

УДК 621.382.323

А.В. Федяй, И.С. Тисный

## Моделирование резонансно-туннельного диода методом функций Эйри

Предложена новая конструкция резонансно-туннельного диода (РТД), в котором потенциальная яма создается за счет линейной варизонности полупроводника, образующего активную область устройства. Показано наличие отрицательной дифференциальной проводимости для  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  РТД. Расчет коэффициента пропускания и ВАХ РТД проводился с использованием метода функций Эйри.

A new design of the resonant-tunneling diode was suggested, in which potential well is originated by means of linear variation of bands of semiconductor forming the device active region. Occurrence of negative differential conductivity for  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  RTD was shown. The transmission coefficient and I-V characteristic were calculated using Airy functions method.

### Введение

Классическая структура РТД включает, обычно, слой относительно узкозонного GaAs (GaN), заключенного между слоями  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  ( $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ), которые вместе образуют так называемую «двухбарьерную квантовую систему» (ДБКС) [1]. В ДБКС при соответствующих геометрических размерах и высоте потенциальных барьеров в потенциальной яме может существовать один и более метастабильных уровней энергии, через которые может происходить резонансное туннелирование.

В данной работе предложена и рассчитана структура, в которой образование метастабильных уровней энергии обеспечивается соответствующим варьированием ширины запрещенной зоны полупроводников активной области устройства. Для расчета статических характеристик использован метод функций Эйри, ранее успешно применявшийся для моделирования двухбарьерных резонансно-туннельных диодов.

### 1. Объект моделирования

В качестве тестовой модельной структуры был выбран РТД, активная область которого и основные топологические параметры схематично изображена на рис. 1. Как обычно, активная область устройства не легирована ( $N_d = 0$ ), а так называемые резервуары (пассивная часть РТД)

сильно легирована примесью донорного типа ( $N_d = 10^{23} \text{ м}^{-3}$ ). Молярная доля  $x_m$  алюминия в соединении  $\text{Al}_{x_m}\text{Ga}_{1-x_m}\text{As}$  линейно уменьшается от границ между резервуарами и активной областью до центра активной области. Это приводит, в свою очередь, к линейному изменению ширины запрещенной зоны по эмпирическому закону  $\Delta E_{33}(x_m(x)) = (1.42 + 1.247x_m(x))$  [эВ] [2]. Изменение ширины запрещенной зоны определяет изменение положения дна зоны проводимости согласно эмпирической формуле  $\Delta E_{3\text{п}}(x) = 0.62(\Delta E_{33}(x) - \Delta E_{33\text{GaAs}})$ , где  $\Delta E_{33}$  – ширина запрещенной зоны AlGaAs, а  $\Delta E_{33\text{GaAs}}$  – ширина запрещенной зоны GaAs [2]. Таким образом, линейное изменение молярной массы  $x_m(x)$  в направлении электронного транспорта приводит к линейному изменению потенциального рельефа зоны проводимости.

Ширина активной области тестовой структуры составляет 12 нм, причем в ее центре  $x_m = 0$ , а на краях –  $x_m = 1$ .

Напряжение  $V$  прикладывается так, как показано на рис. 1. Предполагается, что падение напряжения происходит только в активной области, так как ее сопротивление значительно превосходит сопротивление сильно легированных пассивных областей.

### 2. Нахождение коэффициента прохождения активной области

Уравнение Шредингера в приближении эффективной массы на  $i$ -м участке РТД может быть записано в виде:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m^*}{\hbar^2}(E + U(x) - eV(x))\psi(x) = 0, \quad (1)$$

где  $\psi(x)$  – волновая функция электрона,  $m^*$  – его эффективная масса,  $\hbar$  – постоянная Планка-Дирака,  $U(x)$  – потенциальный рельеф зоны проводимости при нулевом приложенном напряжении,  $e$  – заряд электрона,  $V(x)$  – разность потенциалов между левым краем активной области и точкой  $x$ .

Если сила, действующая на электрон, равна нулю, что выполняется на первом и последнем участке структуры, решением уравнения Шре-

дингера является комбинация плоских волн, соответствующих падающим и отраженным

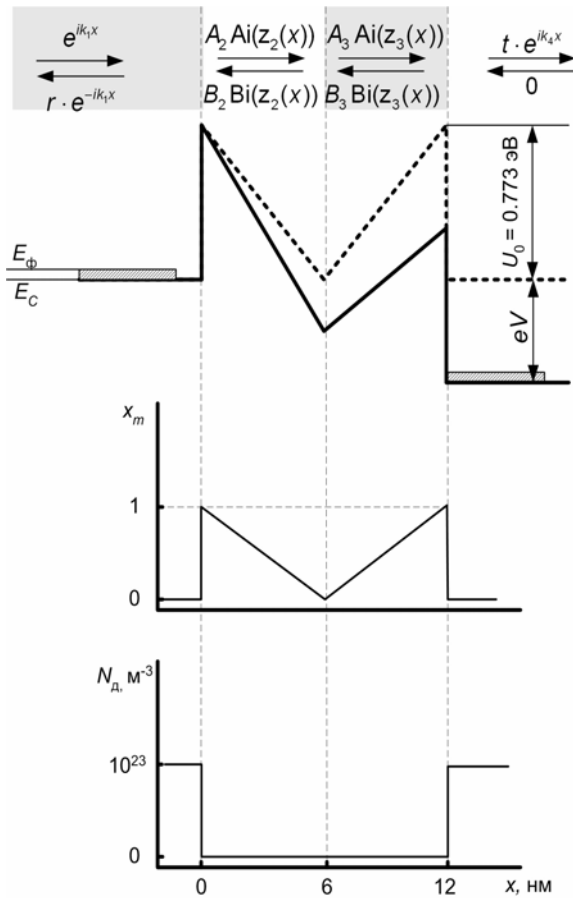


Рис. 1. Физико-топологическая структура исследуемого РТД

волнам. При нахождение коэффициента прозрачности структуры естественно пронормировать  $\psi(x)$  так, чтобы в левом резервуаре коэффициент при падающей плоской волне был равен единице, а также предположить отсутствие отраженной волны в правом резервуаре. Тогда, если обозначить коэффициент при отраженной волне в левом резервуаре через  $r$ , а коэффициент при падающей волне в правом резервуаре через  $t$ , то квадраты модулей этих величин будут иметь смысл соответственно коэффициентов отражения и пропускания активной области РТД.

При ненулевом слагаемом  $U(x) - eV(x)$  в (1), что наблюдается для второй и третьей области, решением уравнения Шредингера на этих участках будет линейная комбинация функции Эйри  $Ai(\xi)$  и комплиментарной функции Эйри  $Bi(\xi)$  [3]. Это объясняется тем, что указанное слагаемое является линейной функцией от координаты. Аргументами функций Эйри будут безразмерные переменные, которые для второго и третьего участка принимают вид:

$$\xi_2(x) = - \left( x + \frac{U_0 - E}{\frac{eV}{2} + U_0} a \right) \left( \frac{2m^*}{a\hbar^2} \right)^{1/3} \left( \frac{eV}{2} + U_0 \right)^{1/3},$$

$$\xi_3(x) = - \left( x + \frac{U_0 + E}{\frac{eV}{2} - U_0} a \right) \left( \frac{2m^*}{a\hbar^2} \right)^{1/3} \left( \frac{eV}{2} - U_0 \right)^{1/3},$$

где  $a$  – половина длины активной области.

Нахождение коэффициента прозрачности активной области проводится с использованием матриц передачи. Они, как обычно, являются одной из форм записи общих требований к волновой функции, предъявляемой к ней на границах  $i$ -го и  $i+1$ -го участков:

$\psi_i(x_{i,i+1}) = \psi_{i+1}(x_{i,i+1})$  – непрерывность волновой функции,

$$\frac{1}{m_i^*} \frac{d\psi_i(x_{i,i+1})}{dx} = \frac{1}{m_{i+1}^*} \frac{d\psi_{i+1}(x_{i,i+1})}{dx} \quad \text{– непрерывность первой производной.}$$

Здесь через  $x_{i,i+1}$  обозначены координаты границы между участками  $i$  и  $i+1$ .

В работе были найдены следующие выражение для матриц передачи  $T_{1,2}$ ,  $T_{2,3}$  и  $T_{3,4}$ , которые мы пронумеровали по участкам, которые они связывают.

Например, матрица  $T_{2,3}$  была приведена к следующему виду:

$$T_{2,3} = \pi \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{bmatrix},$$

где

$$T_{11} = Ai(\xi_2)Bi'(\xi_3) - \frac{\xi_2'}{\xi_3'} Bi(\xi_3)Ai'(\xi_2),$$

$$T_{12} = Bi(\xi_2)Bi'(\xi_3) - \frac{\xi_2'}{\xi_3'} Bi(\xi_3)Bi'(\xi_2),$$

$$T_{21} = \frac{\xi_2'}{\xi_3'} Ai(\xi_3)Ai'(\xi_2) - Ai(\xi_2)Ai'(\xi_3),$$

$$T_{22} = \frac{\xi_2'}{\xi_3'} Ai(\xi_3)Bi'(\xi_2) - Bi(\xi_2)Ai'(\xi_3),$$

где через  $\xi_2$  и  $\xi_3$  обозначены значения соответствующих функций в точке  $a$ .  $Ai'$  и  $Bi'$  означает только дифференцирование по  $\xi_1$  или  $\xi_2$ , а  $\xi_2'$  и  $\xi_3'$  – дифференцирование соответствующих функций по  $x$ .

Матрица

$$\mathbf{M} \equiv \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{bmatrix} = \mathbf{T}_{3,4} \mathbf{T}_{2,3} \mathbf{T}_{1,2}$$

представляет собой результирующую матрицу передачи активной области РТД. Зная ее, легко получить коэффициент прозрачности

$$D = t^* t, \quad (2)$$

где  $t = M_{11} - M_{12}M_{21} / M_{22}$ .

### 3. Результаты моделирования

Плотность тока, протекающего через РТД, рассчитывался с использованием формулы Тсу-Эсаки [4]:

$$J(V) = \frac{4\pi e k_B m^* T}{h^3} \int D(E_x) dE_x \ln \left( \frac{e^{-\frac{E_x - E_\Phi}{k_B T}} + 1}{e^{-\frac{E_x - E_\Phi + eV}{k_B T}} + 1} \right), \quad (3)$$

где  $k_B$  – постоянная Больцмана. Коэффициент прохождения  $D$  находят согласно (2). Нижний предел интегрирования в (3) принимался равным нулю (дно зоны проводимости). Верхний предел, как было показано в процессе расчетов, можно брать не более 1 эВ, так как повышение верхнего предела практически не влияет на точность вычисления интеграла.

Если вычисление коэффициента прозрачности при различных значениях продольной энергии электрона не вызывает затруднения (метод функций Эйри для такого потенциального рельефа дна зоны проводимости является устойчивым), то при вычисления интеграла в (3) пришлось использовать численный метод, аппроксимирующий интеграл с помощью квадратуры Симпсона с адаптивным шагом.

Результаты моделирования коэффициента прозрачности активной области РТД, а также его ВАХ приведены, соответственно, на рис. 2 и 3.

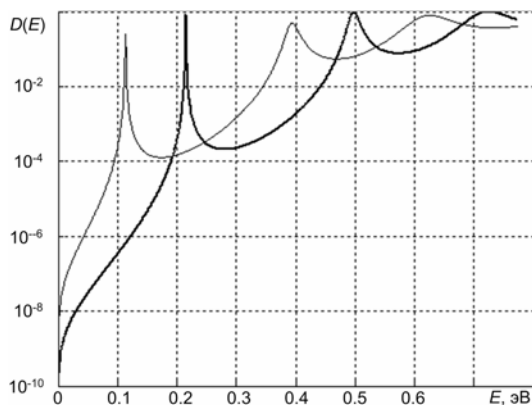


Рис. 2. Зависимость коэффициента прозрачности  $D$  от продольной энергии электрона  $E$  для нулевого (толстая линия) напряжения, и напряжения  $V=0.2$  В

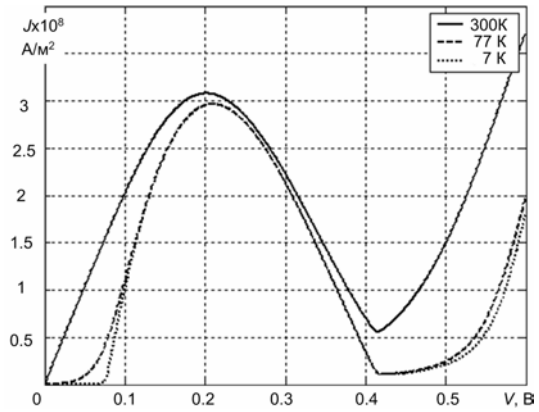


Рис. 3. ВАХ РТД для различных температур

### Выводы

В работе предложена топология РТД, активная область которого выполнена из варизонного полупроводника. Были рассчитаны коэффициенты прозрачности такой структуры и ее ВАХ. Для расчетов применен метод функций Эйри. Функции Эйри являются точными решением уравнения Шредингера для электрона в поле постоянной напряженности, поэтому для коэффициента прозрачности удалось найти аналитическое выражение. Обнаружено наличие отрицательной дифференциальной проводимости, а также высокие значения контрастности ВАХ, которые достигают значения 6 и более.

### Литература

1. Sun J.P. et al. Resonant tunneling diodes: models and properties // Proceedings of IEEE. – 1998. – Vol. 86. – P. 641–661.
2. Brenan K.F., Brown A.S. Theory of modern electronic semiconductor devices. – New York: J. Wiley & Sons, 2002. – 448 p.
3. Vallee O., Soares M. Airy functions and application to physics. – London: Imperial College Press, 2004. – 194 p.
4. Tsu R. Superlattice to nanoelectronics. – London: Elsevier, 2005. – 325 p.