = \frac{2m^* e k_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3} \int_0^\infty T(E_z) \cdot \ln \left(1 + \exp \left(-\frac{E_z - E_\Phi}{k_B T} \right) \right) dE_z. \quad (7.11)$$

Подставив (7.10) и (7.11) в (7.5), получим известную формулу Цу-Эсаки [7.12]:

$$J = \frac{2m^* e k_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3} \int_{eV}^\infty T(E_z) D(E_z) dE_z, \quad (7.12)$$

где $D(E_z)$ – так называемая функция снабжения электронов (англ. "supply function"):

$$D(E) \equiv \ln \left(\frac{1 + \exp\left(-\frac{E_z - E_\Phi}{k_B T}\right)}{1 + \exp\left(-\frac{E_z - (E_\Phi - eV)}{k_B T}\right)} \right).$$

Из двух нижних пределов 0 и eV был выбран наибольший, потому что для состояний с $E_z < eV$ $T(E_z) = 0$.

Из формулы Цу-Эсаки следует, что задача по нахождению вольт-амперной характеристики $J(V)$ сводится к определению коэффициента прохождения $T(E_z, V)$, которая при известном потенциальном рельефе лишь немногим сложнее, чем классическая квантово-механическая задача о прохождении электроном некоторого потенциального рельефа (например, прямоугольного потенциального барьера).

7.2. УСЛОВНО-АНАЛИТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ

Со времен формирования первых представлений о функционировании полупроводниковых структур с поперечным транспортом было разработано множество аналитических методов для вычисления коэффициенту прохождения электроном квантовой структуры. Однако, сложность получающихся выражений обычно не позволяет применять их без дальнейших упрощений. По большей части они используются для построения численных моделей. По этой причине мы использовали приставку «условно-» в их названии. Исключением является *метод лоренцовой модельной функции* (разд. 7.2.2), однако его применимость ограничена исключительно резонансно-туннельным диодом при условии малых смещений.

Общий подход всех методов заключается в том, чтобы найти матрицу передачи квантовой системы, то есть матрицу, которая связывает падающие и отраженные электронные волны с обеих сторон квантовой системы. Зная элементы матрицы передачи, находят коэффициент прохождения.

Как вводится матрица передачи? Согласно принятым предположениям, за пределами квантовой системы падение прикладываемого напряжения отсутствует, потому электрон находится исключительно в поле кристаллической решетки, и огибающая его волновой функции рассматривается как суперпозиция падающих и отраженных плоских волн. Поэтому решение уравнения Шредингера для левого и правого резервуара (на рис. 7.5, *a* это I и V участки) запишется так:

$$\psi_1 = A_1 e^{ik_1 z} + B_1 e^{-ik_1 z}, \quad (7.13)$$

$$\psi_5 = A_5 e^{ik_5 x} + B_5 e^{-ik_5 x}, \quad (7.14)$$

где A_1, B_1, A_5, B_5 – постоянные интегрирования; $k_{1(5)} = \sqrt{2m_{1(5)}^*(E_z - U_{1(5)})}/\hbar$, где $m_{1(5)}^*$ – эффективная масса электрона в I(V) области, $U_{1(5)}$ – потенциальная энергия электрона («потенциальный рельеф») в I(V) области. Введем обозначения для членов выражений (7.13), (7.14):

$$\psi_1^{\rightarrow} \equiv A_1 e^{ik_1 z}, \quad \psi_1^{\leftarrow} \equiv B_1 e^{-ik_1 z}, \quad \psi_5^{\rightarrow} \equiv A_5 e^{ik_5 z}, \quad \psi_5^{\leftarrow} \equiv B_5 e^{-ik_5 z},$$

которые традиционно называются, соответственно, падающими и отраженными волнами в первой и пятой области. Эти волны описывают электрон, который налетает или отражается от квантовой области слева или справа.

Матрица передачи всей квантовой системы \mathbf{M} вводится так:

$$\begin{bmatrix} A_5 \\ B_5 \end{bmatrix} = \mathbf{M} \begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \end{bmatrix}, \quad (7.15)$$

Зная \mathbf{M} , можно найти коэффициент прохождения $T(E_z)$ квантовой системы. По определению [7.3 с. 419]:

$$T(E_z) = j_5^{\rightarrow} / j_1^{\rightarrow}, \quad (7.16)$$

где j_5^{\rightarrow} – поток плотности вероятности в электронной волне, которая прошла в пятую область; j_1^{\rightarrow} – поток плотности вероятности в падающей волне в первой области. Согласно определению потока плотности вероятности:

$$j_{5(1)}^{\rightarrow} = \frac{i\hbar}{2m_{5(1)}^*} \left(\{\Psi_{5(1)}^{\rightarrow}\}^* \frac{d\Psi_{5(1)}^{\rightarrow}}{dz} - \Psi_{5(1)}^{\rightarrow} \frac{d\{\Psi_{5(1)}^{\rightarrow}\}^*}{dz} \right).$$

Простые вычисления дают:

$$j_5^{\rightarrow} = |A_5|^2 \frac{\hbar k_5}{m_5^*}, \quad j_1^{\rightarrow} = |A_1|^2 \frac{\hbar k_1}{m_1^*}.$$

Подставляя эти значения в формулу (7.16), получим:

$$T(E_z) = \frac{|A_5|^2}{|A_1|^2} \frac{k_5}{k_1} \frac{m_1^*}{m_5^*}. \quad (7.17)$$

Из формулы (7.17) следует: если потенциальная энергия электрона в левом или правом резервуаре меньше полной энергии электрона (волновой вектор приобретает мнимое значение), то такой электрон не вносит вклад в ток, поскольку вероятность прохождения оказываются мнимыми. Последнее означает невозможность такого события.

Коэффициент отражения от квантовой системы определяется как:

$$R = -j_1^{\leftarrow} / j_1^{\rightarrow}, \quad (7.18)$$

где $j_1^{\leftarrow} = \frac{i\hbar}{2m_1^*} \left(\{\Psi_1^{\leftarrow}\}^* \frac{d\Psi_1^{\leftarrow}}{dz} - \Psi_1^{\leftarrow} \frac{d\{\Psi_1^{\leftarrow}\}^*}{dz} \right)$ – поток плотности вероятности в отраженной в первую область электронной волне.

Простые вычисления дают:

$$R = |B_1|^2 / |A_1|^2. \quad (7.19)$$

Найдем коэффициент прохождения для электрона, который налетает на квантовую систему из левого резервуара. Поскольку резервуары являются идеально адсорбирующими, волна, отраженная от правого резервуара $\psi_5^{\leftarrow} \equiv B_5 e^{-ik_5 z}$, будет отсутствовать. Без потери общности можно нормировать волновую функцию в левом резервуаре так, что $A_1 = 1$. Тогда амплитуды A_5 и B_1 приобретут смысл комплексных коэффициентов прохождения и отражения, которые обозначим $t \equiv A_5$, $r \equiv B_1$. Таким образом, для электрона, который налетает на квантовую систему слева, (7.17) и (7.19) переписутся так:

$$T(E_z) = |t|^2 \frac{|k_5|}{|k_1|} \frac{m_1^*}{m_5^*}, \quad (7.20)$$

$$R = |r|^2. \quad (7.21)$$

Формула (7.15) во введенных обозначениях будет иметь вид:

$$\begin{bmatrix} t \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ r \end{bmatrix}. \quad (7.22)$$

Здесь неизвестными являются коэффициенты t и r , найдя которые, будем иметь возможность вычислить $T(E_z)$ и R согласно (7.20) и (7.21). Проведя элементарные вычисления, из (7.22) получим:

$$t = m_{11} + m_{12}m_{21}/m_{22}; \quad (7.23)$$

$$r = -m_{21}/m_{22}. \quad (7.24)$$

Следовательно, если матрица передачи квантовой системы известна, формулы (7.20), (7.21), (7.23), (7.24), позволяют вычислить коэффициенты прохождения и отражения.

Напоследок отметим, что закон сохранения плотности потока вероятности в огибающей волновой функции, как и в самой волновой функции [7.3 с. 419] диктует выполнение условия:

$$T(E_z) + R(E_z) = 1;$$

кроме того, в [7.2 с. 108] показано, что для электронов, которые налетают справа или слева, коэффициенты отражения и прохождения одинаковы: $T_{12} = T_{21}$, $R_{12} = R_{21}$. Именно поэтому в формуле Цу-Эсаки фигурирует один коэффициент прохождения $T(E_z) \equiv T_{12} = T_{21}$. Системы, которые удовлетворяют указанным условиям, называются *обратимыми системами без потерь*. Для компонентов матрицы \mathbf{M} , которая описывает указанные системы, справедливы равенства: $m_{11} = m_{22}^*$, $m_{12} = m_{21}^*$ [7.13 с. 250].

7.2.1. Метод плоских волн

Метод плоских волн применяется для нахождения коэффициента прохождения через квантовые системы, потенциальная энергия электрона в которых может быть аппроксимирована кусочно-постоянной функцией (рис. 7.5, а, б). Аппроксимация, которая показана на рис. 7.5, а сплошной линией, является оправданной, когда к системе прикладывается небольшое смещение, а влиянием пространственного заряда можно пренебречь. На любых двух i -м и $(i + 1)$ -ом смежных участках с постоянным потенциальным рельефом решением уравнения Шредингера будет суперпозиция плоских волн:

$$\Psi_i = A_i e^{ik_i z} + B_i e^{-ik_i z}, \quad (7.25)$$

$$\Psi_{i+1} = A_{i+1} e^{ik_{i+1} z} + B_{i+1} e^{-ik_{i+1} z}, \quad (7.26)$$

где $k_i = \sqrt{2m_i^*(U_i - E_z)} / \hbar$, m_i^* – эффективная масса электрона в i -ом слое, U_i – потенциальная энергия электрона в зоне проводимости i -го слоя.

На границе между i -й и $i + 1$ -й областями, в точке $z_{i, i+1}$ волновая функция и поток вероятности в ней должны быть

непрерывными, то есть необходимо обеспечить выполнение соотношений:

$$\psi_i(z_{i,i+1}) = \psi_{i+1}(z_{i,i+1}), \quad (7.27)$$

$$1 / m_i^* \cdot \psi'_i(z_{i,i+1}) = 1 / m_{i+1}^* \cdot \psi'_{i+1}(z_{i,i+1}), \quad (7.28)$$

где штрихом обозначено дифференцирование по z .

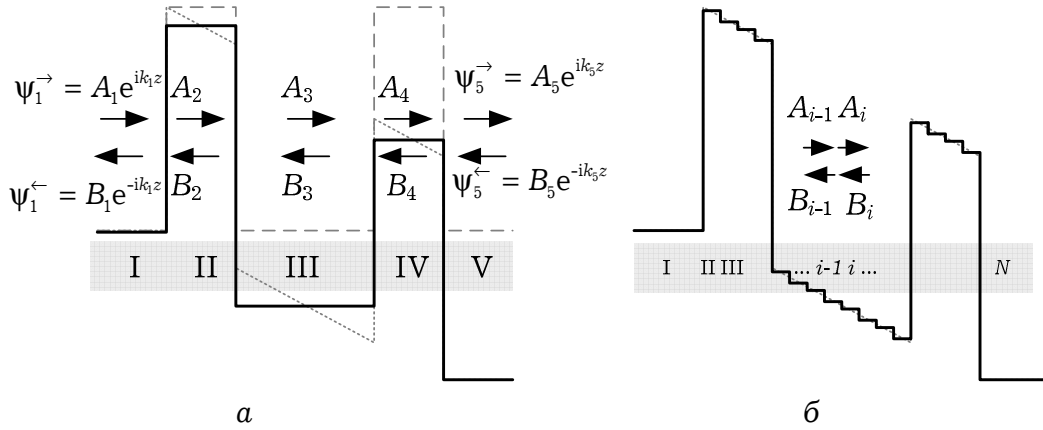


Рис. 7.5. Аппроксимации потенциального рельефа ДБКС, которые можно описать матрицами передачи плоских волн (сплошные линии)

С учетом (7.25) и (7.26) из (7.27) и (7.28) можно получить матричное уравнение, которое связывает $[A_{i+1} \ B_{i+1}]^T$ с $[A_i \ B_i]^T$:

$$\begin{bmatrix} A_{i+1} \\ B_{i+1} \end{bmatrix} = \mathbf{M}_{i+1,i} \begin{bmatrix} A_i \\ B_i \end{bmatrix}, \quad (7.29)$$

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

матрица передачи электронных волн (или просто \mathbf{M} -матрица), которая выражает амплитуды электронных волн в $(i+1)$ -ом слое через амплитуды в i -ом слое.

Аналогично можно получить уравнение, которое связывает соответствующие амплитуды в $(i-1)$ -ом и i -ом слое:

$$\begin{bmatrix} A_i \\ B_i \end{bmatrix} = \mathbf{M}_{i,i-1} \begin{bmatrix} A_{i-1} \\ B_{i-1} \end{bmatrix}. \quad (7.30)$$

Пользуясь (7.29) и (7.30), можно выразить $[A_{i+1}, B_{i+1}]^T$ через $[A_{i-1}, B_{i-1}]^T$:

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

откуда следует, что \mathbf{M} -матрицы мультипликативны.

Легко убедиться, что указанное свойство \mathbf{M} -матриц позволяет выразить амплитуды падающих и отраженных волн в левом резервуаре через аналогичные величины правого резервуара:

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

Матрица $\mathbf{M} = \prod_{i=2}^N \mathbf{M}_{i,i-1}$ является искомой матрицей передачи всей квантовой системы.

Применим метод плоских волн к ДБКС модельного РТД, состоящего из AlAs-барьеров шириной $b = 1,7$ нм и GaAs-ямы шириной $a = 4,5$ нм. Относительные эффективные массы в соответствующих слоях имеют значение: $m_{\text{AlAs}} = 0,15$, $m_{\text{GaAs}} = 0,067$. Разрыв зоны проводимости в месте контакта $U_0 = 1$ эВ. Концентрация донорных примесей в резервуарах $N_{\text{д}} = 2,5 \cdot 10^{24} \text{ м}^{-3}$ (рис. 7.6).

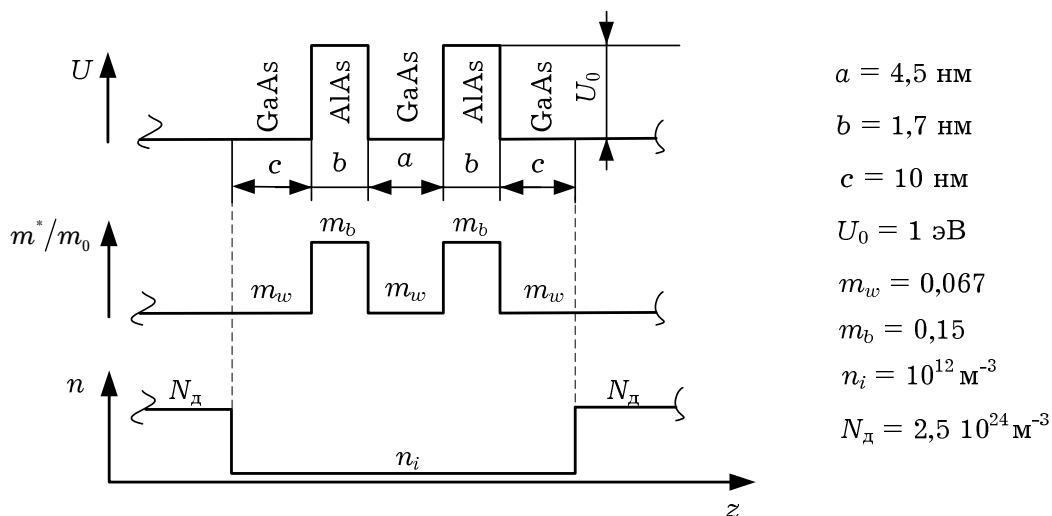


Рис. 7.6. Топология активной части модельного резонансно-туннельного диода

На рис. 7.7 показана зависимость коэффициента прохождения от поперечной энергии электрона для нескольких значений напряжения. Потенциальный рельеф в зависимости от прилагаемого напряжения аппроксимировался согласно рис. 7.5, а.

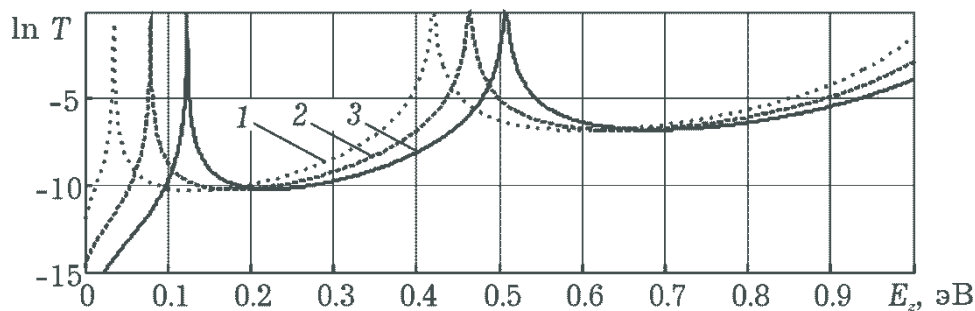


Рис. 7.7. Зависимость коэффициента прохождения модельного резонансно-туннельного диода, рассчитанная методом матриц передачи для напряжений: 1 – 0 В; 2 – 0,1 В; 3 – 0,2 В

7.2.2. Использование лоренцевой модельной функции

Использование матриц передачи на практике требует численной реализации. Умножение уже пяти матриц приводит к сложному выражению для коэффициента передачи с точки зрения возможности анализа (хотя такие попытки осуществлялись [7.14]). Например, как объяснить резонансный характер зависимости коэффициента прохождения для резонансно-туннельного диода (рис. 7.7)? Оказывается, что для РТД можно пользоваться функциями, суперпозиция которых удовлетворительно аппроксимирует резонансный характер зависимости $T(E_z)$. Называются они функциями лоренцового типа, и описываются формулой:

$$T_i(E_z) = \frac{\Gamma_i^2}{\Gamma_i^2 + 4(E_z - E_i)^2}. \quad (7.31)$$

где Γ_i – это величина расширения резонансного уровня, которое обусловлено принципом неопределенности Гейзенберга для энергии; E_i – положение i -го метастабильного уровня в

квантовой яме. Легко видеть, что $T_i(E_i) = 1$, а при $|E_z - E_i| \gg \Gamma_i$ $T_i(E_i) \rightarrow 0$, то есть эта функция описывает некоторую резонансную зависимость.

Иногда формулу (7.31) также называют *формулой Брейта-Вигнера*; она впервые была получена и использована для описания процессов резонансного рассеивания нейтронов на атомных ядрах. Для трехмерного сферического потенциально-го барьера одна из форм этой формулы выводится, например, в [7.3 с. 426].

В квантовой теории возмущений особое место занимает задача, когда возмущение мало, однако его вид таков, что спектр квантовой системы из дискретного становится непрерывным [7.2 с. 202], [7.3 с. 284]. Такая задача возникает, когда невозмущенной системой является яма, окруженная бесконечно широкими потенциальными барьерами (рис. 7.8, а), а возмущенной – такая же яма, но окруженная достаточно широкими барьерами конечной ширины (рис. 7.8, б), настолько широкими, чтобы возмущение можно было считать малым. Для резонансно-туннельных диодов, которые имеют более-менее качественные электрические характеристики, это всегда выполняется.

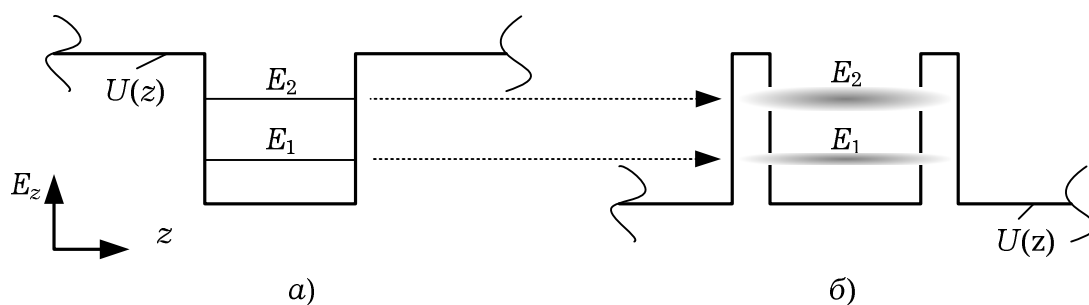


Рис. 7.8. Образование метастабильных уровней энергии: а) невозмущенная система (ширина барьеров бесконечна); б) возмущенная система (ширина барьеров конечна)

В системе, которая изображена на рис. 7.8, а при энергии меньше высоты барьера спектр энергии электрона дискретен. Говорят, что *электрон локализован в квантовой яме*. Вероятность найти его на бесконечности равна нулю, а энергия – фиксирована (неопределенность энергии $\Delta E = 0$). Действи-

тельно, согласно принципу неопределенности Гейзенберга для энергии [7.2 с. 202]:

$$\Delta E \Delta t \sim \hbar, \quad (7.32)$$

а поскольку электрон находится в квантовой яме бесконечно долго ($\Delta t \rightarrow \infty$), (7.32) выполняется, если $\Delta E = 0$.

Ситуация принципиально изменяется, когда барьеры имеют конечную ширину (рис. 7.8, б). Движение электрона в этом случае будет *инфинитным*, а спектр *непрерывным*. Однако и в этом случае вероятность найти электрон в яме будет наибольшей вблизи дискретных уровней энергии невозмущенной системы, уменьшаясь при удалении от них. Говорят, что дискретные уровни энергии «размываются». Если величина ΔE значительно меньше расстояния между дискретными уровнями, такой спектр называют квазидискретным. Последний является особым случаем *непрерывного* спектра.

Таким образом, в формуле (7.31) E_i - это собственные энергии невозмущенной системы (рис. 7.8, а) для дискретного спектра. Из формулы (7.31) следует, что при $E_z = E_i$ функция $T(E_z)$ имеет максимумы, которые равны единице. Если собственными частотами системы считать частоты ДБКС $\omega_{0,i} = E_i / \hbar$, а внешними - частоты волны де Бройля электронов $\omega_{\text{внешн.}} = E_z / \hbar$, то равенство $E_z = E_i$ представляет собой классическое определение резонанса. Явление прохождения ДБКС электроном, обладающего резонансной энергией, называется *резонансным туннелированием*.

Размытые уровни энергии, о которых шла речь, называют метастабильными, а среднее время движения электрона на них Δt называют временем жизни данного метастабильного состояния. Величина Γ_i в формуле (7.32) - это так называемая ширина i -го метастабильного уровня. Ее называют «*естественным расширением*» соответствующего уровня; оно определяется как:

$$\Gamma_i = \frac{\hbar}{\tau_i}, \quad (7.33)$$

где τ_i - это среднее время жизни данного метастабильного состояния.

Величина Γ_i имеет следующий физический смысл. Для системы, коэффициент прохождения которой описывается лоренцевой модельной функцией, часть электронов, которая прошла через систему в диапазоне шириной Γ_i с центром в $E_z = E_i$, будет составлять $1 / \sqrt{2} \approx 0.707$ от общего количества электронов, которые прошли через ДБКС при всех возможных энергиях (при условии, если распределение электронов по энергиям равномерно). Условно говоря, «окно прозрачности» квантовой системы имеет порядок Γ_i .

Время жизни в (7.33) находят из квазиклассических соображений. При каждом отражении от i -го барьера часть $T_i = 1 - R_i$ электронной волны «убегает» из ямы. Частота столкновений электрона с барьерами ν_i приблизительно равняется $2a/v_i$, где v_i - это скорость движения электрона на i -ом метастабильном уровне; $v_i = \sqrt{2E_i / m^*}$; a - ширина квантовой ямы. Вероятность того, что при столкновении с барьером электрон покинет квантовую яму, составляет $T_i^{(1)}$ для левого и $T_i^{(2)}$ для правого барьера. Указанные оценки справедливы при условии $|T_i^{(1)}| \ll 1$, $|T_i^{(2)}| \ll 1$; тогда величину τ_i можно приближенно рассчитать по формуле:

$$\tau_i = \frac{2a}{v_i} \left(\frac{1}{T_i^{(1)} + T_i^{(2)}} \right). \quad (7.34)$$

Если в квантовой яме резонансно-туннельного диода имеется N метастабильных уровней энергии, то функция $T(E_z)$ может быть аппроксимирована суммой функций лоренцевого типа:

$$T(E_z) = \sum_{i=1}^N \frac{\Gamma_i^2}{\Gamma_i^2 + 4(E_z - E_i)^2}. \quad (7.35)$$

Если в квантовой яме существуют другие механизмы, позволяющие электрону покинуть данный энергетический

уровень, например процессы рассеивания, то в рамках лоренцевой аппроксимации их тоже можно учесть. Пусть суммарное время релаксации по всем механизмам релаксации равняется Γ_p и определяется обычным образом:

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

где λ_n – частоты n -го вида рассеивания. Со временем τ_p так же, как и со временем τ_i , можно связать дополнительное расширение метастабильного уровня:

$$\Gamma_p = \frac{\hbar}{\tau_p} , \quad (7.36)$$

которое называется «релаксационным».

По аналогии с резонатором Фабри-Перо [7.15] или следуя квантовой теории можно показать, что при учете рассеивания формулу (7.35) можно уточнить и получить:

$$T(E_z) = \sum_{i=1}^N \frac{\Gamma_i^2}{\Gamma_{\Sigma,i}^2 + 4(E_z - E_i)^2} , \quad (7.37)$$

где $\Gamma_{\Sigma,i} = \Gamma_i + \Gamma_p$ – суммарное расширение i -го энергетического уровня.

7.2.3. Полуаналитическая упрощенная модель РТД

С помощью формулы (7.37) и формулы Цу-Эсаки можно построить упрощенную аналитическую модель резонансно-туннельного диода [7.16]. Преимуществами такой модели по сравнению с численными являются простота и интуитивно понятный смысл величин, которые вычисляются на пути получения ВАХ, а также частичная аналитичность.

Исходя из разд. 7.2.2, поиск зависимости $J(V)$ сводится к следующим шагам:

- поиск суммарного количества N и энергии E_i дискретных уровней в невозмущенной системе (задача на собственные энергии для потенциального рельефа из рис. 7.8, а);
- поиск коэффициентов прохождения для каждого из двух потенциальных барьеров, $T^{(1)}$ и $T^{(2)}$ (рис. 7.8, б);
- поиск величин естественного и релаксационного расширения метастабильных энергетических уровней в квантовой яме по формулам (7.33) и (7.36);
- использование рассчитанных величин для получения ВАХ из формулы Цу-Эсаки.

Найти количество и энергию дискретных уровней в квантовой яме, окруженной бесконечно широкими барьерами (рис. 7.8, а), можно, решив соответствующую квазиквантово-механическую задачу, которая лишь немногим сложнее, чем рассмотренная в [7.2 с. 93].

Расчеты позволяют получить следующие формулы [7.17]. Количество метастабильных уровней в квантовой яме:

$$N = \left[\frac{2\sqrt{m_b}}{\pi\gamma} \right] + 1 = \left[\sqrt{\frac{m_b}{m_0} \cdot \frac{m_w}{m_0} \frac{2}{\pi\gamma_0}} \right] + 1, \quad (7.38)$$

где $[x]$ означает целую часть x ; m_0 , m_w , m_b – масса покоя электрона и эффективные массы электрона в яме и барьере;

$\gamma^2 = \frac{2\hbar^2}{m_w U a^2}$, $\gamma_0^2 = \frac{2\hbar^2}{m_0 U a^2}$; U – высота потенциального барьера,

a – ширина ямы.

Собственные энергии электрона в квантовой яме могут быть найдены из трансцендентного уравнения:

$$(-1)^{n+1} \cos\left(\frac{\pi}{2}(n-1) - \xi\right) = (-1)^{n+1} / \sqrt{1 + \frac{m_w}{m_b} \left(\frac{1}{\gamma^2 \xi^2} - 1\right)}, \quad (7.39)$$

где

$$\xi = ka / 2, \quad k = \sqrt{2m_w E} / \hbar. \quad (7.40)$$

При $m_w = m_b$ правая часть уравнения (7.39) является уравнением прямой $f(\xi) = \pm\gamma\xi$, (если же $m_w \neq m_b$, то это будут некоторые кривые, которые выходят из точки $(0;0)$), левая – в зависимости от четности n – синусом или косинусом. Точки пересечения двух упомянутых функций являются искомыми ξ_i , которым соответствуют искомые E_i согласно (7.40). Один из возможных способов графического решения показан на рис. 7.9.

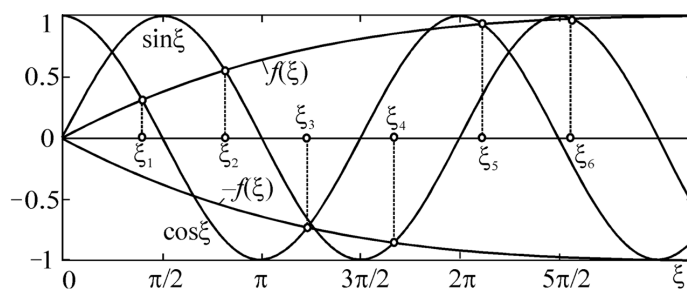


Рис. 7.9. Графическое решение уравнения (7.39). Показанные точки пересечения кривых $f(\xi)$ и кривых $\sin(\xi)$ или $\cos(\xi)$ – его корни

Коэффициент прохождения через прямоугольные потенциальные барьеры можно рассчитать, например, используя метод матриц передачи. Формула для электрона с энергией $E_z = E_i$ имеет вид:

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

где b – ширина барьера,

$$C_i = \frac{k_i}{\chi_i} \cdot \frac{m_2^*}{m_1^*}, \quad \hbar k_i = \sqrt{2m_b^* E_i}, \quad \hbar \chi_i = \sqrt{2m_2^* (U_0 - E_i)}, \quad U_0 - \text{высота}$$

потенциального барьера.

В простейшем случае можно пренебречь зависимостью $T^{1(2)}$ от прилагаемого к ДБКС напряжения V , и считать, что под воздействием напряжения уровни энергии опускаются на величину $eV / 2$:

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

После того как при энергиях E_i проницаемости левого и правого барьеров ($T_i^{(1)}$ и $T_i^{(2)}$) найдены, естественное расширение i -го резонансного уровня Γ_i можно определить из уравнения (7.33).

Наиболее существенным механизмом рассеивания в GaAs при комнатной температуре является полярное оптическое рассеивание. Приблизительно можно считать, что время релаксации импульса в квантовой яме совпадает со временем релаксации в трехмерном полупроводнике, которое определяется формулой [7.18 с. 71]:

$$\frac{1}{\tau_p} = \alpha \omega_0 \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{t^{1/2}}{\text{sh}t} K_0(t), \quad (7.41)$$

где α – полярная постоянная для GaAs; $t = \frac{\hbar\omega_0}{2k_B T}$; K_0 – функция Бесселя нулевого порядка второго рода.

При нулевом смещении суперпозиция лоренцевых функций является хорошей аппроксимацией функции прохождения, особенно для низких энергетических уровней, о чем свидетельствует рис. 7.10, где на одном графике изображена $T(E_z)$, рассчитанная методом матриц передачи, и $T(E_z)$, рассчитанная в соответствии с (7.35) для все той же структуры из рис. 7.6. Для высших энергетических уровней (второй пик на рис. 7.10) аппроксимация менее точна, поскольку для энергии $E_z = E_2$ условие для проницаемости барьеров $T^{(i)} \ll 1$ выполняется хуже.

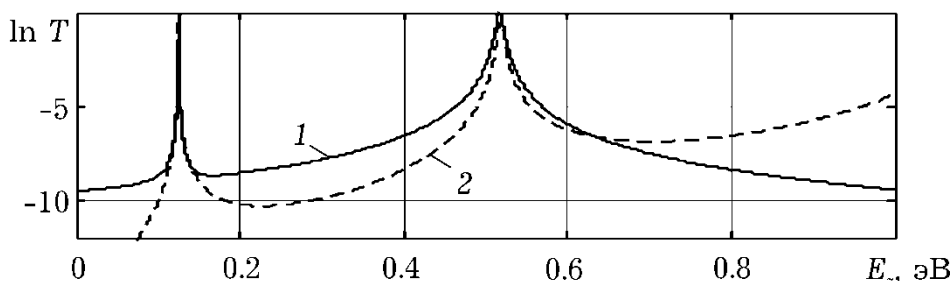


Рис. 7.10. Коэффициент прохождения модельного РТД при нулевом напряжении, рассчитанный: 1 – с использованием суммы лоренцевых модельных функций (формула (7.35)); 2 – методом матриц передачи

Одна из проблем, которую приходится решать при проектировании резонансно-туннельных диодов, заключается в малой контрастности (отношение пикового тока к току в долине РТД) вольтамперных характеристик. Причина заключается в наличии рассеивания и хаотизации фазы электронов в квантовой яме. Модели, которые не учитывают эти факторы, дают сильно заниженные значения тока в долине ВАХ.

Неупругое рассеивание в яме резонансно-туннельного диода приводит к тому, что электрон с резонансной энергией ($E_z = E_i$) имеет конечную вероятность ее изменить за счет взаимодействия с полярными оптическими фононами, которые в GaAs имеют энергию $\hbar\omega \approx 36$ мэВ. Вероятность прохождения электроном квантовой системы с энергией, близкой к резонансной, падает, и даже при $E_z = E_i$ не равняется единице. Процессы рассеивания моделируются введением релаксационного расширения уровня, ширина которого складывается Γ_p , в дополнение к естественному расширению каждого i -го уровня, Γ_i . Изменение формы $T(E_z)$ по аналогии с затуханием электромагнитной волны в резонаторе Фарби-Перо [7.15] позволяет учесть формула (7.37). Отметим, что такой подход является внутренне противоречивым, поскольку механизм рассеивания электрона не сопровождается затуханием волновой функции (что имеет место для электромагнитной волны). Последнее означало бы фактически исчезновение части электронов, что, конечно же, не наблюдается в квантовой яме; напротив, должен выполняться закон непрерывности тока.

Также критике поддаются использование для расчета Γ_p времени релаксации импульса. Согласно квантовой статистике имеется больше оснований использовать в этой роли время релаксации фазы [7.19 с. 14; 7.20].

Несмотря на указанные недостатки, формула (7.37) позволяет максимально просто учесть рассеивание в яме РТД. Время релаксации импульса, будучи рассчитанным по формуле (7.41), увеличивается при повышении температуры, что приводит к увеличению Γ_p , то есть дополнительному размытию функции $T(E_z)$ (рис. 7.11, а), и, в конечном итоге, снижение контрастности ВАХ – рис. 7.11, б. Другие механизмы, в

частности надбарьерное прохождение и размытие функции распределения, приводят к повышению тока долины. Последнее особенно заметно для РТД с низкими барьерами (например $\text{Al}_{0.33}\text{Ga}_{0.77}\text{As}$); такие диоды сегодня, впрочем, имеют лишь историческое значение. Для AlAs/GaAs -РТД надбарьерным прохождением можно пренебречь.

Это коррелирует с экспериментальными ВАХ, на которых с момента создания первых РТД (1973 г.) до 1985 г. не удавалось получить участка с отрицательной дифференциальной проводимостью при комнатной температуре.

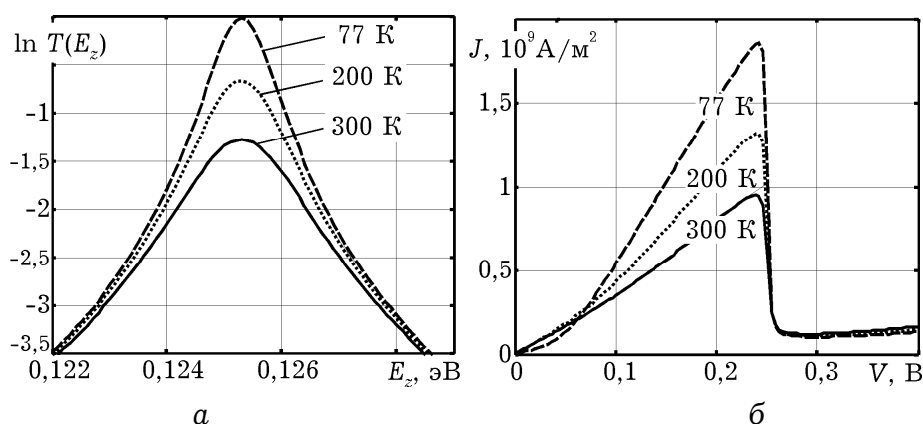


Рис. 7.11. Функция прохождения ДБКС $T(E_z)$ (а) и ВАХ резонансно-туннельного диода (б) при различных температурах

Как уже упоминалось, для второго энергетического уровня модельной структуры аппроксимация лоренцевыми функциями дает завышенные значения проницаемости двухбарьерной квантовой системы (рис. 7.10). Следовательно, и ток, обусловленный туннелированием через второй метастабильный уровень, превышает значение, рассчитанное методом матриц передачи (рис. 7.12). Кроме того, погрешности возникают при аппроксимации изменения потенциального рельефа под действием напряжения смещения V (считается, что дно потенциальной ямы вместе с уровнями энергии в ней опускается на величину $eV/2$).

7.2.4. Другие условно-аналитические методы

Для кусочно-постоянного потенциального рельефа вид решения уравнения Шредингера на каждом участке известен

– это плоские волны. Кроме случая кусочно-постоянного потенциала существуют еще как минимум два: кусочно-линейный и кусочно-квадратичный, для которых вид решения уравнения Шредингера известен. Для первого случая решениями будут функции Эйри [7.21; 7.22], для второго – функции параболического цилиндра [7.23].

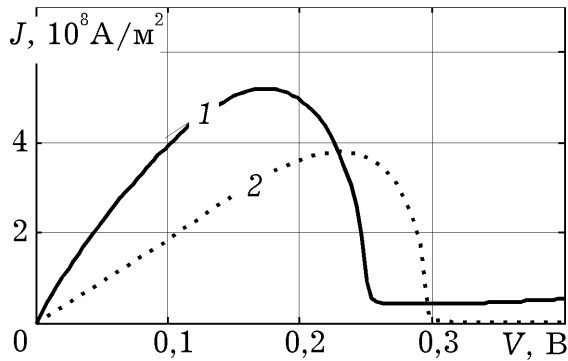


Рис. 7.12. ВАХ модельного РТД, рассчитанная с использованием: 1 – лоренцевой аппроксимации $T(E_z)$; 2 – метода матриц передачи. Рассеивание не учитывается

Однако существенным препятствием на пути использования методов матриц передачи является численная неустойчивость таких методов. Так, если увеличить количество слоев в структуре, которая изображена на рис. 7.4 (десятибарьерная квантовая система), метод матриц передачи теряет численную стойкость за счет плохой обусловленности результирующей матрицы передачи системы (рис. 7.13).

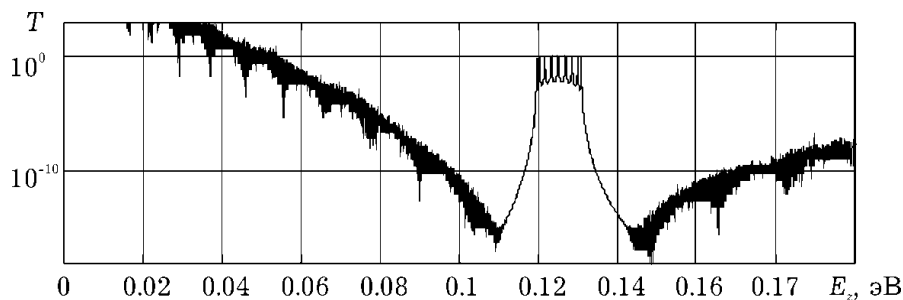


Рис. 7.13. Коэффициент прохождения десятибарьерной квантовой системы, рассчитанный методом матриц передачи. При энергии менее 0,5 эВ коэффициент передачи из-за численной неустойчивости рассчитывается неправильно и поэтому превышает единицу

Даже если процедура умножения матриц не приводит к появлению плохо обусловленной матрицы, она все же занимает неоправданно много вычислительного времени, если коли-

чество слоев достаточно большое. Это будет иметь место, если рельеф сильно нелинеен, что наблюдается, например, при учете пространственного заряда. Следовательно, возникает потребность в создании быстрых и стабильных методов нахождения коэффициента передачи. Этого можно достичь, используя численные методы интегрирования уравнения Шредингера.

7.3. ЧИСЛЕННЫЕ МОДЕЛИ

Количественное моделирование устройств с поперечным электронным транспортом возможно лишь с использованием численных методов. Предположения, которые принимаются при численном моделировании, аналогичны описанным в разд. 7.1. Взаимодействие между электронами учитывается в приближении Хартри, то есть считается, что электроны движутся в поле кристаллической решетки и потенциала, который создают все другие электроны (так называемое «самосогласованное поле»).

Построение численной модели включает шаги, которые направлены на нахождение таких величин:

- концентрация электронов $n(z)$;
- самосогласованный потенциал $V_s(z)$;
- локальная плотность электронных состояний $g(E_z, z)$;
- локальная функция распределения $N(E_z, z)$;
- коэффициент передачи за поперечной энергией $T(E_z)$;
- плотность тока через резонансно-тоннельный диод $J(V)$.

7.3.1. Концентрация и волновые функции

Исходным положением для нахождения концентрации электронов является разделение области моделирования на квантовую и классическую области, то есть «устройство» и «резервуары» (рис. 7.14, *a*).

К квантовой области принадлежат ДБКС и спейсери. К классическим областям относят участки высоколегированных областей такой длины, которая необходима для того, чтобы на

ее краях концентрация и потенциал выравнивались к своим равновесным значениям с нужной точностью. На практике такие участки выбираются длиной в десятки нанометров.

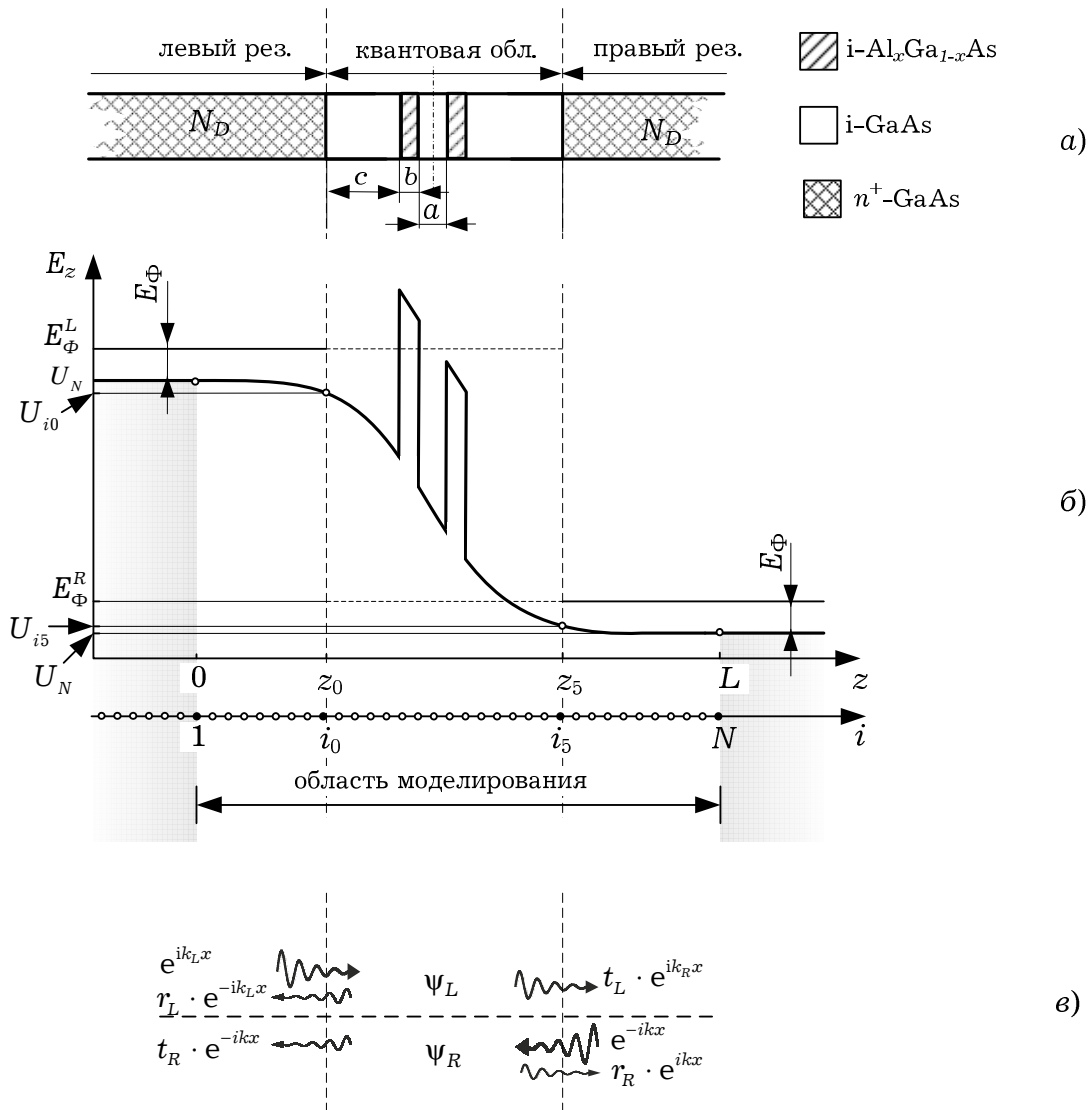


Рис. 7.14. Предположение и обозначения, принятые при моделировании: а) разделение на 3 области; б) дискретизация и условные обозначения; в) волновые функции в области моделирования

На рис. 7.14, б квантовой области соответствует область $z \in [z_0; z_5]$, где $z_0 = (i_0 - 1)\Delta$, $z_5 = (i_5 - 1)\Delta$, Δ – шаг дискретной сетки. Области $z \in [0; z_0]$ и $z \in [z_5; L]$ относятся к левому и правому резервуару соответственно.

Считается, что электронный газ во всем левом резервуаре подчиняется статистике Ферми-Дирака с параметром:

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

в правом:

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

где $U = E_c + U_s$, то есть сумма потенциальной энергии электрона в кристаллической решетке E_c и самосогласованного потенциала $U_s = -eV_s$; L – длина участка, который моделируется; $U_i = (i-1)\Delta$; E_{Φ} – приведенный к дну зоны проводимости уровень Ферми электронов в высоколегированных областях. Он определяется как корень уравнения

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

где N_D^+ – концентрация ионизированных примесей.

Профиль дна зоны проводимости в классических областях $U(z)$ находится из уравнения Пуассона для всего участка, который моделируется. Он определяет плотность состояний трехмерного электронного газа для классических участков. В произвольной точке i (которой соответствует координата $z_i = \Delta(i - 1)$) левой или правой классической области:

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

функция Ферми для левого (правого) резервуара:

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

Таким образом, концентрацию в i -й точке левого (правого) резервуара можно найти по формуле:

$$n_i = 4\pi(2m^*/h^2)^{3/2} \int_{U_i}^{\infty} \frac{\sqrt{E - U_i}}{1 + \exp\left(\frac{E - (E_{\Phi} + U_{1(N)})}{k_B T}\right)} dE. \quad (7.42)$$

Считая, что электроны попадают в квантовую область либо из правого, либо из левого резервуаров и между собой не взаимодействуют и, руководствуясь теми же суждениями, что и в разд. 7.1.2, легко убедиться, что в общем виде концентрацию электронов в неоднородной области можно определить, взяв тройной интеграл:

$$n = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(\mathbf{k})|^2 N(\mathbf{k}) dk_x dk_y dk_z, \quad (7.43)$$

который в случае одномерного квантового транспорта может быть сведен к двум обычным интегралам по поперечной энергии:

$$n = n_R + n_L. \quad (7.44)$$

При переходе от (7.43) к (7.44) принимается следующее.:

Вероятность заполнения электронных состояний, то есть функция распределения электронов по энергиям, совпадает с равновесной в соответствующем резервуаре, умноженной на соответствующую вероятность $|\psi(\mathbf{k})|^2$. Напомним, что для классических областей выше было принято предположение, что электроны в резервуарах подчинены равновесной статистике Ферми.

Соответствующие уровни Ферми в квантовых областях обозначены на рис. 7.14, б пунктирными линиями, которые становятся сплошными в классических областях, где энергия Ферми имеет непосредственное физическое содержание.

Плотность состояний такая же, как и в граничащих с квантовой областью точках. Последние суть $z_0 = (i_0 - 1)\Delta$ для электронов, которые инжектируются из левого резервуара и $z_5 = (i_5 - 1)\Delta$ для электронов, которые инжектируются из пра-

вого резервуара. Это одно из наименее обоснованных предположений, принятых в модели.

Принятые для квантовых областей начала отсчета функции плотности состояний (то есть энергии, при которых плотность состояний равняется 0) обозначены на рис. 7.14, б пунктирными линиями. В классических областях они обозначены сплошной линией; понятие "плотность состояний" там имеет непосредственное содержание, чего нельзя сказать о квантовой области.

Слагаемые формулы (7.44) получены, исходя из следующих соображений.

Интегрирование проводится по всем значениям проекций k_x и k_y , и по положительной (отрицательной) составляющей k_z для «левых» («правых») электронов:

$$n_{L(R)} = \int_{0(-\infty)}^{\infty(0)} |\Psi_{L(R)}(E_z(k_z))|^2 dk_z \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} N(\mathbf{k}) dk_x dk_y \quad (7.45)$$

В формуле (7.45) $N(\mathbf{k}) = g(\mathbf{k})f(\mathbf{k})$, где $g(\mathbf{k}) = 2/(2\pi)^3$ — плотность k -состояний для трехмерного кристалла; $f(\mathbf{k}, k_\Phi)$ — функция Ферми-Дирака, которая определяется так:

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

Последнее равенство обусловлено тем, что закон дисперсии для электронов, которые инжектируются из левого (правого) резервуара¹:

¹ Этим мы приравниваем плотность состояний в квантовой области к плотности состояний в точке i_0 . Понятно, что в квантовой области уже нельзя говорить о плотности электронных состояний, поскольку это про-

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

Считается, что $E_z = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} + U_{i0(i5)}$, то есть поля, в которых находится электрон, изменяют лишь z -составляющую его энергии².

Уровень Ферми в левом (рис. 7.14, б):

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

Подставляя эти значения $g(\mathbf{k})$ и $f(\mathbf{k}, k_{\Phi})$ в (7.45) и производя интегрирование по двум поперечным проекциям \mathbf{k} , получим формулы для $n_{L(R)}$:

$$n_{L(R)} = N_c' \int_{U_{i0}(U_{i5})}^{\infty} \frac{|\Psi_{L(R)}|^2}{\sqrt{E_z - U_{i0(i5)}}} \ln \left(1 + e^{-\frac{E_z - (E_{\Phi} + U_{1(N)})}{k_B T}} \right) dE_z \quad (7.46)$$

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

Для получения формулы (7.46) использовался метод интегрирования, аналогичный описанному в приложении П7.1.

Подынтегральное выражение (7.46) имеет смысл полной функции распределения электронов по z -компоненте энергии в точке z :

$$N(E_z, z) = N_c' \frac{|\Psi_{L(R)}|^2}{\sqrt{E_z - U_{i0(i5)}}} \ln \left(1 + \exp \left(-\frac{E_z - (E_{\Phi} + U_{1(N)})}{k_B T} \right) \right), \quad (7.47)$$

тиворечит возможности туннелирования. Наиболее естественно предположить, что полная энергетическая функция распределения электронов $N(E)$ в квантовой области совпадает с $N(E)$ в крайней точке i_0 (где электроны еще считаются распределенными равновесно), умноженной на соответствующую вероятность.

² Такое предположение принималось с тем, чтобы обеспечить единое начало отсчета энергии для левого и правого резервуара (в численных моделях $|\Psi_L(E_z(k_z), z)|^2$ и $|\Psi_R(E_z(k_z), z)|^2$ рассчитываются в одном цикле)

Функция $N(E_z, z)$ зависит от распределения электронов в резервуарах. Следовательно, из-за экспоненциального уменьшения населенности резервуаров информация о распределении электронов на высших уровнях в квантовой яме теряется. Чтобы получить информацию обо всех уровнях энергии в квантовой яме, а не только о заселенных, удобно пользоваться лишь частью функции $N(E_z, z)$:

$$g(E_z, z) = N_c' \frac{|\Psi_{L(R)}|^2}{\sqrt{E_z - U_{i_0(i_5)}}}, \quad (7.48)$$

которая имеет смысл, аналогичный функции плотности состояний в статистической физике, но зависит от координаты, поэтому $g(E_z, z)$ будем называть локальной плотностью состояний.

В формулу для концентрации электронов (7.46) входят пока что неизвестные волновые функции электронов из правого (левого) резервуара $\Psi_{L(R)}(E_z(k_z), z)$. В численных моделях возникает необходимость дискретизации уравнения Шредингера

$$\frac{d}{dz} \frac{1}{m^*(z)} \frac{d\Psi_{L(R)}(z)}{dz} + \frac{2}{\hbar^2} (E - U(z)) \Psi_{L(R)}(z) = 0 \quad (7.49)$$

Консервативная конечно-разностная схема, полученная *интегро-интерполяционным методом* [7.24 с. 167; 7.25 с. 553] для внутренних точек сетки имеет вид (см. приложение П7.2):

Если точка i не лежит на границе двух материалов, $i \notin \{1, i_1, i_2, \dots, i_5, N\}$:

$$\Psi_{i+1} - 2 \left(1 - \frac{\Delta^2 m \cdot m_i}{\hbar^2} (E_z - U_i) \right) \Psi_i + \Psi_{i-1} = 0, \quad (7.50)$$

где m_i — относительная эффективная масса, m — масса покоя электрона;

Если точка i совпадает с гетерограницей, $i \in \{i_1, i_2, \dots, i_5\}$:

$$\Psi_{\Gamma,i+1} + \frac{m_{i+1}}{m_{i-1}} \Psi_{\Gamma,i-1} - \left(1 + \frac{m_{i+1}}{m_{i-1}} - \frac{2\Delta^2 m_{i+1} m}{\hbar^2} (E_z - V_i) \right) \Psi_i = 0; \quad (7.51)$$

Для внешних точек, пользуясь общими требованиями к волновой функции и ее производной, можно получить следующие уравнения, которые замыкают конечно-разностные схемы для Ψ_L та Ψ_R (см. приложение П7.3):

- для Ψ_L слева:

$$(ik_L \Delta - 1)\psi_1 + \psi_2 = 2ik_L \Delta; \quad (7.52)$$

- для Ψ_L справа:

$$(ik_R \Delta - 1)\psi_N + \psi_{N-1} = 0; \quad (7.53)$$

- для Ψ_R слева:

$$(ik_L \Delta - 1)\psi_1 + \psi_2 = 0; \quad (7.54)$$

- для Ψ_R справа:

$$(ik_R \Delta - 1)\psi_N + \psi_{N-1} = 2ik_R \Delta, \quad (7.55)$$

где $k_{L(R)} = \sqrt{2m^*(E_z - U_{i1(i5)})} / \hbar$; причем в уравнениях (7.52), (7.53) под ψ следует понимать Ψ_L , а в (7.54), (7.55) – Ψ_R .

Уравнения (7.52)–(7.55) были получены, считая, что граница между квантовой областью и резервуарами не совпадает с гетерограницей. Метод получения этих уравнений называется методом квантовой передачи через границу (англ. «*Quantum transmitting boundary method*» [7.26]).

Уравнение (7.50)–(7.55) формируют конечно-разностные схемы уравнений Шредингера для Ψ_L и Ψ_R для всех N_k точек, на которые разбита активная область $[z_0; z_5]$. Для их решения используется метод Томаса [7.27 с. 227].

7.3.2. Влияние пространственного заряда

Учесть межэлектронное взаимодействие, не выходя за пределы одноэлектронного приближения, можно благодаря предположению о том, что каждый электрон двигается под действием поля, создаваемого всеми остальными электронами и ионами. Такое приближение называется приближением Хартри [7.2 стр. 311; 7.11 стр. 71]. Потенциал этого поля – так

называемый самосогласованный потенциал V_s – можно найти из уравнения Пуассона:

$$\frac{d}{dz} \varepsilon(z) \frac{dV_s}{dz} = \frac{e}{\varepsilon_0} [n(z) - N_d^+(z)], \quad (7.56)$$

где ε_0 – диэлектрическая постоянная; ε – относительная диэлектрическая проницаемость; N_d^+ – концентрация ионизированных доноров.

Величины V_s и $n(z) = n_L(z) + n_R(z)$ априори неизвестны. Однако известно, что $n_{L(R)}(z)$ определяются формулами (7.46) и является функциями V_s :

$$U(z) = E_c(z) + U_s(z),$$

где $U_s(z) = -eV_s$ – потенциальная энергия электрона в поле кристаллической решетки и пространственного заряда, величина, которую мы до этого времени считали данной.

Таким образом, (7.44) и (7.56) представляют собой систему интегро-дифференциальных уравнений, которую необходимо решить, чтобы найти самосогласованный потенциал. Выпишем эту систему в таком виде, чтобы была ясна формально-математическая сторона вопроса:

$$\frac{d}{dz} \varepsilon(z) \frac{dV_s}{dz} = \frac{e}{\varepsilon_0} [n(z) - N_d^+(z)], \quad (7.57)$$

$$n(z) = \begin{cases} \sum_{i=L,R} \int |\psi_i(E_z(k_z), V_s, z)|^2 f_i(E_z) dE_z, & z \in [z_1, z_5] \\ 4\pi(2m^*/h^2)^{3/2} \int_{U_i}^{\infty} \frac{\sqrt{E - U(z)}}{1 + e^{\frac{E - (E_\Phi + U_{1(N)})}{k_B T}}} dE, & z \notin [z_1, z_5] \end{cases}, \quad (7.58)$$

$$\text{где } f_i(E_z) \equiv \underbrace{\frac{\sqrt{2}(m^*)^{3/2} k_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3}}_{N'_c} \frac{\ln \left(1 + \exp \left(-\frac{E_z - (E_\Phi + U_{1(N)})}{k_B T} \right) \right)}{\sqrt{E_z - U_{i0(i5)}}}.$$

Поскольку (7.58) зависит от V_s преимущественно в части волновых функций $\psi_{L(R)}$, которые, в свою очередь, являются решениями уравнения Шредингера, (7.57)–(7.58) называют самосогласованной системой Шредингера-Пуассона.

Метод решения системы Шредингера-Пуассона заключается в следующем. Вначале задают начальное приближение для самосогласованного потенциала $V_s(z)$. В качестве начального приближения $V_s^{old}(z)$ лучше всего выбрать линейное падение потенциала в квантовой области, а в резервуарах считать потенциал неизменным, то есть:

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

Это начальное приближение используется для поиска концентрации $n^{old}(z)$ по всей длине модельной структуры согласно (7.58). Подставляя найденную функцию $n^{old}(z)$ в уравнение Пуассона (7.57), можно найти следующее приближение к самосогласованному потенциалу, $V_s^{new}(z)$.

Самый простой способ найти самосогласованный потенциал с абсолютной точностью ε_V – это организовать итерационный процесс так, чтобы найденное $V_s^{new}(z)$ использовалось в качестве следующее приближение для поиска концентрации $n^{new}(z)$ и так далее. Это – так называемый метод простых итераций. Однако практика показывает, что условие $\max |V_s^{new}(z) - V_s^{old}(z)| < \varepsilon_V$ не выполняется ни при каком количестве итераций, то есть итерационный процесс не сходится.

Поэтому альтернативно используются два метода [7.28]:

Релаксационный алгоритм. Он состоит в том, что для поиска $n^{new}(z)$ используется не непосредственно новое приближение V_s^{new} , а величина, определяемая по формуле:

$$V_s^{new'} = V_s^{old} + \alpha(V_s^{new} - V_s^{old}), \quad (7.59)$$

которая сводится к методу простых итераций, если $\alpha = 1$. Однако при $\alpha \ll 1$ (7.59) избавляется от неустойчивости, свойственной предыдущему методу. Типичные значения α составляют 0,01 и меньше; в этих условиях метод обычно уверенно, однако очень медленно сходится.

Метод Гумеля. Идея ускоренных методов самосогласования основывается на учете характера зависимости концентрации от самосогласованного потенциала. Если считать, что электронный газ в области моделирования невырожден и находится в локальном равновесии, то концентрацию можно по формуле [7.29 стр. 125]:

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

$$\text{Для } V_s^{old} \text{ получим: } n^{old}(z) = n_0 \exp\left(\frac{eV_s^{old}}{k_B T}\right).$$

$$\text{Для } V_s^{new} : n^{new}(z) = n_0 \exp\left(\frac{eV_s^{new}}{k_B T}\right).$$

Если бы имело место локальное равновесие и невырожденность, новые и старые приближения связывались бы между собой соотношением:

$$n^{new}(z) = n^{old}(z) \exp\left(\frac{e(V_s^{new} - V_s^{old})}{k_B T}\right), \quad (7.60)$$

что непосредственно следует из двух предыдущих формул. В случае, когда указанные условия не выполняются, (7.60) является хорошим приближением для концентрации n^{old} , поскольку учитывает ее нелинейную зависимость от потенциала. Метод Гумеля [7.30] заключается в том, чтобы находить новые приближения для потенциала из уравнения:

$$\frac{d}{dz} \varepsilon(z) \frac{dV_s^{new}}{dz} = \frac{e}{\varepsilon_0} \left[n^{old}(z) \exp\left(\frac{V_s^{new} - V_s^{old}}{V^{ref}}\right) - N_{\pi}^+(z) \right], \quad (7.61)$$

где $V^{ref} = k_B T / e$ называют опорным потенциалом (англ. «*reference potential*»), он является по существу тепловым потенциалом. Это уравнение нелинейно относительно V_s^{new} , поэтому конечно-разностная схема, которая ему соответствует, будет состоять из нелинейных уравнений, которые можно решить, например, методом Ньютона.

С точки зрения экономии численных ресурсов более привлекательным является линеаризованный метод Гуммеля, который можно получить из (7.61), разложив $\exp\left(\frac{e(V_s^{new} - V_s^{old})}{k_B T}\right)$ в ряд Маклорена и ограничившись первыми двумя членами: $\exp(x) \approx 1 + x$. Результат имеет вид:

$$\frac{d}{dz} \varepsilon(z) \frac{dV_s^{new}}{dz} - n^{old}(z) \frac{e}{\varepsilon_0} \frac{V_s^{new}}{V^{ref}} = \frac{e}{\varepsilon_0} \left[n^{old}(z) \left(1 - \frac{V_s^{old}}{V^{ref}}\right) - N_{\pi}^+(z) \right] \quad (7.62)$$

Уравнению (7.62), в отличие от (7.61), будет соответствовать конечно-разностная схема, которая состоит из линейных алгебраических уравнений. Способ их получения полностью аналогичен ранее применявшемуся к уравнению Шредингера (7.49) (см. приложение П7.2), поскольку математически (7.49) и (7.62) суть одно и то же уравнение.

Запишем конечно-разностную схему, которая соответствует уравнению (7.62) в i -й точке дискретной сетки, в виде:

$$a_i V_{i-1} + b_i V_i + c_i V_{i+1} = d_i, \quad (7.63)$$

(здесь и далее чтобы не усложнять восприятие, вместо V_s употребляется просто V). Для коэффициентов уравнений (7.63) можно получить следующие формулы (II порядок точности):

Для всех внутренних точек, которые не являются гетерограницами $i \notin \{1, i_1, i_2, \dots, i_5, N\}$:

$$a_i = c_i = 1; \quad (7.64)$$

$$b_i = -2 - \frac{1}{\varepsilon_i} \Delta^2 \frac{en_i^{old}}{\varepsilon_0 V^{ref}}; \quad (7.65)$$

$$d_i = \frac{\Delta^2}{\varepsilon_i} \frac{e}{\varepsilon_0} \left[n_i^{old} \left(1 - \frac{V_i^{old}}{V_i^{ref}} \right) - N_i^+ \right]. \quad (7.66)$$

Для всех гетерограниц $i \in \{1, i_1, i_2, \dots, i_5, N\}$:

$$a_i = 1; \quad (7.67)$$

$$b_i = -1 - \frac{\varepsilon_{i-1}}{\varepsilon_{i+1}} - \frac{1}{\varepsilon_{i+1}} \Delta^2 \frac{en_i^{old}}{\varepsilon_0 V^{ref}}; \quad (7.68)$$

$$c_i = \frac{\varepsilon_{i-1}}{\varepsilon_{i+1}}; \quad (7.69)$$

$$d_i = \frac{\Delta^2}{\varepsilon_{i+1}} \frac{e}{\varepsilon_0} \left[n_i^{old} \left(1 - \frac{V_i^{old}}{V_i^{ref}} \right) - N_i^+ \right]. \quad (7.70)$$

Внешние точки выбираются настолько далеко от активной части устройства, что электрическое поле в них отсутствует: $dV_s/dz = 0$, откуда получаем условия Дирихле:

$$V_1 = 0, V_N = V. \quad (7.71)$$

Уравнения (7.63)–(7.71) формируют конечно-разностную схему, которая соответствует уравнению (7.62). Самосогласованный потенциал считается найденным с точностью ε_V , если выполняется условие $\max |V_s^{new}(z) - V_s^{old}(z)| < \varepsilon_V$.

Распределение концентрации и потенциального рельефа в модельном диоде (рис. 7.6), полученные в результате самосогласованного решения системы Шредингера-Пуассона, приведено на рис. 7.15. Из рисунка видно, что с увеличением напряжения накопления заряда в области левого спейсера и квантовой ямы увеличивается. Также понятным является

влияние перераспределения заряда на рассчитанные характеристики: весь потенциальный рельеф квантовой области "поднимается" по оси энергии, чем замедляет достижение пикового напряжения.

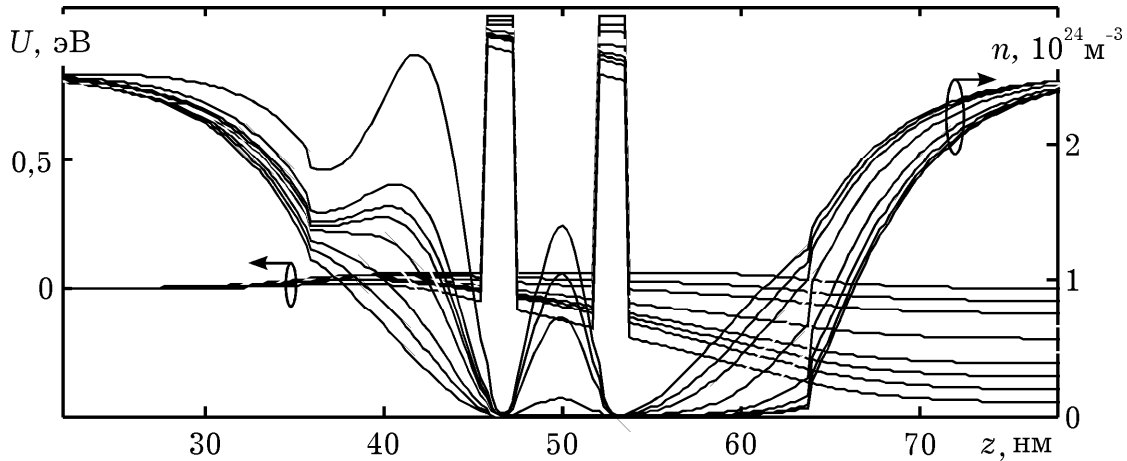


Рис. 7.15. Распределения концентрации и потенциальной энергии электронов в модельном резонансно-туннельном диоде (рис. 7.6), рассчитанные самосогласованно для напряжений от 0 до 0,45 В

Выдающейся чертой численного моделирования является возможность объяснения природы квантово-размерных эффектов в активной части РТД с помощью анализа распределения концентрации $n(z)$, локальной плотности состояний $g(E_z, z)$ и функции распределения $N(E_z, z)$. На рис. 7.16, а плотность состояний как функция двух аргументов изображена с помощью градаций серого. Темные горизонтальные полосы на характеристике $g(E_z, z)$ соответствуют метастабильным уровням энергии в квантовой яме; характерная интерференционная картина распределения плотности состояний в спейсерах указывает на проявление волновой природы электрона.

Плотность состояний на первом метастабильном уровне имеет максимум по центру квантовой ямы, на втором – два симметричных максимума, на третьем уровне, который частично находится над потенциальными барьерами, – три. Природу такого распределения $g(z)$ на i -ом уровне в яме можно объяснить в рамках теории возмущений. Действительно, количество максимумов $g(z)$ на i -ом уровне должно быть таким же, как у $|\psi_i(z)|^2$ для невозмущенной системы, то есть

равняться номеру уровня. Наблюдается также увеличение величины расширения уровней с ростом энергии, которое объясняется уменьшением времени жизни электрона на высших уровнях.

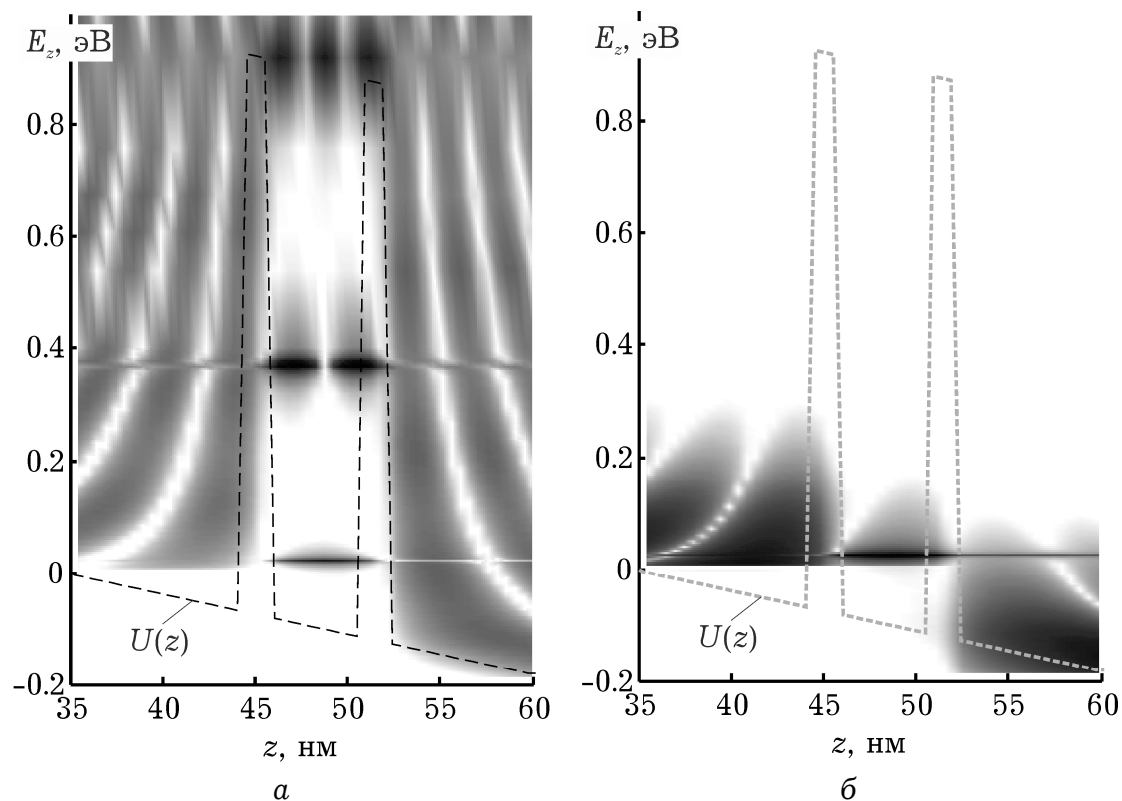


Рис. 7.16. Локальная плотность состояний (а) и функция распределения электронов в квантовой области РТД (б). Приложенное напряжение $V = 0.2$ В. Более темному тону соответствует большее значение функций в логарифмическом масштабе. Штриховой линией обозначен потенциальный рельеф

Из рис. 7.16, б очевидно, что накопление заряда в яме происходит лишь на самом низком уровне. Этот факт объясняет, почему концентрация при малых смещениях имеет максимум в центре квантовой ямы (рис. 7.15).

7.3.3. Обобщенная формула Цу-Эсаки

Плотность тока через РТД может быть рассчитана в соответствии с обычными правилами расчета средних значений физических величин в статистической физике:

$$\mathbf{J} = e \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{v}(\mathbf{k}, z) N(\mathbf{k}) dk_x dk_y dk_z, \quad (7.72)$$

если считать, что функция распределения электронов в квантовой области

$$N(\mathbf{k}, z) \equiv \begin{cases} N_L(\mathbf{k}) \cdot |\psi_L(\mathbf{k}, z)|^2, & \text{если } k_z > 0, \\ N_R(\mathbf{k}) \cdot |\psi_R(\mathbf{k}, z)|^2, & \text{если } k_z < 0; \end{cases} \quad (7.73)$$

$\mathbf{v}(\mathbf{k}, z)$ – средняя скорость электрона в точке z , которая определяется как плотность потока вероятности, деленная на саму плотность вероятности [7.3 с. 123]:

$$\mathbf{v}(\mathbf{k}, z) = \frac{\mathbf{j}(\mathbf{k}, z)}{|\psi(\mathbf{k}, z)|^2} = \frac{i\hbar}{2m^*} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi) / |\psi(\mathbf{k}, z)|^2. \quad (7.74)$$

С учетом того, что ток протекает вдоль оси $0z$, для разных знаков z -проекции волнового вектора единственная ненулевая проекция тока $j_z(k_z, z) \equiv j$ запишется так:

$$j(k_z) \equiv \begin{cases} j_{12} = \frac{i\hbar}{2m^*} \left(\psi_L \frac{d\psi_L^*}{dz} - \psi_L^* \frac{d\psi_L}{dz} \right), & \text{если } k_z > 0; \\ j_{21} = \frac{i\hbar}{2m^*} \left(\psi_R \frac{d\psi_R^*}{dz} - \psi_R^* \frac{d\psi_R}{dz} \right), & \text{если } k_z < 0; \end{cases} \quad (7.75)$$

Учитывая (7.73) и (7.74), придадим (7.72) вид:

$$J(z) = J_{12} + J_{21}, \quad (7.76)$$

$$\text{где } J_{12(21)} \equiv e \int_{0(-\infty)}^{\infty(0)} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} j_{12(21)}(k_z, z) N_{L(R)}(k) dk_z dk_x dk_y.$$

Проведя интегрирование по продольным проекциям волновых чисел k_x та k_y , а также заменив интегрирование по k_z на интегрирование по E_z , получим:

$$J_{12} = \frac{\sqrt{2}(m^*)^{3/2} e k_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3} \int_{U_{i0}}^{\infty} \frac{j_{12}(E_z(k_z), z)}{\sqrt{E_z - U_{i0}}} \ln \left(1 + e^{-\frac{E_z - (E_\Phi + U_1)}{k_B T}} \right) dE_z, \quad (7.77)$$

$$J_{21} = \frac{\sqrt{2}(m^*)^{3/2} e k_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3} \int_{U_{i5}}^{\infty} \frac{j_{21}(E_z(k_z), z)}{\sqrt{E_z - U_{i5}}} \ln \left(1 + e^{-\frac{E_z - (E_\Phi + U_N)}{k_B T}} \right) dE_z. \quad (7.78)$$

В силу выполнения закона сохранения заряда в квантовой механике

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

выполняется также и закон сохранения заряда в классической электродинамике, потому что он есть ничто другое как усреднения первого по всему ансамблю:

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \text{div} \mathbf{J} = 0. \quad (7.79)$$

Для стационарных процессов и транспорта вдоль оси Oz уравнение (7.79) сводится к уравнению $dJ/dz = 0$. Этим подтверждается, что (7.77) и (7.78) обеспечивают выполнение законов сохранения в любой точке структуры.

Покажем, как из (7.77) и (7.78) следует обычная формула Цу-Эсаки. Для этого найдем j_{12} в точке $z = z_5$ и j_{21} в точке $z = z_0$. Отметим, что для $z \geq z_5$ $\psi_L = t_L \exp(ik_R z)$, а для $z \leq z_1$ $\psi_R = t_R \exp(ik_L z)$. Из (7.75) имеем:

$$j_{12}(z_5) = \frac{\hbar k_R}{m^*} |t_L|^2, \quad (7.80)$$

$$j_{21}(z_0) = -\frac{\hbar k_L}{m^*} |t_R|^2. \quad (7.81)$$

Поскольку в (7.77) и (7.78) $1/\sqrt{E_z - U_{i0(5)}} = \sqrt{2m^*}/\hbar k_{L(R)}$, то с учетом (7.80) и (7.81):

$$\frac{j_{12(21)}}{\sqrt{E_z - U_{i0(i5)}}} = \pm \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{m^*}} \frac{k_{R(L)}}{k_{L(R)}} |t_{L(R)}|^2 = \pm \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{m^*}} T(E_z), \quad (7.82)$$

где $T(E_z) \equiv \frac{k_{L(R)}}{k_{R(L)}} |t_{R(L)}|^2$ – коэффициент прохождения.

Подставляя (7.82) в (7.77) и (7.78) и суммируя последние, получим формулу Цу-Эсаки :

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

где $T(E_z) \equiv \frac{k_{L(R)}}{k_{R(L)}} |t_{R(L)}|^2$ – коэффициент прохождения.

Для численного расчета лучше воспользоваться тем, что $|t_L(E_z)|^2 = |\Psi_N|^2$.

Подынтегральное выражение в формуле Цу-Эсаки имеет очень резкий резонансный характер за счет функции $T(E_z)$, поэтому интегрирование обычными численными методами крайне неэффективно. Следовательно, нужно использовать методы с адаптивным подбором шага, например алгоритм Симпсона (в *MatLab* реализуется функцией *quad*). График функции $T(E_z)$ в «адаптивных» точках изображен на рис. 7.17.

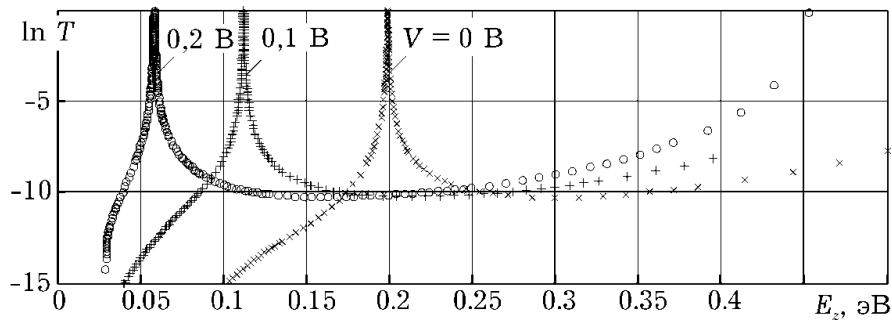


Рис. 7.17. Коэффициент прохождения через квантовую систему в релевантных для расчета ВАХ точках

Вольтамперная характеристика модельного РТД изображена на рис. 7.18. Ориентировочное время расчета 100 точек

ВАХ в *MatLab* без самосогласования составляет около 90 с, с самосогласованным – 3000 с.

Пользуясь формулой Цу-Эсаки, были рассчитаны ВАХ модельного РТД для случаев: а) напряжение на активной области падает линейно, б) потенциальный рельеф рассчитан самосогласованно. Результаты приведены на рис. 7.18.

Как видим, учет пространственного заряда приводит к увеличению пикового напряжения и уменьшению пикового тока. Это объясняется накоплением отрицательного пространственного заряда в спейсерах и квантовой яме, которая увеличивает потенциальную энергию электрона, тем самым "поднимая" все энергетические уровни в квантовой яме, а это смещает условие резонанса в сторону высших напряжений.

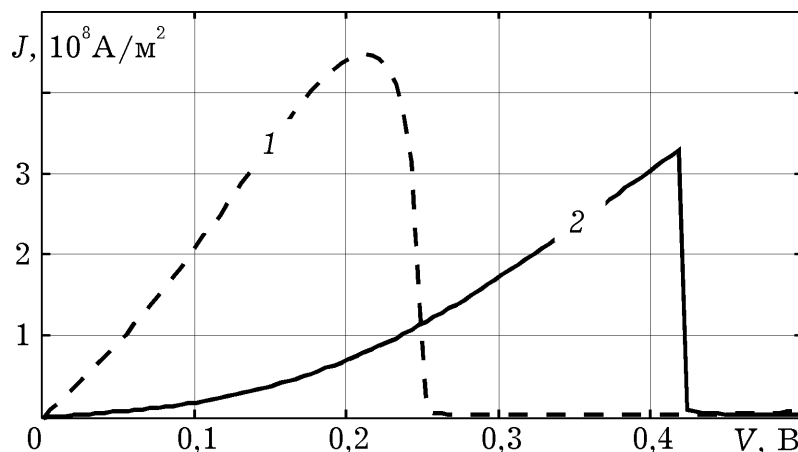


Рис. 7.18. Вольтамперные характеристики модельного РТД: 1 – в предположении линейного падения напряжения, 2 – рассчитанная с привлечением метода Хартри

7.3.4. Рассеивание в квантовой яме РТД

Представление об электронном транспорте в квантовой области, описанные в текущем разделе, иногда классифицируются как «динамическая модель» [7.31; 7.32], чтобы отличать от «кинетических» [7.31; 7.33], то есть таких, что основываются и выводятся из положений квантовой кинетики. Действительно, в активной области рассматривается движение каждого отдельного электрона в поле, которое обусловлено полем са-

мой кристаллической решетки и пространственного заряда. Это задача на движение отдельной частицы, и относится она к динамике, которая является разделом квантовой механики. При этом явления, которые обусловлены качественными отличиями между поведением отдельного электрона и большого электронного ансамбля, что является предметом кинетики, не рассматриваются.

По очерченным выше причинам учет процессов рассеивания в разработанной модели является чем-то не совсем естественным (поскольку выходит за рамки динамики), за что такие модели поддаются справедливой критике [7.34; 7.35]. Однако концептуальная простота модели делает привлекательным учет рассеивания в феноменологический, и, можно сказать, немного неестественный способ. Один из таких подходов описан ниже.

Если небольшая часть электронов испытывает рассеивание за время пребывания в квантовой области, то можно разделить ток J , который протекает через указанную область, на ток электронов, которые не испытали рассеивание или "когерентную" составляющую J_{coh} , и ток электронов, которые такие столкновения испытали или "некогерентную" составляющую J_{incoh} :

$$J = J_{coh} + J_{incoh}. \quad (7.83)$$

Электрон, который испытал рассеивание, выходит из когерентного канала и пополняет последовательный канал. Но как отобразить в рамках используемых представлений процессы такого перехода?

Для ответа на этот вопрос вспомним, что эрмитовость³ оператора Гамильтона обеспечивает выполнение закона сохранения потока плотности вероятности и закона непрерывности заряда (7.79). Суть перехода из когерентного в последовательный канал заключается в том, что когерентная составляющая тока должна уменьшаться в направлении про-

³ С точки зрения математики, квантовая механика – это алгебра самосопряженных («эрмитовских») операторов

текания тока. Если ток протекает в положительном направлении оси $0z$, то должно быть:

$$dJ_{coh}/dz < 0. \quad (7.84)$$

Учитывая (7.77) и (7.78), для выполнения (7.84) необходимо, чтобы было:

$$dj_{12}/dz < 0, \quad (7.85)$$

$$dj_{21}/dz > 0, \quad (7.86)$$

что возможно, только если оператор Гамильтона не является эрмитовым.

Сделать из эрмитового оператора неэрмитов очень просто: достаточно ввести в него мнимую величину $-iW$. Тогда оператор Гамильтона из уравнения Шредингера (7.49) приобретет вид:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m^*(z)} \frac{d}{dz} + U(z) - iW. \quad (7.87)$$

Для выяснения сути введенной величины $-iW$, которая называется *оптическим потенциалом*⁴, рассмотрим максимально простую задачу, а именно случай свободного электрона: $U(z) = U = \text{const}$. Поскольку любой потенциальный рельеф можно описать кусочно-постоянными функциями, то полученные результаты, можно считать универсальными и применимыми к произвольной форме $U(z)$.

Решением уравнения Шредингера в отмеченном случае является суперпозиция плоских волн:

$$\psi(z) = \underbrace{A \exp\{i\gamma z\}}_{\psi_{\rightarrow}} + \underbrace{B \exp\{-i\gamma z\}}_{\psi_{\leftarrow}}, \quad (7.88)$$

⁴ Такое название обусловлено областью науки, в которой был использован подобный прием для учета поглощения света; позже этот способ был использован Фешбахом, Портером и Вайскопфом при описании процессов протекания ядерных реакций. Он вполне аналогичный рассматриваемому здесь

где $\pm\gamma \equiv \pm(k + i\alpha) = \frac{\sqrt{2m^*(E - U + iW)}}{\hbar}$, то есть k – это действительная часть волнового вектора; α – мнимая.

Для электрона, который движется в положительном направлении оси $0z$, $\psi_{\rightarrow} = A \exp\{i\gamma z\}$, – волна, соответствующая падающему электрону, $\psi_{\leftarrow} = B \exp\{-i\gamma z\}$, – волна, соответствующая отраженному электрону.

Простые вычисления дают следующее выражение для плотности вероятности в падающей $\psi_{\rightarrow}(z)$ и отраженной $\psi_{\leftarrow}(z)$ волнах, а также в волновой функции $\psi(z)$:

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

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

Элементарный электрический ток, который создает падающий и отраженный электроны в направлении движения соответствующей частицы уменьшаются, о чем свидетельствуют знаки соответствующих производных:

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

Таким образом, мы получили желаемый характер пространственной зависимости тока (см. (7.84)). Отметим, что на расстоянии $L = 1/(2\alpha)$ элементарный ток, создаваемый падающей и отраженной частицей, уменьшается в $e \approx 2.7$ раз. Это расстояние можно назвать длиной релаксации фазы.

Мнимая часть волнового вектора

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

где $a = \sqrt{2m^*(E_z - U)} / \hbar$; $b = \sqrt{2m^*W} / \hbar$, монотонно возрастает с ростом оптического потенциала W , что следует из приведенной формулы.

Метод расчета величины W основывается на том, что ей сопоставляют некоторое характерное время (чаще всего – время релаксации импульса) в соответствие с формулой: $W = \hbar / 2\tau_p$. Таким образом, с увеличением скорости рассеивания $\nu \equiv 1 / \tau_p$ оптический потенциал тоже растет, что уменьшает длину L , то есть увеличивает интенсивность процессов перехода электронов из когерентного канала в некогерентный.

Для оценки времени релаксации импульса электрона в активной области устройства с поперечным транспортом можно использовать время релаксации импульса в трехмерном полупроводнике.

Таким образом, введение в гамильтониан оптического потенциала iW позволяет моделировать процессы уменьшения когерентной составляющей электрического тока по мере движения электронов от одного электрода к другому. Однако это нарушает закон непрерывности заряда, если считать, что когерентный канал – единственный канал переноса. Поэтому вводят уже упомянутый некогерентный канал, плотность тока в котором обозначена через J_{incoh} (7.83). Закон сохранения тока требует выполнения равенства $j = j_{incoh}(z) + j_{incoh}(z)$ в каждой точке устройства, где j – элементарный ток, создаваемый одним электроном. Однако найти способ нахождения $j_{incoh}(z)$, который бы удовлетворял этому условию, пока что не удалось⁵. Обычно используется подход, который базируется на модели единичного рассеивателя [7.36], впоследствии развитый в работах [7.37; 7.38; 7.1]. Согласно этому подходу при расчете тока считается, что в яме резонансно-туннельного диода содержится один единственный центр рассеивания, при прохождении которого часть когерентного тока скачкообразно уменьшается на величину A :

⁵ этот факт в большинстве работ, где используется оптический потенциал, замалчивается, что можно рассматривать как нарушение научной этики

$$A = 1 - T_{coh} - R_{coh}, \quad (7.89)$$

где R_{coh} – коэффициент отражения от квантовой системы. Отметим, что при $W \neq 0$ $T_{coh} < 1 - R_{coh}$, что всегда имеет место для диссипативных систем; если же рассеивание отсутствует ($W = 0$) $T_{coh} = 1 - R_{coh}$ и $A = 0$, что справедливо для систем без потерь.

В дальнейшем полагают, что каждый электрон, испытавший рассеивание, будет некоторое время двигаться в квантовой яме до тех пор, пока не выйдет через один из барьеров. Вероятность его выхода через правый барьер равняется $T_R/(T_L + T_R)$, где $T_{R(L)}$ – коэффициент прохождения правого (левого) барьера. Положения центра рассеивания во всех известных работах выбирают посередине квантовой ямы. Эта точка условно делит квантовую систему на левую и правую части. Коэффициенты прохождения $T_{R(L)}$ суть коэффициенты прохождения левой и правой подсистемы отдельно. Способ нахождения этих коэффициентов не отличается от уже обсуждавшегося.

Таким образом, вероятность для электрона, который эмитировал из левого резервуара, достичь правого при условии рассеяния в некогерентный канал $A T_R/(T_L + T_R) \equiv T_{incoh}$ ⁶. Вероятность того, что электрон достигнет правого резервуара через когерентный канал, равняется T_{coh} . Поскольку эти два события взаимоисключающие, вероятность достижения правого резервуара любым из двух способов определяются выражением:

$$T(E_z) = T_{coh} + (1 - R_{coh} - T_{coh}) \frac{T_R}{T_R + T_L}. \quad (7.90)$$

Следует еще раз отметить, что такой способ учета рассеяния нарушает физичность модели, а именно не обеспечивает выполнения закона непрерывности полного тока (7.79) по всей длине квантовой области. Его использование объясняется

⁶ вероятность события «А» при условии события «Б» $p_{A|B}$ равна произведению безусловных вероятностей: $p_{A|B} = p_A p_B$, что и было здесь использовано

простотой, однако не отличается высокой адекватностью, поэтому время рассеивания τ_p обычно играет роль подгоночного параметра.

На рис. 7.19, а изображена зависимость суммарного коэффициента передачи $T(E_z)$ и его составляющих - вероятности когерентного $T_{coh}(E_z)$ и некогерентного $T_{incoh}(E_z)$ прохождения. Время релаксации τ рассчитывалось по формуле [7.1]:

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

где $\hbar\omega_{op} = 0.036$ эВ - энергия полярных оптических фононов в GaAs; $S_{op} = 36 \cdot 10^{12} \text{ с}^{-1}$ - скорость рассеивания.

Видно, что функция $T(E_z)$ размывается, то есть рассеивание расширяет границы спектра электронов, которые могут пройти сквозь ДБКС.

Учет рассеивания приводит к ожидаемому изменению формы ВАХ. На рис. 7.19, б приведена ВАХ, рассчитанная с учетом рассеивания (параметры которого указаны выше). Заметно, что рассеивание приводит к увеличению тока приблизительно на порядок и росту пикового тока на 20%. Кроме того, уменьшается величина отрицательной дифференциальной проводимости. Эти изменения объясняются появлением нового канала передачи с более широкой спектральной полосой.

Следует отметить, что сходимость линеаризованного метода Гумеля значительно замедляется в области отрицательной дифференциальной проводимости (ОДП) по сравнению с областями положительной дифференциальной проводимости (ПДП). Для достижения точности 10^{-4} эВ в области ОДП нужно в среднем 30 итераций, тогда как в области ПДП среднее количество таких итераций составляет 10. При этом если не уменьшить абсолютную погрешность вычисления интеграла концентрации до 10^{17} м^{-3} , алгоритм Гумеля вообще может не сойтись; при этом одни и те же приближения самосогласованного потенциала повторяются через одну (иногда - две, три) итерации, так и не достигая заданной точности. Это значит,

что незначительные изменения концентрации электронов в активной области РТД приводят к значительным изменениям самосогласованного потенциала, который определяет ток. Отсюда можно сделать вывод, что в переходных процессах, где распределение объемного заряда во времени изменяется, область ОДП будет областью нестабильности, поскольку при одном и том же напряжении при почти одинаковых концентрациях ток может сильно отличаться. Описанное явление действительно наблюдается на практике [7.39].

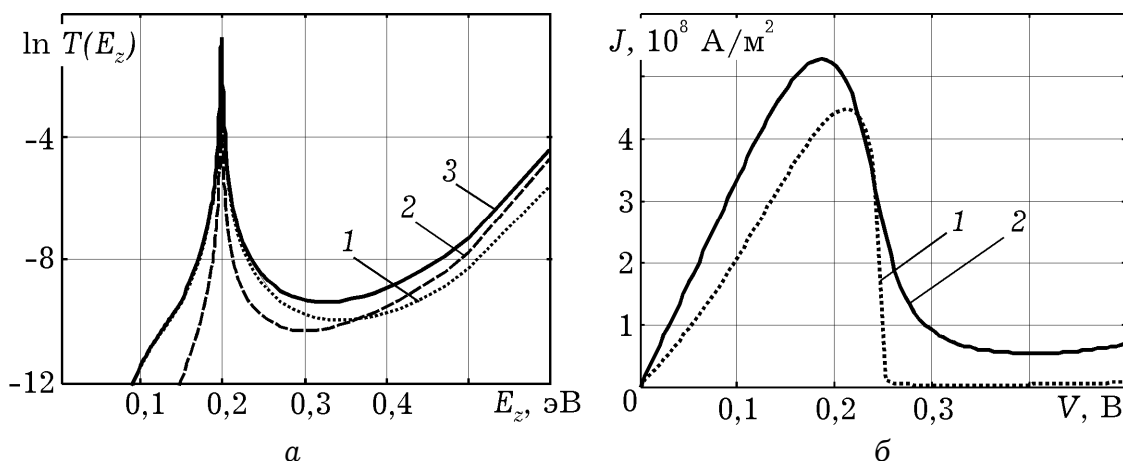


Рис. 7.19. Влияние рассеивания на характеристики РТД: а) коэффициенты прохождения ($V = 0$): 1 – T_{incoh} , 2 – T_{coh} , 3 – $T \equiv T_{incoh} + T_{coh}$; б) вольтамперные характеристики без (1) и с учетом рассеивания (2). Моделирование проводилось несамосогласованно

7.3.5. Влияние вторичных факторов на характеристики РТД

Сопротивление приконтактных областей. При рассмотрении физических процессов в квантовой области достаточно обоснованным является предположение о том, что высоколегированные приконтактные и контактные области – идеально проводящие. Однако даже поверхностный анализ экспериментальных вольтамперных характеристик резонансно-туннельных диодов убеждает, что сопротивление пассивных областей РТД, включая сопротивление высоколегированных слоев и контактов, существенно влияет на вид ВАХ. В частности, пик тока на экспериментальных ВАХ наблюдается при значительно высших напряжениях, чем это допускают любые оценки, которые осуществлены при пренебрежении влияния

указанного фактора [7.40; 7.41]. Так, Цу отмечал [7.42 с. 61], что первый пик ВАХ должен наблюдаться при напряжении $V = 2E_1 / e$, где E_1 – положение первого метастабильного уровня в квантовой яме. Применяя эту приближенную формулу к РТД, описанному в [7.41], яма и барьеры которого изготовлены из слоя GaAs шириной 45 Å и слоев AlAs шириной 17 Å, соответственно, получаем оценку пикового напряжения порядка $2 \cdot E_1 \approx 0,3$ В в то время как экспериментальная ВАХ подтверждает наличие такого пика при напряжении 2,5 В при одной полярности напряжения и около 1 В – при другой, что подтверждает тезис о необходимости учета особенностей топологии, которые влияют на сопротивление контактных и приконтактных слоев.

Поскольку сопротивление самих контактов зависит от топологии конкретного РТД, его следует рассчитывать для каждого устройства отдельно. Унифицировано можно попытаться описать лишь приконтактные высоколегированные области. Обычно можно считать, что высоколегированные области имеют такую же площадь, что и слои РТД. Пусть имеем всего M таких областей; для каждой i -й области известна ее ширина (L_i) и концентрация ионизированных доноров (N_i). Падение напряжения на i -й области составляет:

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

где $R_{s,i}$ – погонное сопротивление, J – плотность тока, который протекает через РТД; $R_{s,i} = \rho_i L_i$, где ρ_i – удельное сопротивление. Удельное сопротивление однородного массивного полупроводника может быть определено из известного соотношения:

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

где μ_i – подвижность электронов в i -м слое. Воспользовавшись ею, получим уравнение, в соответствии с которым сле-

дует пересчитывать теоретические вольтамперные характеристики с учетом влияния высоколегированных областей:

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

где V_{Σ} – напряжение, измеряемое в эксперименте, $V_{\text{DBQS}}(J)$ – рассчитанная ВАХ активной части РТД. Из этой формулы следует, что с увеличением сопротивления высоколегированных областей пиковое напряжение смещается в область высоких напряжений быстрее, чем напряжение долины. Это приводит к увеличению отрицательного дифференциального сопротивления. Это также может привести к возникновению гистерезиса, если величина паразитного сопротивления превысит определенное значение. Гистерезис ВАХ действительно наблюдается на практике [7.43; 7.44], однако описанный механизм его формирования не является единственно возможным.

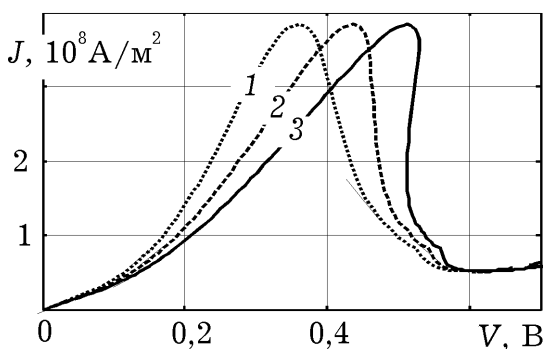


Рис. 7.20. Влияние величины погонного сопротивления пассивных областей РТД R_s на ВАХ РТД: 1 – $R_s = 0$; 2 – $R_s = 40$ Ом мкм², 3 – $R_s = 20$ Ом мкм²

на 1,4 В превышает это же напряжение при другой полярности и достигает 2,5 В. При этом характер зависимости не может быть объяснен, если считать, что сопротивление контактных областей линейно.

Форма разрывов зон. Выше принималось предположение о том, что потенциальная энергия электрона в зоне проводимости

Влияние паразитных сопротивлений на ВАХ РТД отображено на рис. 7.20. При плохом качестве контактов сопротивление паразитных областей может оказаться нелинейным, что, согласно экспериментальным данным, имеет место, например в [7.40] и [7.41], в которых пиковое напряжение на ВАХ при одной из полярностей напряжения источника питания

мости испытывает скачкообразное изменение на гетерограницах и приводит к формированию прямоугольных потенциальных ям и барьеров. Такое предположение достаточно хорошо обосновано, если размеры слоев значительно больше периода кристаллической решетки. Однако это условие не выполняется для рассматриваемых структур.

Другой способ аппроксимации разрывов зон можно предложить, исходя из результатов, полученных методом псевдопотенциалов [7.45], в рамках которого было показано, что более физической является двухступенчатая аппроксимация. При этом считается, что потенциал изменяется резко, однако в два этапа (рис. 7.21, а). Такая аппроксимация, вероятно, является более корректной, поскольку основывается на более адекватных методах расчета зонной структуры, чем метод огибающей волновых функций позволяет в принципе.

Учет реальной формы барьеров приводит к увеличению плотности тока через резонансно-туннельный диод за счет повышения проницаемости барьеров (рис. 7.21, б).

Точность и адекватность описанных моделей можно повысить за счет реализации следующих шагов:

- 1) для описания кинетики электронного коллектива в резервуарах использовать кинетическое уравнение Больцмана вместо предположения о локальном равновесии [7.46];

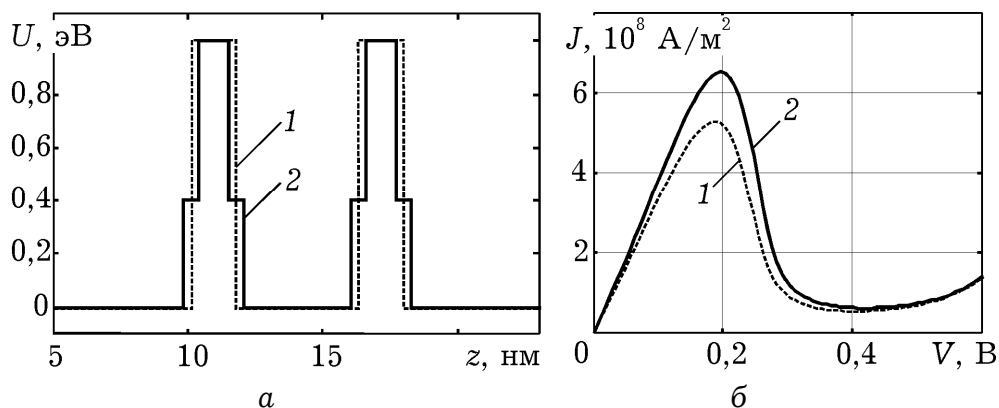


Рис. 7.21. Стандартная (1) и «сверхрешеточная» (2) модели гетерограницы: а) профиль зоны проводимости в Γ -долине, б) результаты моделирования ВАХ

- 2) учет непараболичности закона дисперсии [7.41];
- 3) упразднение предположения о мгновенной термализации электронов в резервуарах;
- 4) учет токопереноса через метастабильные состояния в эмиттерной квантовой яме [7.47];
- 5) если эффективные массы в эмиттере и квантовой яме отличаются (или если учитывается непараболичность законов дисперсии), выражение для расчета тока не сводится к формуле Цу-Эсаки; возникает необходимость проводить численное интегрирование также по составляющей $k_{\parallel} = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ [7.48] или же использовать приближенные формулы для плотности тока [7.49], которые учитывают отличие эффективных масс.

Отдельно следует выделить способы повышения адекватности, которые базируются на учете транспорта с участием высших долин. В случае если направлением роста гетероструктуры является [100], для GaAs/AlAs РТД релевантной будет X-долина.

7.4. ДВУХДОЛИННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Все полученные выше результаты основывались на предположении, что участие в переносе заряда принимают исключительно электроны Γ -долины, а высшие долины незаселены.

Известно, что междолинные переходы в полупроводниках становятся существенными в сильных полях [7.18 с. 89], которые преимущественно не имеют места в резонансно-туннельных диодах. Однако в полупроводниковых гетероструктурах возможен другой тип междолинных переходов – *упругое междолинное рассеивание на гетерограницах* или «смешивание электронных состояний».

Для гетероструктур $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ при $x > 0,45$ в барьерных слоях самой низкой долиной становится X-долина (рис. 2.14). Для двухбарьерной квантовой системы AlAs/GaAs

потенциальный рельеф каждой из долин приобретет вид, изображенный на рис. 7.22.

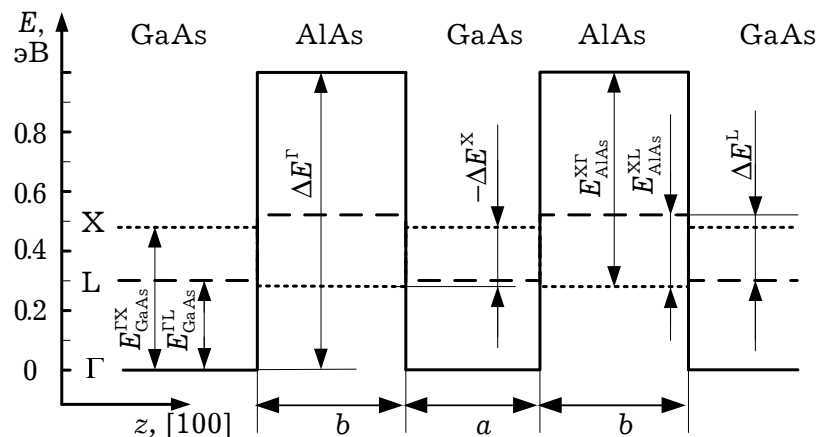


Рис. 7.22. Параметры зоны проводимости AlAs/GaAs РТД

Величины междолинных расстояний и разрывов зон представлены в табл. 7.1.

Таблица 7.1.

Параметры зонной структуры гетероперехода AlAs/GaAs, взятые преимущественно из [7.50] и [7.51].

Разрывы зон, эВ	Междолинные расстояния, эВ	
	GaAs	AlAs
$\Delta E_{\Gamma} = 1$	$E_{\text{GaAs}}^{\Gamma\text{X}} = 0.49$	$E_{\text{AlAs}}^{\text{X}\Gamma} = 0.73$
$\Delta E_{\text{X}} = -0.24$	$E_{\text{GaAs}}^{\Gamma\text{L}} = 0.29$	$E_{\text{AlAs}}^{\text{X}\text{L}} = 0.23$
$\Delta E_{\text{L}} = 0.21$		

Слои РТД чаще всего выращиваются в направлении [100]. Именно в направлении [100] электроны ускоряются внешним полем, которое увеличивает компоненту $k_{[100]}$ волнового вектора (в наших обозначениях – k_z).

Из рис. 2.11 видно, что на гетерограницах наиболее благоприятные условия создаются для перехода электронов из Γ -долин GaAs в X-долины AlAs, но не во все, а лишь в две из них, которые ориентированы вдоль кристаллографического

направления $[100]$ ⁷. Переход в X-долины, которые ориентированы в направлениях $[001]$ и $[010]$, маловероятен, поскольку распределение электронов по импульсам $\hbar k_{[001]}$ и $\hbar k_{[010]}$ остается равновесным (продольное поле отсутствует). По тем же причинам невыгодны также переходы в L-долины, ориентированные в направлении $[111]$ и эквивалентных. Это подтверждается расчетами в рамках полуэмпирического метода сильной связи [7.4] и свидетельствует в пользу пренебрежения всеми междолинными переходами кроме Γ -X. Все последующие выводы справедливы для гетероструктуры со слоями AlAs-GaAs, выращенной на подложке с кристаллографической ориентацией $[100]$.

Большинство предположений, принятых в однодолинной модели, остаются в силе и для двухдолинной модели. Отличие заключается в рассмотрении электронов X-долины. Для упрощения считается, что X-долины в резервуарах не заселены. Электроны из X-долины, которые попадают в резервуары из квантовой области, мгновенно переходят в Γ -долину и термализируются.

Считая ψ^Γ и ψ^X известными, построим самосогласованную модель, аналогичную описанной в разд. 7.3. Распределение концентрации и ток через РТД изменяются с учетом возможности движения электронов в квантовой области как в Γ -, так и в X-долинах. Поскольку мы учитываем электроны из двух долин, то концентрация всех электронов в квантовой области является суммой концентраций электронов в Γ - и X-долинах (n^Γ и n^X соответственно) которые находятся по формулам, которые являются простым обобщением формул, полученных для однодолинной модели:

$$n = n^\Gamma + n^X \quad (7.91)$$

где

$$n^{\Gamma(X)} = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi^{\Gamma(X)}(\mathbf{k})|^2 N(\mathbf{k}) dk_x dk_y dk_z, \quad (7.92)$$

⁷ каждая из этих X-долин лишь наполовину находится в первой зоне Бриллюэна

Здесь $N(\mathbf{k}) = N^\Gamma(\mathbf{k}) + N^X(\mathbf{k})$, где $N^{\Gamma(X)}$ – функция распределения электронов в $\Gamma(X)$ долине левого (если $k_z > 0$) или правого (если $k_z < 0$) резервуаров. Согласно принятым предположениям $N^X = 0$.

Формулы для концентрации и тока в двухдолинной модели имеют вид:

$$n = n_L^\Gamma + n_R^\Gamma + n_L^X + n_R^X,$$

где:

$$n_{L(R)}^\Gamma = N'_c \int_{U_{i0}(U_{i5})}^{\infty} \frac{|\Psi_{L(R)}^\Gamma|^2}{\sqrt{E_z - U_{i0(i5)}^\Gamma}} \ln \left(1 + e^{-\frac{E_z - (E_\Phi + U_{1(N)}^\Gamma)}{k_B T}} \right) dE_z, \quad (7.93)$$

$$n_{L(R)}^X = N'_c \int_{U_{i0}(U_{i5})}^{\infty} \frac{|\Psi_{L(R)}^X|^2}{\sqrt{E_z - U_{i0(i5)}^\Gamma}} \ln \left(1 + e^{-\frac{E_z - (E_\Phi + U_{1(N)}^\Gamma)}{k_B T}} \right) dE_z; \quad (7.94)$$

$$J = \frac{2m^* e k_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3} \int_{\max(U_{i5}, U_{i0})}^{\infty} T(E_z) D(E_z) dE_z, \quad (7.95)$$

Неизвестными в (7.93)–(7.95) пока еще являются волновые функции и коэффициент передачи.

Поскольку X-долины в резервуарах считаются незаселенными

$$\psi_I^X = 0, \text{ если } z < z_1$$

где z_1 – левая граница квантовой области (правую будем обозначать через z_5). Индексами I, II, III будем обозначать, соответственно, левый резервуар, квантовую область и правый резервуар. Под ψ , пока не будет оговорено другое, следует понимать волновую функцию электронов, которые налетают на квантовую область из левого резервуара.

Электрону в левом резервуаре (I область) соответствует суперпозиция падающей и ой плоских волн:

$$\psi_I^\Gamma = \exp(ik_L^\Gamma z) + r \exp(-ik_R^\Gamma z).$$

Если учитывать смешивание состояний в квантовой системе, на выходе из нее в точке $z = z_5$ электрону будет соответствовать уже две волны:

$$\psi_{\Gamma}^{\text{III}} = t_{\Gamma\text{X}\Gamma} \exp(ik_{R,\Gamma}z), \quad (7.96)$$

$$\psi_{\text{X}}^{\text{III}} = t_{\Gamma\text{X}} \exp(ik_{R,\text{X}}z), \quad (7.97)$$

где $k_R^{\Gamma(\text{X})} = \sqrt{2m_{\text{III}}^{\Gamma(\text{X})}(E_{\Gamma(\text{X})} - U_{\Gamma(\text{X})})} / \hbar$ – волновой вектор электрона в $\Gamma(\text{X})$ -долине, $m_{\text{III}}^{\Gamma(\text{X})}$ – эффективная масса электрона в $\Gamma(\text{X})$ -долине в III области $t_{\Gamma\text{X}\Gamma}$, $t_{\Gamma\text{X}}$

Вероятность того, что электрон, пройдя через квантовую систему, окажется в Γ -долине, уже рассчитывалась в однодолинной модели (формула (7.20)) и называлась просто «коэффициент прохождения». Для двухзонной модели (7.20) запишется так:

$$T_{\Gamma\text{X}\Gamma} = |t_{\Gamma\text{X}\Gamma}|^2 \frac{|k_{\text{III}}^{\Gamma}|}{|k_{\text{I}}^{\Gamma}|} \frac{m_{\text{I}}^{\Gamma}}{m_{\text{III}}^{\Gamma}},$$

Вероятность того, что электрон, пройдя через квантовую систему, выйдет через X-долину, рассчитывается аналогично. Формула имеет вид:

$$T_{\Gamma\text{X}} = |t_{\Gamma\text{X}}|^2 \frac{|k_{\text{III}}^{\text{X}}|}{|k_{\text{I}}^{\Gamma}|} \frac{m_{\text{I}}^{\Gamma}}{m_{\text{III}}^{\text{X}}}.$$

Поскольку события «электрон выйдет через Γ -долину» и «электрон выйдет через X-долину» взаимоисключающие, соответствующие вероятности суммируются:

$$T = T_{\Gamma\text{X}\Gamma} + T_{\Gamma\text{X}}. \quad (7.98)$$

В формулах (7.96) и (7.97) остаются неизвестными постоянные интегрирования уравнения Шредингера. Кроме того неизвестными остаются волновые функции, необходимые для

расчета концентрации. Их поиск является основной проблематикой двухдолинного моделирования.

В работе [7.52], основываясь на экспериментальных данных и расчетах, проведенных в рамках модели сильной связи, предложен метод расчета огибающих одноэлектронных волновых функций ψ_{Γ} и ψ_X . Последующее развитие он получил в [7.53], был теоретически обоснован в [7.54 с. 50] и в дальнейшем применялся в «комбинированных» моделях РТД [7.55].

Для учета Γ -X интерфейсного смешивания в уравнение Шредингера для электрона из $\Gamma(X)$ -долины

$$\hat{H}_{\Gamma(X)}\psi_{\Gamma(X)} = E_{z,\Gamma(X)}\psi_{\Gamma(X)} \quad (7.99)$$

слева вводится член $\alpha^{(*)}\cdot\delta(z_k)\cdot\psi_{\Gamma(X)}$, что дает:

$$\hat{H}_{\Gamma(X)}\psi_{\Gamma(X)} + \alpha^{(*)}\delta(z_k)\psi_{X(\Gamma)} = E_{z,\Gamma(X)}\psi_{\Gamma(X)}, \quad (7.100)$$

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

эффективная масса электрона в Γ -долине, m_X^* - продольная⁸ эффективная масса в X-долине; z_k - координаты гетерограниц, δ - дельта-функция Дирака; α [эВ·Å] - константа междолинной связи, в общем случае комплексная величина. Для пары GaAs/AlAs значение α , согласующееся с расчетами методом псевдопотенциалов, составляет: $\alpha = 0.1$ эВ·Å [7.52]. Также использовались значения $\alpha = 0.15$ эВ·Å [7.53] и $\alpha = 0.45$ эВ·Å [7.55]; объективные причины выбора таких значений не указываются.

Чтобы понять сущность этого метода, запишем оба уравнения (7.100) в матричном виде:

⁸ напомним, что X-долины, в которые возможны переходы, ориентированы вдоль направления [100], поэтому масса в z -направлении, которая должна использоваться для расчетов, равна продольной массе в X-долине m_X^l . Исчерпывающее обоснование см. в [7.17]

$$\begin{aligned}
& \left[\begin{array}{cc} -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m_\Gamma^*} \frac{d}{dz} & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m_X^*} \frac{d}{dz} \end{array} \right] \begin{bmatrix} \Psi_\Gamma \\ \Psi_X \end{bmatrix} + \\
& + \left[\begin{array}{cc} U_\Gamma - E + \frac{\hbar^2 k_\parallel^2}{2m_\Gamma^*} & \alpha \delta(z_k) \\ \alpha^* \delta(z_k) & U_X - E + \frac{\hbar^2 k_\parallel^2}{2m_X^*} \end{array} \right] \begin{bmatrix} \Psi_\Gamma \\ \Psi_X \end{bmatrix} = 0.
\end{aligned} \tag{7.101}$$

Видно, что при $\alpha = 0$ (7.101) сводится к двум независимым уравнениям Шредингера для X- и Γ -долин. Но при $\alpha \neq 0$ в точках, которые есть гетерограницями, «включается» взаимодействие между X- и Γ -долинами, и происходит смешивание электронных состояний

Из уравнения (7.101) следует, что на волновую функцию на гетерограницах налагаются такие граничные условия:

$$\Psi_{\Gamma(X)}(z_{k-}) = \Psi_{\Gamma(X)}(z_{k+}), \tag{7.102}$$

$$\frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{1}{m_{\Gamma(X)}^*} \Psi'_{\Gamma(X)}(z_{k-}) - \frac{1}{m_{\Gamma(X)}^*} \Psi'_{\Gamma(X)}(z_{k+}) \right] + \alpha^{(*)} \Psi_{X(\Gamma)}(z_k) = 0, \tag{7.103}$$

где штрихом обозначено дифференцирование по z . Выражения (7.101) и (7.103) при $\alpha = 0$ сводятся к обычным граничным условиям отдельно для Ψ_Γ и Ψ_X .

Используя (7.102) и (7.103) можно построить метод матриц передачи и другие условно-аналитические методы нахождения коэффициента прохождения, — так же, как это было сделано для одиодолинной модели в разд. 7.2.

В приложении П7.2 описана трехточечная конечно-разностная схема, которая соответствует (7.101) для всех внутренних точек. Уравнения, замыкающие схему, для Ψ_Γ такие же, как для однодолинной модели (см. приложение П7.3). Для Ψ_X способ получения уравнений, замыкающих КРС, аналогичен; следует лишь учесть, что в X-долине амплитуда волны, соответствующая налетающему электрону, нулевая,

что отображает предположение о незаселенности X-долины в резервуарах.

Неизвестные постоянные интегрирования $t_{\Gamma X}$ и $t_{X\Gamma}$, используемые для расчета коэффициента прохождения, находят, исходя из того, что $|t_{\Gamma X}(E_z)|^2 = |\Psi_N^\Gamma|^2 |t_{\Gamma X}(E_z)|^2 = |\Psi_N^X|^2$, где $\Psi_N^{\Gamma(X)}$ – волновые функции электрона из левого резервуара на границе квантовой области и правого резервуара.

Процесс нахождения самосогласованного потенциала для двухдолинной модели принципиально не отличается от алгоритма, который описан для однодолинной (разд. 7.3.3), и является его простым обобщением.

Функция прохождения электрона через квантовую область РТД $T(E_z)$ при учете Γ -X рассеивания испытывает качественные изменения, которые представляют интерес как с фундаментальной, так и с прикладной точки зрения (рис. 7.23).

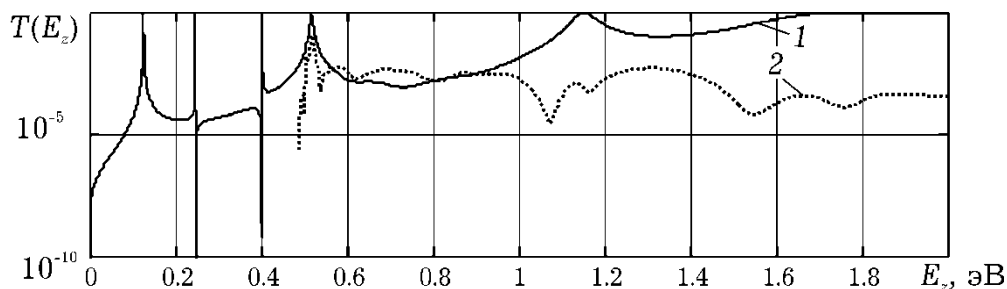


Рис. 7.23. Коэффициент прохождения $T(E_z)$ в двухдолинном приближении (1 – $T_{\Gamma X}$, 2 – $T_{X\Gamma}$) при нулевом напряжении, моделирование несамосогласованное

Резонансный характер, свойственный однодолинной функции передачи, в целом сохраняется (рис. 7.24). Однако появляются дополнительные резонансы и антирезонансы с несимметричным профилем. Известно, что резонансы такого типа могут проявляться в физических системах разнообразной природы; их общее название – резонансы Фано [7.]56). Они возникают, когда имеет место интерференция двух волновых процессов. В данном случае речь идет об интерференции состояний электрона из Γ - и X-долин (в терминах квантовой механики можно сказать, что электрон с энергией E_z

находится в состоянии, которое является суперпозицией состояний в Γ - и X -долинах).

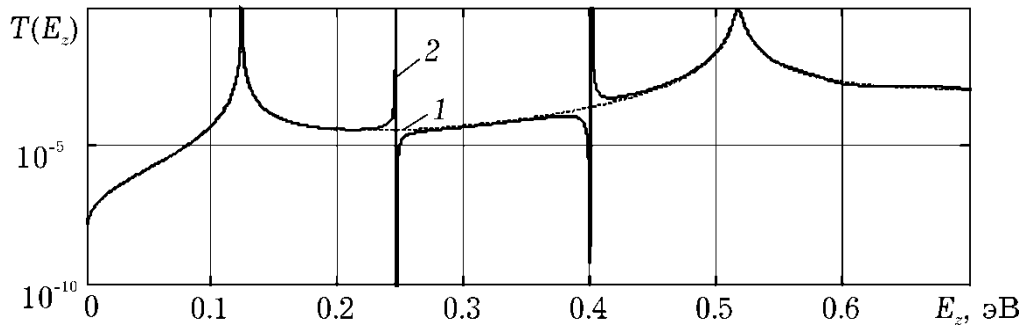


Рис. 7.24. Коэффициент прохождения из Γ в Γ долину: 1 – рассчитанный в рамках однодолинной, 2 – двухдолинной модели. Расчеты осуществлялись методом матриц передачи при нулевом напряжении

Ключом к пониманию зависимости $T(E_z)$ являются графики, изображающие распределение плотности электронных состояний в Γ - и X -долинах, $g_{\Gamma(X)}(E_z)$ – рис. 7.26, а(б). Из них видно, что более широкие максимумы коэффициента прохождения (1-й и 4-й) соответствуют метастабильным состояниям в квантовой яме, которая формируется в Γ -долине; узкие несимметричные резонансы и антирезонансы (2-й и 3-й максимумы и минимумы, следующие за ними) наблюдаются при энергиях, которые соответствуют метастабильным уровням в квантовой яме, которая формируется в X -долине.

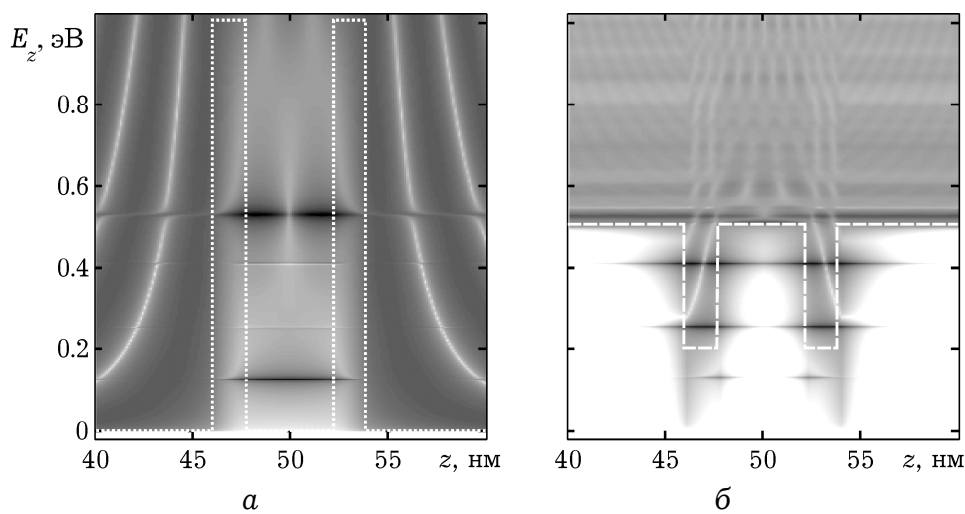


Рис. 7.25. Плотность электронных состояний в Γ - (а) и X -долинах (б). Более темные градации серого соответствуют большей плотности состояний в логарифмическом масштабе

Обнаруженные метастабильные уровни являются дополнительными каналами переноса тока через указанную структуру. На вольт-амперной характеристике учет Γ - X -рассеивания не вызывает появления дополнительных пиков, хотя если бы параметр α имел большее значение, это вполне могло наблюдаться, как это показано в [7.55]. Напротив, наблюдается повышение плотности тока как в долине, так и в пике ВАХ, что обычно приближает результаты моделирования к значениям тока, которые наблюдаются на практике (рис. 7.26).

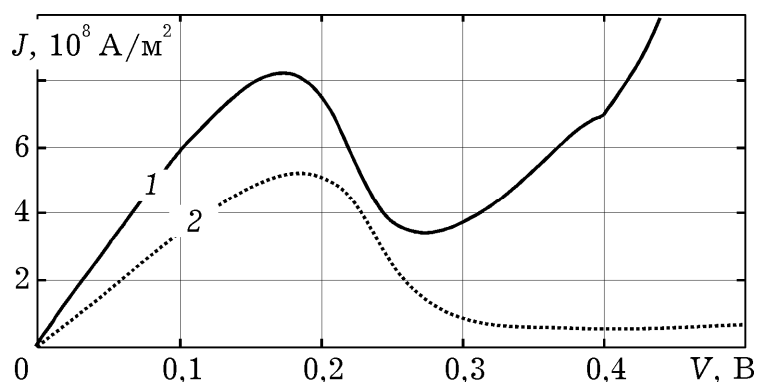


Рис. 7.26. ВАХ РТД при однодолинном (2) и двухдолинном (1) не-самосогласованном моделировании, параметр $\alpha = 1$ эВ \AA

7.5. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ВЕРИФИКАЦИЯ МОДЕЛЕЙ

В [7.57] был описан процесс изготовления резонансно-тоннельного диода (далее — РТД1) методом молекулярно-лучевой эпитаксии и результаты измерения его вольтамперных характеристик при температуре 77 К. РТД1 изготовлен на GaAs-подложке, легированной донорной примесью, концентрация которой составляет $2 \cdot 10^{24} \text{ м}^{-3}$. На подложку нанесен высоколегированный слой GaAs толщиной 1 мкм, за которым следуют нелегированные слои AlAs/GaAs. Верхний слой состоит из высоколегированного GaAs толщиной 0,5 мкм. Нелегированная часть состоит из спейсеров (5 и 10 нм *i*-GaAs), которые предотвращают диффузию примеси в барьерные слои и накопление электронов вблизи двухбарьерной квантовой си-

стемы. Последняя образована одинаковыми барьерными AlAs-слоями толщиной по 3 нм, окружающими 3-нм слой GaAs, в котором формируется квантовая яма (рис. 7.27). Площадь мезоструктуры составляет 16×16 мкм.

Экспериментальная вольт-амперная характеристика (рис. 7.28), измеренная при температуре 77 К, демонстрирует пиковое значение тока $J_p = 2,4 \cdot 10^6$ А/м² при напряжении $V_p = 0,42$ В. Значения тока и напряжения в долине ВАХ составляют, соответственно, $1 \cdot 10^6$ А/м² и 0,46 В.

Для сравнения ВАХ РТД1 с данными эксперимента использована численная двухдолинная модель. Исходные данные для нее взяты из рис. 7.28, а также из табл. 7.2. Параметры выбирались преимущественно из электронного справочника Физико-технического института им. Иоффе [7.51] и не изменялись с целью лучшего согласования с экспериментальными данными. Однако было использовано другие два согласующих параметра, а именно: для согласования ВАХ по пиковому току все рассчитанные значения тока делись на 4,3. Для согласования по пиковым напряжениям вся экспериментальная кривая сдвинута на 0,1 В вправо. Аргументацией введения этих параметров является, соответственно, неизвестная точно площадь и уровень легирования резервуаров и неопределенность величины и зависимости от напряжения сопротивления пассивных областей. Однако авторы не настаивают, что именно эти факторы вызывают расхождение экспериментальных и теоретических ВАХ.

	<i>n</i> -GaAs (2×10^{24} м ⁻³ , 500 нм)
	<i>n</i> -GaAs (2×10^{23} м ⁻³ , 50 нм)
	<i>i</i> -GaAs (5 нм)
///	<i>i</i> -AlAs (3 нм)
	<i>i</i> -GaAs (4 нм)
///	<i>i</i> -AlAs (3 нм)
	<i>i</i> -GaAs (10 нм)
	<i>n</i> -GaAs (2×10^{24} м ⁻³ , 1000 нм)

Рис. 7.27. Толщина, химический состав слоев и концентрация донорной примеси в РТД1

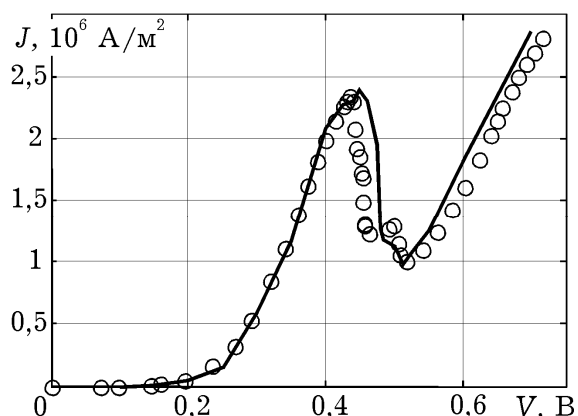


Рис. 7.28. Вольтамперная характеристика РТД1, рассчитанная с помощью двухдолинной самосогласованной модели с использованием двух «подгоночных» параметров (сплошная линия) отлично совпадает с экспериментальной кривой (кружки)

Таблица 7.2

Физико-топологические параметры AlAs/GaAs РТД

параметр	значение	параметр	значение
$T, \text{ К}$	77	m_{GaAs}^{Γ}	0,067
$\hbar\omega_{\text{оп}}, \text{ эВ}$	0,036	$m_{\text{GaAs}}^{\text{X}}$	1,3
$S_{\text{оп}}, \text{ пс}^{-1}$	36	m_{AlAs}^{Γ}	0,15
ϵ_{GaAs}	12,9	$m_{\text{AlAs}}^{\text{X}}$	0,97
ϵ_{AlAs}	10,06	$\alpha, \text{ эВ} \cdot \text{ \AA}$	0,15

Рассмотренный выше РТД1 имеет традиционную топологию активной области: однородные спейсери, между которыми находятся три слоя, формирующих ДБКС. Рассмотрим РТД, описанный в [7.58] (далее – РТД2). Особенностью этого диода является сложная структура его верхнего спейсера (рис. 7.29). Последний состоит из четырех слоев: верхний слой – нелегированный GaAs; следующие слои – $\text{Al}_{0,02}\text{Ga}_{0,98}\text{As}$, $\text{Al}_{0,05}\text{Ga}_{0,95}\text{As}$, $\text{Al}_{0,08}\text{Ga}_{0,92}\text{As}$, которые формируют так называемый «ступенчатый эмиттер», называемый так, поскольку от резервуара к верхнему барьерному слою потенциальный рельеф зоны проводимости растет ступенчато. Приконтактные слои РТД2 состоят из GaAs, легированного примесью донорного типа с концентрацией $1 \cdot 10^{24} \text{ м}^{-3}$. Двухбарьерная квантовая система включает AlAs-барьеры и GaAs-яму, толщина которых равна,

соответственно, 3,4 и 5,9 нм. Нижний спейсер является однородным нелегированным слоем GaAs. Площадь выращенной мезоструктуры составляет 16×16 мкм². В отличие от РТД1, измерения ВАХ проводились при температуре 300 К.

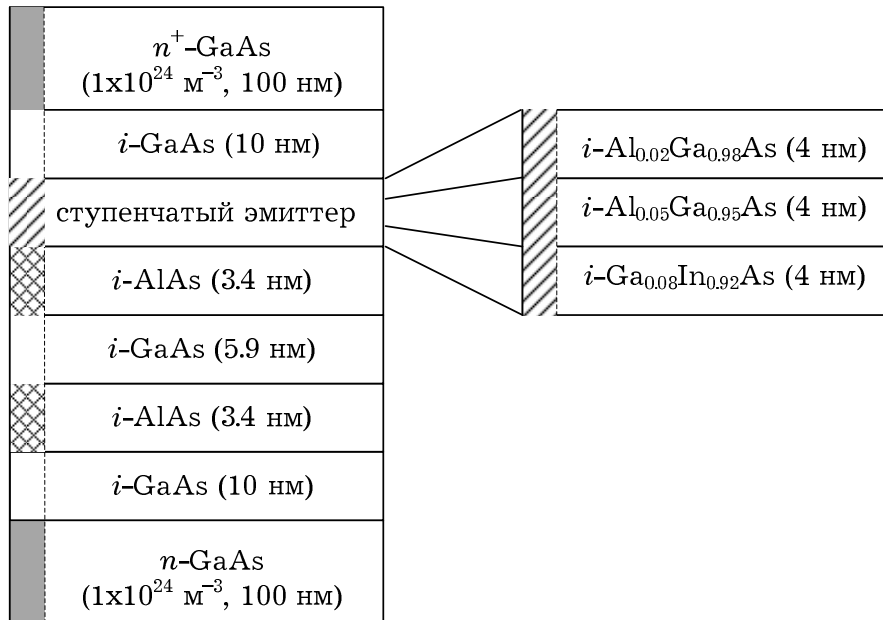


Рис. 7.29. Толщина, химический состав слоев и концентрация донорной примеси в РТД2. Справа показана структура ступенчатого эмиттера

Благодаря введению ступенчатого эмиттера в топологию диода на ВАХ возникает выраженный экстремум, следующий за основным пиком (рис. 7.30). Этот пик обусловлен особенностью взаимодействия уровней энергии в эмиттерной квантовой яме и основной квантовой яме благодаря ступенчатой структуре эмиттера.

Моделирование вольтамперных характеристик проводилось с использованием однодолинной несамосогласованной модели. Последняя была выбрана, поскольку, в отличие от самосогласованной, предусматривает существование экстремума. Самосогласованная модель пик не предусматривает, хотя дает лучшее согласование по пиковому напряжению. Такой парадокс, возможно, объясняется тем, что для слоев ступенчатого эмиттера учета заряда по методу Хартри является более грубым приближением, чем линейное падение потенциала (через

пренебрежение межэлектронным обменным взаимодействием). Входные параметры для моделирования брались из рис. 7.29 и табл. 7.2. Для более качественного сравнения с экспериментальными данными рассчитанные значения плотности тока умножались на 1,3 – этот коэффициент уравнивает характеристики за пиковым током. Кроме того, вся рассчитанная ВАХ смещалась вправо на 0,03 В. Такое смещение призвано учесть полностью проигнорированные контактные разности потенциалов, а также сопротивление пассивных областей.

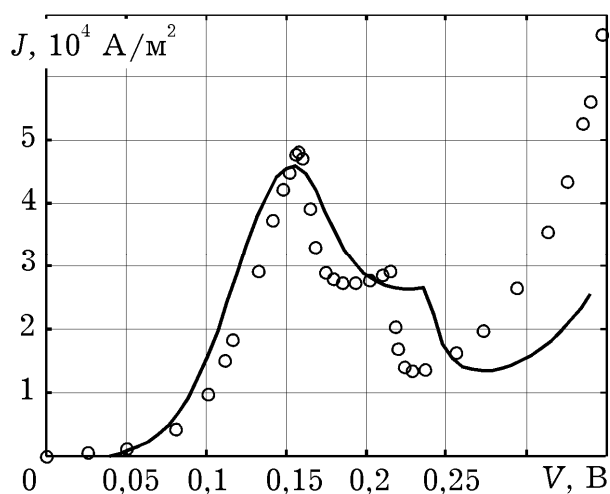


Рис. 7.30. Вольтамперная характеристика РТД2, рассчитанная с помощью однодолинной несамосогласованной модели (сплошная линия) с использованием двух «подгоночных» параметров качественно согласуется с экспериментальной (кружки)

Происхождение участка плато на рис. 7.30 можно понять, анализируя результаты моделирования с помощью численной модели и сравнивая с ВАХ диода, который имеет обычный (*i*-GaAs), а не ступенчатый эмиттер (рис. 7.31).

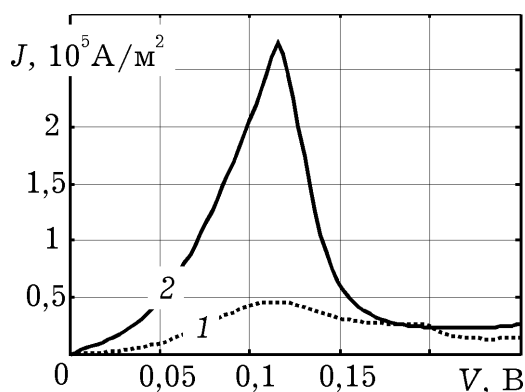


Рис. 7.31. Вольтамперные характеристики двух диодов, которые отличаются лишь структурой эмиттерного спейсера:
1 – ступенчатый эмиттер (рис. 7.29)
2 – обычный эмиттер (22 нм *i*-GaAs)

Для обеих структур основной пик наблюдается, когда метастабильный уровень в основной квантовой яме лежит между дном зоны проводимости и уровнем Ферми в левом резервуаре (рис. 7.32, а). При этом для ступенчатого эмиттера

пиковый ток в несколько раз меньше, чем для обычного, поскольку между левым резервуаром и основной квантовой ямой находятся барьеры, образованные слоями ступенчатого эмиттера.

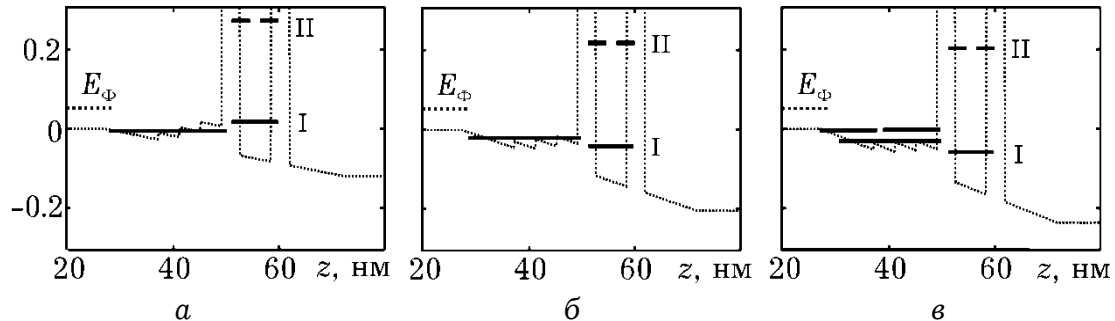


Рис. 7.32. Положение уровней энергии и уровня Ферми в ДБКС диода со ступенчатым эмиттером: а) пиковое напряжение, $V = 0,119$ В, б) напряжение экстра-пика $V = 0,197$ В, в) напряжение долины $V = 0,23$. Наибольшая плотность тока через диод наблюдается, когда уровень энергии в основной квантовой яме лежит между E_F и E_C ; экстра-пик и долина на ВАХ возникают, когда уровень в ОКЯ оказывается ниже дна зоны проводимости

Характер видоизменения этих барьеров при увеличении напряжения (рис. 7.32, б–в) и предопределяет образование области плато на ВАХ. Ток, который протекает через РТД, определяется поведением коэффициента прохождения при энергиях, лежащих между уровнем Ферми и дном зоны проводимости. Можно считать, что для таких энергий коэффициент прохождения через квантовую систему $T(E_z)$ пропорционален коэффициенту прохождения через ступенчатый эмиттер T_L и коэффициенту прохождения через оставшуюся часть квантовой системы T_R , которая включает ДБКС и правый спейсер. Коэффициент прохождения T_R имеет резонансный характер, а его максимумы совпадают с центрами метастабильных уровней основной квантовой ямы. Коэффициент прохождения T_L при увеличении напряжения монотонно возрастает. В указанных пределах изменения энергии их произведение при данной структуре ступенчатого эмиттера в диапазоне напряжений 0,15...0,20 В почти не изменяется: рост T_L

компенсируется уменьшением T_R . При дальнейшем увеличении напряжения T_R уменьшается значительно быстрее, чем T_L , поэтому T резко уменьшается. Это приводит к падению плотности тока. Динамика изменения подынтегральной функции в формуле Цу-Эсаки показана на рис. 7.33, а. Видно, что в отличие от монотонного уменьшения площади под подынтегральной функцией, как это имеет место для диода с обычным эмиттером (рис. 7.32, б), для диода со ступенчатой структурой эмиттера за счет описанных эффектов подынтегральная функция ведет себя так, что точка максимума в области ОДП описывает резонансную кривую, а площадь под подынтегральной кривой почти постоянна (рис. 7.32, а)

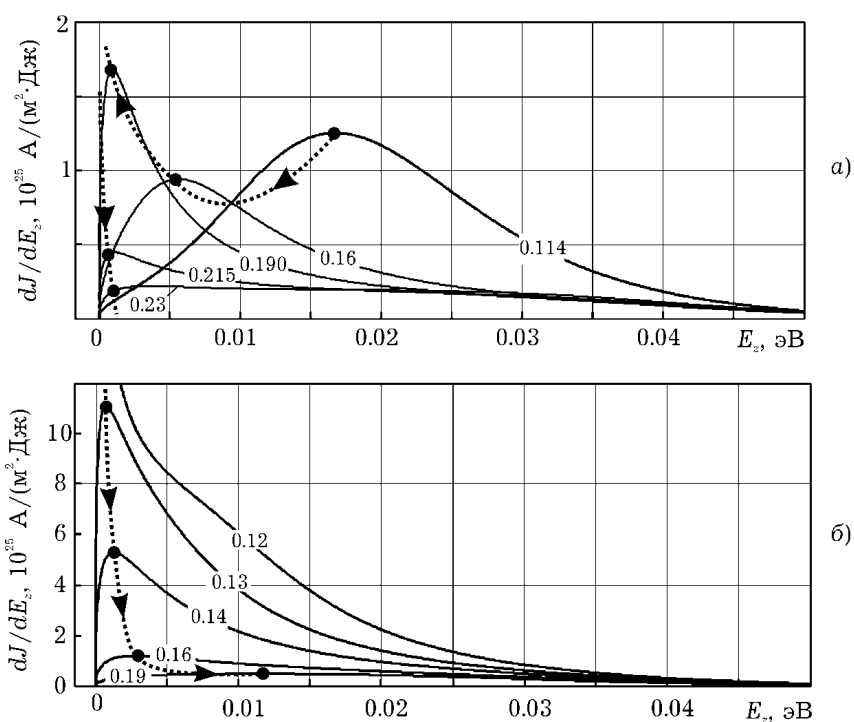


Рис. 7.33. Динамика изменения подынтегральной функции при напряжениях от пиковой к долинной (показаны цифрами в Вольтах). Пунктирной линией показана траектория точки максимума подынтегральной функции в формуле Цу-Эсаки: а) резонансно-туннельный диод со ступенчатым эмиттером; б) РТД с обычным эмиттером. В случае "а" при напряжениях от 0,115 до 0,197 В площадь под кривой почти не изменяется; в случае "б" — монотонно уменьшается по мере роста напряжения от пикового к долинному

Резюмируя вышеприведенные результаты верификации и учитывая опыт авторов, следует заметить, что описанные модели РТД из всех параметров ВАХ лучше всего предсказывают величину контрастности (величина, равная отношению пикового и долинного токов). По этому параметру отличие от экспериментальных данных составляет не больше 5%.

Абсолютные же значения измеренного тока отличаются от теоретических в несколько раз (обычно не больше, чем вдвое), причем закономерности этого расхождения нами не обнаружены. Наиболее вероятной причиной может быть то, что в реальных диодах профиль легирования резервуаров может отличаться от номинального. В [7.9] говорится, что концентрация донорной примеси в резервуарах может отличаться в два раза; кроме того, площадь мезоструктуры не поддается точному измерению. Известно также, и это подтверждается экспериментально, что зависимость пикового тока от толщины барьера имеет экспоненциальный характер. Поэтому вариации толщины барьерных слоев в пределах одного монослоя могут приводить к изменению тока в пределах одного порядка.

Даже при самосогласованном моделировании теоретически предсказываемое пиковое напряжение не достигает значений, измеренных в эксперименте. Это принято объяснять наличием последовательно включенного сопротивления пассивных областей. Зависимость этих сопротивлений от напряжения нелинейна. Обычно даже в диодах с симметричной квантовой системой пиковые напряжения при разных полярностях расходятся не менее, чем на 0,1 В. Насколько нам известно, системные работы по анализу влияния пассивных областей на ВАХ отсутствуют, хотя некоторые попытки осуществлялись [7.59].

Сложнее всего предусмотреть форму зависимости $J(V)$ в диапазоне между пиковым и долинным напряжениями. На этом участке дифференциальная проводимость преимущественно отрицательна, однако во многих РТД ее величина может изменяться так, что образуются один или больше участков, на которых дифференциальная проводимость почти

нулевая. Наличие таких участков прослеживается для всех РТД независимо от материалов и технологий. Обычно их называют участками «плато», поскольку они имеют вид почти горизонтальных линий на склоне N -образной ВАХ. Существующие модели РТД, включая вышеописанные, предусматривают монотонное падение тока на участке ОДП⁹. Отсюда следует, что «плато» на ВАХ обусловлено механизмами транспорта, которые не учитываются в модели. Из этого предположения возникло ряд теорий, которые вводили в существующие модели факторы, которые, по мнению авторов упомянутых моделей, ответственны за образование области «плато». Высказывались мысли о том, что этот участок связан с внутренней [7.60] и внешней [7.61] нестабильностью, с Γ - X - Γ переносом в рамках двухдолинной модели [7.55]. В то же время в [7.62] были получены экспериментальные подтверждения того, что формирование этих областей обусловлено метастабильными состояниями в квазитрехугольной эмиттерной квантовой яме. Однако учет указанного механизма транспорта для моделей РТД стало настоящим вызовом, поскольку необходимо было описать процессы неупругого рассеивания с учетом размерного квантования. Пока что это удалось осуществить лишь с помощью феноменологической модели [7.47]. Такая модель действительно предусматривает формирование участка плато по экспериментально верифицированному механизму, однако количественного согласования получить не удалось, отчасти потому, что модель не предусматривает область плато в рамках самосогласованной модели, а также не обеспечивает выполнения закона сохранения тока.

Также замечено, что самосогласованные модели могут оказываться менее адекватными, чем модели, в которых принимается предположение о линейном падении потенциала в активной области. Два случая описаны выше:

⁹ Исключение составляют модели, разработанные в рамках формализма функций Вигнера, которые стойко предусматривают такую область. Однако наличие области плато является едва ли не единственным экспериментальным фактом, который они предсказывают, а сам формализм функций Вигнера критикуют как теоретически недостаточно обоснованный [7.63]

1) на ВАХ РТД2, рассчитанной самосогласованно, отсутствует область «плато», обусловленная наличием ступенчатого эмиттера;

2) участок «плато» на ВАХ резонансно-туннельных диодов с однородным стехиометрическим составом эмиттера, обусловленный транспортом между эмиттерной и основной квантовыми ямами [7.47], также предусматривается лишь в рамках несамосогласованной модели.

Кроме того, совпадение по пиковым и долинным токам лучше достигается преимущественно в рамках несамосогласованной модели; лучше также согласуется и формы ВАХ. Таким образом, едва ли не единственным аргументом, который указывает на целесообразность использования метода Хартри для учета пространственного заряда есть то, что предсказуемое им пиковое напряжение ближе к экспериментально наблюдаемому.

Литература к разделу 7

7.1. *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.

7.2. *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.

7.3. *Блохинцев Д.И.* Основы квантовой механики, учебное пособие, изд. 5-е переработанное / Д.И. Блохинцев. – М.: Наука, 1976. – 664 с.

7.4. *Иогансен Л.В.* О возможности резонансного прохождения электронов в кристаллах через системы барьеров / Л.В. Иогансен // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 1963. – Т. 45, вып. 2. – С. 207–213.

7.5. *Иогансен Л.В.* Тонкопленочные электронные интерферометры / Л.В. Иогансен // Журнал

экспериментальной и теоретической физики. – 1965. – Т.86, вып. 1. – С. 175–179.

7.6. *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.

7.7. *Shewchuk T.J.* Resonant tunneling oscillations in a GaAs-Al_xGa_{1-x}As heterostructure at room temperature / T.J. Shewchuk, P.C. Chapin, P.D. Coleman // Applied Physics Letters. – 1985. – Vol. 46. – P. 508–510.

7.8. *Luryi S.* Mechanism of operation of double-barrier resonant-tunneling oscillators / S. Luryi // Electron Devices Meeting, 1985 International. – 1985. – Vol. 31. – P. 666–669.

7.9. *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.

7.10. *Герасимов С.М.* Физические основы электронной техники / С.М. Герасимов, М.В. Белоус, В.А. Москалю. – К.: "Вища школа", 1981. – 368 с.

7.11. *Хьюеу Н.В.* Основы метода вторичного квантования / Нгуен Ван Хьюеу. – М.: Энергоатомиздат, 1984. – 208 с.

7.12. *Tsu R.* Tunneling in a finite superlattice / R. Tsu, L. Esaki // Appl. Phys. Letters. – 1973. – Vol. 22. – P. 562–564.

7.13. *Saleh B.E.A.* Fundamentals of photonics / B.E.A. Saleh, M.C. Teich. New Jersey: John Wiley & Sons Inc, 2007. – 1178 p.

7.14. *Araki K.* Analysis of barrier transmission in resonant tunneling diodes / Kinichiro Araki // Journal of Applied Physics. – Vol. 62, No. 3, P. 1059–1069.

7.15. *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.

7.16. *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.

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

7.18. *Москалюк В.О.* Фізика електронних процесів. Динамічні процеси / В.О. Москалюк. Київ.: "Політехніка", 2004. – 180 с.

7.19. *Менский М.Б.* Квантовые измерения и декогеренция / М.Б. Менский. М: Физматлит, 2001. – 232 с.

7.20. *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.

7.21. *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.

7.22. *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.

7.23. *Мар'єнков В.В.* Моделювання РТД з параболічними потенціальними ямами: бакалаврська робота. Режим доступу до ресурсу: <http://phbme.ntu-kpi.kiev.ua/~fedya/2b.pdf>.

7.24. *Самарский А.А.* Введение в численные методы / А.А. Самарский. – М.: «Наука», 1987. – 271 с.

7.25. *Самарский А.А.* Введение в теорию разностных схем / А.А. Самарский. – М.: «Наука», 1971. – 553 с.

7.26. *Lent C.S.* The quantum transmitting boundary method / C.S. Lent, D.J. Kirkner // Journal of Applied Physics. 1990. – Vol. 67. – P. 6353–6359.

7.27. Хокни Р. Численное моделирование методом частиц: Пер. с англ. / Р. Хокни, Дж. Иствуд. – М.: Мир, 1987. – 640 с.

7.28. Pinaud O. Transient simulations of a resonant tunneling diode / O. Pinaud // Journal of Applied Physics. – 2002. – Vol. 92. P. 1987–1994.

7.29. Москалюк В.О. Фізика електронних процесів, частина I: навчальний посібник / В.О. Москалюк. – Київ: “Політехніка”, 2004. – 148 с.

7.30. 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.

7.31. 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.

7.32. 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.

7.33. 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.

7.34. 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.

7.35. 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.

7.36. Buttiker M. Coherent and sequantial tunneling in double barrier / M. Buttiker // IBM. J. Res. Develop. – 1988. – Vol. 32. – P. 63–75.

7.37. Zohta Y. Improved optical model for resonant tunneling diode / Y. Zohta, T. Tanamoto // J. Appl. Phys. – 1993. – Vol. 74. – P. 6996–6998.

7.38. *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.

7.39. *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.

7.40. *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.

7.41. *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.

7.42. *Tsu R.* Superlattice to nanoelectronics / Ralf Tsu // London: Elsveir, 2005. – 325 P.

7.43. *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.

7.44. *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.

7.45. *Караваяев Г.Ф.* "Сверхрешеточная" модель плавной гетерограницы GaAs/AlAs (001) / Г.Ф. Караваяев, С.Н. Гриняев // Физика твердого тела. – 2006. – Том. 48, Вып. 5. – С. 893–901.

7.46. *Baro M.A.* 1D coupled Schrodinger drift-diffusion model including collisions / M. Baro, N. Ben Abdallah, P. Degond, A. El Ayyadi // Journal of Compaudational Physics. – 2005. – Vol. 203. – P. 129–153.

7.47. *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.

7.48. *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.

7.49. *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.

7.50. *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.

7.51. Электронный архив «Новые полупроводниковые материалы: Характеристики и свойства». Режим доступа до ресурсу: <http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/rintroduction.html>.

7.52. *Liu H.C.* Resonant tunneling through single layer heterostructure / H.C. Liu // *Appl. Phys. Lett.* – 1987. – Vol. 51 – P. 1019–1021.

7.53. *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.

7.54. *Васько Ф.Т.* Электронные состояния и оптические переходы в полупроводниковых гетероструктурах / Федор Трофимович Васько. – К.: Наукова Думка, 1993. – 181 с.

7.55. *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.

7.56. Резонанси Фано (матеріал з Вікіпедії). Режим доступу до ресурсу: http://ru.wikipedia.org/wiki/Резонанс_Фано.

7.57. *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.

7.58. *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.

7.59. *Обухов И.А.* Моделирование переноса заряда в мезоскопических структурах / И.А. Обухов. – Севастополь: «Вебер», 2005. – 226 С.

7.60. *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.

7.61. *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.

7.62. *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.

7.63. *Татарский В.И.* Вигнеровское представление квантовой механики / В.И. Татарский // *Успехи физических наук.* – 1983. – Т. 139, вып. 4. – С. 587–619.

ПРИЛОЖЕНИЯ

Приложение к разделу 5

П5. АЛГОРИТМ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ГЕТЕРОСТРУКТУРНЫХ ТРАНЗИСТОРОВ

Уравнения физико-топологических моделей субмикронных структур в двумерном приближении представляют собой уравнения в частных производных различных порядков.

Наибольшую проблему представляет решение дифференциальных уравнений в частных производных второго порядка из-за больших погрешностей их численных аппроксимаций. Уравнения в частных производных второго порядка в нестационарном случае записывается в виде уравнения гиперболического типа:

$$a \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \nabla (b \nabla u) + c u = f$$

где a , b , c – константы, а f – константа или функция пространственных координат, u – вектор неизвестных.

Уравнения Пуассона и непрерывности в стационарном случае относятся к уравнениям в частных производных эллиптического типа, к которым сводятся гиперболические уравнения при $\partial^2 u / \partial t^2 = 0$.

Каноническая форма эллиптических уравнений представляется как:

$$-\nabla (b \nabla u) + c u = f.$$

Данная форма отвечает структуре уравнений непрерывности тока для электронов и дырок. При $c = 0$ получим

$$-\nabla (b \nabla u) = f,$$

что соответствует уравнению Пуассона для потенциала.

Решение приведенных уравнений в двумерной области со сложной функцией в правой части, задающей распределение плотности заряда, как правило, связано с применением численных методов с заданным шагом дискретизации и неоднородными граничными условиями.

Для анализа субмикронных эффектов в транзисторах с высокой подвижностью электронов используется система двумерных уравнений, полученная с учетом релаксационных процессов, которая включает уравнения сохранения энергии, импульса и частиц. Времена релаксации определяются с учетом преобладающих механизмов рассеяния – междолинного и полярного оптического.

При моделировании распределения потенциала в структуре и решении уравнения Пуассона учитывается разрыв энергетических зон на границе узкозонного и широкозонного полупроводников высотой примерно 0,4 эВ. Высота барьера зависит от свойств полупроводниковых материалов, образующих гетеропереход.

Процедура дискретизации и представление уравнений в конечно-разностном виде позволяет свести дифференциальные уравнения в частных производных к системе алгебраических уравнений:

$$\mathbf{K} \mathbf{V} = \mathbf{F},$$

где \mathbf{K} – матрица коэффициентов, \mathbf{F} – матрица известных величин или функций. При этом в зависимости от сложности топологической структуры моделируемой области субмикронной структуры могут использоваться различные методы генерации конечно-разностной сетки. Для моделируемой области со сложной конфигурацией предпочтительнее метод конечных элементов¹, предполагающий триангуляцию. Для достаточно простых областей может использоваться метод конечных разностей с процедурой дискретизации с прямоугольной сеткой. При этом оба подхода, как правило, реализуются с возможностью

¹ *Зенкевич О., Морган К.* Конечные элементы и аппроксимация: Пер. с англ. – М.: Мир, 1986.– 318 с.

Марчук Г.И., Агошков В.И. Введение в проекционно-сеточные методы. – М.: Наука. 1981.–416 с.

применения адаптивного изменения шага сетки. Особенно это актуально в областях с большими градиентами моделируемых функций и в приграничных областях. Можно показать², в частности на примере уравнения Пуассона, что разностные уравнения обоих методов отличаются лишь способом учета плотности объемного заряда. В методе конечных разностей плотность заряда интегрируется непосредственно по всей области ячейки, а в методе конечных элементов требуется взвешенное интегрирование в большей области, включая соседние элементы. То есть при одинаковых аппроксимациях оба метода дают практически одинаковые результаты. Выбор метода разбиения обусловлен необходимостью аппроксимации области со сложной конфигурацией, а также тем, что сильные поля локализуются в области с размерами 0,2-0,3 мкм у стокового края затвора и требуется более мелкая сетка.

Метод конечных элементов основан на построении аппроксимации решения u вариационной задачи в конечномерных подпространствах S_D , содержащихся в области D . В основе вариационных методов лежит переход от задачи для уравнения с частными производными к задаче минимизации функционала. Функционалом для уравнения Пуассона в двумерном приближении вида

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = f(x, y)$$

является интеграл³

$$I(u) = \iint_D \left[\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 - 2uf \right] dx dy = \iint_D F(x, y, u, \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y}) dx dy.$$

Необходимым условием минимальности интеграла $I(u)$, является то, что функция $u(x, y)$ удовлетворяет уравнению Эйлера-Лагранжа:

² Бубенников А.Н. Моделирование интегральных микротехнологий, приборов и схем. – М.: Высшая школа, 1989. – 320 с.

³ Бабенко К.И. Основы численного анализа. – М.: Наука. 1986. – 744 с.

$$\frac{\partial}{\partial x} F_{ux} + \frac{\partial}{\partial y} F_{uy} - F_u = 0.$$

Подпространства S_D строятся с помощью деления моделируемой области на конечные элементы – треугольники. С конечными элементами связывается совокупность узлов – вершин треугольника (могут также использоваться середины сторон, центры тяжести элементов). На множестве конечных элементов строятся пространства кусочно-полиномиальных однотипных функций – линейных, квадратичных, кубических или сплайнов по каждой переменной в пределах одного элемента. Их коэффициенты выражаются через значения самих функций или их производных в узлах. Эти функции являются финитными, т.е. отличными от нуля только в окрестности, ограниченной несколькими соседними элементами.

Для линейной базисной функции для подобласти в виде треугольника с вершинами P_1, P_2, P_3 с заданными значениями u_1, u_2, u_3 функции $u(x,y)$ аппроксимация представляет собой полином:

$$\tilde{u}(x, y) = \alpha_1 + \alpha_2 x + \alpha_3 y, \quad (\text{П5.1})$$

коэффициенты которого могут быть выражены через u_i из решения системы уравнений $\tilde{u}(P_i) = u_i, i = 1, 2, 3$:

$$\alpha_1 = \frac{1}{S_{ijk}} [(x_j x_k - x_k y_i) u_i + (x_k x_i - x_i y_k) u_j + (x_i x_j - x_j y_i) u_k],$$

$$\alpha_2 = \frac{1}{S_{ijk}} [(y_i - y_k) u_i + (y_k - y_i) u_j + (y_i - y_j) u_k],$$

$$\alpha_3 = \frac{1}{S_{ijk}} [(x_k - x_j) u_i + (x_i - x_k) u_j + (x_j - x_i) u_k],$$

где i, j, k – номера вершин, а S_{ijk} – площадь треугольника. Полином (П5.1) может быть выражен через базисные функции как:

$$\tilde{u}(x, y) = \sum_{i=1}^3 u_i p_i(x, y),$$

где p_i – линейный по x, y многочлен, равный единице в i -ом узле и нулю в остальных:

$$p_i(x, y) = (1 / C_{ijk})(\alpha_{ik} + \beta_{ik}x + \gamma_{ik}y) = D_{ik} / C_{ijk}, \quad (\text{П5.2})$$

где $\alpha_{ik} = x_i x_k - y_j x_k$, $\beta_{ik} = x_k - y_j$, $\gamma_{ik} = y_i - y_k$,

$$D_{jk} = \begin{bmatrix} 1 & x & y \\ 1 & x_j & y_j \\ 1 & x_k & y_k \end{bmatrix}; \quad C_{ijk} = \begin{bmatrix} 1 & x_i & y_i \\ 1 & x_j & y_j \\ 1 & x_k & y_k \end{bmatrix}.$$

Распространяя алгоритм определения $p_i(x, y)$ для каждого l -го узла триангуляции моделируемой области строится кусочно-билинейная функция $\Psi_l(x, y)$, равная единице в l -ом узле и нулю – в остальных. При этом в каждом из примыкающих треугольников эта функция определяется по формуле (П5.2). Совокупность таких функций образует базис пространства S_D кусочно-линейных функций для всех узлов триангуляции, за исключением лежащих на границе области.

Порядок интерполяции повышается, если кроме u_i в вершинах треугольников используется также значения в серединах сторон P_4, P_5, P_6 .

В этом случае

$$\tilde{u}(x, y) = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 y + \beta_3 x^2 + \beta_4 xy + \beta_5 y^2,$$

где все β_i определяются из уравнений $\tilde{u}_j(x_j, y_j) = u_j$, $j = 1, 2, \dots, 6$. При квадратичной функции $p_i^{(2)}(x, y)$ по каждой переменной, равной единице в p_i и нулю – в остальных, базисная функция может быть записана:

$$\tilde{u}(x, y) = \sum_{i=1}^6 u_i p_i^{(2)}(x, y),$$

где $p_i^{(2)}$ выражается через $p_i(x, y)$ как

$$p_i^{(2)}(x, y) = p_i(2p_i - 1), \quad j = 1, 2, 3,$$

$$p_4^{(2)}(x, y) = 4p_1 p_2, \quad p_5^{(2)}(x, y) = 4p_2 p_3, \quad p_6^{(2)}(x, y) = 4p_3 p_1.$$

Таким образом, совокупность $p_i^{(2)}(x, y)$ в треугольниках с общими узлами образует базисную функцию пространства кусочно непрерывных функций.

Искомое решение представляется в виде:

$$u(x, y) = u_1\varphi_1(x, y) + u_2\varphi_2(x, y) + \dots + u_n\varphi_n(x, y),$$

где φ_i - кусочно-линейные базисные функции. Триангуляция проводится так, что граница сеточной области совпадает с границей расчётной области. Кроме того, сеточные узлы лежат как на внешней границе, так и на линиях раздела различных сред (металл-полупроводник).

При триангуляции используется адаптивная процедура уменьшения шага сетки до достижения заданной точности. При этом сравниваются потенциалы в соседних точках в области с наибольшим значением градиента потенциала.

Рассмотрим процедуру получения вариационного уравнения для уравнения в частных производных эллиптического типа, адаптированную к уравнению Пуассона. Записанное в матричной форме с учетом описанного ранее алгоритма дискретизации это уравнение определяет алгоритм решения уравнений Пуассона и непрерывности.

В самом общем случае для неоднородных граничных условий 3-го рода

$$\vec{n}(c\nabla u) + qu = g \quad ,$$

где g, q – функции, определенные на области D , \vec{n} – нормаль к поверхности, вариационное уравнение для N базисных функций ($\varphi_i \in V_N$) запишется:

$$\int_D (c\nabla u) \cdot \nabla \varphi_i + au\varphi_i - f\varphi_i dx - \int_{\partial D} (-qu + g)\varphi_i ds = 0, \quad i = 1, \dots, N,$$

где N – размерность пространства V_N .

Тогда

$$u(x) = \sum_{j=1}^N U_j \varphi_j(x).$$

Получим систему уравнений

$$\sum_{j=1}^N \left[\int_D ((c\nabla\varphi_j) \cdot \nabla\varphi_i + a\varphi_j\varphi_i) dx + \int_{\partial D} q\varphi_j\varphi_i ds \right] \cdot U_j = \int_D f\varphi_i dx + \int_{\partial D} g\varphi_i ds,$$

где $I = 1, \dots, N$. Обозначая

$$K_{i,j} = \int_D (c\nabla\varphi_j) \cdot \nabla\varphi_i dx,$$

$$M_{i,j} = \int_D a\varphi_j\varphi_i dx,$$

$$Q_{i,j} = \int_{\partial D} q\varphi_j\varphi_i ds,$$

$$F_i = \int_D f\varphi_i dx,$$

$$G_i = \int_{\partial D} g\varphi_i ds,$$

где матрицы коэффициентов $K_{i,j}$ и $M_{i,j}$ представляют собой так называемые матрицы жесткости и матрицы масс, получим систему уравнений в матричной форме:

$$(\mathbf{K} + \mathbf{M} + \mathbf{Q}) \cdot \mathbf{U} = \mathbf{F} + \mathbf{G}. \quad (\text{П5.3})$$

При этом матрица коэффициентов в левой части системы при U имеет диагональное преобладание.

Однако, чтобы получить приемлемую точность аппроксимации необходимо брать достаточно много слагаемых, что затрудняет процесс интегрирования.

Важно отметить, что точность приближения в методе конечных элементов зависит не от увеличения числа базисных функций (либо гармоник в приведенном выше базисе), а от размера окрестности, где базисная функция отлична от нуля.

Решение систем нелинейных аппроксимационных уравнений вида (П5.3), как правило, связано с различными модификациями метода Ньютона. В зависимости от системы исходных уравнений для описания субмикронных структур используются различные методы и алгоритмы.

После получения решения с заданной точностью для потенциалов (уравнение Пуассона) и концентрации (уравнение непрерывности) совместно решается система уравнений с расчетом на каждом шаге коэффициента диффузии и подвижности электронов. Алгоритм решения системы уравнений Пуассона и уравнения непрерывности с учетом аппроксимаций и уравнения для напряженности электрического поля $\vec{E} = -\text{grad}(\phi)$ представляет собой несколько вложенных циклов. Каждое из этих уравнений, в свою очередь, является системой конечно-элементных уравнений большой размерности. Разреженные матрицы систем обладают диагональным преобладанием и имеют ленточную структуру. Для решения систем используется метод прогонки в сочетании с итерационным многошаговым методом Ньютона.

Алгоритм решения системы уравнений локальной физико-топологической модели может быть представлен следующими этапами.

Шаг 1. Триангуляция моделируемой области с заданным шагом и расчет профилей легирующей примеси.

Шаг 2. Решение уравнения Пуассона для равновесного распределения концентрации носителей (первая итерация).

Шаг 3. Расчет распределения напряженности электрического поля в структуре $\mathcal{E}(x, y)$ и подвижностей носителей при заданных механизмах рассеяния, а также при заданных значениях концентрации и профилей легирующей примеси.

Шаг 4. Решение уравнений непрерывности тока с заданной точностью и определение распределений концентрации подвижных носителей $n(x, y)$.

Шаг 5. Совместное решение системы уравнений, состоящей из уравнений Пуассона и непрерывности.

Шаг 6. Расчет токов на электродах и проверка выполнения закона Кирхгофа для токов, оценка погрешности вычислений. Если заданной точности не достигнуто, осуществляется дробление шага дискретизации триангулярной сетки и переход к шагу 1.

Таким образом, находятся распределения концентрации носителей и потенциала для заданной структуры. Выход из

внешнего цикла осуществляется при условии достижения функцией $\varphi(x,y)$ минимума.

Для нахождения распределения концентрации носителей используется метод Ньютона. В простейшем случае этот метод описывается формулой:

$$n_{i+1} = n_i - F_i'^{(-1)} F_i .$$

Но из-за наличия больших градиентов функций наиболее подходящим является метод Ньютона-Рафсона с дроблением шага, так как в нем заложена адаптация шага для каждого узла сетки:

$$n_{i+1} = n_i - \alpha_i F_i'^{(-1)} F_i ,$$

где целевая функция $F_i = \rho / \epsilon \epsilon_0 \varphi$. Величина α_i выбирается так, чтобы обеспечить убывание целевой функции на каждой итерации. Этот выбор связан с проверкой неравенства:

$$f(x_i + \alpha_i p_i) - f(x_i) \leq \delta \cdot \alpha_i (f'(x_i), p_i),$$

где $p_i = -(f''(x_i))^{-1} \cdot f'(x_i)$ – направление спуска, а $0 < \delta < S$ – некоторое заданное число, общее для всех итераций. Если это неравенство выполнено при $\alpha_i = 1$, то шаг принимается равным единице и осуществляется следующая итерация. Если нет – дробится шаг до тех пор, пока оно не выполнится.

Если итерационный процесс плохо сходится, то используется ускоренный метод Ньютона третьего порядка⁴:

$$x_{i+1} = x_i - F_i'^{-1} F_i - \frac{1}{2!} F_i'^{-1} F_i'' (F_i'^{-1} F_i) (F_i'^{-1} F_i), \quad i = 0, 1, 2, \dots$$

Метод обладает быстрой сходимостью, однако, добиться с его помощью заданной точности довольно трудно, поэтому он используется для нахождения начального приближения для метода Ньютона-Рафсона с дроблением шага.

⁴ Иванов В.В. Методы вычислений на ЭВМ // Справочное пособие. – Киев: Наук. Думка. – 1986. – 584 с.

Для решения исходной системы уравнений нелокальной двумерной модели ГСПТ применяется метод итераций (последовательных приближений). Так как в данные уравнения входит некая функция от координат $z(x,y)$ и ее первая производная, то можно записать: $z = f(z)$. Тогда z_n будет выражаться через z_{n-1} по следующей рекуррентной формуле⁵: $z_n = f(z_{n-1})$.

Выходной ток транзистора рассчитывается как нормальная составляющая тока к контакту стока по известным двумерным распределениям концентрации электронов, напряженности электрического поля и подвижности по результатам решения исходной системы уравнений при достижении заданной точности решений в узлах сетки.

⁵ П5.6. В.А. Ильин Итерационные методы решения функциональных уравнений, Соросовский Образовательный Журнал – М.: 2001 – No 2 – с. 116–120.

П7.1. Вывод формулы Цу-Эсаки

1. Вычисление тока, создаваемого электронами, вышедшими из левого резервуара $J_{LR}(z)$:

$$\begin{aligned}
\mathbf{J}_{LR}(z) &= \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty \mathbf{j}_{LR}(E_z(k_z), z) g(\mathbf{k}) f_{\Phi-D}(\mathbf{k}, E_\Phi) dk_z dk_x dk_y = \\
&= \frac{2}{(2\pi)^3} \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty \frac{\mathbf{j}_{LR}(E_z(k_z), z) dk_z dk_x dk_y}{\exp\left(\left(\hbar^2(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) / 2m^* + U_{i0} - (E_\Phi + U_1)\right) / k_B T\right) + 1} = \\
&\left| \frac{dk_z dk_x dk_y = k_r dk_z dk_r dk_\phi}{k_r = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}} \right| = \\
&\frac{2}{(2\pi)^3} \int_0^\infty \mathbf{j}_{LR}(E_z(k_z), z) dk_z \int_0^\infty \frac{k_r dk_r}{\exp\left(\left(\hbar^2(k_r^2 + k_z^2) / 2m^* + U_{i0} - (E_\Phi + U_1)\right) / k_B T\right) + 1} \int_0^{2\pi} dk_\phi = \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\infty \mathbf{j}_{LR}(E_z(k_z), z) dk_z \int_0^\infty \frac{dk_r^2}{\exp\left(\left(\hbar^2(k_r^2 + k_z^2) / 2m^* + U_{i0} - (E_\Phi + U_1)\right) / k_B T\right) + 1} = \\
&\left| \begin{aligned} u &= \left(\hbar^2(k_r^2 + k_z^2) / 2m^* + U_{i0} - (E_\Phi + U_1)\right) / k_B T, \\ du &= \frac{\hbar^2}{2m^* k_B T} dk_r^2, \quad E_z = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} + U_{i0} \end{aligned} \right| = \\
&\frac{2m^* k_B T}{(2\pi\hbar)^2} \int_0^\infty \mathbf{j}_{LR}(E_z(k_z), z) dk_z \int_{\frac{E_z - (E_\Phi + U_1)}{k_B T}}^\infty \frac{du}{e^u + 1} = \left| \int \frac{du}{e^u + 1} = \ln(e^{-u} + 1) \right| = \\
&= \frac{2m^* k_B T}{(2\pi\hbar)^2} \int_0^\infty \mathbf{j}_{LR}(E_z(k_z), z) \ln\left(\exp\left(-\frac{E_z - (E_\Phi + U_1)}{k_B T}\right) + 1\right) dk_z = \\
&\left| dk_z = \frac{\sqrt{m^*}}{\sqrt{2\hbar}} \frac{dE_z}{\sqrt{E_z - U_{i0}}} \right| = \\
&= \frac{\sqrt{2}(m^*)^{3/2} k_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3} \int_{U_{i0}}^\infty \frac{\mathbf{j}_{LR}(E_z(k_z), z)}{\sqrt{E_z - U_{i0}}} \ln\left(1 + \exp\left(-\frac{E_z - (E_\Phi + U_1)}{k_B T}\right)\right) dE_z
\end{aligned}$$

2. Вычисление тока, создаваемого электронами, вышедшими из левого резервуара $J_{RL}(z)$:

$$\begin{aligned}
\mathbf{J}_{RL}(z) &= \int_{-\infty}^0 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{j}_{RL}(E_z(k_z), z) 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{\mathbf{j}_{RL}(E_z(k_z), z) 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 \mathbf{j}_{RL}(E_z(k_z), z) 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 \mathbf{j}_{RL}(E_z(k_z), z) 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| \frac{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, E_z = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} + U_{i5}} \right| = \\
&\frac{2m^* k_B T}{(2\pi\hbar)^2} \int_{-\infty}^0 \mathbf{j}_{RL}(E_z(k_z), z) 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 \mathbf{j}_{RL}(E_z(k_z), z) \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_{\infty}^{U_{i5}} \frac{\mathbf{j}_{RL}(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 = \\
&= \frac{\sqrt{2}(m^*)^{3/2} k_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3} \int_{U_{i5}}^{\infty} \frac{\mathbf{j}_{RL}(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
\end{aligned}$$

Все обозначения приведены на рис. 7.14

П7.2. Конечно-разностная схема для системы уравнений огибающей волновой функции

Если в переносе заряда участвуют электроны из двух долин (для определенности "Г" и "Х"), для того, чтобы учесть смешивание электронных состояний на гетерограницах необ-

ходимо решать следующую систему уравнений относительно огибающих волновых функций ψ_Γ и ψ_X ⁶:

$$\left\{ \begin{array}{l} -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{mm_\Gamma} \frac{d\psi_\Gamma}{dz} + \left(\underbrace{V_\Gamma(z) - E + \frac{\hbar^2 k_\parallel^2}{2mm_\Gamma}}_{-E_z^\Gamma} \right) \psi_\Gamma + \alpha \delta(z_k) \psi_X = 0 \\ -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{mm_X} \frac{d\psi_X}{dz} + \left(\underbrace{V_X(z) - E + \frac{\hbar^2 k_\parallel^2}{2mm_X}}_{-E_z^X} \right) \psi_X + \alpha \delta(z_k) \psi_\Gamma = 0 \end{array} \right. \quad (\text{П7.1})$$

Здесь $m_{\Gamma(X)}$ – относительная эффективная масса в $\Gamma(X)$ – долине, m – масса покоя электрона, $k = i_1, i_2, \dots, i_{N_b}$ – номера точек, которые принадлежат гетерограницам (N_b – количество таких границ); α – постоянная междолинного взаимодействия [eV·Å]; $\delta(z)$ – дельта-функция Дирака.

Для большей наглядности выкладок будем считать, что $k_\parallel^2 = 0$, так что $E_z^\Gamma = E_z^X \equiv E_z$ (как обозначено в (П7.1)), в таком предположении $\psi_{\Gamma(X)}$ является функцией лишь координаты z и поперечной энергии E_z .

На гетерограницах эти уравнения должны удовлетворять обобщенным граничным условиям, которые налагаются на огибающие волновых функций ψ_Γ (ψ_X)¹:

$$\psi_\Gamma|_{z_k^-} = \psi_\Gamma|_{z_k^+}, \quad (\text{П7.2})$$

$$\frac{\hbar^2}{2} \left[\left(\frac{1}{mm_\Gamma} \frac{d\psi_\Gamma}{dz} \right)_{z=z_k^+} - \left(\frac{1}{mm_\Gamma} \frac{d\psi_\Gamma}{dz} \right)_{z=z_k^-} \right] + \alpha \psi_X|_{z=z_k} = 0. \quad (\text{П7.3})$$

Перепишем первое из уравнений системы (П7.1) в виде:

⁶ Liu H.C. Resonant tunneling through single layer heterostructure // Appl. Phys. Letters – 1987. – Vol. 51, No. 13. – P. 1019–1021.

$$\frac{d}{dz} \frac{1}{m_{\Gamma}} \frac{d\Psi_{\Gamma}}{dz} + \frac{2m(E_z - V_{\Gamma}(z))}{\hbar^2} \Psi_{\Gamma} - \frac{2m}{\hbar^2} \alpha \delta(z_k) \Psi_X = 0, \quad (\text{П7.4})$$

и будем искать для него конечно-разностную схему на нерегулярной сетке $\{z_i, i = 1, 2, \dots, N\}$, где N – количество узлов дискретной сетки.

Введем обозначения:

$$\begin{aligned} k(z) &\equiv \frac{1}{m_{\Gamma}(z)}; \\ q(z) &\equiv \frac{2m}{\hbar^2} (V_{\Gamma} - E_z); \\ f(x) &\equiv -\frac{2m}{\hbar^2} \alpha \delta(z_k) \Psi_X(z). \end{aligned} \quad (\text{П7.5})$$

В них (П7.4) переписывается так:

$$\frac{d}{dz} k(z) \frac{d\Psi_{\Gamma}(z)}{dz} - q(z) \Psi_{\Gamma}(z) = -f(z) \quad (\text{П7.6})$$

Любое трехточечное уравнение, которое соответствует (П7.6) может быть записано в виде⁷:

$$\frac{1}{\bar{h}_i} \left(b_i(z) \frac{\Psi_{i+1} - \Psi_i}{h_{i+1}} - a_i(z) \frac{\Psi_i - \Psi_{i-1}}{h_i} \right) - d_i(z) \Psi_i(z) + \varphi_i(z) = 0, \quad (\text{П7.7})$$

где $a_i(z)$, $b_i(z)$, $d_i(z)$, $\varphi_i(z)$ – искомые разностные функции, которые могут в общем случае зависеть от трех значений координаты: 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 чтобы конечно-разностная схема (П7.7) удовлетворяла условию консервативности и самосопряженности конечно-разностного оператора, необходимо, чтобы $b_i(z) = a_{i+1}(z)$. Тогда она будет описывать уравнение сохранения некоторой физической величины ω в диапазоне $z \in \Omega$, где $\Omega: [z_{i-1/2}; z_{i+1/2}]$:

⁷ Самарский А.А. Введение в численные методы. – М.: «Наука», 1987. – с. 150.

$$\omega_{i+1/2} - \omega_{i-1/2} - \int_{z_{i-1/2}}^{z_{i+1/2}} q(z)\psi(z)dz = - \int_{z_{i-1/2}}^{z_{i+1/2}} f(z)dz, \quad (\text{П7.8})$$

где $\omega = k(z)u'(z)$; уравнение (П7.8) эквивалентно закону сохранения потока вероятности. Легко видеть, что, стягивая область Ω в точку, из (П7.8) получим (П7.3).

Всю совокупность конечно-разностных схем второго порядка точности, соответствующих (П7.6), можно записать в виде⁸:

$$\frac{1}{\bar{h}_i} \left(a_{i+1}(z) \frac{\Psi_{i+1} - \Psi_i}{h_{i+1}} - a_i(z) \frac{\Psi_i - \Psi_{i-1}}{h_i} \right) - d_i(z)\Psi_i(z) + \phi_i(z) = 0, \quad (\text{П7.9})$$

$$\text{где } a_i = \left(\frac{1}{h_i} \int_{z_{i-1}}^{z_i} \frac{dz}{k(z)} \right)^{-1}, \quad \phi_i = \frac{1}{\bar{h}_i} \int_{z_{i-1/2}}^{z_{i+1/2}} f(z)dz, \quad d_i = \frac{1}{\bar{h}_i} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} q(z)dz.$$

Далее, применяя интегро-интерполяционный метод⁹, можно заменить соответствующие интегралы их конечно-разностными аппроксимациями. В данном случае важно, чтобы все точки z_k попадали в узлы сетки, поскольку функция $f(z)$ содержит в себе δ -функцию, которая превращается в нуль везде кроме точек z_k . Рассмотрим аппроксимацию по трехточечной схеме в случае, если центральная точка схемы в точности совпадает с гетерограницей: $z_i = z_k$.

Учитывая, что эффективная масса в этой точке обычно изменяется скачкообразно (функция $k(z)$ испытывает разрыв I рода), а в интервалах $z \in [z_{i-1}; z_i]$ и $z \in [z_i; z_{i+1}]$ достаточно гладкая (обычно постоянная), лучшим приближением для интеграла a_i служит:

$$a_i = k_{i-1/2}. \quad (\text{П7.10})$$

⁸ Самарский А.А. Введение в численные методы. — М.: «Наука», 1987. — с. 53.

⁹ Самарский А.А. Введение в численные методы. — М.: «Наука», 1987. — с. 167.

В случае если эффективная масса в левом и правом интервале не изменяется, можно точно положить:

$$a_i = k_{i-1}. \quad (\text{П7.11})$$

Аналогично, можно положить:

$$a_{i+1} = k_{i+1}. \quad (\text{П7.12})$$

Интеграл φ_i , очевидно, будет равен:

$$\varphi_i = \varphi_k = \frac{1}{\bar{h}_i} \int_{z_{i-1/2}}^{z_{i+1/2}} \varphi(z) dz = -\frac{1}{\bar{h}_i} \frac{2m}{\hbar^2} \alpha \psi_X(z); \quad (\text{П7.13})$$

$$d_i = \int_{z_{i-1/2}}^{z_{i+1/2}} q(z) dz \approx q_i \equiv (q_{i+1} + q_{i-1}) / 2. \quad (\text{П7.14})$$

Все вместе формулы (П7.9)–(П7.14) удовлетворяюь второму порядку точности аппроксимации дифференциального уравнения конечно-разностной схемой. Подставляя аппроксимации интегралов (П7.10)–(П7.14) в (П7.9), получим:

$$\frac{1}{\bar{h}_i} \left(\frac{1}{m_{i+1}} \frac{(\Psi_{\Gamma,i+1} - \Psi_{\Gamma,i})}{h_{i+1}} - \frac{1}{m_{i-1}} \frac{(\Psi_{\Gamma,i} - \Psi_{\Gamma,i-1})}{h_i} \right) - q_i \Psi_{\Gamma,i} + \varphi_i = 0. \quad (\text{П7.15})$$

Проведя эквивалентные преобразования, (П7.15) можно переписать в виде:

$$\Psi_{\Gamma,i+1} + \beta \Psi_{\Gamma,i-1} - (1 + \beta + h_{i+1} \bar{h}_i m_{i+1} q_i) \Psi_{\Gamma,i} + h_{i+1} \bar{h}_i m_{i+1} \varphi_i = 0, \quad (\text{П7.16})$$

где $\beta = \frac{h_{i+1} m_{i+1}}{h_i m_{i-1}}$.

Возвращаясь полностью к изначальным обозначениям в соответствии с (П7.5), получим конечно-разностную схему для всех точек $i = k$:

$$a_k \Psi_{\Gamma, k-1} + b_k \Psi_{\Gamma, k} + c_k \Psi_{\Gamma, k+1} = d_k \Psi_{X, k}, \quad (\text{П7.17})$$

где:

$$\begin{aligned} a_{\Gamma, k} &= \frac{h_{k+1} m_{k+1}}{h_k m_{k-1}}; \\ b_{\Gamma, k} &= -1 - \frac{h_{k+1}}{h_k} \frac{m_{k+1}}{m_{k-1}} + \frac{h_{k+1} \bar{h}_k m_{k+1} 2m(E - V_{\Gamma, k})}{\hbar^2}; \\ c_{\Gamma, k} &= 1; \\ d_{\Gamma, k} &= -\frac{2n_{k+1} m_{k+1} m\alpha}{\hbar^2}. \end{aligned}$$

Еще раз подчеркнем, что схема (П7.17) с коэффициентами, приведенными под ней, должна использоваться лишь для точек с индексами $i \in \{i_1, i_2, \dots, i_{N_b}\}$, то есть для *гетерограниц*. Мы индексируем эти точки через k , чтобы не путать с "обычными" внутренними точками.

Для всех других точек (то есть для $i \notin \{i_1, i_2, \dots, i_{N_b}\}$) в случае, если эффективная масса в пределах слоев остается неизменной, необходимо положить в уравнении (П7.17) $m_{i+1} = m_{i-1} = m_i$, что приведет к выражению:

$$a_i \Psi_{\Gamma, i-1} + b_i \Psi_{\Gamma, i} + c_i \Psi_{\Gamma, i+1} = 0, \quad (\text{П7.18})$$

где:

$$\begin{aligned} a_i &= \frac{h_{i+1}}{h_i}; \\ b_i &= -1 - \frac{h_{i+1}}{h_i} + \frac{h_{i+1} h_i m_i 2m(E - V_{\Gamma, i})}{\hbar^2}; \\ c_i &= 1. \end{aligned}$$

Подчеркнем, что эта схема пригодна для всех точек, кроме $i \in \{i_1, i_2, \dots, i_{N_b}\}$.

Формулы (П7.17) и (П7.18) позволяют сопоставить первому из уравнений (П7.1) его конечно-разностную схему во всех внутренних точках. При ее получении были выполнены

все условия, чтобы она имела второй порядок точности, в чем можно непосредственно убедиться.

Для того чтобы получить конечно-разностную схему для второго уравнения системы (П7.1), необходимо в формулах (П7.17) и (П7.18) везде поменять местами индексы "X" и "Г".

Для того чтобы получить конечно-разностную схему с регулярной сеткой, которая имеет шаг h , необходимо в уравнениях (П7.17) и (П7.18) положить $h_{i-1} = h_i = h_{i+1} \equiv h$.

Наконец, если в (П7.17) положить $\alpha = 0$, то это уравнение будет описывать конечно-разностную схему для $\Gamma(X)$ -долины однодолинной модели (формула (П7.17) при этом не изменится).

П7.3. Уравнения, замыкающие конечно-разностную схему

Уравнения, замыкающие конечно-разностную схему, которая сопоставляется уравнению Шредингера для огибающей волновой функции, может быть полученная из условий непрерывности волновой функции и ее первой производной в точках, являющимися левой и правой границей "квантовой" области устройства, z_0 и z_5 соответственно¹⁰:

$$\begin{cases} \psi^I(z_0) = \psi^{II}(z_0), \\ \frac{1}{m^I(z_{0-})} \frac{d\psi^I(z_0)}{dz} = \frac{1}{m^{II}(z_{0+})} \frac{d\psi^{II}(z_0)}{dz}, \end{cases} \quad (\text{П7.19})$$

$$\begin{cases} \psi^{II}(z_5) = \psi^{III}(z_5), \\ \frac{1}{m^{II}(z_{5-})} \frac{d\psi^{II}(z_5)}{dz} = \frac{1}{m^{III}(z_{5+})} \frac{d\psi^{III}(z_5)}{dz}, \end{cases} \quad (\text{П7.20})$$

где $\psi^{I,II,III}$, $m^{I,II,III}$ – волновые функции и эффективные массы в левом резервуаре, квантовой области и правом резервуаре. В дальнейшем мы не будем указывать, в какой точке берется эффективная масса, поскольку это и так понятно.

¹⁰ Lent C.S. The quantum transmitting boundary method /C.S. Lent, D.J. Kirkner // Journal of Applied Physics. - 1990. - Vol. 67. - P. 6353-6359

В резервуарах вид волновой функции известен: это суперпозиция волн де Бройля; в квантовой области волновая функция обозначается через ψ^{II} , именно она ищется с помощью конечно-разностной схемы, уравнения для крайних точек которой здесь выводятся.

Для электронов из *левого резервуара*:

$$\psi_L(z) = \begin{cases} \psi^{\text{I}}(z) = \exp\{ik_L(z - z_0)\} + r_L \exp\{-ik_L(z - z_0)\}, z < z_0, \\ \psi^{\text{II}}(z), z \in [z_0; z_5], \\ \psi^{\text{III}}(z) = t_L \exp\{ik_R(z - z_5)\}, z > z_5. \end{cases} \quad (\text{П7.21})$$

где $k_{L(R)} = \sqrt{2m_{L(R)}^*(E_z - U_{i_0(i_5)})} / \hbar$.

При этом $\psi^{\text{II}}(z)$ определяется в дискретных точках $\psi_i = \psi_{\text{II}}(z_i) = \psi_{\text{II}}\{\Delta(i - 1)\}$ численным методом.

Найдем уравнение для *левой границы* для электронов из *левого резервуара*.

Учитывая (П7.21), (П7.19) переписывается:

$$\begin{cases} 1 + r_L = \psi_1, \\ ik_L(1 - r_L)\alpha = (\psi_2 - \psi_1) / \Delta, \end{cases} \quad (\text{П7.22})$$

где $\alpha = m_{\text{II}}/m_{\text{I}}$. Во втором уравнении (П7.22) была использована аппроксимация производной:

$$\frac{d\psi^{\text{II}}(z_0)}{dz} \approx \frac{\psi_2 - \psi_1}{\Delta}.$$

Исключая из (П7.22) r_L , находим уравнение, которое замыкает конечно-разностную схему для ψ_L слева:

$$(i\alpha k_L \Delta - 1)\psi_1 + \psi_2 = 2i\alpha k_L \Delta, \quad (\text{П7.23})$$

а также выражение для "комплексного коэффициента отражения" r_L : $r_L = \psi_1 - 1$.

Коэффициент отражения (вероятность отражения) электрона от левой границы активной области равняется¹¹:

$$R_{LR} = \frac{|j_{\leftarrow}^I|}{|j_{\rightarrow}^I|},$$

где $j_{\rightarrow(\leftarrow)}^I$ – плотность потока вероятности в падающей (отраженной) волнах:

$$\psi_{\rightarrow}^I(z) = \exp\{ik_L(z - z_0)\} \quad (\psi_{\leftarrow}^I(z) = -r_L \exp\{-ik_L(z - z_0)\})$$

в первой области, и определяется¹²:

$$j = \frac{i\hbar}{2m^*} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi). \quad (\text{П7.24})$$

Для нахождения $j_{\rightarrow(\leftarrow)}^I$ под ψ в (П7.24) следует понимать $\psi_{\rightarrow(\leftarrow)}^I$. Проведя вычисление, получим:

$$R_{LR} = |r_L|^2 = |\psi_1 - 1|^2. \quad (\text{П7.25})$$

Найдем уравнение для правой границы для электронов из левого резервуара. Учитывая (П7.21), (П7.20) переписывается:

$$\begin{cases} \psi_N = t_L, \\ \frac{m_{III}}{m_{II}} \frac{(\psi_N - \psi_{N-1})}{\Delta} = t_L ik_R, \end{cases}$$

где была использована аппроксимация производной

$$\frac{d\psi^{II}(z_5)}{dz} \approx \frac{\psi_N - \psi_{N-1}}{\Delta}.$$

¹¹ Ландау Л.Д. Квантовая механика (нерелятивистская теория) / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц //. – М.: Физматгиз, 1963. – с. 101.

¹² Блохинцев Д.И. Основы квантовой механики: учебное пособие / Д.И. Блохинцев //. – М.: Наука, 1976. – с. 122.

Из этой системы получим уравнение, которое замыкает конечно-разностную схему для ψ_L справа:

$$(ik_R\Delta - \alpha)\psi_N = \alpha\psi_{N-1} = 0, \quad (\text{П7.26})$$

де $\alpha = m_{\text{III}}/m_{\text{II}}$.

Коэффициент прохождения (вероятность прохождения) электрона через активную область равняется:

$$T_{LR} = \frac{|j_{\rightarrow}^{\text{III}}|}{|j_{\rightarrow}^{\text{I}}|}, \quad (\text{П7.27})$$

где $j_{\rightarrow}^{\text{I(III)}}$ – плотность потока вероятности, соответствующая волне, которая падает на активную область $\psi_{\rightarrow}^{\text{I}}(z) = \exp\{ik_L(z - z_0)\}$ (прошла через активную область $\psi_{\rightarrow}^{\text{III}} = \psi^{\text{III}} = t_L \exp\{ik_R(z - z_5)\}$) и определяется в соответствии с (П7.24). Вычисления дают:

$$T_{LR} = \frac{k_R}{k_L} \frac{m_L}{m_R} |t_L|^2 = \frac{k_R}{k_L} \frac{m_L}{m_R} |\psi_N|^2 \quad (\text{П7.28})$$

Для электронов из *правого* резервуара:

$$\psi_R(z) = \begin{cases} \psi^{\text{I}}(z) = t_R \exp\{-ik_L(z - z_0)\}, & z < z_0, \\ \psi^{\text{II}}(z), & z \in [z_0; z_5], \\ \psi^{\text{III}}(z) = r_R \exp\{ik_R(z - z_5)\} + \exp\{-ik_R(z - z_5)\}, & z > z_5 \end{cases} \quad (\text{П7.29})$$

Уравнения, замыкающие конечно-разностную схему для ψ_R , могут быть получены из (П7.19), (П7.20) и (П7.29).

Найдем уравнение, которое замыкает конечно-разностную схему для левой границы для электронов, которые инжектируются из правого резервуара. Учитывая (П7.29), (П7.19) переписется:

$$\begin{cases} t_R = \psi_1, \\ \frac{m_I}{m_{II}} \frac{\psi_2 - \psi_1}{\Delta} = -ik_L t_R, \end{cases}$$

откуда можно получить уравнение, которое запирает конечно-разностную схему для ψ_R слева:

$$(ik_L \Delta - \alpha)\psi_1 + \alpha\psi_2 = 0, \quad (\text{П7.30})$$

где $\alpha = m_I/m_{II}$.

Аналогично к тому, как было получено (П.28), можно получить выражение для вероятности прохождения электрона через активную область слева направо:

$$T_{RL} = \frac{k_L}{k_R} \frac{m_R}{m_L} |t_R|^2 = \frac{k_L}{k_R} \frac{m_R}{m_L} |\psi_1|^2. \quad (\text{П7.31})$$

Учитывая (П7.29), (П.20) переписывается:

$$\begin{cases} \psi_N = 1 + r_R, \\ \frac{m_{III}}{m_{II}} \frac{\psi_N - \psi_{N-1}}{\Delta} = ik_R (r_R - 1), \end{cases}$$

где $\alpha = m_{III}/m_{II}$. Исключая r_R , получим уравнение, которое запирает конечно-разностную схему для ψ_R справа:

$$\alpha\psi_{N-1} + (ik_R \Delta - \alpha)\psi_N = 2ik_R \Delta. \quad (\text{П7.32})$$

Вероятности отражения электрона от правой границы квантовой области:

$$R_{RL} = |r_R|^2 = |\psi_N - 1|^2. \quad (\text{П7.33})$$

Для дальнейшего изложения результатов работы необходимо сделать замечание относительно коэффициентов прохождения и отражения от границ квантовой области. Для еще

более широкого класса систем, чем рассматриваемая, можно показать, что:

$$T_{RL} = T_{LR} \equiv T, R_{RL} = R_{LR} \equiv R.$$

Это следует из того, что выражения для волновой функции в I и III областях являются формами решения одного и того же дифференциального уравнения (Шредингера).

Заметим, что из (П7.26), (П7.28) и (П7.31), (П7.33) следуют следующие полезные соотношения:

$$|t_R|^2 = \frac{k_R}{k_L} T = \frac{k_R}{k_L} (1 - R),$$

$$|t_L|^2 = \frac{k_L}{k_R} T = \frac{k_L}{k_R} (1 - R).$$