

На правах рукописи

Гришаков Константин Сергеевич

СТАТИЧЕСКИЕ И ДИНАМИЧЕСКИЕ
ХАРАКТЕРИСТИКИ
РЕЗОНАНСНО-ТУННЕЛЬНЫХ ДИОДОВ В
КОГЕРЕНТНОЙ МОДЕЛИ

Специальность 01.04.07 —
«Физика конденсированного состояния»

Автореферат
диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Автор:



Москва — 2017

Работа выполнена в Федеральном государственном автономном
образовательном учреждении высшего образования
Национальном исследовательском ядерном университете «МИФИ»

Научный руководитель: доктор физико-математических наук, профессор
Елесин Владимир Федорович

Официальные оппоненты: **Капаев Владимир Васильевич**,
доктор физико-математических наук, профессор,
ФИАН, г. Москва,
главный научный сотрудник

Дубовский Леонид Борисович,
кандидат физико-математических наук, доцент,
НИЦ «Курчатовский институт»,
ведущий научный сотрудник

Ведущая организация: Физико-технологический институт Российской
академии наук, г. Москва

Защита состоится 24 января 2018 г. в 14:30 на заседании диссертационно-
го совета Д 212.130.04 на базе Национального исследовательского ядерного
университета «МИФИ» по адресу: 115409, г. Москва, Каширское ш., д. 31.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке НИЯУ МИФИ.

Автореферат разослан «___» _____ 2017 года

Просим принять участие в работе совета или прислать отзыв в двух
экземплярах, заверенных печатью организации, по адресу НИЯУ «МИФИ».

Ученый секретарь
диссертационного совета
д-р физ.-мат. наук, профессор



Чернов И.И.

Общая характеристика работы

Актуальность темы. В настоящее время большой практический интерес представляет создание компактных, твердотельных, когерентных источников излучения в терагерцевом диапазоне частот (0,1–10 ТГц), работающих при комнатной температуре, а также имеющих высокую чувствительность и быстродействие. Данный интерес вызван возможностями их широкого применения в различных областях, таких как медицина, метеорология, системы безопасности, беспроводные высокоскоростные средства связи, спектроскопия и т.д. Одним из возможных кандидатов в качестве подобного рода источников терагерцевого излучения является резонансно-туннельный диод (РТД). Впервые генерация электромагнитного излучения на РТД была получена при температуре порядка 200 К в 1984 г., при этом частота и выходная мощность были невелики и составляли 18 ГГц и несколько мкВт, соответственно. На данный момент экспериментально получена частота генерации РТД на основной гармонике, равная 1,92 ТГц, что является рекордом для электронных приборов, работающих при комнатной температуре. Выходная мощность составляла порядка 0,4 мкВт. Также получены относительно большие мощности генерации, порядка 400 мкВт, на частотах 530–590 ГГц.

На основе РТД уже предпринимаются попытки создания беспроводной связи нового поколения. До недавнего времени скорость беспроводной передачи данных при использовании РТД составляла 2–3 Гбит/с на частоте 542 ГГц, максимум мощности излучения был равен 210 мкВт. Однако, в последних работах были получены экспериментальные результаты, в которых зафиксирована скорость передачи данных в 30 Гбит/с. Также экспериментально продемонстрирована возможность применения РТД в спектроскопии и в качестве детектора электромагнитного поля без внешнего смещения (zero bias detector).

Таким образом, РТД представляет собой перспективный прибор наноэлектроники с большим количеством практических применений, а его изучение является актуальным. Но, несмотря на очевидный прогресс, достигнутый в частотных характеристиках РТД в последнее время, мощности генерации в терагерцевом диапазоне частот остаются невелики (порядка микроватта). В связи с этим, важную роль приобретают теоретические исследования, направленные на более глубокое физическое понимание

поведения РТД в высокочастотном электромагнитном поле.

Целью данной работы являлся расчет основных закономерностей поведения резонансно-туннельного диода в постоянном и переменном электрических полях, а также оптимизация его параметров для увеличения статических и динамических характеристик.

Для достижения поставленной цели решены следующие **задачи**:

1. Разработан алгоритм расчета статических и динамических характеристик РТД в рамках когерентной модели, включающей уравнения Шредингера и Пуассона с открытыми граничными условиями, который был реализован в виде компьютерной программы.
2. Исследовано поведение РТД в постоянном электрическом поле с учетом особенностей реальных структур, таких как наличие спейсерных слоев, фермиевское распределение электронов по энергиям и межэлектронное взаимодействие.
3. Исследованы особенности резонансного туннелирования через двухбарьерные наноструктуры при наличии переменного электрического поля произвольной амплитуды и частоты.
4. Определено влияние спейсерных слоев на частотные характеристики РТД в случае слабого переменного электрического поля.
5. Исследованы особенности переходных процессов в РТД, возникающих под действием мгновенно меняющегося напряжения, в том числе в условиях гистерезиса вольт-амперной характеристики.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Выявленные закономерности влияния межэлектронного взаимодействия в самосогласованном приближении на пиковый ток РТД при различных значениях спейсера эмиттера.
2. Обнаруженные закономерности поведения активного тока резонансно-туннельного диода в сильных переменных электрических полях при различных частотах, показавшие возможность достижения больших значений активного тока РТД на высоких частотах, по порядку величины сопоставимых с максимумом постоянного тока.
3. Результаты расчета зависимостей активного тока РТД для различных толщин спейсера эмиттера и в широком интервале частот слабого переменного

электрического поля, показавшие что, величина активного тока на конечных частотах ($\hbar\omega > \Gamma$, Γ – ширина резонансного уровня) может быть выше, чем в низкочастотном пределе $\omega \rightarrow 0$.

4. Установленные закономерности влияния межэлектронного взаимодействия в самосогласованном приближении на переходные процессы в РТД, показавшие кардинальное изменение зависимостей переходного тока от времени вблизи точек «срыва» гистерезисной ВАХ при переключениях малыми напряжениями.

Научная новизна

1. Впервые в когерентной модели с точными открытыми граничными условиями к нестационарному уравнению Шредингера найдены зависимости активного тока поляризации РТД от амплитуды и частоты внешнего переменного электрического поля, от толщины спейсера эмиттера и других параметров.

2. В результате сопоставление численных расчетов активного тока РТД при использовании точных и приближенных открытых граничных условий выявлено, что в случае наличия спейсера эмиттера на высоких частотах $\hbar\omega > \Gamma$ переменного электрического поля использование точных открытых граничных условий является принципиальным.

3. Установлено, что за счет подбора толщины спейсера эмиттера на конечных частотах $\hbar\omega > \Gamma$ можно достигнуть большей величины активного тока РТД, чем в пределе низкой частоты $\omega \rightarrow 0$.

4. В результате численных расчетов выявлено, что с ростом амплитуды переменного электрического поля на высоких частотах $\hbar\omega > \Gamma$ активный ток поляризации может достигать больших значений, сопоставимых по порядку величины со значением постоянного тока в резонансе.

5. Впервые найдено численное решение задачи о переходных процессах в РТД при наличии гистерезиса вольт-амперной характеристики в рамках когерентной модели Шредингер-Пуассон с ферми-распределением электронов.

6. Впервые показано, что времена перехода из точек «срыва» гистерезисной ВАХ в новое состояние под действием малых переключающих напряжений, могут значительно превосходить характерное $\hbar/\Gamma$, Γ – ширина резонансного уровня.

7. В результате численных расчетов показано, что влияние межэлектронного взаимодействия на величину постоянного тока через РТД при наличии спей-

сера эмиттера сильно зависит от отношения энергии Ферми ε_F , определяемой концентрацией донорных примесей в контактных областях, к ширине резонансного уровня Γ . Если это отношение очень велико $\varepsilon_F/\Gamma \sim 100$, то при увеличении толщины спейсера эмиттера учет взаимодействия между электронами приводит к существенному уменьшению величины пикового тока. Если $\varepsilon_F/\Gamma \sim 10$, то уменьшение пикового тока незначительно.

Практическая значимость

В данной работе получены важные результаты, способные улучшить характеристики приборов на основе РТД. Показано, что существенного увеличения высокочастотных характеристик РТД можно достигнуть за счет оптимизации параметров спейсера эмиттера. Определены параметры РТД, при которых на высоких частотах мощность генерации РТД достигает относительно больших значений $\sim 10^5$ Вт/см². Обнаруженные особенности статических характеристик, такие как наличие гистерезиса ВАХ, в том числе нескольких областей гистерезиса, приводят к радикальному изменению характера переходных процессов РТД, причем следует ожидать сильного влияния и на частотные характеристики РТД, что стимулирует проведение дальнейших исследований в данном направлении.

Разработанный в ходе работы программный комплекс позволяет рассчитывать статические и динамические характеристики РТД. Данный программный комплекс может быть полезен широкому спектру научных и инженерных сотрудников для проведения своих прикладных или фундаментальных исследований, может быть использован при производстве устройств, включающих РТД для определения их оптимальных характеристик, а также использован студентами и преподавателями в образовательных и исследовательских целях.

Достоверность полученных результатов работы проверялась с помощью сравнения численных расчетов с известными аналитическими решениями, которое показало согласие с высокой степенью точности.

Апробация работы

Основные результаты работы докладывались на следующих конференциях: Научная сессия НИЯУ МИФИ-2014 (27 января – 01 февраля 2014 года, г. Москва); 5-я Научно-практическая конференция по физике и технологии наногетероструктурной СВЧ-электроники «Мокеровские чтения» (21–22 мая

2014 года, г. Москва); 6-я Международная Научно-практическая конференция по физике и технологии наногетероструктурной СВЧ-электроники «Мокеровские чтения» (20–21 мая 2015 года, г. Москва); IV Всероссийская научная молодежная конференция с международным участием «Актуальные проблемы микро- и нанoeлектроники» (29 ноября – 2 декабря 2016 года, г. Уфа).

Результаты диссертации использовались при выполнении проекта: «Исследование тепловых свойств графеносодержащих пленок, а также разработка технологии их применения для отвода тепла, выделяющегося при работе СВЧ полупроводниковых приборов на основе GaN» при поддержке Министерства образования и науки России (соглашение о субсидии № 14.584.21.0001 от 22.08.2014, уникальный идентификатор проекта: RFMEFI58414X0001).

Личный вклад Все результаты, представленные в данной диссертации, получены автором лично или при его непосредственном участии.

Публикации Основные результаты по теме диссертации изложены в 9 печатных изданиях, 4 из которых изданы в журналах, рекомендованных ВАК РФ, и входящие в базы данных Web of Science и/или Scopus.

Основное содержание работы

Во **введении** обоснована актуальность исследований, проводимых в рамках данной диссертационной работы, приведен обзор научной литературы по изучаемой проблеме, сформулированы цель работы и решаемые задачи, указаны новизна и практическая значимость, изложены основные положения, выносимые на защиту.

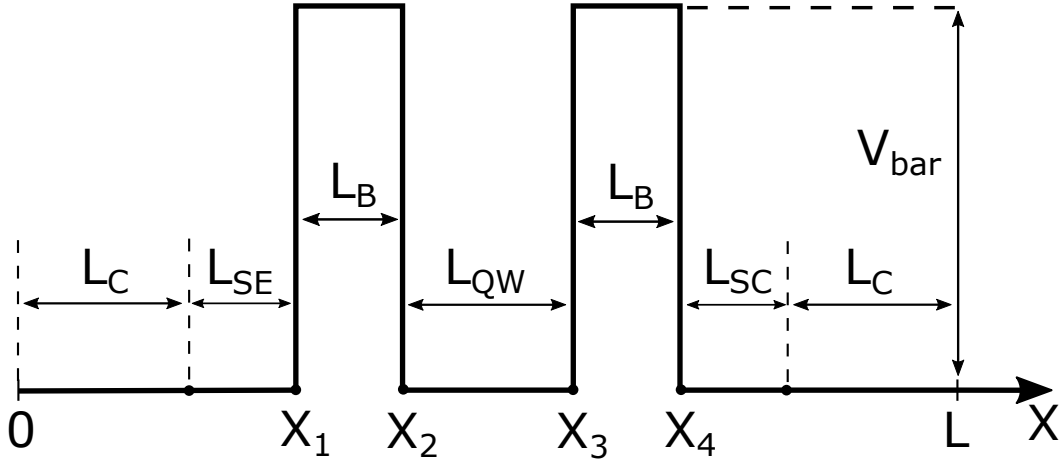
Анализ литературы показал, что резонансно-туннельный диод является перспективным прибором нанoeлектроники, а его изучению посвящено большое количество работ. Однако, несмотря на достижение больших частот генерации, порядка 2 ТГц, достигнутые при этом мощности генерации невелики и составляют всего около 1 мкВт. Аналитическая теория, построенная профессором Елесиным В.Ф., позволила глубже понять квантовую природу РТД и открыла новые возможности для улучшения его характеристик. Главным результатом данной теории является открытие квантового режима генерации РТД, который обусловлен переходами между квазиэнергетическими уровнями, возникающими в переменном электрическом поле, и резонансным

уровнем. При этом, достигается значительное увеличение активного тока на высоких частотах $\hbar\omega > \Gamma$. Но результаты теории были получены для простой модели, когда рассматривается квантовая яма с δ -функциональными барьерами, а налетающие на структуру электроны считаются моноэнергетическими. Таким образом, теория не учитывает ряда важных особенностей, присущих реальным структурам РТД, а именно наличия спейсерных слоев, Ферми-распределения налетающих электронов, реальную геометрию барьеров, а также наличия приложенного к структуре постоянного напряжения. В свою очередь исследования, проводимые при помощи компьютерного моделирования, зачастую также не учитывали наличия спейсерных слоев и межэлектронного взаимодействия, которые, как было показано в обзоре литературы, играют очень важную роль. Изучение влияния спейсеров, в основном, проводилось для статических характеристик РТД. Влиянию же спейсеров на динамические характеристики уделено недостаточно внимания, при этом исследования проводились с использованием приближенных граничных условий к нестационарному уравнению Шредингера, применимость которых для данной постановки не обоснована. Также остается непонятной причина резкого увеличения высокочастотного отклика при определенных размерах спейсера, и отсутствуют теоретические исследования по влиянию спейсерных слоев на гистерезис ВАХ РТД, хотя некоторые экспериментальные исследования явно указывают на связь между гистерезисом и параметрами спейсерных слоев. Теоретические работы по переходным процессам в РТД либо выполнены в упрощенных постановках, либо носят методический характер.

Первая глава посвящена исследованию поведения резонансно-туннельного диода в постоянном электрическом поле и расчету его статических характеристик. Рассматривается одномерная двухбарьерная наноструктура, потенциальный профиль которой изображен на рисунке 1. Слева из эмиттера ($x \rightarrow -\infty$), а также справа из коллектора ($x \rightarrow \infty$) подводится стационарный поток электронов с энергиями $E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$ и энергией Ферми, равной E_F . Здесь k – x -компонента квазиимпульса электрона, m^* – эффективная масса электрона, T – температура. К структуре прикладывается постоянное электрическое поле с потенциалом $V_{stat}(x)$, имеющим вид:

$$V_{stat}(x) = -V_{dc} \frac{x}{L}. \quad (1)$$

где L – полный размер структуры.



L_{QW} – толщина квантовой ямы, L_B и V_{bar} – толщина и высота барьеров квантовой ямы, L_{SE} и L_{SC} – толщина спейсера эмиттера и спейсера коллектора, соответственно, L_C – размер легированных контактных областей

Рисунок 1 – Дно зоны проводимости РТД.

Волновая функция электрона $\psi_k(x)$ с квазиимпульсом k удовлетворяет стационарному уравнению Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2 \psi_k(x)}{dx^2} + (V_{str}(x) + V_{stat}(x) + \varphi(x)) \psi_k(x) = E_k \psi_k(x),$$

$$V_{str}(x) = \begin{cases} V_{bar}, & \text{если } x \in [x_1, x_2] \cup [x_2, x_3], \\ 0, & \text{если иначе,} \end{cases} \quad (2)$$

где $V_{str}(x)$ – потенциал структуры РТД (см. рисунок 1). Взаимодействие между электронами учитывается в самосогласованном приближении с помощью потенциала $\varphi(x)$, который определяется из уравнения Пуассона с нулевыми граничными условиями:

$$\frac{d^2 \varphi}{dx^2} = -\frac{e^2}{\varepsilon \varepsilon_0} (n(x) - n_D(x)),$$

$$\varphi(0) = \varphi(L) = 0, \quad (3)$$

где e – заряд электрона, $n_D(x)$ – концентрация донорных примесей, ε – диэлектрическая проницаемость, $\varepsilon_0 = 8,8542 \cdot 10^{-12} \text{ Ф} \cdot \text{м}^{-1}$ – электрическая по-

стоянная, $n(x)$ – концентрация электронов, определяемая выражением:

$$n(x) = \int_0^{k_{max}} g(k) |\psi_k(x)|^2 dk, \quad (4)$$

$$g(k) = \frac{m^* k_B T}{2\pi^2 \hbar^2} \ln \left(1 + \exp \left(\frac{E_F - \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}}{k_B T} \right) \right), \quad (5)$$

где $g(k)$ – функция распределения электронов, проинтегрированная по поперечному импульсу. При проведении численных расчетов считалось, что $k_{max}^2 = \frac{2m^*}{\hbar^2} (E_F + 5k_B T)$.

Для уравнения Шредингера (2) используются открытые граничные условия, которые для электронов, налетающих слева из эмиттера, имеют вид:

$$\begin{aligned} \psi_k(0) + \frac{1}{ik} \frac{d\psi_k(x)}{dx} \Big|_{x=0} &= 2, \\ \psi_k(L) - \frac{1}{i\sqrt{k^2 - \frac{2m^*}{\hbar^2} V_{stat}(L)}} \frac{d\psi_k(x)}{dx} \Big|_{x=L} &= 0. \end{aligned} \quad (6)$$

Ток через РТД определяется по формуле:

$$j_0(x) = \frac{e\hbar}{m^*} \int_0^{k_{max}} g(k) \operatorname{Im} \left(\psi_k^*(x) \frac{d\psi_k(x)}{dx} \right) dk, \quad (7)$$

где Im обозначает взятие мнимой части комплексного выражения. Причем в силу стационарности задачи ток не зависит от координаты, т.е. $j_0(x) = \text{const}$.

Исследование статических характеристик РТД включает в себя нахождение зависимости тока j_0 от напряжения V_{dc} в результате решения уравнений (1)–(7), а также исследование распределения концентрации электронов $n(x)$ и потенциала $\varphi(x)$ при различных параметрах структур РТД.

Рассмотрены несколько структур РТД, различающихся своими характеристиками. Эффективная масса считается постоянной для всей структуры и равной эффективной массе материала квантовой ямы для лучшего совпадения с экспериментом. Основные параметры данных структур:

1) структура № 1: $L_B = 2$ нм, $L_{QW} = 4,5$ нм, $V_{bar} = 1,2$ эВ, $m^* = 0,041m_e$, $\varepsilon = 10$, $\Gamma = 2,924$ мэВ;

2) структура № 2: $L_B = 1,4$ нм, $L_{QW} = 4,5$ нм, $V_{bar} = 1,2$ эВ, $m^* = 0,041m_e$, $\varepsilon = 10$, $\Gamma = 10,272$ мэВ;

3) структура № 3: $L_B = 5$ нм, $L_{QW} = 5$ нм, $V_{bar} = 0,3$ эВ, $m^* = 0,067m_e$, $\varepsilon = 11,44$, $\Gamma = 0,20435$ мэВ.

Проведенные исследования для модельной задачи с δ -функциональными барьерами показали, что для малых энергий налетающих электронов наблюдается сильное уменьшение пикового значения коэффициента прохождения через РТД при $E \rightarrow 0$, $t_{max} \rightarrow \sqrt{\frac{E}{E_R}} \rightarrow 0$. При этом, в случае малых энергий, можно добиться восстановления величины коэффициента прохождения до его максимальной величины, равной единице, за счет подбора толщины спейсера эмиттера. Однако, как оказалось, при учете межэлектронного взаимодействия существенного усиления пикового тока можно достичь только в случае структур, имеющих большую ширину резонансного уровня Γ , так что $\varepsilon_F/\Gamma \sim 10$ (рисунок 2 для структуры РТД №2).

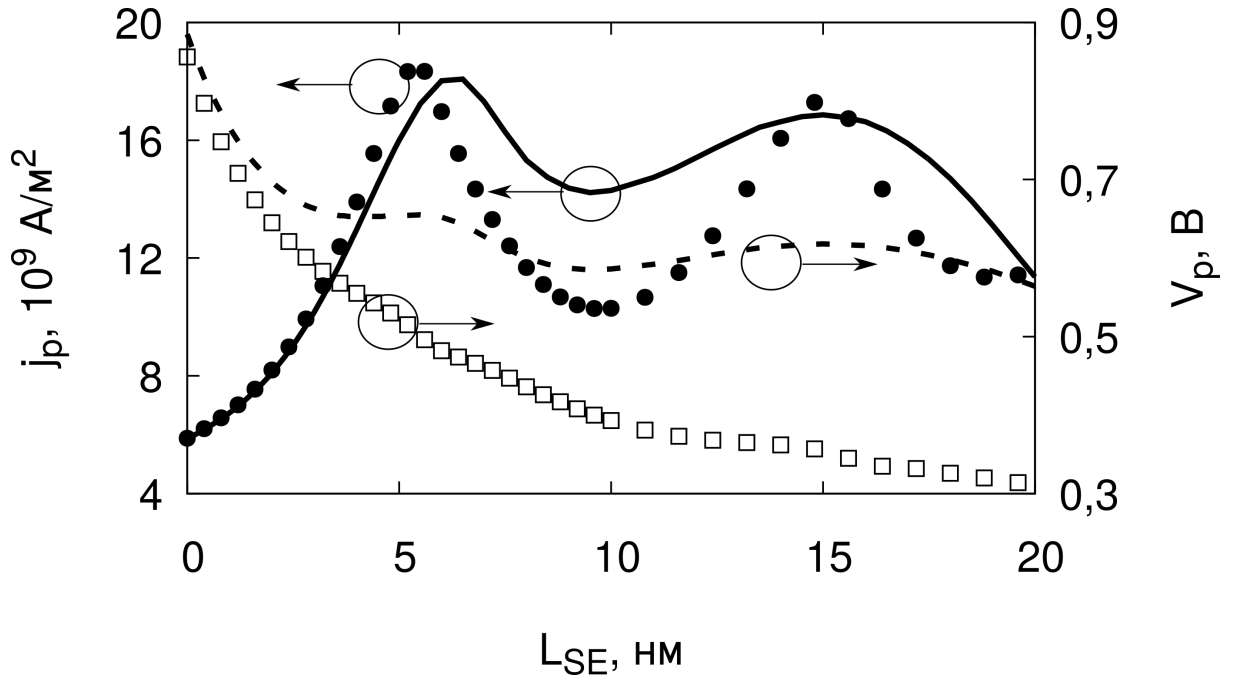


Рисунок 2 — Зависимость плотности пикового тока (левая ось Y) и величины пикового напряжения (правая ось Y) от размера спейсера эмиттера для структуры № 2, размер спейсера коллектора $L_{SC} = 10$ нм.

Сплошная и штриховая линии, отвечают случаю, когда учитывается взаимодействия между электронами, кружки и квадраты – случаю, когда взаимодействие не учитывается.

Для структуры РТД № 2 без учета взаимодействия между электронами пиковый ток достигает максимального значения $j_p \approx 1,85 \cdot 10^{10}$ А/м² при толщине спейсера эмиттера $L_{SE} = 5,4$ нм, при этом усиление пикового тока в сравнении со случаем $L_{SE} = 0$ составляет 3,14 раз. При учете межэлектронного взаимодействия максимум пикового тока составляет $j_p \approx 1,807 \cdot 10^{10}$ А/м², что в 3,08 раза больше величины пикового тока при отсутствии спейсера эмиттера, а соответствующая толщина спейсера $L_{SE} = 6,5$ нм. Таким образом, для структуры резонансно-туннельного диода № 2, имеющей наибольшую ширину резонансного уровня среди рассматриваемых, максимальные значения пикового тока при учете и без учета межэлектронного взаимодействия различаются слабо.

Для структур РТД с малыми значениями Γ , так что $\varepsilon_F/\Gamma \sim 100$ (структура РТД № 3), межэлектронное взаимодействие сильно подавляет величину пикового тока (рисунок 3).

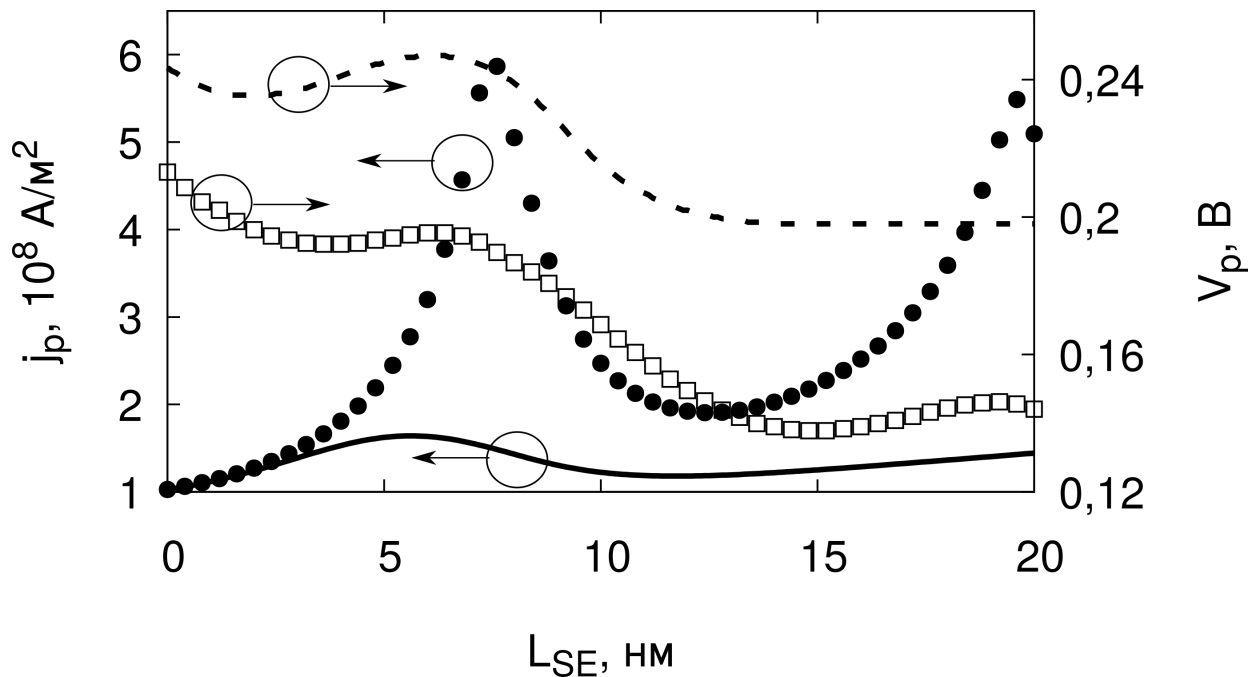
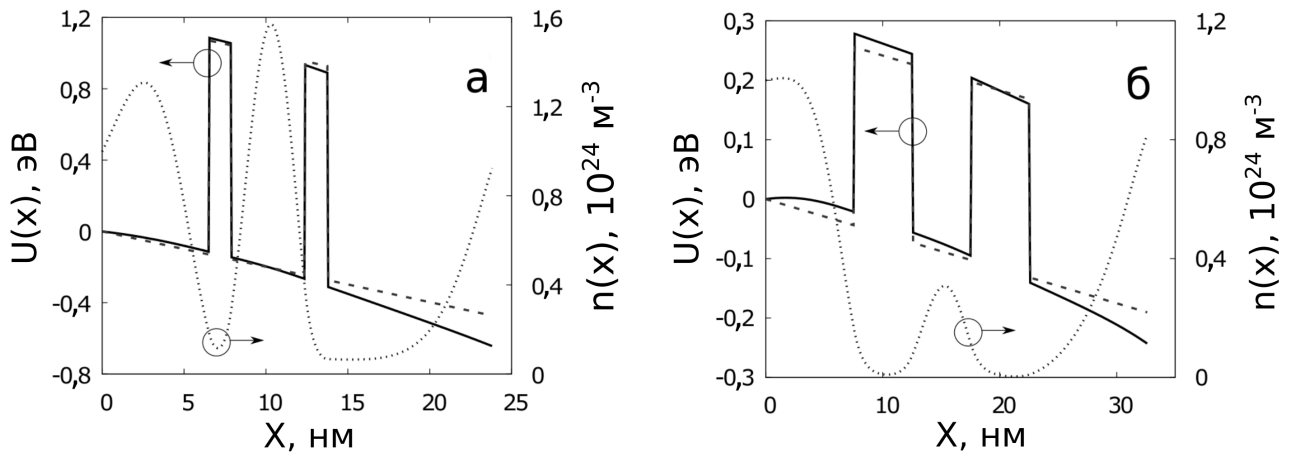


Рисунок 3 — Зависимость плотности пикового тока (левая ось Y) и величины пикового напряжения (правая ось Y) от толщины спейсера эмиттера для структуры № 3, размер спейсера коллектора $L_{SC} = 10$ нм.

Сплошная и штриховая линии, отвечают случаю, когда учитывается взаимодействия между электронами, кружки и квадраты - случаю, когда взаимодействие не учитывается.

Это происходит из-за того, что в структурах с малыми по сравнению с энергией Ферми значениями ширины резонансного уровня большая часть электронов, даже при реализации резонанса, отражается от структуры, увеличивая потенциал $\varphi(x)$, определяемый из уравнения Пуассона, а следовательно и суммарный потенциал, в котором движутся электроны, в области квантовой ямы спейсера эмиттера. Это приводит к уменьшению размеров квантовой ямы (уменьшается как ширина, так и глубина), которая образуется в области спейсера эмиттера при приложении к структуре РТД постоянного напряжения (рисунок 4).



(а) – структура № 2, $L_{SE} = 6,5$ нм; (б) – структура № 3, $L_{SE} = 7,5$ нм

Рисунок 4 — Зависимость потенциала $U(x) = V_{str}(x) + V_{stat}(x) + \varphi(x)$ (левая ось Y, сплошная линия) и плотности электронов (правая ось Y, пунктирная линия) от координаты с учетом межэлектронного взаимодействия.

Величина постоянного напряжения отвечает пиковому значению тока.

Штриховой линией изображается случай, когда межэлектронное взаимодействие не учитывается.

Вторая глава посвящена исследованию отклика резонансно-туннельного диода на переменное электрическое поле в широком диапазоне частот и амплитуд, а также при наличии спейсерных слоев. Расчеты в данной главе выполнены без учета межэлектронного взаимодействия.

В данной главе на структуру РТД действует переменное электрическое поле с потенциалом $V(x,t)$, имеющим вид

$$V_t(x,t) = -V_{ac} \frac{x}{L} \cos(\omega t), \quad (8)$$

также прикладывается постоянное электрическое поле:

$$V_{stat}(x) = -V_{dc} \frac{x}{L}. \quad (9)$$

Волновая функция электрона $\psi_k(x, t)$ с квазиимпульсом k удовлетворяет временному уравнению Шредингера:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2 \psi_k(x)}{dx^2} + U(x, t) \psi_k(x), \\ U(x, t) &= V_{str}(x) + V_{stat}(x) + \varphi(x, t) + V_t(x, t), \\ V_{str}(x) &= \begin{cases} V_{bar}, & \text{если } x \in [x_1, x_2] \cup [x_2, x_3], \\ 0, & \text{если иначе,} \end{cases} \\ \psi_k(x, 0) &= \phi_k(x). \end{aligned} \quad (10)$$

Здесь $\phi_k(x)$ – начальное условие, которое находится из решения соответствующей стационарной задачи. Используются точные открытые граничные условия к нестационарному уравнению Шредингера (10):

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial f_{kL}(x, t)}{\partial x} \right|_{x=0} &= \sqrt{\frac{2m^*}{\pi\hbar}} e^{-i\frac{\pi}{4}} \frac{d}{dt} \int_0^t f_{kL}(0, \tau) \frac{1}{\sqrt{t-\tau}} d\tau, \\ \left. \frac{\partial f_{kR}(x, t)}{\partial x} \right|_{x=L} &= \sqrt{\frac{2m^*}{\pi\hbar}} e^{-i\frac{\pi}{4}} e^{-\frac{iV_{stat}(L)}{\hbar}t} \frac{d}{dt} \int_0^t f_{kR}(L, \tau) \frac{e^{\frac{iV_{stat}(L)}{\hbar}\tau}}{\sqrt{t-\tau}} d\tau, \\ f_{kL}(x, t) &= \psi_k(x, t) - \phi_k(x) \exp\left(\frac{-iE_k t}{\hbar}\right), \\ f_{kR}(x, t) &= \psi_k(x, t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_0^t V_t(L, \tau) d\tau\right) - \\ &- \phi_k(x) \exp\left(\frac{-i(E_k - V_{stat}(L) - V_t(L, 0))t}{\hbar}\right). \end{aligned} \quad (11)$$

В записанных выше граничных условиях считается, что потенциал на левой границе равен нулю и не зависит от времени, потенциал на правой границе постоянен по координате, но зависит от времени. Данные граничные условия нелокальны по времени и носят интегральный характер, что требует хранения информации о значениях волновой функции на границе во все предыдущие моменты времени. В работах Арнольда было показано,

что нужно уделять существенное внимание дискретизации данных граничных условий для предотвращения возникновения нефизических отражений от границ расчетной области. В связи с этим, численная реализация данных граничных условий является достаточно сложной задачей, требующей больших вычислительных ресурсов.

В ряде случаев вместо граничных условий (11) в численных расчетах использовались приближенные граничные условия, которые для электронов, налетающих на структуру слева из эмиттера, имеют вид:

$$\begin{aligned} \psi_k(0,t) + \frac{1}{ik} \frac{\partial \psi_k(x,t)}{\partial x} \Big|_{x=0} &= 2 \exp\left(-\frac{iE_k t}{\hbar}\right), \\ \psi_k(L,t) - \frac{1}{i\sqrt{k^2 - \frac{2m^*}{\hbar^2} V_{stat}(L)}} \frac{\partial \psi_k(x,t)}{\partial x} \Big|_{x=L} &= 0. \end{aligned} \quad (12)$$

Решение задачи состоит в нахождении средних по координате активного J_c (синфазного с переменным электрическим полем) и реактивного J_s (находящегося в противофазе с переменным полем) токов поляризации, а также постоянной составляющей переменного тока J_0 , после выхода на установившийся режим, когда ток через РТД $j(x,t)$ периодически зависит от времени. Выражения для токов J_c , J_s и J_0 даются выражениями:

$$\begin{aligned} J(t) &= \frac{1}{L} \int_0^L j(x,t) dx, \\ J_c &= \frac{\omega}{\pi} \int_0^{2\pi/\omega} J(t) \cos(\omega t) dt, \\ J_s &= \frac{\omega}{\pi} \int_0^{2\pi/\omega} J(t) \sin(\omega t) dt, \\ J_0 &= \frac{\omega}{2\pi} \int_0^{2\pi/\omega} J(t) dt. \end{aligned}$$

Наибольший интерес представляет изучение поведения активного тока J_c , поскольку он описывает усиление поля и мощность передаваемую электронами полю (или получаемую от поля) за период. Нас будут интересовать

отрицательные значения активного тока, поскольку они отвечают генерации электромагнитных волн.

В рамках модели моноэнергетических электронов нами проведено исследование поведения РТД (структура № 1) в сильном переменном электрическом поле на высоких частотах $\hbar\omega = 2\Gamma$ и 4Γ . Результаты численных расчетов представлены на рисунке 5.

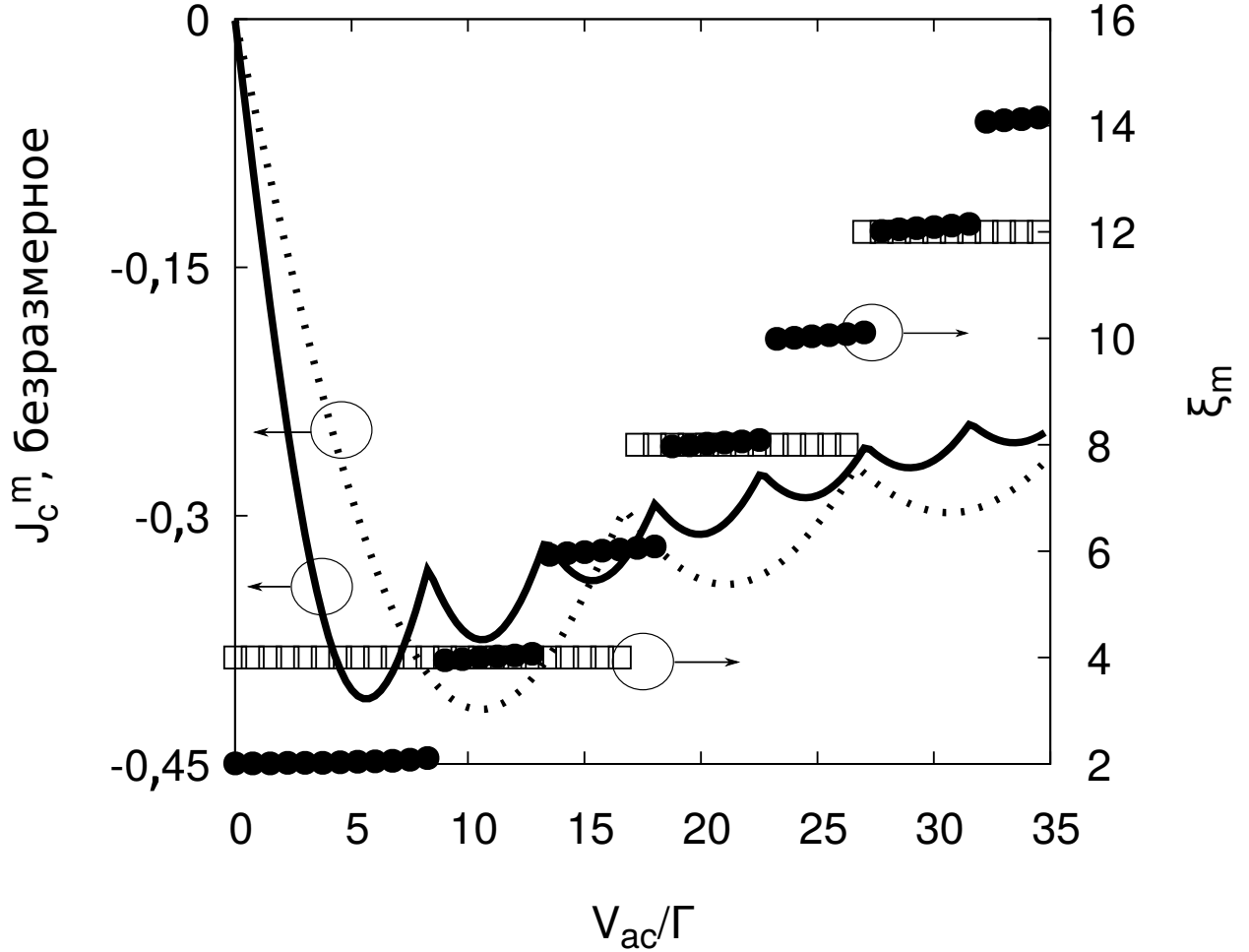


Рисунок 5 — Зависимость тока J_c^m (левая ось Y, сплошная и пунктирная линии) и положения рабочей точки ξ_m (правая ось Y, точки) от амплитуды

потенциала переменного электрического поля для частот $\hbar\omega = 4\Gamma$

(сплошная линия и квадраты) и $\hbar\omega = 2\Gamma$ (пунктирная линия и кружки);

$$\xi_m = \frac{E_m - \varepsilon_R}{\Gamma}.$$

Вводится следующее обозначение: максимальное по модулю (и отрицательное по величине) значение, которое достигает активный ток при заданной частоте и амплитуде переменного электрического поля, будем называть

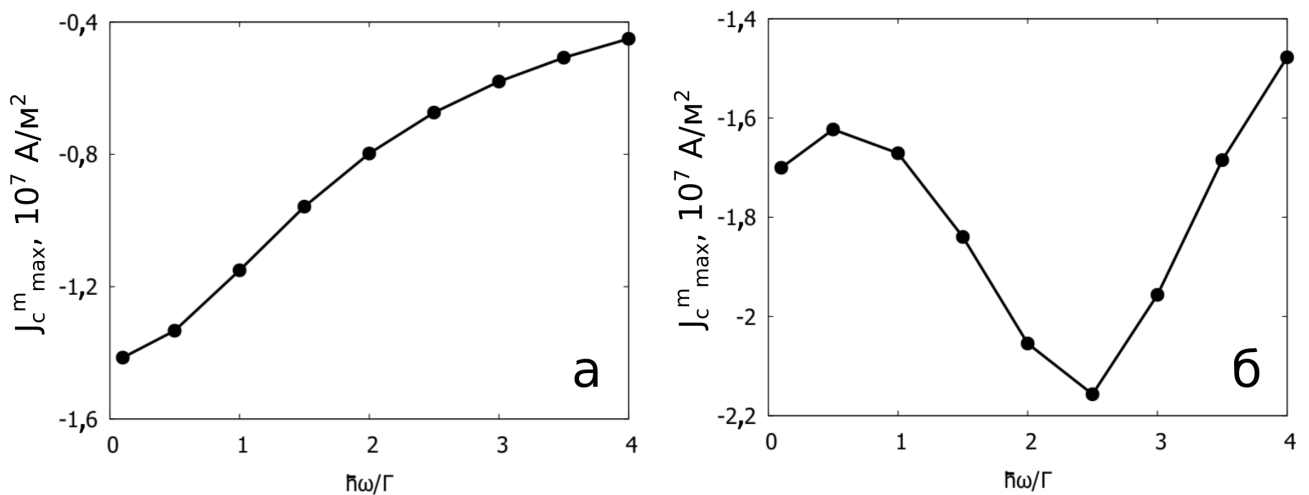
пиковым значением активного тока и обозначать J_c^m , а значение энергии налетающих электронов, при которой модуль активного тока максимален обозначим, как E_m .

На зависимости тока J_c^m от амплитуды потенциала переменного поля V_{ac} наблюдается череда максимумов с убывающей с ростом поля амплитудой. Причем, значение энергии налетающих электронов, при котором достигается пиковое значение активного тока J_c^m , при переходе от одного максимума к другому скачком меняется на величину $\hbar\omega$. Таким образом, при увеличении амплитуды переменного поля большой вклад в активный ток J_c начинают давать электроны с энергиями $E = \varepsilon_R + n\hbar\omega$, $n = 2, 3, \dots$, т.е. происходит возбуждение высших квазиэнергетических уровней. Следовательно, в высокочастотных сильных переменных электрических полях наиболее оптимальным является квантовый режим генерации, связанный с наличием переходов между состояниями с квазиэнергиями $\varepsilon_R + n\hbar\omega$.

В случае Ферми распределения электронов по энергиям, отмеченные выше особенности «смазываются». Для того, чтобы данные особенности проявились необходимо уменьшать отношение ε_F/Γ и увеличивать ω/Γ . Важным результатом является то, что в широком диапазоне частот активный ток поляризации достигает большой величины, сравнимой по порядку с максимальной величиной постоянного тока в отсутствии переменного электрического поля. Сам факт того, что в сильном поле для больших частот активный ток поляризации может достигать больших значений свидетельствует о реализации квантового режима генерации РТД. Вторым важным результатом является устойчивость максимума усиления к сильным электромагнитным полям, т.е. J_c^m слабо спадает при увеличении амплитуды поля. Данные результаты позволяют рассчитывать на достижение больших мощностей генерации РТД в широком интервале частот, в том числе и в терагерцевом диапазоне частот, имеющем важное практическое значение.

В отсутствии спейсера эмиттера пиковое значение модуля активного тока максимально на нулевой частоте и с ростом частоты переменного электрического поля монотонно уменьшается (рисунок 6, а). Причем, на высоких частотах ($\hbar\omega > \Gamma$) реализуется квантовый режим генерации РТД, и поэтому активный ток с ростом частоты спадает по закону $1/\omega$. В то время, как в отсутствии квантового режима уменьшение активного тока с

ростом частоты происходило бы по закону $1/\omega^4$. Это свидетельствует о том, что в случае фермиевского распределения электронов на высоких частотах пиковое значение активного тока связано с квантовым режимом генерации РТД. Введение спейсера эмиттера и выбор его оптимальной, с точки зрения увеличения величины активного тока, толщины приводит к тому, что на высоких частотах максимум активного тока может быть больше, чем в низкочастотном пределе. Это наглядно продемонстрировано на рисунке 6, б, на котором изображена зависимость величины J_c^m , учитывающей оптимизацию активного тока по толщине спейсера эмиттера, от частоты переменного электрического поля. Например, для структуры РТД № 1 максимальное по модулю значение тока J_c^m на частоте $\omega = 2,5\Gamma/\hbar \sim 1,77$ ТГц, оказалось больше на 27%, чем на низкой частоте $\omega = 0,1\Gamma/\hbar$. Увеличение величины активного тока поляризации для $\omega = 2,5\Gamma/\hbar$ за счет оптимизации толщины спейсера эмиттера по сравнению со случаем отсутствия спейсера составляет 32 раза. Такое поведение активного тока на высоких частотах связано с образованием в области спейсера эмиттера квантовой ямы при приложении к структуре РТД постоянного напряжения, и возможностью реализации излучательных переходов между двумя резонансными уровнями, а не между квазиуровнем и резонансным уровнем, как в случае отсутствия спейсера.



(а) – в отсутствии спейсера эмиттера; (б) – при наличии спейсера эмиттера

Рисунок 6 — Зависимость максимума $J_c^m(L_{SE})$ от частоты переменного электрического поля. Структура РТД № 1.

Сопоставление результатов численных расчетов с использованием точных открытых граничных условий к нестационарному уравнению Шредингера (11) и приближенных граничных условий (12) показало, что для рассмотренных в диссертационной работе задач, когда наличие спейсерных слоев не учитывалось, результаты двух методик качественно совпадают и могут наблюдаться лишь некоторые количественные расхождения. Однако, при учете наличия спейсерных слоев на высоких частотах $\hbar\omega > \Gamma$ наблюдаются как количественные, так и качественные отличия. Поэтому при расчетах с учетом наличия спейсерных слоев использование точных открытых граничных условий к нестационарному уравнению Шредингера становится принципиальным.

Третья глава посвящена исследованию переходных процессов в резонансно-туннельных диодах, вызванных мгновенным переключением напряжения. Рассматривается структура РТД № 3. Также как и в предыдущей главе, решалось нестационарное уравнение Шредингера с точными открытыми граничными условиями, только теперь считается, что потенциал переменного электрического поля имеет вид:

$$V_t(x,t) = \begin{cases} V_0 \cdot \frac{x}{L}, & \text{если } t \geq 0, \\ 0, & \text{если } t < 0. \end{cases}$$

Без учета межэлектронного взаимодействия переход в новое стационарное состояние происходит за времена порядка $\hbar/\Gamma$, т.е. за время жизни электрона в квантовой яме. При этом, переход сопровождается осцилляциями переходного тока с частотой, равной разности характерных энергий.

Можно было ожидать, что при реализации гистерезиса ВАХ РТД (за счет учета межэлектронного взаимодействия), можно сколь угодно малым переключающим напряжением перевести РТД из состояния с большим током в состояние с малым током за характерное время. Однако, нами было установлено, что переходные процессы вблизи точек «срыва» гистерезисной ВАХ (рисунок 7, точки $V_{dc}^{(1)}$ и $V_{dc}^{(2)}$) существенно изменяются, а их времена увеличиваются. Причина состоит в том, что мгновенное включение поля приводит к изменению самосогласованного потенциала $\varphi(x)$, удовлетворяющего уравнению Пуассона, который сдвигает резонансную энергию таким образом, что приход электронов за счет резонансного туннелирования

увеличивается, компенсируя их уход. При этом, времена перехода в новое стационарное состояние могут превосходить характерное в десятки и даже тысячи раз. В ходе исследований было показано, что увеличивая величину переключающего напряжения до значений порядка ширины резонансного уровня, можно уменьшить времена таких переходных процессов до характерного времени $\hbar/\Gamma$ (рисунок 8). Также численные расчеты показали, что характер зависимостей от времени среднего по координате потенциала $\varphi(x)$ и переходного тока на правой границе расчетной области одинаков и на этих зависимостях отсутствуют осцилляции.

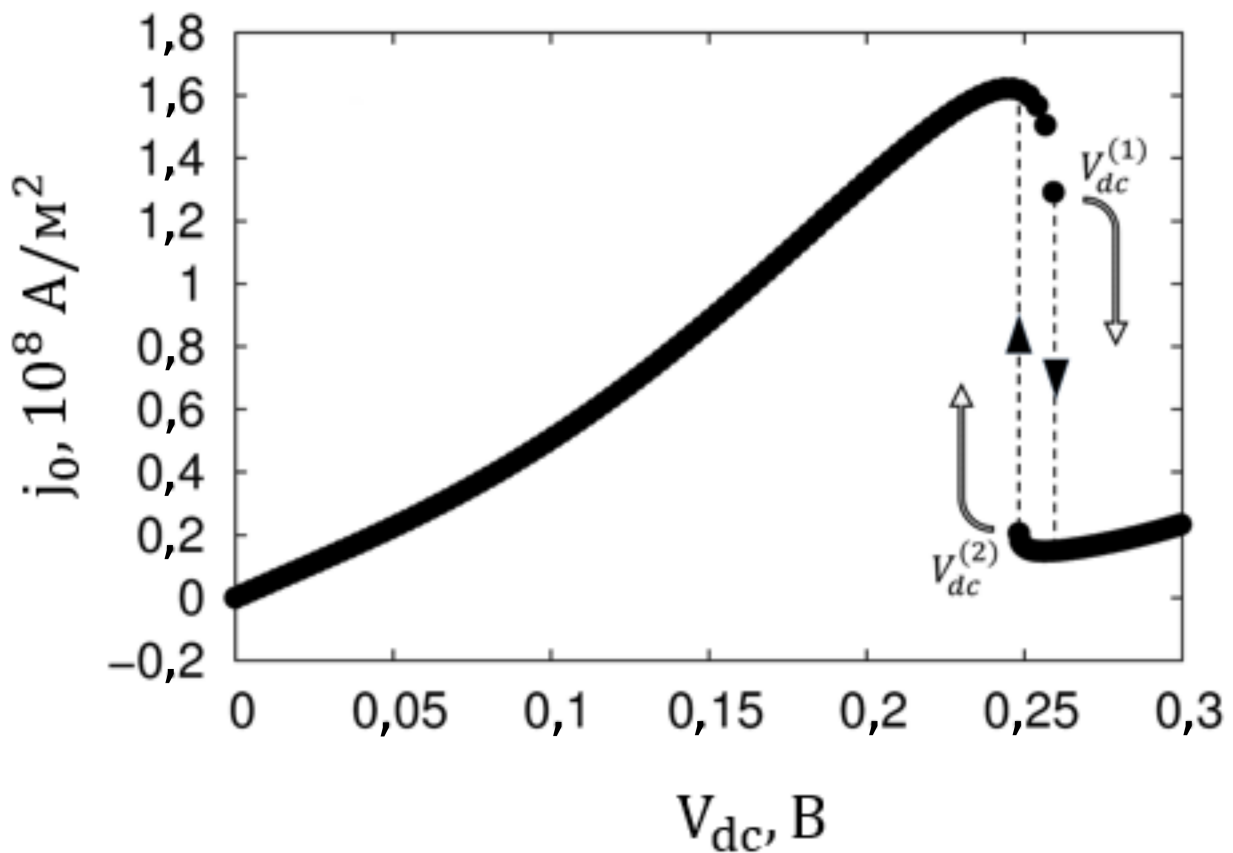
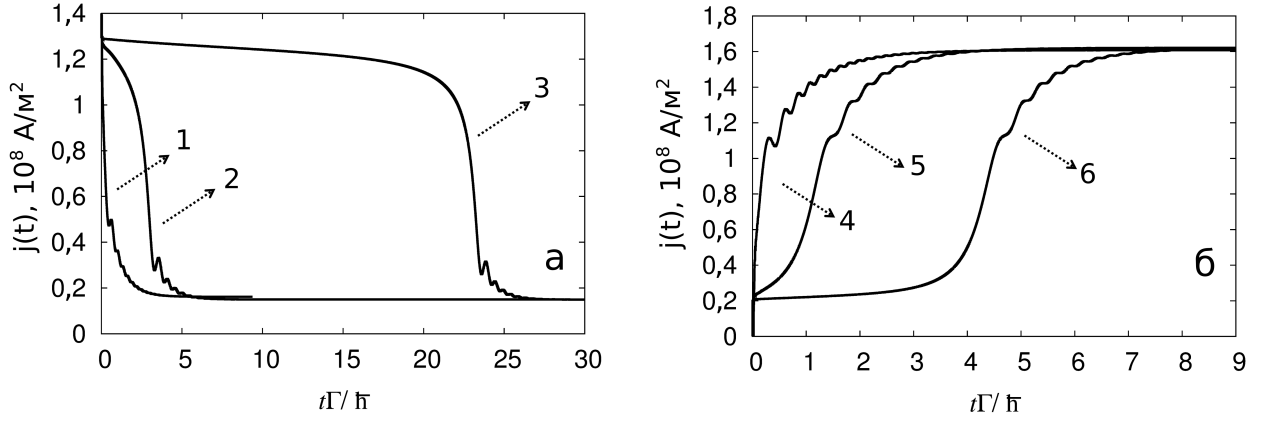


Рисунок 7 — Зависимость постоянного тока через РТД от напряжения для структуры РТД № 3 с учетом межэлектронного взаимодействия и при наличии гистерезиса. $L_{SE} = L_{SC} = 10$ нм. Стрелками обозначены переходы из точек «срыва» гистерезисной ВАХ, которым соответствуют значения постоянного напряжения $V_{dc}^{(1)}$ и $V_{dc}^{(2)}$.



(а) – переход из точки $V_{dc}^{(1)}$; (б) – переход из точки $V_{dc}^{(2)}$.

1 – $V_0 = 10$ мВ; 2 – $V_0 = 1$ мВ, 3 – $V_0 = 0,1$ мВ; 4–6 отвечают тем же значениям переключающих напряжений, что и в случае зависимостей 1–3, взятые с обратным знаком

Рисунок 8 — Зависимость среднего значения переходного тока от времени при различных значениях мгновенно прикладываемого напряжения V_0 ,
 $\varepsilon_F = 42$ мэВ.

Основные выводы

1. При исследовании статических характеристик при наличии межэлектронного взаимодействия показано, что для структур РТД с большим отношением энергии Ферми, которая зависит от концентрации доноров в контактных областях, к ширине резонансного уровня, определяемой параметрами активной области, $\varepsilon_F/\Gamma \sim 100$, межэлектронное взаимодействие при больших размерах спейсера эмиттера L_{SE} (для рассматриваемой нами структуры РТД № 3 $L_{SE} > 4$ нм) сильно подавляет величину пикового тока по сравнению со случаем, когда взаимодействие не учитывается. Это вызвано тем, что когда ε_F значительно превосходит Γ , большая часть электронов отражается от структуры, увеличивая их концентрацию в области спейсера эмиттера, что приводит к росту самосогласованного потенциала $\varphi(x)$, удовлетворяющего уравнению Пуассона, вызывающего уменьшение размеров квантовой ямы спейсера. Причем, уменьшается как ширина, так и глубина квантовой ямы спейсера эмиттера. При увеличении ширины резонансного уровня, например, за счет уменьшения толщины барьеров квантовой ямы, так, что $\varepsilon_F/\Gamma \sim 10$, эффект подавления пикового тока за счет учета межэлектронного взаимодействия становится незначителен.

2. Изучено поведение активного тока поляризации в широком интервале частот и амплитуд переменного электрического поля. В низкочастотном пределе $\hbar\omega \ll \Gamma$ для случая слабых переменных электрических полей $V_{ac} \ll \Gamma$ активная составляющая тока с точностью до постоянного множителя определяется дифференциальной проводимостью постоянного тока. В сильных полях, когда амплитуда потенциала поля превосходит ширину резонансного уровня $V_{ac} > \Gamma$, активный ток достигает своего максимального (по модулю) значения при некотором значении амплитуды поля, которое зависит от отношения ε_F/Γ , т.е. от параметров активной области и концентрации доноров в контактах. При этом величина постоянного напряжения, при которой модуль активного тока достигает своего максимума, монотонно увеличивается с ростом амплитуды поля.

3. Для случая высоких частот $\hbar\omega > \Gamma$ показано, что максимум модуля активного тока связан с реализацией квантового режима генерации. При этом, существенное влияние на характер поведения активного тока J_c оказывает отношение ε_F/Γ . Структуры с меньшим значением этого отношения при более низких частотах начинают проявлять особенности, характерные для моноэнергетического распределения. В мало-сигнальном приближении $V_{ac} \ll \Gamma$ эти особенности связаны со смещением величины постоянного напряжения, при которой модуль активного тока достигает своего максимума, из области максимальной ОДП в сторону бóльших значений постоянного напряжения. В сильных переменных электрических полях $V_{ac} > \Gamma$ активный ток РТД на высоких частотах может достигать больших значений, сопоставимых по порядку с максимальной величиной постоянного тока. Причем, при больших амплитудах поля происходит возбуждение высших квазиэнергетических уровней, что в частности приводит к медленному спаду активного тока при увеличении амплитуды поля, а также к скачкообразному изменению положения рабочей точки на величину $\sim \hbar\omega$. Это приводит к возможности достижения относительно больших мощностей генерации РТД порядка 10^5 Вт/см² на высоких частотах.

4. Установлено, что за счет подбора толщины спейсера эмиттера можно значительно увеличить активный ток, а, следовательно, и мощность, передаваемую электронами полю, на высоких частотах. Причем, максимальная мощность достигается не в низкочастотном пределе, а на конечной частоте.

те $\hbar\omega > \Gamma$, которая для рассматриваемой нами структуры РТД составляет $\omega = 2.5\Gamma/\hbar \approx 1.77$ ТГц. Резкое усиление активного тока вызвано образованием квантовой ямы в области спейсера эмиттера при приложении к структуре РТД постоянного напряжения, и возможностью реализации излучательных переходов между двумя резонансными уровнями. Таким образом, спейсер эмиттера, который изначально использовался для предотвращения попадания примесей в активную область, в случае двухбарьерных структур РТД играет ключевую роль, и поэтому оптимизации его параметров должно уделяться существенное внимание. Также было продемонстрировано, что при расчетах РТД с учетом спейсерных слоев использование точных открытых граничных условий к временному уравнению Шредингера, вместо, часто применяемых, приближенных граничных условий (12) становится принципиальным.

5. Исследование переходных процессов в РТД показало, что учет межэлектронного взаимодействия существенно меняет характер переходного процесса, особенно при наличии гистерезиса вольт-амперной характеристики. Без учета межэлектронного взаимодействия переход к новому стационарному состоянию происходит за времена, порядка $\hbar/\Gamma$, т.е. за время жизни электрона в квантовой яме. Установлено, что при переключениях слабым полем $V_0 \ll \Gamma$ времена переходных процессов из точек «срыва» гистерезисной ВАХ существенно возрастают по сравнению с характерным $\hbar/\Gamma$ и могут превосходить его в десятки раз и даже тысячи раз. Однако, время перехода можно уменьшить до характерного за счет увеличения величины поля переключения.

Основные публикации автора по теме диссертации

1. Grishakov K. S., Elesin V. F. Emitter spacer layers influence on the dynamic characteristics of resonant tunneling diode // IEEE Transactions on Electron Devices. – 2017. – Vol. 64. – No. 7. – P. 2963–2969.
2. Grishakov K. S., Elesin V. F. Transition times between the extremum points of the current–voltage characteristic of a resonant tunneling diode with hysteresis // Semiconductors. – 2016. – Vol. 50. – No. 8. – P. 1092–1096.

3. Grishakov K. S., Elesin V. F. Transient processes in a resonant tunneling diode in the presence of I-V curve hysteresis // Nanotechnologies in Russia. – 2015. – Vol. 10. – No. 5–6. – P. 449–457.

4. Effect of a diamond heat spreader on the characteristics of gallium nitride-based transistors / K. S. Grishakov, V. F. Elesin, N. I. Kargin et al. // Russian Microelectronics. – 2016. – Vol. 45. – No. 1. – P. 41–53.

5. Гришаков К. С., Елесин В. Ф. Переходные процессы в РТД с учетом межэлектронного взаимодействия в когерентной модели (Шредингер-Пуассон) // В сб.: Труды Научной сессии НИЯУ МИФИ-2014, Том 2, г. Москва. — 2014. — С. 86.

6. Гришаков К. С., Елесин В. Ф. Переходные процессы в резонансно-туннельном диоде с учетом межэлектронного взаимодействия в когерентной модели (Шредингер-Пуассон) // В сб.: Труды 5-ой Научно-практической конференции по физике и технологии наногетероструктурной СВЧ-электроники «Мокеровские чтения», г. Москва. – 2014. – С. 9.

7. Гришаков К. С., Елесин В. Ф. Времена перехода резонансно-туннельного диода между экстремальными точками гистерезисной вольт-амперной характеристики // В сб.: Труды 6-ой Международной Научно-практической конференции по физике и технологии наногетероструктурной СВЧ-электроники «Мокеровские чтения», г. Москва. – 2015. – С. 20.

8. Гришаков К. С., Елесин В. Ф. Влияние спейсера эмиттера на динамические характеристики резонансно-туннельного диода // В сб.: Доклады IV Всероссийской научной молодежной конференции с международным участием «Актуальные проблемы микро- и нанoeлектроники», г. Уфа. – 2016. – С. 12.

9. Гришаков К. С., Елесин В. Ф. Высокочастотный отклик резонансно-туннельного диода в сильном переменном электрическом поле // В сб.: Доклады IV Всероссийской научной молодежной конференции с международным участием «Актуальные проблемы микро- и нанoeлектроники», г. Уфа. – 2016. – С. 13.