

УДК 612.382

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПОВЕРХНОСТНОГО ЗАРЯДА И ПАРАМЕТРОВ РАССЕЙНИЯ НА ВОЛЬТ-АМПЕРНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ РЕЗОНАНСНО-ТУННЕЛЬНОГО ДИОДА

И.И. АБРАМОВ, И.А. ГОНЧАРЕНКО

*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники
П. Бровки, 6, Минск, 220013, Беларусь*

Поступила в редакцию 29 мая 2004

Описана модифицированная численная комбинированная модель резонансно-туннельного диода (РТД), основанная на самосогласованном решении уравнений Шредингера и Пуассона. Кроме эффектов самосогласованного поля, взаимодействия классических и квантовомеханических областей РТД, она позволяет учитывать рассеяние на оптических фонах в квантовой яме, а также наличие поверхностного заряда на границе раздела двух сред. С использованием предложенной комбинированной модели проведено исследование влияния параметров рассеяния и поверхностного заряда на вольт-амперные характеристики (ВАХ) РТД.

Ключевые слова: РТД, ВАХ, рассеяние на оптических фонах, поверхностный заряд.

Введение

В настоящее время РТД является одним из немногих приборов нанoeлектроники, который используется в производстве интегральных схем [1]. Так, на их основе уже созданы различные аналоговые и цифровые схемы. Для успешного применения РТД необходимо глубокое понимание физических процессов, протекающих в них. Это невозможно без теоретических исследований с использованием адекватных моделей. К настоящему времени проведено большое количество таких исследований РТД. Несмотря на это, очень редко, к сожалению, удается получить удовлетворительное согласование результатов моделирования с экспериментальными данными. Анализ показывает, что факторами, которые важно учитывать в моделях, являются самосогласованное поле, взаимодействие между классическими и квантовомеханическими областями прибора, рассеяние. Последнее, в частности, может приводить к существенному изменению вероятности туннелирования носителей заряда в РТД. Одним из наиболее важных механизмов является рассеяние на оптических фонах в области квантовой ямы [2]. В то же время наличие поверхностного заряда на границах раздела двух сред в известных моделях не учитывалось.

Целью данной статьи является исследование влияния различных параметров рассеяния на оптических фонах и поверхностного заряда на ВАХ РТД с применением предложенной комбинированной модели.

Модель

Комбинированная однозонная модель основана на самосогласованном решении уравнений Шредингера и Пуассона. В модели учитывается взаимодействие между квантовомеханиче-

скими и протяженными классическими областями, форма потенциального барьера, сопротивления приконтактных областей, наличие поверхностного заряда на границах раздела двух сред и рассеяние на оптических фонах. Детальное описание модели приведено в работах [3, 4]. В связи с этим здесь отметим лишь наиболее важные моменты для дальнейших исследований, включая проведенные модификации.

Рассмотрим сначала, как учитывается поверхностный заряд в модели. Так, на гетерограницах должен выполняться закон Гаусса–Остроградского:

$$\varepsilon^{\Gamma^-} \varepsilon_0 \frac{\partial \Phi}{\partial x} \Big|_{\Gamma^-} - \varepsilon^{\Gamma^+} \varepsilon_0 \frac{\partial \Phi}{\partial x} \Big|_{\Gamma^+} = \sigma_{sur}, \quad (1)$$

где Φ — электростатический потенциал, верхними индексами Γ^- , Γ^+ обозначены точки слева и справа от гетерограницы, ε^{Γ^-} , ε^{Γ^+} — относительные диэлектрические проницаемости материалов, ε_0 — диэлектрическая проницаемость вакуума, σ_{sur} — плотность поверхностного заряда, определяемая соотношением [5]

$$\sigma_{sur} = qD_s [q(\Phi^{sur} - \Phi^{0S})], \quad (2)$$

где q — заряд электрона, Φ^{sur} — электростатический потенциал поверхности, Φ^{0S} — электростатический потенциал поверхности в условиях равновесия, D_s — плотность состояний. В случае, когда плотность поверхностного заряда постоянна, конечно-разностная аппроксимация уравнения Пуассона на границе раздела упрощается, а именно:

$$\Phi_{i-1} + \Phi_i \left(-1 - \frac{h_i \varepsilon^{\Gamma^+}}{h_{i+1} \varepsilon^{\Gamma^-}} \right) + \Phi_{i+1} \frac{h_i \varepsilon^{\Gamma^+}}{h_{i+1} \varepsilon^{\Gamma^-}} = - \frac{h_i \sigma_{sur}}{\varepsilon^{\Gamma^-} \varepsilon_0} - \frac{qh_i}{2\varepsilon^{\Gamma^-} \varepsilon_0} (h_i (N_D^{\Gamma^-} - n_i^{\Gamma^-}) + h_{i+1} (N_D^{\Gamma^+} - n_i^{\Gamma^+})), \quad (3)$$

где N_D — концентрация ионизированных доноров, n — концентрация электронов, i — номер узла сетки пространственной дискретизации, h_i — шаг сетки. Для более общего случая (2) аппроксимация приведена в [3].

После нахождения самосогласованного потенциала в результате решения уравнений Шредингера и Пуассона на основе комбинированной однозонной модели РТД [3] с целью учета рассеяния дополнительно решается уравнение Шредингера с комплексным гамильтонианом в области квантовой ямы, а именно [2, 4, 6]:

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{m^*} \frac{\partial}{\partial x} \psi \right) - (E - V + iWo) \psi = 0, \quad (4)$$

где \hbar — приведенная постоянная Планка, m^* — эффективная масса электрона, ψ — волновая функция, E — энергия электрона, V — потенциальная энергия, Wo — оптический потенциал ($Wo = \frac{\hbar}{2\tau}$, где $1/\tau$ — скорость рассеяния). Для расчета скорости рассеяния соотношения [2, 6] были модифицированы на случай учета всех уровней, через которые возможно туннелирование электронов, а именно:

$$\frac{1}{\tau_i} = S_{op} \left[1 + \frac{2}{\exp(\hbar\omega_{opi}/k_A T) - 1} \right], \quad E - E_{Ri} \geq \hbar\omega_{opi}, \quad (5)$$

$$\frac{1}{\tau_i} = S_{op} \left[\frac{1}{\exp(\hbar\omega_{opi}/k_A T) - 1} \right], \quad |E - E_{Ri}| < \hbar\omega_{opi}, \quad (6)$$

где S_{op} — коэффициент скорости рассеяния, E_{Ri} — энергия, соответствующая i -му резонансному уровню, $\hbar\omega_{opi}$ — энергия оптических фононов для i -го уровня, k_B — постоянная Больцмана, T — температура. Далее считается, что общая скорость рассеяния складывается из скоростей рассеяния всех резонансных уровней, лежащих в задаваемом диапазоне энергий.

В результате решения уравнения Шредингера (4) определяются волновые функции, на основе которых рассчитывается коэффициент прохождения. Вычисляется он как сумма когерентной T_{coh} и некогерентной T_{incoh} составляющих [2, 4, 6]. Для нахождения T_{incoh} волновые функции представляются в виде

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad (7)$$

$$k(x) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m^*(E - V(x) + iW_0(x))}. \quad (8)$$

В областях наноструктуры вне квантовой ямы k вычисляется на основе выражения (8) с $W_0 = 0$. Далее коэффициент прохождения определяется согласно [3, 4]. В работах других авторов волновую функцию записывают в виде

$$\psi(x) = Ae^{i(\kappa+i\gamma)x} + Be^{-i(\kappa+i\gamma)x}, \quad (9)$$

где γ — коэффициент затухания волновой функции вследствие рассеяния, κ — волновой вектор без учета рассеяния, который может быть рассчитан согласно (8) с $W_0 = 0$. Коэффициент затухания γ вычисляется на основе оптического потенциала [2, 6] и обычно считается постоянной величиной в квантовой яме при заданной энергии [7]. Однако такое предположение, строго говоря, справедливо лишь для прямоугольной квантовой ямы. Следовательно, в моделях [2, 6] не учитывается реальный потенциальный профиль квантовой ямы. Таким образом, предложенная модификация комбинированной модели позволяет учесть произвольный потенциальный профиль квантовой ямы. Программа, реализующая описанную численную модель РТД, была включена в систему моделирования наноэлектронных приборов NANODEV [8], предназначенную для персональных ЭВМ.

Результаты и их обсуждение

С использованием разработанной модели проведен расчет ВАХ двухбарьерного РТД на основе GaAs/AlAs [9]. Его структура состоит из активной области, включающей барьеры толщиной 2 нм и заключенную между ними квантовую яму толщиной 4,5 нм, окруженные спейсерами. Спейсерные области со стороны эмиттерного и коллекторного контактов не легированы и имеют толщину 7 и 10 нм соответственно. В эмиттерной и коллекторной приконтактных областях с размерами 600 нм концентрация примеси равна $2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$, за исключением 100 нм вблизи спейсеров, где она уменьшается до 10^{17} см^{-3} . При моделировании использовались следующие значения электрофизических параметров: высота барьеров 1,116 эВ; $m^* = 0,068m_0$, $\varepsilon = 13,18$ для GaAs, а для AlAs $m^* = 0,172m_0$, $\varepsilon = 10,06$, где m_0 — масса покоя электрона.

Было исследовано влияние на результаты расчета ВАХ двух параметров рассеяния: энергии оптических фононов $\hbar\omega_{op}$ и коэффициента S_{op} . Анализ известных работ показал, что их значения могут различаться. Так, например, в работе [2] $S_{op} = 6,0 \cdot 10^{12} \text{ с}^{-1}$, $\hbar\omega_{op} = 0,32 \text{ эВ}$, а в работе [6] $S_{op} = 1,25 \cdot 10^{13} \text{ с}^{-1}$, $\hbar\omega_{op} = 0,032 \text{ эВ}$. Поэтому в наших исследованиях величины параметров рассеяния варьировались в близких к этим диапазонам значений.

На рис. 1 показаны ВАХ РТД, рассчитанные для различных значений $\hbar\omega_{op}$ при фиксированном $S_{op}=1,25\cdot 10^{13} \text{ c}^{-1}$. Кривая 1 соответствует случаю, когда рассеяние не учитывается. Кривые 2–4 получены для энергий оптических фононов 0,064, 0,032 и 0,016 эВ. Видно, что уменьшение $\hbar\omega_{op}$ приводит к снижению пикового тока и увеличению тока долины по сравнению со случаем, когда рассеяние не учитывается. Следует также отметить, что при $\hbar\omega_{op}=0,016$ эВ наблюдается существенное снижение пикового тока и трансформация формы ВАХ. Контрастности 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 увеличивается и достигает максимального значения для случая, когда рассеяние не учитывается.

На рис. 2 приведены результаты моделирования для различных значений S_{op} . Кривая 1 — ВАХ, рассчитанная без учета рассеяния. Кривые 2–4 (рис. 2) соответствуют случаям, когда S_{op} равны $0,625\cdot 10^{13}$, $1,25\cdot 10^{13}$ и $2,5\cdot 10^{13} \text{ c}^{-1}$. Видно, что увеличение S_{op} приводит к снижению пикового тока и увеличению тока долины. Контрастности ВАХ при этом уменьшаются и составляют: 2,237; 2,156; 2,022 для кривых 2, 3, 4.

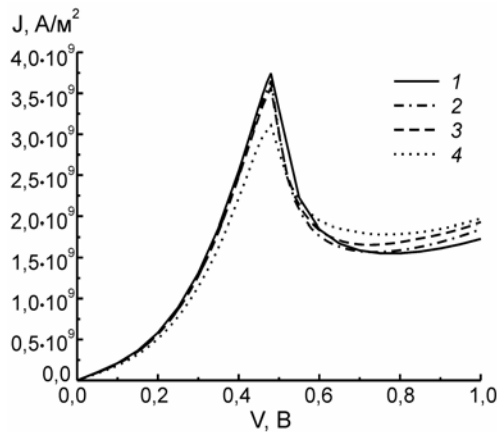


Рис. 1. ВАХ РТД для различных значений энергии оптических фононов: 1 — без учета рассеяния; 2 — $\hbar\omega_{op}=0,064$ эВ; 3 — $\hbar\omega_{op}=0,032$ эВ; 4 — $\hbar\omega_{op}=0,016$ эВ

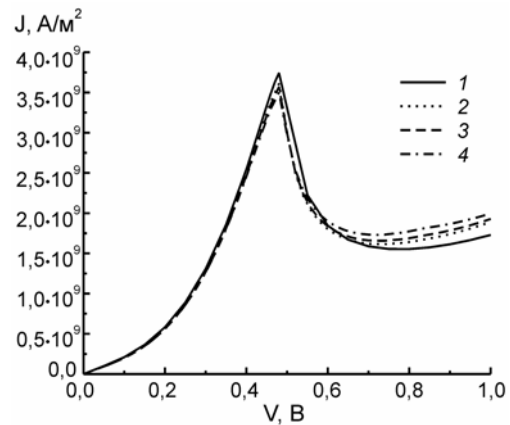


Рис. 2. ВАХ РТД для различных значений коэффициента скорости рассеяния: 1 — без учета рассеяния; 2 — $S_{op}=0,625\cdot 10^{13}$; 3 — $S_{op}=1,25\cdot 10^{13}$; 4 — $S_{op}=2,5\cdot 10^{13} \text{ c}^{-1}$

В то же время исследования учета различного количества резонансных уровней при расчете скорости рассеяния позволили установить, что для рассматриваемого РТД наибольший вклад вносит рассеяние с участием только нижнего уровня. Влияние на ВАХ рассеяния с участием 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 РТД на основе GaAs/AlAs для различных значений плотности поверхностного заряда. Рассеяние при этом не учитывалось с целью исключения возможного влияния данного эффекта. Кривая 1 рассчитана без учета поверхностного заряда, а кривые 2–5 получены для σ_{sur} на границе правого барьера и квантовой ямы, равных $-1\cdot 10^{-5}$, $1\cdot 10^{-5}$, $-1\cdot 10^{-4}$, $1\cdot 10^{-4}$ Кл/м² соответственно. Как следует из результатов, поверхностный заряд оказывает ощутимое влияние на пиковые напряжения ВАХ РТД. Так, уменьшение σ_{sur} с $1\cdot 10^{-4}$ Кл/м² (кривая 5) до $-1\cdot 10^{-4}$ Кл/м² (кривая 4) приводит к увеличению пикового напряжения с 0,43 до 0,54 В. Объяснить это можно тем, что отрицательный заряд на гетерогранице препятствует процессу резонансного туннелирования, а следовательно, пиковое напряжение возрастает.

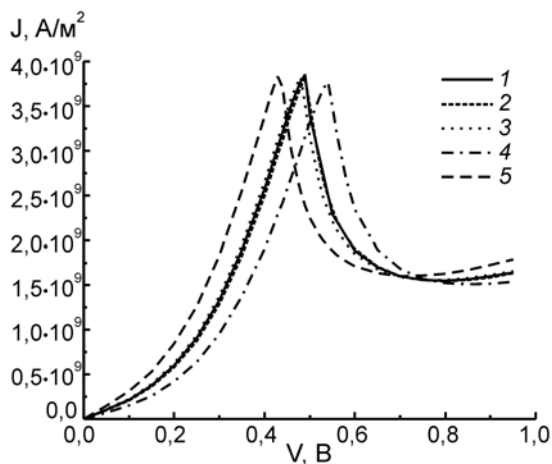


Рис. 3. ВАХ РТД для различных значений поверхностного заряда на границе раздела правого барьера и квантовой ямы: 1 — $\sigma_{sur} = 0$; 2 — $\sigma_{sur} = -1 \cdot 10^{-5}$; 3 — $\sigma_{sur} = 1 \cdot 10^{-5}$; 4 — $\sigma_{sur} = -1 \cdot 10^{-4}$; 5 — $\sigma_{sur} = 1 \cdot 10^{-4}$ Кл/м²

водит к падению пикового тока и увеличению долиного тока и, как следствие, к уменьшению контрастности ВАХ. К аналогичным результатам приводит увеличение коэффициента рассеяния S_{op} . При учете поверхностного заряда на гетерограницах происходит изменение пикового напряжения в зависимости от его величины и знака.

Аналогичные исследования проведены для случаев, когда поверхностный заряд учитывался на других границах, а именно: на границе левого барьера и эмиттерной приконтактной области; левого барьера и квантовой ямы; правого барьера и коллекторной приконтактной области. Полученные результаты показали, что установленная закономерность сохраняется. В этих случаях происходит лишь перераспределение заряда и потенциала в активной области, что не влияет на пиковые напряжения.

Заключение

Проведенные с помощью предложенной модели исследования позволили установить, что уменьшение энергии оптических фононов приводит к падению пикового тока и увеличению долиного тока и, как следствие, к уменьшению контрастности ВАХ.

THE INFLUENCE OF INTERFACE CHARGE AND SCATTERING PARAMETERS ON I-V CHARACTERISTICS OF RESONANT TUNNELING DIODE

I.I. Abramov, I.A. Goncharenko

Abstract

The modified combined numerical model of a resonant-tunneling diode (RTD), based on self-consistent solution of the Schrödinger and Poisson equations is presented. The influence of interface charge and scattering parameters on RTD's I-V characteristics with the use of the model was investigated.

Литература

1. Technology Roadmap for Nanoelectronics / European Commission, IST programme, Future and Emerging Technologies; Ed. R. Compano. 2000.
2. Zohta Y., Tanamoto T. // J. Appl. Phys. 1993. Vol. 74. N 11. P. 6996-6998.
3. Абрамов И.И., Гончаренко И.А. // Электромагнитные волны и электронные системы. 2002. Т. 7, № 3. С. 54-60.
4. Абрамов И.И., Гончаренко И.А. // Низкоразмерные системы-2. Гродно. 2002. С. 21-25.
5. Абрамов И.И. Моделирование физических процессов в элементах кремниевых интегральных микросхем. Мн., 1999.
6. Sun J.P., Haddad G.I. // VLSI Design. 1997. Vol. 3. P. 1-4.
7. Hu Y. // J. Phys. C: Solid State Phys. 1988. Vol. 21. P. L23-L29.
8. Абрамов И.И., Гончаренко И.А., Игнатенко С.А., Королев А.В., Новик Е.Г., Рогачев А.И. // Микроэлектроника. 2003. Т. 32, № 2. С. 124-133.
9. Boykin T.B., Bowen R.C., Klimeck G., Lear K.L. // Appl. Phys. Lett. 1999. Vol. 75, N 9. P. 1302-1304.