



приложение для имитационного моделирования
поперечного электронного транспорта в
наноразмерных полупроводниковых
гетероструктурах

ИНСТРУКЦИЯ ПОЛЬЗОВАТЕЛЯ

Авторы приложения:

(в алфавитном порядке)

mosk@phbme.ntu-kpi.ua

Москалюк Владимир Александрович,
проф. кафедры ФБМЭ ФЭЛ
соавтор теории

artem.fedyay@gmail.com

Федяй Артем Васильевич,
ассистент кафедры ФБМЭ ФЭЛ КПИ
соавтор теории, разработчик численных
алгоритмов, автор идеи графического
интерфейса пользователя

magadano4ka@mail.ru

Ярошенко Ольга Юрьевна,
талантливая студентка кафедры ФБМЭ ФЭЛ КПИ
разработчик графического интерфейса
пользователя

Составитель инструкции:

Федяй Артем Васильевич

Содержание

1. Краткие теоретические сведения.....	3
• Что можно моделировать	
• Формализм	
• Квантовая область	
2. Структура меню.....	9
• Ввод данных	
• База данных материалов	
• Результаты моделирования	
• Сохранение данных	
3. Open source.....	12
• Недостатки текущей версии	
• ! Ограничения	
Литература.....	13

1. Краткие теоретические сведения

- Что можно моделировать (1.1)
- Формализм (1.2)
- Квантовая область (1.3)
- Классическая область (1.4)
- Расчет тока (1.5)

1.1 → Что можно моделировать при помощи QuanT?

Коротко:

Полупроводниковые гетероструктуры с поперечным электронным транспортом

Подробно:

Применимость QuanT ограничивается областью структур, для которых справедливо следующее:

Материальная основа – полупроводниковые материалы

Все слои выращены параллельно; напряжение прикладывается так, что ток протекает вдоль направления роста гетероструктура

Площадь мезаструктуры велика настолько, что краевыми эффектами можно пренебречь. Это требование связано с тем, что модель *квазиодномерна*.

Все релевантные электронные процессы по всей длине устройства происходят лишь в *зоне проводимости*. Этому требованию удовлетворяют гетеропереходы типа I и типа II¹

В устройстве должны четко выделяться и следовать одна за другой три области:

- левый «резервуар»,
- «квантовая» область,
- правый «резервуар».

«Резервуары» – это массивные высоколегированные области с концентрацией носителей обычно не ниже 10^{22} м^{-3} . «Массивность» означает, что электронный газ в них можно считать трехмерным (нет локализации ни в одном пространственном направлении). Обычно размер резервуаров составляет не менее 500 \AA .

«Квантовая» область – это чередующиеся слои из различных материалов, обычно нелегированных. Если в квантовой области встречаются сильнолегированные области, то не все их свойства могут быть адекватно учтены. Например, модель оказывается несостоятельной предсказать образование периодического потенциала в т.н. «легированных» сверхрешетках.

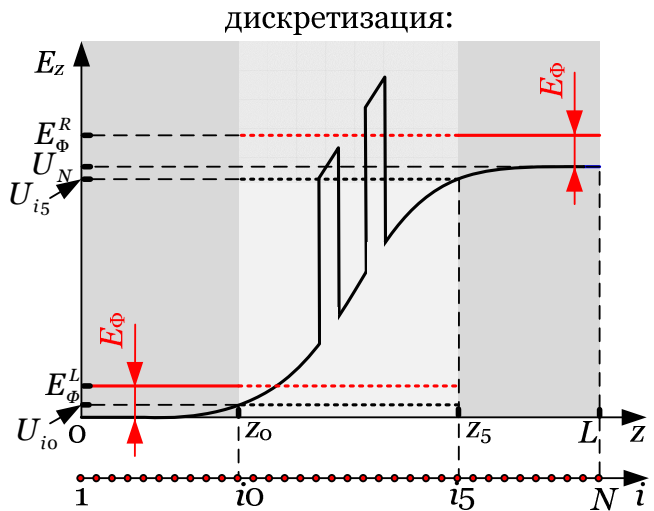
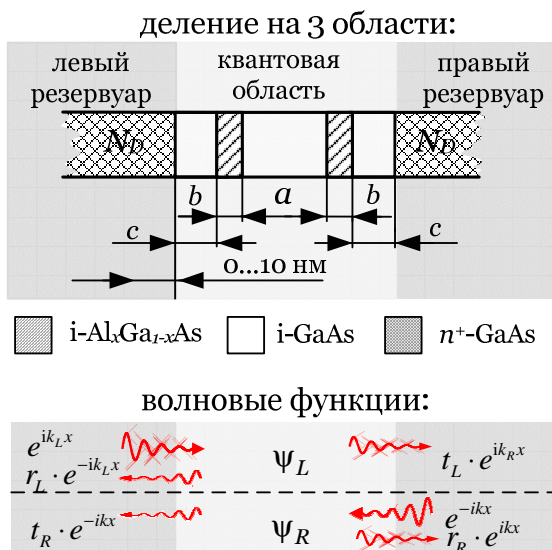
Пример структуры, которая подходит для моделирования, и схема ее деления на различные области показаны на рис. 1.1

¹ К гетеропереходам типа I относятся переходы между парами:

GaAs-AlGaAs; GaSb-AlSb; GaAs-GaP; InGaAs-InAlAs; InGaAs-InP.

II тип гетеропереходов включает переходы:

InP-Al_{0.48}In_{0.52}As; InP-InSb; BeTe-ZnSe; GaInP-GaAsP; Si-SiGe.



а)

б)

рис. 1.1. Структуры, пригодные для моделирования при помощи QuanT:

а) пример деления на три области всей модельной структуры (в данном случае это резонансно-туннельный диод) и волновые функции электронов, налетающих на квантовую систему слева и справа;

б) графическая иллюстрация использованных в тексте обозначений (изображена зонная диаграмма РТД для некоторого отрицательного напряжения смещения).

1.2 → Формализм

Коротко:

Формализм волновых функций² (огibaющих волновых функций)

Подробно:

Модель можно классифицировать как «комбинированную», поскольку в «резервуарах» используется представление об электронном газе как о равновесном трехмерном коллективе, состоящем из квазиклассических частиц, а в квантовой области фактически рассматривается движение индивидуального электрона в поле остовов и всех остальных электронов и внешнего поля.

Иногда такие модели называют «динамическими», чтобы подчеркнуть факт, что кинетика коллектива не учтена на столь фундаментальном теоретическом уровне, как это можно сделать в традиционной электронике с помощью кинетического уравнения Больцмана.

Для электронного коллектива в резервуарах принято предположение о том, что он находится в термодинамическом равновесии каждый со своим резервуаром. Иногда говорят [сленг], что электронный коллектив в каждом из резервуаров находится в равновесии каждый со своим уровнем Ферми. Уровни Ферми

² Кроме метода волновых функций выделяют следующие «квантовомеханические» формализмы (методы) моделирования гетероструктур с поперечным транспортом: метод функций Вигнера (*Wigner function method*), формализм неравновесных функций Грина (*Green's function formalism*). Они претендуют на роль кинетического уравнения Больцмана в случае, когда оно неприменимо из-за невозможности учета квантовых эффектов в рамках полуклассического подхода

определяются концентрацией носителей заряда в резервуарах и приложенным напряжением.

Напротив, электронный коллектив в квантовой области предполагается в общем случае неравновесным. К нему неприменим метод кинетического уравнения Больцмана из-за того, что электроны нельзя уже считать не то что классическими, но даже квазиклассическими частицами, которым приписывается эффективная масса и функция распределения Ферми-Дирака (как это было для приборов традиционной электроники).

1.3 → Квантовая область

Коротко:

Распределение электронов в квантовой области определяется распределением электронов, которые эмитируют туда из левого и правого резервуара, а также индивидуальным поведением каждого электрона в поле кристаллической решетки и всех остальных электронов с учетом волновых свойств электронов в приближении Хартри (самосогласованного поля)

Подробно:

Движение индивидуального электрона в квантовой области описывается уравнением Шредингера для огибающей волновой функции (или уравнением Шредингера с эффективной массой – «*effective mass Schrödinger equation*» [сленг]). Считая, что электроны друг с другом почти не взаимодействуют (спин можно учесть эффективно), получают, пожалуй, главное *исходное предположение для дальнейшего развития модели*. Именно, считается, что концентрация электронов в квантовой области может быть найдена по формуле:

$$n = n_R + n_L, \quad (1.1)$$

где

$$n_{L(R)} = \int_{0(-\infty)}^{\infty(0)} |\psi_{L(R)}(E_z(k_z))|^2 dk_z \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} N(\mathbf{k}) dk_x dk_y. \quad (1.2)$$

Формула (1.1) имеет наглядное физическое толкование: электроны попадают в квантовую область с левого (правого) резервуара, в котором они подчиняются статистике с функцией распределения $N_{L(R)}$. В квантовой области электроны двигаются согласно законам квантовой механики, поэтому можно найти относительные вероятности нахождения электронов конкретной точке квантовой области. Эти вероятности находятся отдельно для электронов, пришедших с левого и правого «резервуара», ψ_L и ψ_R : хоть классическая область для них казалось бы одна и та же, однако граничные условия для электронов, налетающих слева и справа разные – см. рис. 1.1 (а). Такой способ постановки и решения уравнения Шредингера обычно называют «задача переноса». Элементарными «задачами переноса» есть задача о прохождении электрона через потенциальный барьер и проч.

Проникать в квантовую область могут лишь те электроны, которые двигаются по направлению к ней (это обеспечивают пределы в первых интегралах слагаемых формулы (1.1)).

Формула (1.2) допускает интегрирование по всем координатам кроме z (ось Oz – это направление роста гетероструктуры). После интегрирования (1.1) можно записать так:

$$n_{L(R)} = N'_c \int_{U_{io}(U_{i5})}^{\infty} \frac{|\psi_{L(R)}(E_z(k_z), z)|^2}{\sqrt{E_z - U_{io}(i5)}} \ln \left(1 + \exp \left(-\frac{E_z - (E_\Phi + U_{1(N)})}{k_B T} \right) \right) dE_z, \quad (1.3)$$

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

Обозначения, введенные в формуле (1.3), расшифрованы на рис. 1.1 (а) или очевидны.

1.4 → Классическая область

Коротко:

В левом и правом резервуарах электронный коллектив находится в локальном равновесии каждый со своим уровнем Ферми

Подробно:

Резервуары по-другому называются «классической областью», поскольку все квантовые свойства электрона в ней могут быть учтены в квазиклассическом приближении. Например, это может быть сделано в рамках метода кинетического уравнения Больцмана в приближении времени релаксации. В данной версии программы это сделано одним из простейших способов. Именно, электронный коллектив в левом и правом резервуаре считался равновесным, соответственно описывался функцией Ферми-Дирака с параметрами E_Φ^L и E_Φ^R . Физически это означает, что электроны, которые могут инжектироваться в левый (правый) резервуар из правого (левого) резервуара мгновенно термализуются. Это, конечно же, не полностью соответствует действительности: для этого необходимо в среднем преодолеть диффузионную длину, которая отличная от нуля. Тем не менее, такое предположение оправдано, когда концентрация электронов в резервуарах гораздо больше, чем в квантовой области, которая обычно нелегирована.

Формулы для нахождения концентрации в левом (правом) резервуаре с учетом принятых предположений:

$$n_{L(R)}(z) = 4\pi(2m^*/\hbar^2)^{3/2} \int_{U(z)}^{\infty} \frac{\sqrt{E - U(z)}}{1 + \exp\left(\frac{E - (E_\Phi + U_{1(N)})}{kT}\right)} dE. \quad (1.4)$$

1.5 → Ток через структуру

Коротко:

Рассчитывается по формуле Цу-Эсаки

Подробно:

Методика расчета тока через структуры с поперечным транспортом зиждется на формализме Ландауэра-Буттикера, которая учитывает преимущественно волновую природу электрона в отличие от теории Друде, которая полагает электроны частицами. Для расчета плотности тока, протекающего через моделируемую структуру, использована формула Цу-Эсаки с учетом «кинематического члена» $Coon$ и Liu , которая является частным случаем упомянутого формализма, когда имеются два электрода (резервуара). В данном случае она принимает вид:

$$J = \frac{2m^* e k_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3} \int_{\max(U_{i_5}, U_{i_0})}^{\infty} \frac{k_R}{k_L} |t_L(E_z)|^2 D(E_z) dE_z, \quad (1.5)$$

где

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

t_L – комплексный коэффициент прохождения электронных волн через квантовую область,

$k_{R(L)}$ – волновой вектор электрона в правом (левом) резервуаре.

1.5 → Нахождение самосогласованного потенциала

Коротко:

Самосогласованный потенциал находится из совместного решения уравнения Пуассона и (1.3) или (1.4).

Подробно:

Для нахождения самосогласованного потенциала решалась система из уравнения Пуассона:

$$\frac{d}{dz}\epsilon(z)\frac{dV_s}{dz} = \frac{e}{\epsilon_0}[n(z) - N^+(x)], \quad (1.6)$$

и уравнения (1.3) для $\forall z \in [z_0, z_5]$ ³ или (1.4) для $\forall z \in [0, z_0] \cup [z_5, L]$.

В (1.6) через N^+ обозначена концентрация ионизированных доноров. Найденный самосогласованный потенциал V_s связан с потенциальной энергией электрона U соотношением: $U(z) = E_c(z) + -eV_s(z)$.

³ для расшифровки обозначений см. рис. 1.1

2. Структура меню

- Ввод данных (2.1)
- База данных материалов (2.2)
- Общие установки (2.3)
- Результаты моделирования (2.4)
- Сохранение текущего проекта (2.5)

2.1. → Ввод данных

Запускать приложение можно через файл [PUSK.m](#) или сразу через [PUSK.fig](#). По желанию можно выбрать «Новый проект», «Предыдущий проект» или «Выбрать проект». Начинать работу лучше с «Нового проекта»; при этом слева появится меню, содержащее кнопки «Эмиттер» ... «Выход».

«Эмиттер» - это левый резервуар, «База» – правый резервуар (обозначения, которые упоминались в теоретическом разделе).

В меню «Эмиттер» - «Квантовая область» - «База» вводят:

Материал	система материалов, на котором построена гетероструктура (по умолчанию AlGaAs). Материал выбирается в меню « Выбор материала »
d, нм	ширина слоев в нм;
Молярная доля	определяет молярную долю x в тройных соединениях, например, $Al_xGa_{1-x}As$. Таким образом, значение $x = 1$ соответствует AlAs, $x = 0$ соответствует GaAs;
n, 10^{16} см^{-3}	концентрация ионизированных атомов примеси.

2.2. → База данных материалов

В описанных выше меню имеется возможность создавать собственную систему тройных соединений при помощи кнопки «**Создать материал**». Для этого необходимо в открывшемся меню «**Таблица данных материалов**» ввести:

Материал	название материала,
m_{00}, k_m	параметры зависимости $m(x) = m_{00} + k_m \cdot x$, которые определяют эффективную массу при различных молярных долях первого и второго элемента в тройных соединениях. Например, в GaAs $x = 0$ и, соответственно, $m(0) = m_{00}$.
U_{00}, k_U	параметры зависимости $U(x) = U_{00} + k_U \cdot x$, которая определяет потенциальную энергию электрона в поле кристаллической решетки при различных x в $Al_xGa_{1-x}As$ (обычно называется «потенциальным рельефом»). Для материала AlGaAs $U_{00} = 0$, так что $U(0) = 0$.
$\epsilon_{p00}, k_\epsilon$	параметры зависимости $\epsilon(x) = \epsilon_{00} + k_\epsilon \cdot x$, которая определяет диэлектрическую проницаемость соединений $Al_xGa_{1-x}As$.

Во всех упомянутых меню имеется возможность копировать несколько строчек указанное количество раз «**Копировать N строк M раз**». Чтобы вставить заданное количество строк, необходимо нажать кнопку «**Вставить**».

2.3. → Общие установки

Для того, чтобы определить параметры работы приложения, нажмите кнопку «**Общие установки**» левого меню. Появившееся меню позволяет контролировать следующие параметры:

1. Режим моделирования. Если поставить галочку напротив слова «**Самосогласование**», приложение будет учитывать пространственный заряд, как описано выше (см. раздел 1.5). Иначе все напряжение будет падать равномерно на квантовой области. Если выбран режим самосогласования, необходимо ввести «**Максимум итераций**» - максимальное количество итераций процедуры самосогласования, а также относительная точность при которой самосогласование считается достигнутым «**Погрешность, %**».
2. Для получения ВАХ в заданных пределах и с желаемым количеством точек по напряжению используйте «**Диапазон изменения напряжений**» и «**Количество точек**».
3. Для определения дискретной пространственной сетки, которая используется в численных алгоритмах, установите «**Количество точек кристаллической решетки**».
4. Температуру кристаллической решетки можно менять, задавая соответствующее значение в меню «**Температура**».
5. В меню «**Интеграл концентрации**» с помощью введения соответствующих значений в «**Наименьший верхний предел**» и «**Абсолютная погрешность**» устанавливаются параметры вычисления интеграла концентрации (1.1) и (1.4).
6. Погрешность вычисления тока по формуле Цу-Эсаки (1.5) задается в меню «**Интеграл тока**».
7. Графики «**Функция распределения**», «**Локальная плотность состояний**» и «**Коэффициент передачи**» выводятся только если поставить напротив них «галочки». Являясь функциями энергии, эти зависимости могут использовать либо равномерную сетку по энергии, либо же брать точки, в которых оценивался интеграл тока (это релевантные точки, их кучность больше там, где больше плотность состояний). Эти режимы задаются в меню «**Энергия**».

2.4. → Результаты моделирования

По умолчанию выводятся графики:

<i>Название</i>	<i>Смысл</i>
Потенциал	потенциальная энергия электрона
Концентрация	концентрация электронов в устройстве и концентрация ионизированных атомов примеси
ВАХ	вольтамперная характеристика

Опционными являются графики:

<i>Название</i>	<i>Смысл</i>
Коэффициент передачи	вероятность прохождения электронами квантовой системы для различных значений поперечных энергий электрона
Плотность состояний	плотность электронных состояний (ее логарифм)
Распределение	полная функция распределения электронов (ее логарифм)

Графики потенциала, концентрации и коэффициента передачи выводятся два раза: слева – для всех значений напряжения, справа – лишь для выбранного.

Для всех графиков кроме ВАХ снизу имеются уменьшенные копии графиков для соседних значений напряжения.

Для редактирования, копирования и сохранения графиков воспользуйтесь опцией **«Вывести в нов. окне»**.

Для трехмерных графиков возможен режим вывода в «2D» (по умолчанию) или «3D». Кроме того, доступны все существующие цветовые схемы (цвета кодируют значения соответствующих функций при данной энергии в данной точке).

2.5. → Сохранение текущего проекта

Результаты моделирования хранятся в папке [Save](#). Чтобы сохранить текущий проект используйте кнопку **«Сохранить»** в верхнем меню. По имени файла можно затем загрузить данный проект из стартового меню, нажав кнопку **«Выбрать проект»**.

Кроме того, данные для графиков хранятся в папке [Menusky\Save\Autosaving\GRAF](#). Они не могут быть очищены автоматически, поэтому при копировании приложения сохраненные графики следует удалить вручную, поскольку данные для трехмерных могут занимать до 100 Мб памяти.

4. Open source

- Недостатки текущей версии (4.1)
- ! Ограничения (4.2)

4.1 → Недостатки текущей версии

1. Не учитывается рассеивание в квантовой яме.
2. Не учитывается отличие закона дисперсии электрона в Γ -долине от параболического.
3. В главном меню не работают изменения «**Интеграла концентрации**»; не осуществляется выбор энергии из «квадратуры», то есть из точек, в котором оценивалась подынтегральная функция тока (работает с ошибкой: не запускать).
4. В численных алгоритмах использованы неконсервативные схемы, что снижает точность расчетов и требует большего количества пространственных точек для достижения требуемой точности.
5. Не учитывается ближайшая высшая долина, которая при значении молярной доли $x > 0.33$ в $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ оказывает существенное влияние на протекание тока через квантовую структуру за счет перемешивания Γ и X -состояний на гетероинтерфейсах.
6. Не учитывается перенос заряда через эмиттерную яму, который ответственен, к примеру, за области «плато» на ВАХ РТД (если моделируется резонансно-туннельный диод).
7. Не учитывается реальная форма потенциальных барьеров, которая обычно отличается от скачкообразной; это эффективно сужает барьеры.
8. В резервуарах слишком упрощенно рассчитывается кинетика электронного газа. Необходимо решать кинетическое уравнение Больцмана, чтобы повысить адекватность нахождения самосогласованного потенциала в «классической» области.
9. Не учитывается инжекция носителей зарядов из левого резервуара в правый (это значит, что мы полагаем, что диффузионная длина носителей заряда из левого (правого) резервуара в правом (левом) резервуаре равна нулю: мгновенная термализация). Этот недостаток тесно связан с п.8, от них следует избавляться одновременно.

Недостатки 1,4,5,6 уже устранены, и будут внесены в следующую до сентября 2011. Недостаток интерфейса пользователя 3 также будет учтен в новой версии. Недостатки 2,7,8,9 планируется устранить теоретически до августа 2011 и программно до сентября 2011.

4.1 → ! Ограничения

! Ни в коем случае не заставляйте выводить опционные графики (плотность состояний, функцию распределения и коэффициент передачи), если количество точек по напряжению больше 10-20. Это может вызвать переполнение максимально выделяемой памяти в Matlab за счет того, что массивы соответствующих величин занимают много физической памяти.

Литература

! При использовании результатов моделирования при помощи Quant, пожалуйста, ссылайтесь на статью:

Москалюк В.О., Федяй А.В., Ярошенко О.Ю. Прикладна програма для моделювання переносу заряду в квантоворозмірних гетероструктурах з графічним інтерфейсом користувача // Н.-техн. журнал «Електроніка і зв'язь», тематический выпуск «Електроніка і нанотехнології». 2011, №1. С. 48-53.

* * *

Детальную информацию о теоретическом подходе, численных методах, использованных при разработке программы, пожалуйста, ищите здесь:

1. *Абрамов И.И., Гончаренко И.А.* Численная комбинированная модель резонансно-туннельного диода // Физика и техника полупроводников. - 2005. – Вып. 39. - С. 1138-1145.
2. *R. Lake and S. Datta.* Nonequilibrium “Green’s function method applied to double barrier resonant tunneling diodes”, Phys. Review B, vol. 45, pp. 6670-6685, 1992.
3. *K.L. Jensen and F.A. Buot.* “Effects of spacer layers on the Wigner function simulation of resonant tunneling diodes”, J. Appl. Phys., vol. 65, pp. 5248-8061, 1989.
4. *R. Tsu and L. Esaki.* “Tunneling in a finite superlattice”, Appl. Phys. Letters, vol. 22, pp. 562-564, 1973.
5. *Sun J.P Mains R.K., Haddad G.I.* “Resonant tunneling diodes: models and properties”, Proc. of IEEE, vol. 86, pp. 641-661, 1998.
6. Пакет для моделювання поперечного транспорту в наноструктурах WinGreen <http://www.fz-juelich.de/ibn/mbe/software.html>
7. *Moskaliuk V., Timofeev V., Fedyay A.* Simulation of transverse electron transport in resonant tunneling diode // Abstracts Proceedings of 33rd International Spring Seminar on Electronics Technology “ISSE 2010”. – ISBN 978-1-4244-7849-1.
8. *Нгуен Ван Хьюеу.* Основы метода вторичного квантования. – М.: Энергоатомиздат, 1984. – 208 с.
9. *Liu H.C.* Resonant tunneling through single layer heterostructure // Appl. Phys. Letters – 1987. – Vol. 51, No. 13. – P. 1019-1021.
10. *Sun J.P., Mains R.K., Yang K., Haddad G.I.* A self-consistent model of Γ -X mixing in GaAs/AlAs/GaAs quantum well using quantum transmitting boundary method // J. Appl. Phys. – 1993. – Vol. 74, No. 8. – P. 5053-5060.
11. *Васько Ф.Т.* Электронные состояния и оптические переходы в полупроводниковых гетероструктурах. – К.: Наукова Думка, 1993. – 181 с.
12. *Zohta Y., Tanamoto T.* Improved optical model for resonant tunneling diode // J.. Appl. Phys. – 1993. – Vol. 74, No. 11. – P. 6996-6998.
13. *Sun J.P. Haddad G.I.* Self-consistent scattering calculation of Resonant Tunneling Diode Characteristics // VLSI design. – 1998. – Vol. 6, P. 83-86.
14. *Lent C. S. and Kirkner D. J.* The quantum transmitting boundary method // Journal of Applied Physics. - 1990. - Vol. 67. - P. 6353-6359.
15. *Mizuta H., Tanoue T.* The physics and application of resonant tunnelling diode. – Cambridge University Press, 1993. – 245 с.
16. *Abramov I.I.; Goncharenko I.A.; Kolomejtseva N.V.; Shilov A.A.* RTD Investigations using Two-Band Models of Wave Function Formalism // Microwave & Telecommunication Technolog, CriMiCo 2007. 17th International Crimean Conference (10-14 Sept. 2007), 2007.–P.: 589-590.
17. *Самарский А.А.* Введение в теорию разностных схем. – М.: «Наука», 1971. – 553 с.
18. *Хокни Р., Иствуд Дж.* Численное моделирование методом частиц; Пер. с англ. – М.: Мир, 1987. – 640 с.
19. *Pinaud O.* Transient simulation of resonant-tunneling diode // J. Appl. Phys. – 2002. – Vol. 92, No. 4. – P. 1987-1994.