

УДК 05.27.01

В.О. Москалюк, канд. техн. наук, А.В. Федяй, О.Ю. Ярошенко

## Прикладна програма для моделювання переносу заряду в квантово-розмірних гетероструктурах з графічним інтерфейсом користувача

В рамках формалізму огинаючих функцій розроблені одно- та дводолинна моделі стаціонарних електронних процесів в квантоворозмірних гетероструктурах. Самоузгодження заряду в квантовій області досягається використанням методом Хартрі, Г-Х-розсіювання на гетероінтерфейсах враховується за допомогою сталої міжзонної взаємодії. Розсіювання на оптичних фонах враховано шляхом введення уявної частини в Гамільтоніан, а також шляхом поділу всього струму через структуру на струм через когерентний та послідовний канали. Дружній інтерфейс, який реалізовано в середовищі MatLab, дозволяє створювати будь-яку послідовність гетерошарів для аналізу більшості сполук  $A^III B^V$ .

**One- and two-band models of stationary electronic processes in nanoscaled heterostructures were developed, using envelope function formalism. Selfconsistency of quantum charge were achieved by Hartree method; Г-Х mixing at the hetero-interfaces was included using conception of intervalley coupling constant. Optical phonon scattering were taken into account via introduction of complex part into Hamiltonian, as well as by means of partition of a whole current into coherent and sequential tunneling channels. User-friendly interface realized in Matlab allows to create any consequence of heterolayers for analysis of most of the  $A^III B^V$  compounds.**

**Ключові слова:** моделювання квантово-розмірних структур, сполуки  $A^III B^V$ , метод огинаючих функцій, графічний інтерфейс користувача, дводолинна модель.

### Вступ

Моделювання квантоворозмірних структур з поперечним переносом заряду історично пройшло декілька етапів розвитку. Формалізм огинаючих функцій [1], методи функцій Гріна та Вігнера [2,3], та інші формалізми були застосовано в різний час різними авторами з моменту виходу піонерської роботи [4] до цього часу. Шлях підвищення точності та адекватності моделей пролягав через розробку процедури врахування об'ємного заряду, уточнення зонної структури відповідних сполук, а також урахуванні процесів розсіювання [5]. Одно-

часне застосування усіх вказаних чинників призводить до непомірного ускладнення чисельної процедури моделювання. За таких умов мають бути застосовані адекватні чисельні методи. У даній роботі автори керувались двома принципами: вірне формулювання чисельних алгоритмів, що враховують фізичну природу процесів (1) та використання швидких та стійких чисельних методів (2).

Серед програмних пакетів для імітаційного моделювання (simulation), що розповсюджуються на безоплатній основі можна виділити *Simulation Package "WinGreen"* [6], розробка якого почалася в 2005 р. в *Julich*, Німеччина. Цей пакет дозволяє моделювати квантоворозмірні гетероструктури з поперечним переносом заряду; формалізм, який використаний для побудови моделі – метод функцій Гріна [2]. Номінально пакет розрахований на те, щоб забезпечувати моделювання в одно- та 10-зонному наближенні. Однак 10-зонне моделювання до цього часу не досягло рівня будь-якої адекватності. Наші чисельні експерименти показали, що у 10-зонному наближенні як коефіцієнт передачі, так і, як наслідок, розрахований струм через гетероструктуру знаходяться поза межами здорового глузду. В цьому можна перекоонатися, безпосередньо спробувавши змоделювати у *WinGreen*, наприклад, резонансно-тунельний діод у 10-зонному наближенні. Іншим недоліком пакету є відсутність механізму врахування розсіювання (змішування електронних станів) на гетероінтерфейсах, а також неможливість врахування полярного оптичного розсіювання, що зазвичай є найважливішим видом розсіювання у таких структурах.

Таким чином, розробка альтернативного пакету для моделювання вказаних структур є актуальною. Слід зауважити, що дана робота – перша спроба створення подібного пакету в цій країні.

### 1. Фізична модель

#### 1.1. Поділ на області.

Вся структура розбивається на два види областей: резервуари та квантову область. Електрони в резервуарах та квантовій області знаходяться в суттєво відмінних умовах, тому описуються по-різному. Перелік властивостей цих областей у одноступінному наближенні, обумовлених ними при-

пущень та формул, що з них випливають, подано в таблиці до рис. 1, де введено позначення:  $m^*$  – ефективна маса електрона у  $\Gamma$ -долині матеріалу резервуарів,  $e$  – елементарний заряд,  $k_B$  – стала Больцмана,  $\hbar$  – стала Планка,  $E_z$  – поздовжня енергія електрона,  $E_z = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*}$ , де  $k_z$  –  $z$ -проекція хвильового вектора електрона,  $k_{\perp}$  – проекція хвильового вектора на площину, перпендикулярну напрямку росту гетероструктури,  $E_F$  – рівень Фермі електронів у резервуарах, відрахований від дна зони провідності у відповідному резервуарі;  $U = E_C + U_H$  – потенціальна енергія електрона, що є сумою потенціальної енергії решітки  $E_C$  та потенціальної енергії Хартрі  $U_H$ ,  $U_{i0(i5)}$  – зна-

чення потенціальної енергії електрона на лівій (правій) границі квантової області.

Подробиці отримання формул з рис. 1 можна знайти в [7]. Моделі такого типу іноді називаються комбінованими [1].

**1.2. Хвильові функції електронів.**

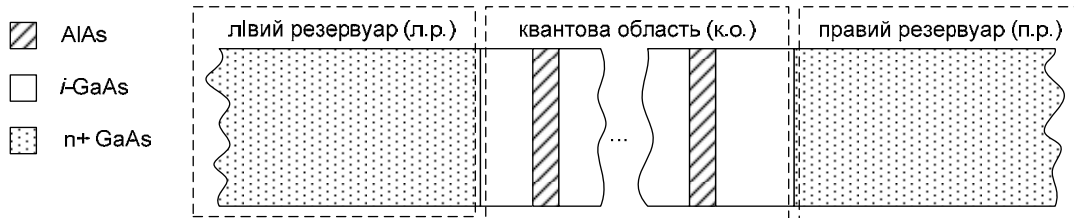
Знання хвильових функцій електронів необхідно для знаходження концентрації електронів у квантовій області, що впливає з рис. 1.

Рівняння Шредінгера для огинаючої функції в  $\Gamma$ -долині має вигляд:

$$\hat{H}\psi_{\Gamma} = E_z\psi_{\Gamma}, \text{ де}$$

$$\hat{H}_{\Gamma} = \hat{T} + E_C(z) + U_H(z) + \alpha\delta(z_i)\psi_{\chi} + iW_{op} \quad (1)$$

в якому:



Параметр	Значення в л.р.	Значення в к.о.	Значення в п.р.
Концентрація донорів	$N_D=10^{22} \dots 10^{24} \text{ м}^{-3}$	$N_D=0$	$N_D=10^{22} \dots 10^{24} \text{ м}^{-3}$
Матеріальна основа	$n^+$ GaAs	$i$ -GaAs, $i$ -AlAs	$n^+$ GaAs
Електронний газ (е.г.)	тривимірний (3D)	квазі-двовимірний (2D)	тривимірний (3D)
Стан е.г.	локальна рівновага	нерівноважний	локальна рівновага
Закон дисперсії	$E = U(z) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m^*}$ , $k_{\perp} = \sqrt{k_y^2 + k_z^2}$	$E = U(z_{0(5)}) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m^*}$ , якщо $k_z > 0$ ( $k_z < 0$ )	$E = U(z) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m^*}$
Хвильова природа електрона враховується	через ефективну масу та зонну структуру	через ефективну масу, зонну структуру та <b>огинаючу хвильової функцію</b>	через ефективну масу та зонну структуру
Середня довжина вільного пробігу	менша за характерні розміри	більша за характерні розміри	менша за характерні розміри
Механізм руху електронів	дрейф, дифузія	Балістичний, квазібалістичний	дрейф, дифузія
Концентрація електронів	$n_{L(R)} = N_c' \int_{U_{i0(i5)}}^{\infty} \frac{ \psi_{L(R)}(E_z(k_z), z) ^2}{\sqrt{E_z - U_{i0(i5)}}} \ln \left( 1 + \exp \left( -\frac{E_z - (E_F + U_{i(N)})}{k_B T} \right) \right) dE_z,$ <p style="text-align: center;">де <math>N_c' = \frac{\sqrt{2}(m^*)^{3/2} k_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3}</math></p> $n_i = N_c \int_{U_i}^{\infty} \frac{\sqrt{E - U_i}}{1 + \exp \left( \frac{E - (E_F + U_{i(N)})}{kT} \right)} dE, \quad \text{де } N_c = 4\pi(2m^* / \hbar^2)^{3/2}$		

Рис. 1. До поділу на резервуари та квантову область

$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m_{\Gamma}(z)} \frac{\partial}{\partial z}$  оператор кінетичної енергії;

$E_c(z)$  – дно зони провідності для  $\Gamma$ -долини;

$U_H$  – потенціал Хартрі;  $\alpha$  – стала міждолинної

взаємодії (eV·Å);  $\psi_{\chi}$  – огибаюча хвильової фун-

кції в  $X$ -долині зони провідності;  $\delta(z_i)$  – дельта-

функція Дірака,  $z_i$  – координати гетерограниць;  
 $W_{op}$  – так званий оптичний потенціал, який мо-  
 делює процеси виходу електронів з когерентно-  
 го каналу тунелювання завдяки взаємодії з по-  
 лярними оптичними фононами.

В (1) враховано самоузгодження методом Хартрі [8], змішування станів на гетероінтерфейсах – відповідно до [9, 10, 11] полярне оптичне розсіювання – у відповідності до [12, 13].

Аналогічний (1) вид має також Гамільтоніан для рівняння Шредінгера огибаючої функції електрона з  $X$ -долини.

Припускаючи, що в резервуарах електронні хвилі мають вигляд плоских хвиль, формують відповідні граничні умови для рівняння Шредінгера. Такий підхід називається “*quantum transmitting boundary method*” (QTBM) [14].

Хвильова функція електронів у дводолинній моделі представляється у вигляді біспінора,  $\psi = [\psi_{\Gamma} \ \psi_{\chi}]^T$ ; між його компонентами відбувається змішування на гетерограниці, як описано в [9,10]. Вважається, що в резервуарі, з якого інжектується електрон, усі електрони знаходяться виключно в  $\Gamma$ -долині, відтак у лівому резервуарі  $\psi_{\chi} = 0$ . Решта граничних умов звичайна для QTBM [14].

### 1.3. Струм через квантову область

Розраховується по адаптованій формулі Тсу-Есакі [4] з урахуванням когерентного та некогерентного каналів переносу заряду:

$$J = \frac{2m^* e k_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3} \int_{\max(U_{i5}, U_{i0})}^{\infty} T(E_z) D(E_z) dE_z, \quad (2)$$

де  $T(E_z)$  – ймовірність тунелювання електрона, що має складову поздовжньої енергії  $E_z$ , через квантову область,

$$D(E_z) \equiv \ln \left( \frac{1 + \exp\left(-\frac{E_z - (E_{\Phi} + U_1)}{k_B T}\right)}{1 + \exp\left(-\frac{E_z - (E_{\Phi} + U_N)}{k_B T}\right)} \right) - \text{так звана}$$

«supply function» [15]. Адаптованою формула (2) називається тому, що  $T(E_z)$  включає в себе як когерентну, так і послідовну складову струму

через квантову область:  $T(E_z) = T_c(E_z) + T_s(E_z)$ , кожна з яких для однодолинної моделі визначається у відповідності до [1, 13], в той час як для дводолинної моделі  $T_c(E_z) = T^{\Gamma X} + T^{\Gamma X}$ , де складові знаходяться, як описано в [10].

## 2. Формулювання та реалізація чисельних методів

Як було сказано у вступі, реалізація моделі на персональному комп'ютері потребує використання швидких та стійких алгоритмів.

Для знаходження інтегралів  $n_{L(R)}$  (рис. 1) та  $J$  (формула 2) було, по-перше, змінено верхню нескінченну границю на  $E_{\Phi} + \max(U_{i0(i5)}) + 10 \cdot k_B T$ , можливість чого слідує з того, що  $0 < T(E_z) \leq 1$ , а  $D(E_z)$  досить швидко прямує до 0 з ростом  $E_z$ . По-друге, враховуючи, що функція  $T(E_z)$  проявляє сильно виражений резонансний характер, використано рекурсивний алгоритм Сімсона з автоматичним підбором кроку інтегрування. У *MatLab* цей алгоритм реалізує функція *quad*. Крім того, ця функція була змінена: вона була адаптована для роботи з аргументом у вигляді вектора. Така необхідність зумовлена наявністю у підінтегральному виразі для  $n_{L(R)}$  функції від координати (хвильової функції  $\psi_{L(R)}(E_z(k_z), z)$ ), що знаходиться для певної енергії відразу в усіх дискретних точках  $z_i$ , на які розбито простір структури. Тому й інтеграл  $n_{L(R)}$  з метою економії часу має знаходитись відразу у всіх точках  $z_i$ , тобто маємо, фактично, вектор інтегралів.

Слід зауважити, що стандартна функція *MatLab quad* не є оптимальною для інтегрування такого класу функцій, в яких є члени виду  $1/\sqrt{E_z}$  (якими є підінтегральна функція в  $n_{L(R)}$ ); нами ведеться пошук кращих методів.

Окрім того, для взяття інтегралу  $J$  згідно формули (2) до переліку вихідних параметрів функції *quad* додано вектор енергій, у яких проводилося оцінювання підінтегральної функції. Цей вектор потім використовувався, щоб знайти ймовірність проходження електроном квантової структури саме тих енергій, які є його елементами.

Кінцево-різницева схема, що відповідає рівнянню Шредінгера для однодолинної моделі [7] та двох пов'язаних між собою рівнянь Шредінгера в дводолинній моделі [16] є консервативною, отриманою інтегро-інтерполяційним методом [17], клас точності – другий. У поточній версії програмного пакету використана рівномірна просторова сітка; ведеться розробка схеми з автоматичним підбо-

ром кроку. Отримані системи лінійних алгебраїчних рівнянь розв'язуються: в однодолинній моделі методом Томаса [18], у дводолинній – прямим методом, що враховує вигляд матриці коефіцієнтів. У останньому випадку при програмній реалізації використовується також поняття розріджених матриць (*sparse matrix*), що дозволяє не запам'ятовувати нульові елементи, кількість яких в порядку разів більша, ніж ненульових.

### 3. Структура інтерфейсу прикладної програми

У відповідності з фізичною моделлю розроблено графічний інтерфейс. На рис. 2 зображено розроблений інтерфейс прикладної програми, у якому відкрита вкладка «Квантова область».

Усі три вкладки «Эмитер» (тобто лівий резервуар); «Квантовая область», та «База» (тобто правий резервуар) організовані однаково. У них вказуються параметри кожного шару:

1. Молярна доля відповідного елементу у потрійних структурах (до прикладу, частка Al у сполуці  $Al_xGa_{1-x}As$ );

2. Сама матеріальна основа – «Выбор материала» (зазвичай це потрійні сплави, тому позначаються як AlGaAs, AlGaIn, InGaAs і т.д.);

3. Ширина кожного шару,  $d$ ;

4. Концентрація електронів у кожному з шарів;

5. Параметр розсіювання  $W_{op}$ ,

Для зручності створення багат шарових структур вкладки забезпечені кнопками «видалити рядок», «додати рядок» і т.д.

Матеріальна основа структури та молярна доля відповідного елементу в ній визначає фізичні та електричні властивості кожного шару.

В однодолинній моделі це такі параметри:

- ефективна маса електрона в Г-долині; діелектрична проникність відповідної сполуки;
- розриви зони провідності в Г-долині;
- параметр розсіювання.

У дводолинній моделі до вищевказаних параметрів додаються такі:

- ефективна маса електрона в Х-долині;
- відстань між Х- та Г-долинами;
- параметр міждолинної взаємодії.

Ці файли являють собою файли типу \*.dat, з яких відбувається зчитування параметрів основною програмою. Слід зазначити, що користувач може сам створювати такі файли для потрібних сполук.

Вкладка «Общие установки» визначає параметри чисельного алгоритму та величини, які буде розраховано та відображено, діапазон їх зміни та ін.

Результати роботи програми відображуються у вкладці «Графики». Доступні для відображення наступні величини:

а) розподіли в просторі:

- потенціалу;
- концентрації;
- густини електронних станів за енергією;
- повної функції розподілу за енергією;

б) розподіл за енергією:

- коефіцієнту проходження при певних значеннях напруги;

в) вольтамперна характеристика.

Вигляд такої вкладки за умови розрахунку всіх параметрів показано на рис. 3.

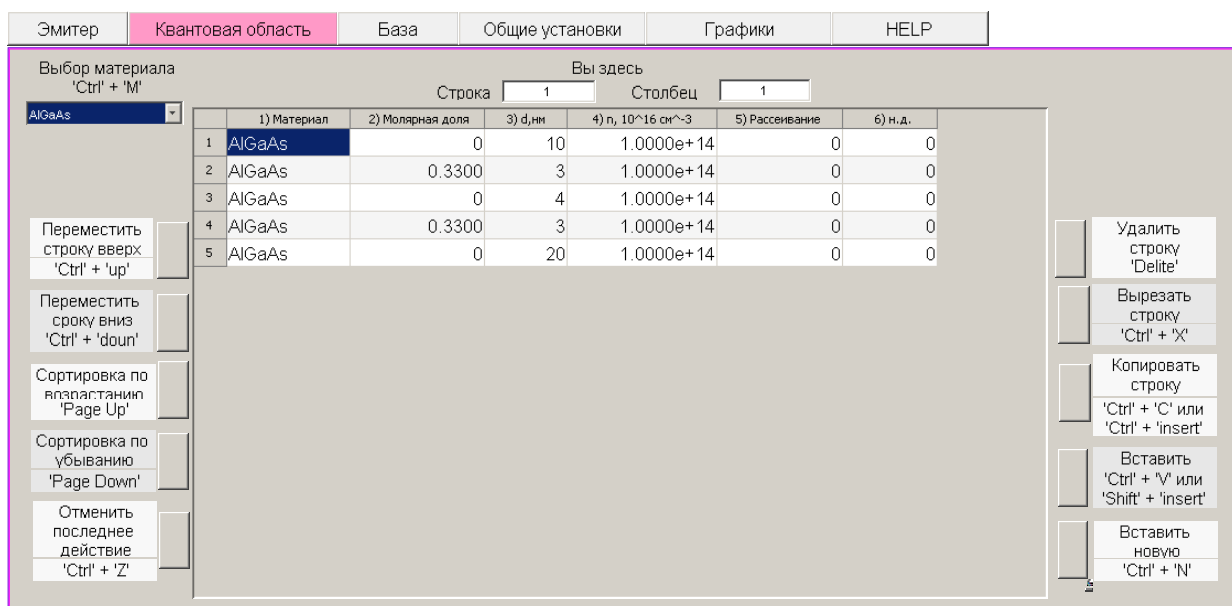


Рис. 2. Відкрита вкладка «Квантова область»

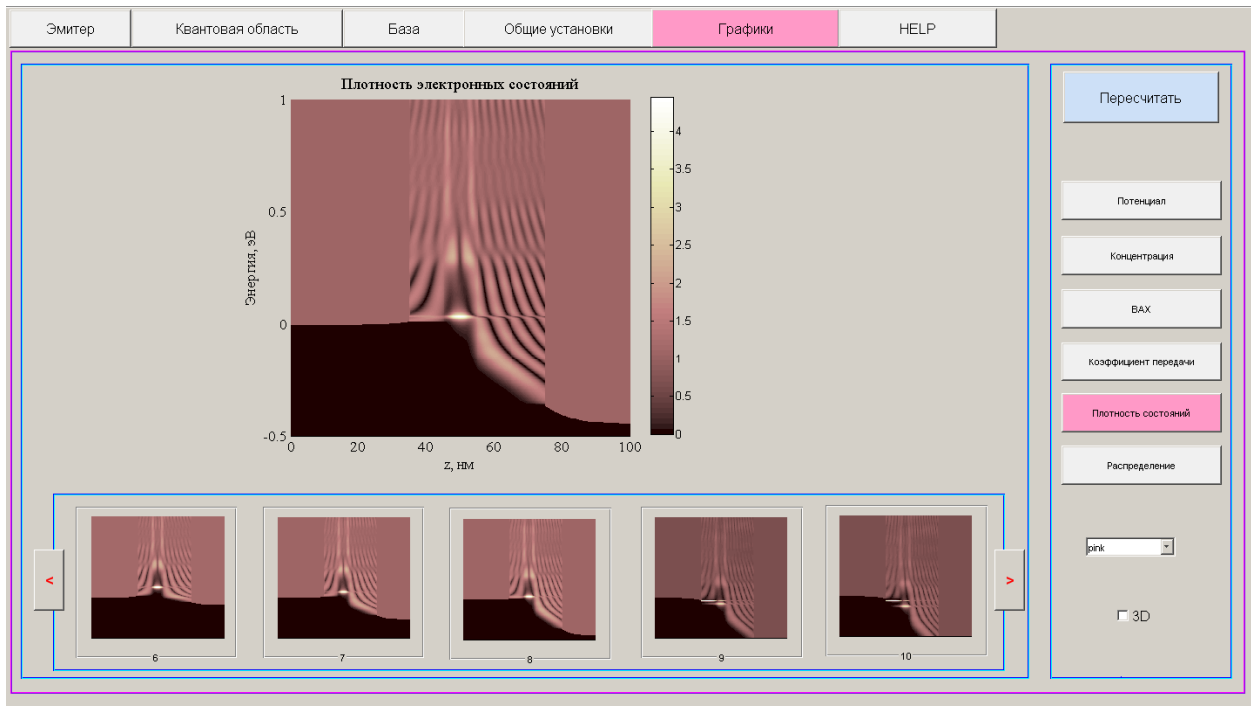


Рис. 3. Відкрита вкладка «Густина електронних станів»

Як бачимо, у верхній частині показано у крупному масштабі відповідний графік (густина станів у резонансно-тунельному діоді, в даному випадку), а нижче в дрібному масштабі – сусідні з ним за напругою графіки для того, щоб можна було оцінити динаміку зміни величини зі зміною напруги. Подібну структуру мають також інші графіки.

## Висновки

Розроблена модель квантоворозмірних напівпровідникових гетероструктур з поперечним переносом заряду дозволяє описувати електронні процеси, що в них відбуваються в одно- та двозонному наближенні. Модель, що описана в даній роботі переважно шляхом посилань на попередні роботи, увібрала в себе найкращі риси спроб моделювання квантоворозмірних структур (зокрема РТД) з використанням формалізму огибаючої функції. Більшість переваг (або недоліків) запропонованої моделі важко виділити, оскільки достеменно невідомо, як саме математично та програмно реалізувалися моделі попередніх авторів. Відомо, однак, що в роботі [16] квантовомеханічно описувалася лише квантова яма РТД, тоді як у даній роботі ми описуємо і квантові ями і бар'єри квантовомеханічно. Інші автори [19] використовували наближення повністю когерентного електронного транспорту, що робить неможливим врахування процесів розсіювання у квантовій області. У цих аспектах описана тут модель є більш адекватною.

Крім того, розроблений алгоритм адаптовано для того, щоб моделювати не тільки двобар'єрні, але й багатобар'єрні структури, включаючи над-решітки. Це єдина відома на сьогоднішній день прикладна програма такого призначення, що виконана із застосуванням формалізму хвильових функцій та має графічний інтерфейс.

Дружній інтерфейс, що його розробила авторка, дозволяє без зайвих зусиль експериментувати з новітніми напівпровідниковими матеріалами на звичайному ПК, що є підтвердженням ефективності обраних для програмної реалізації чисельних методів.

На даному етапі програма проходить верифікацію та тестування, тому ми пропонуємо усім бажаним скористатися нею поки що в учбових цілях, а також запрошуємо прийняти участь в її удосконаленні. Вихідні коди ми лишаємо відкритими.

Поточну версію прикладної програми можна завантажити з сайту кафедри фізичної та біомедичної електроніки НТУУ «КПІ»: <http://www.phbme.ntu-kpi.kiev.ua/~feday>. Для її роботи необхідно мати *MatLab* 2009.

## Література

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 reso-

- nant 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 моделирования поперечного транспорта 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 33<sup>rd</sup> International Spring Seminar on Electronics Technology “ISSE 2010”. – ISBN 978-1-4244-7849-1.
  8. *Науен 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  $\Gamma$ -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. *Zohra 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. 17<sup>th</sup> 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.