

3 САМОУЗГОДЖЕНА МОДЕЛЬ РЕЗОНАНСНО-ТУНЕЛЬНОГО ДІОДУ

3.1 ОБ'ЄКТ ТА ПРЕДМЕТ МОДЕЛЮВАННЯ

3.2 ПРИПУЩЕННЯ, ПРИЙНЯТІ ПРИ МОДЕЛЮВАННІ

3.3 ПОБУДОВА МОДЕЛІ

3.3.1 Формули для знаходження концентрації електронів у різних областях

3.3.2. Хвильові функції електронів

3.3.3. Пошук самоузгодженого потенціалу

3.3.4 Розрахунок струму через резонансно-тунельний діод

3.4 РЕЗУЛЬТАТИ РОБОТИ МОДЕЛІ

3 САМОУЗГОДЖЕНА МОДЕЛЬ РЕЗОНАНСНО-ТУНЕЛЬНОГО ДІОДУ

3.1 Об'єкт та предмет моделювання

Резонансно-тунельний діод як елемент інтегральних схем зазвичай виготовляється в топології, зображеній на рис. 3.1 [3.1].

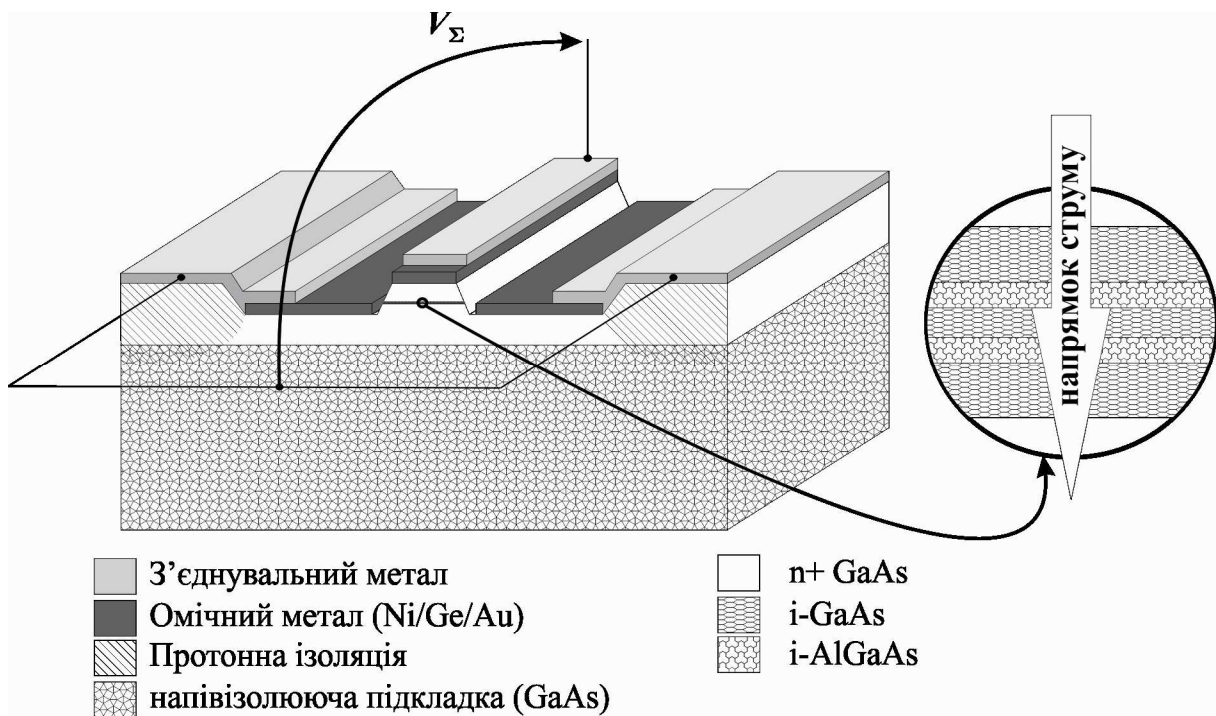


Рисунок 3.1 – Топологія типового інтегрального резонансно-тунельного діоду

За умови прикладання напруги, як показано на рис. 3.1, струм протікає перпендикулярно по відношенню до напрямку вирощування напівпровідникових шарів гетероструктури. Тому такий перенос заряду називають «поперечним».

Омічні контакти разом зі значною частиною високолегованих ділянок проблеми для моделювання не становлять: вважається, що на них відбувається

падіння частини напруги всієї напруги V_{Σ} , що прикладена до компоненту u відповідності з законом Ома. В цій частині розглядаються лише процеси, які відбуваються в та поблизу шаруватої нанорозмірної гетероструктури, що на рис. 3.1 зображена праворуч.

Кінцевою метою моделювання електричних характеристик резонансно-тунельного діоду є отримання статичних електричних характеристик. Однак для відслідковування причинно-наслідкових зв'язків між фізико-топологічними параметрами резонансно-тунельного діоду та його статичними характеристиками можливе та здійснено обчислення розподілу таких важливих величин, як: концентрація електронів $n(z)$, густина електронних станів $g(E_z, z)$ та повна функція розподілу $N(E_z, z)$, коефіцієнт передачі за поперечною енергією $T(E_z)$, де z – напрямок переносу заряду (що перпендикулярний до напрямку росту гетероструктури), E_z – так звана «поперечна» складова енергії електрона E .

3.2 ПРИПУЩЕННЯ, ПРИЙНЯТІ ПРИ МОДЕЛЮВАННІ

Для раціонального використання обчислювальних ресурсів РТД умовно поділяють на три області: лівий та правий «резервуари», а також активну область (див. рис. 3.1).

До лівого та правого резервуару відносять сильнолеговані області, які складаються з вузькозонного напівпровідника. До активної області відносять ДБКС, а також спейсери, тобто всі нелеговані ділянки. Область моделювання починається в точці з координатою $z = 0$ та має довжину L . Вона вибирається так, щоб за її межами був відсутній просторовий заряд.

Описане розділення необхідно і є досить добре обґрунтованим, про що йтиметься далі.

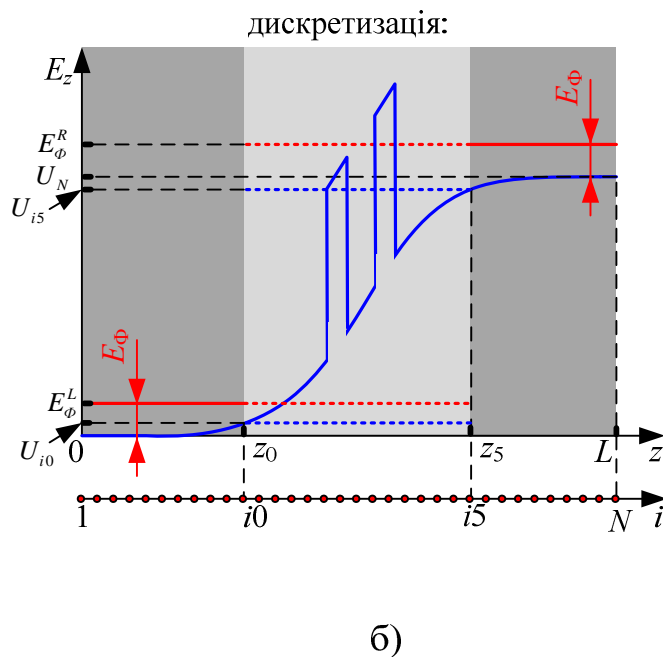
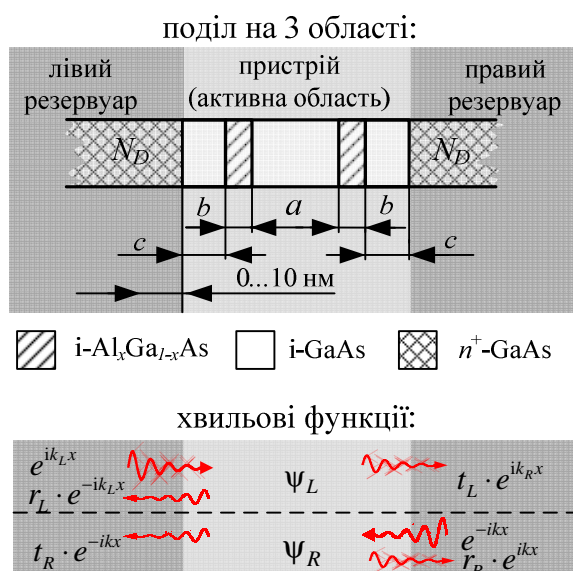


Рисунок 3.2 – До питання припущень, прийнятих при моделюванні:

а) поділ на 3 області;

б) дискретизація

Електрони в «резервуарах» описуються як квазікласичні частинки, що мають масу, яка дорівнює ефективній масі у відповідному тривимірному напівпровіднику (в англійській літературі «bulk semiconductor», що дослівно означає «масивний напівпровідник»). Електрони в резервуарах знаходяться у термодинамічній рівновазі. Однак, при ненульовій напрузі енергія Фермі електронів у правому та лівому резервуарах (E_Φ^R та E_Φ^L відповідно) відрізняються на величину прикладеної напруги: т. зв. квазі-рівні Фермі (рис. 3.2, б). Та частина потенціальної енергії електрона, що зумовлена прикладеною напругою $-eV(z)$ у лівому резервуарі покладається рівною нулю ($V(z)$ – це потенціал в точці z): $V(z)=0$, якщо $z < 0$, а в правому резервуарі відповідна потенціальна енергія $-eV(z) = -eV_{act}$, якщо $z > L$, де V_{act} – падіння напруги на активній області.

Оскільки всі пасивні та активна області РТД конструктивно з'єднані послідовно, то не має сенсу постійно враховувати падіння напруги на пасивних областях, обумовлене їх сумарним опором $R_{п}$, а є сенс пізніше перерахувати,

знаючи опори резервуарів та контактних областей, а також залежність густини струму через активну область від падіння напруги на ній: $I(V_{act})$. Еквівалентна схема може бути представлена у вигляді послідовно з'єднаних резистора, що має опір R_{Π} , та пасивного нелінійного елемента, що має вольтамперну характеристику $I(V_{act})$, пошук якої є основним завданням цього розділу. Формула для перерахунку має вигляд $I(V_{\Sigma}) = I(V_{act} + IR_{\Pi})$, або якщо знайти $V_{act}(I)$ замість $I(V_{act})$, то у явному вигляді можна отримати:

$$V_{\Sigma} = V_{act}(I) + IR_{\Pi} \quad (3.1)$$

Електрони в активній області розглядаються:

- в напрямку переносу $0z$ – як квантові безспінові квазічастинки з масою, що дорівнює ефективній масі електрона вздовж $0z$ у відповідному напівпровіднику, $m_z(z)$;
- в напрямках, що перпендикулярні напрямку переносу, – як квазікласичні частинки з ефективними масами у відповідних напрямках.

У випадку ізотропності долини, електрони якої беруть участь у процесі переносу заряду, всі згадані ефективні маси є рівними і дорівнюють звичайній ефективній масі у відповідній долині.

Таким чином, квантові властивості електрона безпосередньо враховуються лише в напрямку $0z$. В інших напрямках його квантові властивості враховуються ефективно.

Вважається, що електрон в активній області знаходиться під дією наступних полів:

- поля огинаючої функції кристалічної решітки, потенціальна енергія електрона в якому дорівнює так званому «потенціальному рельєфу» $E_c(z)$. Для областей, що складаються з найбільш вузькозонного напівпровідника приймається, що $E_c = 0$;
- поля, зумовленого прикладеною до активної області напругою та зарядом некомпенсованих електронів, так званим самоузгодженим полем $U_s(z)$.

Тому сумарна потенціальна енергія електрона в цих полях дорівнює:

$$U(z) = E_c(z) + U_s(z) \quad (3.2)$$

Довжина резервуарів значно (в середньому від 1 до 2 порядків) перевищує довжину всієї активної області. Це дає підстави вважати резервуари напівнескінченними у розрахунках, що проводяться для активної області, і не враховувати зовсім, скажімо, відбиття електронних хвиль від місця контакту сильнолегованих областей з областями металізації та можливі ефекти, що пов'язані зі скінченністю резервуарів.

Підкреслимо, що це зовсім не означає, що падінням напруги на резервуарах буде знехтувано. Це падіння буде враховано апостеріорно відповідно до (3.1).

3.3 ПОБУДОВА МОДЕЛІ

Виходячи з прийнятих припущень, побудова моделі має включати кроки, які спрямовані на знаходження:

- концентрації електронів $n(z)$,
- самоузгодженого потенціалу $V_s(z)$
- густини електронних станів $g(E_z, z)$
- повної функції розподілу $N(E_z, z)$,
- коефіцієнту передачі за поперечною енергією $T(E_z)$.

3.3.1 Формули для знаходження концентрації електронів у різних областях

Спочатку припустимо, що самоузгоджений потенціал $V_{scf}(z)$ знайдено.

Вихідним положенням для знаходження концентрації електронів є поділ області, що моделюється, на квантову та класичну області, тобто «пристрій» та «резервуари» (рис. 3.2, б).

До квантової області належать ДБКС та спейсери. До класичних областей належить ділянка високолегованих областей такої довжини, яка необхідна для того, щоб на її кінцях концентрація та потенціал вирівнювався до своїх рівноважних значень зі вказаною точністю. На практиці обирається такі ділянки довжиною десятки нанометрів.

На рис. 3.2, б квантовій області відповідає область $z \in [z_0; z_5]$, де $z_0 = (i0 - 1)\Delta$, $z_5 = (i5 - 1)\Delta$. Області $z \in [0; z_0]$ та $z \in [z_5; L]$ відносяться до лівого та правого резервуару відповідно.

Вважається, що електрони в класичних областях підпорядковані статистиці Фермі-Дірака.

Електронний газ у всьому *лівому резервуарі* підпорядковується статистиці Фермі-Дірака з параметром:

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

у правому:

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

Тут $U(z) = E_c + U_s$, тобто сума потенціальної енергії електрона в кристалічній решітці E_c та самоузгодженого потенціалу U_s . На границях ділянки, що моделюється, очевидно, $E_c = 0$.

Тут L – довжина ділянки, що моделюється; $U_i = (i - 1)\Delta$; E_{Φ} – це приведений до дна зони провідності рівень Фермі електронів у високолегованих областях. Він визначається як корінь рівняння:

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

де N_D^+ – концентрація іонізованих домішок, h – стала Планка, k – стала Больцмана, T – температура кристалічної решітки, m_c^* – ефективна маса густини станів електрона.

Профіль дна зони провідності у класичних областях, або інакше – потенціальна енергія електрона в кристалі $U(z)$ знаходяться як розв'язок рівняння Пуассона для всієї ділянки, що моделюється.

Він визначає для класичних лівої та правої ділянок густину станів тривимірного електронного газу.

В довільній точці i (мається на увазі точку з координатою $z_i = \Delta(i-1)$) лівої чи правої класичної області:

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

В той же час, функція Фермі для лівого (правого) резервуару:

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

Таким чином, в довільній точці i лівого (правого) резервуару концентрація може бути віднайдена за формулою:

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

У загальному вигляді концентрацію електронів у неоднорідній області можна визначити, взявши потрійний інтеграл:

$$n = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(\mathbf{k})|^2 N(\mathbf{k}) d^3k \quad (3.3)$$

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

$$n = n_R + n_L \quad (3.4)$$

При переході від (3.3) до (3.4) вважалося, що:

1. Ймовірність заповнення електронних станів, тобто функція розподілу електронів по енергіях співпадає з рівноважною у відповідному резервуарі, що помножена на відповідну ймовірність $|\psi(\mathbf{k})|^2$. Для класичних областей вище було припущено, що електрони в резервуарах підпорядковані рівноважній статистиці Фермі. Це припущення використовується і для квантової області.

Відповідні рівні Фермі в квантових областях позначено на рис.3.2, б пунктирними лініями, що стають суцільними в класичних областях, де енергія Фермі має безпосередній фізичний зміст.

2. Густина станів вважається рівною густині станів у граничних з квантовою областю точках, тобто точці $z_0 = (i0 - 1)\Delta$ для електронів, що інжектуються з лівого резервуару та $z_5 = (i5 - 1)\Delta$ для електронів, що інжектуються з правого резервуару.

Прийняті для квантових областей початки відліку функції густини станів (тобто енергії, за яких густина станів дорівнює 0) позначені на рис. 3.2, б пунктирними лініями. В класичних областях вони позначені суцільною лінією; поняття «густина станів» там має безпосередній зміст, чого не можна сказати про квантову область.

Доданки формули (3.4) отримано, виходячи з наступних суджень.

Інтегрування проводиться по всім складовим хвильового вектора k_x та k_y (що паралельні до напрямку росту гетероструктури) та по додатнім (від'ємним) складовим k_z , що відповідає електрону, що балістично рухається зліва праворуч (з права ліворуч):

$$n_{L(R)} = \int_{0(-\infty)}^{\infty(0)} |\Psi_{L(R)}(E_z(k_z))|^2 dk_z \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} N(\mathbf{k}) dk_x dk_y \quad (3.5)$$

В формулі (3.5) $N(\mathbf{k}) = g(\mathbf{k})f(\mathbf{k})$, які в свою чергу:

$g(\mathbf{k}) = \frac{2}{(2\pi)^3}$ – густина k -станів для тривимірного кристалу;

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

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

– модифікована функція Фермі-Дірака.

Остання рівність зумовлена тим, що закон дисперсії для електронів, що інжектуються з лівого (правого) резервуару¹:

¹ Цим ми прирівнюємо густину станів у квантовій області до густини станів у точці $i0$. Зрозуміло, що в квантовій області вже не можна говорити про густину електронних станів, оскільки це суперечить можливості тунелювання. Найбільш логічно припустити, що повна енергетична функція розподілу електронів $N(E)$ електронів у квантовій області співпадає з $N(E)$ в крайній точці $i0$ (де електрони ще вважаються розподіленими рівноважно), що помножена на відповідну ймовірність.

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

В останній рівності вважається, що $E_z = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} + U_{i0(i5)}$, що вказує на те, що поля, в яких знаходиться електрон змінюють лише z -складову його енергії².

Рівень Фермі у лівому(правому) резервуарі, як видно з рис. 3.2, б:

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

Підставляючи ці значення $g(\mathbf{k})$ та $f(\mathbf{k}, k_\phi)$ у (3.5) та проводячи інтегрування по двом проєкціям \mathbf{k} , отримаємо формули для $n_{L(R)}$:

$$n_{L(R)} = N'_c \int_{U_{i0(i5)}}^{\infty} \frac{|\psi_{L(R)}(E_z(k_z), z)|^2}{\sqrt{E_z - U_{i0(i5)}}} \ln \left(1 + \exp \left(-\frac{E_z - (E_\phi + U_{1(N)})}{k_B T} \right) \right) dE_z, \quad (3.6)$$

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

3.3.2 Хвильові функції електронів

У формулу для концентрації електронів (3.6) входять поки що невідомі хвильові функції електронів з правого (лівого) резервуару $\psi_{L(R)}(E_z(k_z), z)$. За

² таке припущення було зроблене для того, щоб забезпечити однаковий початок відліку енергії для лівого та правого резервуару. Це необхідно з точки зору того, що $|\psi_L(E_z(k_z), z)|^2$ та $|\psi_R(E_z(k_z), z)|^2$ розраховуються в одному циклі, тому для них недоцільно вибирати різні початки відліку енергії для лівого та правого резервуару.

умови пошуку цих функцій на дискретній сітці виникає необхідність дискретизації рівняння Шредінгера для огинаючої хвильової функції електрона (далі просто «хвильової функції»):

$$\frac{d}{dz} \frac{1}{m^*(z)} \frac{d\psi(z)}{dz} + \frac{2}{\hbar^2} (E - U(z)) \psi(z) = 0 \quad (3.7)$$

Спочатку знайдемо кінцево-різницеву схему, що відповідає рівнянню Шредінгера у *внутрішніх* точках.

Для скорочення викладок позначимо

$$\varepsilon(z) = \frac{m_0}{m^*(z)}, \quad (3.8)$$

Ця величина має сенс оберненої відносної ефективної маси.

Враховуючи (3.8), (3.7) перепишеться:

$$\frac{d}{dz} \frac{1}{\varepsilon(z)} \frac{d\psi(z)}{dz} + \frac{2m_0}{\hbar^2} (E - U(z)) \psi(z) = 0 \quad (3.9)$$

Перший доданок у лівій частині можна перетворити, використовуючи правило диференціювання добутку функцій $\varepsilon(z)$ та $\psi'(z) \equiv \frac{d\psi}{dz}$:

$$\frac{d}{dz} \varepsilon(z) \frac{d\psi}{dz} = \varepsilon'(z) \psi'(z) + \varepsilon(z) \psi''(z).$$

Дискретизація лівої частини рівняння Шредінгера в точках $z_i = \Delta(i-1)$ проводиться по таким формулам:

$$\varepsilon'(z_i) = \frac{1}{2} \left[\frac{\varepsilon_{i+1} - \varepsilon_i}{\Delta} + \frac{\varepsilon_i - \varepsilon_{i-1}}{\Delta} \right] = \frac{\varepsilon_{i+1} - \varepsilon_{i-1}}{2\Delta}$$

(тобто середнє між «правою» на «лівою» похідною в точці i).

Цілком аналогічно:

$$\psi'(z_i) = \frac{\psi_{i+1} - \psi_{i-1}}{2\Delta}.$$

Друга похідна хвильової функції знаходиться звичайним чином:

$$\psi''(z_i) = \frac{\psi_{i+1} + \psi_{i-1} - 2\psi_i}{\Delta^2}.$$

З урахуванням всього вищесказаного кінцево-різницева схема (3.7) для точки $z_i = \Delta(i-1)$ переписеться у вигляді:

$$a_i \psi_{i-1} + b_i(E) \psi_i + c_i \psi_{i+1} = 0, \quad (3.10)$$

де $a_i = -\epsilon_{i+1} + \epsilon_{i-1} + 4\epsilon_i$, $c_i = \epsilon_{i+1} - \epsilon_{i-1} + 4\epsilon_i$, $b_i(E) = 8 \left(-\epsilon_i + \frac{m_0 \cdot \Delta^2}{\hbar^2} (E - U_i) \right)$, або,

повернувшись за допомогою (3.8) до $m^*(z)$:

$$\begin{aligned} a_i &= -1/m_{i+1}^* + 1/m_{i-1}^* + 4/m_i^*, \\ c_i &= 1/m_{i+1}^* - 1/m_{i-1}^* + 4/m_i^*, \\ b_i(E) &= 8 \left(-\frac{1}{m_i^*} + \frac{m_0 \cdot \Delta^2 (E - U_i)}{\hbar^2} \right). \end{aligned}$$

Рівняння, що замикають кінцево-різницеву схему, що відповідає рівнянню Шредінгера, можуть бути отримані з умов неперервності хвильової функції та її першої похідної в точках, що є лівою та правою границею «квантової» області пристрою, z_0 та z_5 відповідно:

$$\begin{cases} \psi^I(z_0) = \psi^{II}(z_0), \\ \frac{d\psi^I(z_0)}{dz} = \frac{d\psi^{II}(z_0)}{dz}; \end{cases} \quad (3.11)$$

$$\begin{cases} \psi^{II}(z_5) = \psi^{III}(z_5), \\ \frac{d\psi^{II}(z_5)}{dz} = \frac{d\psi^{III}(z_5)}{dz}. \end{cases} \quad (3.12)$$

Для електронів з *лівого резервуару* (див. рис. 3.2, а):

$$\psi_L(z) = \begin{cases} \psi^I(z) = \exp\{ik_L(z - z_0)\} + r_L \exp\{-ik_L(z - z_0)\}, \text{ при } z \in [-\infty; z_0], \\ \psi^{II}(z), \text{ при } z \in [z_0; z_5], \\ \psi^{III}(z) = t_L \exp\{ik_R(z - z_5)\}, \text{ при } z \in [z_5; +\infty]. \end{cases} \quad (3.13)$$

де $k_{L(R)} = \sqrt{2m^*(E_z - U_{i0(i5)})} / \hbar$,

При цьому $\psi^{II}(z)$ визначається в дискретних точках $\psi_i = \psi^{II}(z_i) = \psi^{II}(\Delta(i-1))$ чисельним методом.

Знайдемо рівняння для *лівої границі* для електронів з *лівого резервуару*.

Враховуючи (3.13), (3.11) переписуться:

$$\begin{cases} 1 + r_L = \psi_1, \\ ik_L(1 - r_L) = (\psi_2 - \psi_1) / \Delta, \end{cases} \quad (3.14)$$

де в другому рівнянні було використана апроксимація похідної

$$\frac{d\psi^{II}(z_0)}{dz} = \frac{\psi_2 - \psi_1}{\Delta}.$$

Виключаючи з (3.14) r_L , знаходимо рівняння, що замикає кінцево-різницеву схему для ψ_L ліворуч:

$$(ik_L\Delta - 1)\psi_1 + \psi_2 = 2ik_L\Delta, \quad (3.15)$$

а також вираз для «комплексного коефіцієнта відбивання» r_L : $r_L = \psi_1 - 1$.

Коефіцієнт відбивання (ймовірність відбивання) електрона від лівої границі активної області дорівнює [3.2]:

$$R_{LR} = \frac{|j_{\leftarrow}^I|}{|j_{\rightarrow}^I|},$$

де $j_{\rightarrow(\leftarrow)}^I$ – густина потоку ймовірності, що відповідає падаючій: $\psi_{\rightarrow}^I(z) = \exp\{ik_L(z - z_0)\}$ (відбитій: $\psi_{\leftarrow}^I(z) = -r_L \exp\{-ik_L(z - z_0)\}$) хвилям в першій області, та визначається [3.3, с. 122]:

$$j = \frac{i\hbar}{2m^*} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi). \quad (3.16)$$

Для знаходження $j_{\rightarrow(\leftarrow)}^I$ під ψ в (5) слід розуміти $\psi_{\rightarrow(\leftarrow)}^I$. Провівши обчислення, отримаємо:

$$R_{LR} = |r_L|^2 = |\psi_1 - 1|^2. \quad (3.17)$$

Знайдемо рівняння для *правої границі* для електронів з *лівого резервуару*. Враховуючи (3.13), (3.12) перепишеться:

$$\begin{cases} \psi_N = t_L \\ (\psi_N - \psi_{N-1}) / \Delta = t_L ik_R \end{cases},$$

де було використано апроксимацію похідної

$$\frac{d\psi^{\text{II}}(z_5)}{dz} = \frac{\psi_N - \psi_{N-1}}{\Delta}.$$

З цієї системи отримаємо рівняння, що замикає кінцево-різницеву схему для ψ_L праворуч:

$$(ik_R\Delta - 1)\psi_N + \psi_{N-1} = 0. \quad (3.18)$$

Коефіцієнт проходження (ймовірність проходження) електрона через активну область дорівнює [3.2, с. 101]:

$$T_{LR} = \frac{|j_{\rightarrow}^{\text{III}}|}{|j_{\rightarrow}^{\text{I}}|}, \quad (3.19)$$

де $j_{\rightarrow}^{\text{I(III)}}$ – густина потоку ймовірності, що відповідає частинці, що падає на активну область $\psi_{\rightarrow}^{\text{I}}(z) = \exp\{ik_L(z - z_0)\}$ (пройшла через активну область $\psi_{\rightarrow}^{\text{III}} = \psi^{\text{III}} = t_L \exp\{ik_R(z - z_5)\}$) та визначається відповідно до (3.16). Обчислення дають:

$$T_{LR} = \frac{k_R}{k_L} |t_L|^2 = \frac{k_R}{k_L} |\psi_N|^2 \quad (3.20)$$

Для електронів з *правого резервуару* (див. рис. 3.2, а):

$$\psi_R(z) = \begin{cases} \psi^{\text{I}}(z) = t_R \exp\{-ik_L(z - z_0)\}, \text{ при } z \in [-\infty; z_0], \\ \psi^{\text{II}}(z), \text{ при } z \in [z_0; z_5], \\ \psi^{\text{III}}(z) = r_R \exp\{ik_R(z - z_5)\} + \exp\{-ik_R(z - z_5)\}, \text{ при } z \in [z_5; +\infty]. \end{cases} \quad (3.21)$$

Рівняння, що замикають кінцево-різницеву схему, що відповідає рівнянню Шредінгера, можуть бути отримані з (3.12) та (3.13).

Знайдемо рівняння, що замикає кінцево-різницеву схему для лівої границі для електронів, що інжектуються з правого резервуару. Враховуючи (3.21), (3.11) переписуться:

$$\begin{cases} t_R = \psi_1, \\ (\psi_2 - \psi_1) / \Delta = -ik_L t_R, \end{cases}$$

звідки можна отримати, яке замикає кінцево-різницеву схему для ψ_R ліворуч:

$$(ik_L \Delta - 1)\psi_1 + \psi_2 = 0. \quad (3.22)$$

Аналогічно до того, як було отримано (3.20), можна отримати вираз для ймовірності проходження електрона через активну область зліва направо:

$$T_{RL} = \frac{k_L}{k_R} |t_R|^2 = \frac{k_L}{k_R} |\psi_1|^2. \quad (3.23)$$

Враховуючи (3.21), (3.12) переписуться:

$$\begin{cases} \psi_N = 1 + r_R, \\ (\psi_N - \psi_{N-1}) / \Delta = ik_R (r_R - 1). \end{cases}$$

Виключаючи r_R , отримаємо рівняння, що замикає кінцево-різницеву схему для ψ_R праворуч:

$$\psi_{N-1} + (ik_R \Delta - 1)\psi_N = 2ik_R \Delta. \quad (3.24)$$

Ймовірності відбиття електрона від правої границі квантової області:

$$R_{RL} = |r_R|^2 = |\psi_N - 1|^2. \quad (3.25)$$

Для подальшого викладу результатів роботи необхідно зробити зауваження стосовно коефіцієнтів проходження та відбивання від границь квантової області. В [3.2, с. 102] для ще більш широкого класу систем, ніж та, що нами розглядається, показано, що:

$$T_{RL} = T_{LR} \equiv T, \quad R_{RL} = R_{LR} \equiv R.$$

Це випливає з того, що вирази для хвильової функції в I та III областях є формами розв'язання одного й того ж диференціального рівняння (Шредінгера).

Зауважимо, що з (3.17), (3.20) та (3.23), (3.25) слідують наступні співвідношення, які нам в подальшому знадобляться:

$$|t_R|^2 = \frac{k_R}{k_L} T = \frac{k_R}{k_L} (1 - R), \quad (3.26)$$

$$|t_L|^2 = \frac{k_L}{k_R} T = \frac{k_L}{k_R} (1 - R). \quad (3.27)$$

Рівняння (3.10), (3.15), (3.18), (3.22) та (3.24) формують кінцево-різницеві схеми рівнянь Шредінгера для ψ_L та ψ_R для усіх N_k точок, на які розбита активна область довжиною L_a . Для їх розв'язання використовується метод Томаса [3.4].

3.3.3 Пошук самоузгодженого потенціалу

Для того, щоб можна було користуватися одноелектронною картиною, було зроблено припущення про те, що кожний електрон рухається під дією поля, що його створюють всі решта електронів та іонів (поля просторового заряду). Потенціал цього поля – так званий самоузгоджений потенціал V_s – може бути знайдений з рівняння Пуассона:

$$\frac{d}{dz} \epsilon(z) \frac{dV_s}{dz} = \frac{e}{\epsilon_0} [n(z) - N^+(x)], \quad (3.28)$$

де ϵ_0 – діелектрична стала;

ϵ – відносна діелектрична проникність;

e – елементарний заряд.

Цим припущенням створена можливість знаходити найкращі «одноелектронні» наближення для розподілу концентрації та потенціалу.

Ані V_s , ані $n(z)$ невідомі апіорі. Однак, відомо, що $n(z)$ визначається сумою формул (3.6), які є функціями V_s : $-eV_s = U_s$, а $U(z) = E_c(z) + U_s(z)$ – потенціальна енергія електрона у полі кристалічної решітки та просторового заряду, величина, яку ми дотепер вважали даною.

Таким чином, (3.28) та (3.6) становлять систему інтегро-диференціальних рівнянь, які необхідно розв'язати, щоб досягнути мети роботи. Оскільки (3.6) залежить від V_s переважно в частині $\Psi_{L(R)}$, які в свою чергу є розв'язками рівняння Шредінгера, то часто говорять про самоузгоджену систему рівнянь Шредінгера-Пуассона, але це некоректно, оскільки рівняння Шредінгера одночастинкове, а Пуассона – застосовне для неперервного розподілу заряду, що само собою має на увазі наявність великої кількості електронів.

Знайдемо кінцево-різницеву схему, що відповідає рівнянню Пуассона на вибраній нами дискретній сітці.

Ліву частину (3.28) можна перетворити, використовуючи правило диференціювання добутку функцій $\epsilon(z)$ та $V_s' \equiv \frac{dV_s}{dz}$:

$$\frac{d}{dz} \epsilon(z) \frac{dV_s}{dz} = \epsilon'(z) V_s'(z) + \epsilon(z) V_s''(z).$$

Дискретизація лівої частини рівняння Пуассона в точках $z_i = \Delta(i-1)$

проводиться по таким формулам:

$$\varepsilon'(z_i) = \frac{1}{2} \left[\frac{\varepsilon_{i+1} - \varepsilon_i}{\Delta} + \frac{\varepsilon_i - \varepsilon_{i-1}}{\Delta} \right] = \frac{\varepsilon_{i+1} - \varepsilon_{i-1}}{2\Delta}$$

(тобто середнє між «правою» на «лівою» похідною в точці i).

Цілком аналогічно:

$$V'(z_i) = \frac{V_{i+1} - V_{i-1}}{2\Delta}.$$

Друга похідна потенціалу знаходиться звичайним чином:

$$V''(z_i) = \frac{V_{i+1} + V_{i-1} - 2V_i}{\Delta^2}.$$

Результатом дискретизації рівняння Пуассона для всіх точок $i = 2 \dots N - 1$ є кінцево-різницева схема:

$$a_i V_{i-1} + c_i V_{i+1} + b_i V_i = d_i, \quad (3.29)$$

де:

$$a_i = \frac{-\varepsilon_{i+1} + \varepsilon_{i-1} + 4\varepsilon_i}{4\Delta^2},$$

$$c_i = \frac{+\varepsilon_{i+1} - \varepsilon_{i-1} + 4\varepsilon_i}{4\Delta^2},$$

$$b_i = -\frac{2\varepsilon_i}{\Delta^2},$$

$$d_i = \frac{q_e}{\varepsilon_0} (n_i - N_i)$$

Виконання граничних умов першого типу призведе до таких рівнянь для крайніх точок:

$V_1 = 0$, що рівносильне рівностям $a = 0, c = 0, b = 1, d = 0$ у схемі (3.29).

$V_N = V_{act}$, що рівносильне рівностям $a = 0, c = 0, b = 1, d = V_{sum}$ у схемі (3.29).

Безпосередньо з рівняння Пуассона можна зі старого V^{old} знайти нове наближення для потенціалу V^{new} по формулі:

$$V^{new} = V^{old} + \alpha(V^{new} - V^{old}),$$

де $\alpha \leq 1$. При $\alpha = 1$ це будуть так звані прості ітерації між рівняннями для концентрації та Пуассона; процес сходження ітераційного процесу буде нестабільним; а для $\alpha < 0$ цей метод буде більш стабільним та більш повільним. Такий алгоритм називається «релаксаційним» [3.5].

В [3.5] приведені рівняння для знаходження нового наближення до самоузгодженого потенціалу лінеаризованим методом Гумеля у наближенні сталої відносної діелектричної проникності. Скасовуючи це наближення, таке рівняння приймає вигляд:

$$\frac{d}{dx} \epsilon(x) \frac{dV^{new}}{dx} - \frac{q_e n_{old}}{\epsilon_0 V_{ref}} V^{new} = \frac{q_e}{\epsilon_0} \left[n^{old} \left(1 - \frac{V^{old}}{V_{ref}} \right) - N_D \right]. \quad (3.30)$$

Тут V_{ref} – так званий «*reference potential*» приймався рівним тепловому:

$$V_{ref} = kT / e.$$

Права частина кінцево-різницевої схеми, що відповідає, яку ми запишемо у вигляді

$$\tilde{a}_i V_{i-1} + \tilde{c}_i V_{i+1} + \tilde{b}_i V_i = \tilde{d}_i$$

буде відрізнятися від (3.29) лише членом \tilde{b}_i . Тут він набуде вигляду:

$$\tilde{b}_i = b_i - \frac{q_e n_i^{old}}{\epsilon_0 V_{ref}} = -\frac{2\epsilon_i}{\Delta^2} - \frac{q_e n_i^{old}}{\epsilon_0 V_{ref}}.$$

При цьому:

$$\tilde{a}_i = a_i, \tilde{c}_i = c_i.$$

Права частина кінцево-різницевої схеми, що відповідає (3.30), має вигляд:

$$\tilde{d}_i = \frac{q_e}{\epsilon_0} \left[n_i^{old} \left(1 - \frac{V_i^{old}}{V_{ref}} \right) - N_i \right].$$

Нове наближення, що є розв'язком рівняння (3.30) використовується для знаходження нового значення концентрації. Метод збігається досить швидко (в 10 разів швидше, ніж «релаксаційний алгоритм») та є стабільним.

Ітерації продовжуються доти, доки максимальне значення $\left| (V_i^{new} - V_i^{old}) / V_i^{new} \right|$ настане меншою за деяку величину tol , типові значення якої вибираються з-поміж $10^{-4} \dots 10^{-2}$.

3.3.4 Розрахунок струму через резонансно-тунельний діод

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

$$\mathbf{J} = e \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{v}(k_z, z) N(\mathbf{k}) dk_x dk_y dk_z \quad (3.31)$$

де $N(\mathbf{k})$ – функція розподілу електронів в квантовій області:

$$N(\mathbf{k}, z) = \begin{cases} N_L(\mathbf{k}) \cdot |\psi_L(k_z, z)|^2 \equiv N_{LR}(\mathbf{k}, z), \text{ якщо } k_z > 0, \\ N_R(\mathbf{k}) \cdot |\psi_R(k_z, z)|^2 \equiv N_{RL}(\mathbf{k}, z), \text{ якщо } k_z < 0; \end{cases} \quad (3.32)$$

$\mathbf{v}(k_z, z)$ – середня швидкість електрона в точці z , що визначається як густина потоку ймовірності, що поділена на саму густину ймовірності (3.3, с. 123):

$$\mathbf{v}(\mathbf{k}, z) = \frac{\mathbf{j}(\mathbf{k}, z)}{|\psi(\mathbf{k}, z)|^2} = \frac{i\hbar}{2m^*} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi) / |\psi(\mathbf{k}, z)|^2 \quad (3.33)$$

Для різних знаків проекції хвильового вектору $\mathbf{j}(\mathbf{k}, z)$ запишеться:

$$\mathbf{j}(\mathbf{k}) \equiv \mathbf{j}_{LR} = \frac{i\hbar}{2m^*} (\psi_L \nabla \psi_L^* - \psi_L^* \nabla \psi_L), \text{ якщо } k_z > 0;$$

$$\mathbf{j}(\mathbf{k}) \equiv \mathbf{j}_{RL} = \frac{i\hbar}{2m^*} (\psi_R \nabla \psi_R^* - \psi_R^* \nabla \psi_R), \text{ якщо } k_z < 0.$$

Враховуючи (3.32) та (3.33), (3.31) набуде вигляду:

$$\mathbf{J}(z) = e \underbrace{\int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty \mathbf{j}_{LR}(k_z, z) N_L(\mathbf{k}) dk_z dk_x dk_y}_{\equiv \mathbf{J}_{LR}} + e \underbrace{\int_{-\infty}^0 \int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty \mathbf{j}_{RL}(k_z, z) N_R(\mathbf{k}) dk_z dk_x dk_y}_{\equiv \mathbf{J}_{RL}} \quad (3.34)$$

Провівши інтегрування по проекціям хвильового числа k_x та k_y , а також замінивши інтегрування по k_z на інтегрування по E_z , отримаємо:

$$\mathbf{J}_{LR} = \frac{\sqrt{2}(m^*)^{3/2} e k_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3} \int_{U_{i0}}^\infty \frac{\mathbf{j}_{LR}(E_z(k_z), z)}{\sqrt{E_z - U_{i0}}} \ln \left(1 + \exp \left(-\frac{E_z - (E_\Phi + U_1)}{k_B T} \right) \right) dE_z, \quad (3.35)$$

$$\mathbf{J}_{RL} = \frac{\sqrt{2}(m^*)^{3/2} e k_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3} \int_{U_{i5}}^\infty \frac{\mathbf{j}_{RL}(E_z(k_z), z)}{\sqrt{E_z - U_{i5}}} \ln \left(1 + \exp \left(-\frac{E_z - (E_\Phi + U_N)}{k_B T} \right) \right) dE_z. \quad (3.36)$$

Очевидно, що виконуються:

- закони збереження заряду в квантовій механіці:

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

-

(для стаціонарних процесів $e\partial|\psi|^2 / \partial t = 0$);

- закони збереження заряду в класичній електродинаміці як усереднення першого по всьому ансамблю:

-

$$- \frac{\partial q}{\partial t} + \text{div} \mathbf{J}_{LR(RL)} = 0;$$

-

(для стаціонарних процесів знову ж таки $\partial q / \partial t = 0$).

З них, зокрема, слідує, що $\mathbf{J}(z) = \text{const}$ в квантовій області. Це означає, що для обчислення струму можна вибрати будь-яку точку на осі Oz , і обчислити струм саме в ній. Покажемо, як, користуючись цим, можна отримати, зокрема, формулу Цу-Есакі [3.6] з модифікаціями, які ввели [3.7].

Для цього знайдемо \mathbf{j}_{LR} в точці $z = z_5$ та \mathbf{j}_{RL} в точці $z = z_0$, користуючись, зокрема, (3.26) та (3.27):

$$\mathbf{j}_{LR}(z) = \mathbf{j}_{LR}(z_5) = \frac{\hbar k_L}{m^*} T \mathbf{e}_z \quad (3.37)$$

$$\mathbf{j}_{RL}(z) = \mathbf{j}_{RL}(z_0) = -\frac{\hbar k_R}{m^*} T \mathbf{e}_z \quad (3.38)$$

Відмітимо, що в (3.35) та (3.36)

$$\frac{1}{\sqrt{E_z - U_{i0(5)}}} = \frac{\sqrt{2m^*}}{\hbar k_{L(R)}},$$

а тому:

$$\frac{\mathbf{j}_{LR(RL)}}{\sqrt{E_z - U_{i0(i5)}}} = \pm \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{m^*}} T \mathbf{e}_z.$$

Підставляючи це значення до (3.35) та (3.36), отримаємо:

$$\mathbf{J}_{LR} = \mathbf{e}_z \frac{2m^* e k_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3} \int_{U_{i0}}^{\infty} T(E_z) \cdot \ln \left(1 + \exp \left(-\frac{E_z - (E_\Phi + U_1)}{k_B T} \right) \right) dE_z \quad (3.39)$$

$$\mathbf{J}_{RL} = \mathbf{e}_z \frac{2m^* e k_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3} \int_{U_{i5}}^{\infty} T(E_z) \ln \left(1 + \exp \left(-\frac{E_z - (E_\Phi + U_N)}{k_B T} \right) \right) dE_z \quad (3.40)$$

Легко показати, що (3.34) з урахуванням (3.39) та (3.40) можна переписати як один інтеграл:

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

$$\text{де } D(E) \equiv \ln \left(\frac{1 + \exp \left(-\frac{E - (E_\Phi + U_1)}{k_B T} \right)}{1 + \exp \left(-\frac{E - (E_\Phi + U_N)}{k_B T} \right)} \right).$$

В оригінальній роботі [3.6] за словами самого Тсу члена k_R/k_L не було [3.8]. Цей член однак, не вносить серйозних якісних змін до ВАХ, збільшуючи, приміром, резонансний струм в порядку $\sqrt{3}$ разів [3.8]. Часто його пропускають і в сучасних роботах, що можна розглядати як грубу помилку в тому випадку, якщо модель претендує на кількісний опис ВАХ.

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

3.4 РЕЗУЛЬТАТИ МОДЕЛЮВАННЯ

Структуру тестового РТД показано на рис. 3.3.

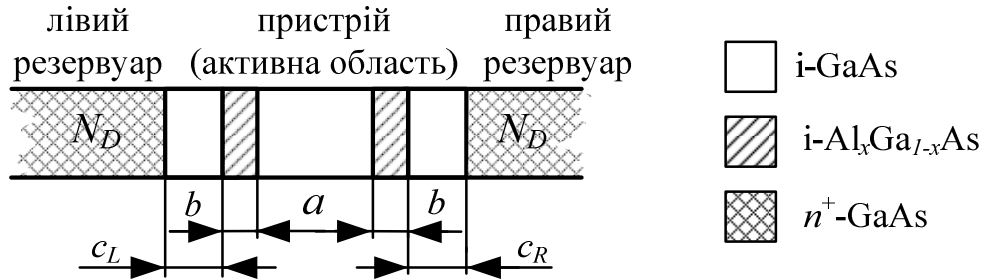
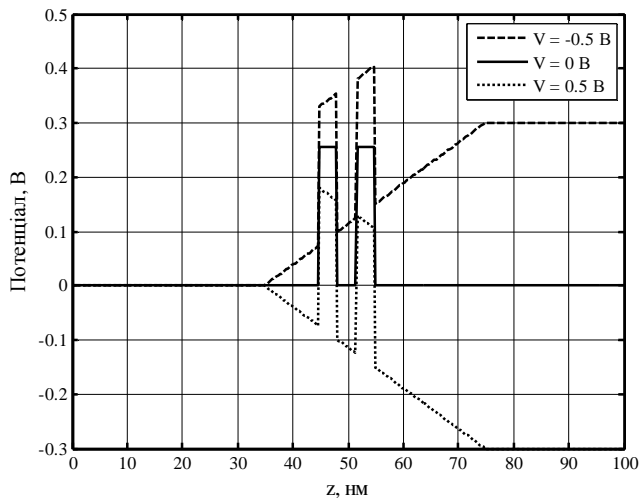


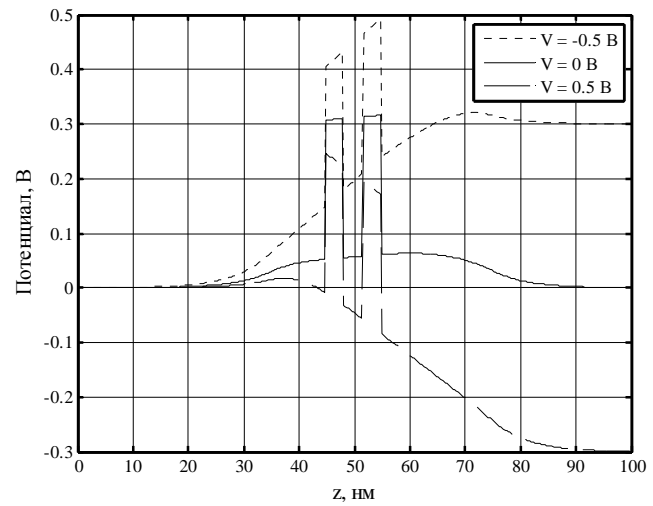
Рисунок 3.3 – Топологія модельного резонансно-тунельного діоду

Розміри тестової структури, що вказані на рис. 3.3 такі: товщина бар'єрів $b = 3$ нм, товщина ями $a = 4$ нм, товщина спейсерів $c_L = 10$ нм, $c_R = 20$ нм. Концентрація донорних домішок у резервуарах $\gg N_D = 10^{24} \text{ м}^{-3}$, молярна доля Al в Al_xGa_{1-x}As $x = 0.33$. Довжина області моделювання складала $L = 100$ нм. Двобар'єрна квантова система знаходиться по центру області моделювання.

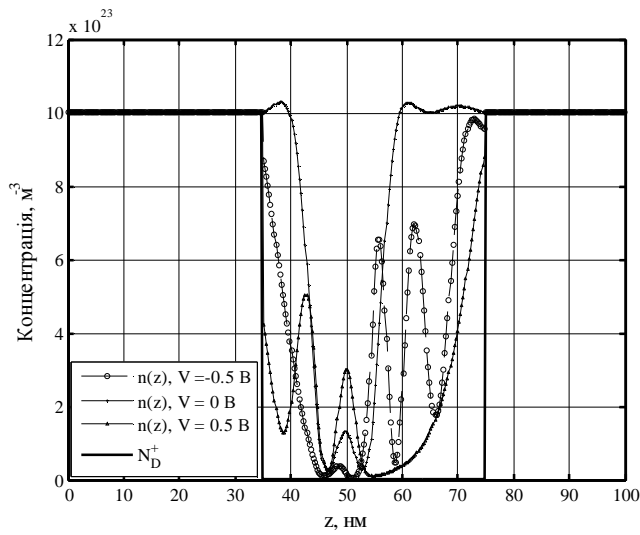
Результати самоузгодженого моделювання, які подано на рис. 3.4–3.8 показують, що просторовий заряд суттєво впливає на розподіл потенціалу, функції розподілу електронів, коефіцієнт прозорості структури, і, через них, на ВАХ резонансно-тунельного діоду. Самоузгодження в рамках розробленої моделі проводилося не лише в квантовій ямі, але й у квантовій та прилеглих до неї класичних областях, на відміну від [3.9].



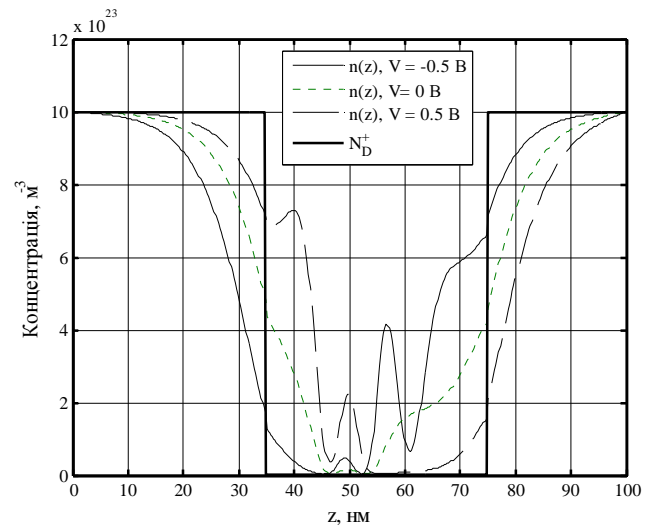
а)



б)



в)



г)

Рисунок 3.4 – Розподіл потенціалу та концентрації для несамоузгодженого (а, в) та самоузгодженого (б, г) моделювання. Ступінчата лінія на рис. (в,г) показує концентрацію іонізованих донорів

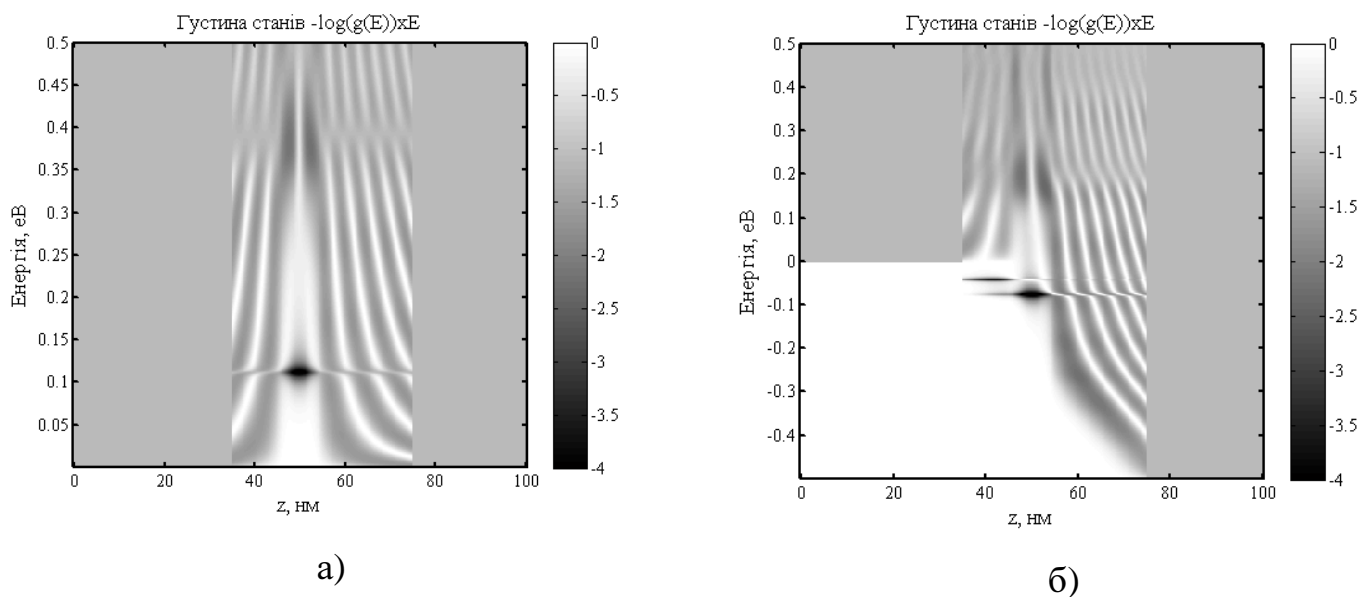


Рисунок 3.5 – Густина електронних станів при несамоузгодженому моделюванні (темніший колір відповідає більш високій густині у відповідності з картою кольорів):

а) за напруги 0 В,

б) за напруги 0.5 В

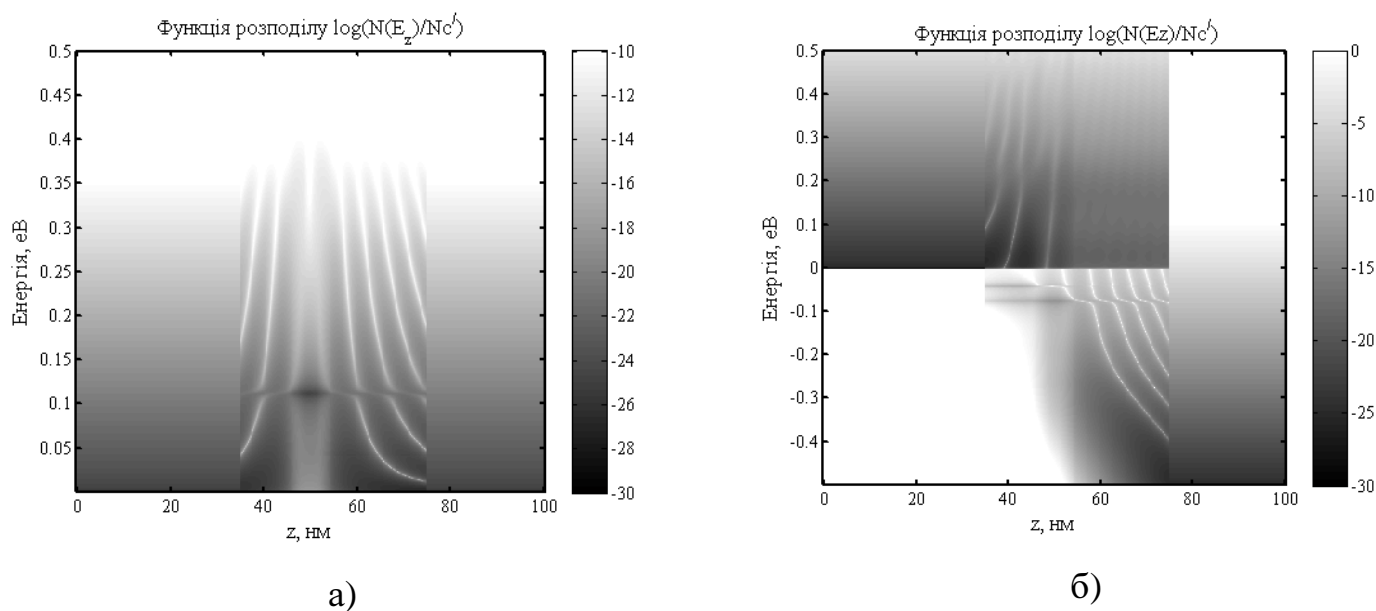
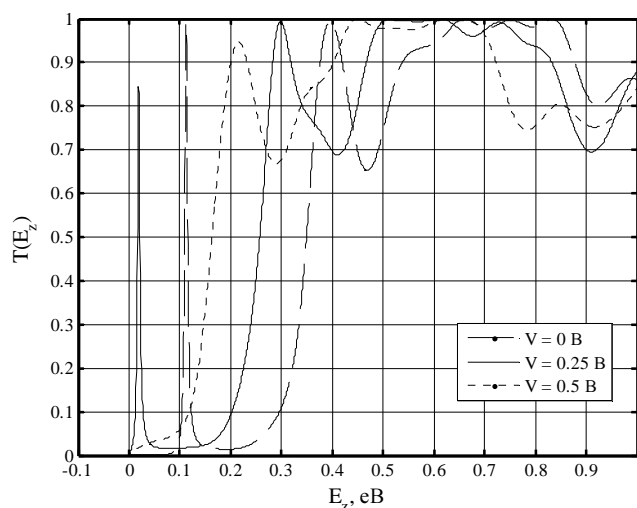


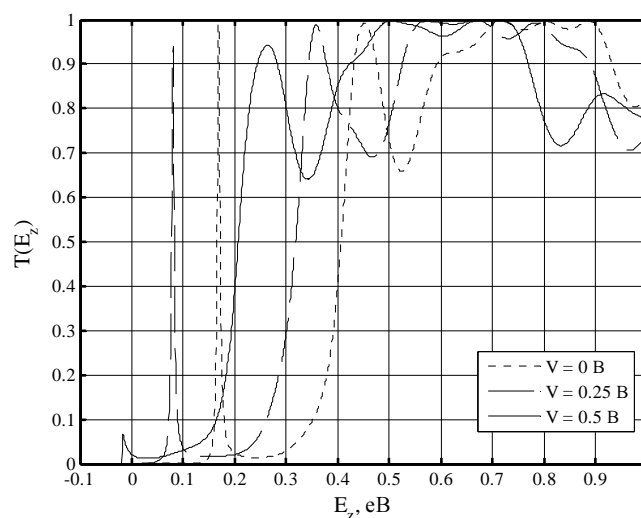
Рисунок 3.6 – Повна функція розподілу електронів при несамоузгодженому моделюванні (темніший колір відповідає більшому значенню $N(E_z)$ у відповідності з картою кольорів):

а) за напруги 0 В,

б) за напруги 0.5 В



а)



б)

Рисунок 3.7 – Коефіцієнт проходження квантової структури $T(E_z)$ при а) несамоузгодженому, б) самоузгодженому моделюванні

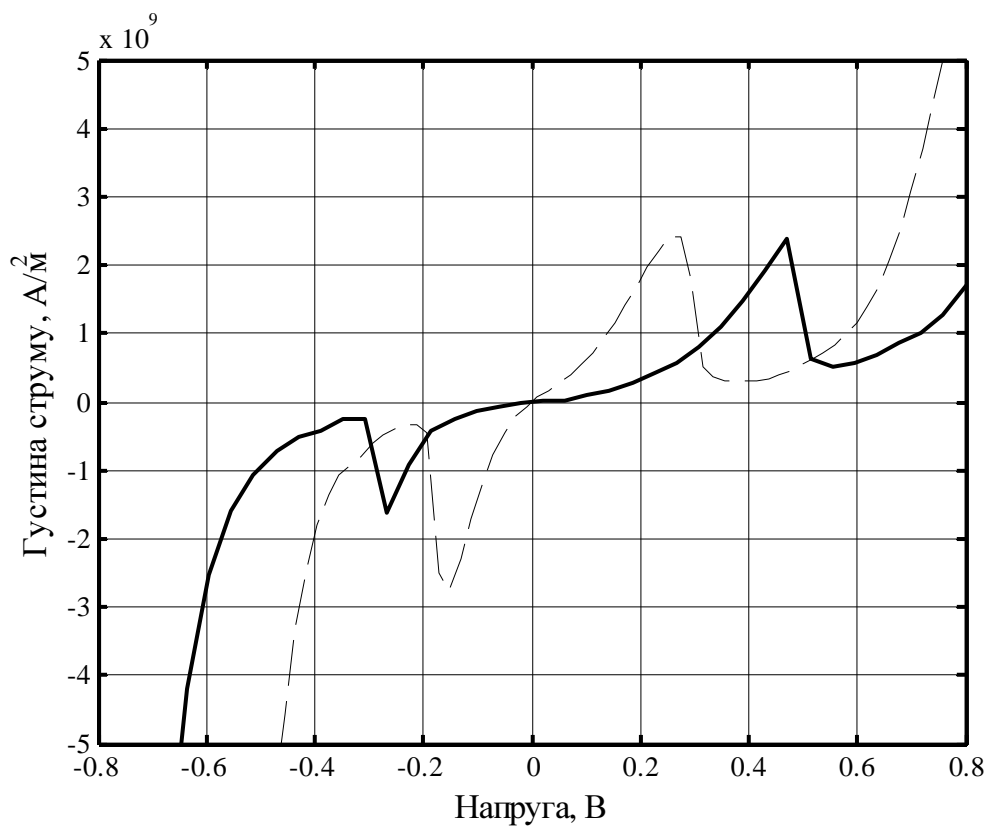


Рисунок 3.8 – Вольт-амперна характеристика модельного резонансно-тунельного діоду: самоузгоджена (суцільна лінія) та не самоузгоджена модель (пунктирна лінія)

ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ

- 3.1 *Diamond S.K. et. al.* Fabrication of 200-GHz fmax Resonant-Tunneling Diodes for Integrated Circuit and Microwave Applications // IEEE Electron device letters. – 1989. – Vol. 10, No. 3. – P. 104–106.
- 3.2 *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика (нерелятивистская теория). – М.: Физматгиз, 1963. – 704 с.
- 3.3 *Блохинцев Д.И.* Основы квантовой механики: учебное пособие. – М.: Наука, 1976. – 664 с.
- 3.4 *Хокни Р., Иствуд Дж.* Численное моделирование методом частиц: Пер. с англ. – М.: Мир, 1987. – 640 с.
- 3.5 *Pinaud O.* Transient simulation of resonant-tunneling diode // J. Appl. Phys. – 2002. – Vol. 92, No. 4. – P. 1987–1994.
- 3.6 *Tsu R. and Esaki L.* Tunneling in a finite superlattice // Appl. Phys. Letters. – 1973. – Vol. 22, P. 562–564.
- 3.7 *Coon D.D. and Liu H.C.* Tunneling currents and two-body effects in quantum well and superlattice structures // Appl. Phys. Letters. – 1985. – Vol. 47. – P. 172–174.
- 3.8 *Tsu R.* Superlattice to nanoelectronics // London: Elsevier, 2005. – 325 P.
- 3.9 *Абрамов И.И., Гончаренко И.А.* Численная комбинированная модель резонансно-туннельного диода // Электромагнитные волны и электронные системы. - 2002. - №7. - С. 54-60.
- 3.10 Пакет для моделювання поперечного транспорту в наноструктурах WinGreen
<http://www.fz-juelich.de/ibn/mbe/software.html>

ВИСНОВКИ

Реалізована модель резонансно-тунельного діоду вигідно відрізняється від [3.9] тим, що в ній процес само узгодження поводить не тільки в квантовій ямі, але й у всій двобар'єрній системі, спейсерах, а також прилеглих високолегованих шарах ненормованої гетероструктури. Це додає їй адекватності, як показують результати попередньої верифікації. Великою перевагою моделі є відсутність будь-яких «підгоночних» параметрів, якими зазвичай перенасичені фізико-топологічні моделі квантових наноструктур. Вона є повністю фізичною та внутрішньо несуперечною. Всі припущення, що в ній зроблено, можна теоретично пояснити та вказати межі використання.

Крім того, на відміну від аналогів [3.10], розроблений на основі описаної математичної моделі пакет програм має переваги: значно покращена якість графіки, що виводиться, процес самоузгодження має кращу збіжність.