



«Московский государственный технический университет
имени Н.Э. Баумана
Факультет «Радиоэлектроника и лазерная техника»
Кафедра «Технологии приборостроения»

Выпускная квалификационная работа
«Исследование гетероструктурных низкоразмерных каналов в
полупроводниковых устройствах»
по направлению подготовки 28.03.02 Наноинженерия

Студент:

Александров А.С.
группа Рлб-81Б

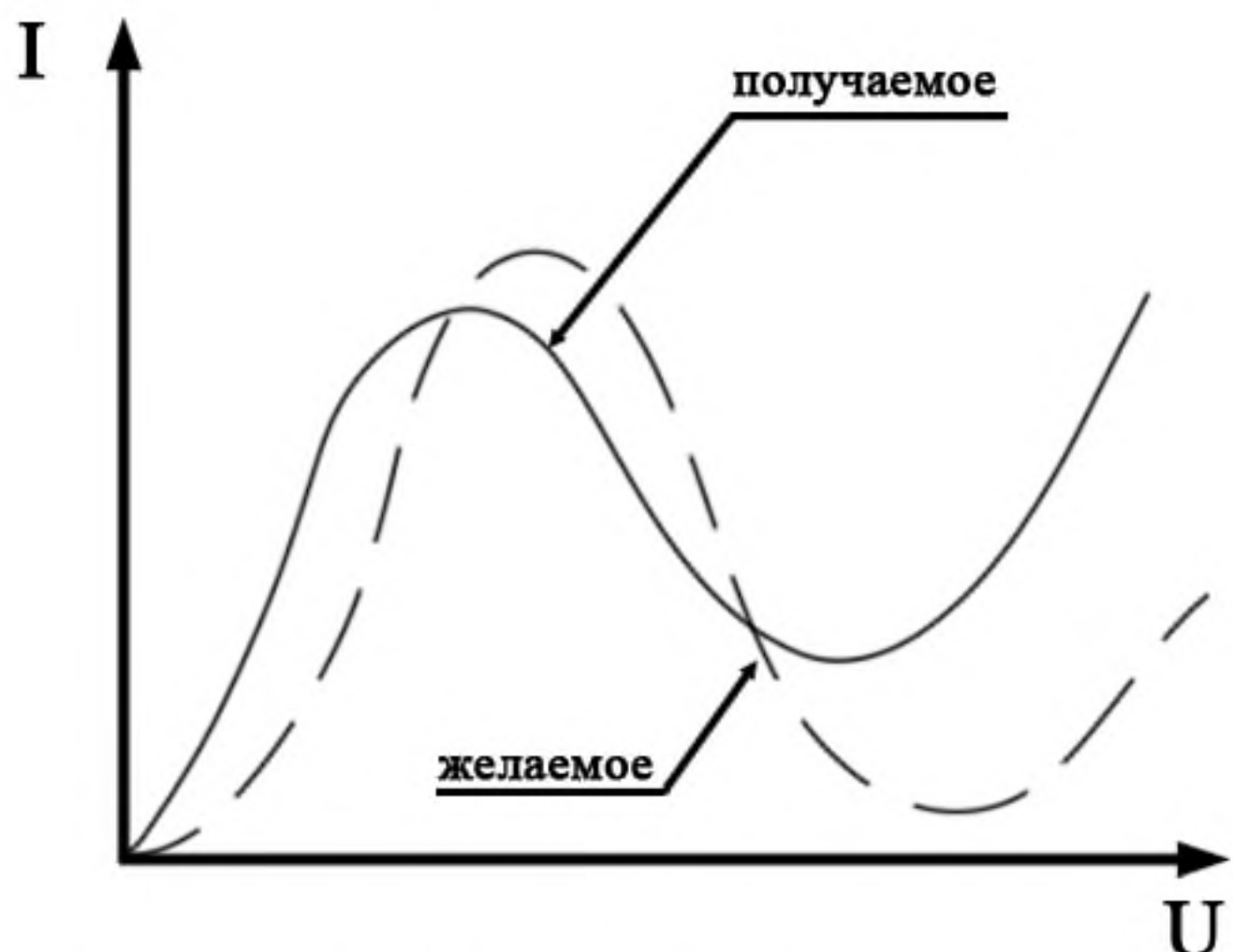
Руководитель ВКР:

Ветрова Н.А.
К.т.н., доцент

Актуальность и постановка проблемы



Проектирование устройства с требуемой ВАХ – сложная задача.



Поиск конструкционных параметров устройства реализуется методами «грубой силы».

С ростом количества управляющих параметров устройства сложность задачи значительно возрастает.

Требуется модификация методов определения параметров структуры, которые упростят и обеспечат большую эффективность процесса поиска.

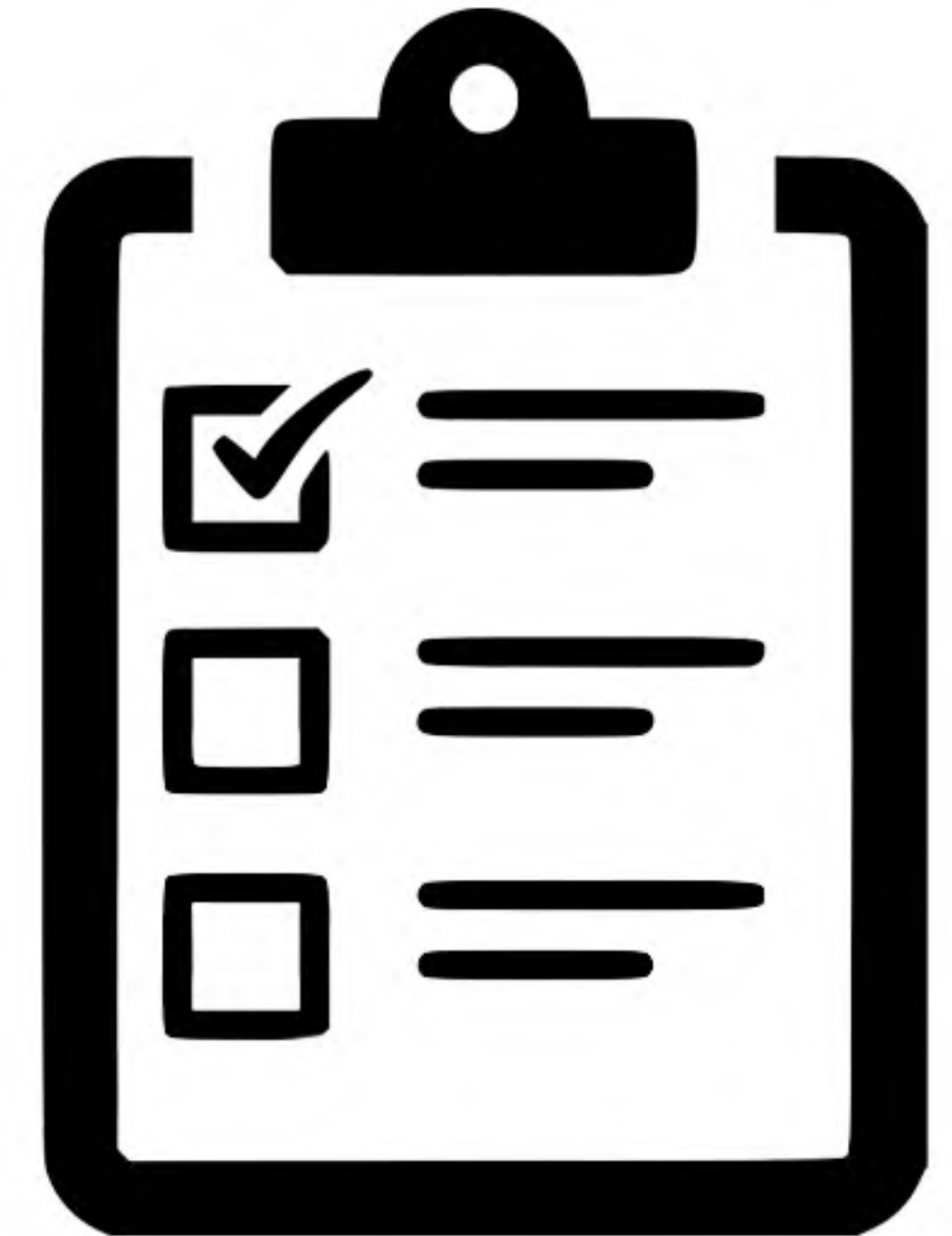
* – Белькова Е.В., Бельская А.Ю., Мешков С.А., Исследование субгармонических смесителей радиосигналов на основе ДБШ и перспективы замены нелинейных элементов на РТД

Цели и задачи исследования

Цель исследования - исследование гетероструктурных низкоразмерных AlGaAs каналов (ГК) в полупроводниковых устройствах.

Задачи исследования:

1. Разработка вычислительного алгоритма расчета электрических характеристик гетероструктурных низкоразмерных AlGaAs каналов в полупроводниковых устройствах.
 - 1.1. Обзор существующих методов расчета прозрачности ГК.
 - 1.2. Разработка вычислительного алгоритма расчета ВАХ ГК.
2. Верификация алгоритмов расчета электрических характеристик гетероструктурных низкоразмерных AlGaAs каналов в полупроводниковых устройствах.
3. Исследование гетерослоистых низкоразмерных каналов.
 - 3.1. Исследование гетероструктурных каналов в отсутствие напряжения.
 - 3.2. Исследование гетероструктурных каналов при наличии напряжения.
4. Разработка программного обеспечения расчета электрических характеристик гетероструктурных низкоразмерных AlGaAs каналов в полупроводниковых устройствах.



1.1 Обзор существующих методов расчета прозрачности

1.1.1 Метод функций Грина (МФГ)

Уравнение Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U \right) \Psi$$

$$U(t)=\text{const: } i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = E \Psi$$

$$E\psi = H\psi$$

$$\psi = \psi(r, t)$$

Закрытая система:

$$E\{\psi\} = [H]\{\psi\}$$

$$E[I]\{\psi\} - [H]\{\psi\} = 0$$

Открытая система:

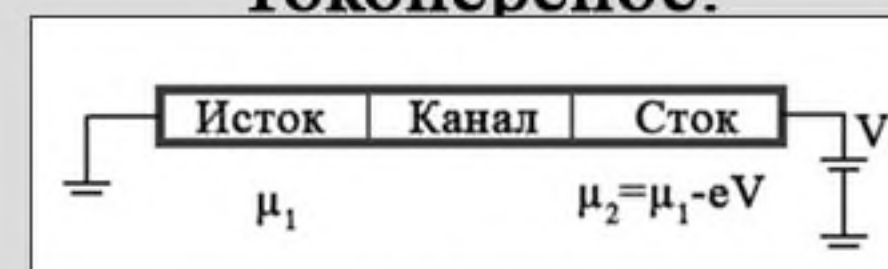
$$[E[I] - [H]]\{\psi\} = [\Sigma]\{\psi\} + \{F_{in}\}$$

$$[E[I] - H - \Sigma]\{\psi\} = \{F_{in}\}$$

$$\{\psi\} = G^{-1}(E)\{F_{in}\}$$

$$G(E) = [E[I] - H - \Sigma]^{-1}$$

Токоперенос:



$$I_{tn} = -\frac{e}{\hbar} \frac{\hbar}{\Delta x} v_1 n_1(x) =$$

$$= -\frac{e}{\hbar} Tr \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{2\pi} f_F(E - \mu) \Gamma_1(E) A(x, x', E) \right]$$

$$I_{out} = -\frac{e}{\hbar} Tr \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{2\pi} \Gamma_1 [f_1 A_1 + f_2 A_2] \right]$$

Статистические функции:

1. Электронная плотность

$$n(x) = \sum |\psi_m|^2 f_F(\epsilon_m - \mu)$$

2. Матрица плотности

$$\rho(x, x') = \sum \psi_m(x) f_F(\epsilon_m - \mu) \psi_m^*(x')$$

$$n(x) = \rho(x, x')$$

3. Спектральная функция

$$A(x, x'; E) = 2\pi \sum \psi_m(x) \delta(E - \epsilon_m) \psi_m^*(x')$$

$$\rho(x, x') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} A(x, x'; E) f_F(\epsilon_m - \mu) dE$$

Анализ структуры:

1. Спектральная функция

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

2. Матрица плотности

$$\rho(x, x') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} A(x, x'; E) f_F(\epsilon_m - \mu) dE$$

3. Электронная плотность

$$n(x) = \text{diag}(\rho(x, x'))$$

Электрические характеристики

$$I_{res} = I_{tn} - I_{out} =$$

$$= Tr\{\Gamma_1(A_1 + A_2)\}f_1 - Tr\{\Gamma_1 A_1 f_1 + \Gamma_1 A_2 f_2\} =$$

$$= Tr[\Gamma_1 A_2](f_1 - f_2) = Tr[\Gamma_1 G \Gamma_2 G^+](f_1 - f_2)$$

$$D(E) = Tr[\Gamma_1 G \Gamma_2 G^+]$$

$$I = \frac{e}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} I_{res} dE = \frac{e}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} D(E)(f_1 - f_2) dE$$

Ψ – волновая функция

\hbar – постоянная Дирака

m – эффективная масса

U – силовое поле

∇ – Набла (оператор частных производных)

i – мнимая единица

$[I]$ – единичная матрица

E – энергия частицы

$\{F_{in}\}$ – функция, описывающая приток электронов

$G(E)$ – функция Грина

$[\Sigma]$ – матрица собственных значений

$f_F(E)$ – функция Ферми-Дирака

Γ – матрица уширений

I – суммарный ток

$Tr[X]$ – след матрицы X

$D(E)$ – коэффициент прозрачности

1.1.2 Метод матриц переноса (ММП)

Структура = последовательность слоёв, силовое поле в которых можно считать постоянным.

В каждой области определены значения параметров структуры и значение силового поля: m_k и U_k .

Волновая функция будет представлять из себя совокупность падающей и отраженной плоских волн вдоль оси z :

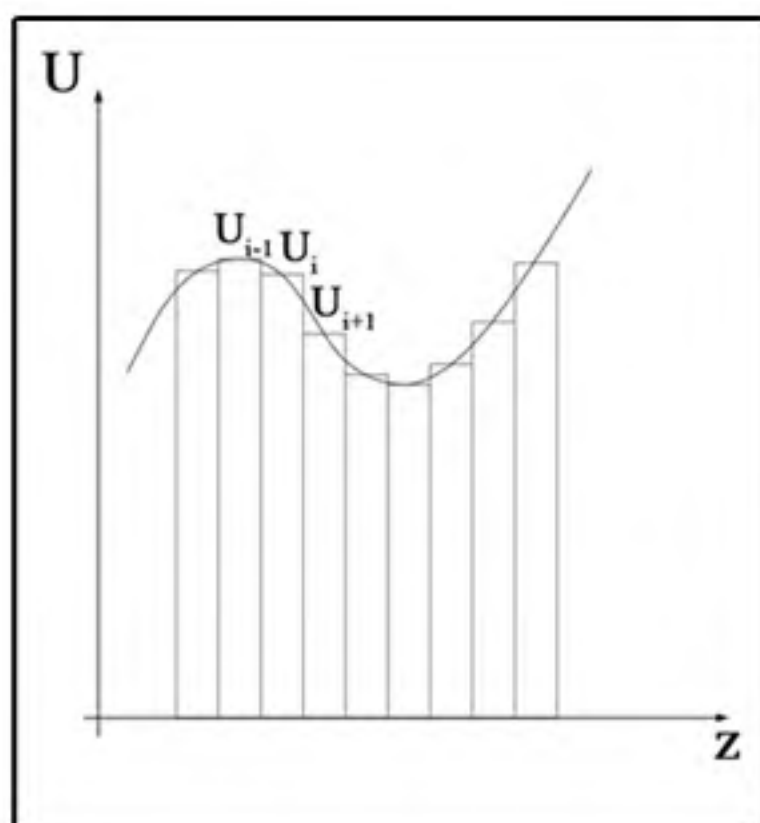
$$\psi_k(z) = A_k e^{i\gamma_k z} + B_k e^{-i\gamma_k z}$$

Условия сшивки Бастарда:

$$\begin{cases} \psi_k = \psi_{k+1} \\ \frac{1}{m_k} \psi'_k = \frac{1}{m_{k+1}} \psi'_{k+1} \end{cases}$$

Определение коэффициентов:

$$\begin{cases} A_k e^{i\gamma_k z} + B_k e^{-i\gamma_k z} = \\ = A_{k+1} e^{i\gamma_{k+1} z} + B_{k+1} e^{-i\gamma_{k+1} z} \\ \frac{iA_k \gamma_k}{m_k} e^{i\gamma_k z} - \frac{iB_k \gamma_k}{m_k} e^{-i\gamma_k z} = \\ = \frac{iA_{k+1} \gamma_{k+1}}{m_{k+1}} e^{i\gamma_{k+1} z} - \frac{iB_{k+1} \gamma_{k+1}}{m_{k+1}} e^{-i\gamma_{k+1} z} \end{cases}$$



Уравнение связи соседних областей:

$$\begin{pmatrix} A_{k+1} \\ B_{k+1} \end{pmatrix} = T_{k,k+1} \begin{pmatrix} A_k \\ B_k \end{pmatrix}$$

$$T_{k,k+1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\gamma_k}{\gamma_{k+1}} \frac{m_{k+1}}{m_k} \right) e^{-i(\gamma_{k+1}-\gamma_k)z_k} & \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\gamma_k}{\gamma_{k+1}} \frac{m_{k+1}}{m_k} \right) e^{-i(\gamma_{k+1}+\gamma_k)z_k} \\ \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\gamma_k}{\gamma_{k+1}} \frac{m_{k+1}}{m_k} \right) e^{i(\gamma_{k+1}+\gamma_k)z_k} & \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\gamma_k}{\gamma_{k+1}} \frac{m_{k+1}}{m_k} \right) e^{i(\gamma_{k+1}-\gamma_k)z_k} \end{pmatrix}$$

Коэффициент прозрачности

$$\begin{pmatrix} A_{N+1} \\ 0 \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix}, \quad T = \begin{pmatrix} T_{00} & T_{01} \\ T_{10} & T_{11} \end{pmatrix} = \prod_{j=N}^0 T_{j,j+1}$$

$$D = \frac{|\gamma_{N+1}|}{|\gamma_0|} \frac{m_0}{m_{N+1}} \frac{|A_{N+1}|^2}{|A_0|^2}$$

$$D = \frac{|\gamma_{N+1}|}{|\gamma_0|} \frac{m_0}{m_{N+1}} \frac{|T_{11}T_{00} - T_{01}T_{10}|^2}{|T_{11}|^2}$$

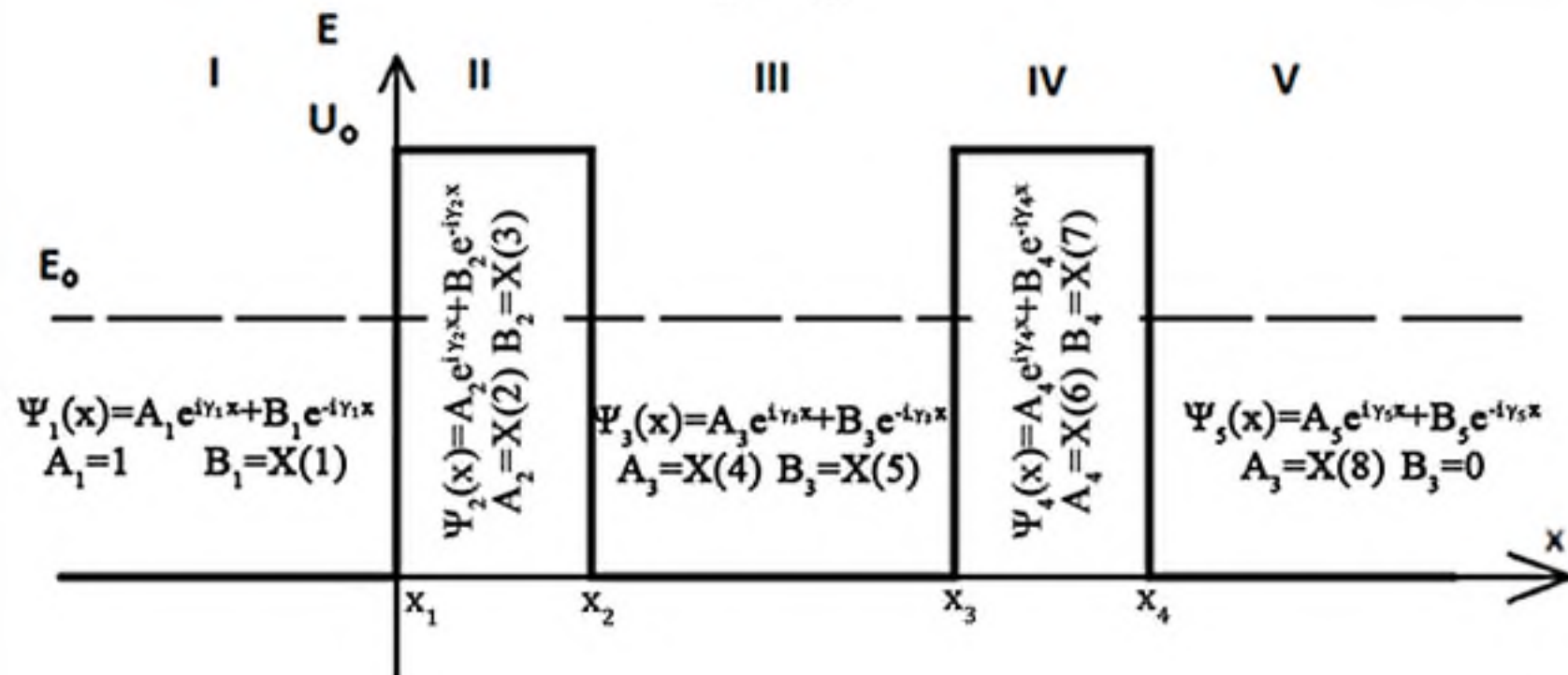
$$\gamma_k = \frac{\sqrt{2m_k(E_k - V_k)}}{\hbar} \text{ — волновое число}$$

T — матрица переноса волны

- при дискретизации можно рассматривать структуры сложных энергетических профилей
- эффективен для малого количества гетерослоёв N
- при увеличении N метод проявляет нестабильность
- альтернатива - метод треугольных профилей (трудоемок)

1.1.3 Аналитический метод расчета

$V=0$



$$\Psi_n(x) = A_n e^{i \gamma_n x} + B_n e^{-i \gamma_n x}$$

$$\gamma_k = \frac{\sqrt{2m_n(E - U_n)}}{\hbar}, n = 1 \dots V$$

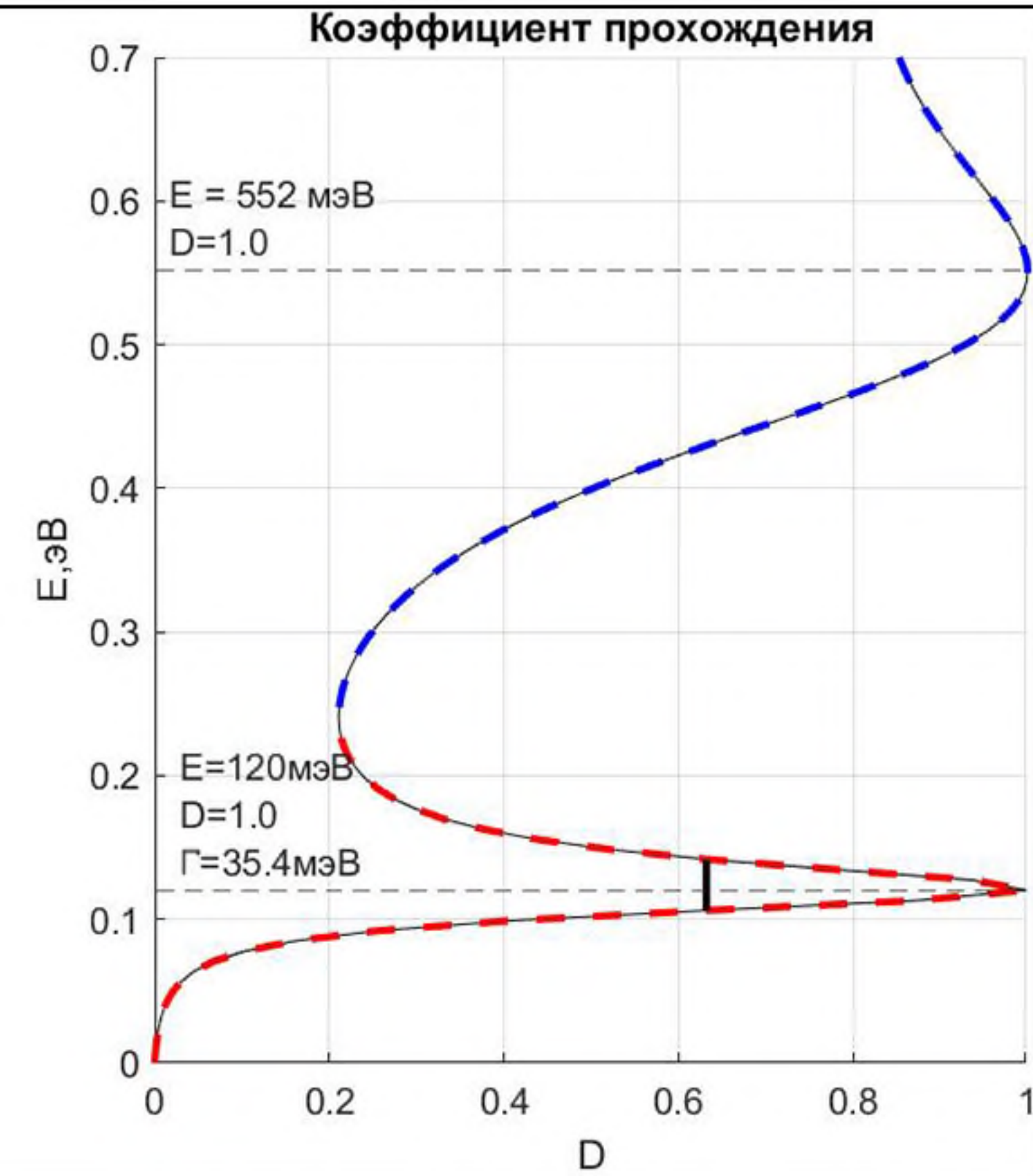
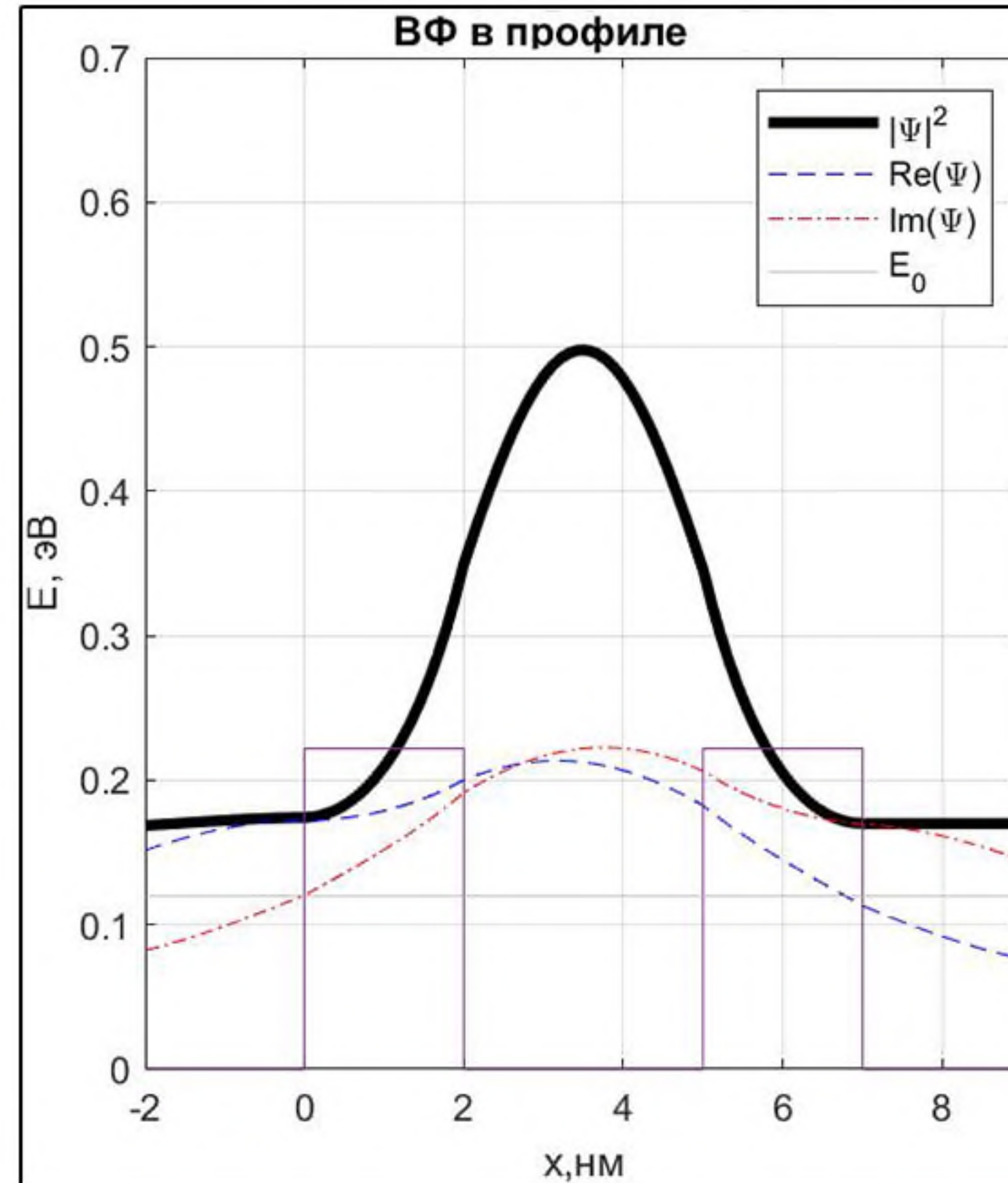
$$A_1 = 1, B_5 = 0$$

$$\begin{cases} \Psi_n(x_0) = \Psi_{n+1}(x_0) \\ \frac{1}{m_n} \Psi_n'(x_0) = \frac{1}{m_{n+1}} \Psi_{n+1}'(x_0) \end{cases}$$

8 уравнений \Rightarrow СЛАУ $Y X_E = Z$
8 неизвестных

$$X_E = [B_1, A_2, B_2, A_3, B_3, A_4, B_4, A_5]$$

$$D(E) = \left| \frac{A_5}{A_1} \right|^2 = \left| \frac{X_E(8)}{1} \right|^2 = |X_E(8)|^2$$



Γ — уширение уровня

Аналитическое рассмотрение структуры позволило:

- 1) Получить непосредственно ВФ
- 2) Физически интерпретировать резонансный характер прозрачности канала как следствие интерференционных процессов

Существенное ограничение аналитического метода расчета: $V = 0$

2. Верификация алгоритмов расчета электрических характеристик

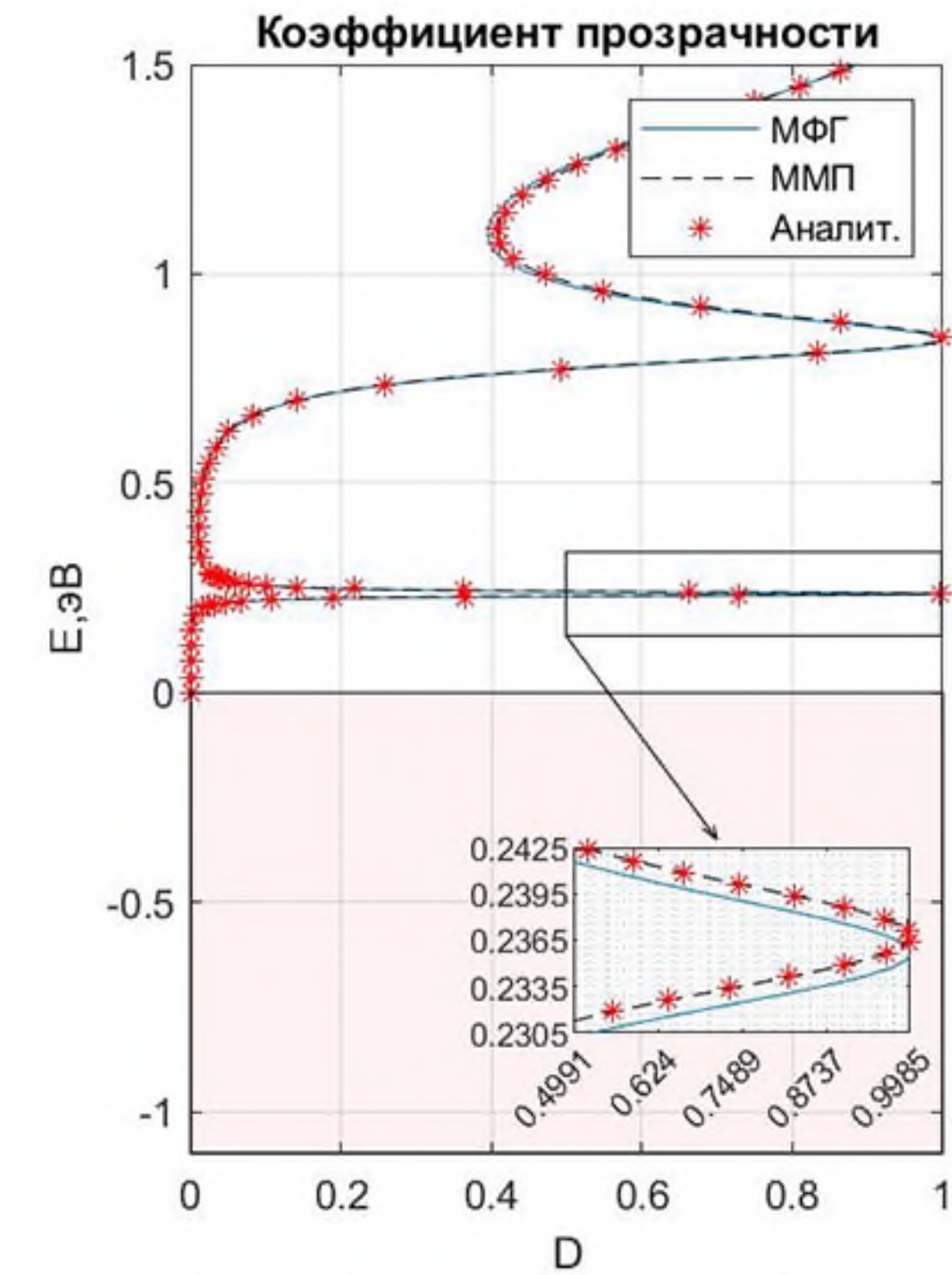
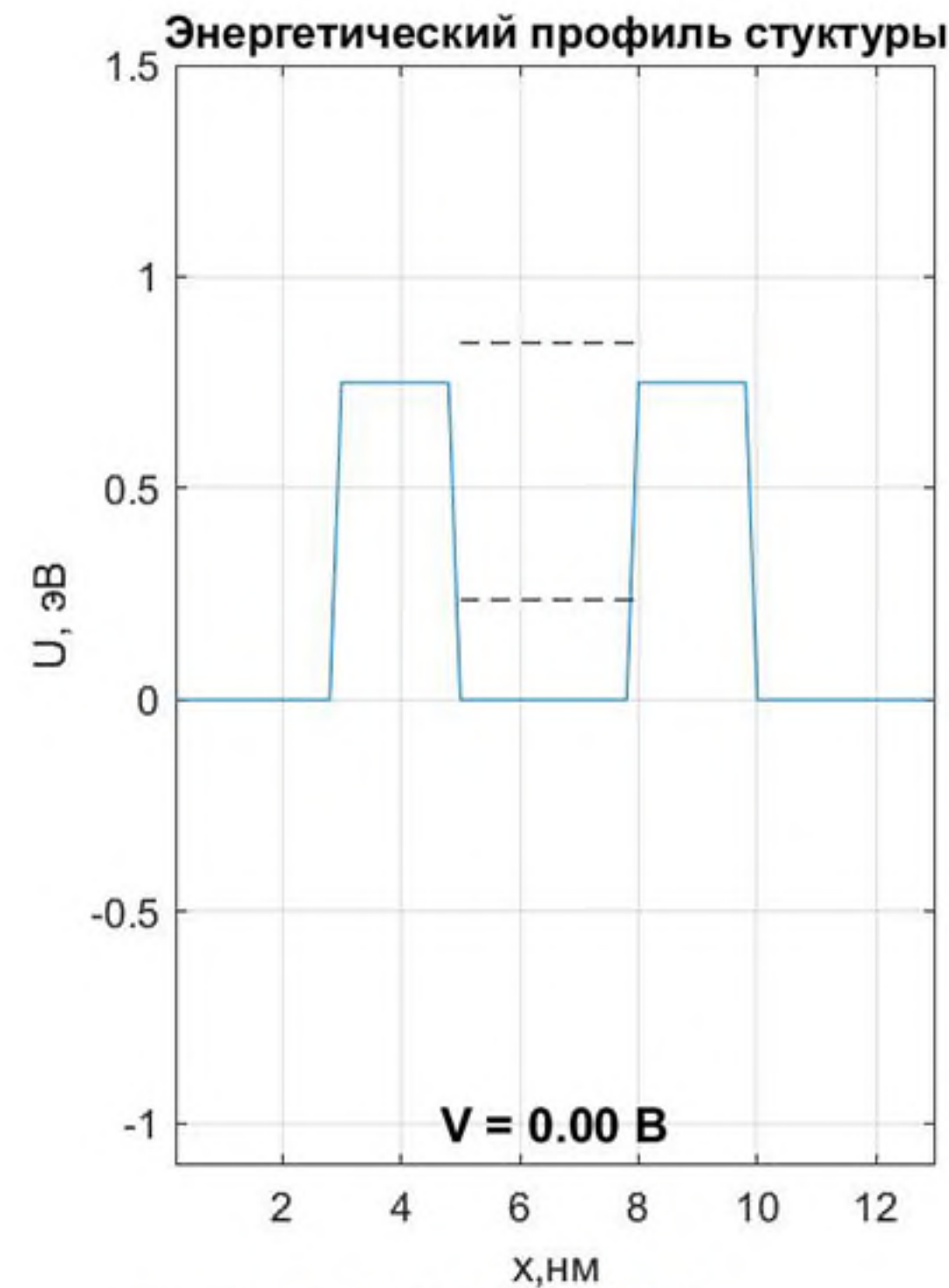
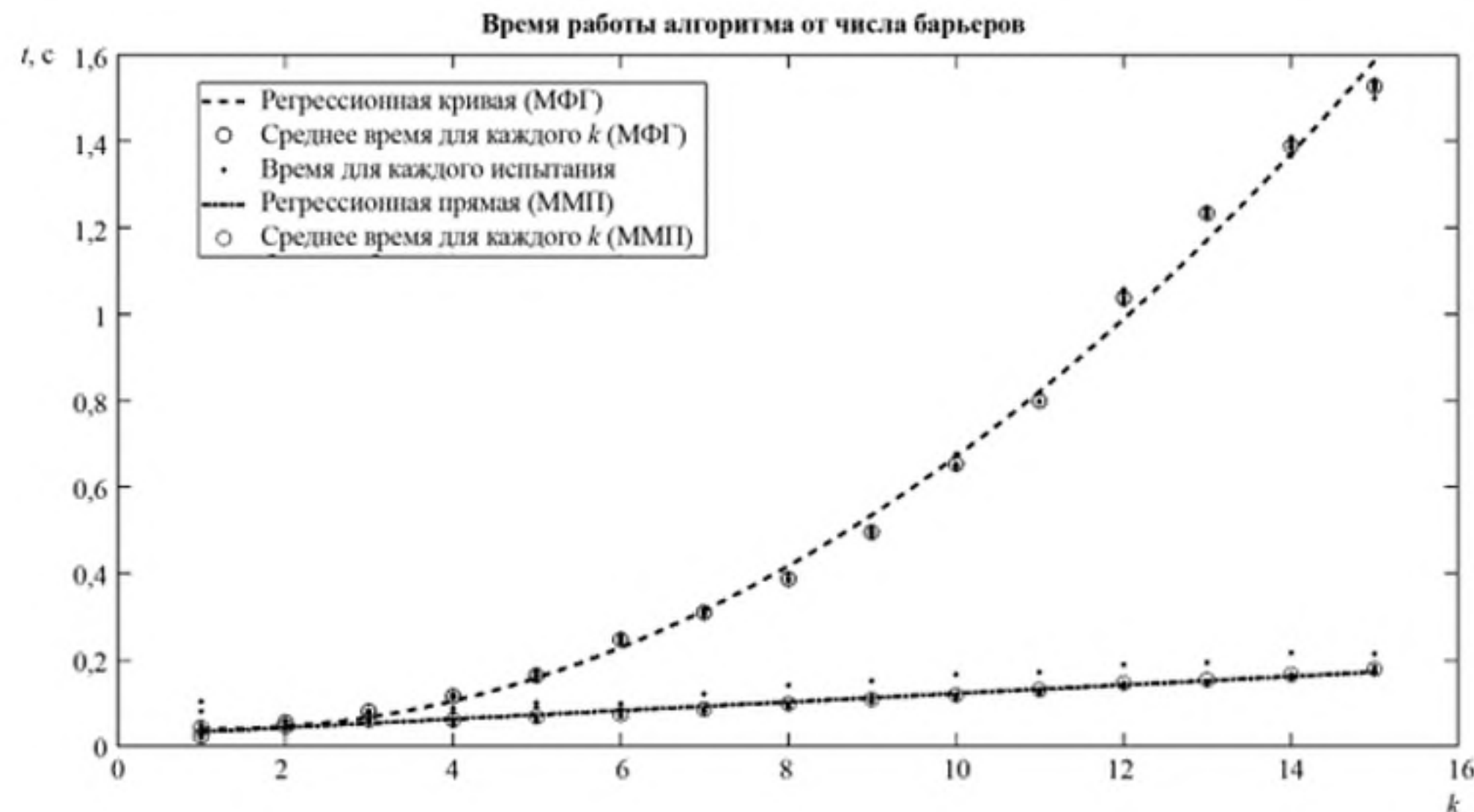
Структура AlGaAs/GaAs/AlGaAs (2/3/2 нм) в отсутствие напряжения была проанализирована:

- 1) МФГ
- 2) Аналитически
- 3) ММП

Так как при реализации МФГ наблюдается квадратичная зависимость времени расчета от сложности структуры, а для ММП – линейная, то в качестве метода расчета прозрачности был выбран ММП.

Погрешность определения положения РУ составила 10^{-14} %.

Максимальная погрешность определения прозрачности не превысила 10^{-13} %.



```
250 max(abs(DD-Danalyt))/DD)*100 %максимальное расхождение коэффициента прозрачности по ММП
251 max(abs(D-Danalyt))/D)*100 %максимальное расхождение коэффициента прозрачности по МФГ
252
253 E1=Ener(islocalmax(DD)); E1=E1(1); %расположение первого РУ по ММП
254 E2=Ener(islocalmax(D)); E2=E2(1); %расположение первого РУ по МФГ
255 E3=Eanalyt(islocalmax(Danalyt))/e; E3=E3(1); %расположение первого РУ по аналитическому методу
256
257 (E1-E3)/E1*100
258 (E2-E3)/E2*100
259
260
```

Command Window

```
ans =
9.9058e-14
ans =
0.4641
ans =
1.1743e-14
ans =
1.1743e-14
```

- Максимальная погрешность коэффициента прозрачности ММП, %
- Максимальная погрешность коэффициента прозрачности МФГ, %
- Погрешность определения положения первого РУ ММП, %
- Погрешность определения положения первого РУ МФГ, %

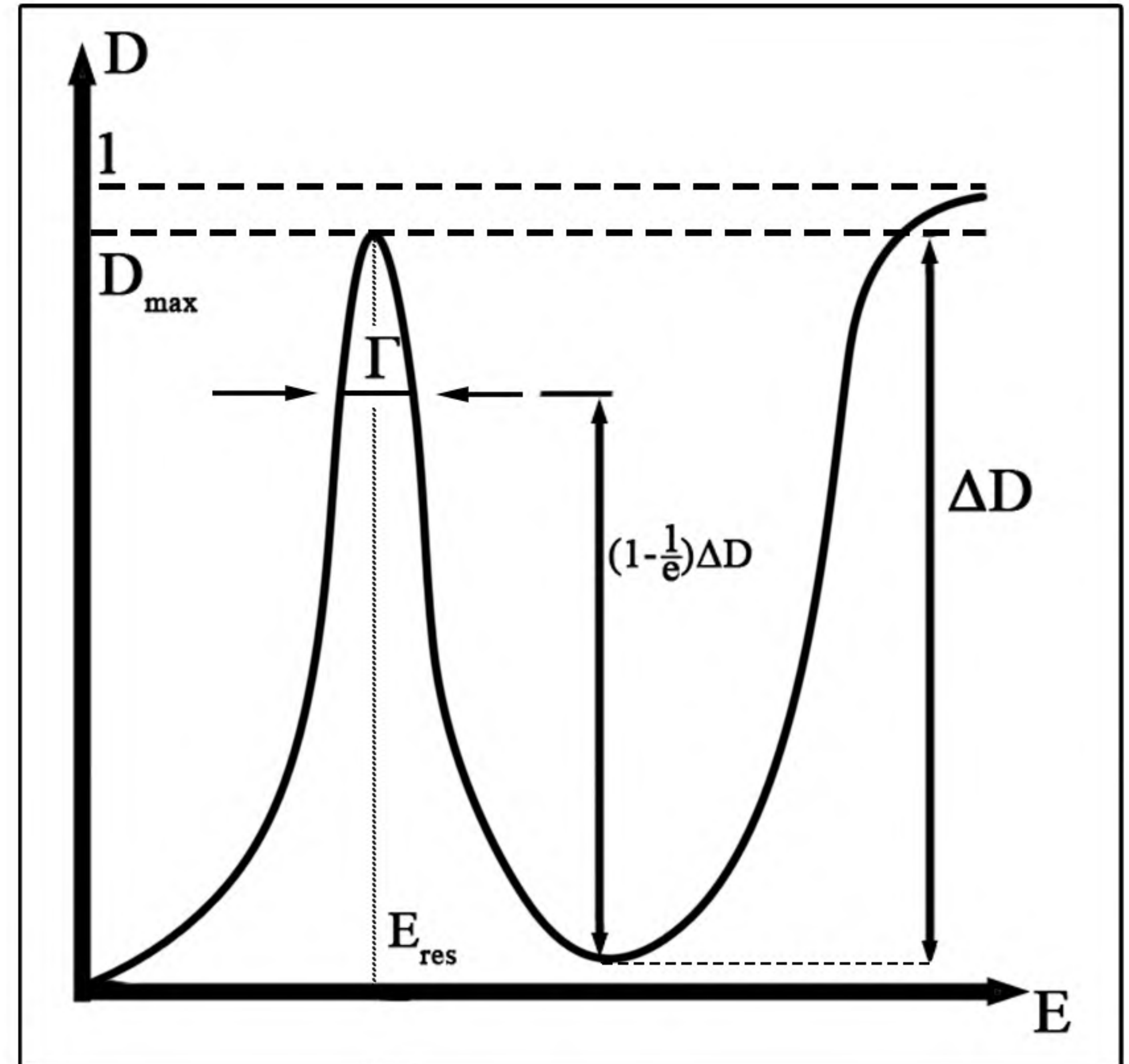
3. Исследование гетероструктурных низкоразмерных каналов

В зависимости от параметров структур были измерены следующие характеристики:

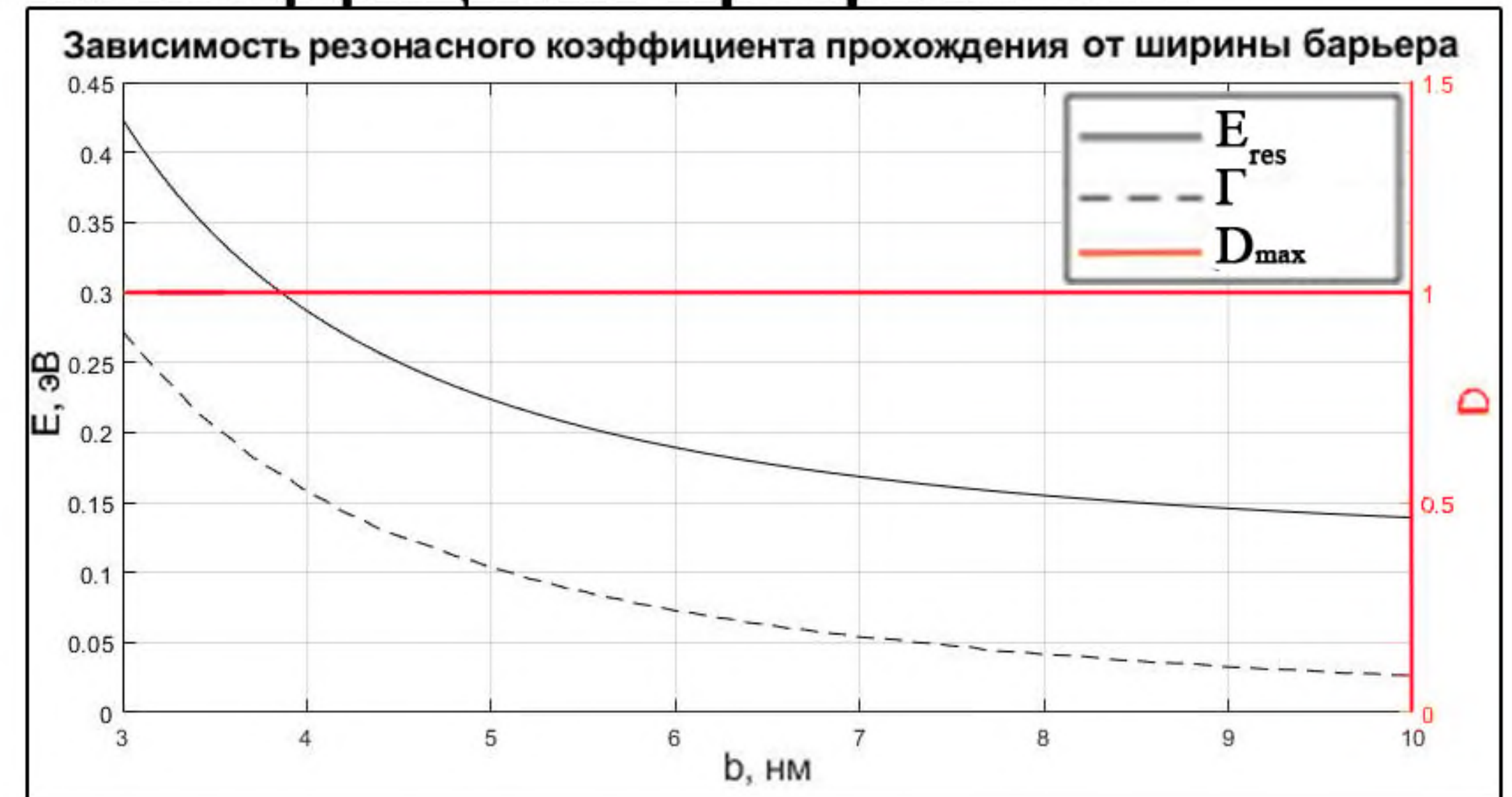
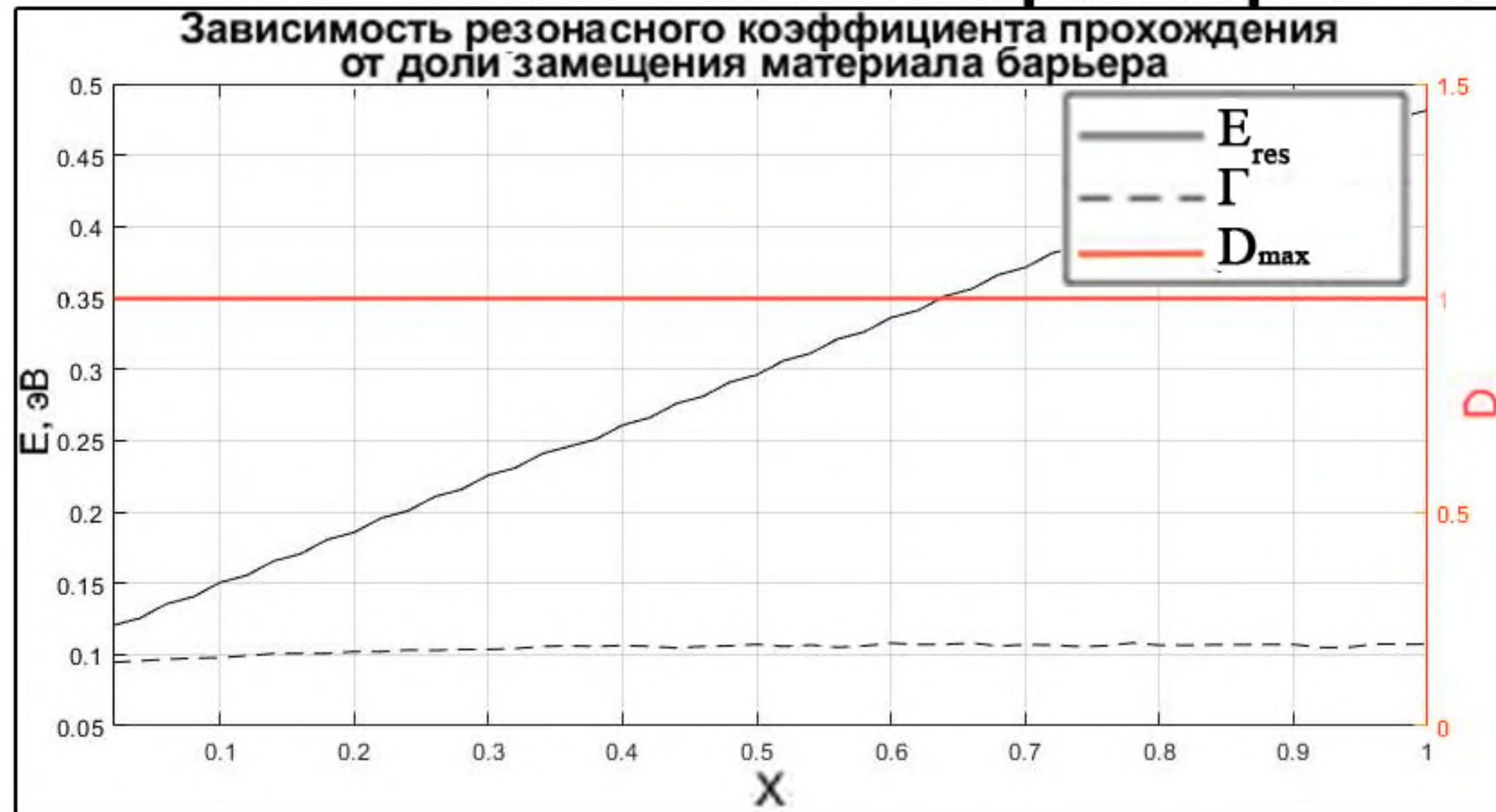
- Положение первого резонансного уровня (РУ) прозрачности E_{res}
- Значение первого резонансного коэффициента прозрачности D_{max}
- Уширение первого резонансного уровня Γ (замеряется на доле $(1-1/e)$ от минимального отклонения коэффициента прозрачности)

Данные характеристики были оценены для однобарьерной и двухбарьерной квантовых структур (ОБКС и ДБКС) на основе GaAs в зависимости от следующих параметров:

- ширина барьера
- ширина ямы (для ДБКС)
- доля замещения атомов основного материала



3.1 Влияние параметров ОБКС на коэффициент прозрачности



С увеличением доли замещения:

- Сдвиг E_{res} в область больших значений.

(Аналогично понижению положения первого резонансного уровня с увеличением глубины квантовой ямы)

- Уширение Γ не изменяется.

(Стабильность* состояния не меняется)

С увеличением ширины барьера:

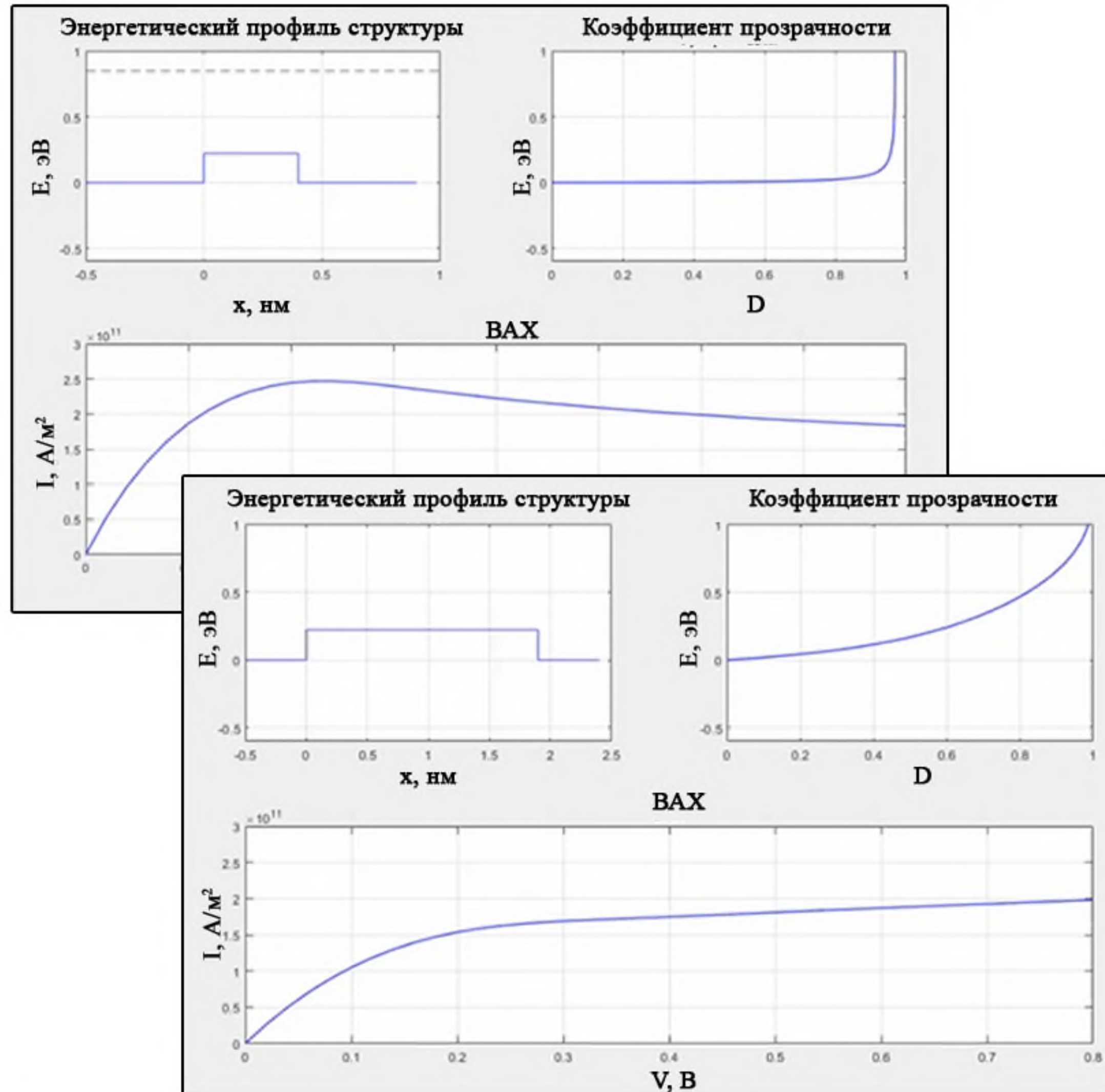
- Уменьшение E_{res} .

(Аналогично понижению положения первого резонансного уровня с увеличением ширины в квантовой яме)

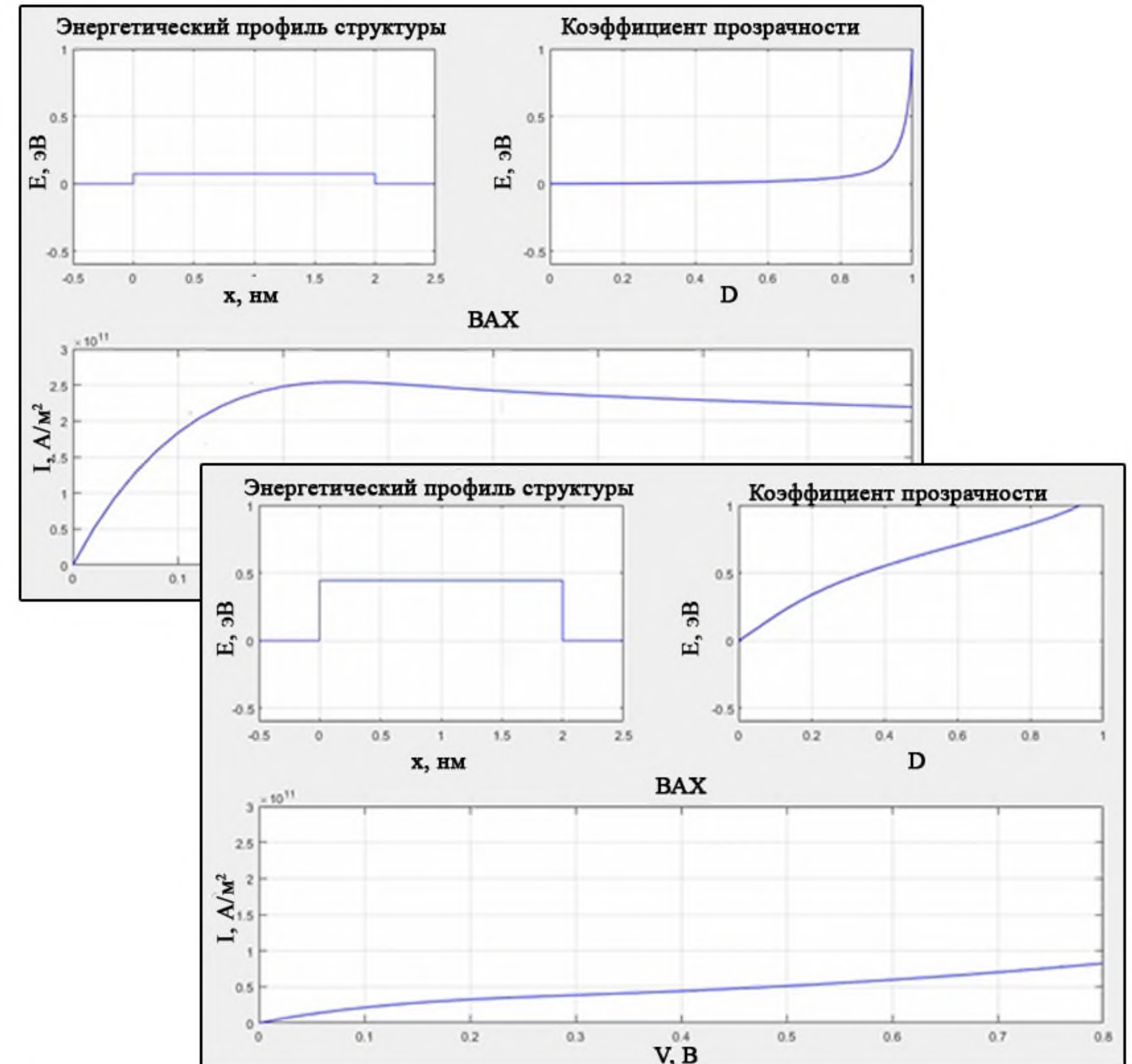
- Γ уменьшается.

(Состояние становится более стабильным)

3.1 Влияние параметров ОБКС на ВАХ

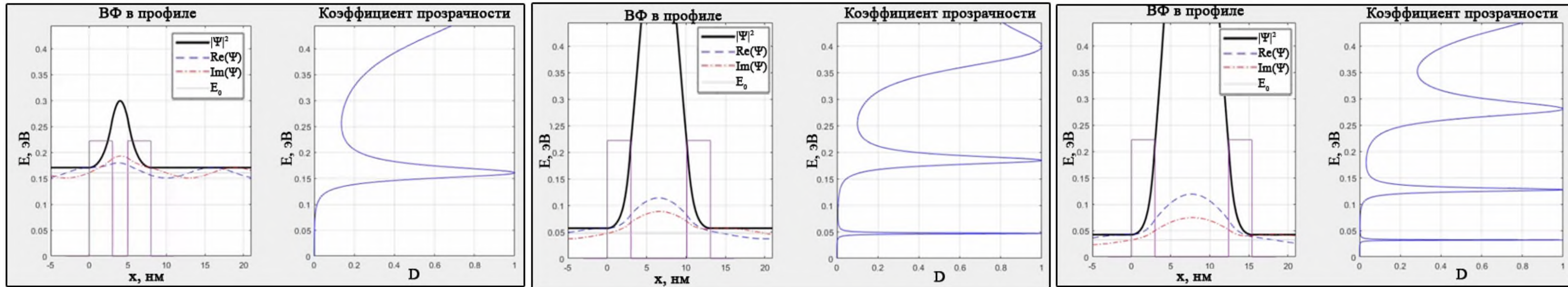


С увеличением ширины барьера отрицательная дифференциальная проводимость (ОДП) вырождается, пиковый ток уменьшается (так как уширение уменьшается)



С увеличением доли замещения материала барьера ОДП вырождается, пиковый ток уменьшается (так как энергия РУ увеличивается)

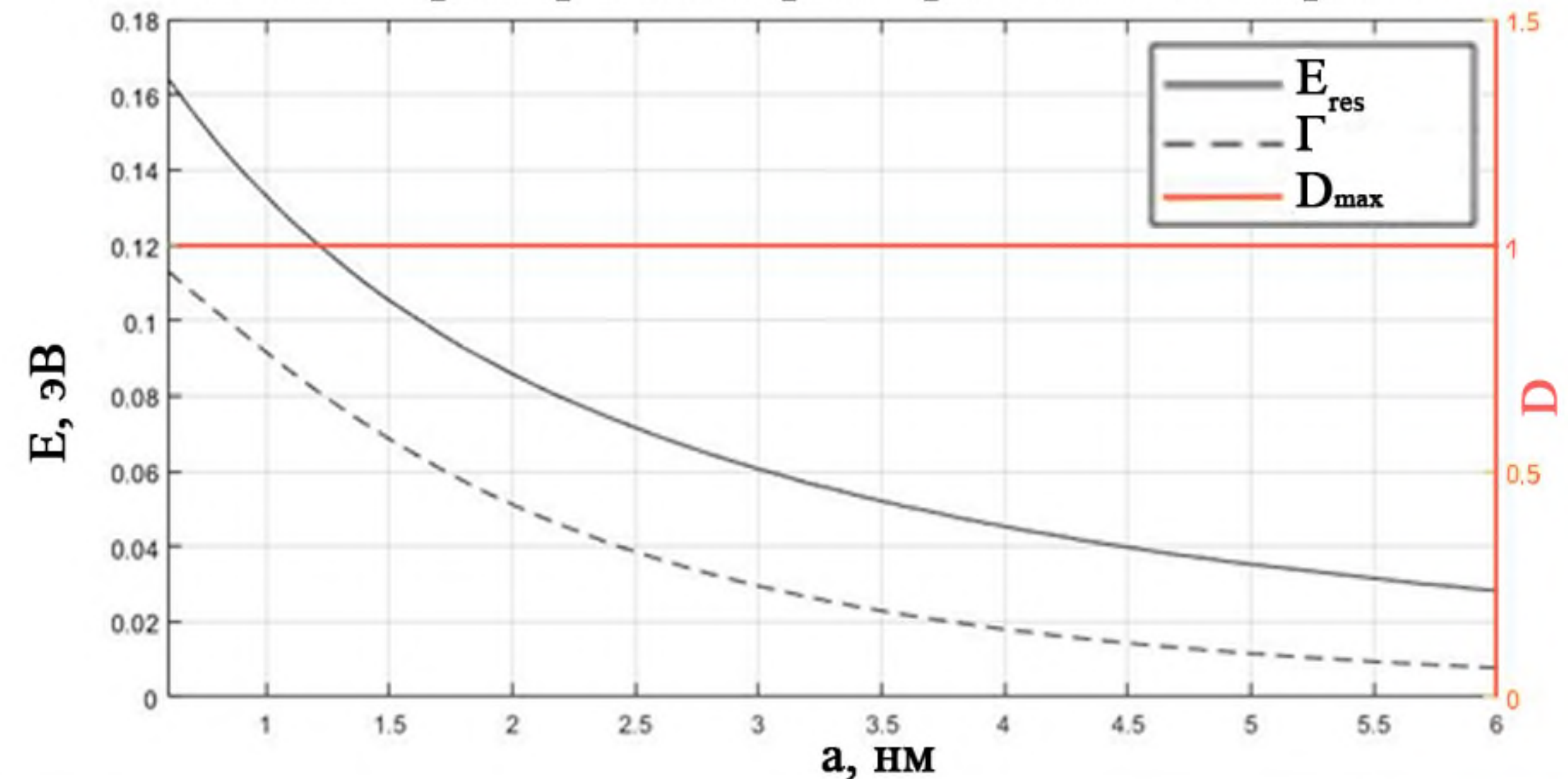
3.2.1 Влияние ширины ямы ДБКС на коэффициент прозрачности



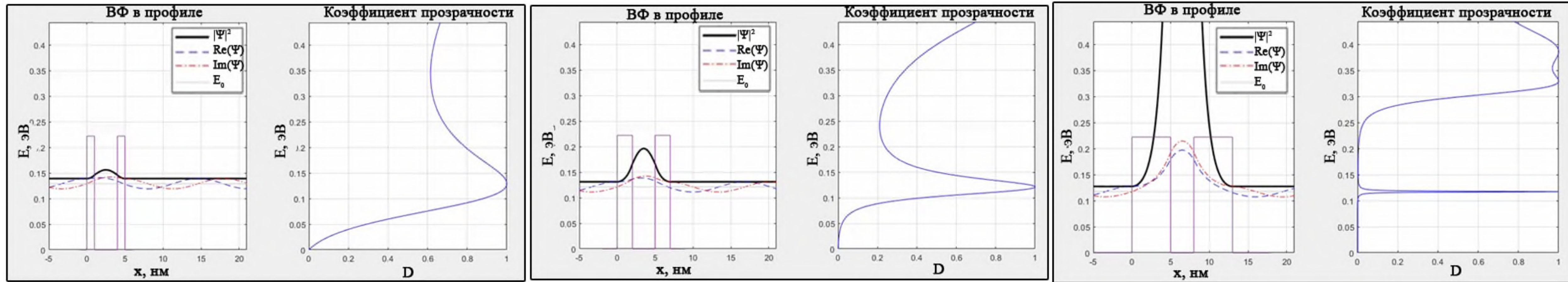
С увеличением ширины канала:

- Сдвиг E_{res} в область меньших значений.
(Аналогично понижению положения первого резонансного уровня с увеличением глубины квантовой ямы)
- Γ уменьшается.
(Стабильность состояния увеличивается)
- Частота квазипериодичности прозрачности увеличивается.
(В более широкую яму уместается большее количество уровней.)
- Минимумы принимают меньшие значения.
(Стабильность состояния увеличивается)

Зависимость характеристик первого резонанса от ширины ямы



3.2.2 Влияние ширины барьеров ДБКС на коэффициент прозрачности



С увеличением ширины барьеров:

- Положение E_{res} не меняется.

(Положение резонансного уровня определяется шириной канала)

- Уширение Γ уменьшается.

(Стабильность состояний увеличивается)

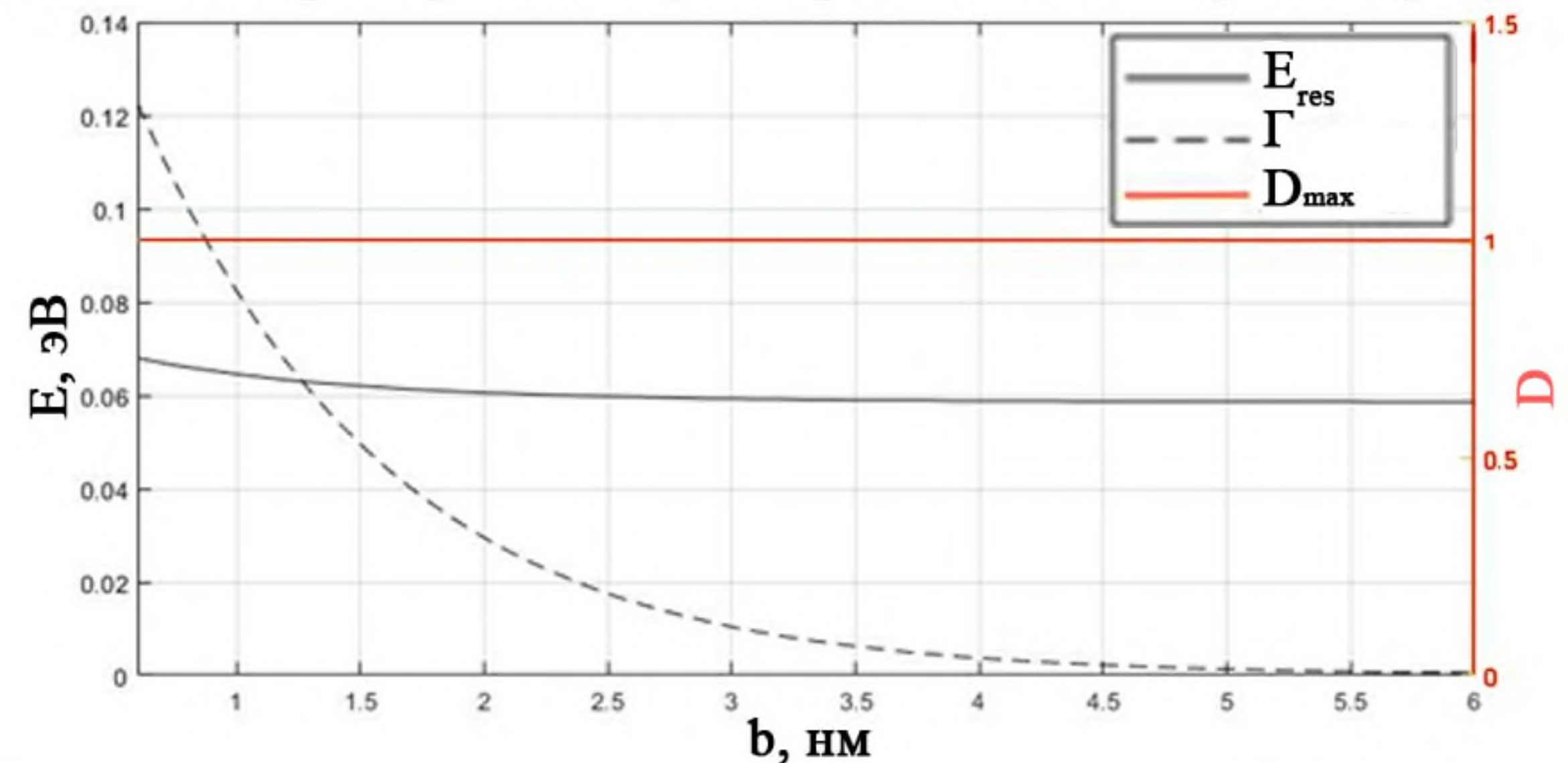
- Частота квазипериодичности увеличивается.

(По аналогии с ямами - в широких ямах большее количество уровней на единицу энергии)

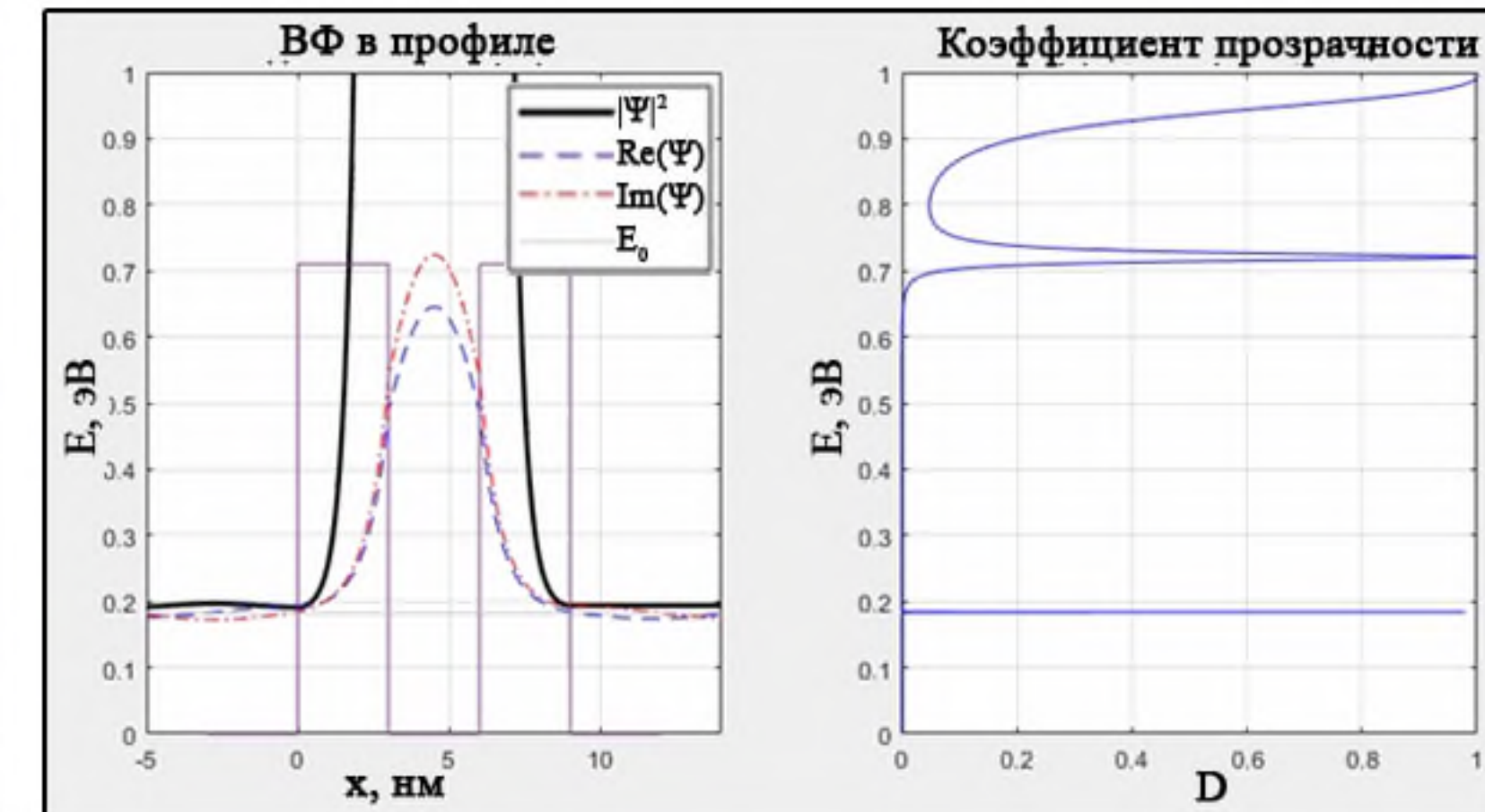
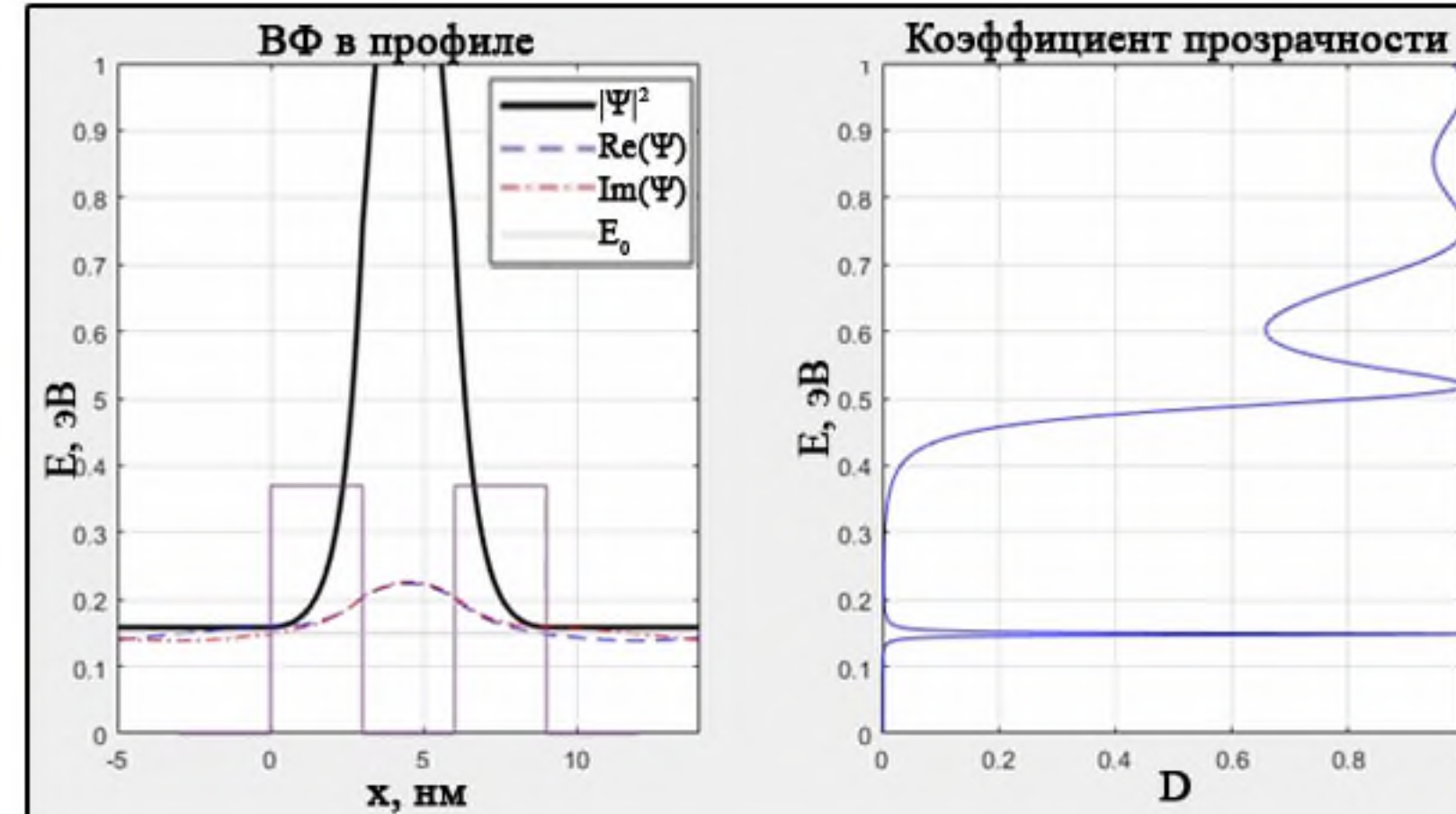
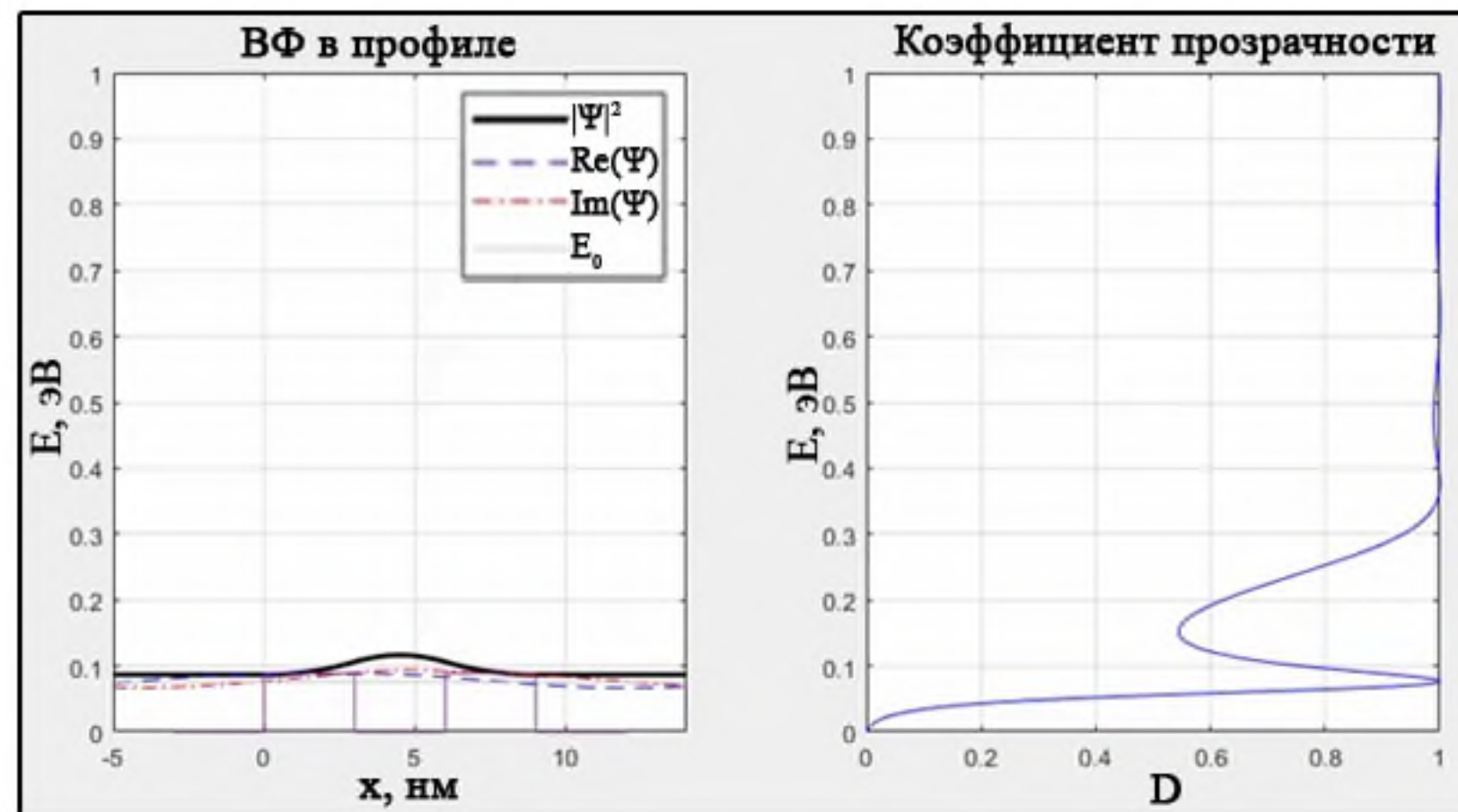
- Минимумы принимают меньшие значения.

(Чем шире барьеры тем меньше вероятность туннелирования вне резонанса)

Зависимость характеристик первого резонанса от ширины барьеров



3.2.3 Влияние относительной доли замещения барьеров ДБКС



С увеличением высоты барьеров:

- E_{res} увеличивается.

(Чем выше яма, тем выше первый уровень)

- Γ уменьшается.

(Стабильность состояний увеличивается)

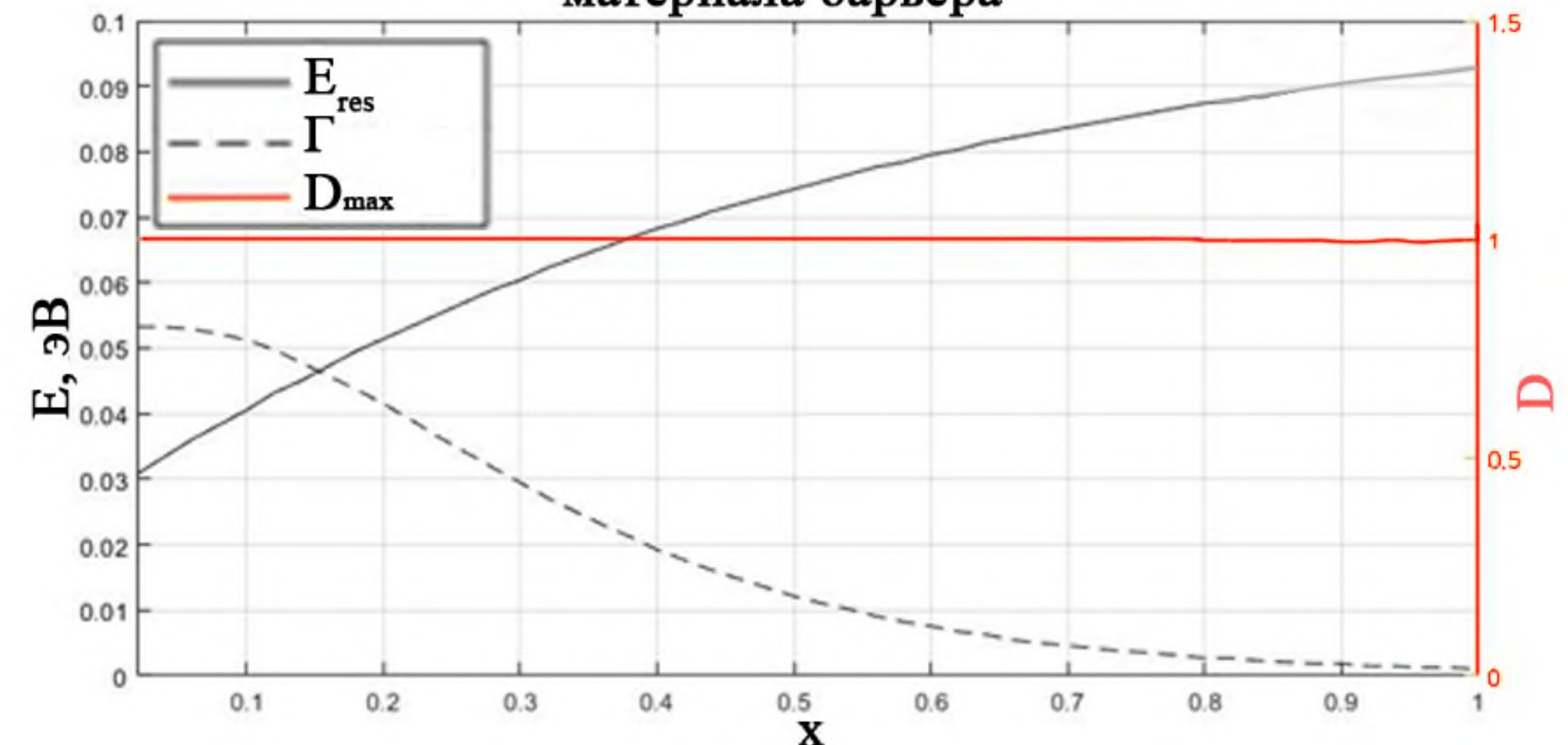
- Частота квазипериодичности увеличивается.

(По аналогии с ямами - в высоких ямах большее количество уровней на единицу энергии)

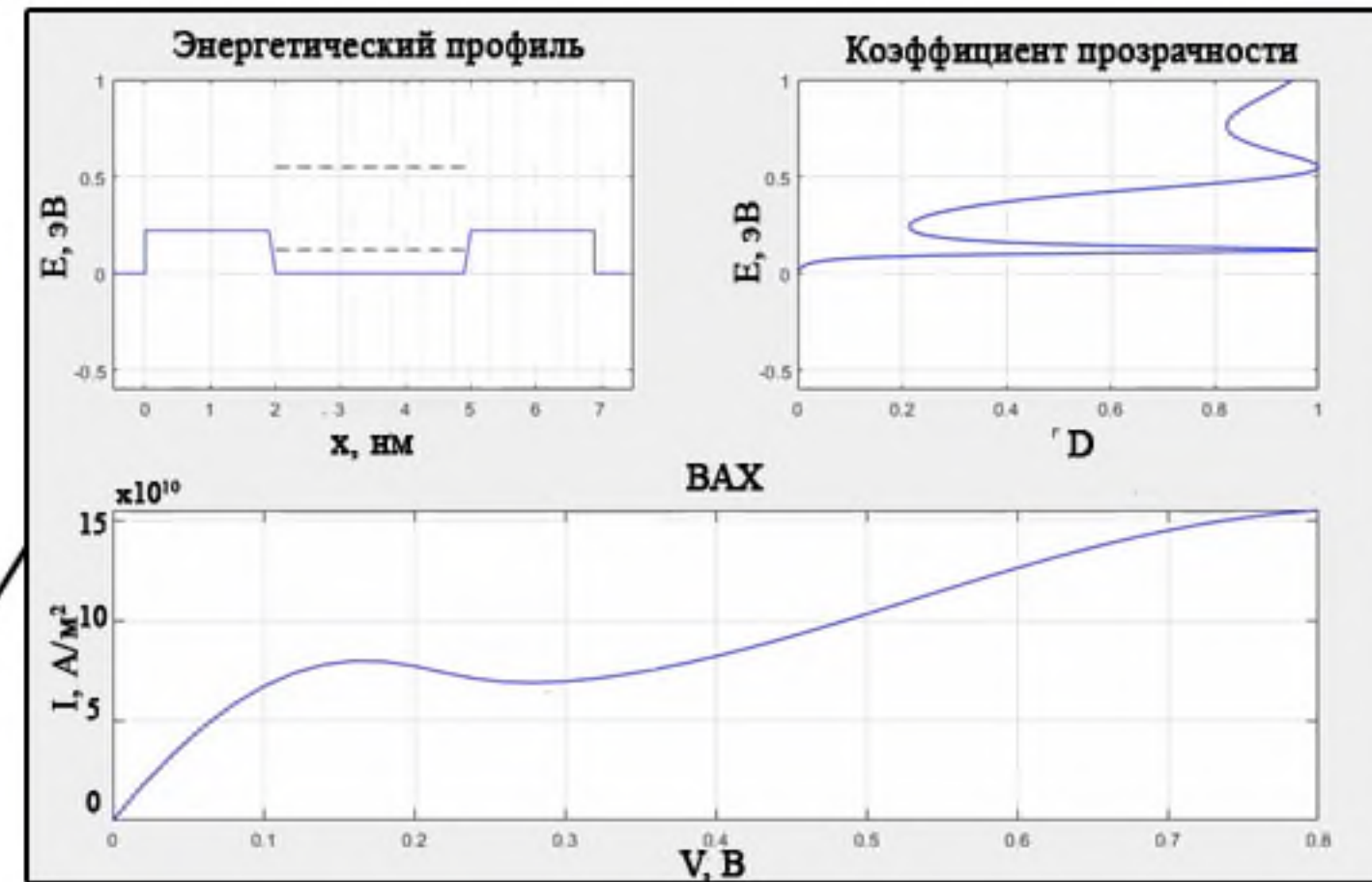
- Минимумы принимают меньшие значения.

(Чем выше барьеры тем меньше вероятность туннелирования вне резонанса)

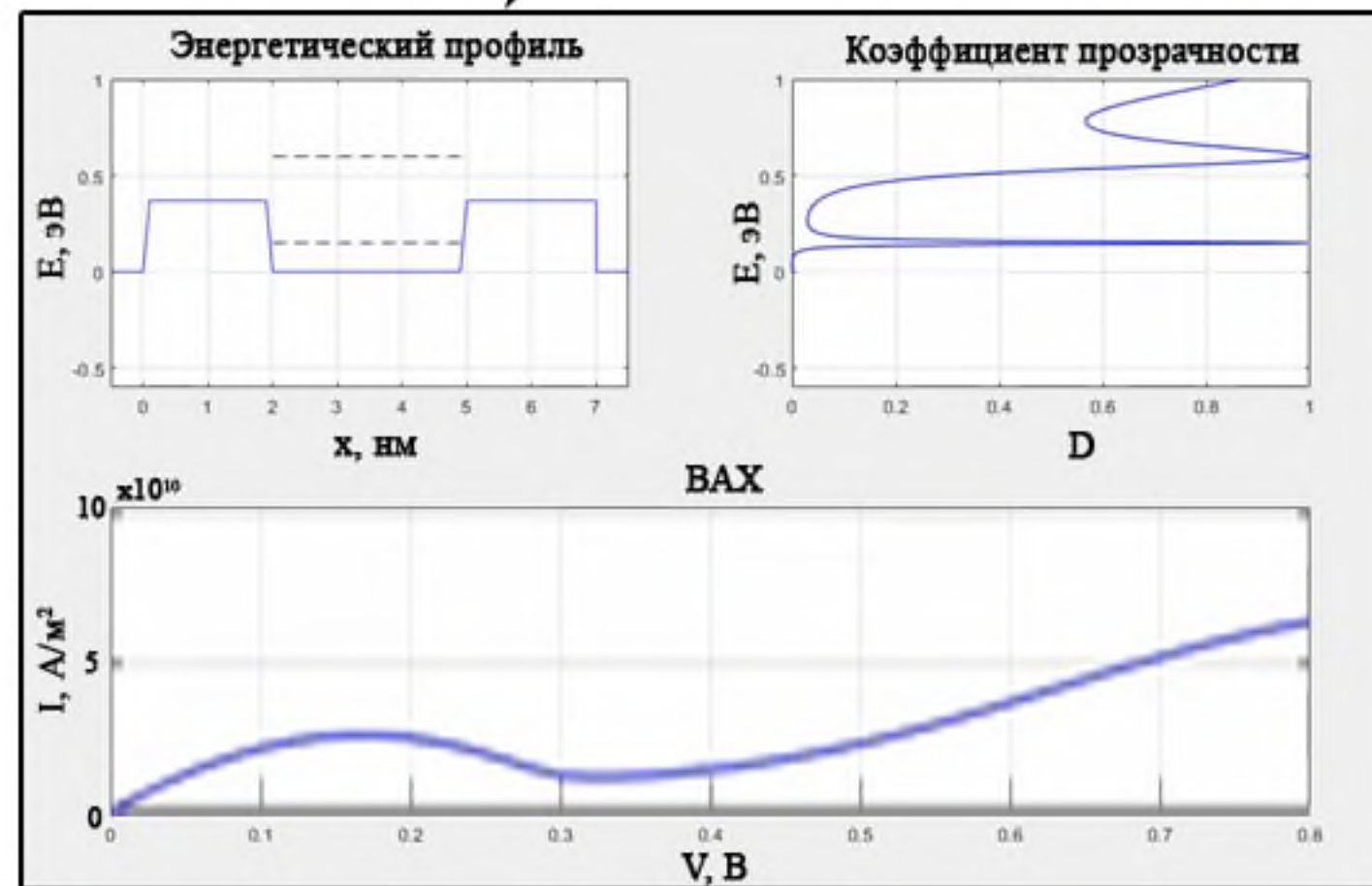
Зависимость характеристик первого резонанса доли замещения материала барьера



3.2 Влияние значения параметров ДБКС на ВАХ



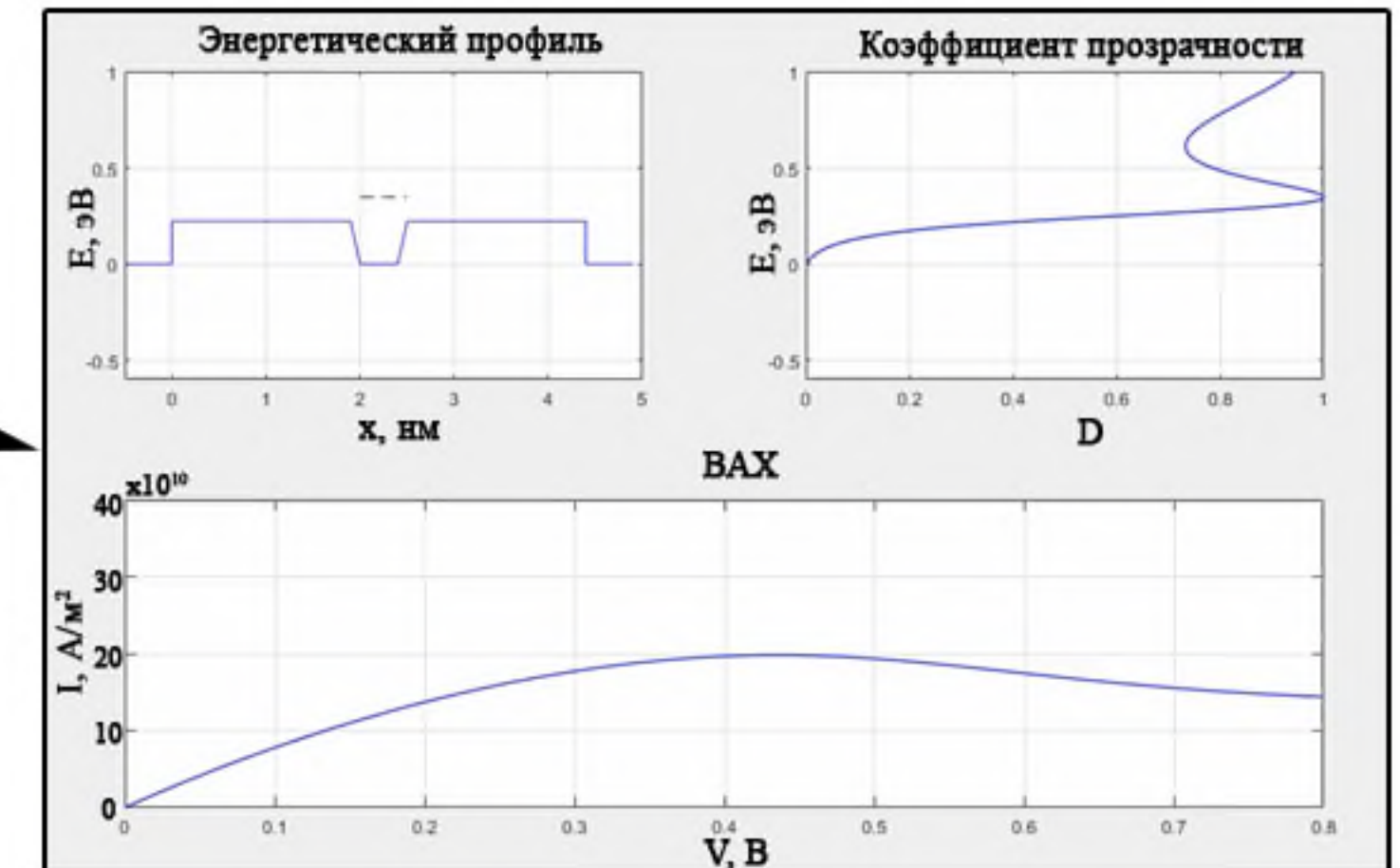
Изменение доли замещения барьера



При увеличении высоты барьера:

- уменьшаются значения тока
- протяженность одп уменьшилась незначительно

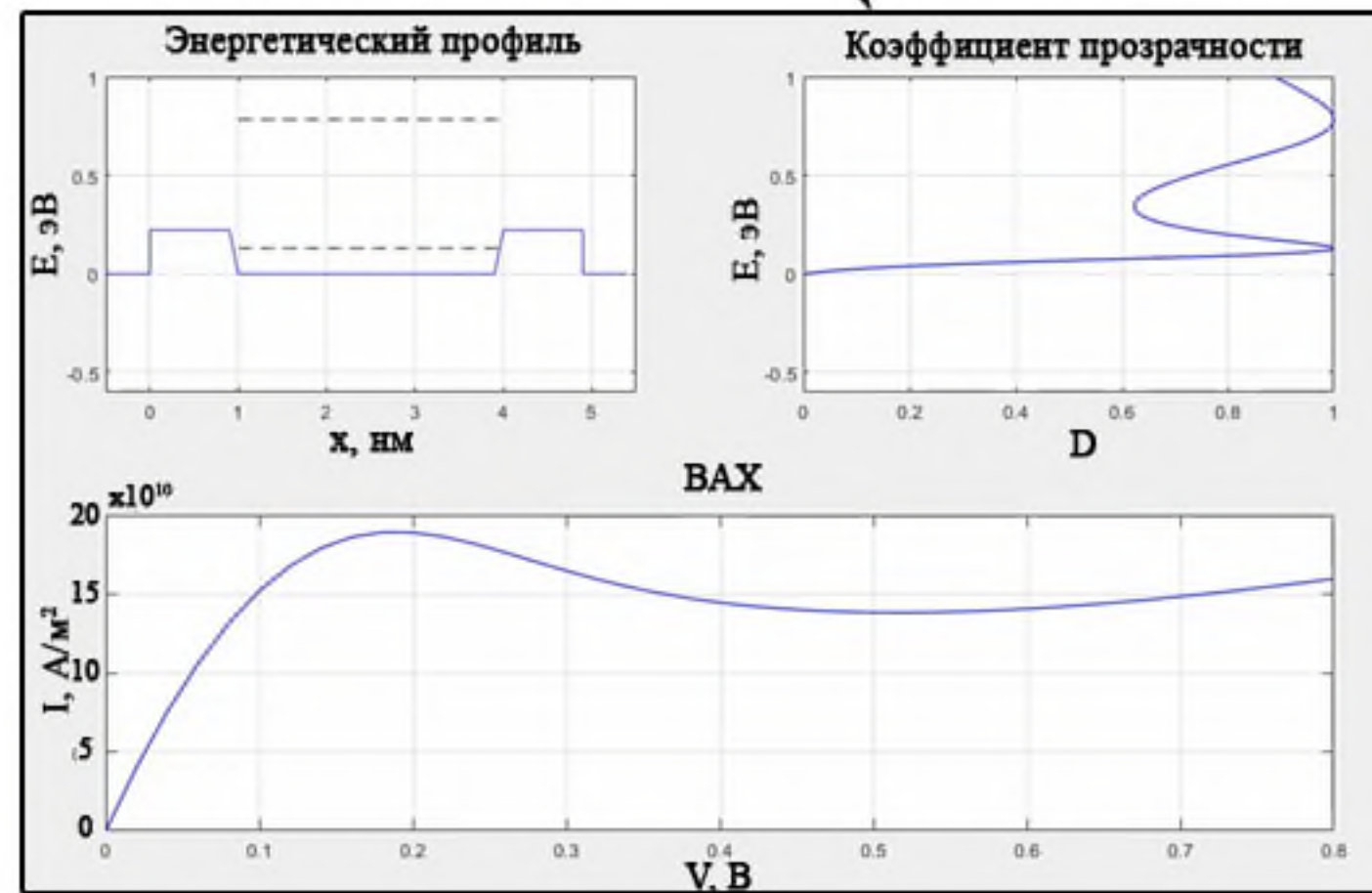
Изменение ширины канала



При увеличении ширины канала:

- меняется положение пиков
- токи уменьшаются

Изменение ширины барьеров



При уменьшении ширины барьеров:

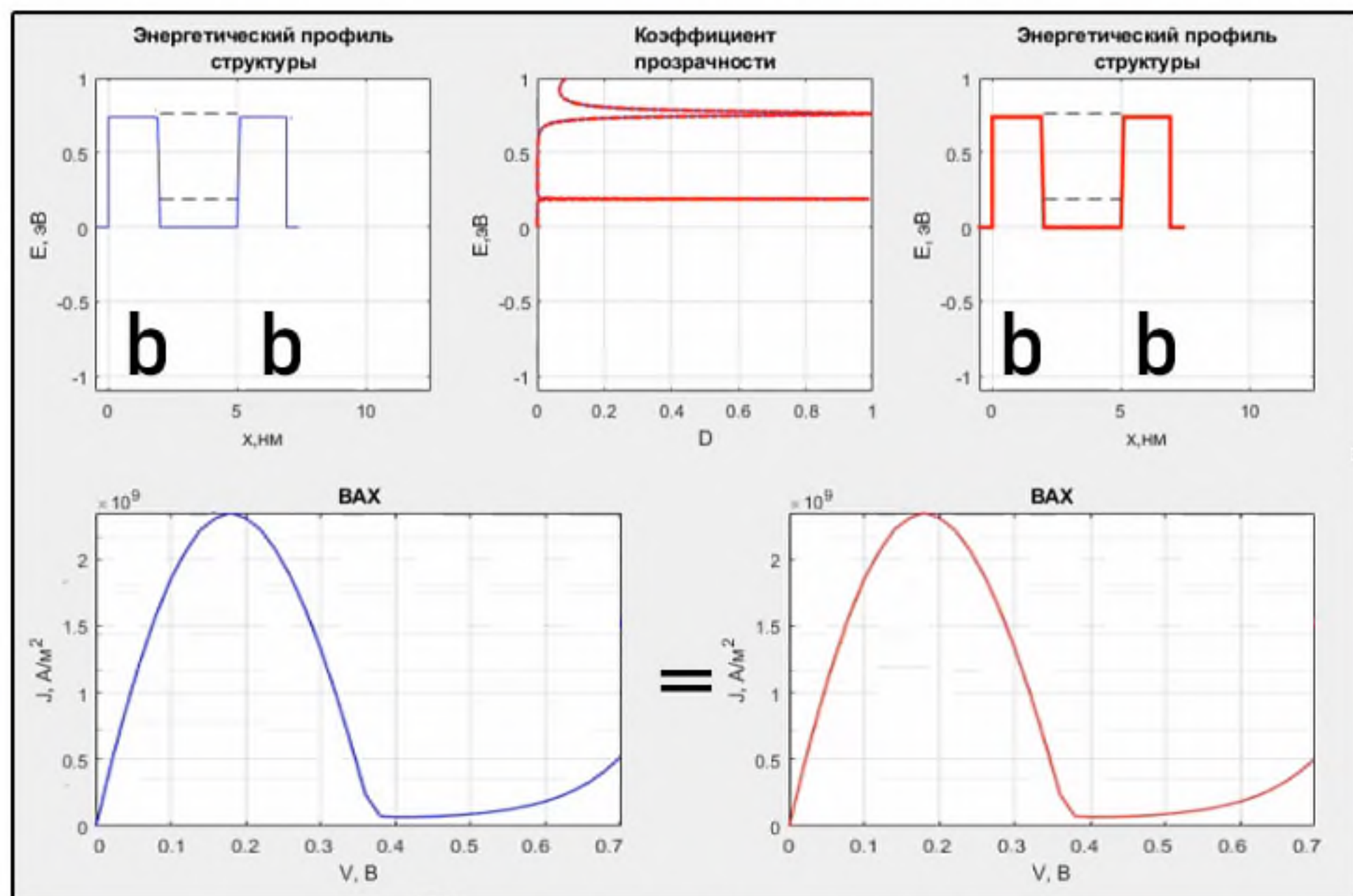
- увеличиваются значения тока
- увеличивается протяженность ОДП

Увеличение ширины ямы увеличивает напряжение пикового тока.

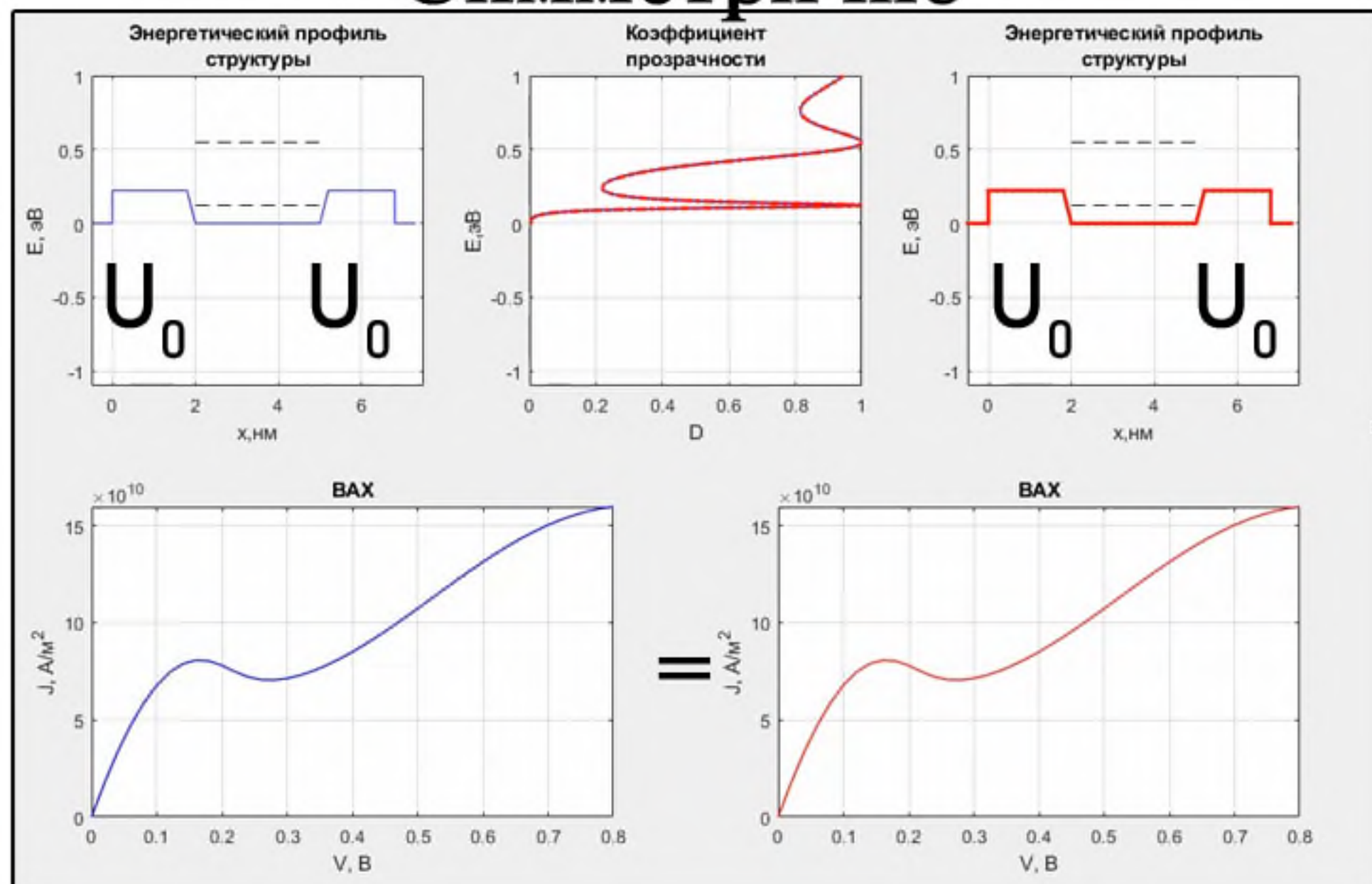
Увеличение ширины барьеров уменьшает протяженность участка ОДП.

Увеличении высоты барьеров уменьшает значения токов.

3.2 Влияние симметрии ДБКС на характеристики



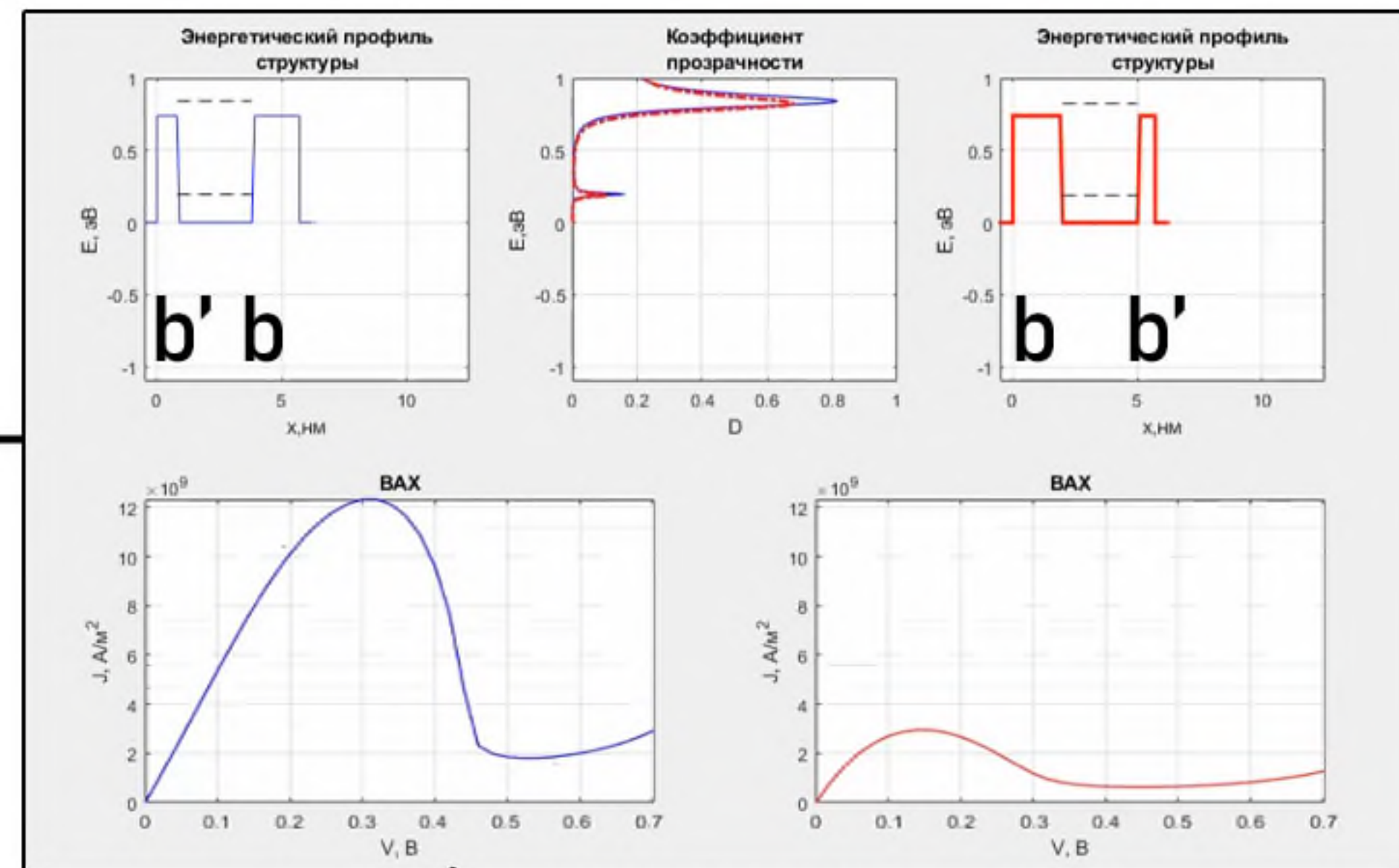
Симметрично



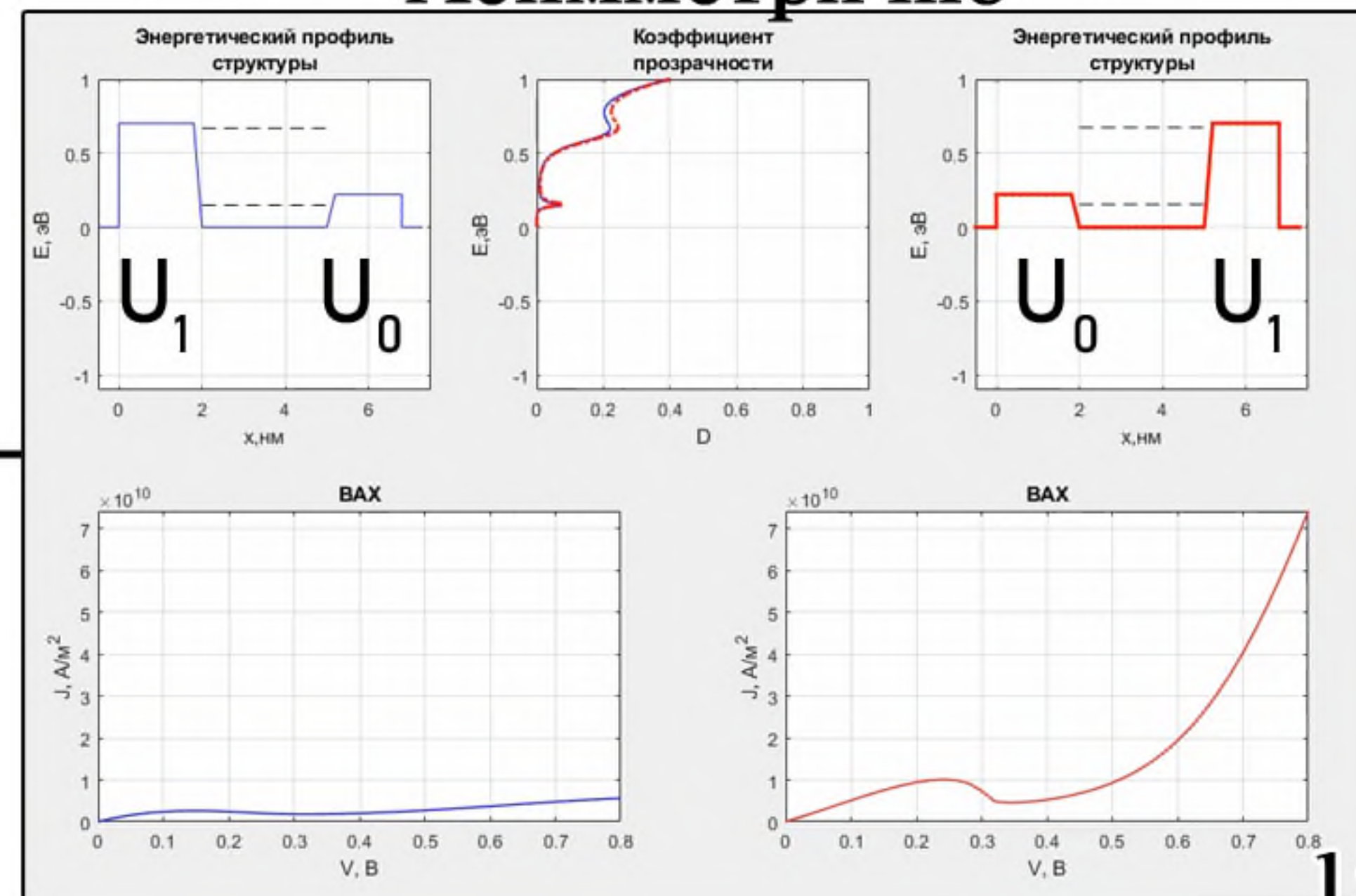
При асимметрии
ширин и высот
барьеров
коэффициент
прохождения РУ
отличен от
единицы.

Несмотря на
одинаковый
коэффициент
прозрачности в
отсутствие
напряжения, ВАХ
отличается.

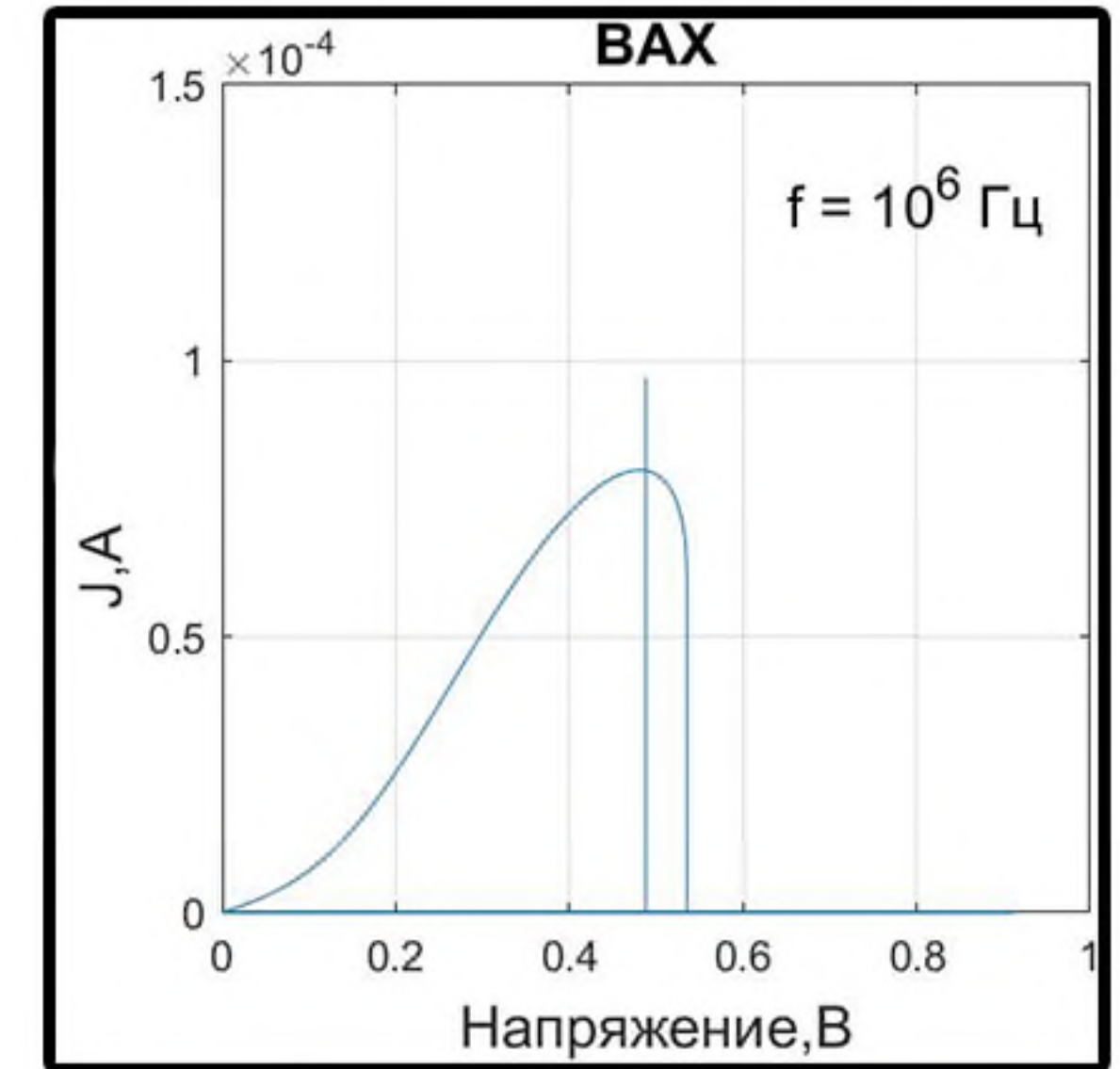
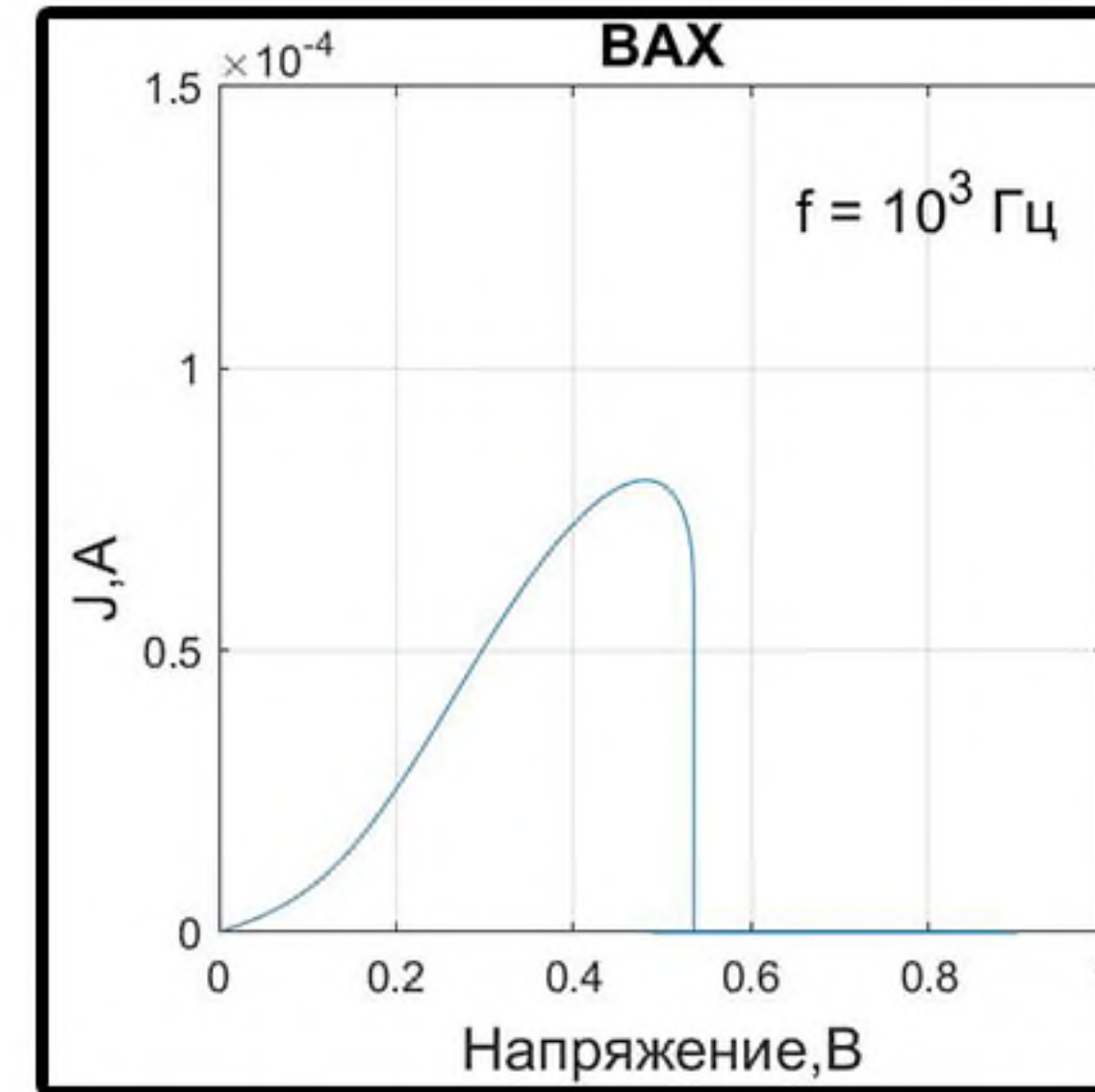
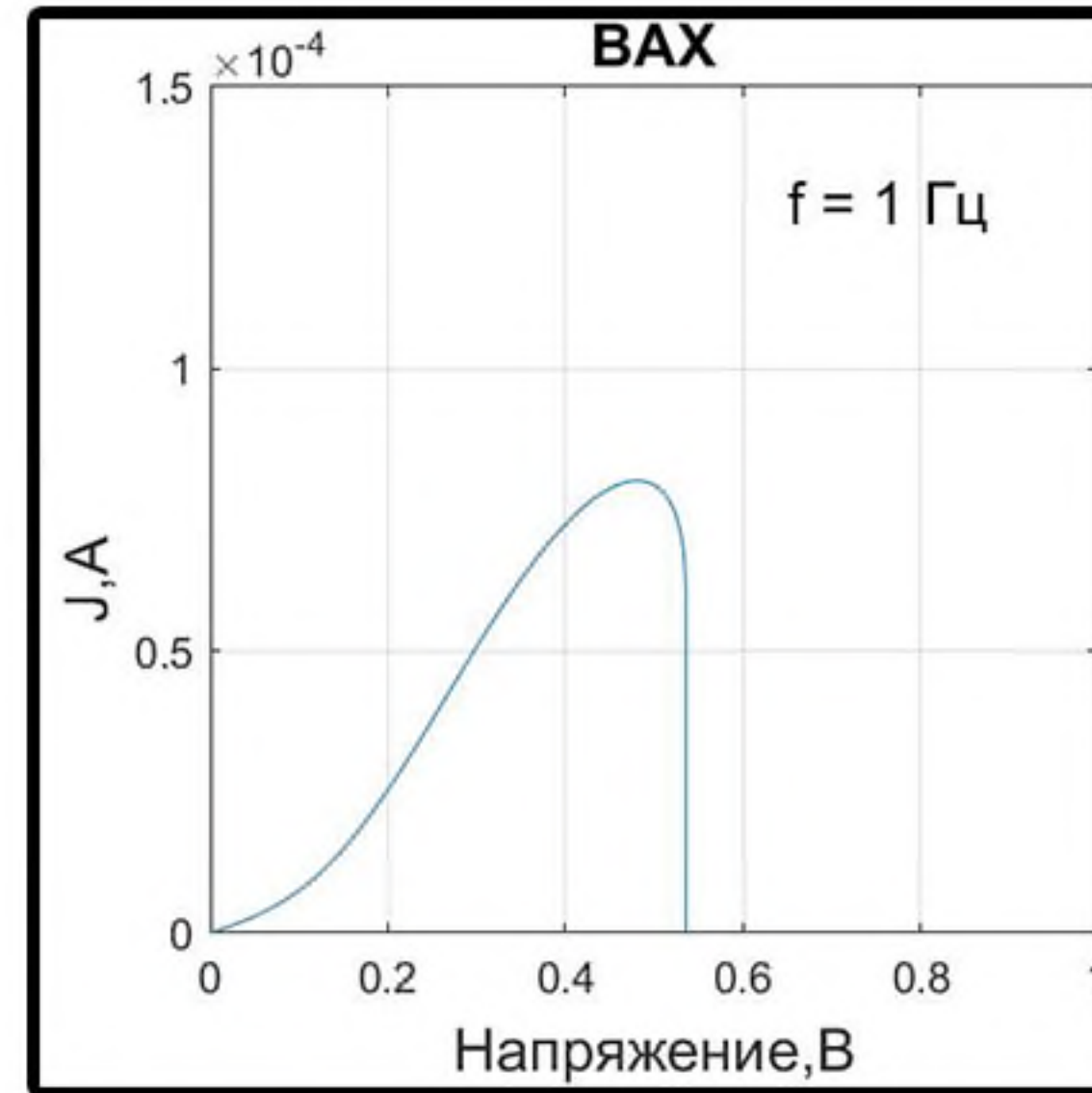
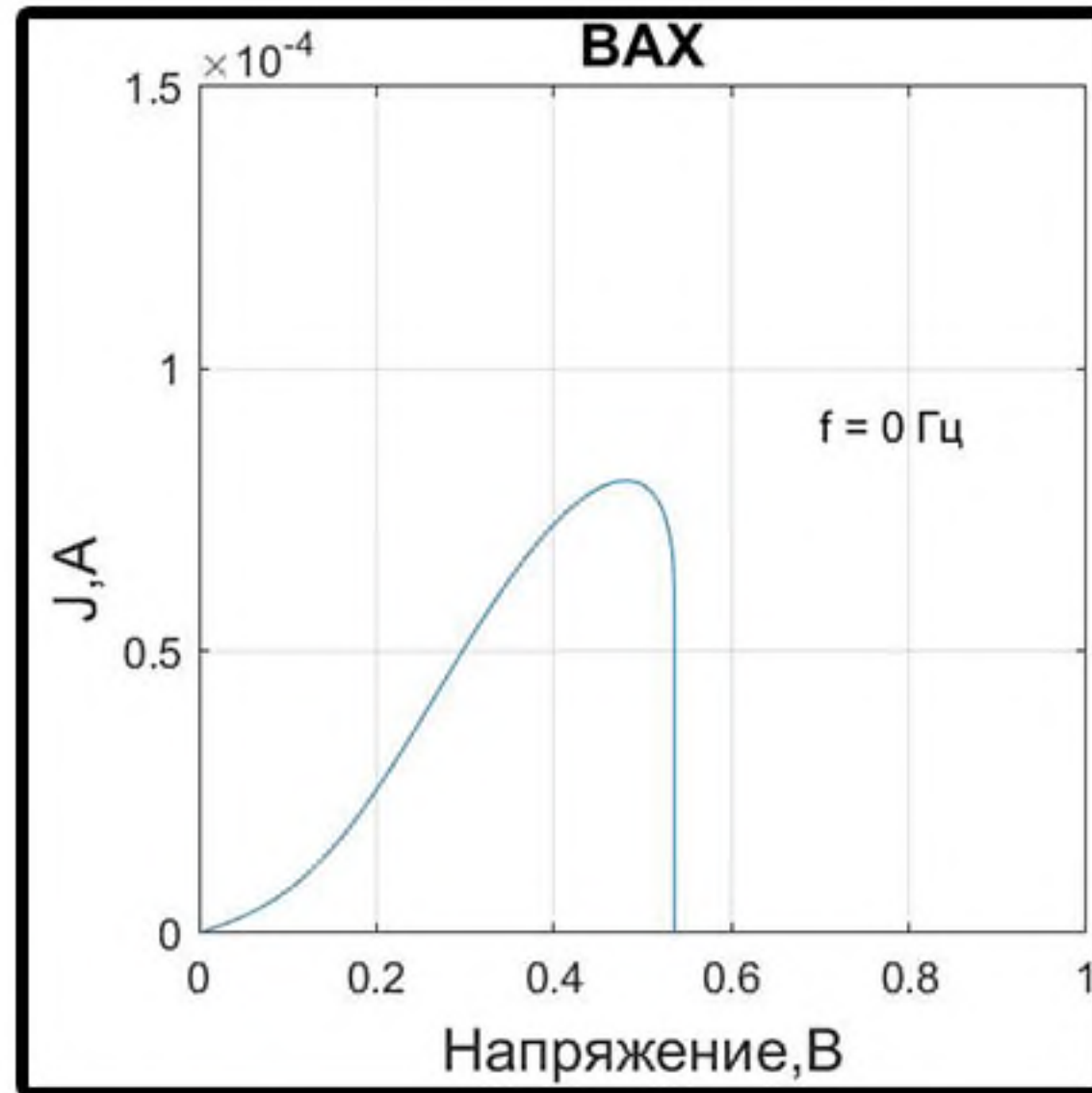
Отклонение от
симметрии
позволяет менять
кривизну участка
ВАХ.



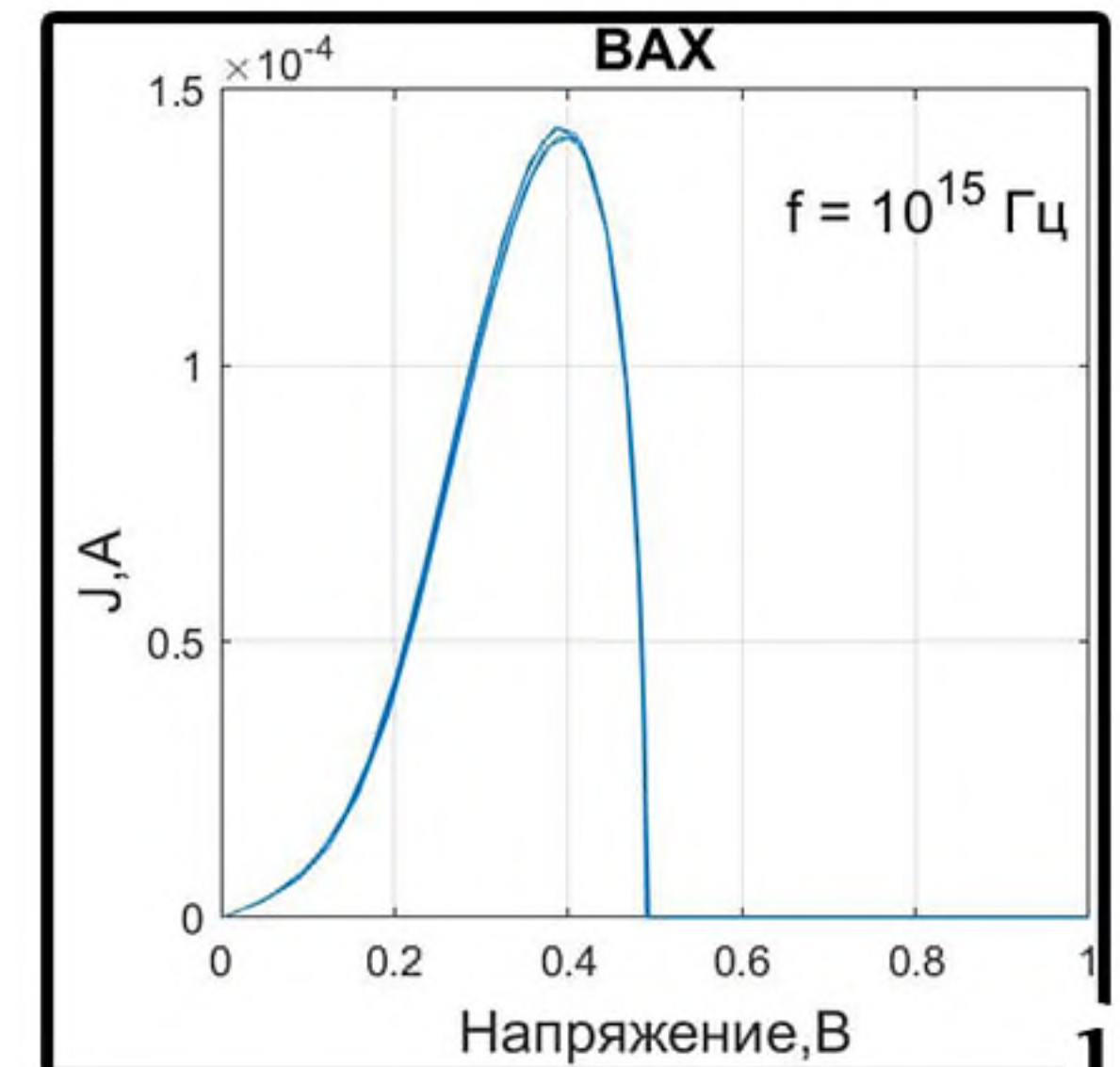
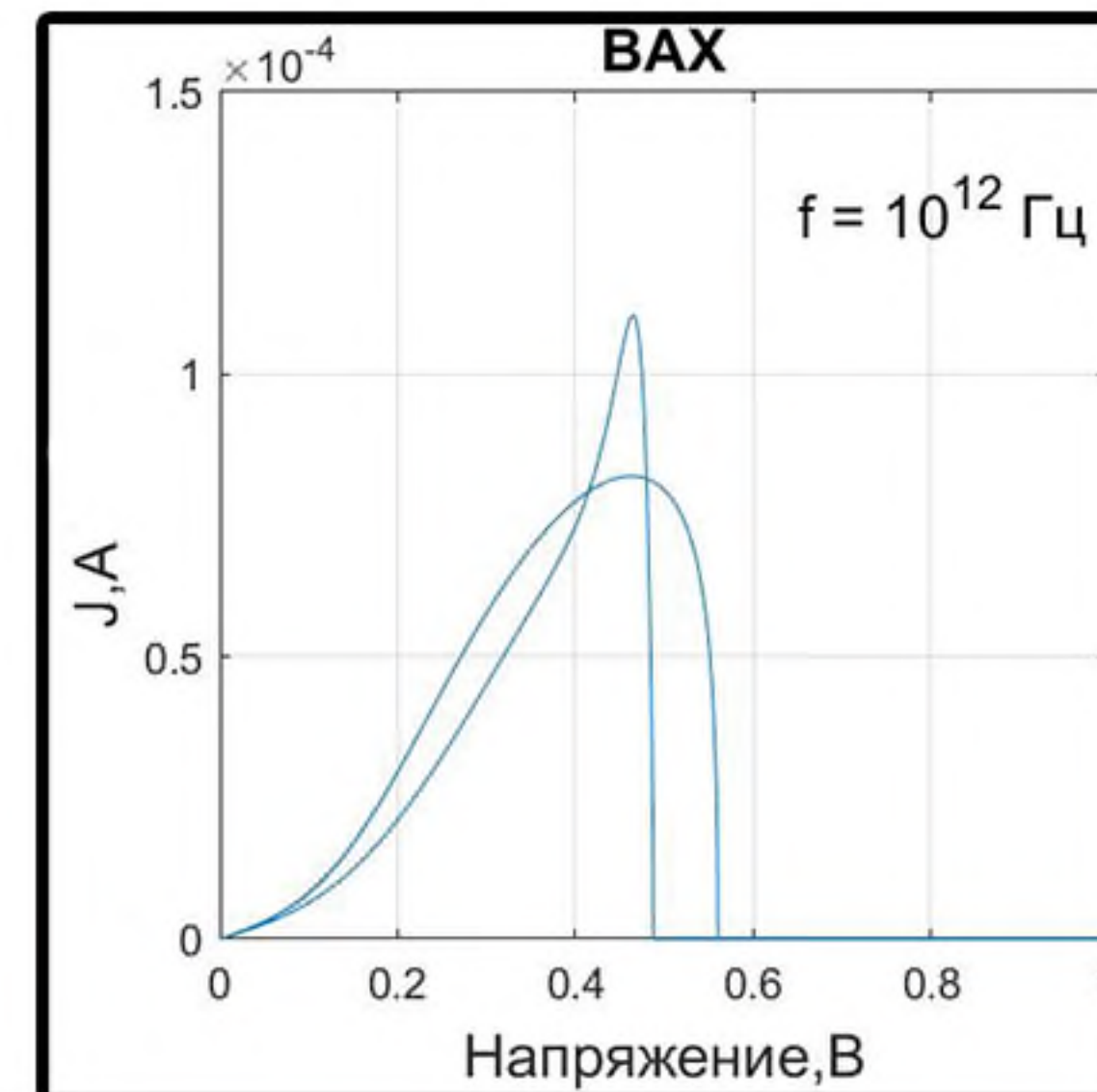
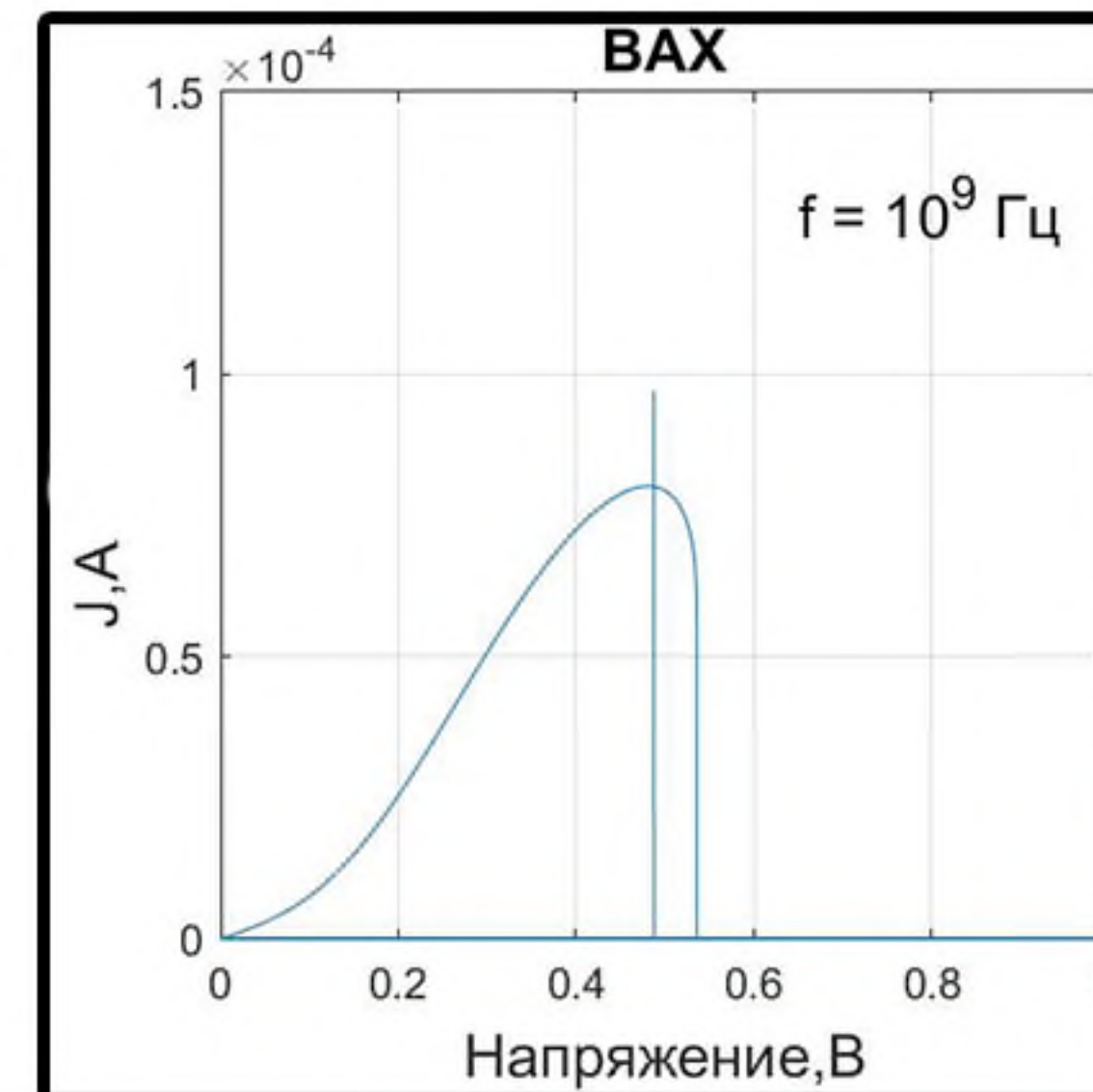
Асимметрично



ДБКС: ВАХ при переменном напряжении.



При высокой частоте (>1 ГГц) источника напряжения на ВАХ резонансно-туннельной структуры наблюдается гистерезис.



4 Разработка программного обеспечения расчета электрических характеристик

Конечное ПО позволяет на основании разработанного вычислительного алгоритма рассчитать электрические характеристики гетероструктуры.

Входными параметрами являются:

- массовый профиль
- энергетический профиль
- ширины каждого из слоёв
- выбор метода расчта прозрачности
- значение химического потенциала
- точностные характеристики

Выходные данные:

- энергетический профиль
- коэффициент прозрачности
- ВАХ
- возможна выгрузка данных

Menu

Анализ электрических характеристик структуры

$m^* = 0.067, 0.18, 0.067$ $\times m_0$

$U_0 = 0.22, 0.72, 0.22$ эВ

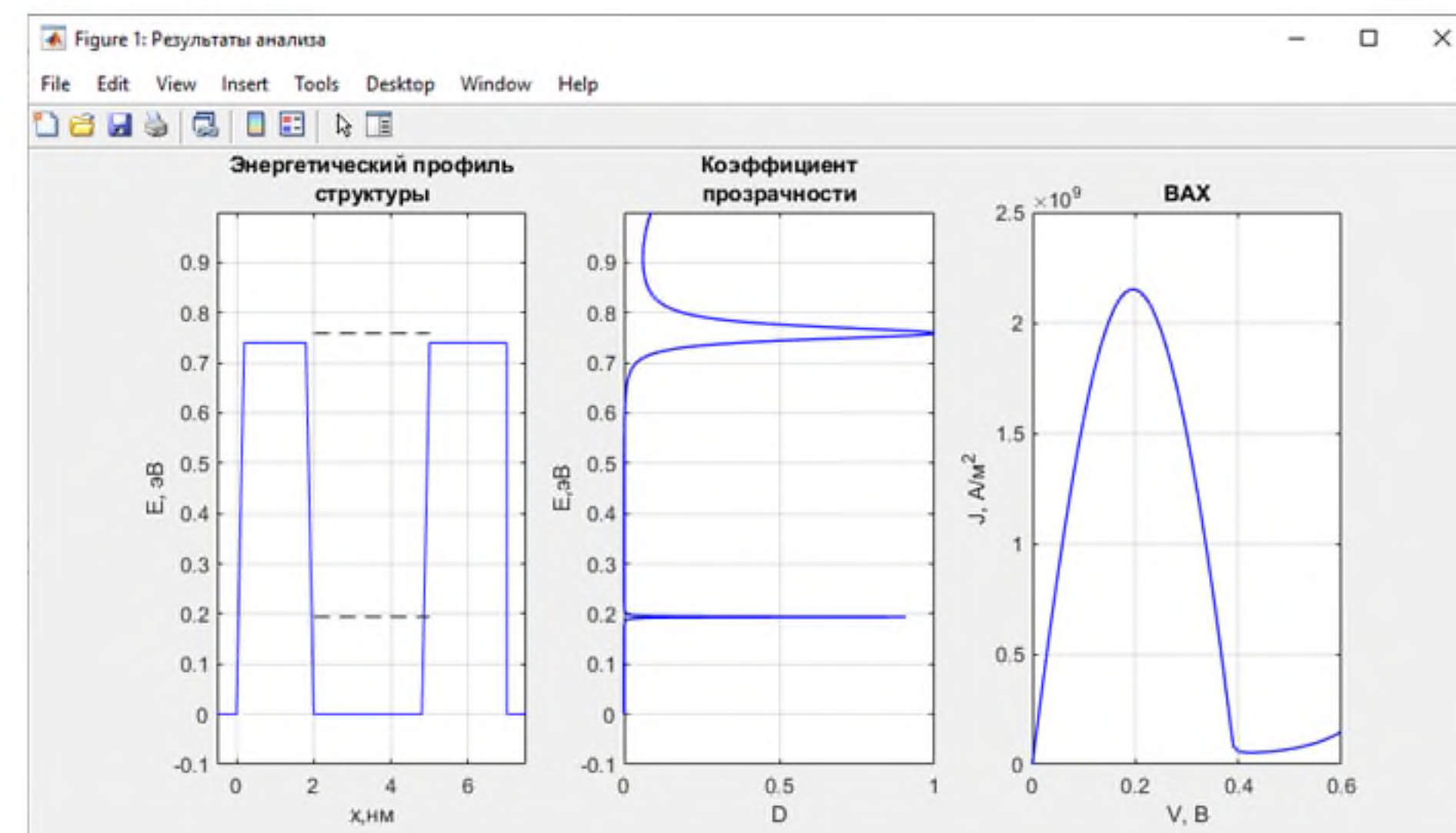
$z = 3, 2, 3$ нм

$E_f = 0.3$ эВ $dE = 1e-4$ эВ $dx = 0.02$ нм

Метод анализа прозрачности: ММП

☐ Выгрузить результат

Приступить



ВЫВОДЫ ПО РАБОТЕ

- Проведён анализ основных подходов к расчету электрических характеристик гетероструктурных низкоразмерных каналов в AlGaAs устройствах:
 - ММП и МФГ являются мощными вычислительными средствами анализа коэффициента прохождения;
 - ММП наиболее подходит для анализа структур с малым числом барьеров и быстрого приближенного анализа многобарьерных структур.
 - МФГ подходит для более точного расчета коэффициента туннельной прозрачности.
- Разработан вычислительный алгоритм расчета электрических характеристик, позволяющий исследовать низкоразмерные AlGaAs каналы – вычисление прозрачности выполняется ММП.
- Результаты верификации вычислительного алгоритма (ММП обеспечивает требуемую погрешность (менее 10^{-13} %) на ГС AlGaAs/GaAs/AlGaAs (2/3/2 нм), приемлемую временную сложность и позволяет получить не только прозрачность структуры, но и волновую функцию) позволили сделать вывод об эффективности разработанного алгоритма.
- Результаты исследования позволили сделать следующие основные выводы по наблюдаемым тенденциям:
 - увеличивая ширину ямы можно увеличить напряжение пикового тока;
 - увеличивая толщину барьеров можно уменьшать протяженность участка ОДП;
 - увеличивая высоту барьеров можно уменьшать значения токов.
- Разработанное ПО позволяет получить электрические характеристики гетероструктуры произвольной сложности;
- Масштабируемость разработанного ПО обеспечивает возможность учета широкой номенклатуры входных параметров, гибкость адаптации под временные и точностные требования к вычислительному алгоритму.

Спасибо за внимание!

Результаты исследования приведены в статье:

**Топологически-ориентированный подход к выбору метода моделирования
прозрачности гетероструктурных каналов нанoeлектронных приборов//**

Нанотехнологии: разработка, применение - XXI век – 2022. – №1