

# Комбинированная модель резонансно-туннельного диода

© И.И. Абрамов<sup>†</sup>, И.А. Гончаренко, Н.В. Коломейцева

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,  
220013 Минск, Белоруссия

(Получена 21 декабря 2004 г. Принята к печати 21 января 2005 г.)

Предложена комбинированная модель резонансно-туннельного диода, основанная на полуклассическом и квантово-механическом (формализм волновых функций) подходах. В ней учтены, кроме ряда факторов, важные свойства гетерограниц прибора, в частности форма разрыва зон и поверхностный заряд. Показано, что с помощью модели может быть получено удовлетворительное согласование с экспериментом при расчете вольт-амперных характеристик диода. При этом пиковые напряжения определяются с хорошей точностью только при учете сопротивлений протяженных пассивных областей и поверхностного заряда на гетерограницах.

## 1. Введение

Резонансно-туннельный диод (РТД) — один из наиболее перспективных приборов твердотельной нанoeлектроники [1]. Так, в настоящее время на их основе разрабатываются аналоговые, цифровые и аналогово-цифровые интегральные схемы различного назначения [2]. Некоторые из них уже находятся в промышленном производстве [3]. Максимально достигнутые частоты функционирования РТД превышают 2.5 ТГц, т.е. этот прибор характеризуется рекордным быстродействием. Последнее приводит к возможности его использования в качестве уникального активного элемента СВЧ электроники. К сожалению, несмотря на, казалось бы, относительно простой принцип функционирования данного прибора [4,5], физика и моделирование его достаточно сложны. Это связано с очень высокой чувствительностью его к воздействию самых различных факторов. Поэтому в физике функционирования РТД еще много неясного, соответственно немало проблем и при его моделировании.

В принципе при построении моделей РТД возможно применение следующих общих квантово-механических формализмов [6]: 1) волновых функций, 2) матриц плотности, 3) функций распределения Вигнера, 4) функций Грина, 5) фейнмановских интегралов по траекториям. При построении упрощенных моделей в качестве исходного, как правило, используется формализм волновых функций [7–11]. Разработка более адекватных и сложных численных моделей обычно проводится в рамках формализмов волновых функций [12–16], функций распределения Вигнера [17–21] и функций Грина [22–24]. В моделях РТД повышенной адекватности в процессе самосогласованного расчета часто учитывается широкий спектр факторов, важными из которых и наиболее часто встречаемыми являются заряд в различных областях структуры и рассеяние [25]. Каждый из отмеченных трех формализмов имеет свои достоинства и недостатки. Не останавливаясь на их глубоком анализе, здесь лишь отметим, что формализмы функций Вигнера и Грина приводят к увеличению количества переменных,

поэтому часто при реализации численных моделей этих формализмов необходимо применение ЭВМ повышенной производительности [19,21,24]. В итоге такие модели малоприспособны для широкого использования.

Несмотря на значительные усилия, проводимые фактически в течение около 30 лет, крайне редко удается удовлетворительно согласовать результаты расчета вольт-амперных характеристик (ВАХ) РТД с экспериментальными данными даже для моделей повышенной адекватности в рамках трех отмеченных формализмов. Наиболее удачные результаты в этом плане получены с помощью моделей [24–26].

В чем же причина плохого согласования с экспериментом для большинства моделей? С нашей точки зрения, их две основные, кроме отмеченной в начале статьи. Во-первых, это используемые приближения. В численных моделях всех трех формализмов традиционно применяются одночастичное приближение и метод эффективной массы. Кроме того, модели, как правило, одномерные по пространству, т.е. часто не анализируются должным образом хотя бы пассивные области. Во-вторых, в моделях РТД до сих пор не было попыток учесть более детально свойства реальных гетерограниц [27], в частности форму разрыва зон и поверхностный заряд.

В данной работе описана разработанная численная комбинированная модель РТД, основанная на полуклассическом и квантово-механическом (формализм волновых функций) подходах и учитывающая влияние заряда в различных областях структуры, включая поверхностный на гетерограницах, формы разрыва зон на гетерограницах, рассеяния в квантовой яме и сопротивлений протяженных пассивных областей. С ее использованием показана важность учета всего комплекса указанных факторов при расчете ВАХ РТД.

## 2. Учет заряда, включая поверхностный

Предлагаемая численная модель РТД основана на самосогласованном решении уравнений Шредингера и Пуассона и относится к классу комбинированных [6],

<sup>†</sup> E-mail: nanodev@bsuir.edu.by

так как объединяет полуклассический и квантово-механический подходы.

Рассмотрим сначала, как осуществляется в модели учет заряда в различных областях структуры, включая поверхностный заряд. Прежде всего прибор представляется состоящим из трех видов областей: контакты, приконтактные и активная. Влияние контактов описывается с помощью контактной разности потенциалов. В приконтактных областях, включающих и спейсерные слои, вместо приближения Томаса–Ферми для подвижных носителей заряда [28,29] используется больцмановская статистика и концентрация электронов задается соотношением [6]

$$n = n_{ie} \exp[q(\Phi - F_n)/k_B T], \quad (1)$$

где  $n_{ie}$  — эффективная собственная концентрация,  $\Phi$  — электростатический потенциал,  $F_n$  — квазипотенциал Ферми электронов,  $k_B$  — постоянная Больцмана,  $T$  — температура,  $q$  — величина заряда электрона.

В активной области, к которой относятся барьеры и квантовая яма, самосогласованно решаются уравнения Пуассона и Шредингера:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( \varepsilon_s \varepsilon_0 \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right) = -q(N_D - n), \quad (2)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{1}{m^*} \frac{\partial}{\partial x} \psi \right) + V\psi = E\psi, \quad (3)$$

где  $\varepsilon_s \varepsilon_0$  — диэлектрическая проницаемость среды,  $N_D$  — концентрация ионизованных доноров,  $m^*$  — эффективная масса электрона,  $\psi$  — волновая функция,  $E$  — энергия электрона,  $V$  — потенциальная энергия электрона. В активной области величина  $n$  вычисляется на основе волновых функций  $\psi(E_k)$  и концентрации электронов для каждого из состояний  $k$  по известной формуле [28], которая в нашем случае принимает вид

$$n = \frac{m^* k_B T}{\pi \hbar^2} \times \sum_k |\psi(E_k)|^2 \ln \left\{ 1 + \exp \left[ -\frac{E_k + \Delta E_c - q(\Phi - F_n)}{k_B T} \right] \right\}, \quad (4)$$

где  $\Delta E_c$  — величина разрыва зоны проводимости барьера относительно квантовой ямы.

Начальное приближение для потенциала  $\Phi$  задается исходя из предположений электронейтральности и справедливости (1) для всего прибора, постоянства квазипотенциала  $F_n$  в приконтактных областях и его линейного изменения в активной области. Последнее предположение применяется и далее в процессе самосогласованного расчета.

Концентрация электронов в активной области определяется исходя из решения уравнения (3) в виде задачи переноса [30,31]. С этой целью на границах обла-

сти решения уравнения Шредингера волновые функции задаются как комбинация падающей (прошедшей) и отраженной волн [30] с крайевыми условиями общего вида [32]. Заметим, что в известных моделях при нахождении самосогласованного потенциала значения волновых функций на границах активной области задаются фиксированными (нулевыми), что приводит к погрешностям [28], а также к необходимости дополнительно решать уравнение Шредингера в виде задачи переноса для вычисления плотности тока  $J$  на завершающем этапе [14,29].

Для обеспечения лучшей сходимости итерационного процесса проводится линейризация уравнения (2), что дает

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( \varepsilon_s \varepsilon_0 \frac{\partial \delta \Phi}{\partial x} \right) - q \frac{\partial n(\Phi)}{\partial \Phi} \delta \Phi = - \left[ \frac{\partial}{\partial x} \left( \varepsilon_s \varepsilon_0 \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right) + q(N_D - n(\Phi)) \right]. \quad (5)$$

Уравнение (5) решается для всего прибора (приконтактные и активная области) относительно поправки к потенциалу  $\delta \Phi$ , а далее находится новое значение потенциала  $\Phi$ . При решении учитывается нелинейная зависимость заряда от электростатического потенциала как в классических (приконтактных), так и в квантово-механических (барьеры и яма) областях с помощью производной  $\partial n(\Phi)/\partial \Phi$ . Формулы для последней выводятся на основе выражений (1) и (4). Блок-схема системного метода последовательной концепции [6] итерационного решения уравнений Шредингера и Пуассона приведена в работе [30].

При оценке точности совместного решения уравнений применялось два критерия, а именно: 1) по максимальному изменению электростатического потенциала между итерациями ( $\max |\delta \Phi(x)| \leq \varepsilon_{ps}$ , здесь  $\varepsilon_{ps}$  — задаваемая погрешность), 2) по выполнению свойства нейтральности заряда РТД в целом. После нахождения самосогласованного потенциала на основе коэффициента прохождения [30] вычисляется плотность тока по формулам, выведенным в работе [5] для двух случаев: конечных температур ( $T \neq 0$  К) и в пределе  $T \rightarrow 0$  К.

Рассмотрим, как осуществляется в модели учет поверхностного заряда на гетерограницах. С этой целью используется закон Гаусса–Остроградского

$$\varepsilon_s^- \varepsilon_0 \frac{\partial \Phi}{\partial x} \Big|_{\Gamma^-} - \varepsilon_s^+ \varepsilon_0 \frac{\partial \Phi}{\partial x} \Big|_{\Gamma^+} = \sigma_{\text{sur}}, \quad (6)$$

где верхними индексами  $\Gamma^-$  и  $\Gamma^+$  обозначены точки слева и справа от границы,  $\sigma_{\text{sur}}$  — плотность поверхностного заряда. Отметим, что узел сетки пространственной дискретизации должен обязательно находиться на гетерогранице. В результате конечноразностная аппроксима-

ция уравнения (5) в точке  $i$  границы раздела имеет вид

$$\begin{aligned} & \delta\Phi_{i-1} + \delta\Phi_i \left[ -1 - \frac{h_i \varepsilon_s^{\Gamma+}}{h_{i+1} \varepsilon_s^{\Gamma-}} - \frac{qh_i}{2\varepsilon_0 \varepsilon_s^{\Gamma-}} \right. \\ & \quad \left. \times \left( h_i \frac{\partial n_i^{\Gamma-}}{\partial \Phi} + h_{i+1} \frac{\partial n_i^{\Gamma+}}{\partial \Phi} \right) \right] + \delta\Phi_{i+1} \frac{h_i \varepsilon_s^{\Gamma+}}{h_{i+1} \varepsilon_s^{\Gamma-}} \\ & = -\Phi_{i-1} - \Phi_i \left( -1 - \frac{h_i \varepsilon_s^{\Gamma+}}{h_{i+1} \varepsilon_s^{\Gamma-}} \right) - \Phi_{i+1} \frac{h_i \varepsilon_s^{\Gamma+}}{h_{i+1} \varepsilon_s^{\Gamma-}} - \frac{h_i \sigma_{\text{sur}}}{\varepsilon_s^{\Gamma-} \varepsilon_0} \\ & \quad - \frac{qh_i}{2\varepsilon_0 \varepsilon_s^{\Gamma-}} [h_i (N_{Di}^{\Gamma-} - n_i^{\Gamma-}) + h_{i+1} (N_{Di}^{\Gamma+} - n_i^{\Gamma+})], \quad (7) \end{aligned}$$

где  $\Phi_i$  — значение потенциала в точке  $i$ ,  $h_i$  — шаг сетки пространственной дискретизации. Аппроксимация для внутренних точек (вне гетерограниц) является частным случаем (7) при  $\varepsilon_s^{\Gamma-} = \varepsilon_s^{\Gamma+}$ ,  $N_{Di}^{\Gamma-} = N_{Di}^{\Gamma+}$ ,  $n_i^{\Gamma-} = n_i^{\Gamma+}$ ,  $\sigma_{\text{sur}} = 0$ . Конечно-разностные аппроксимации линеаризованного уравнения Пуассона в случае, когда  $\sigma_{\text{sur}}$  зависит от потенциала  $\Phi$ , и уравнения Шредингера приведены в [30]. Возникающие на каждом итерационном шаге системы линейных алгебраических уравнений решаются с помощью прямых методов [30].

### 3. Учет формы разрыва зон на гетерограницах

При учете этого фактора возможны две принципиально различные ситуации: 1) разрыв зон резкий, ступенчатый; 2) разрыв зон более плавен. Отметим, что обе эти ситуации могут быть также описаны в дискретной модели, когда узел сетки находится на гетерогранице. Первый случай подробно рассмотрен в работе [30]. В связи с этим остановимся на втором, более привлекательном с физической точки зрения, случае, когда разрыв более плавен.

В используемых аппроксимациях берется усредненное значение потенциала непосредственно на гетерогранице (точка с индексом  $i$ ), а именно:

$$V_i = \frac{V_{i-1} + V_{i+1}}{2}, \quad (8)$$

где  $V_{i-1}$ ,  $V_{i+1}$  — значения потенциала по разные стороны барьера. Для описания формы барьера, кроме линейной, применялась и гиперболическая аппроксимация [33], которая подобна часто используемой при учете потенциала сил изображения в упрощенных моделях туннельного эффекта [34]. Аппроксимация проводилась не только для барьеров, но и для квантовой ямы между ними. В результате модифицированный исходный потенциальный профиль описывался соотношением

$$V_b(x) = V_{b0} \mp \beta \frac{d^2}{x(d-x)}, \quad (9)$$

где  $V_{b0}$  — высота эквивалентного прямоугольного барьера, знак „−“ соответствует области барьера, а „+“ —

области ямы,  $\beta$  — коэффициент,  $d$  — ширина барьера,  $x$  — координата для барьера, причем здесь  $x \in (0, d)$ . В граничных точках возможно деление на 0, поэтому для описания потенциального профиля непосредственно вблизи граничных точек применялась линейная аппроксимация, а следовательно, соотношение (8) и в этом случае выполняется.

Подчеркнем, что в описанных аппроксимациях разрыв зон на гетерограницах обычно достаточно резкий, как это в действительности и имеет место [27], однако не ступенчатый. Это связано с очень малым шагом сетки пространственной дискретизации в активной области прибора, как правило, измеряемого ангстремами и его долями. Многое, конечно же, зависит от параметра  $\beta$  в соотношении (9).

### 4. Учет рассеяния

Признанным в настоящее время при учете процессов неупругого рассеяния является использование комплексного гамильтониана в рамках различных формализмов [25,35]. Так как основным механизмом рассеяния в приборах с резонансным туннелированием считается рассеяние на оптических фононах, его учет осуществлялся согласно подходу, использованному в работах [14,36]. В частности, после расчета самосопряженного потенциала  $\Phi$  в результате решения уравнений Пуассона (2) и Шредингера (3) с целью учета рассеяния на следующем этапе решается уравнение Шредингера с комплексным гамильтонианом в области квантовой ямы, а именно [14,36]:

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{1}{m^*} \frac{\partial}{\partial x} \psi \right) - (E - V + iW_{\text{op}}) \psi = 0, \quad (10)$$

где  $W_{\text{op}}$  — оптический потенциал  $W_{\text{op}} = \hbar/2\tau$ ,  $1/\tau$  — скорость рассеяния. Потенциал  $V$  берется с предыдущего этапа, т.е. зависит от  $\Phi$ , вычисляется согласно [30] и корректируется на гетерограницах, как описано в разд. 3.

Для расчета скорости рассеяния соотношения работ [14,36] были модифицированы на случай учета всех уровней, через которые возможно туннелирование. В этом случае

$$\frac{1}{\tau_l} = S_{\text{op}l} \left[ 1 + \frac{2}{\exp(\hbar\omega_{\text{op}l}/k_B T) - 1} \right], \quad E - E_{Rl} \geq \hbar\omega_{\text{op}l}, \quad (11)$$

$$\frac{1}{\tau_l} = S_{\text{op}l} \left[ \frac{1}{\exp(\hbar\omega_{\text{op}l}/k_B T) - 1} \right], \quad |E - E_{Rl}| < \hbar\omega_{\text{op}l}, \quad (12)$$

где  $S_{\text{op}l}$  — коэффициент скорости рассеяния,  $E_{Rl}$  — энергия, соответствующая  $l$ -му резонансному уровню,  $\hbar\omega_{\text{op}l}$  — энергия оптических фононов для  $l$ -го уровня. Общая скорость рассеяния вычисляется согласно

$$1/\tau = \sum_l 1/\tau_l, \quad (13)$$

где суммирование ведется по всем резонансным уровням  $l$ , лежащим в задаваемом диапазоне энергий.

В результате решения уравнения (10) определяются волновые функции, на основе которых рассчитывается коэффициент прохождения

$$T_{\text{tot}} = T_{\text{coh}} + T_{\text{incoh}} = T_{\text{coh}} + \frac{AT_R}{T_L + T_R}, \quad (14)$$

где  $T_{\text{coh}}$ ,  $T_{\text{incoh}}$  — когерентная и некогерентная составляющие коэффициента прохождения,  $A$  — коэффициент затухания ( $A = 1 - T_{\text{coh}} - R_{\text{coh}}$ ),  $R_{\text{coh}}$  — когерентная составляющая коэффициента отражения,  $T_L$  и  $T_R$  — коэффициенты прохождения для левого и правого барьеров. Для нахождения  $T_{\text{incoh}}$  волновые функции представляются в виде

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad (15)$$

$$k(x) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m^*[E - V(x) + iW_{\text{op}}(x)]}. \quad (16)$$

В активной области РТД вне квантовой ямы  $k(x)$  вычисляется на основе выражения (16) с  $W_{\text{op}} = 0$ . Далее коэффициент прохождения определяется согласно [30], а плотность тока, как описано в разд. 2. Заметим, что в работах [25,36] волновую функцию записывают в ином виде:

$$\psi(x) = Ae^{i(\kappa+i\gamma)x} + Be^{-i(\kappa+i\gamma)x}, \quad (17)$$

где  $\gamma$  — коэффициент затухания волновой функции вследствие рассеяния,  $\kappa$  — волновой вектор без учета рассеяния. При этом коэффициент  $\gamma$  вычисляется на основе оптического потенциала и считается постоянной величиной в квантовой яме при заданной энергии. Такое предположение, строго говоря, справедливо лишь для прямоугольной квантовой ямы. Таким образом, предложенная модификация позволяет учесть и произвольный профиль квантовой ямы.

## 5. Учет сопротивлений приконтактных областей

Ранее, как и во многих известных моделях, предполагалось, что все прикладываемое напряжение падает на активной области структуры (см. разд. 2). Отметим, что это допущение имеет определенное основание, так как приконтактные (пассивные) области, как правило, высоко легируются, т.е. фактически в этих моделях они считаются продолжением контактов.

Учетом падения напряжений в приконтактных областях РТД. Необходимость этого связана с двумя факторами. Во-первых, в структуре могут протекать очень большие плотности тока. Во-вторых, реальные РТД имеют часто достаточно протяженные, вообще говоря, трехмерные пассивные области, которые не могут быть строго учтены в рамках одномерных численных моделей.

Корректировку напряжения в предложенной модели осуществим по формуле

$$U' = U + IR_e + IR_c, \quad (18)$$

где  $U'$  — напряжение, прикладываемое к РТД;  $I$  — ток, рассчитанный по модели (см. разд. 2–4) при напряже-

нии  $U$ ;  $R_e, R_c$  — сопротивления приконтактных областей РТД. Для оценки значений этих сопротивлений можно использовать известную модель резистора для бруска однородно легированного полупроводника [37]:

$$R = L/qs\mu_n N_D, \quad (19)$$

где  $L$  — длина области,  $s$  — площадь поперечного сечения,  $\mu_n$  — подвижность электронов. Заметим, что обычно приконтактные области РТД включают несколько подобластей с различной проводимостью, поэтому оценку общего сопротивления необходимо определять с учетом этого факта [38].

Программа, реализующая описанную комбинированную модель РТД, была включена в систему моделирования наноэлектронных приборов NANODEV [39], предназначенную для персональных ЭВМ. Все приводимые далее данные получены с ее использованием на ЭВМ типа Pentium-III.

## 6. Результаты и их обсуждение

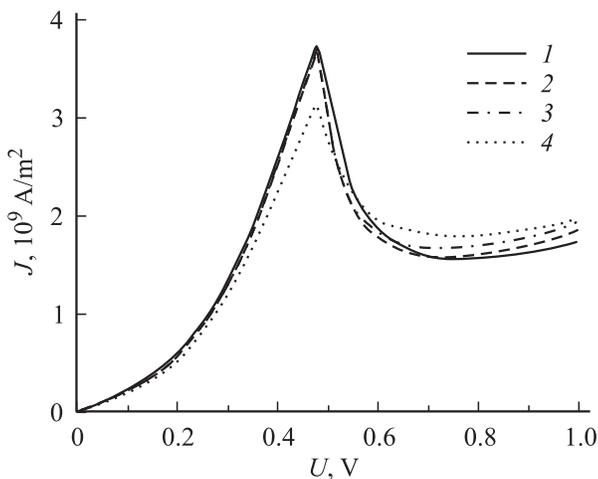
Влияние некоторых из рассмотренных факторов на результаты моделирования исследовалось в ряде наших работ [30,31,38–43]. Так, в статьях [30,41] описаны установленные закономерности влияния ширин различных областей на ВАХ РТД как в случае учета, так и неучета заряда активной области. Оказалось, что для расчета ВАХ, лежащих в характерной для реальных РТД диапазоне численных значений, принципиально важным является корректный учет заряда в активной области. Очень сильное влияние на результаты расчета ВАХ оказывает и форма разрыва зон на гетерограницах [42]. В частности, для двухбарьерного РТД на основе  $\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}/\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$  вычисленное значение пикового тока примерно в 47 раз меньше для случая ступенчатого разрыва зон, чем в случае использования усредненного значения потенциала в граничной точке (см. (8),  $\beta = 0$  эВ в (9)). Пиковое напряжение при этом больше почти в 2.5 раза. Значения пиковых токов и напряжений при использовании плавных аппроксимаций (см. разд. 3, случай 2) хотя и различаются между собой, но гораздо менее значительно. По мере увеличения коэффициента  $\beta$  в (9) барьер становится более сглаженным, уменьшается его высота и ширина, что приводит к увеличению пикового тока и уменьшению пикового напряжения. Форма же ВАХ оказывается ближе к экспериментальной. Эти данные свидетельствуют о важности разработки моделей зонных структур гетеропереходов, пригодных для моделирования резонансно-туннельных приборов, в частности РТД. В то же время в работах [38,43] была показана необходимость учета, казалось бы, на первый взгляд, незначительных, сопротивлений пассивных областей РТД при согласовании результатов расчета ВАХ с экспериментальными данными. Причем отметим, что значения сопротивлений  $R_e$  и  $R_c$  близки к оценочным значениям, вычисленным согласно разд. 5.

Поэтому можно считать, что в предложенной модели эти параметры не носят явно подгоночного характера. Важное влияние приконтактные области оказывают и на распределения заряда и потенциала в активной области [43], т. е. для адекватного моделирования физических процессов в данном приборе необходимо корректное описание взаимодействия всех трех отмеченных видов областей РТД.

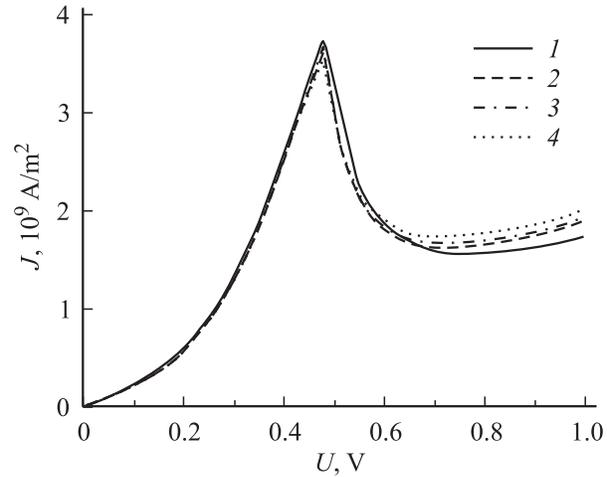
Рассмотрим влияние других факторов, учет которых возможен в описанной комбинированной модели. Расчет ВАХ проводился для двухбарьерного РТД на основе GaAs/AlAs при  $T = 300$  К [44]. Его структура состоит из активной области, включающей барьеры шириной 2 нм и заключенную между ними квантовую яму шириной 4.5 нм. Спейсерные области со стороны эмиттерного и коллекторного контактов не легированы и имеют ширину 7 и 10 нм. В эмиттерной и коллекторной приконтактных областях с размерами 600 нм концентрация примеси равна  $2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ , за исключением слоев в 100 нм вблизи спейсеров, где она уменьшается до  $10^{17} \text{ см}^{-3}$ . При моделировании использовались следующие значения параметров: высота барьеров 1.116 эВ; для GaAs  $m^* = 0.068m_0$ ,  $\epsilon_s = 13.18$ ; для AlAs  $m^* = 0.172m_0$ ,  $\epsilon_s = 10.06$ .

Исследовалось влияние на результаты расчета ВАХ параметров используемой модели рассеяния (считалось, что они не зависят от  $l$ ): энергии оптических фононов  $\hbar\omega_{\text{оп}}$  и коэффициента скорости рассеяния  $S_{\text{оп}}$ . Анализ известных работ показал, что их значения могут различаться. Так, например, в работе [36]:  $S_{\text{оп}} = 6.0 \cdot 10^{12} \text{ с}^{-1}$ ,  $\hbar\omega_{\text{оп}} = 0.32$  эВ, а в работе [14]:  $S_{\text{оп}} = 1.25 \cdot 10^{13} \text{ с}^{-1}$ ,  $\hbar\omega_{\text{оп}} = 0.032$  эВ. Поэтому в наших исследованиях величины параметров рассеяния варьировались в близких к этим диапазонам значениях.

На рис. 1 показаны ВАХ РТД, рассчитанные для различных значений  $\hbar\omega_{\text{оп}}$  при фиксированном значении  $S_{\text{оп}} = 1.25 \cdot 10^{13} \text{ с}^{-1}$ . Кривая 1 соответствует случаю,



**Рис. 1.** ВАХ РТД для различных значений энергии оптических фононов: 1 — без учета рассеяния; 2–4 — с учетом рассеяния при  $\hbar\omega_{\text{оп}}$ , эВ: 2 — 0.064, 3 — 0.032, 4 — 0.016.



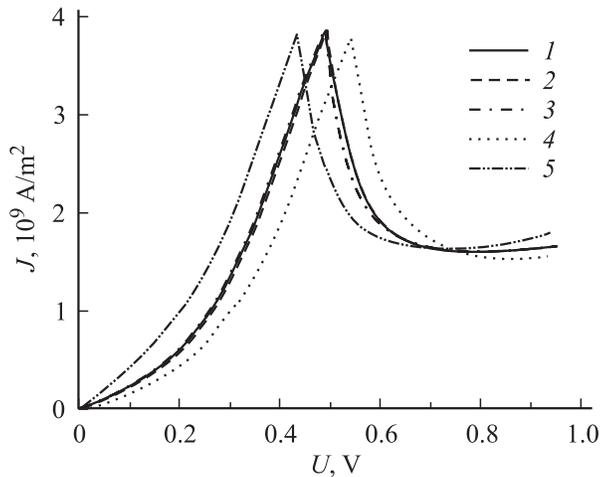
**Рис. 2.** ВАХ РТД для различных значений коэффициента скорости рассеяния: 1 — без учета рассеяния; 2–4 — с учетом рассеяния при  $S_{\text{оп}}$ ,  $10^{13} \text{ с}^{-1}$ : 2 — 0.625, 3 — 1.25, 4 — 2.5.

когда рассеяние не учитывается. Кривые 2–4 получены для энергий оптических фононов 0.064, 0.032 и 0.016 эВ. Видно, что уменьшение  $\hbar\omega_{\text{оп}}$  приводит к снижению пикового тока и увеличению тока „долины ВАХ“ (при высоком напряжении) по сравнению со случаем, когда рассеяние не учитывается. Наиболее существенная трансформация формы ВАХ наблюдается при  $\hbar\omega_{\text{оп}} = 0.016$  эВ. Отношения между пиковым значением тока и его величиной в области долины ВАХ („контрастность ВАХ“) равны: кривая 1 — 2.41, кривая 2 — 2.33, кривая 3 — 2.156, кривая 4 — 1.744. Таким образом, с возрастанием энергии оптических фононов контрастность ВАХ увеличивается и достигает максимального значения для случая, когда рассеяние не учитывается.

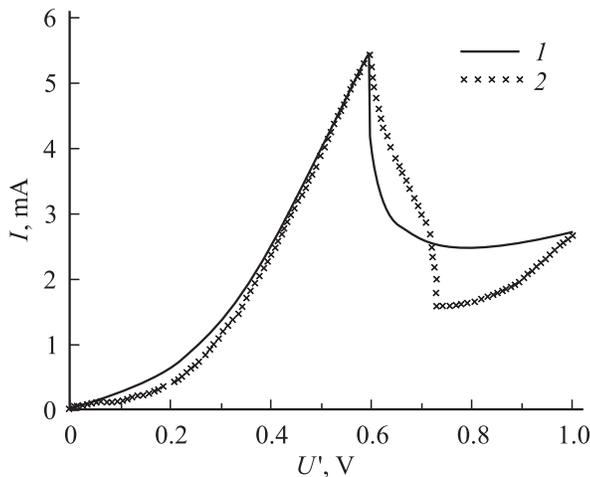
На рис. 2 приведены результаты моделирования для различных значений  $S_{\text{оп}}$ . Кривая 1 — ВАХ, рассчитанная без учета рассеяния. Кривые 2–4 соответствуют случаям, когда значения  $S_{\text{оп}}$  равны  $0.625 \cdot 10^{13}$ ,  $1.25 \cdot 10^{13}$  и  $2.5 \cdot 10^{13} \text{ с}^{-1}$ . Видно, что увеличение  $S_{\text{оп}}$  приводит к снижению пикового тока и увеличению тока долины ВАХ. Контрастности ВАХ при этом уменьшаются и составляют 2.237, 2.156, 2.022 для кривых 2, 3, 4.

В то же время исследование учета различного количества резонансных уровней при расчете скорости рассеяния (см. разд. 4) позволило установить, что для рассматриваемого РТД наибольший вклад вносит рассеяние с участием только нижнего уровня. Влияние на ВАХ рассеяния с участием также и других резонансных уровней незначительное. Несмотря на это, учет влияния нескольких резонансных уровней позволяет более полно отразить реальную картину физических процессов, протекающих в РТД.

На рис. 3 иллюстрируются рассчитанные ВАХ того же РТД для различных значений плотности поверхностного заряда. Рассеяние при этом не учитывалось с целью



**Рис. 3.** ВАХ РТД для различных значений плотности поверхностного заряда на границе раздела правого барьера и квантовой ямы  $\sigma_{\text{sur}}$ , Кл/м<sup>2</sup>: 1 — 0, 2 —  $-10^{-5}$ , 3 —  $10^{-5}$ , 4 —  $-10^{-4}$ , 5 —  $10^{-4}$ .



**Рис. 4.** Сравнение рассчитанной ВАХ (кривая 1) с экспериментальными данными [44] (кривая 2).

исключения возможного влияния данного эффекта. Кривая 1 рассчитана без учета поверхностного заряда, а кривые 2–5 получены для  $\sigma_{\text{sur}}$  на границе правого барьера и квантовой ямы, равных  $-10^{-5}$ ,  $10^{-5}$ ,  $-10^{-4}$ ,  $10^{-4}$  Кл/м<sup>2</sup>. Как следует из результатов, поверхностный заряд оказывает ощутимое влияние на напряжение  $V_{\text{max}}$ , соответствующее пиковым значениям тока. Так, уменьшение  $\sigma_{\text{sur}}$  от  $10^{-4}$  Кл/м<sup>2</sup> (кривая 5) до  $-10^{-4}$  Кл/м<sup>2</sup> (кривая 4) приводит к увеличению напряжения  $V_{\text{max}}$  от 0.43 до 0.54 В. Объяснить это можно тем, что отрицательный заряд на гетерогранице препятствует процессу резонансного туннелирования, а следовательно, напряжение  $V_{\text{max}}$  возрастает.

Аналогичные исследования проведены для случаев, когда поверхностный заряд учитывался на других гетерограницах, а именно: левого барьера и эмиттерной

приконтактной области; левого барьера и квантовой ямы; правого барьера и коллекторной приконтактной области. Результаты показывают, что установленные закономерности сохраняются. В указанных случаях происходит лишь перераспределение заряда и потенциала в активной области, что слабо влияет на напряжения  $V_{\text{max}}$  при одинаковых  $\sigma_{\text{sur}}$ . В связи с этим при определении напряжения  $V_{\text{max}}$  рассматриваемого РТД достаточно учесть поверхностный (эффективный) заряд всего лишь на одной из гетерограниц.

И наконец, на рис. 4 приведено сравнение результатов расчета ВАХ с учетом всех рассмотренных факторов (кривая 1) с экспериментальными данными [44] (кривая 2). Удовлетворительное согласие с экспериментом получено при следующих значениях параметров: площадь поперечного сечения  $s = 1.5$  мкм<sup>2</sup>, коэффициент скорости рассеяния  $S_{\text{op}} = 1.25 \cdot 10^{13}$  с<sup>-1</sup>, энергия оптических фононов  $\hbar\omega_{\text{op}} = 0.032$  эВ, коэффициент формы барьера  $\beta = 0$  эВ, плотность поверхностного заряда  $\sigma_{\text{sur}} = -10^{-4}$  Кл/м<sup>2</sup>, сопротивления приконтактных областей  $R_e = R_c = 7$  Ом.

Проанализируем полученные результаты. Число подгоночных параметров всего лишь семь в предложенной комбинированной модели РТД, а именно:  $s$ ,  $S_{\text{op}}$ ,  $\hbar\omega_{\text{op}}$ ,  $\beta$ ,  $\sigma_{\text{sur}}$ ,  $R_e$  и  $R_c$ . Много это или мало? Мы считаем — немного. Поясним сказанное. Так, в известной модели Гуммеля–Пуна биполярного транзистора количество таких параметров более 25 [37]. В одной из наиболее адекватных численных моделей субмикронных МОП транзисторов, основанной на методе Монте-Карло и предназначенной для использования на супер-ЭВМ, количество подгоночных параметров равно четырем только при описании транспортных свойств кремния [45], и авторы считают это „огромным“ достижением. С другой стороны, явно подгоночный характер в данных исследованиях в предложенной модели носят только три параметра —  $s$ ,  $\beta$  и  $\sigma_{\text{sur}}$ . Так, параметры  $R_e$  и  $R_c$ , как уже указывалось, близки к оценочным значениям (см. разд. 5), а параметры рассеяния  $S_{\text{op}}$ ,  $\hbar\omega_{\text{op}}$  взяты из характерного диапазона значений ввиду отсутствия другой информации. Площадь поперечного сечения  $s$  и в известных моделях традиционно выбирается исходя из согласования величины пикового тока с соответствующим экспериментальным значением. Подобный подход вообще часто используется в одномерных численных моделях полупроводниковых приборов [37]. Кроме того, в работе [44] не приведено сведений о величине  $s$ . Что касается параметров  $\beta$  и  $\sigma_{\text{sur}}$ , то, к сожалению, о них крайне мало даже экспериментальной информации [27]. В связи с этим важно отметить, что предложенная модель может использоваться для косвенного метода определения этих параметров.

В то же время необходимо заметить, что учет поверхностного заряда и сопротивлений приконтактных областей позволил получить очень хорошее согласие с экспериментом по напряжению  $V_{\text{max}}$  (см. рис. 4), что редко достигается в известных моделях. Так, значение

напряжения  $V_{\max}$  без учета этих факторов при различных параметрах рассеяния составляет около 0.48 В (см. рис. 2, кривая 1), а с учетом — 0.59 В (рис. 4, кривая 1). Следовательно, учет поверхностного заряда и сопротивлений приконтактных областей важен для правильной оценки пикового напряжения РТД.

В заключение сделаем несколько замечаний по поводу области долины или „плато“ и внутренней бистабильности [46] ВАХ РТД, так как именно в этой области наблюдается наиболее существенное различие наших расчетов с экспериментальными результатами (рис. 4). Во-первых, в настоящее время показано, что данная область может быть адекватно описана только с использованием нестационарных моделей (см., например, [21]). Во-вторых, с помощью моделей, основанных на эквивалентных схемах РТД, возможно более адекватное описание этой области путем вариации сопротивления [47]. Последняя корректировка легко может использоваться и в предложенной модели, однако кардинальное улучшение модели с физической точки зрения — учет нестационарных процессов.

## 7. Заключение

Предложена численная комбинированная модель РТД, основанная на полуклассическом и квантово-механическом (формализм волновых функций) подходах, которая может использоваться для реализации на персональных ЭВМ. Модель позволяет описывать совместное влияние комплекса факторов, а именно: заряд в различных областях структуры, включая поверхностный на гетерограницах; формы разрыва зон на гетерограницах; рассеяния в квантовой яме для набора резонансных уровней; сопротивлений протяженных пассивных областей.

Проведенные исследования влияния каждого из отмеченных факторов показали важность их учета при моделировании РТД. Удовлетворительное согласование результатов расчета ВАХ с экспериментом получается при учете всего комплекса факторов. Впервые включение в модель важных свойств (формы разрыва зон и поверхностного заряда) гетерограниц приводит к выводу о необходимости более детального учета характеристик реальных гетеропереходов для адекватного моделирования РТД. В итоге неплохие результаты анализа могут быть достигнуты в рамках одночастичного приближения и метода эффективной массы с помощью одномерной модели. Дальнейшее усовершенствование предложенной комбинированной модели будет осуществляться по пути учета влияния нестационарных процессов с целью более адекватного описания области плато ВАХ и внутренней бистабильности РТД.

Авторы считают своим приятным долгом выразить искреннюю признательность проф. George I. Haddad, д-ру Gerhard Klimeck и канд. физ.-мат. наук И.А. Обухову за любезно предоставленные отписки работ.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Государственных программ фундаментальных научных исследований „Электроника“, „Нанотех“ и „Низкоразмерные системы-2“ Белоруссии.

## Список литературы

- [1] Ж.И. Алфёров, А.Л. Асеев, С.В. Гапонов, П.С. Копьев, В.И. Панов, Э.А. Полторацкий, Н.Н. Сибельдин, Р.А. Су-рис. Микросистемная техника, № 8, 3 (2003).
- [2] P. Mazumder, S. Kulkarni, M. Bhattacharya, J.P. Sun, G.I. Haddad. Proc. IEEE, **86** (4), 664 (1998).
- [3] *Technology Roadmap for Nanoelectronics*, ed. by R. Com-pano (European Commission, IST programme, Future and Emerging Technologies, 2000).
- [4] Л.В. Иогансен. ЖЭТФ, **45**(2), 207 (1963).
- [5] R. Tsu, L. Esaki. Appl. Phys. Lett., **22**(11), 562 (1973).
- [6] И.И. Абрамов. *Моделирование физических процессов в элементах кремниевых интегральных микросхем* (Минск, БГУ, 1999).
- [7] А.С. Тагер. Электрон. техн., сер. Электроника СВЧ, № 9, 21 (1987).
- [8] И.Н. Долманов, В.И. Толстихин, В.Г. Еленский. Зарубеж. радиоэлектрон., № 7, 66 (1990).
- [9] Е.В. Бузанева. *Микроструктуры интегральной электроники* (М., Радио и связь, 1990).
- [10] *Resonant Tunneling in Semiconductors: Physics and Applications*, ed. by L.L. Chang, E.E. Mendez and C. Tejedor (N.Y.–London, Plenum Press, 1991).
- [11] В.П. Драгунов, И.Г. Неизвестный, В.А. Гридчин. *Основы нанозлектроники* (Новосибирск, НГТУ, 2000).
- [12] R.K. Mains, I. Mehdi, G.I. Haddad. Appl. Phys. Lett., **55**(25), 2631 (1989).
- [13] Y. Fu, Q. Chen, M. Willander, H. Brugger, U. Meiners. J. Appl. Phys., **74**(3), 1874 (1993).
- [14] J.P. Sun, G.I. Haddad. VLSI Design, **3**, 1 (1997).
- [15] А.А. Горбачевич, В.М. Колтыженков, А.Г. Цибизов. Изв. вузов. Электроника, № 4, 61 (2001).
- [16] O. Pinaud. J. Appl. Phys., **92**(4), 1987 (2002).
- [17] W.R. Frensley. Phys. Rev. B, **36**(3), 1570 (1987).
- [18] N.C. Kluksdahl, A.M. Krivan, D.K. Ferry, C. Ringhofer. Phys. Rev. B, **39**(11), 7720 (1989).
- [19] K.L. Jensen, F.A. Buot. J. Appl. Phys., **65**(12), 5248 (1989).
- [20] B.A. Biegel, J.D. Plummer. Phys. Rev. B, **54**(11), 8070 (1996).
- [21] P. Zhao, D.L. Woolard, B.L. Gelmont, H.-L. Cui. J. Appl. Phys., **94**(3), 1833 (2003).
- [22] G. Klimeck, R. Lake, R.C. Bowen, W.R. Frensley, T.S. Moise. Appl. Phys. Lett., **67**(17), 2539 (1995).
- [23] R.C. Bowen, G. Klimeck, R.K. Lake, W.R. Frensley, T. Moise. J. Appl. Phys., **81**(7), 3207 (1997).
- [24] R. Lake, G. Klimeck, R.C. Bowen, D. Jovanovich. J. Appl. Phys., **81**(12), 7845 (1997).
- [25] J.P. Sun, G.I. Haddad, P. Mazumder, J.N. Schulman. Proc. IEEE, **86**(4), 641 (1998).
- [26] И.А. Обухов. Микросистемная техника, № 2, 23 (2001).
- [27] *Молекулярно-лучевая эпитаксия и гетероструктуры*, ред. Л. Ченг, К. Плог (М., Мир, 1989).
- [28] J.P. Sun. *Modeling of semiconductor quantum devices and its application* (Ph.D. Theses, Dep. of EECS, Univ. of Michigan, Ann Arbor, 1993).

- [29] S. Mohan, J.P. Sun, P. Mazumder, G.I. Haddad. IEEE Trans., **CAD-14**(6), 653 (1995).
- [30] И.И. Абрамов, И.А. Гончаренко. Электромагнит. волны и электрон. системы, **7**(3), 54 (2002).
- [31] И.И. Абрамов, И.А. Гончаренко. Матер. 11-й Межд. конф. „СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии“ (Севастополь, Украина, 2001) с. 443.
- [32] И.И. Абрамов, И.А. Гончаренко. Изв. Белорус. инж. акад., № 1(9)/2, 88 (2000).
- [33] И.И. Абрамов, Е.Г. Новик. *Численное моделирование металлических одноэлектронных транзисторов* (Минск, Бестпринт, 2000).
- [34] *Туннельные явления в твердых телах*, ред. Э. Бурштейн, С. Лундквист (М., Мир, 1973).
- [35] *Nanostructure Physics and Fabrication*, ed. M.A. Reed, W.P. Kirk (San Diego, Academic Press, 1989).
- [36] Y. Zohta, T. Tanamoto. J. Appl. Phys., **74**(11), 6996 (1993).
- [37] И.И. Абрамов. *Курс лекций „Моделирование элементов интегральных схем“* (Минск, БГУ, 1999).
- [38] И.И. Абрамов, И.А. Гончаренко. Изв. Белорус. инж. акад., № 2(14)/2, 170 (2002).
- [39] И.И. Абрамов, И.А. Гончаренко, С.А. Игнатенко, А.В. Королев, Е.Г. Новик, А.И. Рогачев. Микроэлектроника, **32**(32), 124 (2003).
- [40] И.И. Абрамов, И.А. Гончаренко. *Низкоразмерные системы-2* (Гродно, ГрГУ, 2002) с. 21.
- [41] И.И. Абрамов, И.А. Гончаренко. Изв. Белорус. инж. акад., № 1(11)/3, 77 (2001).
- [42] И.И. Абрамов, И.А. Гончаренко. Матер. 12-й Межд. конф. „СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии“ (Севастополь, Украина, 2002) с. 464.
- [43] И.И. Абрамов, И.А. Гончаренко. Матер. 13-й Межд. конф. „СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии“ (Севастополь, Украина, 2003) с. 534.
- [44] T.V. Boykin, R.C. Bowen, G. Klimeck, K.L. Lear. Appl. Phys. Lett., **75**(9), 1302 (1999).
- [45] M.V. Fischetti, S.E. Laux. Phys. Rev. B, **38**(14), 9721 (1988).
- [46] V.J. Goldman, D.C. Tsui, J.E. Cunningham. Phys. Rev. Lett., **58**(12), 1256 (1987).
- [47] C.Y. Huang, J.E. Morris, Y.K. Su. J. Appl. Phys., **82**, 2690 (1997).

Редактор Т.А. Полянская

## Combined model of resonant tunneling diode

*I.I. Abramov, I.A. Goncharenko, N.V. Kolomejtseva*

Belorussian State University  
of Informatics and Radioelectronics,  
220013 Minsk, Belorussia

**Abstract** A combined model of resonant tunneling diode, based on semiclassical and quantum-mechanical (wave function formalism) approaches is proposed. In addition to certain factors, important properties of device heterojunction such as the shape of energy-band offset and interface charge were taken into account. It was shown that satisfactory agreement of  $I-V$  characteristics with experiment can be obtained with the use of the model. The peak voltages are determined with a good accuracy when resistances of long passive regions and interface charge are included.