

УДК 538.91

УЧЁТ МЕЖЭЛЕКТРОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ПРИ РАСЧЁТЕ ГИСТЕРЕЗИСНЫХ ЯВЛЕНИЙ ТОКОПЕРЕНОСА В КАНАЛЕ АРСЕНИД-ГАЛЛИЕВЫХ РЕЗОНАНСНО-ТУННЕЛЬНЫХ ДИОДОВ

© В. Д. Шашурин, Н. А. Ветрова, Е. В. Куимов, С. А. Мешков,
М. О. Макеев

*Московский государственный технический университет им. Н. Э. Баумана,
105005, Москва, ул. 2-я Бауманская, 5, стр. 1
E-mail: ekjmo@mail.ru*

При проектировании устройств терагерцевого диапазона на основе резонансно-туннельных структур с рабочей точкой на участке отрицательной дифференциальной проводимости возникают серьёзные проблемы в прогнозировании вольт-амперных характеристик таких структур. Решается задача прогнозирования вольт-амперных характеристик резонансно-туннельных диодов на участке отрицательной дифференциальной проводимости для устройств преобразования сигналов. Предложен метод расчёта гистерезиса на вольт-амперных характеристиках резонансно-туннельных диодов. Разработанная модель отличается от ранее применявшихся подходов использованием для описания гистерезиса стационарного варианта формализма волновых функций, в то время как ранее применялись нестационарные уравнения формализма функций Вигнера или квантовой гидродинамики. Показано, что гистерезис является следствием межэлектронного взаимодействия в квантовом канале резонансно-туннельной структуры, которое может быть учтено с помощью метода самосогласованного поля. Рассмотрены три типа начальных условий для системы уравнений Шрёдингера — Пуассона, и показано, что появление гистерезиса на вольт-амперных характеристиках резонансно-туннельных диодов достигается применением специальных начальных условий при процедуре самосогласования. Выяснено, что гистерезис проявляется в стационарном случае постоянного напряжения, что возможно предсказать путём вариации начальных условий при проведении процедуры самосогласования.

Ключевые слова: математическое моделирование, резонансно-туннельные структуры, самосогласованный потенциал, концентрация электронов, осцилляторы, полупроводниковые эпитаксиальные слои, беспроводная коммуникация.

DOI: 10.15372/AUT20240610

EDN: ZSHEZB

Введение. Одним из активно развивающихся направлений современной фотоники является интеграция оптоэлектроники и микроволновой радиоэлектроники, позволяющая создавать системы передачи и обработки информации с недостижимыми ранее параметрами. В связи с этим приоритетным направлением развития науки и техники в данной области в России является разработка отечественной сверхбыстродействующей элементной базы и, прежде всего, активных электрооптических и оптоэлектронных элементов.

Очевидно, что разработка таких элементов требует создания математических моделей, позволяющих по параметрам конструкции и технологии производства прогнозировать их эксплуатационные характеристики.

Примером таких перспективных активных элементов является резонансно-туннельный диод (РТД) на основе многослойных наногетероструктур AlGaAs. Принцип работы РТД основан на физическом эффекте резонансного туннелирования электронов в гетероструктуре диода, толщины слоёв которой находятся в диапазоне от единиц до десятков нанометров [1–8]. Перспективность РТД для современной оптоэлектроники обусловлена следующими обстоятельствами:

— РТД функционирует в нужном для технических приложений диапазоне температур и других внешних воздействий;

— технологии и оборудование для производства РТД отработаны в рамках технологий микро- и нанoeлектроники;

— предельная частота, на которой работает РТД, достигает вплоть до единиц ТГц;

— изменяя параметры слоёв гетероструктуры (толщину, химический состав), можно управлять формой вольт-амперной характеристики (ВАХ) и создавать диод с оптимальной для конкретного вида нелинейного преобразования формой ВАХ.

В работах [4–7], в частности, показано, что возможность оптимизации формы ВАХ, а также наличие на ней падающего участка позволяют создавать целый ряд нелинейных преобразователей радиосигналов с улучшенными характеристиками на основе РТД. Набор возможных нелинейных преобразований с применением РТД очень широк и включает в себя генерацию радиосигналов, частотную модуляцию, смешивание, амплитудное детектирование, выпрямление и др.

Однако на сегодняшний день задача оптимизации формы ВАХ остаётся нерешённой. Даже построение модели ВАХ РТД, способной качественно прогнозировать форму ВАХ, представляет собой трудноразрешимую проблему, не говоря уже о количественных оценках [9]. Дело в том, что ВАХ РТД имеет ряд артефактов, физика которых до сих пор остаётся не до конца понятной, вследствие чего прогнозирование появления этих артефактов и тем более оценивание их количественно является трудной задачей. Одним из таких артефактов является гистерезис [10] — зависимость силы тока не только от напряжения внешнего поля в текущий момент времени, но и от «предыстории» изменения напряжения. При этом расчёт ВАХ РТД, как указывалось выше, необходим для реализации одного из его важнейших преимуществ по сравнению с другими типами диодов — возможности проектирования топологии РТД под требуемую ВАХ. Таким образом, целью данной работы является построение модели ВАХ РТД, способной предсказывать появление гистерезиса для задач проектирования устройств на основе РТД. Далее рассмотрим суть данной проблемы подробнее.

Методы. Одним из самых распространённых методов расчёта плотности тока через резонансно-туннельную структуру (РТС) является метод волновых функций, которые находятся из уравнения Шрёдингера для открытой системы [11]:

$$\left[-\frac{\hbar}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m^*(z)} \frac{d}{dz} - E + E_c(z) - q_e \varphi(z) + \Sigma(z) \right] \psi(z) = S(z), \quad (1)$$

где $\hbar$ — постоянная Дирака; q_e — элементарный заряд; $m^*(z)$ — эффективная масса электронов; E — энергия электронов; $E_c(z)$ — дно зоны проводимости; $\varphi(z)$ — потенциал самосогласованного поля (ПСП); $\Sigma(z)$ — оператор, описывающий отток электронов из активной области структуры в резервуары; $S(z)$ — функция, описывающая инжекцию электронов в активную область; $\psi(z)$ — огибающие волновые функции электронов.

Плотность тока рассчитывается с помощью формулы туннельного тока [12, 13]:

$$J(V) = \frac{q_e}{\hbar} \int_{E_s}^{\infty} T(E, V) D(E, V) dE, \quad (2)$$

где $T(E, V)$ — коэффициент туннельной прозрачности, $D(E, V)$ — функция снабжения, E_s — минимальная энергия в зоне проводимости истока.

Коэффициент туннельной прозрачности связан с волновой функцией следующим соотношением [12]:

$$T(E, V) = |\psi(l)|^2 \frac{|k_R|}{|k_L|} \frac{|m_L|}{|m_r|}, \quad (3)$$

где l — координата границы активная область — сток, k_R — волновое число в стоке, k_L — волновое число в истоке, m_r — эффективная масса электронов в стоке, m_L — эффективная масса электронов в истоке.

Важный фактор, влияющий на ВАХ РТД, — межэлектронное взаимодействие. Обычно методом его учёта является метод самосогласованного поля, согласно которому ПСП определяется из уравнения Пуассона

$$\frac{d}{dz} \varepsilon(z) \frac{d}{dz} \varphi(z) = q_e [n(z) - N_D(z)], \quad (4)$$

где $\varepsilon(z)$ — диэлектрическая проницаемость, $N_D(z)$ — концентрация донорных примесей, $n(z)$ — концентрация электронов.

Концентрация электронов зависит от волновых функций и рассчитывается по формулам из [12], где можно найти подробное описание процедуры самосогласования. Кратко опишем её суть.

Потенциал согласованного поля находится с помощью итерационного решения системы интегрально-дифференциальных уравнений, в которую входят уравнения Шрёдингера и Пуассона, а также выражения для концентрации электронов. Перед запуском цикла задаётся начальное приближение ПСП, при расчёте которого обычно в качестве его начального приближения выбираются линейное падение потенциала в активной области и постоянный потенциал в резервуарах. Затем в каждой итерации сначала вычисляются волновые функции, потом — концентрация электронов, далее решается уравнение Пуассона, из которого находится следующее приближение ПСП. Итерационная процедура останавливается либо при проведении определённого числа итераций, либо до достижения разницы между двумя последними приближениями ПСП заданного порогового значения. Ниже мы покажем, как результаты расчёта ВАХ с помощью метода самосогласованного поля зависят от выбора начального приближения ПСП.

Результаты. На рис. 1 приведены результаты расчёта ВАХ в рамках формализма волновых функций с учётом межэлектронного взаимодействия при разных начальных приближениях ПСП. Вольт-амперная характеристика, соответствующая повышающемуся напряжению, получена, когда в качестве начального приближения берётся ПСП при меньшем напряжении, что трактуется как расчёт ВАХ при изначально заполненной квантовой яме РТД. Вольт-амперная характеристика, соответствующая понижающемуся напряжению, получена, когда в качестве начального приближения берётся ПСП при большем напряжении, что трактуется как расчёт ВАХ при изначально пустой яме. Также была рассчитана ВАХ (когда в качестве начального условия выбран ПСП, линейный в активной области и постоянный в резервуарах), которая совпадает с ВАХ, соответствующей понижающемуся напряжению, так как такое начальное условие отвечает структуре, в которой отсутствуют носители заряда.

Обсуждение. Процедура самосогласования напоминает расчёты методом установления: запуском временной модели на довольно большом участке времени, достаточном для установления стационарного состояния. Вольт-амперная характеристика РТД, рассчитанная таким способом, зависит от выбора начального условия при решении нестационарной системы уравнений Шрёдингера — Пуассона. Таким образом, на ВАХ РТД, полученных

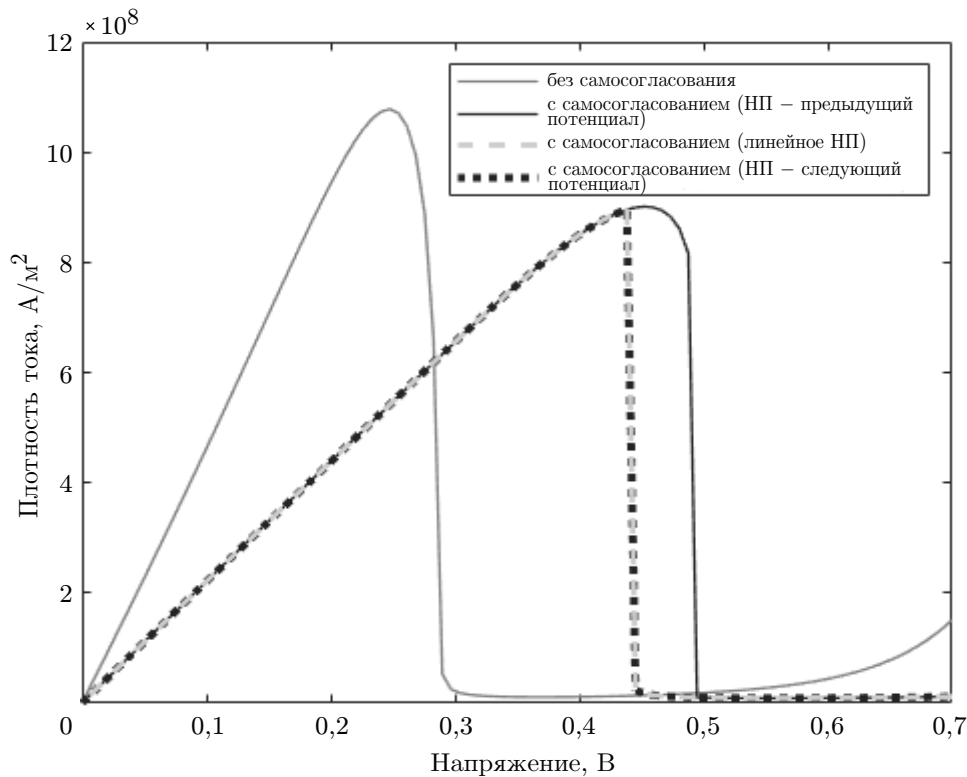


Рис. 1. Стационарные ВАХ РТД, полученные в рамках формализма волновых функций. Самосогласованные ВАХ приведены при различных начальных приближениях (НП) самосогласованного потенциала: линейного потенциала и потенциала при предыдущем и следующем значениях напряжения

с помощью метода установления, присутствует гистерезис, который во временных моделях [14–17] проявляется как зависимость ВАХ РТД от знака изменения напряжения [10]. Объясняется это тем, что при повышающемся напряжении резонансный уровень попадает в запрещённую зону истока при заполненной электронами яме, из-за чего компонента энергии резонансного уровня, отвечающая за межэлектронное взаимодействие, выше, чем при понижающемся напряжении, так как в этом случае на момент перехода энергии резонансного уровня из запрещённой зоны в разрешённую электроны в яме практически отсутствуют. Разница энергий резонансного уровня показана в ситуации, когда он у дна зоны проводимости (т. е. при пиковом напряжении) при понижающемся и повышающемся напряжениях определяет разницу пиковых напряжений и, следовательно, является причиной гистерезиса.

Другими словами, в рамках метода установления гистерезисную ВАХ можно получить с помощью различных начальных условий для волновой функции, которые при этом будут соответствовать «предыстории» состояния РТД, а решение методом установления — состоянию при текущем напряжении. Очевидно, что к недостатку метода установления относится необходимость реализации временной модели, что является нетривиальной задачей даже без учёта межэлектронного взаимодействия, в том числе из-за сложностей в реализации граничных условий [18]. Если же включать в модель межэлектронное взаимодействие, добавляются сложности в численном интегрировании при вычислении концентрации электронов из-за резонансного характера локальной плотности состояний в активной области структуры [19, 20].

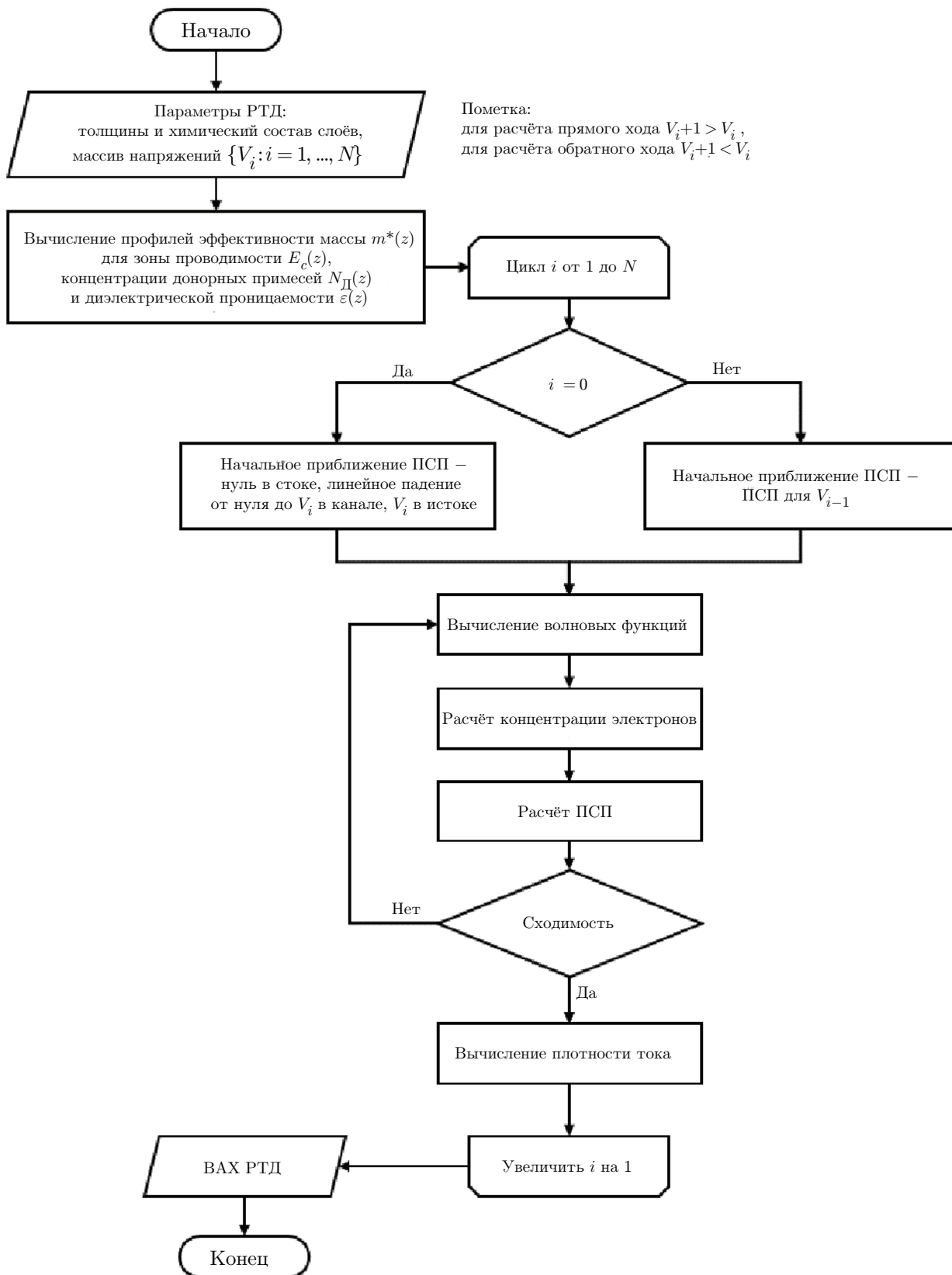


Рис. 2. Схема алгоритма вычисления ВАН

Чтобы отказаться от использования нестационарных моделей, воспользуемся аналогией между методом установления и процедурой самосогласования, которая проявляется в соответствии между начальными условиями в методе установления и начальным приближением ПСП в методе последовательных приближений. В таком случае, чтобы получить ВАХ при повышающемся напряжении, в качестве начального приближения при решении системы уравнений Шрёдингера — Пуассона (1) и (4) требуется брать ПСП при меньшем напряжении, чем текущее, а для получения ВАХ при понижающемся напряжении — ПСП при большем напряжении соответственно. Схема алгоритма расчёта гистерезисной ВАХ показана на рис. 2. При таком выборе начального приближения при процедуре самосогласования гистерезис на расчётных ВАХ РТД появляется по тем же причинам, по которым гистерезис присутствует на ВАХ, полученных с помощью метода установления.

Принимая во внимание аналогию между методами установления и самосогласованного поля, из этого объяснения можно сделать вывод, что гистерезис на ВАХ РТД должен проявиться и в случае стационарного напряжения, так как метод самосогласованного поля применяется для расчёта стационарных ВАХ. Действительно, в сущности плотность тока на участке гистерезиса в текущий момент времени определяется тем, являлась ли яма заполненной при напряжениях, установленных до измерения. При расчётах методом самосогласованного поля в стационарном случае, если взять в качестве начального условия самосогласованные волновые функции электронов при меньшем (большем) напряжении, чем текущее, то в результате расчётов можно ожидать ВАХ при повышающемся (понижающемся) напряжении. Очевидно, что при расчётах на интервале напряжений для значений на границах интервала в качестве начальных условий вышеописанная процедура не подойдёт. Для этих значений необходимо брать другое начальное условие, например линейное падение потенциала.

Заключение. Таким образом, предложена модель токопереноса в РТД, предсказывающая появление гистерезиса как проявление межэлектронного взаимодействия, которое учтено методом самосогласованного поля. Однако в отличие от большинства работ, где расчёты производятся методом функций Вигнера или с помощью гидродинамической модели, предложенная в данном исследовании модель построена в рамках формализма волновых функций. Ещё одно существенное отличие состоит в том, что в приведённых работах появление гистерезиса предсказывается в рамках нестационарных моделей, в то время как в разработанной модели предлагается решение, основанное на стационарных волновых функциях. Рассмотрены три типа начальных условий для процедуры самосогласования, и показано, что появление гистерезиса на ВАХ РТД достигается применением начальных условий специального вида при процедуре самосогласования для расчёта различных ветвей гистерезисной ВАХ.

Финансирование. Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда (грант № 22-19-00455, <https://rscf.ru/project/22-19-00455/>).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Saadiah H., Jubadi W. M., Ahmad N., Jabbar M. H. Resonant Tunnelling Diode Design for Oscillator Circuit // Journ. Phys.: Conf. Ser. 2018. **1049**. 012069.
2. Wang J., Al-Khalidi A., Alharbi K. et al. High Performance Resonant Tunneling Diode Oscillators as Terahertz Sources // Proc. of the 46th European Microwave Conf. (EuMC). London, UK, 4–6 Oct., 2016. P. 341–344.
3. Maekawa T., Kanaya H., Suzuki S., Asada M. Oscillation up to 1.92 THz in resonant tunneling diode by reduced conduction loss // Appl. Phys. Exp. 2016. **9**, N 2. 024101.

4. **Baba R., Stevens B. J., Mukai T., Hogg R. A.** Epitaxial Designs for Maximizing Efficiency in Resonant Tunneling Diode Based Terahertz Emitters // IEEE Journ. Quantum Electronics. 2018. **54**, Iss. 2. DOI: 10.7567/APEX.9.024101. 8500211.
5. **Izumi R., Sato T., Suzuki S., Asada M.** Resonant-tunneling-diode terahertz oscillator with a cylindrical cavity for high-frequency oscillation // AIP Adv. 2019. **9**, Iss. 8. 085020.
6. **Ogino K., Suzuki S., Asada M.** Phase locking of resonant-tunneling-diode terahertz oscillators // Proc. of the 42nd Int. Conf. on Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves (IRMMW-THz). Cancun, Mexico, 27 Aug. – 1 Sept., 2017. P. 1–2.
7. **Feiginov M.** Frequency Limitations of Resonant-Tunnelling Diodes in Sub-THz and THz Oscillators and Detectors // Journ. Infrar., Millimeter, and Terahertz Waves. 2019. **40**, Iss. 4. P. 365–394.
8. **Geldash A. A., Djuplin V. N., Klimin V. S. et al.** Influence of two-stage growth during the formation of GaAs/Si heterostructures for the creation of optoelectronic devices // Journ. Phys.: Conf. Ser. 2019. **1410**. DOI: 10.1088/1742-6596/1410/1/012030.
9. **Kuimov E. V., Vetrova N. A.** Forming a Portion of Negative Differential Conductivity in the I–V Characteristic of Resonant-Tunneling Structures // Journ. Surf. Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. 2022. **16**, Iss. 1. P. 176–180.
10. **Fung E.-D., Gelbwaser D., Taylor J. et al.** Breaking Down Resonance: Nonlinear Transport and the Breakdown of Coherent Tunneling Models in Single Molecule Junctions // Nano Lett. 2019. **10**, Iss. 4. P. 2555–2561.
11. **Ветрова Н. А., Иванов Ю. А., Куимов Е. В. и др.** Моделирование токопереноса в AlAs/GaAs-гетероструктурах с учётом междолинного рассеяния // Радиоэлектроника. Наносистемы. Информационные технологии (РЭНСИТ). 2019. **10**, № 1. С. 71–76.
12. **Moskaliuk V., Timofeev V., Fediai A.** Ultra-high-speed Electronic Devices. Saarbrücken: Lambert Academic Publishing, 2014. 232 p.
13. **Buccafurri E.** Analytical modeling of silicon based resonant tunneling diode for RF oscillator application: Thèse de doct. Lyon, INSA, 2010. 163 p.
14. **Berrada S., Carrillo-Nunez H., Lee J. et al.** Nano-electronic Simulation Software (NESS): A flexible nano-device simulation platform // Journ. Comput. Electron. 2020. **19**, Iss. 3. P. 1031–1046.
15. **Decleer P., Ginste D. V.** A Hybrid EM/QM Framework Based on the ADHIE-FDTD Method for the Modeling of Nanowires // IEEE Journ. Multiscale and Multiphysics Comput. Techniques. 2022. **7**. P. 236–251.
16. **Singh M. M., Kumar A., Ratnesh R. K.** Observation of Proposed Triple Barrier σ -Doped Resonant Tunneling Diode / Eds. by P. Verma, C. Charan, X. Fernando, S. Ganesan // Advances in Data Comput., Commun. and Security. Vol. 106. Singapore: Springer, 2022. P. 687–694.
17. **Gardner C. L.** Quantum hydrodynamic simulation of hysteresis in the resonant tunneling diode at 300 K // Journ. Comput. Electron. 2021. **20**, Iss. 1. P. 230–236.
18. **Schulz L., Inci B., Pech M., Schulz D.** Subdomain-based exponential integrators for quantum Liouville-type equations // Journ. Comput. Electron. 2021. **20**, Iss. 6. P. 2070–2090.
19. **Zhang W.-D., Growden T. A., Storm D. F. et al.** Investigation of Switching Time in GaN/AlN Resonant Tunneling Diodes by Experiments and P-SPICE Models // IEEE Trans. Electron Devices. 2020. **67**, Iss. 1. P. 75–79.
20. **Zhao P., Cui H. L., Woolard D. L. et al.** Origin of hysteresis and plateau-like behavior of the I–V characteristics of resonant tunneling diodes // Int. Journ. Modern Phys. B. 2000. **14**, N 4. P. 411–426.

Поступила в редакцию 13.11.2023

После доработки 15.08.2024

Принята к публикации 14.10.2024