

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ, МОЛОДІ ТА СПОРТУ УКРАЇНИ  
НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ  
“КИЇВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ”

Факультет електроніки

Кафедра фізичної та біомедичної електроніки

Інв. № \_\_\_\_\_

До захисту допущено

Завідувач кафедри

\_\_\_\_\_ В. І. Тимофєєв

“\_\_\_” \_\_\_\_\_ 20\_\_р.

## ПОЯСНЮВАЛЬНА ЗАПИСКА

до дипломної роботи освітньо-кваліфікаційного рівня «бакалавр»

за напрямом підготовки 6.050801 "Мікро- та наноелектроніка"

на тему: «Адекватність чисельних та аналітичних моделей резонансно-  
тунельних діодів»

Студент групи ДМ-72 \_\_\_\_\_ Дмитро В'ячеславович Шаула

Керівник роботи \_\_\_\_\_ асистент А.В Федяй

Консультант з технічної частини \_\_\_\_\_ к.т.н., доц. А. О. Попов

## РЕФЕРАТ

Дипломну роботу виконано на 82 сторінках, що містять 3 розділа, 39 ілюстрацій, 1 таблицю, 24 джерела в переліку посилань.

Об'єктом дослідження в роботі є резонансно-тунельний діод (РТД) з прямокутною потенціальною ямою. Предмет роботи – верифікація моделей статичних характеристик РТД з прямокутною ямою шляхом моделювання в середовищі Matlab 7.9 з подальшим порівнянням з експериментальними даними.

Метою роботи є дослідження впливу врахування різноманітних факторів адекватність моделей (знаходження самоузгодженого потенціалу, паразитних опорів, розсіювання та форми бар'єрів) на статичні характеристики резонансно-тунельного діоду.

У першому розділі описано топології, за допомогою яких можна отримати структури, аналогічні об'єктам дослідження, а також сучасні матеріали, що застосовуються при їх виготовленні. В другому розділі описані рівні моделювання РТД. В третьому розділі проводиться різноманітне моделювання РТД з параметрами, що взяті з експериментальної роботи. Основна частина роботи закінчується аналізом впливу різноманітних факторів на адекватність моделей РТД.

Виконана робота знаходиться в контексті науково-дослідних робіт, присвячених перспективним нанорозмірним структурам, які проводяться на кафедрі, зокрема НДР *„Дослідження напівпровідникових наноприладів та нанокомпонентів інтегральних схем на основі квантових одно- і двовимірних структур”* (номер держреєстрації: 0108U0005938). Здійснений аналіз може стати основою та орієнтиром для побудови більш адекватних кількісних моделей гетероструктур з поперечним транспортом.

Значущість роботи полягає в тому, що резонансно-тунельні діоди, робочі частоти яких нещодавно перевищили 1ТГц, потребують вдосконалення в тому числі за рахунок передбачення їх властивостей, яке неможливе без верифікації створених моделей, яка є метою роботи.

РЕЗОНАНСНО-ТЕНЕЛЬНИЙ ДІОД, МОДЕЛЮВАННЯ, ВЕРИФІКАЦІЯ

## ABSTRACT

Diploma's project is done at 82 pages. It contains 3 sections, 39 illustrations, 1 tables, 0 appendixes and 24 sources in the list of references.

The object of research is the resonant-tunneling diodes (RTD) with potential well. Subject of the work is modeling of stationary characteristics of RTD with the parabolic well and simulation, using Matlab 7.9.

The objective is to create semi-analytical simplified model of RTD with parabolic quantum well, identification of the properties and advantages of the RTD with this topology over other types of RTD as well as, defining the scope of application of such devices in electronics.

The first section outlines the principles of RTD with conventional topology as well as modern materials, used in their manufacturing. The second chapter describes method of envelope functions for simulation of nanoscale effects in RTD modeling. The model of the given RTD developed and formalized in section 3. In the fourth and fifth section results of simulation are being presented both with their interpretation. Possible scope of application of the simulated diode was indicated in the section 6.

Formal treatment of the modeling of RTD's entails advanced quantum transport theory, possibly including rather intricate formulations of multiband effective mass theory, quantum statistical theory based on the density matrix, Wigner functions, and Green's functions [1]. Frensley, Ferry, Grubin, and other authors have written extensive review papers on related subjects, more detailed information can be found from these reviews [2], [3]. Significant effort has been devoted to developing physical models of RTD's with varying degrees of sophistication and success.

The interest in achieving an accurate RTD model lies in the fundamental motivation to gain insight into mesoscopic transport and provide guidance for optimal device design, which are indispensable for conceiving new devices and pursuing realistic device development. Moreover, there exists a lag in theoretical modeling of quantum transport as compared to nanofabrication technology.

Quantum device modeling has yet to be as well established as modeling capabilities for conventional field-effect transistors (FET's) and bipolar transistors. On the other hand, quantum transport problems in nanoelectronic devices and their complicated material and structural dependence demand heavy reliance on computer simulation tools. In that sense, RTD models serve as a test vehicle for device modeling capabilities as we progress into the nanoelectronic regime.

Device terminal properties are determined by studying carrier transport of the electrons, whose available energies are described by the band structure. The carrier motion should include the major physical processes. In order to compute RTD I–V characteristics, it is clear that RTD modeling should include two important aspects.

First of them is proper energy-band parameters for a particular RTD structure, built up from dissimilar materials and their interfaces. For example, the band offsets at the heterointerfaces, carrier effective masses, and other material parameters derived from the band structure must be available with accuracy.

Second of them is a proper transport formalism, which must be able to model the major processes in the RTD. Since simplifications, approximations, and numerical discretization are always used in the various models, they must not violate the basic physical laws and principles of quantum mechanics. However, in practice, these simplifications and approximations often compromise some of these principles.

From a first-principles point of view, the RTD as a nanoelectronic device is in general an open quantum system, in which electron transport is three dimensional, time dependent, time irreversible, dissipative, and many-body interactive, with both particle and energy exchanges with the device's environment. The device system is therefore very different from a simple isolated quantum system, where a conservative Hamiltonian and the boundary conditions for the Schrödinger equation may be readily formulated.

On the other hand, since a full many-body formalism that is computationally manageable for such open device systems has not been well established, and may not be necessary for calculations of specific device properties, approximations and simplifications are typically used in various modeling approaches to simplify the calculations, provided that the major transport processes can be properly modeled.

Recent efforts in RTD modeling have generated fruitful results for evaluation of quantum effects in RTD's and for device design. In terms of the electron state description and the capability of correctly treating the electron interactions with its environment, the existing RTD physical models can be classified into two categories: dynamic or coherent models and kinetic models.

First indicate their common ingredients before identifying their differences. According to quantum mechanics, an electron can be described by its quantum state, represented by its state function. A simple or pure electron state is generally represented by the electron wave function and may be specified by its amplitude, momentum (wave vector), energy, and phase; its time evolution follows the time-dependent Schrödinger equation. An interaction between an electron and an optical phonon, however, may break the electron's phase coherence and generate correlations with other microparticles. We then speak of incoherent interactions and mixed electronic states. This is because the interacting particles have no phase relation with the incident electron wave, and it is therefore in practice impossible to trace the variation of the electron wave function of every particle.

According to quantum statistical theory, the mixed state may be characterized by the density matrix, Wigner (distribution) functions, or Green's functions. For device modeling purposes, we may have the view that common to all quantum transport models, one takes a model function to represent electron states in a quantum device. Once the model function is evaluated for a specific device under specific operating conditions, other physical quantities of interest as well as device properties can all be calculated from the available model function. It is the chosen model function that makes major differences in terms of the formalism, capabilities, and results from one model to another.

The model function in the coherent dynamic models is typically the envelope function, whereas in the kinetic models, the density matrix, Wigner function, and Green's functions are employed and formulated. These functions representing electron states in quantum devices are capable of modeling, to varying degrees, the physical processes in the device, such as electron transmission, reflection, and scattering processes, in a unified formulation.

The central formulation in a model can be a single equation or a set of equations, depending on the chosen model. Since the approximations often render an approach inadequate for all the processes to be modeled even approximately, however, additional formulation may still be needed. The central equation is typically a nonlinear differential or differential-integral equation, and solutions to the equation require extensive numerical work and computer programming as well as significant computer resources. An important issue closely related to the central equations is boundary conditions. It is essential to have a proper treatment of boundary conditions for any device model.

It is especially critical for quantum device models where the device system is open to particle reservoirs and driven far from equilibrium. As restricted by the scope of this paper, however, we will only point out the boundary conditions in RTD models. For a comprehensive review on this topic, the reader is referred to an in-depth analysis by Frensley [2]. As in any physical system, one would like to find how a system evolves in time with a computable equation of motion. Device transient and high-frequency properties, such as switching times and device admittance (impedance) at high frequencies, require a time-dependent solution of the model function. For device dc I–V characteristics, solutions of the time-independent or steady-state equation of the model function often suffice. In this paper, we identify in each approach a central model equation associated with its model function. A solution for the model function leads to the device terminal properties, such as I–V characteristics.

Envelope Function Models of RTD's. RTD models based on the envelope function description of electron states have been popular and very useful in studying RTD's and other nanoelectronic devices because they are conceptually simple, computationally efficient, and capable of modeling important properties of RTD's. Outline RTD models based on the envelope function in this section to illustrate the main issues. The envelope function description for electron states in semiconductors has been well documented and is familiar to device engineers. It is based on effective mass theory, where the internal crystal potential is integrated into the effective response of carriers to an external applied force, greatly simplifying the treatment of carrier transport in semiconductor devices. For RTD models, since quantum phenomena must be included, the effective mass Schrödinger

equation is invoked to calculate the electron state function, or the envelope wave function, neglecting the rapidly varying periodic component. This is the first major approximation made in the envelope function formalism, which brings about a great simplification, at the price of ignoring the microscopic information of the central cell part of the true wave function. Another major approximation involved in the envelope function approach is that it is limited to pure state calculations.

**Other RTD Models.** Based on the well-known Esaki–Tsu integral formula for the tunneling current, many modifications and improvements have been made. Analytic models for the RTD current such as those offer simple formulas relating the most important physical ingredients of RTD operation but do not adequately predict experimental I–V behavior. On the other hand, as RTD device and circuit developments advance to the stage of practical circuit innovation and implementation, there is a need to bridge the gap between the available RTD physical models and circuit simulation. The RTD quantum models are too complicated and generally not accurate enough to be directly called from a circuit simulator. Recent attempts have begun to incorporate the RTD NDR into circuit simulation models based on SPICE-type computeraided design tools. Therefore, simple analytic models that loosely relate both the essential RTD physical parameters and measured I–V characteristics are desired. Work in this area follows analytical approximations for the I–V characteristics based on transmission calculations with adjustable empirical parameters linked as closely as possible to real physical quantities. It has been shown that such models can accurately reproduce experimental I–V characteristics, which should be a very valuable tool for realistic RTD device and circuit development.

There are several important issues to note when comparing theoretical and experimental results, including the uncertainties in the material and doping profiles of the device, the possible error in the growth data, the material parameters employed such as effective masses and band offsets, and the effects of imperfectly known parasitic impedances on the measured I–V curve. These factors make it very difficult to obtain an accurate prediction or reproduction of experimental I–V characteristics and demand more accurate characterization and calculation of material and structural parameters pertinent to

RTD modeling calculations. Last, there is a well-known issue that is conceptually simple but difficult to include in practice: the inclusion of the series and contact resistances. These resistances modify the device I–V characteristics. It is difficult for all the above models to include an accurate evaluation of these resistances. Usually, a rough estimate or measurement is made to fit the measured I–V curve, which may not be satisfactory for circuit designers if the RTD's being used have a large fluctuation in their values for the resistance, and therefore in their peak and valley voltage values. A recently proposed technique to determine the RTD I–V characteristics experimentally based on microwave reflection coefficient measurement may be useful in this regard.

People now examine RTD dc properties, emphasizing only those that affect potential digital logic circuit applications, since this is where the major impact is expected. Before specific RTD dc properties required by its logic applications are discussed, we note that there are also serious considerations for analog applications, signal processing, and A/D converter applications of RTD's, which are not covered in this paper.

The most important property of an RTD lies in its NDR, which is sustainable to very high frequencies and offers very fast switching speed. Of course, the time-dependent device properties possess interesting and subtle effects that have absorbed a great deal of effort, particularly in relation to device transients and high-frequency behavior. Recent results have shown that RTD's can produce small amounts of power at frequencies above 800 GHz, and calculations predict an NDR response in the terahertz range. An analysis of RTD switching speed requires solving the central transport equations in the time domain. The resulting current transient information can be Fourier transformed into the frequency domain to obtain the admittance, which can in turn be used to construct a small signal circuit model for the analysis of the high-frequency properties. RTD switching characteristics have been investigated by many authors. Despite the impressive high-frequency oscillations that have been demonstrated [4] and theoretical predictions that terahertz frequencies are obtainable, current devices produce only very low levels of output power and have limited application as power sources.

It is hoped that recently proposed schemes for coherently combining the power of RTD's in array form can overcome this limitation. We will not discuss high-frequency



aspects of RTD's in this paper. For realistic applications of RTD's in digital circuits, some of the questions that need to be addressed are: What is required of the dc I–V characteristic for typical digital circuits, e.g., logic gates? How likely is it that these requirements can be attained? What are the major issues concerning the choice of material system and structural considerations?

In addition, there exist other quantum devices, notably the resonant tunneling transistor (RTT), the resonant tunneling hot-electron transistor (RHET), the RITD, and the Esaki TD, all of which exhibit NDR characteristics. Is the RTD more attractive than the others? We will provide a brief comparison among some of those devices in terms of their main features and properties. Before we make the comparison, it is helpful to see what is required from the device NDR characteristics for digital logic applications. First of all, it is important to note that two-terminal device logic circuits, i.e., using RTD's alone, have several limitations and are not adequate for most circuit applications. That is the main reason that circuits employing conventional Esaki TD's did not materialize in the past.

Recent advances in very-high-frequency transistors such as HBT's and HEMT's, however, and the possibility of integrating NDR devices such as RTD's with them, have changed the picture significantly. The combination of these devices now holds great promise for very high speed/functionality circuits. In the next section, we will mainly consider an RTD-HBT-based circuit as an illustration, but certainly RTD-HEMT based circuits and other circuits are also very important and are being pursued.

**Material and Structural Considerations.** For RTD's based on III–V compound materials, the original traditional material system, GaAs(well)/AlGaAs(barrier), has been extended to GaAs/AlAs, InGaAs/AlAs, InGaAs/InAlAs, InAs/AlSb, and others. The work on RTD's built from these material systems is extensive for a summary of the various RTD characteristics achieved in these systems. RTD's made from these systems can achieve a very high peak current density, a sufficient PVR, and a very high speed index (i.e., the ratio of the peak current to the device capacitance). At this time, the GaAs/GaAlAs and InGaAs/AlAs (on InP substrates) systems are the strongest candidates for actual circuit insertion. The InGaAs/AlAs system is clearly superior in terms of its intrinsic properties, but GaAs/GaAlAs IC fabrication technology is significantly more

mature in general. The focus now is on low power at moderately high frequencies (tens of gigahertz), as there are other more conventional high-frequency solutions available if power is not the primary objective. In this regard, a variation of the InGaAs/AlAs system has come to the fore. It contains a modified InGaAs well with extra In inserted, either in the form of a higher alloy concentration than called for by lattice matching or a small number of pure InAs central layers.

Either way, the extra In lowers the resonance energy in the well so that the peak voltage is lowered correspondingly. The tradeoff is that the peak current decreases as the resonance is lowered, so a compromise is required. The lower voltage is absolutely essential if low power is to be achieved. For that purpose, an even better system is the InAs/AlSb/GaSb RTD, or a variation thereof, which will be explained shortly.

We now make a comparison between RTD's and other quantum devices with NDR characteristics. RTT's and RHET's, being three-terminal devices, have the advantage that the NDR can be controlled by the voltage applied to the third terminal, an attractive feature for circuit design, since it provides isolation between different circuit stages. This allows better control of device operation and gain. Although RTT operation has been demonstrated [5], it is extremely difficult to make a low resistive contact to the RTT base. On the other hand, RHET's have limited gain due to scattering in the base and are difficult to fabricate [6]. However, this controllable NDR characteristic can be obtained with RTD's alone by connecting it in series with an FET or an HBT.

Another device whose operation is based on electron tunneling, the Esaki or tunnel diode, is the original quantum device with an NDR I-V curve. At that time, only discrete devices were possible. Now, there is no reason that they cannot also be integrated with HBT's or HEMT's. The challenges are different from those for RTD's in that it is the doping that varies instead of the composition. One or the other may be more appropriate for a given application. A comprehensive comparison among these devices with an in-depth analysis is of current interest, and research is ongoing on both device and circuit aspects.

It is generally agreed that the continued miniaturization of transistors and IC's may open a revolutionary regime for novel semiconductor devices and circuits. Research in

nanoelectronics today stands at a frontier of semiconductor science and engineering. The RTD is considered to be a major nanoelectronic device at the center of nanoelectronic research. In this review, we have addressed the following questions. How well do we understand RTD device operation? How accurately are we able to model its I–V characteristics and other properties? What basic requirements are there for application in digital logic in terms of the dc I–V characteristics? How realistic it is that the desired I–V characteristics can be attained with available material and device structures? These issues were discussed, and recent accomplishments as well as impediments were reviewed.

Numerical modeling is playing an increasingly important role as a tool for gaining insight into nanoelectronic device operation and providing guidance for device design. Quantum transport modeling and computer simulation tools will be very valuable for conceiving new device concepts and exploring novel nanostructures. Sophisticated RTD models have been developed with varying levels of success in reproducing and predicting the I–V characteristics. Accurate predictions of the I–V characteristics for different material systems and device structures are difficult to achieve. This is due to uncertainties in material growth and device process data as well as in the material parameters, especially when complicated materials and structures are involved.

Therefore, more accurate characterization and calculation of material and structural parameters are needed for further development. We also note that RTD models, including multiband and scattering effects, can become quite computationally expensive and demand significant human and computer resources, including a good understanding of advanced quantum physics. Tradeoffs between modeling cost and accuracy should be considered for specific applications. RTD's are very promising nanoelectronic devices for digital logic circuit application due to their intrinsically high-speed NDR characteristics at room temperatures. Integrated circuits made from the III–V semiconductors are the most likely opportunity for technology insertion, but if a material system compatible with silicon technology could be achieved, the circuits could also be developed for silicon very large scale integration.

Another concern for practical RTD applications is that achieving uniformity in resonant tunneling current, which depends exponentially on the parameters of the

tunneling barriers, presents a serious challenge for circuit design and performance. However, recent progress indicates that in situ probing of the epitaxial growth, with real-time feedback into the growth process, may adequately achieve this goal.

Nanoscience and nanotechnology are broad fields, highly interdisciplinary in breadth and depth. It may take years for RTD's to become routine workhorses in future electronics. Whether or not RTD's will achieve their promise may also be aided by advances in other areas of quantum devices, such as single electronic devices and quantum MOS transistors now under active research.

The RTD model with the parabolic potential pit can be used for engineering calculations when creating RTD with parabolic quantum pits, because it fast and easy to interpret.

The significance of the work is novelty and availability of RTD topological structure in his approach to modeling (analyticity preserving models, wherever it possible) and investigation the possibilities of using application in devices meaningful logic.

Further work in this direction should be devoted to consistent inclusion in the model parasitic effects that occur in a real RTD.

RESONANT TUNNELING DIODE, VERIFICATION, MODELING

## ЗМІСТ

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ, СИМВОЛІВ, ОДИНИЦЬ, СКОРОЧЕНЬ І  
ТЕРМІНІВ

ВСТУП

РОЗДІЛ 1. МОЖЛИВА ТОПОЛОГІЯ РЕЗОНАНСНО-ТУНЕЛЬНИХ ДІОДІВ

1.1. Технології виготовлення РТД

1.1.1. Осадження металоорганічних сполук з газової фаза

1.1.2. Молекулярно-променева епітаксія

1.2. Матеріали для виготовлення РТД

1.3. Двобар'єрні структури з різким переходом між гетерограницями

РОЗДІЛ 2. РІВНІ МОДЕЛЮВАННЯ РТД

2.1. Несамоузгоджене моделювання

2.2. Самоузгоджене моделювання

2.3. Врахування розсіювання, форми гетеропереходів та паразитних опорів

РОЗДІЛ 3. ВЕРИФІКАЦІЯ МОДЕЛЕЙ

3.1. Експериментальні дані

3.2. Методика верифікації

3.3. Результати моделювання і обговорення

ВИСНОВКИ

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ, СИМВОЛІВ, ОДИНИЦЬ, СКОРОЧЕНЬ І  
ТЕРМІНІВ

ВАХ – вольт-амперна характеристика

ДБКС – двобар’єрна квантова система

ЗП – заборонена зона

КМОП – комплементарна логіка на транзисторах метал-окис-напівпровідник

НВЧ – надвисокі частоти

ПТШ – польовий транзистор з затвором Шоттки

РТД – резонансно-тунельний діод

$k_B = 1,38 \cdot 10^{-23}$  Дж/К – стала Больцмана

$\hbar = 1,054 \cdot 10^{-34}$  Дж/с – зведена стала Планка

$f_{\Phi-D}(E, T) = 1 / \left( \exp \frac{E - E_{\Phi}}{k_B T} + 1 \right)$  – функція Фермі-Дірака

$D(E)$  – коефіцієнт передачі

$R(E)$  – коефіцієнт відбивання

## ВСТУП

Розвиток сучасної електроніки з-поміж іншого передбачає необхідність зменшення геометричних розмірів електронних компонентів [7], що призводить до виникнення двох проблем: удосконалення технології виготовлення компонентів та передбачення їх властивостей. Останнє передбачає необхідність створення фізичних моделей новітніх електронних структур.

Однією з найбільш перспективних напівпровідникових структур електроніки близького майбутнього є резонансно-тунельний діод, робочі частоти якого сягають 1 ТГц. Однак, до цього часу зберігається серйозна прогалина у знаннях про кількісну картину електричних процесів згаданого пристрою, не зважаючи на величезну кількість робіт, які виконано після піонерських робіт Тсу та Есакі в 1974 році [8]. Останнє твердження найбільш помітне в частині верифікації створених моделей. Систематичної роботи в даному напрямку майже не проводилося. Метою даної роботи є напрацювання матеріалу в області верифікації моделей РТД різного рівня складності та адекватності.

Підставою для виконання робіт є успішний досвід створення моделей під час виконання наукових робіт кафедрою фізичної та біомедичної електроніки. Моделі, що були створені в згаданих роботах, потребують системної верифікації і дослідження впливу різноманітних факторів на адекватність моделі.

Не дивлячись на, здавалося б, простий принцип функціонування РТД, моделювання таких пристроїв ускладнюється за рахунок багатьох факторів [9]. Виходом з цієї ситуації є застосування в умовах існуючих формалізмів двох основних різновидів моделей [10]: фізико-топологічної та електричної. Проте, сучасні фізико-топологічні моделі, на жаль, дають лише грубі якісні розрахунки, а електричні моделі в основному застосовується для аналізу електричних схем. Тому на даний момент нема моделей, які б добре узгоджувались з отриманими експериментальними ВАХ [9]. Таким чином, пріоритетним напрямком практичного вдосконалення моделей всіх формалізмів є створення комбінованих моделей, бо

саме такі моделі, як правило, і дозволяють отримати результати, що узгоджуються з експериментом [9].

Викладений аналіз адекватності різнорівневих моделей може слугувати основою для подальших кроків, щодо удосконалення існуючих припущень, що прийняті у використаних моделях та паразитних ефектів в РТД.



## РОЗДІЛ 1

### ТОПОЛОГІЯ РЕЗОНАНСНО-ТУНЕЛЬНИХ ДІОДІВ

#### 1.1. Технології виготовлення РТД

Виготовлення РТД стало можливим з розвитком технологій молекулярно-променевої епітаксії (англомовна аббревіатура – «МВЕ», molecular beam epitaxy) та осадження металоорганічних сполук з газової фази (англомовна аббревіатура – «МОСVD», metal-organic chemical vapor deposition). Ці два методи спочатку були розроблені для мікроелектроніки, але згодом знайшли застосування в наноелектроніці.

##### 1.1.1. Осадження металоорганічних сполук з газової фази

Хімічне осадження з газової фази широко використовується для створення напівпровідникових епітаксіальних структур [11]. Воно включає орієнтоване зростання монокристалічної плівки з матеріалу, що надходить з газової фази, на підходящій для цих цілей монокристалічній підкладці. Газова середовище може містити як пари кристалізується матеріалу, так і газоподібні реагенти, що здатні утворити необхідний для епітаксіального росту матеріал в процесі хімічних реакцій на підкладці. Осадження плівок зазвичай проводиться у проточних камерах, де газ-носій, що містить відповідні реагенти, пропускається над нагрітою монокристалічній підкладкою. Хімічний склад, тиск газу і температура підкладки є головними параметрами, що контролюють процес осадження та властивості осаджених плівок.

Серед розмаїття методів проведення хімічного осадження з газової фази використання металоорганічних сполук в якості вихідних газоподібних реагентів дає найкращий результат при створенні досконалих надграток з різкою границею

поділу і товщиною до одного осадження моношару. Термін «металоорганіка» відноситься до широкої групи сполук, що мають хімічні зв'язки метал-вуглець, а також метал-кисень-вуглець і координаційні зв'язки між металами і органічними молекулами. У практиці хімічного осадження плівок з металоорганічних сполук переважно використовуються алкіл металів з метилової ( $\text{CH}_3$ ) і етилової ( $\text{C}_2\text{H}_5$ ) групами радикалів. Більшість з них – це рідини при кімнатній температурі. Їх вводять в реакційну камеру в потоці газу-носія, попередньо насиченого парами даного з'єднання в барботері, де газ-носії проходить («пробулькує») через рідке металоорганічне з'єднання. Осадження може проводитися як при атмосферному, так і при зниженому тиску реагентів у камері.

Установка для хімічного осадження з металоорганічних сполук показана на рисунку 1.1 у варіанті, типовому для осадження GaAs та гетероструктур GaAlAs.

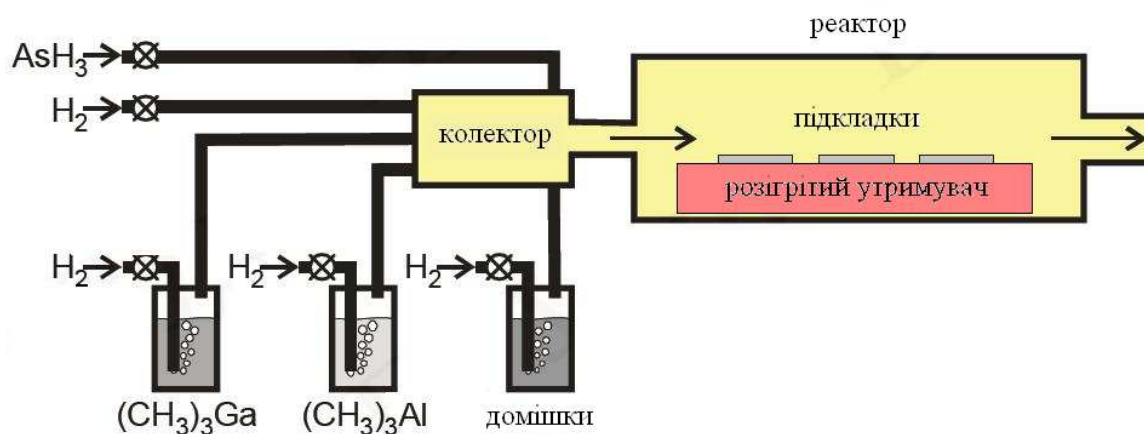


Рис. 1.1. Принципова компоновка установки для хімічного осадження плівок з газової фази металоорганічних сполук

Для формування різких меж розділу шляхом зміни хімічного складу осаджуваного матеріалу або легуючої домішки необхідно швидко змінювати склад газової суміші в реакційній камері. Для цього обсяги змішувальної камери і самої реакційної камери повинні бути мінімізовані. Зміна складу газової суміші має відбуватися без зміни загального потоку газу через реакційну камеру. Найбільш різкі міжфазні границі вдається сформувати з використанням режимів швидкісного нагріву, коли тривалість витримки підкладки при необхідній для осадження

температурі обмежена 30-60 с. При цьому значно зменшується дифузійний перерозподіл компонентів в околицях границь розділу.

Хімічне осадження з газоподібних металоорганічних сполук забезпечує осадження практично всіх бінарних, трійних і четверних напівпровідникових сполук  $A^{III}B^V$  з високим ступенем їх стехіометричності. Цей метод успішно застосовується і для осадження інших напівпровідників, таких як  $A^{II}B^{VI}$ , а також оксидів. За допомогою цього методу формуються не тільки суцільні епітаксіальні плівки, а й квантові ниті і квантові точки.

Головною перевагою методу є можливість одночасної обробки великої кількості підкладок, що як не можна краще відповідає вимогам масового виробництва. Обмеженням методу є важко контрольоване забруднення матеріалу плівок вуглецем, а також необхідність вживати серйозних заходів безпеки при роботі з гідридами, які токсичні та вибухонебезпечні.

### 1.1.2. Молекулярно-променева епітаксія

Молекулярно-променева епітаксія з'явилася як розвиток методу хімічного осадження плівок в надвисокий вакуумі [11]. Відзначимо, що тиск залишкових газів нижче  $10^{-7}$  мм. рт. ст. вважається високим вакуумом, а тиск  $10^{-11}$  мм. рт. ст. та нижче відноситься до надвисокому вакууму. Довжина вільного (без взаємних зіткнень) пробігу атомів і молекул у таких умовах досягає десятків метрів.

При молекулярно-променевої епітаксії реагенти вводяться в робочу камеру у вигляді молекулярних чи атомних потоків. Ці потоки формуються випаровуванням матеріалу всередині замкнутої комірки з дуже малим вихідним отвором. Вона називається ефузійною, або коміркою Кнудсена. Випаровуванні усередині неї молекули та атоми, виходячи з отвору малого діаметру в надвисокий вакуум, рухаються без зіткнень, тобто балістично, створюючи таким чином добре спрямовані потоки частинок.

Для молекулярно-променевої епітаксії зазвичай використовують кілька ефузійних комірок - по одній комірці на кожен матеріал, що конгуентно випаровується. Крім комірок для осадження самих матеріалів повинні бути також джерела легуючих домішок. Поряд з випаровуванням осаджуваного матеріалу всередині ефузійної комірки молекулярні потоки можуть формуватися за таким же принципом і з парів або газоподібних сполук. Для цього їх вводять в надвисоковакуумну камеру через спеціальні підігрівальні сопла.

Конструкція типової установки для молекулярно-променевої епітаксії схематично показана на рис. 1.2. Її основними частинами крім уже названих ефузійних або газових комірок є тримач підкладки з підігрівом та система моніторингу процесу осадження. Всі ці пристрої поміщено до надвисоковакуумної камери.

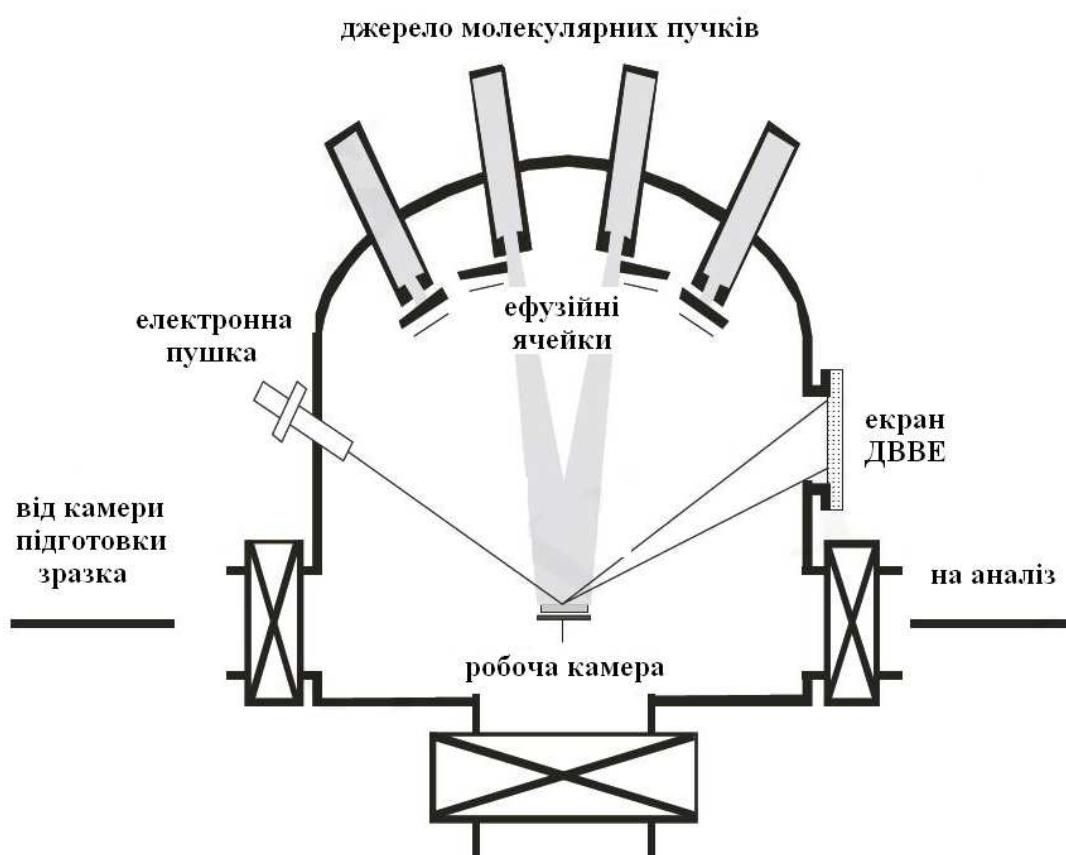


Рис. 1.2. Принципова схема компонування установки для молекулярно-променевої епітаксії

Для оперативного контролю і управління процесом осадження зазвичай використовують дифракцію відбитих високоенергетичних електронів. Для цього електрони з енергією 10-15 кеВ направляють на підкладку з осадженою плівкою під ковзаючим кутом. Дифракція відбитих електронів реєструється на екрані, розташованому на протилежній від електронної гармати стінці камери. Положення та інтенсивність дифракційних максимумів несуть інформацію про структуру і товщину поверхневого шару, що й використовується для моніторингу осадження.

Молекулярно-променевої епітаксії широко застосовується для формування високоякісних надграток. Слід нагадати, що для цих цілей підходить і більш продуктивний метод хімічного осадження з газової фази металоорганічних сполук. Проте за дефектності, складом неконтрольованих домішок і різкості міжфазних границь цей метод поступається молекулярно-променевої осадженню. Так само, як і у випадку хімічного осадження з газової фази, молекулярно-променевої епітаксії забезпечує формування як суцільних нанорозмірних плівок, так і (за певних умов осадження) квантових шнурів та квантових точок.

## 1.2. Матеріали для виготовлення РТД

Основними матеріалами для виготовлення РТД являються напівпровідникові сполуки типу  $A^{III}B^V$ , що характеризуються великим діапазоном значень ширини забороненої зони. Таким чином можна ефективно змінювати висоту потенційного бар'єру в РТД.

Найбільш вивченими є РТД, в яких в якості матеріалу для квантової ями використовується GaAs с бар'єрами з AlAs або AlGaAs. Відпрацьована технологія виготовлення таких структур, що дозволяє стабільно отримувати діоди з від'ємною динамічною провідністю при кімнатній температурі.

Використання твердих розчинів, наприклад AlGaAs, дозволяє створювати гетероструктури з неперервною зміною складу. В таких гетероструктурах ширина забороненої зони може змінюватися неперервно.

Для виготовлення гетероструктур важливо узгодження параметрів кристалічної решітки двох контактуючих матеріалів, хоча останнім часом з'явилося багато робіт по РТД з напруженими шарами [12]. Якщо два матеріали з сильно відмінними сталими решітки вирощуються один на одному, то при збільшенні товщини шарів на границі розділу з'являються великі деформації і дислокації невідповідності [12]. Деформації з'являються незалежно від того, чи є перехід між двома матеріалами плавним, чи ні. Для зменшення деформації сталі кристалічних решіток повинні відрізнятись якомога менше. Саме тому, при вивченні гетероструктур частіше використовують тверді розчини AlGaAs, бо арсеніди алюмінію та галію мають майже однакові параметри решітки. В такому випадку GaAs у вигляді монокристалу є ідеальною підкладною для росту гетероструктури. Іншою підкладкою являється фосфід індію InP, котрий використовується в комбінації з твердими розчинами GaAs/InAs, AlAs/AlSb та ін. [13]

Крім РТД на основі гетеропари AlGaAs / GaAs створені структури на основі InP / InGaAs, AlAs / InGaAs, AlGaAs / InGaAs.

Потреба в пошуках нових матеріалів для РТД пов'язана з можливістю досягти більшої густини струму в матеріалах з більш високим, ніж у GaAs, допустимим ступенем легування та великих потужностей НВЧ приладів. Обнадійливі результати за величиною від'ємної диференціальної провідності і значень пікових струмів отримані зі структурами InAlAs / InGaAs, AlAs / InGaAs.

Інтерес також становлять матеріали на основі азоту: AlN, GaN, InN, застосовувати які почали досить недавно. Їх основною відмінністю є велика ширина забороненої зони, а також висота потенціальних бар'єрів в резонансно-тунельних структурах на їх основі [14].

### 1.3. Двобар'єрні структури з різким переходом між гетерограницями

Резонансно-тунельний діод з прямокутною потенціальною ямою – один з найбільш досліджуваних видів РТД, який вже використовують в аналогових, цифрових, та аналогово-цифрових (інвертор, компаратор) схемах [12]. У загальному випадку такий резонансно-тунельний діод являє собою періодичну структуру, яка складається з послідовно розташованих квантових ям, розділених потенційними бар'єрами, з електричними контактами до двох крайніх протилежних областей. Найчастіше це двобар'єрні структури з одною квантовою ямою та симетричними характеристиками бар'єрів, оскільки, в міру збільшення значення кількості квантових ям, все важче реалізувати умови для узгодженого резонансного переносу носіїв заряду [15]. Такі діоди працюють на частотах до декількох ТГц.

Основною особливістю резонансно-тунельних діодів є наявність на його вольт-амперній характеристиці області від'ємного диференціального опору, що зображено на рис 1.3, яка є основою для більшості його практичних застосувань, а також його найкращого хвильового узгодження короткохвильової частини спектру.

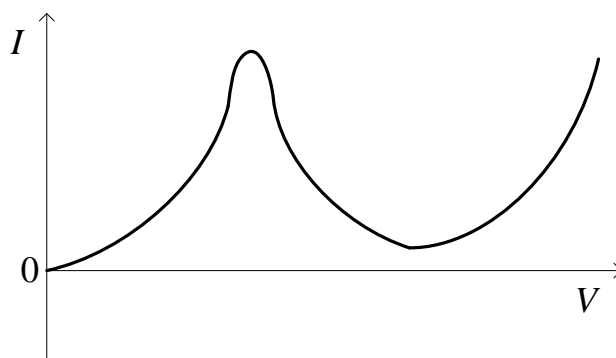


Рис. 1.3. Вольт-амперна характеристика РТД з прямокутною потенціальною ямою

В таблиці 1.1 наведено переваги використання РТД та ПТШ над КМОП в цифрових схемах [12].

**Кількість елементів, необхідних для виконання логічних функцій для різних типів елементної бази**

Тип схеми	КМОП	РТД/ПТШ
Дворівнева логіка XOR	16	4
Дворівнева мажоритарна логіка	18	5
Елемент пам'яті (9 станів)	24	5
Схеми NO-OR та NO-AND з тригером	12	4

## РОЗДІЛ 2

### РІВНІ МОДЕЛЮВАННЯ РТД

#### 2.1. Несамозгоджене моделювання

Резонансно-тунельний діод як елемент інтегральних схем зазвичай виготовляється в топології, зображеній на рис. 2.1 [11].

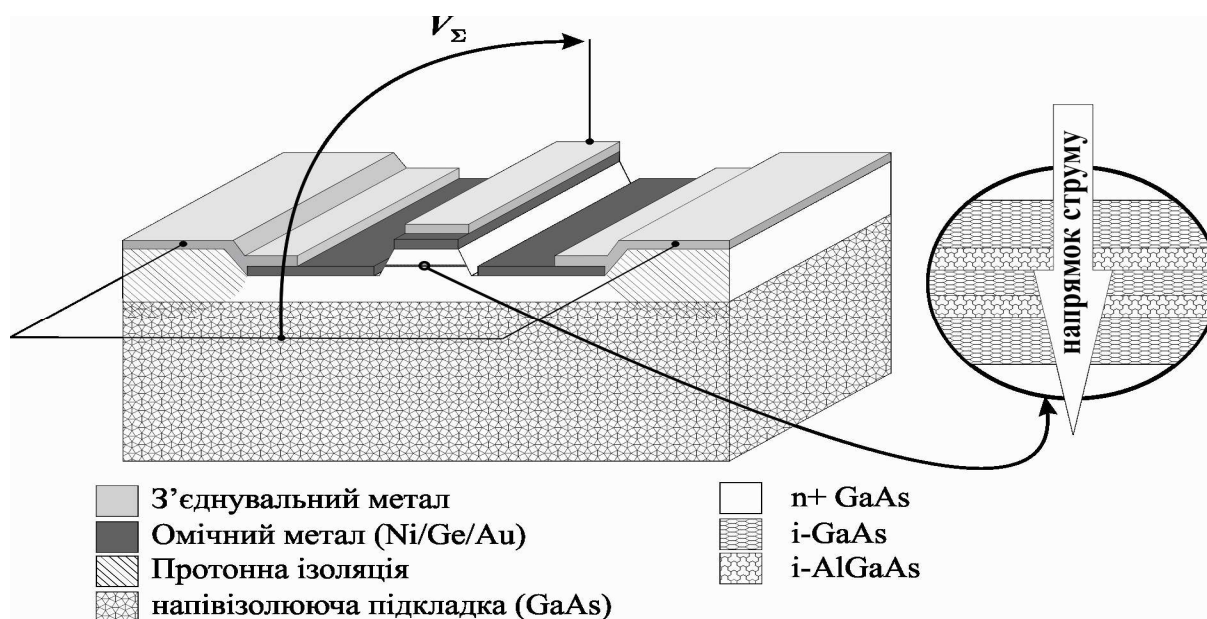


Рис. 2.1. Топологія типового інтегрального резонансно-тунельного діоду



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  $V_{\Sigma}$ , 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  $E$ .

### 2.1.1 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. 2.1).

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.

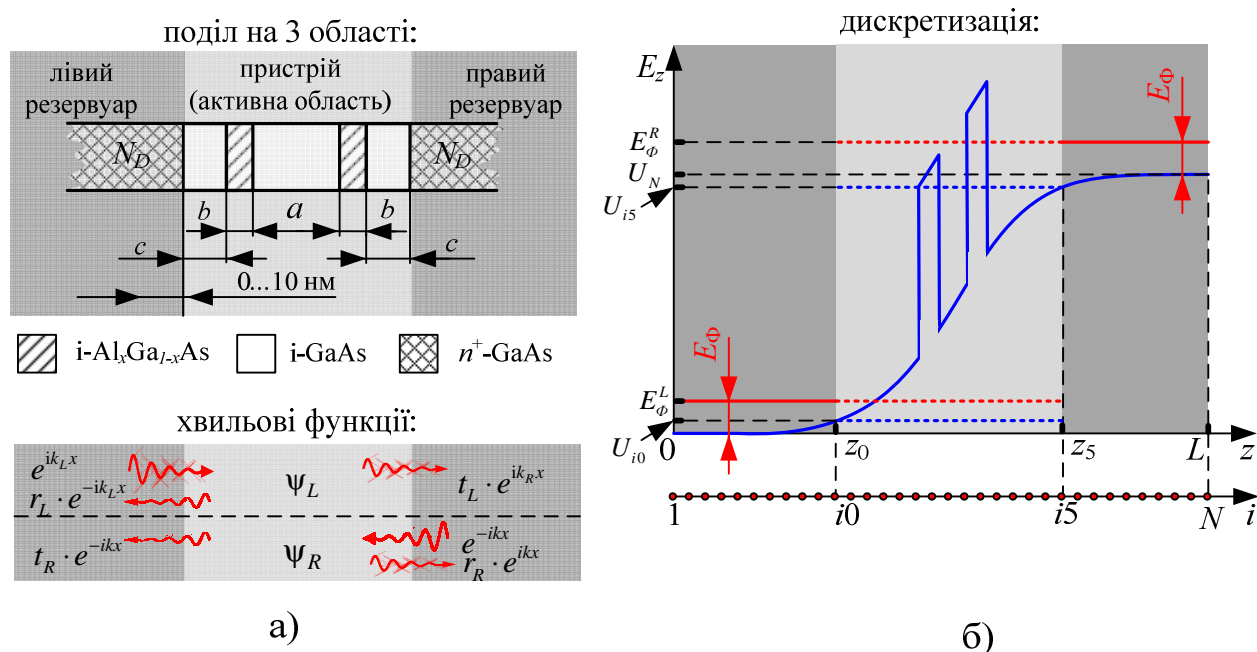


Рис. 2.2. До питання припущень, прийнятих при моделюванні:

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 ( $E_\phi^R$  та  $E_\phi^L$  відповідно) відрізняються на величину прикладеної напруги: квазірівні Фермі (рис. 2.2 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  $R_{\Pi}$ , 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  $R_{\Pi}$ , 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:

$$V_{\Sigma} = V_{act}(I) + IR_{\Pi} \quad (2.1)$$

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:

$$U(z) = E_c(z) + U_s(z) \quad (2.2)$$

Довжина резервуарів значно (в середньому від 1 до 2 порядків) перевищує довжину всієї активної області. Це дає підстави вважати резервуари напівнескінченими 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 (2.1).

### 2.1.2 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  $T(E_z)$ .

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. 2.2, 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. 2.2, 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;  $U_i = (i - 1)\Delta$ ;  $E_{\Phi}$  – 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 і 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:

$$n = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(\mathbf{k})|^2 N(\mathbf{k}) d^3k \quad (2.3)$$

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

$$n = n_R + n_L \quad (2.4)$$

При переході від (2.3) до (2.4) 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.2.2, 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. 2.2, 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 2.4 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):

$$n_{L(R)} = \int_{0(-\infty)}^{\infty(0)} |\Psi_{L(R)}(E_z(k_z))|^2 dk_z \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} N(\mathbf{k}) dk_x dk_y \quad (2.5)$$

В формулі (2.5)  $N(\mathbf{k}) = g(\mathbf{k})f(\mathbf{k})$ , які в свою чергу:

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



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

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

– модифікована функція Фермі-Дірака.

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

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

В останній рівності вважається, що  $E_z = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} + U_{i_0(i_5)}$ , що вказує на те, що поля, в яких знаходиться електрон змінюють лише  $z$ -складову його енергії.

Рівень Фермі у лівому(правому) резервуарі, як видно з рис. 2.2, 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 (2.5) та проводячи інтегрування по двом проєкціям  $\mathbf{k}$ , отримаємо формули для  $n_{L(R)}$ :

$$n_{L(R)} = N'_c \int_{U_{i0}(U_{i5})}^{\infty} \frac{|\Psi_{L(R)}(E_z(k_z), z)|^2}{\sqrt{E_z - U_{i0}(i5)}} \ln \left( 1 + \exp \left( - \frac{E_z - (E_\Phi + U_{1(N)})}{k_B T} \right) \right) dE_z, \quad (2.6)$$

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

У формулу для концентрації електронів (2.6) входять поки що невідомі хвильові функції електронів з правого (лівого) резервуару  $\Psi_{L(R)}(E_z(k_z), z)$ . За умови пошуку цих функцій на дискретній сітці виникає необхідність дискретизації рівняння Шредінгера для огинаючої хвильової функції електрона (далі просто «хвильової функції»):

$$\frac{d}{dz} \frac{1}{m^*(z)} \frac{d\psi(z)}{dz} + \frac{2}{\hbar^2} (E - U(z)) \psi(z) = 0 \quad (2.7)$$

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

Для скорочення викладок позначимо

$$\varepsilon(z) = \frac{m_0}{m^*(z)}, \quad (2.8)$$

Ця величина має сенс оберненої відносної ефективної маси.

Враховуючи (2.8), (2.7) переписеться:

$$\frac{d}{dz} \frac{1}{\varepsilon(z)} \frac{d\psi(z)}{dz} + \frac{2m_0}{\hbar^2} (E - U(z))\psi(z) = 0 \quad (2.9)$$

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 скінченно-різницева схема (2.7) для точки  $z_i = \Delta(i-1)$  переписеться у вигляді:

$$a_i \psi_{i-1} + b_i(E) \psi_i + c_i \psi_{i+1} = 0, \quad (2.10)$$

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

або, повернувшись за допомогою (2.8) до  $m^*(z)$ :

$$a_i = -1/m_{i+1}^* + 1/m_{i-1}^* + 4/m_i^*,$$

$$c_i = 1/m_{i+1}^* - 1/m_{i-1}^* + 4/m_i^*,$$

$$b_i(E) = 8 \left( -\frac{1}{m_i^*} + \frac{m_0 \cdot \Delta^2 (E - U_i)}{\hbar^2} \right)$$

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

$$\begin{cases} \psi^I(z_0) = \psi^{II}(z_0), \\ \frac{d\psi^I(z_0)}{dz} = \frac{d\psi^{II}(z_0)}{dz}; \end{cases} \quad (2.11)$$

$$\begin{cases} \psi^{\text{II}}(z_5) = \psi^{\text{III}}(z_5), \\ \frac{d\psi^{\text{II}}(z_5)}{dz} = \frac{d\psi^{\text{III}}(z_5)}{dz}. \end{cases} \quad (2.12)$$

Для електронів з лівого резервуару (див. рис. 2.2, а):

$$\psi_L(z) = \begin{cases} \psi^{\text{I}}(z) = \exp\{ik_L(z - z_0)\} + r_L \exp\{-ik_L(z - z_0)\}, \text{ при } z \in [-\infty; z_0], \\ \psi^{\text{II}}(z), \text{ при } z \in [z_0; z_5], \\ \psi^{\text{III}}(z) = t_L \exp\{ik_R(z - z_5)\}, \text{ при } z \in [z_5; +\infty]. \end{cases} \quad (2.13)$$

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

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

Знайдемо рівняння для лівої границі для електронів з лівого резервуару.

Враховуючи (2.13), (2.11) перепишеться:

$$\begin{cases} 1 + r_L = \psi_1, \\ ik_L(1 - r_L) = (\psi_2 - \psi_1) / \Delta, \end{cases} \quad (2.14)$$

де в другому рівнянні було використана апроксимація похідної

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

Виключаючи з (2.14)  $r_L$ , знаходимо рівняння, що замикає скінченно-різницеву схему для  $\psi_L$  ліворуч:

$$(ik_L\Delta - 1)\psi_1 + \psi_2 = 2ik_L\Delta, \quad (2.15)$$

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 [17]:

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

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 [17, с. 122]:

$$j = \frac{i\hbar}{2m^*} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi). \quad (2.16)$$

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

$$R_{LR} = |r_L|^2 = |\psi_1 - 1|^2. \quad (2.17)$$

Знайдемо рівняння для правої границі для електронів з лівого резервуару. Враховуючи (2.13), (2.12) перепишеться:

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

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 скінченно-різницеву схему для  $\psi_L$  праворуч:

$$(i k_R \Delta - 1) \psi_N + \psi_{N-1} = 0. \quad (2.18)$$

Коефіцієнт проходження (ймовірність проходження) електрона через активну область дорівнює [17 с. 101]:

$$T_{LR} = \frac{|j_{\rightarrow}^{\text{III}}|}{|j_{\rightarrow}^{\text{I}}|}, \quad (2.19)$$

де  $j_{\rightarrow}^{(III)}$  – густина потоку ймовірності, що відповідає частинці, що падає на активну область  $\psi_{\rightarrow}^I(z) = \exp\{ik_L(z - z_0)\}$  (пройшла через активну область  $\psi_{\rightarrow}^{III} = \psi^{III} = t_L \exp\{ik_R(z - z_5)\}$ ) та визначається відповідно до (2.16).

Обчислення дають:

$$T_{LR} = \frac{k_R}{k_L} |t_L|^2 = \frac{k_R}{k_L} |\psi_N|^2 \quad (2.20)$$

Для електронів з правого резервуару (див. рис. 2.2, а):

$$\psi_R(z) = \begin{cases} \psi^I(z) = t_R \exp\{-ik_L(z - z_0)\}, \text{ при } z \in [-\infty; z_0], \\ \psi^{II}(z), \text{ при } z \in [z_0; z_5], \\ \psi^{III}(z) = r_R \exp\{ik_R(z - z_5)\} + \exp\{-ik_R(z - z_5)\}, \text{ при } z \in [z_5; +\infty]. \end{cases} \quad (2.21)$$

Рівняння, що замикають скінченно-різницеву схему, що відповідає рівнянню Шредінгера, можуть бути отримані з (2.12) та (2.13).

Знайдемо рівняння, що замикає скінченно-різницеву схему для лівої границі для електронів, що інjektуються з правого резервуару. Враховуючи (2.21), (2.11) переписеться:

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

звідки можна отримати, яке замикає скінченно-різницеву схему для  $\psi_R$  ліворуч:



$$(ik_L\Delta - 1)\psi_1 + \psi_2 = 0. \quad (2.22)$$

Аналогічно до того, як було отримано (2.20), можна отримати вираз для ймовірності проходження електрона через активну область зліва направо:

$$T_{RL} = \frac{k_L}{k_R} |t_R|^2 = \frac{k_L}{k_R} |\psi_1|^2. \quad (2.23)$$

Враховуючи (2.21), (2.12) перепишеться:

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

Виключаючи  $r_R$ , отримаємо рівняння, що замикає скінченно-різницеву схему для  $\psi_R$  праворуч:

$$\psi_{N-1} + (ik_R\Delta - 1)\psi_N = 2ik_R\Delta. \quad (2.24)$$

Ймовірності відбиття електрона від правої границі квантової області:

$$R_{RL} = |r_R|^2 = |\psi_N - 1|^2. \quad (2.25)$$

Для подальшого викладу результатів роботи необхідно зробити зауваження стосовно коефіцієнтів проходження та відбивання від границь квантової області. В [17, 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 (2.17), (2.20) та (2.23), (2.25) слідують наступні співвідношення, які нам в подальшому знадобляться:

$$|t_R|^2 = \frac{k_R}{k_L} T = \frac{k_R}{k_L} (1 - R), \quad (2.26)$$

$$|t_L|^2 = \frac{k_L}{k_R} T = \frac{k_L}{k_R} (1 - R). \quad (2.27)$$

Рівняння (2.10), (2.15), (2.18), (2.22) та (2.24) формують скінченно-різницеві схеми рівнянь Шредінгера для  $\psi_L$  та  $\psi_R$  для усіх  $N_k$  точок, на які розбита активна область довжиною  $L_a$ .

## 2.2 Самоузгоджене моделювання

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:

$$\frac{d}{dz} \epsilon(z) \frac{dV_s}{dz} = \frac{e}{\epsilon_0} [n(z) - N^+(x)], \quad (2.28)$$

де  $\epsilon_0$  – діелектрична стала;

$\epsilon$  – 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 апріорі. Однак, відомо, що  $n(z)$  визначається сумою формул (2.6), 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, (2.28) та (2.6) становлять систему інтегро-диференціальних рівнянь, які необхідно розв'язати, щоб досягнути мети роботи. Оскільки (2.6) 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 скінченно-різницеву схему, що відповідає рівнянню Пуассона на вибраній нами дискретній сітці.

Ліву частину (2.28) 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:

$$\epsilon'(z_i) = \frac{1}{2} \left[ \frac{\epsilon_{i+1} - \epsilon_i}{\Delta} + \frac{\epsilon_i - \epsilon_{i-1}}{\Delta} \right] = \frac{\epsilon_{i+1} - \epsilon_{i-1}}{2\Delta}$$

(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 скінченно-різницева схема:

$$a_i V_{i-1} + c_i V_{i+1} + b_i V_i = d_i, \quad (2.29)$$

$$\text{де: } a_i = \frac{-\varepsilon_{i+1} + \varepsilon_{i-1} + 4\varepsilon_i}{4\Delta^2};$$

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

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

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

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

$$V_1 = 0, \text{ що рівносильне рівностям } a = 0, c = 0, b = 1, d = 0 \text{ у схемі (2.29).}$$

$$V_N = V_{act}, \text{ що рівносильне рівностям } a = 0, c = 0, b = 1, d = V_{sum} \text{ у схемі (2.29).}$$

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» [18].

В [12] приведені рівняння для знаходження нового наближення до самоузгодженого потенціалу лінеаризованим методом Гумеля у наближенні сталої відносної діелектричної проникності. Це наближення було скасовано; рівняння набуло вигляду:

$$\frac{d}{dx} \epsilon(x) \frac{dV^{new}}{dx} - \frac{q_e n_{old}}{\epsilon_0 V_{ref}} V^{new} = \frac{q_e}{\epsilon_0} \left[ n^{old} \left( 1 - \frac{V^{old}}{V_{ref}} \right) - N_D \right]. \quad (2.30)$$

Тут  $V_{ref}$  – так званий «reference potential» приймався рівним тепловому:  $V_{ref} = kT / e$ .

Права частина скінченно-різницевої схеми, що відповідає (2.30), 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 (2.29) лише членом  $\tilde{b}_i$ . Тут він набуває 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 скінченно-різницевої схеми, що відповідає (2.30), 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 (2.30), 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  $10^{-4} \dots 10^{-2}$ .

### 2.2.2. 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:

$$\mathbf{J} = e \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{v}(k_z, z) N(\mathbf{k}) dk_x dk_y dk_z \quad (2.31)$$

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

$$N(\mathbf{k}, z) = \begin{cases} N_L(\mathbf{k}) \cdot |\Psi_L(k_z, z)|^2 \equiv N_{LR}(\mathbf{k}, z), \text{ якщо } k_z > 0, \\ N_R(\mathbf{k}) \cdot |\Psi_R(k_z, z)|^2 \equiv N_{RL}(\mathbf{k}, z), \text{ якщо } k_z < 0; \end{cases} \quad (2.32)$$

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

$$\mathbf{v}(\mathbf{k}, z) = \frac{\mathbf{j}(\mathbf{k}, z)}{|\Psi(\mathbf{k}, z)|^2} = \frac{i\hbar}{2m^*} (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi) / |\Psi(\mathbf{k}, z)|^2 \quad (2.33)$$

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 (2.32) та (2.33), (2.31) набуде вигляду:

$$\mathbf{J}(z) = e \underbrace{\int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty \mathbf{j}_{LR}(k_z, z) N_L(\mathbf{k}) dk_z dk_x dk_y}_{\equiv \mathbf{J}_{LR}} + e \underbrace{\int_{-\infty}^0 \int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty \mathbf{j}_{RL}(k_z, z) N_R(\mathbf{k}) dk_z dk_x dk_y}_{\equiv \mathbf{J}_{RL}} \quad (2.34)$$



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

$$\mathbf{J}_{LR} = \frac{\sqrt{2}(m^*)^{3/2} ek_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3} \int_{U_{i0}}^{\infty} \frac{\mathbf{j}_{LR}(E_z(k_z), z)}{\sqrt{E_z - U_{i0}}} \ln \left( 1 + \exp \left( -\frac{E_z - (E_\Phi + U_1)}{k_B T} \right) \right) dE_z, \quad (2.35)$$

$$\mathbf{J}_{RL} = \frac{\sqrt{2}(m^*)^{3/2} ek_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3} \int_{U_{i5}}^{\infty} \frac{\mathbf{j}_{RL}(E_z(k_z), z)}{\sqrt{E_z - U_{i5}}} \ln \left( 1 + \exp \left( -\frac{E_z - (E_\Phi + U_N)}{k_B T} \right) \right) dE_z. \quad (2.36)$$

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  $0z$ , і обчислити струм саме

в ній. Покажемо, як, користуючись цим, можна отримати, зокрема, формулу Тсу-Есакі [2] з модифікаціями, які ввели [7].

Для цього знайдемо  $\mathbf{j}_{LR}$  в точці  $z = z_5$  та  $\mathbf{j}_{RL}$  в точці  $z = z_0$ , користуючись, зокрема, (2.26) та (2.27):

$$\mathbf{j}_{LR}(z) = \mathbf{j}_{LR}(z_5) = \frac{\hbar k_L}{m^*} T \mathbf{e}_z \quad (2.37)$$

$$\mathbf{j}_{RL}(z) = \mathbf{j}_{RL}(z_0) = -\frac{\hbar k_R}{m^*} T \mathbf{e}_z \quad (2.38)$$

Відмітимо, що в (2.35) та (2.36)

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

а тому:

Підставляючи це значення до (2.35) та (2.36), отримаємо:

$$\mathbf{J}_{LR} = \mathbf{e}_z \frac{2m^* e k_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3} \int_{U_{i0}}^{\infty} T(E_z) \cdot \ln \left( 1 + \exp \left( -\frac{E_z - (E_\Phi + U_1)}{k_B T} \right) \right) dE_z \quad (2.39)$$

$$\mathbf{J}_{RL} = \mathbf{e}_z \frac{2m^* e k_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3} \int_{U_{i5}}^{\infty} T(E_z) \ln \left( 1 + \exp \left( -\frac{E_z - (E_\Phi + U_N)}{k_B T} \right) \right) dE_z \quad (2.40)$$

Легко показати, що (2.34) з урахуванням (2.39) та (2.40) можна переписати як один інтеграл:

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

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

В оригінальній роботі [8] члена  $k_R/k_L$  не було [19]. Останній, однак, не вносить серйозних якісних змін до ВАХ, збільшуючи, приміром, резонансний струм в порядку  $\sqrt{3}$  разів [19]. 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  $|t_L(E_z)|^2 = |\Psi_N|^2$ .

### 2.2.3. Результати моделювання

Структуру тестового РТД показано на рис. 2.3.

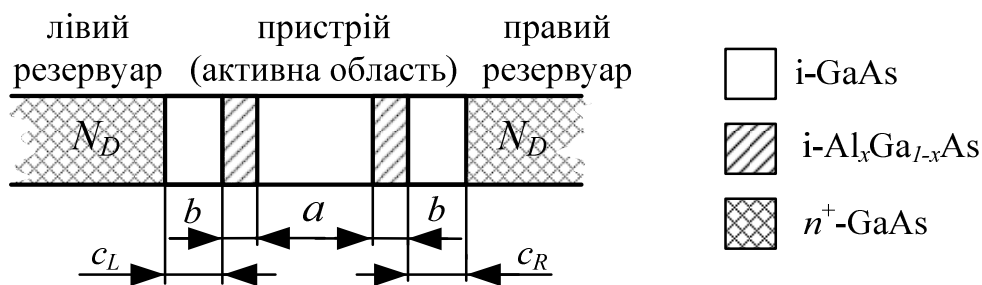
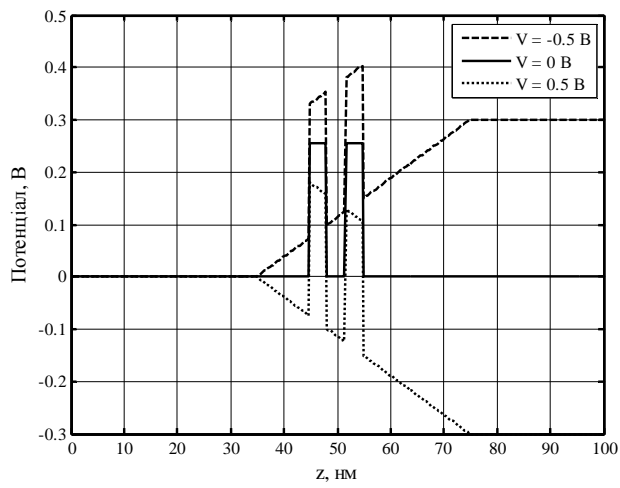


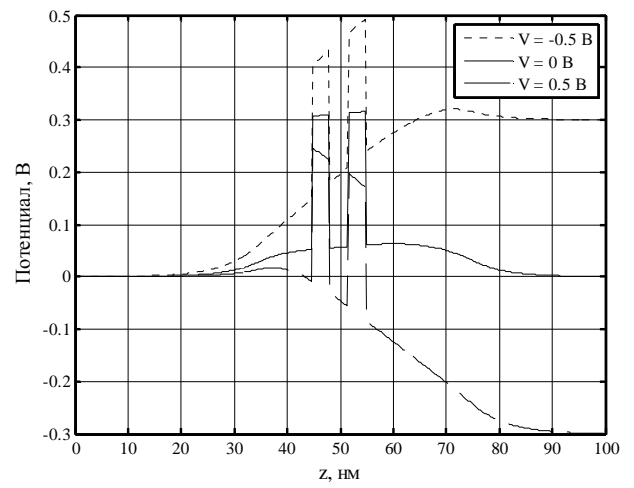
Рис. 2.3. Топологія модельного резонансно-тунельного діоду

Розміри тестової структури, що вказані на рис. 2.3 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  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$   $x = 0.33$ . Довжина області моделювання складала  $L = 100$  нм. Двобар'єрна квантова система знаходиться по центру області моделювання.

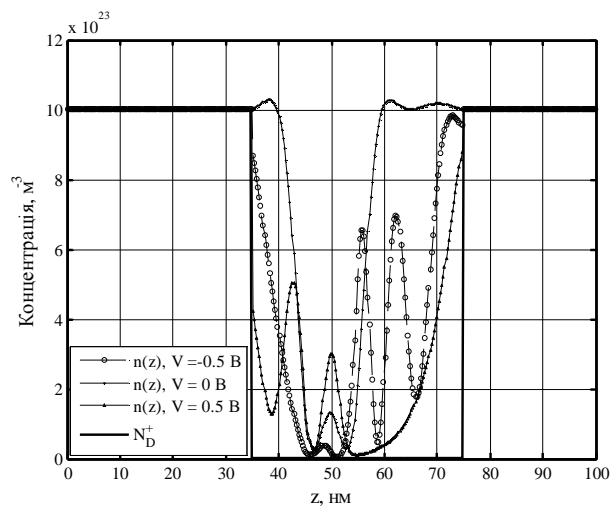
Результати самоузгодженого моделювання, які подано на рис. 2.4–2.8 показують, що просторовий заряд суттєво впливає на розподіл потенціалу, функції розподілу електронів, коефіцієнт прозорості структури, і, через них, на ВАХ резонансно-тунельного діоду. Самоузгодження в рамках розробленої моделі проводилося не лише в квантовій ямі, але й у квантовій та прилеглих до неї класичних областях, на відміну від [20].



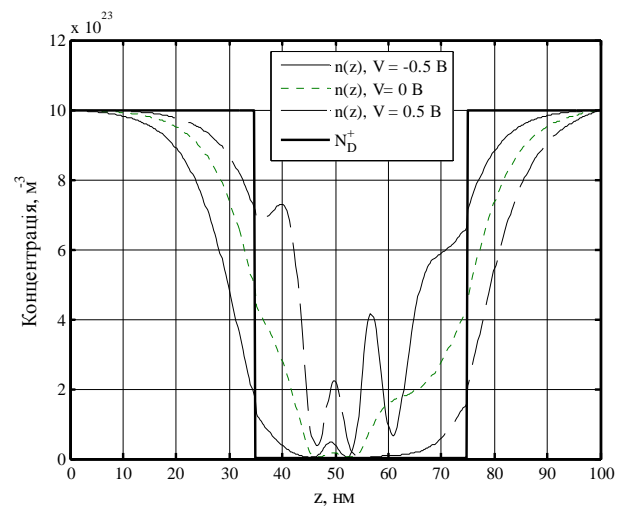
а)



б)



в)



г)

Рис. 2.4. Розподіл потенціалу та концентрації для несамоузгодженого (а, в) та самоузгодженого (б, г) моделювання. Ступінчаста лінія на рис. (в, г) показує концентрацію іонізованих донорів

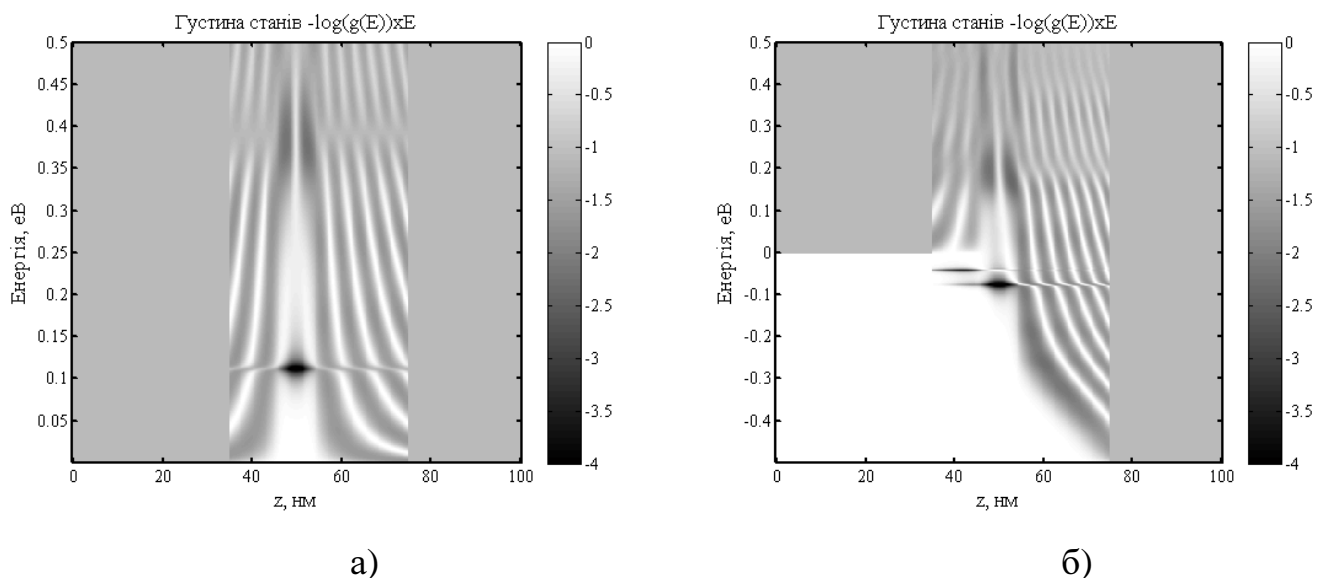


Рис. 2.5. Густина електронних станів при несамоузгодженому моделюванні (темніший колір відповідає більш високій густині у відповідності з картою відтінків):

а) за напруги 0 В,

б) за напруги 0.5 В

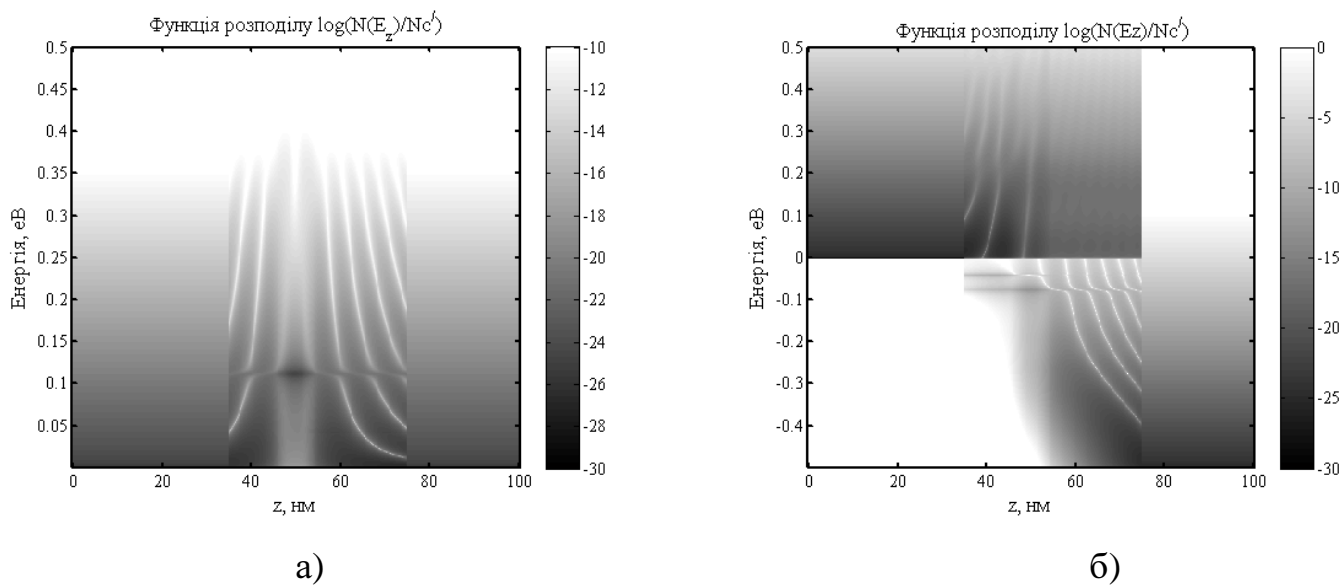


Рис. 2.6. Повна функція розподілу електронів при несамоузгодженому моделюванні (темніший колір відповідає більшому значенню  $N(E_z)$  у відповідності з картою відтінків):

а) за напруги 0 В, б) за напруги 0.5 В

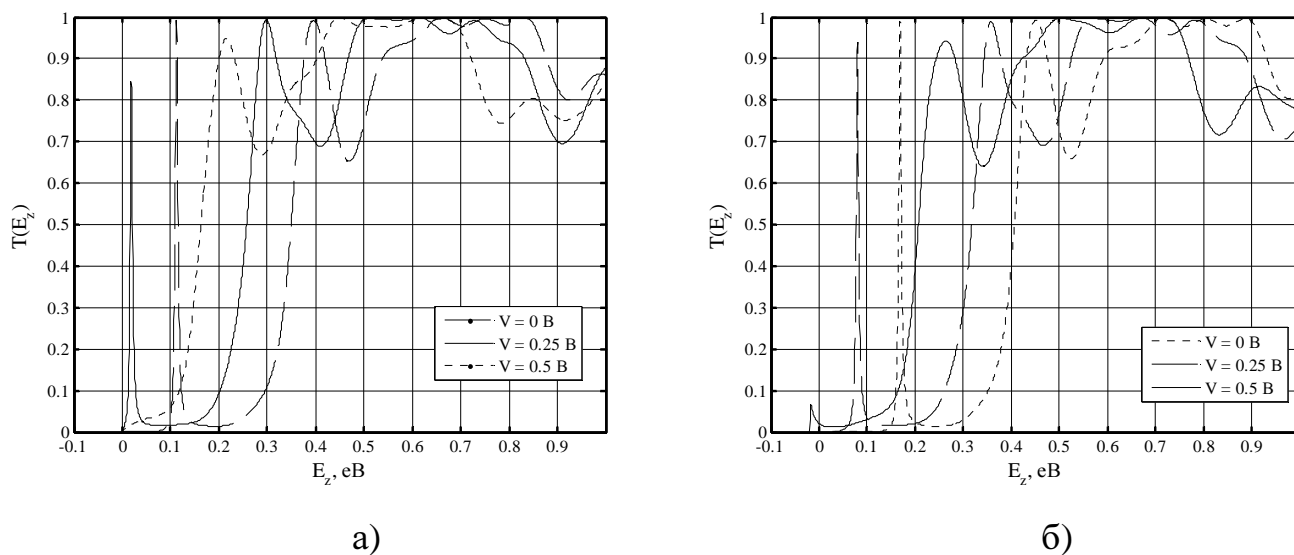


Рис. 2.7. Коефіцієнт проходження квантової структури  $T(E_z)$  при  
а) несамоузгодженому, б) самоузгодженому моделюванні

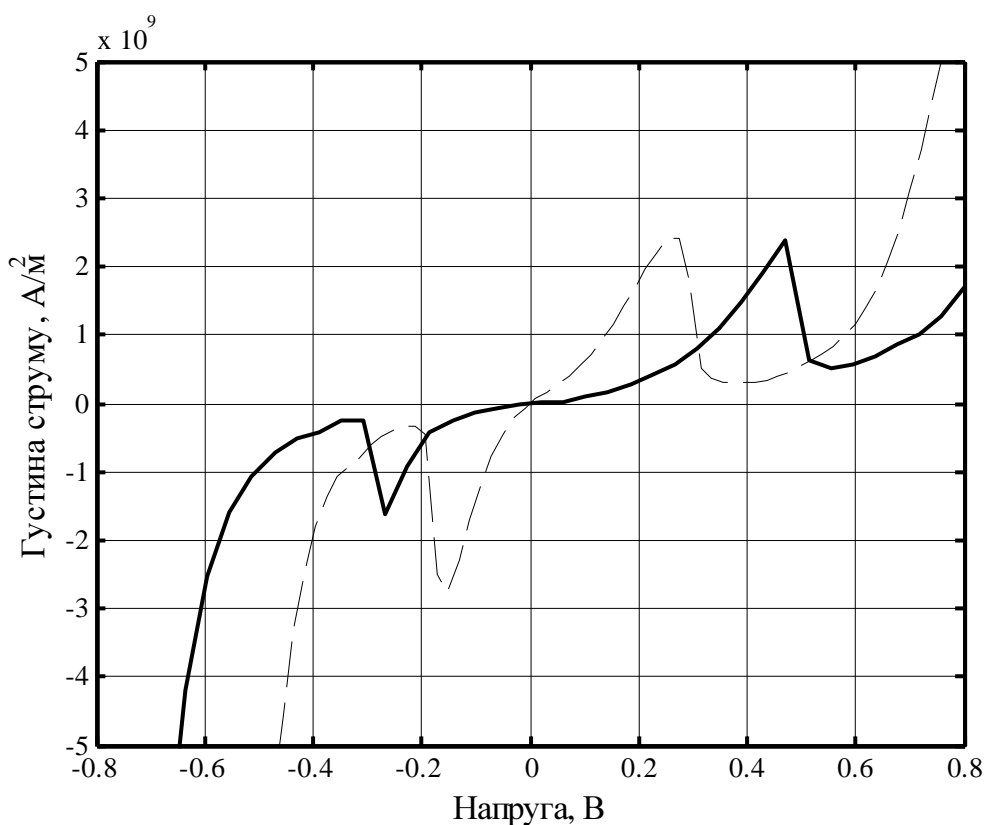


Рис. 2.8 Вольт-амперна характеристика модельного резонансно-тунельного діоду:  
самоузгоджена (суцільна лінія) та не самоузгоджена модель (пунктирна лінія)

### 2.3 Врахування розсіювання, форми гетеропереходів та паразитних опорів

Основним механізмом розсіювання в РТД вважається розсіювання на оптичних фонах, його формування виконується згідно підходу, використаному в роботах [21, 22]. Після розрахунку самоузгодженого потенціала в результаті вирішення рівнянь Пуассона і Шредінгера з метою врахування розсіювання на наступному етапі вирішується рівняння Шредінгера з комплексним Гамільтоніаном в області квантової ями [21,22], а саме:

$$\frac{-\hbar^2}{2} \frac{d}{dx} \left( \frac{1}{m^*} \frac{d}{dx} \psi \right) - (E - V + iW_{op}) \psi = 0, \quad (2.41)$$

де  $W_{op}$  – оптичний потенціал  $W_{op} = \hbar / 2\tau$ ,

$1/\tau$  – швидкість розсіювання.

Для розрахунку швидкості розсіювання враховуємо всі рівні через котрі можливе тунелювання. В такому випадку:

$$\frac{1}{\tau_l} = S_{op l} \left[ 1 + \frac{2}{\exp(\hbar\omega_{op l} / k_B T) - 1} \right], E - E_{Rl} \geq \hbar\omega_{op l}, \quad (2.42)$$

$$\frac{1}{\tau_l} = S_{op l} \left[ \frac{2}{\exp(\hbar\omega_{op l} / k_B T) - 1} \right], E - E_{Rl} \leq \hbar\omega_{op l}, \quad (2.43)$$

де  $S_{op l}$  – коефіцієнт швидкості розсіювання,

$E_{Rl}$  – енергія, яка відповідає  $l$ -му резонансному рівню,

$\hbar\omega_{op l}$  – енергія оптичних фонів  $l$ -го рівня.



Загальна швидкість розсіювання обчислюється згідно (2.44)

$$1/\tau = \sum_l 1/\tau_l,$$

де сумування ведеться по всім резонансним рівням  $l$ , які лежать в заданих діапазонах енергій.

В результаті вирішення рівняння (2.41) визначаються хвильові функції, на основі яких розраховується коефіцієнт проходження

$$T_{tot} = T_{coh} + T_{incoh} = T_{coh} + \frac{AT_R}{T_L + T_R}, \quad (2.45)$$

де  $T_{coh}$ ,  $T_{incoh}$  - когерентна та некогерентна складова проходження,  $A$  - коефіцієнт затухання ( $A = 1 - T_{coh} - R_{coh}$ ),

$R_{coh}$  - когерентна складова коефіцієнта відбивання,

$T_L$  і  $T_R$  - коефіцієнти проходження лівого і правого бар'єрів.

Для знаходження  $T_{incoh}$  хвильові функції представляють в вигляді

$$\psi(x) = A^{ikx} + B^{-ikx}, \quad (2.46)$$

$$k(x) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m^* [E - V(x) + iW_{op}(x)]}, \quad (2.47)$$

Для того, щоб побачити зміну паразитних опорів, врахуємо падіння напруги в приконтактних областях РТД. Необхідність цього пов'язана з двома факторами. По-перше, в структурі можуть протікати велика густина струму. По-друге, реальні РТД має достатньо протяжні тривимірні пасивні області, котрі не можуть бути строго враховані в рамках одновимірних численних моделей.

Коригування напруги виконаємо по формулі

$$U' = U + IR_e + IR_c, \quad (2.48)$$

де  $U'$  – наруга прикладена до РТД,

$I$  – струм, розрахований при нарузі  $U$ ,

$R_e, R_c$  – опори приконтактних областей РТД.

Для оцінки значення цих опорів можна використовувати відому модель резистора для бруска однорідно легованого напівпровідника [23]:

$$R = L / qs\mu_n N_D, \quad (2.50)$$

де  $L$  – довжина області,

$s$  – площа поперечного перерізу,

$\mu_n$  – рухливість електронів.

Відмітимо, що контактні області РТД включають в себе декілька прошарків з різною провідністю, тому оцінку загального опору необхідно визначати з урахуванням цього факту [24].

## РОЗДІЛ 3

### ВЕРИФІКАЦІЯ МОДЕЛЕЙ

#### 3.1 Експериментальні дані

Ми розглядаємо 3 структури РТД, які відрізняються шириною бар'єрів та потенціальних ям. Відповідно, у першій моделі ширина потенціальної ями 45 Å та бар'єра 17 Å, у другій моделі 51 Å та 14 Å і у третій моделі 45 Å та 14 Å. Решта будови всіх трьох РТД ідентична. Це можна побачити на рис. 3.1, де чітко видно, що

в усіх РТД однакові резервуари, сильно леговані анодні та катодні прошарки та проміжкові нелеговані області.

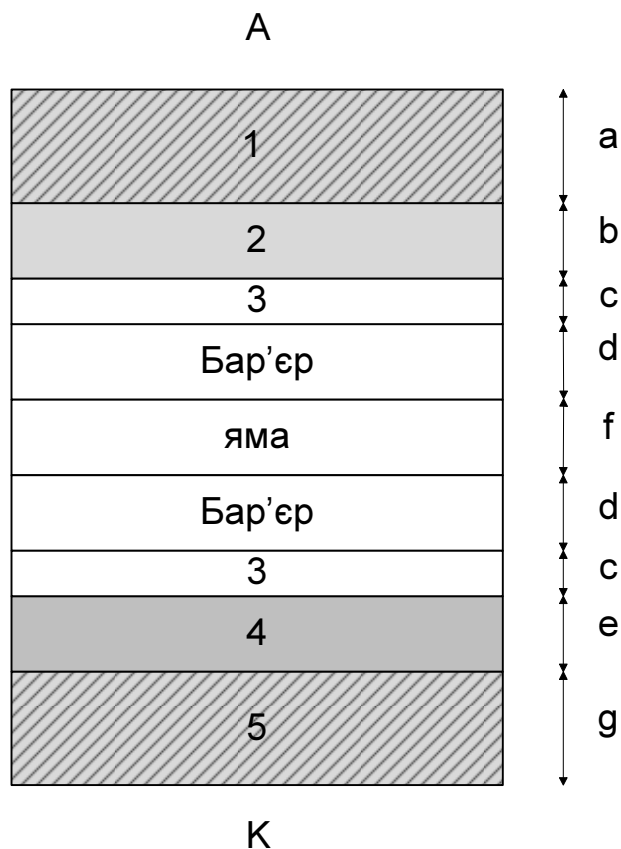


Рис 3.1. Топологія РТД.

1 – $n^+$ -GaAs ( $2 \times 10^{18} \text{ см}^3$ )	$a = 4000 \text{ \AA}$
2 – $n^+$ -GaAs ( $1 \times 10^{17} \text{ см}^3$ )	$b = 600 \text{ \AA}$
3 – AlAs	$c = 100 \text{ \AA}$
4 – $n^+$ -GaAs ( $2 \times 10^{17} \text{ см}^3$ )	$e = 400 \text{ \AA}$
5 – GaAs ( $2.5 \times 10^{18} \text{ см}^3$ )	$g = 5000 \text{ \AA}$

Експеримент було проведено за температури 77 К. РТД з піковими токами більше 25 мА виходили з ладу при температурі 300 К через нагрівання.

Розглянемо експериментальні вольт-амперні характеристики кожної з трьох моделей РТД на рисунках 3.2-3.4.

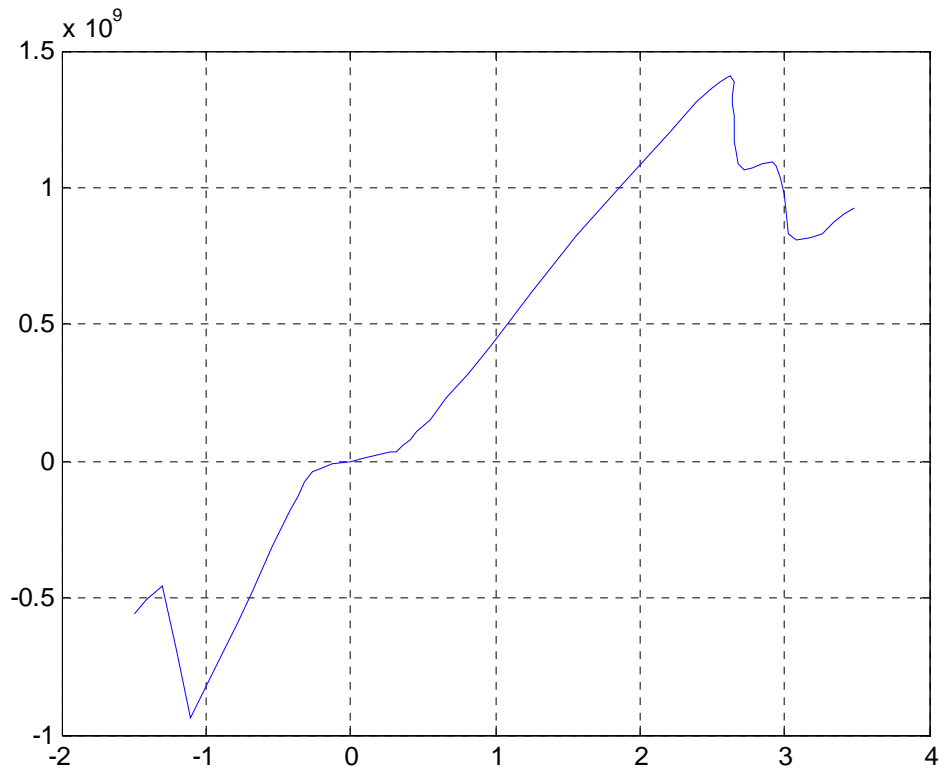


Рис. 3.2. РТД з потенційною ямою  $45\text{\AA}$  та бар'єром  $17\text{\AA}$ .

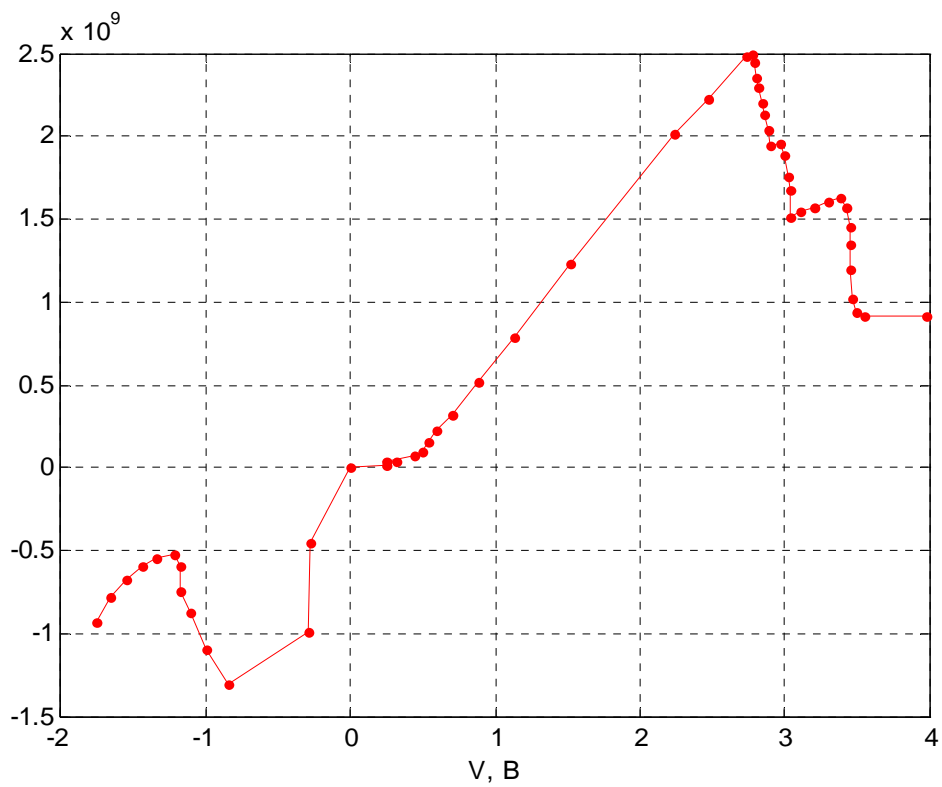


Рис. 3.3. РТД з потенційною ямою  $51\text{\AA}$  та бар'єром  $14\text{\AA}$ .

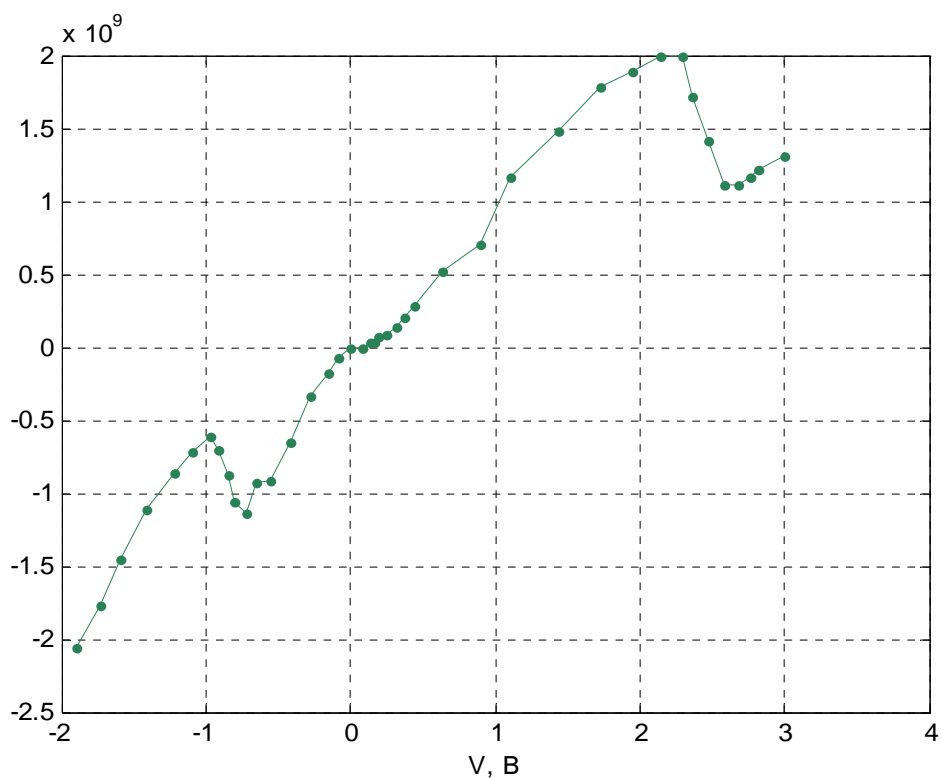


Рис. 3.4. РТД з потенційною ямою  $45\text{\AA}$  та бар'єром  $14\text{\AA}$ .

### 3.2 Методика верифікації

Моделювання даних структур здійснюється за допомогою пакету програм *Matlab 7.9*. Для початку змодельємо РТД несамоузгоджено та самоузгоджено без врахування розсіювання, паразитних опорів та зміни ширини бар'єрів.

Спочатку спробуємо отримати спів падіння по піковому струмові ВАХ. Та порівняємо його з експериментальними даними на рисунках 3.5-3.10.

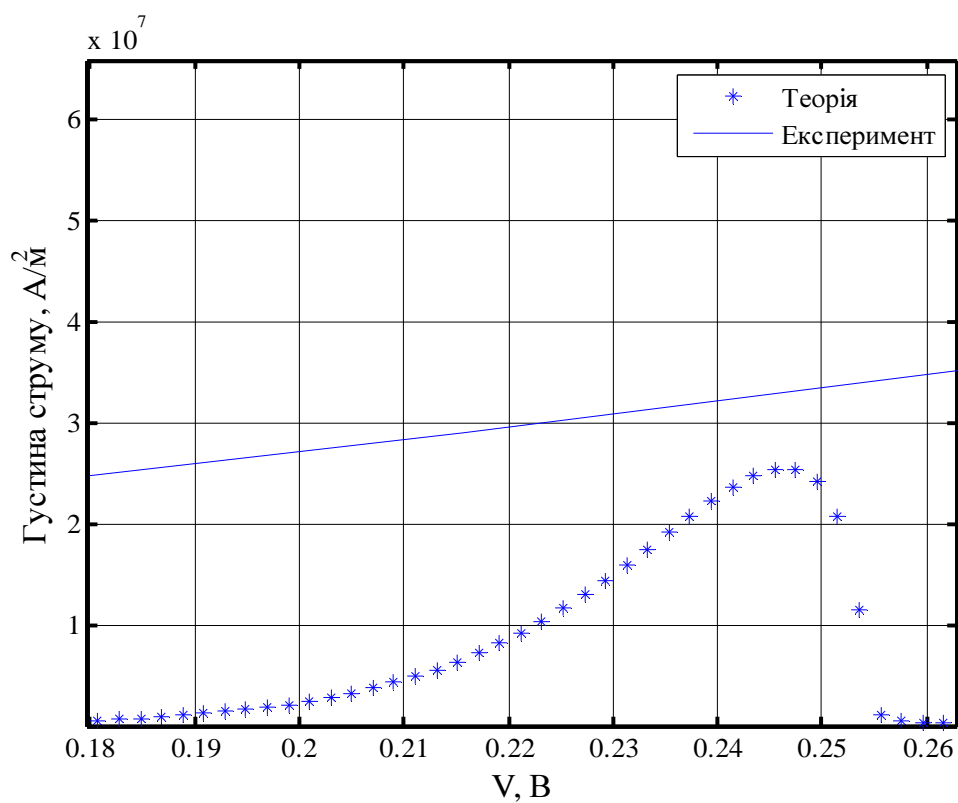


Рис. 3.5. ВАХ РТД з потенційною ямою  $45\text{\AA}$  та бар'єром  $17\text{\AA}$  несамоузгоджено.

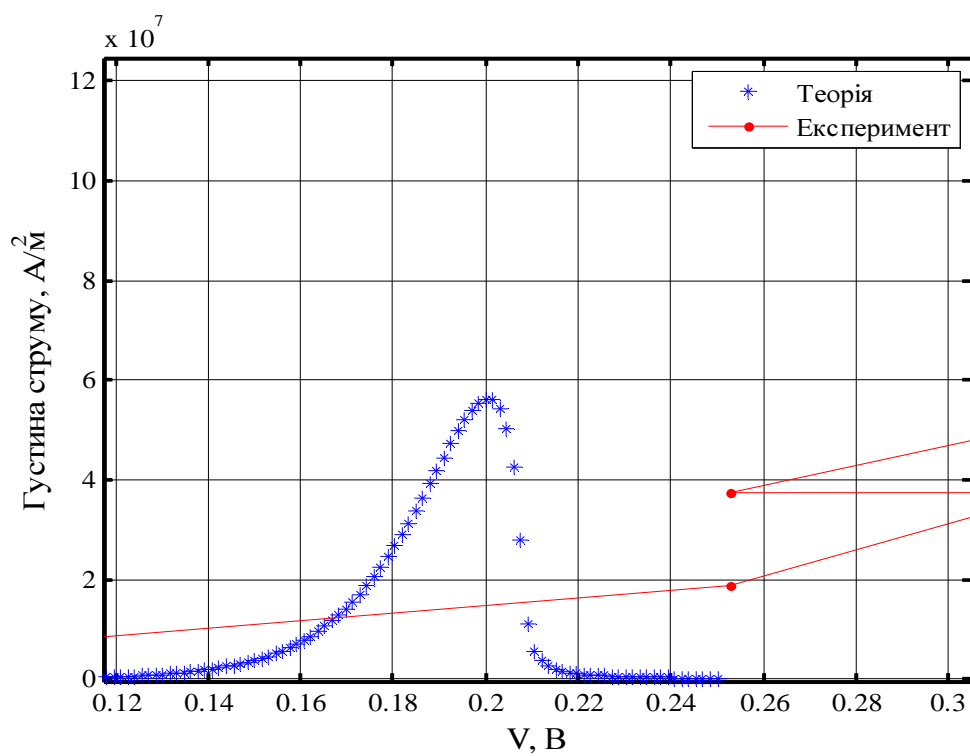


Рис. 3.6. ВАХ РТД з потенційною ямою  $51\text{\AA}$  та бар'єром  $14\text{\AA}$  несамоузгоджено.

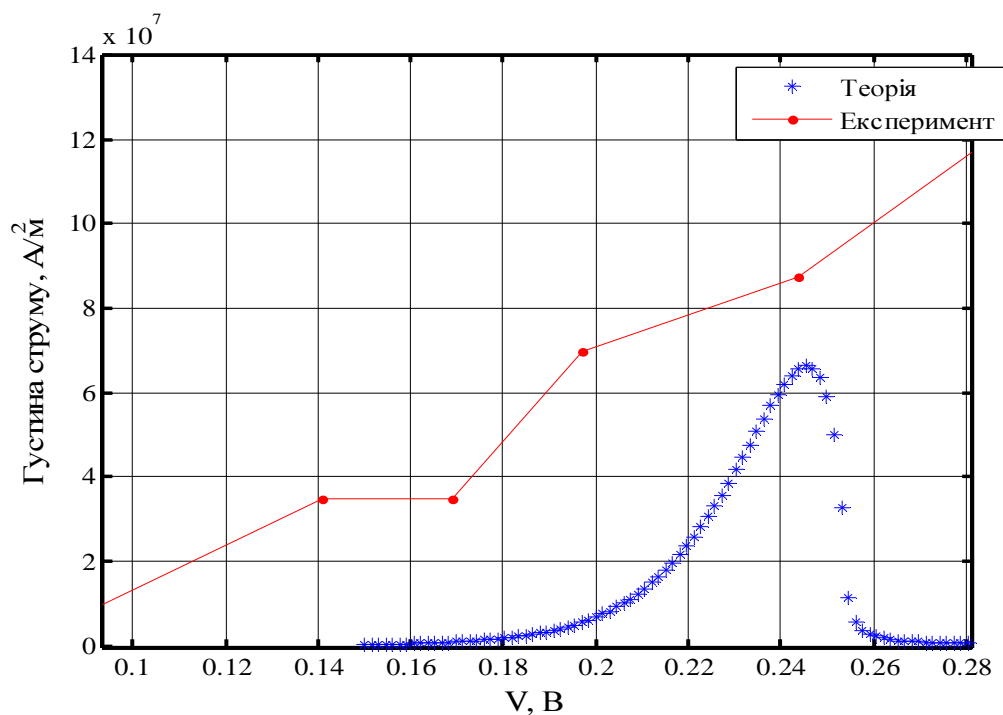


Рис. 3.7. ВАХ РТД з потенційною ямою  $45\text{\AA}$  та бар'єром  $14\text{\AA}$  несамоузгоджено.

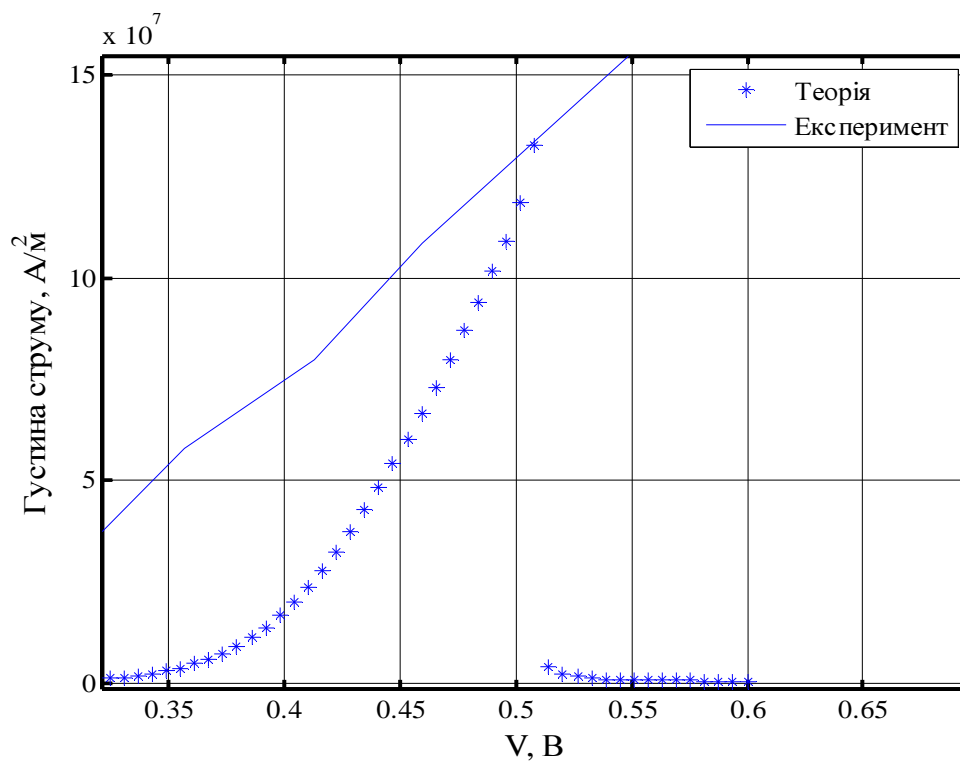


Рис. 3.8. ВАХ РТД з потенційною ямою  $45\text{\AA}$  та бар'єром  $17\text{\AA}$  самоузгоджено.

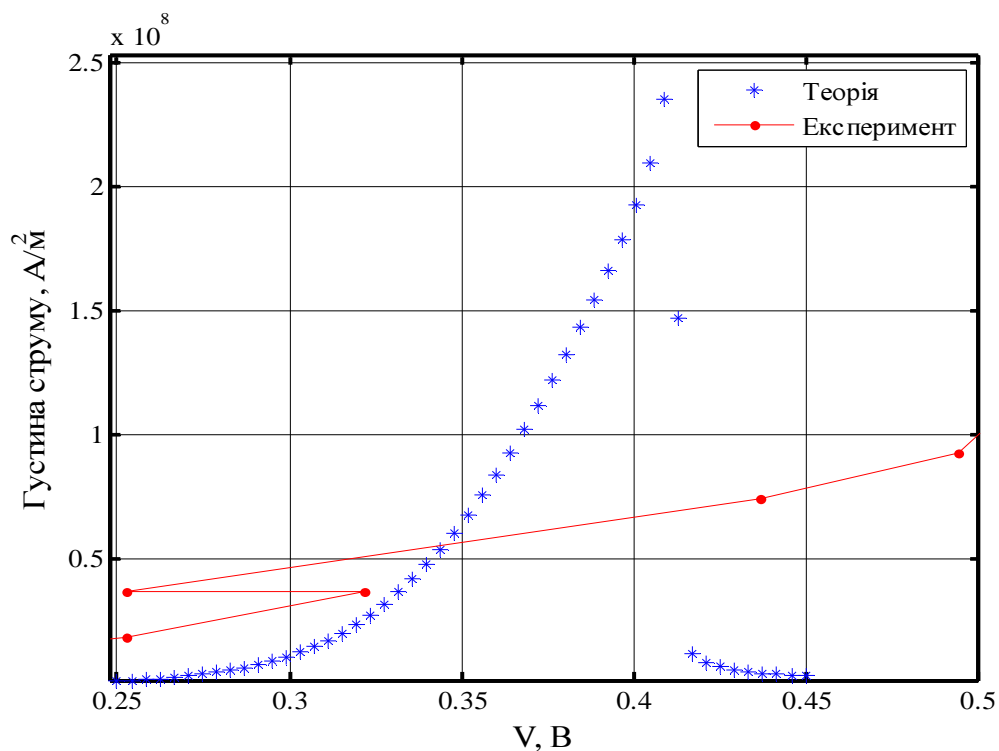


Рис. 3.9. ВАХ РТД з потенційною ямою  $51 \text{ \AA}$  та бар'єром  $14 \text{ \AA}$  самоузгоджено.

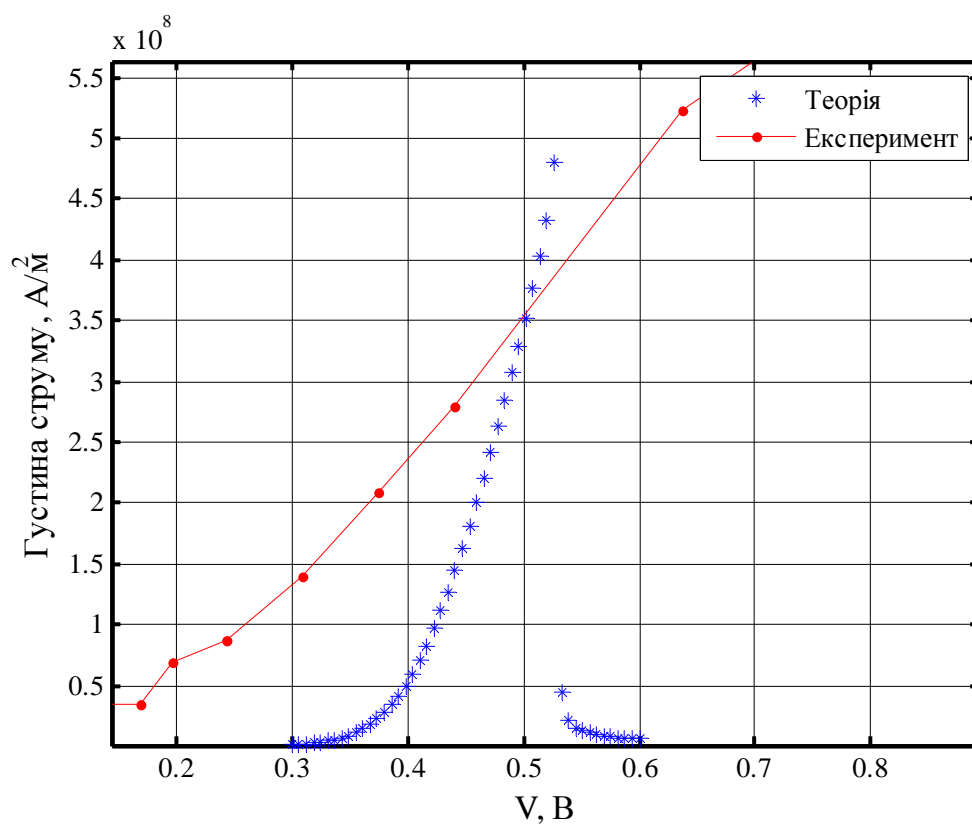


Рис. 3.10. ВАХ РТД з потенційною ямою  $45 \text{ \AA}$  та бар'єром  $14 \text{ \AA}$  самоузгоджено.



З рисунків 3.5-3.10 помітно, що піковий струм в теорії та експерименті відрізняється в декілька разів. Це зумовлено тим, що ми не враховували в теорії розсіювання, паразитні опори та не змінювали ширини бар'єрів. Теоретичні ВАХ – це лише ВАХ тієї частини діода, в котру входять лише спейсери, бар'єри та потенційна яма та маленька частина резервуарів. Крім того моделювання розривів зон відбувалось ступінчатими функціями, що в реальності відбувається не так.

Тепер ми спробуємо максимально наблизити в подальшому моделюванні наші теоретичні ВАХ до експериментальних.

Почнемо наближувати піковий струм за рахунок зменшення ширини потенціальних бар'єрів. Реальна форма бар'єрів відмінна від ступінчатої апроксимації, яку ми використовуємо в даній роботі. Однак, форму бар'єрів можна врахувати, зменшивши їх ширину, але залишивши в силі ступінчату апроксимацію.

На рисунках 3.11–3.16 ВАХ моделей РТД зі зменшеною шириною потенційних бар'єрів.

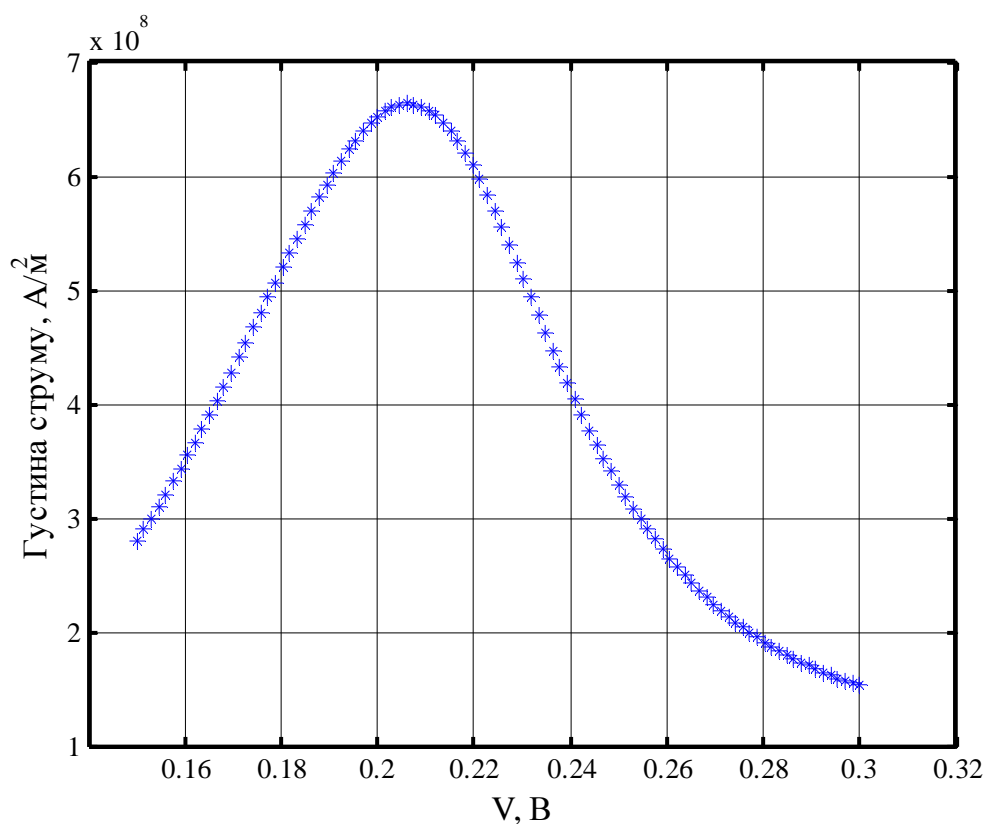


Рис. 3.11. РТД з потенційною ямою  $45\text{\AA}$  та бар'єром  $4\text{\AA}$  (несамоузгоджене моделювання).

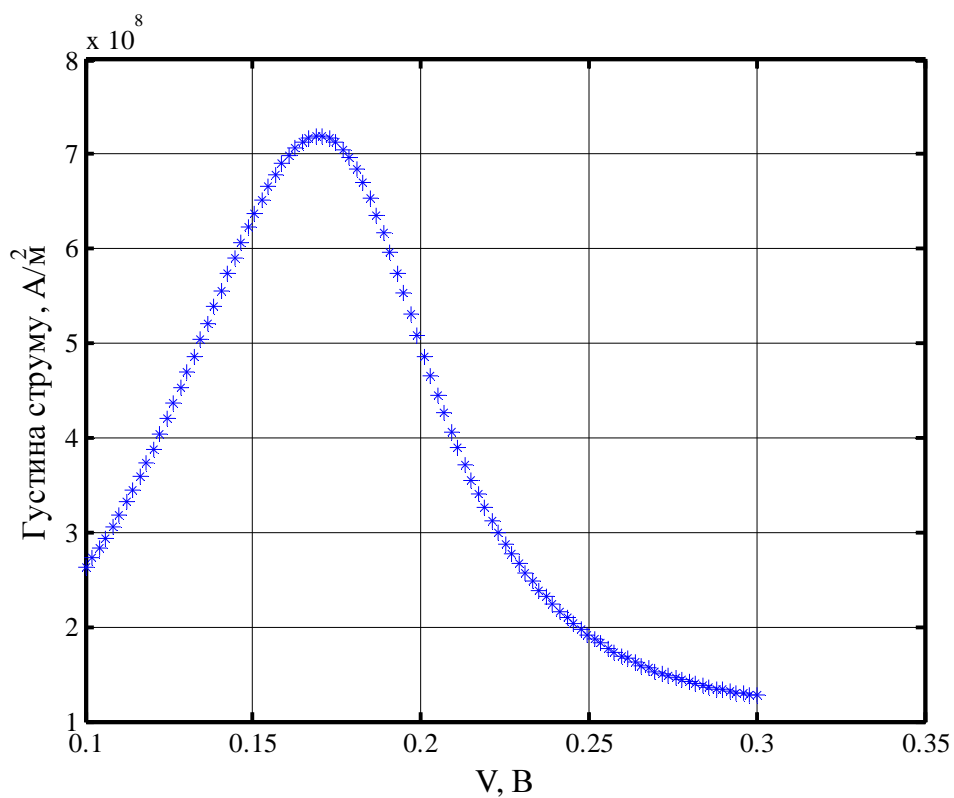


Рис. 3.12. РТД з потенційною ямою  $51\text{\AA}$  та бар'єром  $4\text{\AA}$  (несамоузгоджене моделювання).

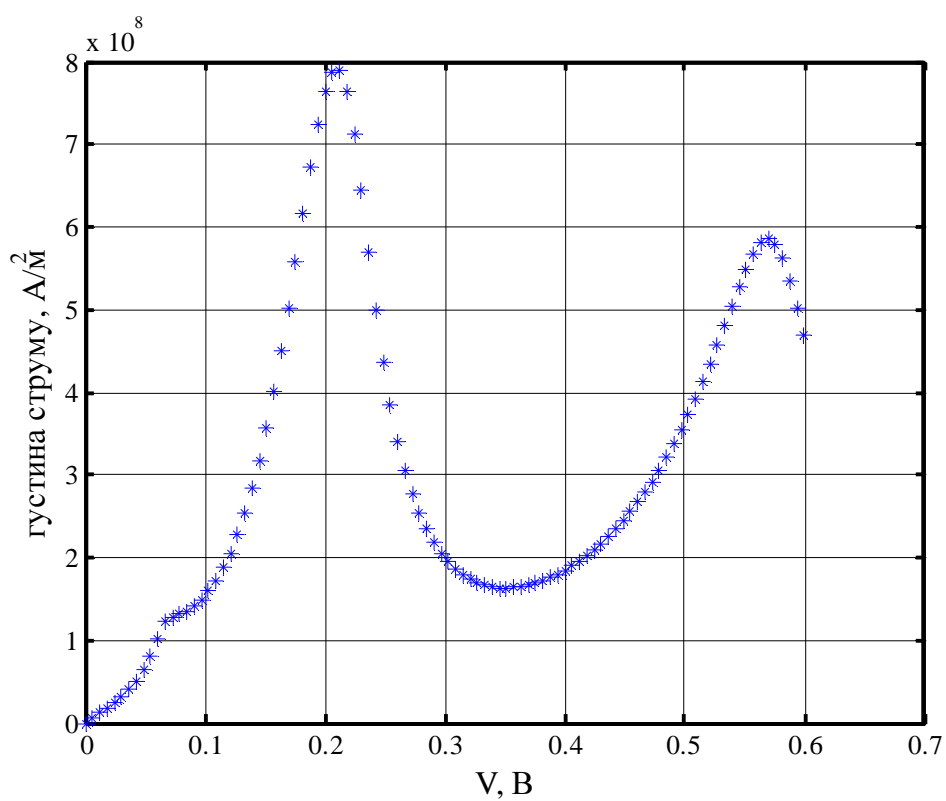


Рис. 3.13. РТД з потенційною ямою  $45\text{\AA}$  та бар'єром  $4\text{\AA}$  (несамоузгоджене моделювання)

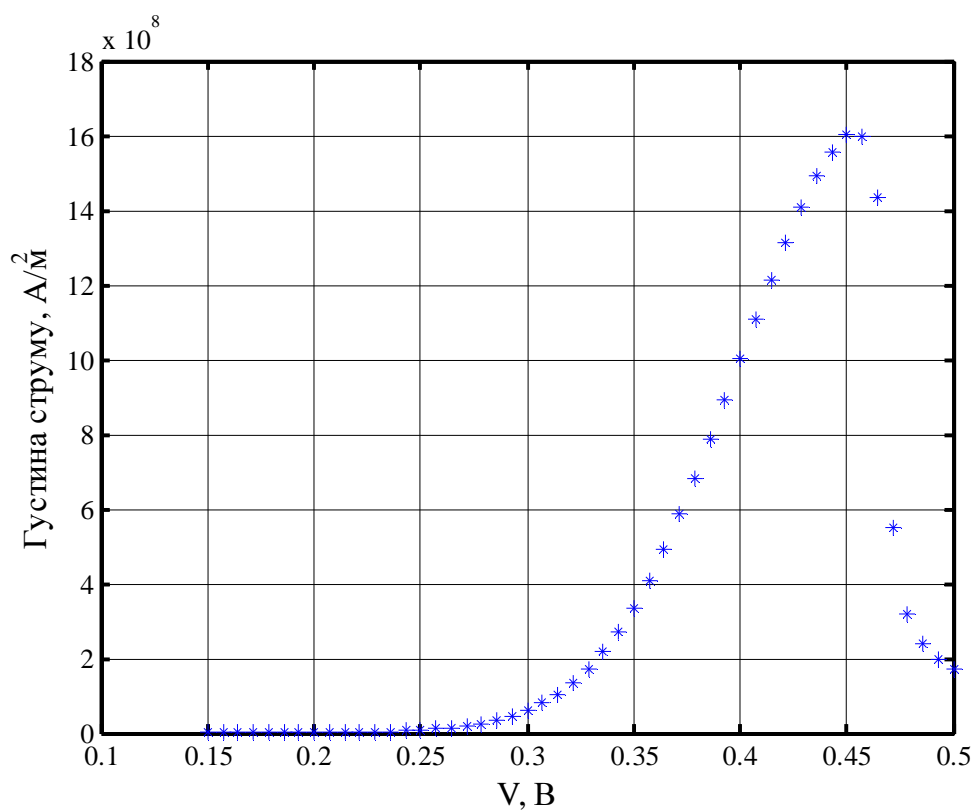


Рис. 3.14. РТД з потенційною ямою 45Å та бар'єром 12Å (самоузгоджене моделювання).

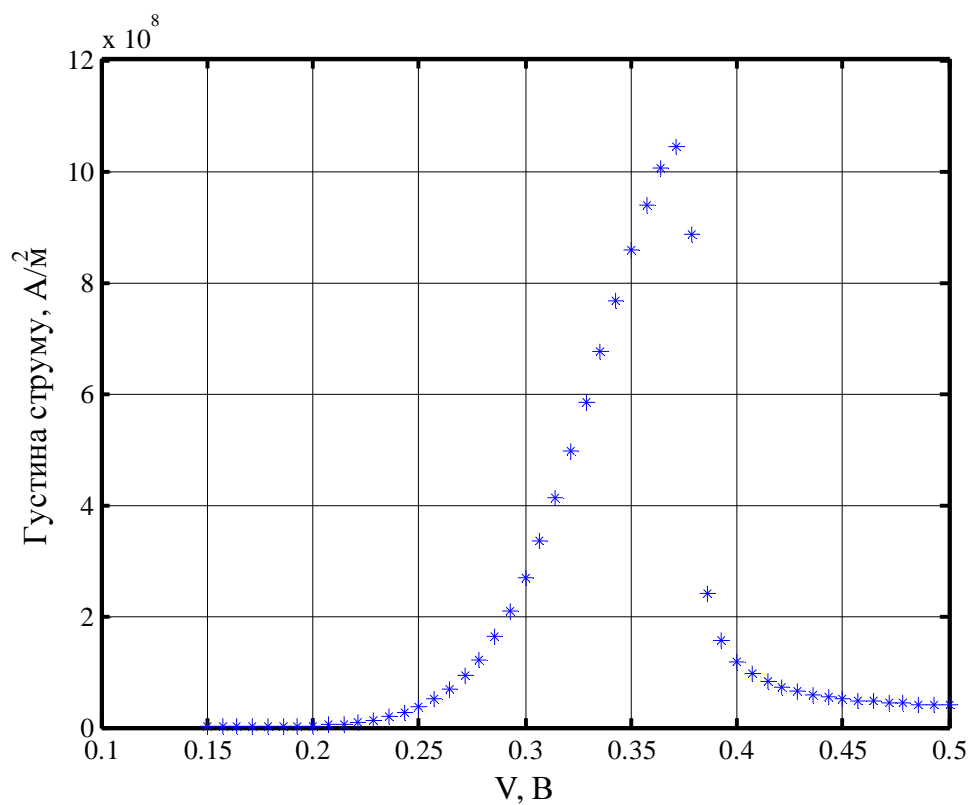


Рис. 3.15. РТД з потенційною ямою 51Å та бар'єром 10Å (самоузгоджене моделювання).

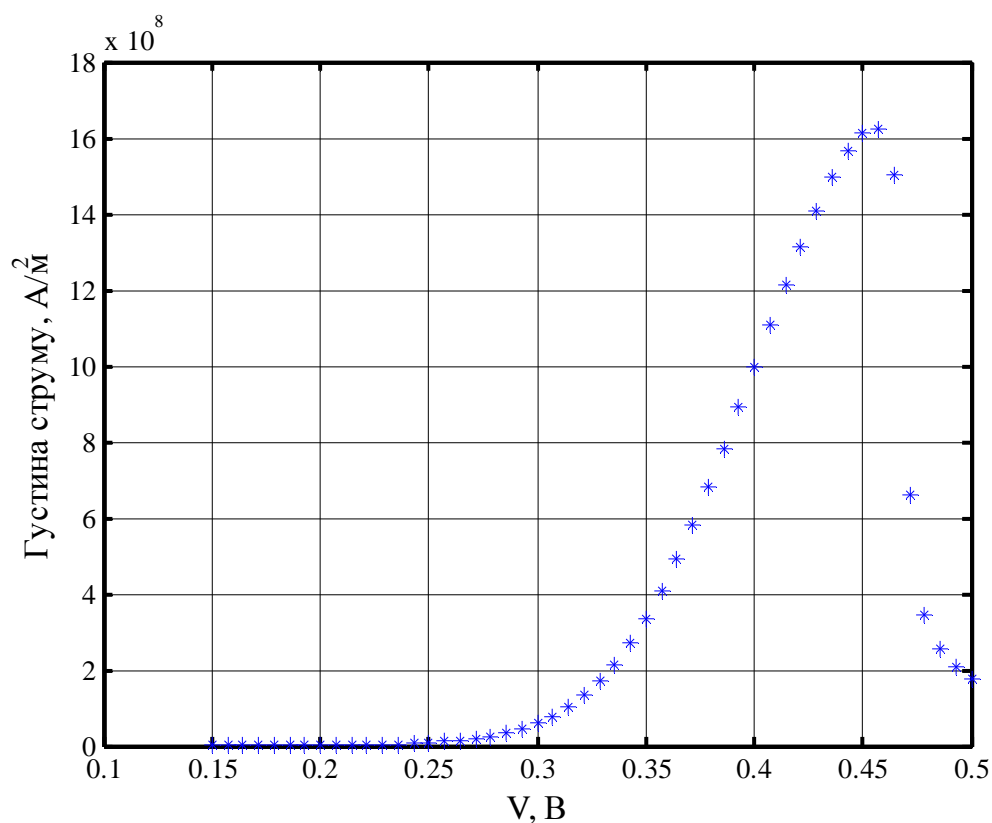


Рис. 3.16. РТД з потенційною ямою  $45\text{\AA}$  та бар'єром  $11\text{\AA}$  (самоузгоджене моделювання).

З рисунків 3.11–3.16 можна помітити, що піковий струм значно виріс порівняно з теоретичними ВАХ РТД на рисунках 3.5–3.10. Для самоузгодженого моделювання ми досягли більш точних результатів і піковий струм в теорії і експерименті несуттєво відрізняється.

Далі ми будемо моделювати дані РТД з урахуванням розсіювання для того, щоб отримати струм долини на ВАХ та наблизити його максимально до експериментальних даних.

На рисунках 3.17–3.22 зобразимо ВАХ даних РТД з урахуванням розсіювання.

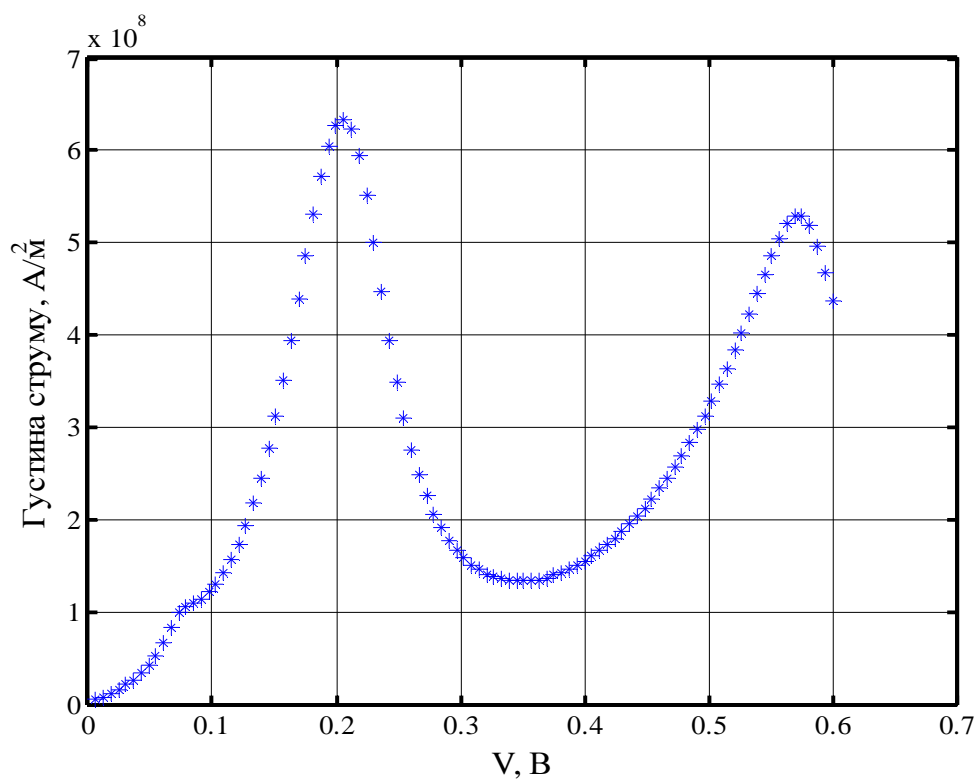


Рис. 3.17. РТД з потенційною ямою  $45\text{\AA}$  та бар'єром  $4\text{\AA}$  з розсіюванням  $6 \times 10^{12}$  1/с (самоузгоджене моделювання).

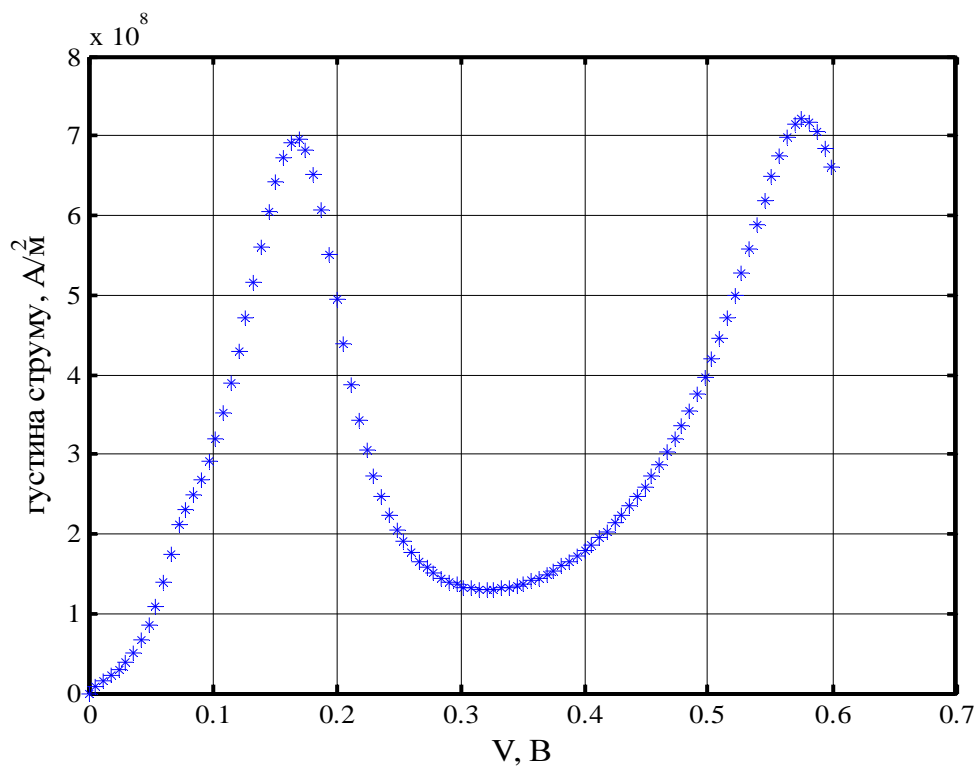


Рис. 3.18. РТД з потенційною ямою  $51\text{\AA}$  та бар'єром  $10\text{\AA}$  (несамоузгоджене моделювання) з розсіюванням  $S_{op} = 6 \times 10^{12}$  1/с.

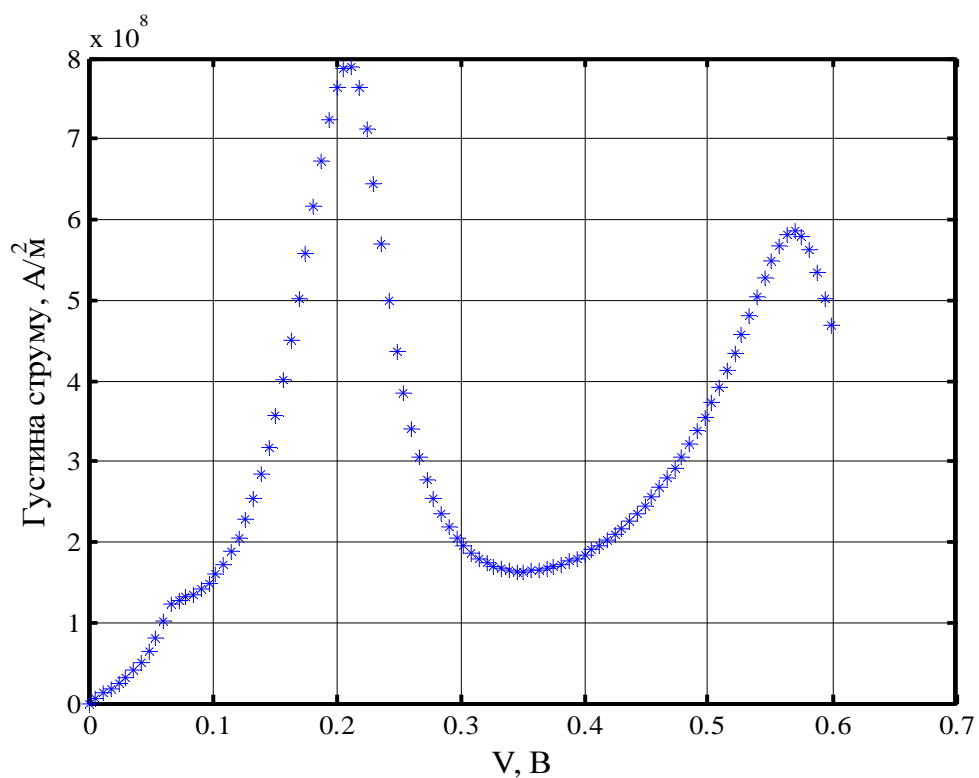


Рис. 3.19. РТД з потенційною ямою  $45\text{\AA}$  та бар'єром  $11\text{\AA}$  (несамоузгоджене моделювання) з розсіюванням  $S_{op} = 6 \times 10^{12}$  1/с.

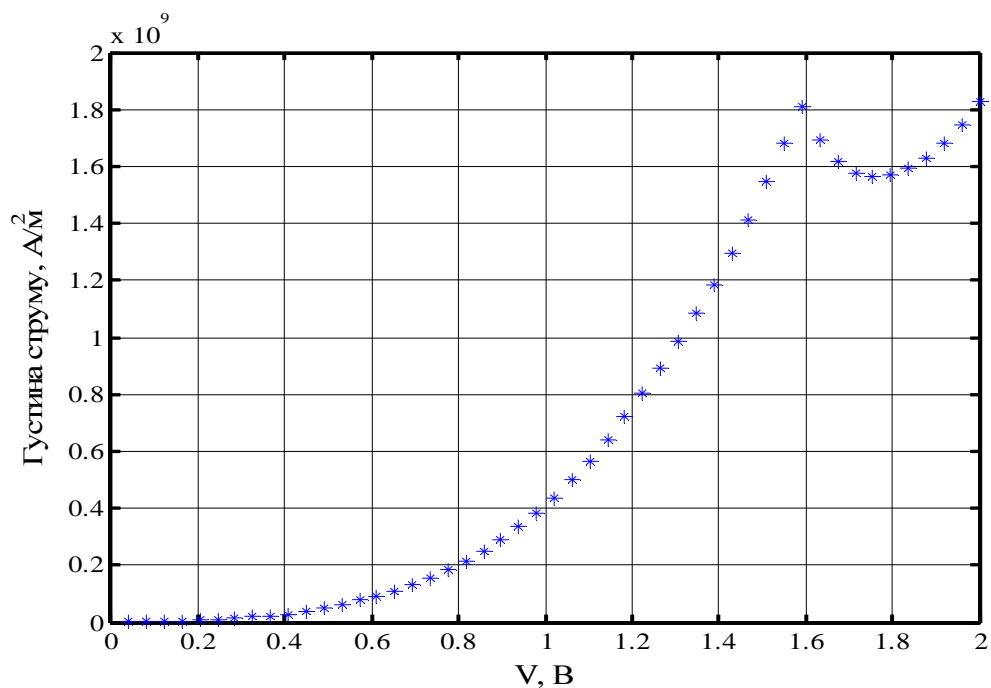


Рис. 3.20. РТД з потенційною ямою  $45\text{\AA}$  та бар'єром  $4\text{\AA}$  (самоузгоджене моделювання) з параметром розсіюванням  $S_{op} = 6 \times 10^{16}$  1/с.

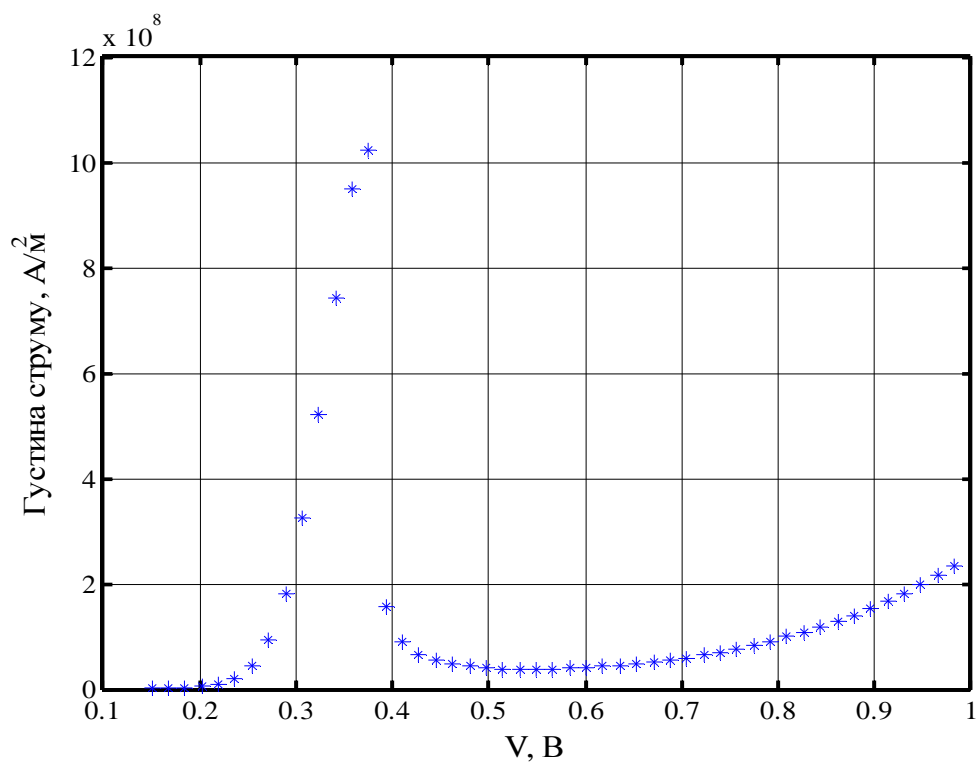


Рис. 3.21. РТД з потенційною ямою  $51\text{\AA}$  та бар'єром  $10\text{\AA}$  (самоузгоджене моделювання) з розсіюванням  $S_{op} = 6 \times 10^{16} \text{ 1/c}$ .

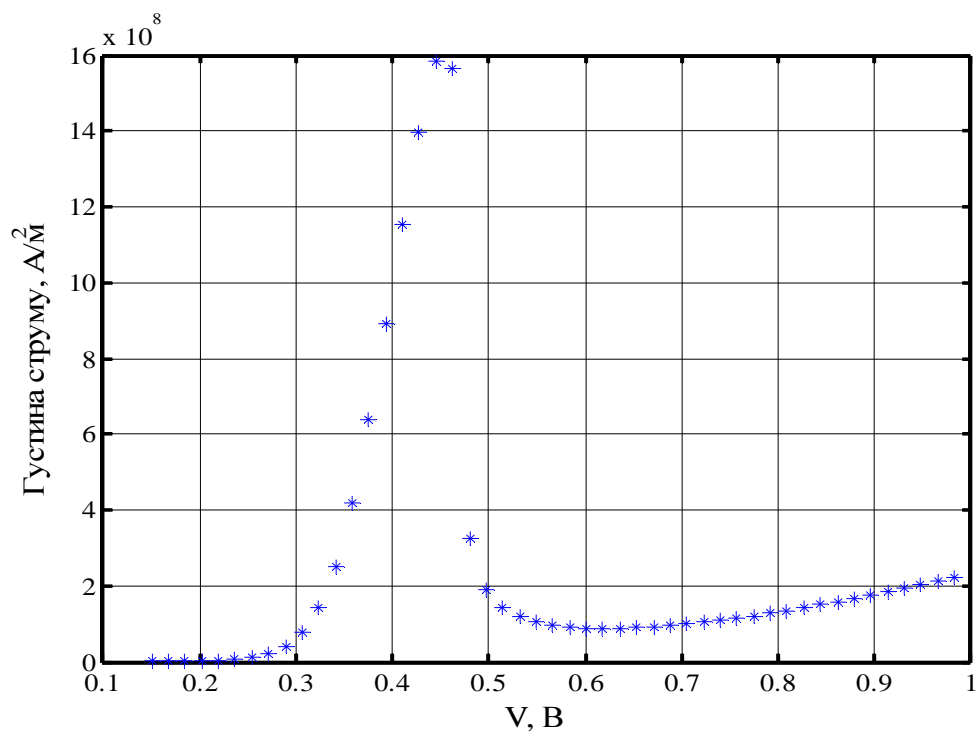


Рис. 3.22. РТД з потенційною ямою  $45\text{\AA}$  та бар'єром  $11\text{\AA}$  (самоузгоджене моделювання з розсіюванням  $S_{op} = 6 \times 10^{16} \text{ 1/c}$ ).

З рисунків 3.17–3.22 можна помітити, що, врахувавши розсіювання, ми отримали добре узгодження за долинним струмом в усіх випадках. Максимально наблизити його до експериментальних значень вдалося в самоузгодженому моделюванні.

Надалі нас цікавить отримані результати з рисунків 3.17–3.22 максимально наблизити пікову напругу до експериментальних значень. Для цього ми в подальшому моделюванні будемо враховувати паразитні опори РТД.

На рисунках 3.23–3.29 зобразимо отримані результати моделювання даних РДТ з урахуванням паразитних опорів, розсіювання та зменшеною шириною бар'єрів та порівняємо з початковими експериментальними даними.

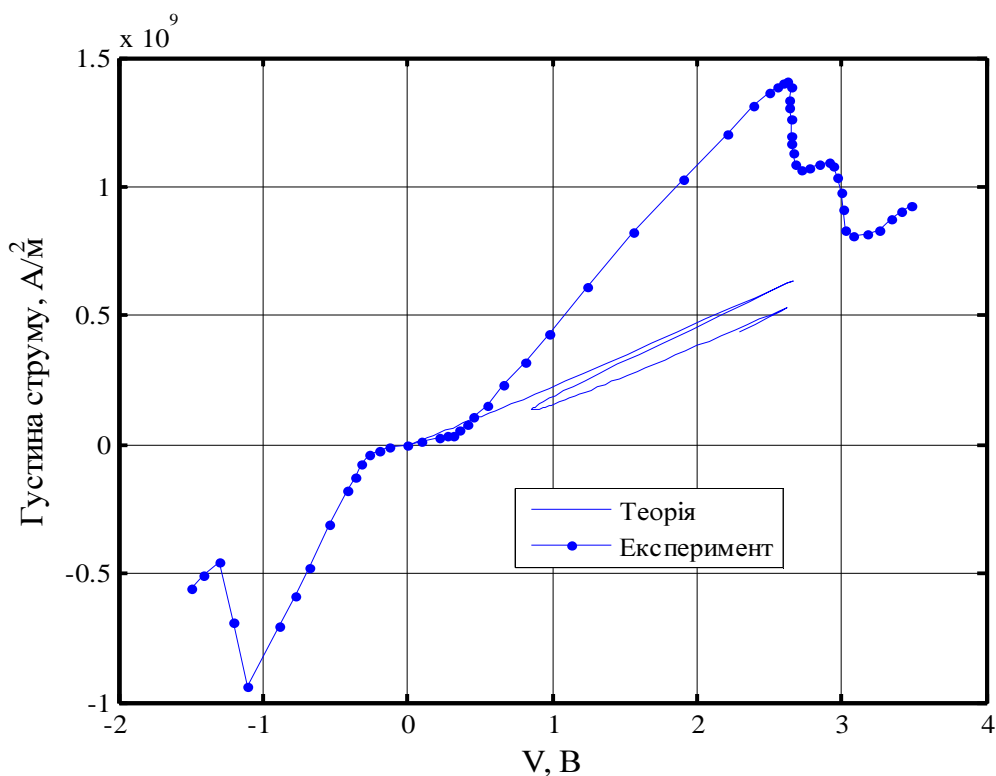


Рис. 3.23. РТД з потенційною ямою  $45\text{\AA}$  та бар'єром  $4\text{\AA}$  (несамоузгоджене моделювання) з розсіюванням  $S_{op} = 6 \times 10^{12} \text{ 1/s}$  та паразитним опором.



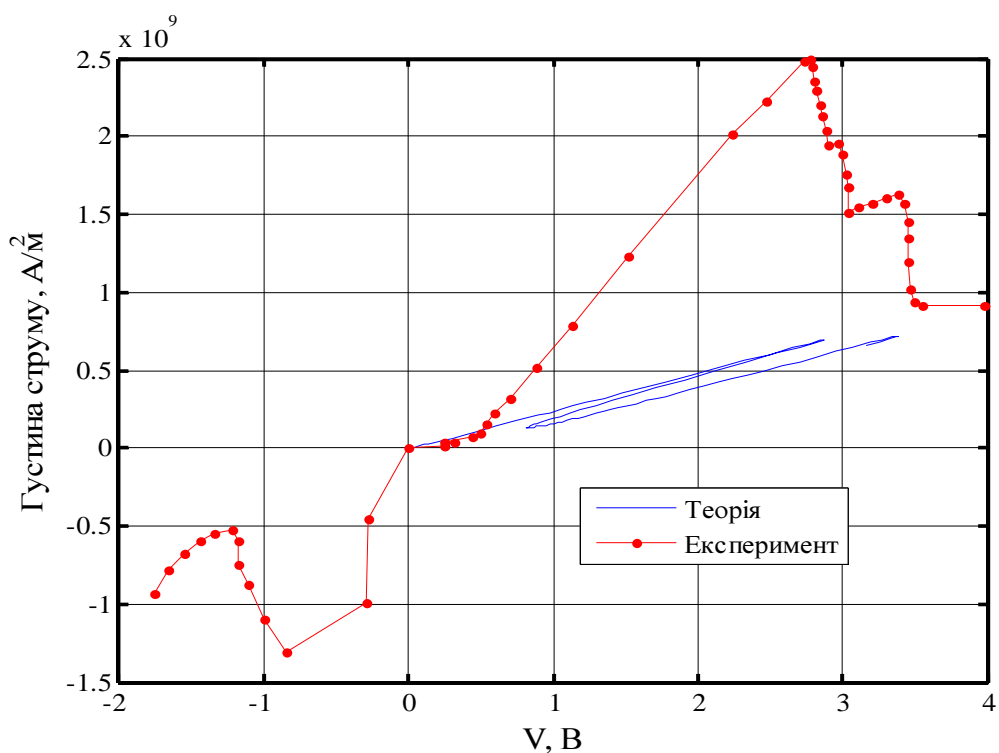


Рис. 3.24. РТД з потенційною ямою  $51 \text{ \AA}$  та бар'єром  $10 \text{ \AA}$  (несамоузгоджене моделювання) з розсіюванням  $S_{or} = 6 \times 10^{12} \text{ 1/c}$  та паразитним опором.

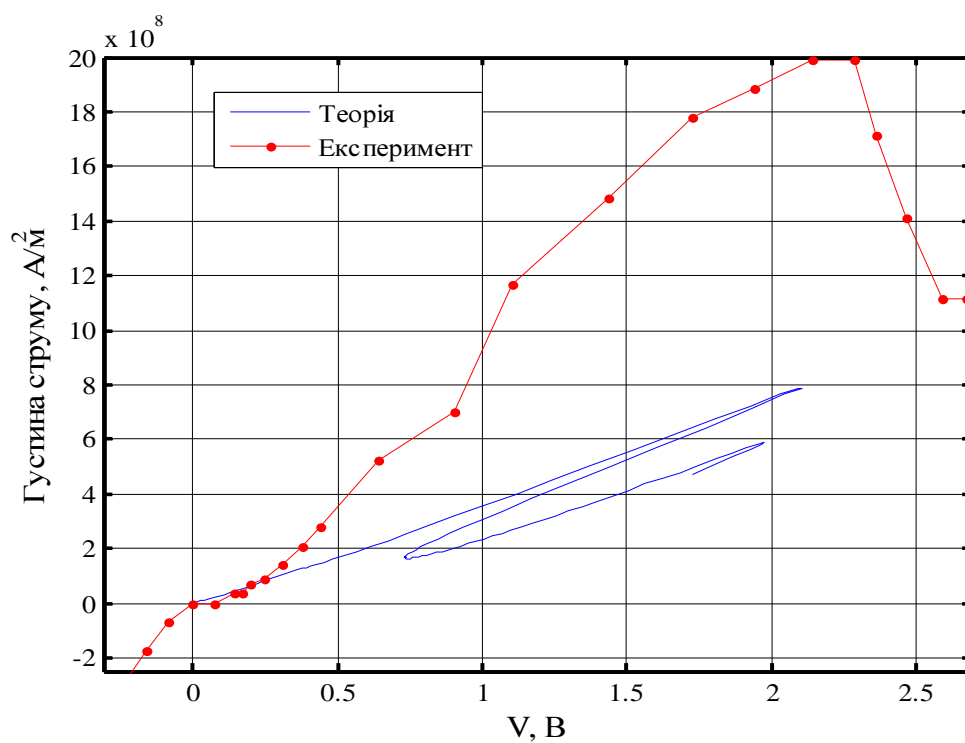


Рис. 3.25. РТД з потенційною ямою  $45 \text{ \AA}$  та бар'єром  $11 \text{ \AA}$  (несамоузгоджене моделювання) з розсіюванням  $6 \times 10^{12} \text{ 1/c}$  та паразитним опором.

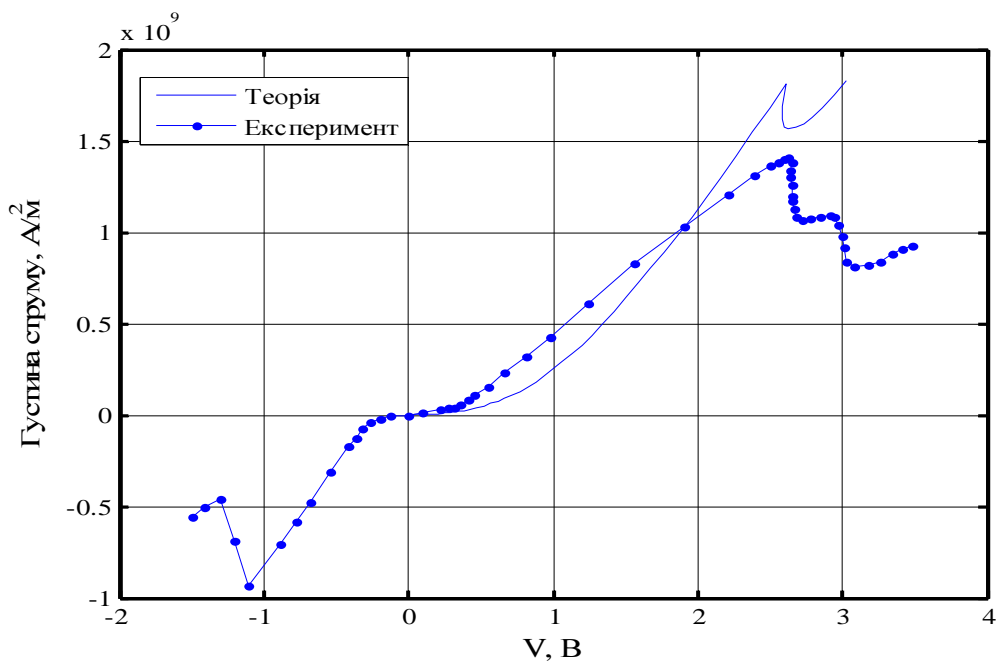


Рис. 3.26. РТД з потенційною ямою 45Å та бар'єром 4Å (самоузгоджене моделювання) з розсіюванням  $6 \times 10^{16}$  1/с та паразитним опором.

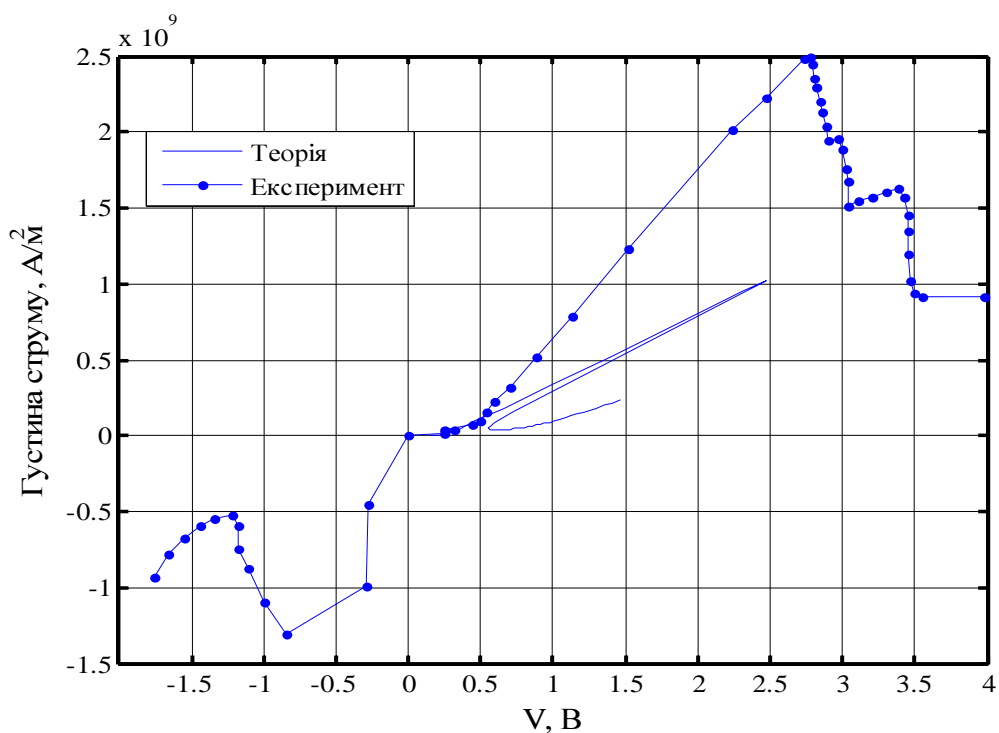


Рис. 3.27. РТД з потенційною ямою 51Å та бар'єром 10Å (самоузгоджене моделювання) з розсіюванням  $6 \times 10^{16}$  1/с та паразитним опором.

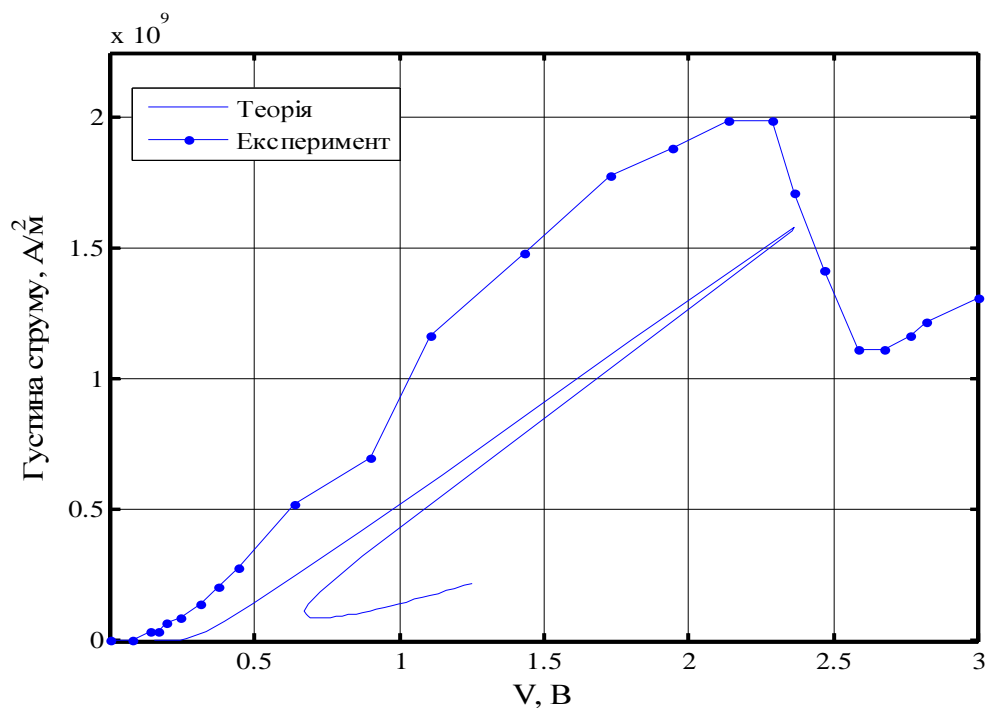


Рис. 3.28. РТД з потенційною ямою  $45\text{\AA}$  та бар'єром  $11\text{\AA}$  (самоузгоджене моделювання) з розсіюванням  $6 \times 10^{16} \text{ 1/c}$  та паразитним опором.

### 3.3 Результати моделювання і обговорення

Виконавши моделювання, ми отримали модельні ВАХ РТД. Помітно, що більш точним є самоузгоджене моделювання. Струм піку в несамоузгодженому моделюванні приблизно в 2-3 рази менший, ніж в експериментальних даних.

При самоузгодженому моделюванні модель демонструє більшу точність, оскільки вдалося отримати незначне відхилення струму піка ВАХ. Напруга піку співпала так само, як і в несамоузгодженому моделюванні.

Струм долини не співпадає в обох методах моделювання. В теоретичному моделюванні ми моделювали лише прямі частини ВАХ, оскільки при моделюванні зворотніх частин можна отримати аналогічні результати з урахуванням підбору всіх коефіцієнтів.

Лише для першого графіку вдалося отримати добре узгодження експериментальних даних та результатів моделювання (рис. 3.26). Для решти моделей навіть за умови врахування всіх факторів (розсіювання в ямі, ефективне зменшення ширини бар'єрів, врахування паразитних опорів, самоузгодження заряду та потенціалу) не вдалося отримати задовільного узгодження експериментальних та модельних даних. Це можна пояснити специфікою паразитного опору даних діодів. Скоріше за все, причина полягає в наявності нелінійного опору (вірогідно, зворотнього зміщеного р-n переходу чи бар'єру Шотткі) за умови прикладання додатної напруги. Цю тезу підтверджують зворотні вітки ВАХ трьох досліджуваних РТД (рис. 3.2-3.4), у яких напруга піку приблизно в 2 рази нижча за аналогічну величину прямої гілки ВАХ. Однак, в роботі [8] нічого про це не сказано, тому ми вважали, що паразитні опори лінійні. Як виявилось, це не так. І на графіках рис. 3.27, 3.28 спостерігаємо великий гістерезис, що набагато більший, ніж для будь-яких до цього часу відомих експериментальних даних.

## ВИСНОВКИ

В даній дипломній роботі проведено системний аналіз впливу різноманітних факторів на адекватність моделей резонансно-тунельних діодів з прямокутною потенціальною ямою.

Унікальність роботи полягає в тому, що такого системного аналізу не проводилось до сьогоднішнього часу. Проводились одиничні аналізи окремих резонансно-тунельних діодів. А ми розглядаємо одразу декілька моделей РТД і визначаємо закономірний вплив різноманітних факторів таких, як: несамоузгодженість та самоузгодженість заряду та потенціалу в РТД, зміна ширини бар'єрів довкола потенціальної ями, вплив розсіювання в потенціальній ямі, залежність РТД від паразитних опорів.

В результаті проведеної роботи було встановлено, що в самоузгодженій моделі РТД напруга піку більша, ніж в не самоузгодженій. Також в самоузгоджених моделях РТД струм піку в декілька разів більший, ніж в несамоузгоджених.

Зі зменшенням ширини бар'єрів в РТД зростає струм піку за рахунок легшого проходження електронів. При самоузгодженому моделюванні майже вдалося досягти експериментальних значень струму піка при меншому звуженні бар'єрів порівняно з несамоузгодженим моделюванням.

За допомогою розсіювання вдалося підвищити струм долини ВАХ РТД.

За допомогою збільшення паразитного опору вдалося досягти бажаних результатів напруги піку як при несамоузгодженому так і при самоузгодженому моделюванні.

Але при досягненні кінцевих результатів моделювання на графіках ВАХ виник великий гістерезис. Лише для однієї моделі вдалося досягти бажаних результатів. Гістерезис, зумовлено тим, що не була врахована специфіка паразитних опорів діодів. Скоріше за все, причина полягає в наявності нелінійного опору (вірогідно, зворотнозмщеного р-п переходу чи бар'єру Шотткі) за умови прикладання додатної напруги. Цю тезу підтверджують зворотні вітки ВАХ

досліджуваних РТД, у яких напруга піку приблизно в 2 рази нижча за аналогічну величину прямої гілки ВАХ. Однак, в роботі [8] нічого про це не сказано, тому ми вважали, що паразитні опори лінійні.

Не зважаючи на велику кількість негативних результатів, виконана робота є хорошим початком для подальшого розвитку методик верифікації РТД. Знаючи закономірність впливу різноманітних факторів на роботу РТД можливо рухатись далі в його дослідженнях.

## СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Sun J.P. et. al. Resonant tunneling diodes: models and properties // Proceedings of IEEE. – 1998. – Vol. 86. – P. 641–661.
2. Frensley W. R. Boundary conditions for open quantum systems driven far from equilibrium // Rev. Mod. Phys. – 1990. – Vol. 62. – P. 745–791.
3. Ferry D. K., Grubin H. L. Modeling of quantum transport in semiconductor devices // Solid State Physics, Advances in Research and Application. – 1955. – Vol. 49. – P. 283–448.
4. Brown E. R., Soderstrom J. R., Parker C. D., Mahoney L. J., Molvar K. M., McGill T. C. // Oscillation up to 712 GHz in InAs/AlSb resonant tunneling diodes // Appl. Phys. Lett. – 1991. – Vol. 58. – P. 2291–2293.
5. Haddad G. I., Reddy U. K., Sun J. P., Mains R. K. The bound-state resonant tunneling transistor (BSRTT): fabrication, d.c. I–V characteristics, and high-frequency properties // Superlattices and Microstructures. – 1990. – Vol. 7. – P. 369–374.
6. Yokoyama N. et. al. Resonant-tunneling transistors using InGaAs-based materials // Proc. SPIE. – 1988. – Vol. 943. – P. 14–21.
7. Драгунов В.П., Неизвестный В.П., Гридчин В.А. Основы нанoeлектроники / Новосибирск: НТГУ, 2000. – 6–8 с.
8. Tsu R. and Esaki L. Tunneling in a finite superlattice // Appl. Phys. Letters. – 1973. – Vol. 22, P. 562–564.
9. Абрамов И.И. Проблемы и принципы физики и моделирование приборных структур микро- и нанoeлектроники. V. Резонансно-туннельные структуры // Нано- и микросистемная техника. – 2007. – №3. С. 57-70.
10. Абрамов И.И. Проблемы и принципы физики и моделирование приборных структур микро- и нанoeлектроники. II. Модели полуклассического подхода // Нано- и микросистемная техника. – 2006. – №9. С. 26-36.

11. Борисенко В.Е., Ворольева А.И. Нанoeлектроника: учеб. пособ. Нанотехнология / Мн: БГУИР, 2003. – 3-10 с. – ISBN 985-444-493-7 (ч. 2).
12. Электронный архив под инициативой Федерального Министерства Освiти та Дослiджень Германiї. Режим доступу до ресурсу: [http://www.nanotruck.de/fileadmin/nanoTruck/redaktion/download/Nanoelectronics\\_Roadmap\\_EU.pdf](http://www.nanotruck.de/fileadmin/nanoTruck/redaktion/download/Nanoelectronics_Roadmap_EU.pdf)
13. Гусев А.И. Наноматериалы, наноструктуры, нанотехнологии. / М.: ФИЗМАТЛИТ, 2005. – 416 с. – ISBN 5-9221-0582-5.
14. Боцула О.В., Прохоров Э.Д., Безмаль И.П. Резонансно-туннельные диоды на основе нитридов  $\text{AlN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ,  $\text{GaN}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  // Радиофизика и электроника – 2008. – Т. 13, № 3. – 518–522 с.
15. Борисенко В.Е. Нанoeлектроника: учеб. пособ. Перенос носителей в низкоразмерных структурах / Мн: БГУИР, 2003. – 76 с. – ISBN 985-444-721-9 (ч. 3).
16. Diamond S.K. et. al. Fabrication of 200-GHz  $f_{\text{max}}$  Resonant-Tunneling Diodes for Integrated Circuit and Microwave Applications // IEEE Electron device letters. – 1989. – Vol. 10, No. 3. – P. 104–106.
17. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика (нерелятивистская теория). – М.: Физматгиз, 1963. – 704 с.
18. Pinaud O. Transient simulation of resonant-tunneling diode // J. Appl. Phys. – 2002. – Vol. 92, No. 4. – P. 1987–1994.
19. Tsu R. Superlattice to nanoelectronics // London: Elsevier, 2005. – 325 P.
20. Абрамов И.И., Гончаренко И.А. Численная комбинированная модель резонансно-туннельного диода // Электромагнитные волны и электронные системы. - 2002. - №7. - С. 54-60.
21. J.P. Sun, G.I. Haddad. VLSI Design, 3, 1 (1997).
22. Y. Zohta, T. Tanamoto. J. Appl. Phys., 74(11), 6996 (1993).
23. И.И. Абрамов, И.А. Гончаренко. Изв. Белорус. инж. акад., № 2(14)/2, 170 (2002).



24. И.И. Абрамов, И.А. Гончаренко. Изв. Белорус. инж. акад., № 2(14)/2, 170 (2002).