

12, декабрь 2015

УДК 621.382(075.8)

**К вопросу о перспективности использования метода функций Грина
для моделирования вольт-амперной характеристики
резонансно-туннельного диода**

Савельева Е.О., студент

*Россия, 105005, г. Москва, МГТУ им. Н.Э. Баумана,
кафедра «Технологии приборостроения»*

Научный руководитель: Ветрова Н.А., к.т.н, доцент

*Россия, 105005, г. Москва, МГТУ им. Н.Э. Баумана,
кафедра «Технологии приборостроения»*

k_rl6@bmstu.ru

Введение

Устройства наногетероструктурной электроники позволяют получить совершенно новые, ранее недостижимые свойства РЭС. Принцип работы таких устройств основан на квантоворазмерных эффектах в наноразмерных слоях составляющих их полупроводниковых гетероструктур. Одна из основных проблем, сдерживающих широкое применение указанных изделий в различных радиоэлектронных системах, состоит в обеспечении их надежности. На сегодняшний день разработаны [1] математические модели проведения конструкторско-технологической оптимизации радиоэлектронных средств нового поколения на базе приборов, функционирующих на квантоворазмерных эффектах в их полупроводниковых гетероструктурах, по критерию их надежности.

Первым этапом оценки надежности резонансно-туннельного диода (РТД) является расчет его вольт-амперной характеристики (ВАХ), в основе которого лежит построение потенциального профиля и моделирование прозрачности резонансно-туннельной структуры (РТС). Существует множество подходов к моделированию токопереноса в РТД. Точность выбранной математической модели определяется адекватностью и полнотой учета реальных физических процессов и квантовых эффектов в гетероструктуре и контактных областях диода. Выходная характеристика наноприборов на основе РТД сильно чувствительна к точности моделирования ВАХ диода. А так как соответствие данной характеристики требуемым значениям является критерием работоспособности прибора, высокий коэффициент чувствительности говорит о сильном влиянии точности

модели на правильность оценки показателей надежности наноприбора и системы (макрообъекта), в составе которой он находится.

Целью статьи является анализ математической модели на основе метода функций Грина, выявление преимуществ и недостатков данного метода по сравнению с распространенным методом матриц переноса.

1. Общий подход к моделированию ВАХ.

Задача по нахождению зависимости тока, проходящего через резонансно-туннельный диод, от приложенного к его полюсам напряжения складывается из двух составляющих:

1) Определение потока электронов, переходящих из одного контакта в другой под действием приложенной разности потенциалов, без учета квантоворазмерной структуры между ними. Считается, что в контактных областях (или резервуарах) имеет место равновесный электронный газ, и частицы распределены согласно статистике Ферми-Дирака.

2) Нахождение туннельной прозрачности гетероструктуры, то есть отношения потока прошедших сквозь нее электронов к потоку падающих, которое зависит от энергии электрона.

Формальное выражение такого подхода к описанию токопереноса известно как формула Цу-Есаки:

$$J = \frac{m_{\text{eff}} q k_B T}{\pi^2 \hbar^3} \int_0^{+\infty} Z(E_x) N(E_x) dE_x,$$

где q – заряд электрона, m_{eff} – эффективная масса электрона, $\hbar$ – постоянная Дирака, k_B – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура, x – направление, перпендикулярное плоскости слоев РТС, $Z(E_x)$ – прозрачность гетероструктуры, $N(E_x)$ – функция обеспечения структуры носителями заряда.

Интегрирование дает суммарный ток по всем энергиям электронов.

Функция обеспечения носителями, приведенная к зависимости от поперечной составляющей энергии E_x :

$$N(E_x) = \ln \left(\frac{1 + \exp\left(-\frac{E_x - E_f}{k_B T}\right)}{1 + \exp\left(-\frac{E_x - E_f + qV}{k_B T}\right)} \right),$$

где E_f – уровень Ферми в контактах до приложения потенциала, V – приложенный потенциал.

Функция прозрачности $Z(E_x)$ определяется потенциальным профилем гетероструктуры и может быть рассчитана различными методами, отличными по физическому описанию токопереноса и математической реализации. Выбор метода расчета прозрачности является основополагающей задачей для обеспечения точности построения выходной характеристики.

2. Расчет прозрачности структуры.

2.1. Метод матриц переноса.

Метод матриц переноса относится к условно-аналитическим методам расчета электронной прозрачности [2]. Данный метод заключается в нахождении матрицы T , связывающей амплитуды A и B распространяющихся в противоположные стороны волн в крайних областях рассматриваемой структуры.

$$\begin{pmatrix} \vec{A}_1 \\ \vec{B}_1 \end{pmatrix} = [T] \cdot \begin{pmatrix} \vec{A}_N \\ \vec{B}_N \end{pmatrix}.$$

Потенциальный профиль разбивается на конечное число $N-1$ малых участков с шагом a , потенциал в каждом из которых условно считается постоянным для всего участка. В каждом из участков аналитически решается уравнение Шредингера и на всем пространстве применяются условия непрерывности и гладкости волновой функции. Матрица переноса через каждую элементарную область складывается из матрицы непрерывности при переходе через границы областей и матрицы распространения при прохождении участка между границами.

Матрица непрерывности выводится из условий гладкости и непрерывности волновой функции электрона на границе элементарных участков и имеет вид:

$$d_{i-1,i} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \frac{k_i}{k_{i-1}} & 1 - \frac{k_i}{k_{i-1}} \\ 1 - \frac{k_i}{k_{i-1}} & 1 + \frac{k_i}{k_{i-1}} \end{pmatrix},$$

где $k_i = \frac{\sqrt{2m_{eff}(U_i - E)}}{\hbar}$ – волновое число электрона с энергией E в i -ой участке потенциального профиля.

Матрица распространения основана на условии эквивалентности непрерывности волновой функции в начальной и конечной точках элементарного участка:

$$p_i = \begin{pmatrix} e^{-ik_i a} & 0 \\ 0 & e^{ik_i a} \end{pmatrix}.$$

Элементарная матрица переноса:

$$T_i = d_{i-1,i} \cdot p_i.$$

Общая матрица переноса представляет собой произведение всех элементарных матриц:

$$T = \prod_i T_i.$$

Коэффициент прозрачности определяется как отношение квадрата модуля амплитуды прошедшей волны A_N к квадрату модуля амплитуды падающей волны A_1 .

$$Z = \frac{|A_N|^2}{|A_1|^2} = \frac{1}{|T_{11}|^2}.$$

Учет различных физических процессов, например, рассеяния электронов в структуре, производится с помощью специальных коэффициентов [3,4], которые позволяют привести теоретически рассчитанную ВАХ диода в соответствие с экспериментальной характеристикой.

2.2. Метод функций Грина.

Данный метод является численным методом расчета прозрачности [5-7]. Гамильтониан в уравнении Шредингера приведен к матричному виду с использованием аппроксимации второй производной, а само уравнение с учетом дискретного представления волновой функции и потенциала записывается также в матричном виде:

$$[EI - H]\{\psi\} = 0.$$

При количестве разбиений N матрица гамильтониана H и единичная матрица I имеют размер (N,N) .

При рассмотрении системы «контакт-канал-контакт», где каналом является гетероструктура, уравнение Шредингера имеет вид:

$$[EI - H - \Sigma_1 - \Sigma_2]\{\psi\} = \{S\},$$

где S – вектор инжекции электронов из контакта в канал, $\Sigma_{1,2}$ – матрица связи канала с контактом 1,2 соответственно.

Функция Грина является матрицей, на которую необходимо умножить вектор $\{S\}$, чтобы получить вектор волновой функции $\{\psi\}$. Физический смысл функции Грина проявляется в ее временном отображении и заключается в реакции на импульсное возбуждение канала электронами контактов.

Входящие и выходящие потоки носителей из обоих контактов рассчитываются по следующим формулам:

$$\begin{aligned}
 B_{x1} &= \frac{1}{h} \int \frac{dE}{2\pi} f_1(E) \text{Trace}[\Gamma_1 A] \\
 B_{x2} &= \frac{1}{h} \int \frac{dE}{2\pi} f_2(E) \text{Trace}[\Gamma_2 A] \\
 B_{bx1} &= \frac{1}{h} \int \frac{dE}{2\pi} \text{Trace}[\Gamma_1 G^n] \\
 B_{bx2} &= \frac{1}{h} \int \frac{dE}{2\pi} \text{Trace}[\Gamma_2 G^n] \\
 [G^n] &= [A_1] f_1 + [A_2] f_2.
 \end{aligned}$$

Ток, проходящий через структуру:

$$\begin{aligned}
 I &= B_{x1} - B_{bx1} = B_{x2} - B_{bx2} = \dots \\
 \dots &= \frac{q}{2\pi h} \int \text{Trace}[\Gamma_1 A_2] (f_1(E) - f_2(E)) = \frac{q}{2\pi h} \int \text{Trace}[\Gamma_2 A_1] (f_2(E) - f_1(E)),
 \end{aligned}$$

где A_1, A_2 – спектральные функции 1 и 2 контакта соответственно, Γ_1, Γ_2 – расширение разрешенного уровня при соединении с 1 и 2 контактом соответственно. Множитель разности распределений Ферми при рассмотрении структуры с одномерным ограничением преобразуется в функцию $N(E_x)$ формулы Цу-Есаки, а прозрачность структуры определяется выражением:

$$\begin{aligned}
 Z &= \text{Trace}[\Gamma_1 A_2] = \text{Trace}[\Gamma_2 A_1] = \text{Trace}[\Gamma_1 G \Gamma_2 G^+] \\
 (A_1 &= G \Gamma_1 G^+; \quad A_2 = G \Gamma_2 G^+).
 \end{aligned}$$

Для учета рассеяния носителей в рамках когерентной среды в модель гетероструктуры вводятся пробы Буттикера, отображающие «плавающие зонды» - центры рассеяния электронов в различных точках канала. Математически пробы Буттикера выражаются как добавочные резервуары, присоединенные к какой-либо точке структуры и характеризующиеся своей матрицей связи Σ_i . Для такой структуры справедливы уравнения Буттикера, определяющие ток через каждый контакт i :

$$I_i = \left(\frac{q}{h} \right) \sum_j \tilde{T}_{ij} [\mu_i - \mu_j].$$

Эффективный коэффициент переноса возможно определить по условной электрической схеме, состоящей из контактов и проводников, помещенных между ними. Так как проводимость пропорциональна коэффициенту переноса носителей между

контактами, эффективный коэффициент прозрачности определяется из соотношений для параллельно и последовательно соединенных проводников.

Например, в самом простом случае, проба Буттикера помещена в середине структуры. Электрическая схема для данного примера представлена на рис. 1.

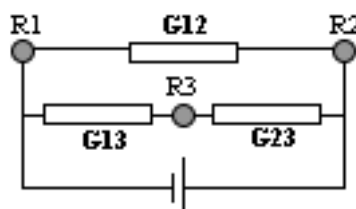


Рис. 1. Условная электрическая схема РТС с пробой Буттикера

И эффективный коэффициент переноса определяется по формуле:

$$T_{eff} = T_{12} + \frac{T_{13}T_{23}}{T_{13} + T_{23}}.$$

3. Моделирование реальной структуры.

Для сравнения двух рассмотренных методов расчета прозрачности в среде Matlab была смоделирована резонансно-туннельная гетероструктура со следующими параметрами:

- Ширина ямы: $l_a = 5$ нм;
- Ширина барьера: $l_b = 2$ нм;
- Ширина контакта: $l_k = 1$ нм (малое значение для сокращения времени расчетов);
- Высота барьера $U_b = 0.5$ эВ;
- Контактная разность потенциала КРП = 0.1 эВ;
- Уровень Ферми $E_f = 0.1$ эВ.

Смещение потенциального профиля структуры с приложением напряжения принимается линейным.

Смоделированы три способа расчета прозрачности данной структуры: метод матриц переноса, метод функций Грина и метод функций Грина с пробой Буттикера (рис. 2). Диапазон энергий 0..0.5 эВ, напряжение смещения 0..0.5 В.

Исходя из графика функции обеспечения электронами (рис. 3), электронов с энергией выше 0,2 эВ в канале почти нет. Поэтому для адекватной оценки токопереноса достаточно рассмотреть прозрачность в диапазоне $E=0..0.2$ эВ.

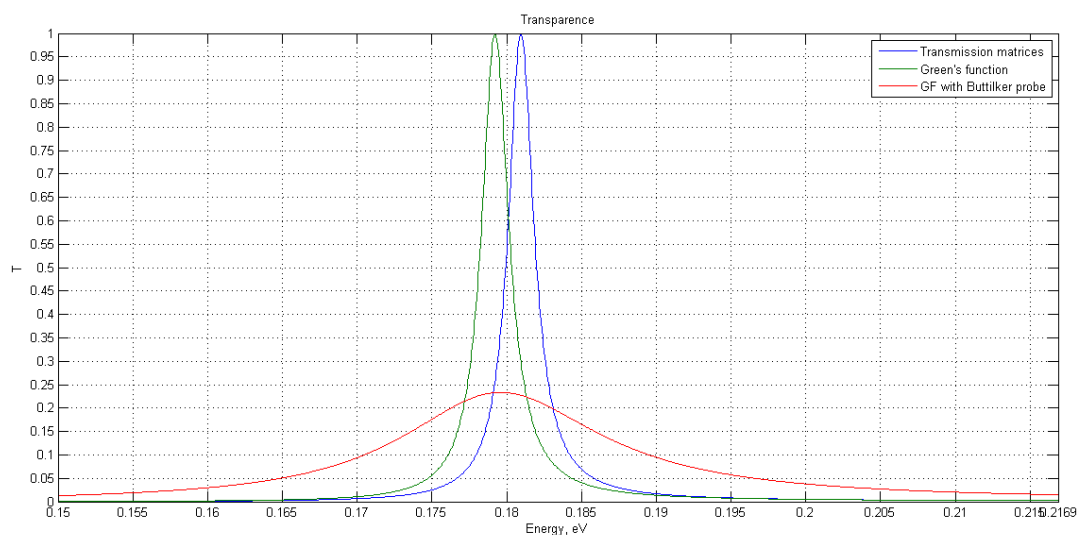


Рис. 2. Прозрачность структуры, полученная разными методами

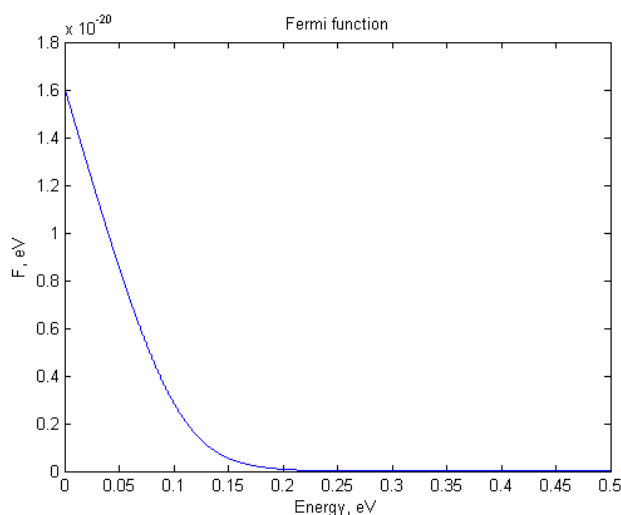


Рис. 3. Функция обеспечения носителями

Пики прозрачности, полученные методом матриц переноса и методом функций Грина, имеют одинаковую ширину и высоту и смещены друг относительно друга по оси энергии. Разность положения пиков составляет 10% от полуширины, что при большой крутизне графика $N(E)$ с приложением напряжения сильно влияет на расхождение вольт-амперных характеристик, несмотря на малый по сравнению с шириной порядок разности положений.

Добавление в центр структуры пробы Буттикера с энергией $\Sigma=0.05$ эВ приводит к сильному уширению пика и уменьшению его высоты. Это соответствует расширению резонансного уровня из-за рассеяния и изменения фазы волновой функции частиц.

Проблема учета рассеяния заключается в выборе численного значения энергии связи пробы Буттикера, количества и места их нахождения. Например, на рис. 4 показано изменение первого пика прозрачности при энергиях пробы 0,00025 эВ, 0,0025 эВ и 0,025 эВ. Характеристики пика сильно зависят от принятой энергии пробы, поэтому в данном методе важно правильно оценить значение этой энергии для достижения корректных результатов моделирования.

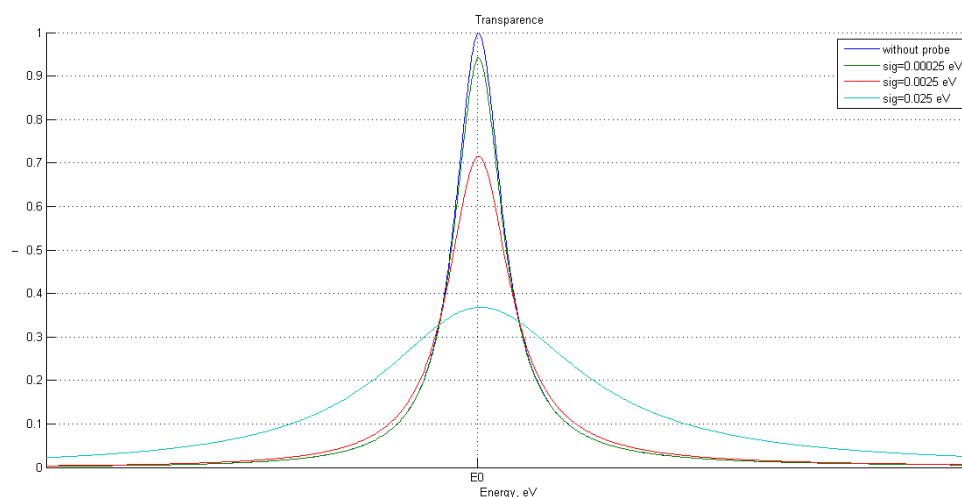


Рис. 4. Зависимость пика прозрачности от энергии пробы

Различные характеристики пиков прозрачности обуславливают отличие в форме вольт-амперной характеристики резонансно-туннельной структуры на основе рассматриваемой гетероструктуры (рис. 5).

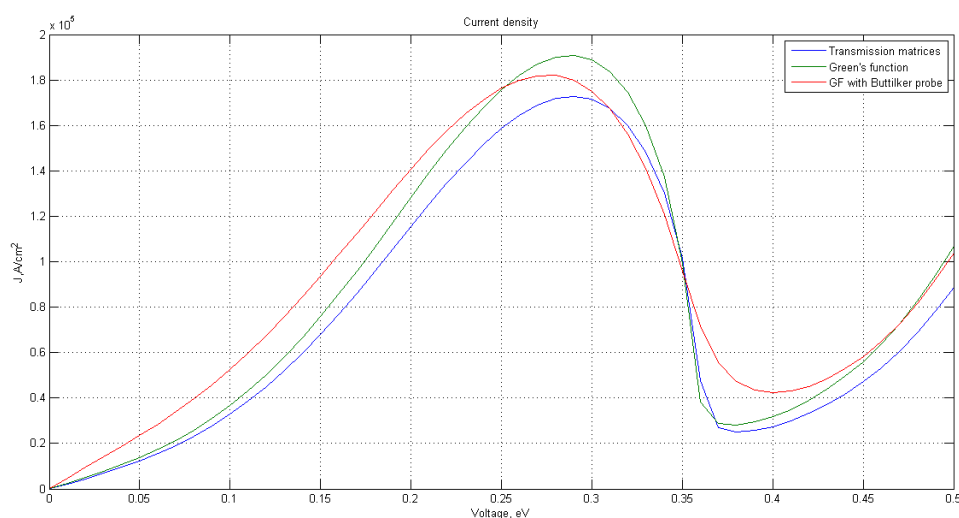


Рис. 5. ВАХ резонансно-туннельной структуры

4. Электронная плотность и общее число носителей.

Для уточнения моделирования параметров гетероструктуры, например, построения потенциального профиля с учетом самосогласованного потенциала, необходима процедура расчета электронной плотности в каждой точке структуры. Существует несколько способов расчета электронной плотности и общего числа заряда в полупроводнике. Для замкнутой системы задача разработки рассматриваемой процедуры довольно проста, однако при переходе к открытой системе «резервуар-канал-резервуар» необходимо выбрать наиболее корректный способ расчета плотности электронов, так как характерные размеры составляющих этой системы значительно отличаются друг от друга.

Классический подход к расчету электронной плотности заключается в вычислении матрицы плотности как функции Ферми от матрицы гамильтониана и оперирует полным гамильтонианом рассматриваемой системы:

$$[\rho] = f_0 ([H] - \mu [I]),$$

где $[\rho]$ – матрица электронной плотности, $[H]$ – гамильтониан системы в матричном виде, μ – электрохимический потенциал (уровень Ферми), $[I]$ – единичная матрица размера гамильтониана. Диагональные элементы матрицы электронной плотности, представленной в некотором базисе (например, базис собственных значений гамильтониана или базис реального пространства), являются плотностями носителей в данном базисе.

Гамильтониан открытой системы имеет очень большой размер из-за относительно большого размера резервуаров, поэтому вычисление плотности по данной формуле представляет собой трудоемкую задачу. Целесообразно преобразование данной формулы к такому виду, при котором можно использовать только матрицы размера гетероструктуры.

Самым простым способом является использование гамильтониана канала с учетом резервуаров путем наложения периодических граничных условий. Таким образом в модель заложено, что волновая функция продолжается за пределами гетероструктуры, однако согласно данному способу, должна повторяться периодически, что не соответствует реальности.

Другой способ преобразования возможен благодаря переходу к функциям Грина. В данном случае сведение задачи для открытой системы к задаче для гетероструктуры с учетом влияния резервуаров производится с помощью матричных операций с функцией Грина полной системы, из которой выражается функция Грина отдельно для канала. Далее матрица плотности приводится к следующему виду:

$$[\rho] = \int_{-\infty}^{+\infty} dE f_0(E - \mu) \delta([EI - H]) = \int_{-\infty}^{+\infty} dE f_0(E - \mu) \frac{[A(E)]}{2\pi}$$

$$[A(E)] = i[G(E) - G^+(E)].$$

Несмотря на необходимость интегрирования по большому диапазону энергий, такое представление позволяет менее трудоемко рассчитать электронную плотность, чем при работе с полными матрицами системы.

На рис. 6 изображено распределение электронной плотности в структуре, рассчитанное обоими методами. Наблюдается заметное различие графиков в приконтактных областях структуры, при этом электронная плотность, рассчитанная по методу функций Грина больше, чем полученная при периодических граничных условиях. Так как на самом деле потенциальный профиль в резервуарах не идентичен профилю гетероструктуры, а характеризуется высокой плотностью состояний, а, следовательно, большим количеством носителей, в том числе инжектируемых в канал, это объясняет высокий рост плотности зарядов вблизи контакта с резервуарами.

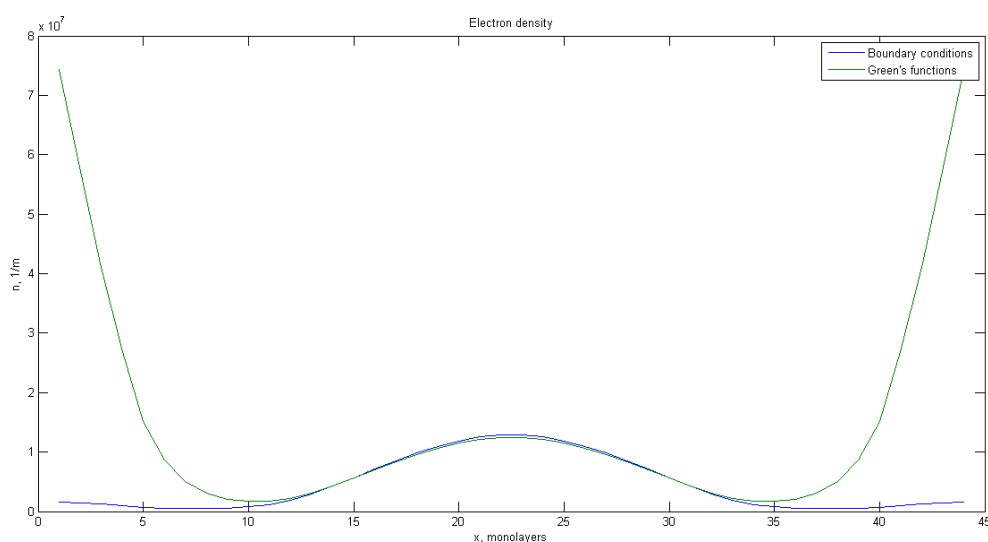


Рис. 6. Электронная плотность

Заключение

Перспективность метода функций Грина в моделировании вольт-амперной характеристики обусловлена возможностью адекватного учета рассеяния носителей заряда внутри гетероструктуры как в рамках модели когерентной среды с помощью проб Буттикера, так и с переходом к некогерентному транспорту. В отличие от коэффициентного подхода, используемого в методе матриц переноса, способ учета рассеяния в методе функций Грина обладает физическим смыслом и, следовательно,

позволит улучшить соответствие расчетных и экспериментальных характеристик. Недостатком этого метода учета рассеяния является сложность выбора правильной численной меры рассеяния, соответствующей реальному физическому влиянию на токоперенос.

Другим преимуществом метода является возможность физически наиболее корректного сведения задачи для открытой системы «резервуар-гетероструктура-резервуар» к задаче только для гетероструктуры, что полезно для расчета электронной плотности в структуре с учетом влияния присоединенных резервуаров и может быть использовано при решении других подобных проблем.

Список литературы

1. Ветрова Н.А., Скороходов Е.А., Шашурин В.Д. К вопросу о надежности радио-электронных средств на наноприборах // Инженерный журнал: наука и инновации, 2013. Вып. 6. Режим доступа: <http://engjournal.ru/catalog/nano/hidden/799.html> (дата обращения 29.05.2015).
2. Федирко В.А., Поляков С.В., Зенюк Д.А. Метод передаточных матриц для моделирования туннельного переноса // Письма в ЭЧАЯ. 2011. Т. 8. №5(168). С. 779-784.
3. Luryi S. Coherent versus incoherent resonant tunneling and implications for fast devices // Superlattices and Microstructures. 1989. Vol. 5(3). P. 375
4. Akkala A.G. NEGF simulation of electron transport in resonant tunneling and resonant interband tunneling diodes: dis. ... master of sc. West Lafayette, Indiana, 2011. 81 p.
5. Ashhadi M., Ketabi S.A., Shahtahmasebi N., Vahedi Fakharab D., Askari M. The role of impurities on the properties of electron transport through the metal/trans-PA/metal system: Green's function approach // Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures. 2011. Vol. 43(4). P. 924-928.
6. Chun-Nan Chen, Sheng-Hsiung Chang, Wei-Long Su, Jen-Yi Jen, Yiming Li Multiband treatment of quantum transport in anisotropic semiconductors: Non-equilibrium Green's function // Mathematical and Computer Modelling. 2013. Vol. 58(1-2). P. 282-287.
7. Haiyan Jiang, Sihong Shao, Wei Cai, Pingwen Zhang Boundary treatments in non-equilibrium Green's function (NEGF) methods for quantum transport in nano-MOSFETs // Journal of Computational Physics. 2008. Vol. 227(13). P. 6553-6573.