

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТОКОПЕРЕНОСА В AlAs/GaAs-ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ С УЧЁТОМ МЕЖДОЛИННОГО РАССЕЯНИЯ

Ветрова Н.А., Иванов Ю.А., Куимов Е.В., Макеев М.О., Мешков С.А.,
Пчелинцев К.П., Шашурин В.Д.

Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана, <http://www.bmstu.ru>

Москва 105005, Российская Федерация

Поступила 18.05.2018

Представлена действительным членом РАЕН Колесовым В.В.

При моделировании токопереноса в устройствах на основе AlAs/GaAs-гетероструктур важным фактором является междолинное рассеяние электронов на гетерограницах. В статье продемонстрирован подход к моделированию таких процессов с использованием уравнений Шрёдингера для открытой системы «резервуар-канал-резервуар». Рассмотрен вопрос о моделировании междолинного рассеяния электронов в случае, если профиль доли алюминия является непрерывным, когда отсутствуют выраженные гетерограницы. Для численного решения полученных уравнений использован метод конечных разностей без понижения точности разностной схемы до первого порядка при учете краевых условий. Рассмотрены способы компоновки элементов матриц СЛАУ для понижения временной сложности алгоритма. На основании результатов расчёта в двухдолинном приближении по сравнению с однодолинными вычислениями сделан вывод о возможности использования данной модели при расчёте вольтамперных характеристик AlAs/GaAs-гетероструктур с учетом закономерностей деградации в процессе эксплуатации в жестких условиях при оценке параметров надёжности приборов наноэлектроники.

Ключевые слова: гетероструктуры, наноэлектроника, математическое моделирование, междолинное рассеяния электронов, двухдолинное приближение

УДК 004.052, 538.91

СОДЕРЖАНИЕ

1. ВВЕДЕНИЕ (71)
 2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ (72)
 3. РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ И ИХ
ОБСУЖДЕНИЕ (74)
 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ (75)
- ЛИТЕРАТУРА (76)

1. ВВЕДЕНИЕ

Наноэлектронные приборы на основе туннельных эффектов имеют расширенные (по сравнению с традиционными приборами) функциональные возможности, связанные с уникальной формой вольтамперных характеристик (ВАХ), а также характеризуются высоким быстродействием. Такие приборы играют важную роль в разработке сверхбыстродействующих интегральных микросхем со сверхвысокой степенью интеграции [1]. Резонансно-туннельные диоды (РТД) и транзисторы на основе AlAs/GaAs-гетероструктур применяются как в аналоговых, так и в цифровых

интегральных микросхемах в качестве элементов, имеющих ВАХ с участком отрицательного дифференциального сопротивления (например, в сверхбыстродействующих логических вентилях, работа которых основана на переходе из моностабильного в бистабильное состояние *monostable-bistable transition logic elements – MOBILEs* [2-3], в ячейках статической памяти с произвольным доступом *SRAM*), а также в качестве элементов, предоставляющих возможность оптимизации кривизны начального участка ВАХ по критерию, в основе которого лежат эксплуатационные характеристики устройства (например, в смесителях радиосигналов [1]). Высокие потенциальные AlAs-барьеры гетероструктур РТД определяют повышенный рабочий температурный диапазон: с одной стороны, обеспечивают снижение величины туннельного тока при неизменной толщине барьера, с другой – понижают ток, связанный с тепловым возбуждением и надбарьерной

эмиссией электронов в квантовую яму. Использование в качестве материала барьера широкозонных полупроводников обеспечивает надежное функционирование таких структур при комнатных температурах. [4] Однако при моделировании таких приборов нужно учитывать, что $AlxGa1-xAs$ ($x > 0.45$), в том числе $AlAs$, являются непрямозонными полупроводниками, в отличие от прямозонного $GaAs$ и соединения с $x < 0.45$. Самой низкой в $AlAs$ является в X -долина, а в $GaAs$ – в Γ -долина. Слои $AlAs/GaAs$ -гетероструктуры чаще всего выращиваются на подложке с кристаллографической ориентацией $[100]$, в этом же направлении электроны ускоряются внешним полем. Таким образом на гетерограницах наиболее вероятно междолинное рассеяние электронов из Γ -долин $GaAs$ в X -долины $AlAs$ кристаллографического направления $[100]$. Малая вероятность переходов в других направлениях и в иные долины подтверждается расчетами и обуславливает низкую эффективность таких многозонных моделей при повышенной вычислительной сложности [5]. Междолинное ΓX -рассеяние моделируется путём записи отдельного уравнения Шрёдингера для Γ -долины и X -долины, причём в каждое уравнение вводится оператор связи, действующий на волновую функцию X -долины для уравнения Γ -долины и, соответственно, наоборот [5-7]. Если принято предположение о том, что профиль молярной доли Al на гетерогранице представляет собой ступенчатую функцию, то оператор связи на этой гетерогранице представляет дельта-функцию, умноженную на константу междолинного взаимодействия [5, 6]. В том случае, если стоит задача учёта диффузионных изменений профиля молярной доли Al , предположение о его скачкообразном изменении на гетерогранице в общем случае не является справедливым. Такая задача возникает при оценке надёжности приборов наноэлектроники при эксплуатации в условиях жестких внешних воздействий. Следовательно, возникает вопрос об обобщении определения оператора связи на случай плавно меняющегося профиля молярной доли Al и вообще построении более общей численной модели токопереноса с учётом междолинного рассеяния.

2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Для проведения численного эксперимента сформулируем математическую модель токопереноса в рамках формализма волновых функций. В однодолинном приближении движение электрона в активной области описывается стационарным уравнением Шрёдингера с переменной эффективной массой. На границе моделируемой области с электронными резервуарами действуют граничные условия Бастарда:

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{3} \frac{d}{dz} \frac{1}{m^*} \frac{d}{dz} \psi + U\psi = E\psi, \\ \psi(z_L) = A_L e^{ik_L z_L} + B_L e^{-ik_L z_L}, \\ \psi(z_R) = A_R e^{ik_R z_R} + B_R e^{-ik_R z_R}, \\ \frac{1}{m_L^*} \frac{d}{dz} \psi(z_L) = \frac{ik_L}{m^*(z_L)} A_L e^{ik_L z_L} - \frac{ik_L}{m^*(z_L)} B_L e^{-ik_L z_L}, \\ \frac{1}{m_R^*} \frac{d}{dz} \psi(z_R) = \frac{ik_R}{m^*(z_R)} A_R e^{ik_R z_R} - \frac{ik_R}{m^*(z_R)} B_R e^{-ik_R z_R}, \end{cases} \quad (1)$$

где \hbar – постоянная Планка, z – координата, $m^* = m^*(z)$ – эффективная масса, ψ – волновая функция электрона, $U = U(z)$ – потенциальная энергия электрона, E – полная энергия электрона, $z_{L(R)}$ – левая (правая) границы моделируемой области, $A_{L(R)}$ и $B_{L(R)}$ – амплитуды электронных волн в левом (правом) резервуаре, $k_{L(R)} = \frac{\sqrt{2m_{L(R)}^*(E - U_{L(R)})}}{\hbar}$ – волновое число электрона в левом (правом) резервуаре, $m_{L(R)}^*$ – эффективная масса электрона в левом (правом) резервуаре.

Потенциальная энергия электрона $U(z)$ определяется как сумма профиля дна зоны проводимости и потенциальной энергии внешнего поля, обусловленного прикладываемым к структуре напряжением.

$$U(z) = E_c - q_e V, \quad (2)$$

где E_c – профиль дна зоны проводимости, V – потенциал внешнего поля, q_e – элементарный заряд.

В случае $AlAs/GaAs$ -гетероструктур профили дна зоны проводимости и эффективной массы электрона определяются молярной долей Al .

Система (1) довольно громоздкая, однако, можно записать уравнение, эквивалентное этой системе [8-9]

$$\left[\frac{d}{dz} \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d}{dz} + (E - U) + \Sigma_L + \Sigma_R \right] \psi = S_L + S_R, \quad (3)$$

где

$$\Sigma_{L(R)} = ik_{L(R)} \frac{\hbar^2}{2m_{L(R)}^*} \delta(z - z_R),$$

$$S_L = -2ik_L \frac{\hbar^2}{2m_L^*} \delta(z - z_L) A_L, \quad (4)$$

$$S_R = -2ik_R \frac{\hbar^2}{2m_R^*} \delta(z - z_R) B_R.$$

Уравнение (3) не только компактнее системы (1), но и также удобнее с точки зрения физической интерпретации. Так, появление операторов Σ_L и Σ_R объясняется взаимодействием канала с резервуарами, иначе говоря, можно считать, что эти операторы описывают отток электронов из канала. В то же время, величины S_L и S_R интерпретируются как слагаемые, описывающие инжекцию электронов из резервуаров в канал.

Для описания движения электронов с учётом междолинного рассеяния, следует записать два уравнения Шрёдингера для каждой долины. Оба эти уравнения содержат слагаемые, описывающие связь между долинами

$$\begin{cases} \left[\frac{d}{dz} \frac{\hbar^2}{2m^\Gamma} \frac{d}{dz} + (E - U^\Gamma) + \Sigma_L^\Gamma + \Sigma_R^\Gamma \right] \psi^\Gamma + A\psi^X = S_L^\Gamma + S_R^\Gamma, \\ \left[\frac{d}{dz} \frac{\hbar^2}{2m^X} \frac{d}{dz} + (E - U^X) + \Sigma_L^X + \Sigma_R^X \right] \psi^X + A\psi^\Gamma = S_L^X + S_R^X. \end{cases} \quad (5)$$

Система (5) описывает движение электронов уже с учётом Γ - X рассеяния. Верхний индекс $\Gamma(X)$ означает принадлежность той или иной физической величины к $\Gamma(X)$ -долине. Оператор связи A в случае AlAs/GaAs-гетероструктур определяется следующим образом

$$A = \alpha \sum_{k=1}^{M+1} \delta(z - z_k), \quad (6)$$

где α – константа междолинного взаимодействия, z_k – координата k -ой гетерограницы, M – число слоёв в гетероструктуре, $\delta(z)$ – дельта-функция.

Обычно при моделировании предполагают, что все электроны попадают в активную область из Γ -долины. Следовательно, слагаемые источников $S_L^X = S_R^X = 0$.

Определение оператора связи (6) справедливо только в том случае, если профиль гетерограницы явно выражен, то есть, когда профиль доли A на гетерограницах представляет собой ступенчатую функцию. В том случае, если профиль доли A является непрерывной функцией, требуется обобщение определения оператора связи, например, в соответствии с формулой (7)

$$A = \alpha \left| \frac{d}{dz} x \right|, \quad (7)$$

где $x = x(z)$ – доля алюминия.

Система уравнений (5) в общем случае решается только численно. Для численного решения этой системы воспользуемся методом конечных разностей на регулярной сетке, с помощью которого получим систему линейных алгебраических уравнений

$$\begin{cases} t_{i-1}^\Gamma \psi_{i-1}^\Gamma + (E - U_i^\Gamma + \Sigma_i^\Gamma - t_{i-1}^\Gamma - t_i^\Gamma) \psi_i^\Gamma + t_i^\Gamma \psi_i^X + A \psi_i^X = S_i^\Gamma, \\ t_{i-1}^X \psi_{i-1}^X + (E - U_i^X + \Sigma_i^X - t_{i-1}^X - t_i^X) \psi_i^X + t_i^X \psi_i^\Gamma + A \psi_i^\Gamma = S_i^X. \end{cases} \quad (8)$$

Коэффициенты перед узловыми значениями волновой функции $\psi_i^{\Gamma(X)}$ определяются следующим образом

$$\begin{aligned} t_i^{\Gamma(X)} &= \frac{\hbar^2}{2m_i^{\Gamma(X)} h^2}, \quad A_i = \frac{1}{2h} \int_{z_{i-1}}^{z_{i+1}} A dz, \\ m_i^{\Gamma(X)} &= \frac{1}{h} \int_{z_i}^{z_{i+1}} m^{\Gamma(X)} dz, \quad U_i^{\Gamma(X)} = \frac{1}{2h} \int_{z_{i-1}}^{z_{i+1}} U^{\Gamma(X)} dz, \end{aligned} \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \Sigma_i^{\Gamma(X)} &= \frac{1}{2h} \int_{z_{i-1}}^{z_{i+1}} (\Sigma_L^{\Gamma(X)} + \Sigma_R^{\Gamma(X)}) dz, \\ S_i^{\Gamma(X)} &= \frac{1}{2h} \int_{z_{i-1}}^{z_{i+1}} (S_L^{\Gamma(X)} + S_R^{\Gamma(X)}) dz, \end{aligned}$$

где h – шаг сетки.

Согласно определению, и учитывая, что $S_L^X = S_R^X = 0$

$$\Sigma_i^{\Gamma(X)} = \begin{cases} ik_L^{\Gamma(X)} \frac{\hbar^2}{2m_L^{\Gamma(X)} h} i = 1, \\ 0 \quad i \in [2; N-1], \\ ik_R^{\Gamma(X)} \frac{\hbar^2}{2m_R^{\Gamma(X)} h} i = N, \end{cases} \quad S_i^\Gamma = \begin{cases} -2ik_L^\Gamma \frac{\hbar^2}{2m_L^\Gamma h} i = 1, \\ 0 \quad i \in [2; N-1], \\ -2ik_R^\Gamma \frac{\hbar^2}{2m_R^\Gamma h} i = N, \end{cases} \quad (10)$$

$$S_i^X = 0,$$

где $k_{L(R)}^{\Gamma(X)}$ – волновое число электрона в $\Gamma(X)$ -долине в левом (правом) резервуаре, определяется аналогично однодолинному случаю.

Отметим, что систему уравнений (8) можно использовать как в случае ступенчатого, так и в случае непрерывного изменения профиля A на гетерограницах.

Систему (8) можно записать в матричном виде. В зависимости от компоновки уравнений, сделать это можно двумя способами. Запишем систему (8) для сетки из трёх узлов

$$\begin{pmatrix} d_1^\Gamma & t_1^\Gamma & 0 & A_1 & 0 & 0 \\ t_1^\Gamma & d_2^\Gamma & t_2^\Gamma & 0 & A_2 & 0 \\ 0 & t_2^\Gamma & d_3^\Gamma & 0 & 0 & A_3 \\ A_1 & 0 & 0 & d_1^X & t_1^X & 0 \\ 0 & A_2 & 0 & t_1^X & d_2^X & t_2^X \\ 0 & 0 & A_3 & 0 & t_2^X & d_3^X \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1^\Gamma \\ \psi_2^\Gamma \\ \psi_3^\Gamma \\ \psi_1^X \\ \psi_2^X \\ \psi_3^X \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_1^\Gamma \\ S_2^\Gamma \\ S_3^\Gamma \\ S_1^X \\ S_2^X \\ S_3^X \end{pmatrix}, \quad (11)$$

$$\begin{pmatrix} d_1^\Gamma & A_1 & t_1^\Gamma & 0 & 0 & 0 \\ A_1 & d_1^X & 0 & t_1^X & 0 & 0 \\ t_1^\Gamma & 0 & d_2^\Gamma & A_2 & t_2^\Gamma & 0 \\ 0 & t_1^X & A_2 & d_2^X & 0 & t_2^X \\ 0 & 0 & t_2^\Gamma & 0 & d_3^\Gamma & A_3 \\ 0 & 0 & 0 & t_2^X & A_3 & d_3^X \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1^\Gamma \\ \psi_2^\Gamma \\ \psi_3^\Gamma \\ \psi_1^X \\ \psi_2^X \\ \psi_3^X \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_1^\Gamma \\ S_2^\Gamma \\ S_3^\Gamma \\ S_1^X \\ S_2^X \\ S_3^X \end{pmatrix}, \quad (12)$$

где $d_i^{\Gamma(X)} = E - U_i^\Gamma + \Sigma_i^\Gamma - t_{i-1}^\Gamma - t_i^\Gamma$.

При больших размерностях способ компоновки (12) более эффективен при использовании алгоритма Томаса – метода прогонки для пятидиагональной матрицы системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ).

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Данная математическая модель была протестирована на модельной структуре, параметры которой указаны в Таблице 1. Моделирование проводилось при различных значениях константы междолинного моделирования с целью исследования влияния этой величины на расчётную ВАХ.

На рис. 1 и 2 показаны результаты расчёта волновых функций в Г-долине и X-долине в

Таблица 1.

Параметры модельной структуры

Толщина, nm	Материал	Концентрация Si, 10 ²² м ⁻³	Примечания
50	GaAs	400	Приконтактный слой
5	GaAs	0	Спейсер
2	AlAs	0	Барьер
3	GaAs	0	Яма
2	AlAs	0	Барьер
5	GaAs	0	Спейсер
50	GaAs	400	Приконтактный слой

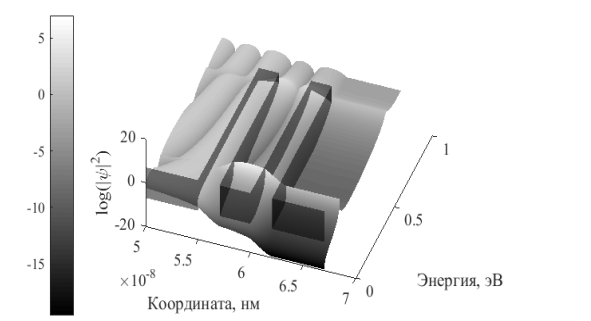


Рис. 1. Логарифм квадрата модуля волновой функции электрона в Г-долине при $a = 0$ эВ·нм.

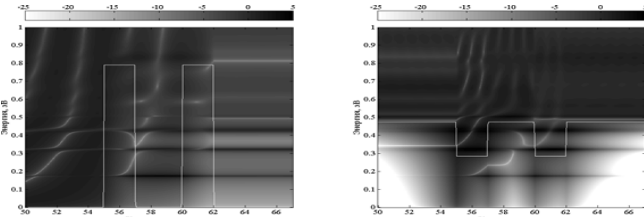


Рис. 2. Логарифм квадрата модуля волновой функции электрона в Г-долине (слева) и в X-долине (справа) при $a = 0.05$ эВ·нм.

канале структуры из Таблицы 1. Для удобства восприятия отображён натуральный логарифм от квадратов модулей волновых функций. Прозрачная поверхность соответствует профилю дна зоны проводимости в Г-долине.

Как видно из рисунков, при расчёте в двухдолинном приближении в Г-долине появляются новые метастабильные уровни, соответствующие метастабильным уровням в X-долине. Это объясняет появление новых пиков коэффициента туннельной прозрачности, графики которых представлены на рис. 3.

При увеличении константы междолинного взаимодействия наблюдается уширение новых максимумов коэффициента туннельной прозрачности и смещение "однодолинных" максимумов. Из этого можно сделать вывод, что при увеличении константы междолинного

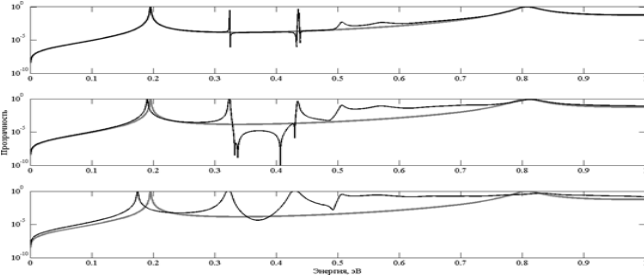


Рис. 3. Коэффициент туннельной прозрачности при $a = 0.01$ эВ·нм (верхний), $a = 0.05$ эВ·нм (средний) и $a = 0.10$ эВ·нм (нижний). Серой линией показан коэффициент туннельной прозрачности в однодолинном приближении.

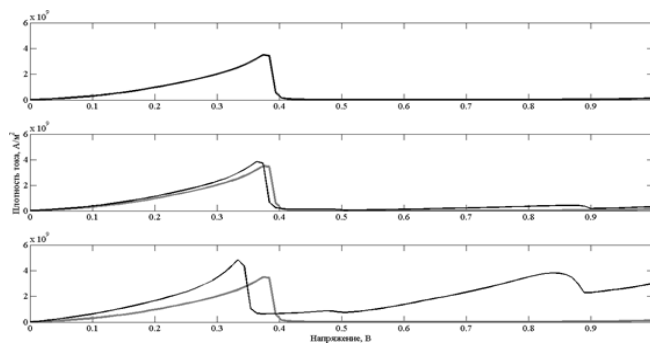


Рис. 4. ВАХ модельной структуры при $a = 0.01$ эВ·нм (верхний), $a = 0.05$ эВ·нм (средний) и $a = 0.10$ эВ·нм (нижний). Серой линией показана ВАХ в однодолинном приближении.

моделирования пик плотности тока на расчётной ВАХ будет смещаться в сторону меньших напряжений и будет увеличиваться его значение. Так же на ВАХ будут появляться новые максимумы, что мы и видим на графиках на **рис. 4**.

Представленный метод расчёта коэффициента туннельной прозрачности в двухдолинном приближении был использован при реализации алгоритма моделирования гетероструктур в среде MATLAB. Для ввода параметров гетероструктуры и представления выходных параметров (ВАХ, коэффициент туннельной прозрачности и пр.) был разработан графический интерфейс. Помимо междолинного рассеяния в реализованной модели учитывается межэлектронное взаимодействие методом самосогласованного поля, неупругое рассеяние электронов методом оптического потенциала и паразитное сопротивление приконтактных областей. На **рис. 5** показано окно интерфейса с результатами расчёта ВАХ с учётом самосогласованного поля и междолинного рассеяния. На графике тёмная линия соответствует ВАХ, рассчитанной в однодолинном приближении, светлая — в двухдолинном приближении.

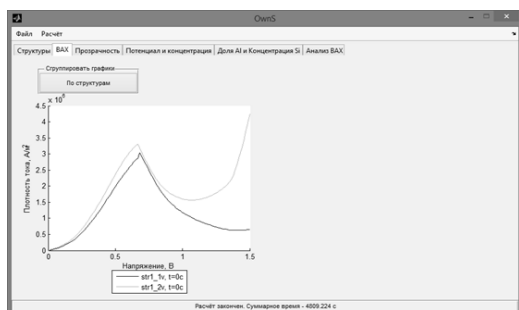


Рис. 5. ВАХ модельной структуры.

На графике расчётных ВАХ видны те же тенденции, что и на рис. 4, а именно увеличение пиковой плотности тока и уменьшение пикового напряжения. Также на этой ВАХ вследствие учёта междолинного рассеяния появляется выраженный второй участок положительной дифференциальной проводимости, который так же присутствует на экспериментально измеренных ВАХ резонансно-туннельных структур.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Уравнение Шрёдингера с граничными условиями Бастарда было сведено к уравнению Шрёдингера для открытой системы, что улучшает физическую интерпретацию процессов в канале структуры. Система из двух таких уравнений, дополненных оператором связи, позволяет описывать движение электрона в канале с учётом междолинного рассеяния. Для моделирования токопереноса в гетероструктурах с учётом диффузионных процессов было расширено определение оператора связи для описания AlGaAs-гетероструктур с характерным поведением профиля Al при учете влияния технологического процесса их изготовления и закономерностей деградации на этапе эксплуатации устройств на их основе. Была представлена численная модель, полученная в рамках метода конечных разностей без понижения точности разностной схемы до первого порядка при учете краевых условий. Уменьшена временная сложность реализованного алгоритма за счет выбора способа формирования матрицы коэффициентов системы линейных уравнений. Был проведён расчёт ВАХ модельной структуры при различных значениях константы междолинного взаимодействия. Разработанная модель была интегрирована в алгоритм моделирования AlGaAs-гетероструктур. На основании результатов расчёта в двухдолинном приближении по сравнению с однодолинными вычислениями сделан вывод о целесообразности использования данной модели при расчёте ВАХ AlAs/GaAs гетероструктур с учетом закономерностей деградации в процессе эксплуатации в условиях воздействия ионизирующих излучений различной природы и повышенной температуры при оценке параметров надёжности приборов наноэлектроники.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ проект № 16.1663.2017/4.6.

ЛИТЕРАТУРА

1. Иванов ЮА, Мешков СА, Шашурин ВД, Федоркова НВ, Федоренко ИА. Субгармонический смеситель с улучшенными интермодуляционными характеристиками на базе резонансно-туннельного диода. *Радиотехника и электроника*, 2010, 55(8):982-988.
2. Kim H, Seo K. Monostable-to-Bistable Transition Logic Element-Based Literal Gates Using Resonant Tunneling Diodes. *Japanese Journal of Applied Physics*, 2008, 47(5):3340-3345.
3. Arun Goud Akkala. NEGF simulation of electron transport in resonant tunneling and resonant interband tunneling diodes. *Dissertation degree M.S.E.C.E*, 2011, 80 p.
4. Борисенко ВЕ, Воробьева АИ, Данилюк АЛ. *Нанозлектроника: теория и практика*. М., БИНОМ: Лаборатория знаний, 2013, 366 с.
5. Абрамов ИИ, Гончаренко ИА, Коломейцева НВ. Комбинированная двухзонная модель резонансно-туннельного диода. *Физика и техника полупроводников*, 2007, 41(11):1395-1400.
6. Sun JP, Mains RK, Yang K, Haddad GI. A Self-Consistent Model of Γ -X Mixing in GaAs/AlAs/GaAs Quantum Well Using Quantum Transmitting Boundary Method. *J. Appl. Phys.*, 1993, 74(8):5053-5060.
7. Fedyay A, Moskaliuk V. Hierarchical Approach to Resonant-Tunneling Diode Modeling. *ELNANO'* 2012, April 10-12, 2012, Kyiv, Ukraine, p.58-59.
8. Datta S. *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*, Cambridge University Press, Cambridge, 1995.
9. Datta S. *Quantum Transport. Atom to Transistor*, Cambridge University Press, Cambridge, 2005, 404 p.

Ветрова Наталия Алексеевна

к.т.н., доцент

Московский гос. технич. университет им Н.Э.Баумана
5/1, ул. 2-я Бауманская, Москва 105005, Россия
vetrova@bmstu.ru

Иванов Юрий Александрович

д.ф.-м.н., проф.

Московский гос. технич. университет им Н.Э.Баумана
5/1, ул. 2-я Бауманская, Москва 105005, Россия
y-a-ivanov@mail.ru

Куимов Евгений Владимирович

магистрант

Московский гос. технич. университет им Н.Э.Баумана
5/1, ул. 2-я Бауманская, Москва 105005, Россия
ekjmo@mail.ru.

Макеев Мстислав Олегович

к.т.н., доцент

Московский гос. технич. университет им Н.Э.Баумана
5/1, ул. 2-я Бауманская, Москва 105005, Россия
mc.stiv@gmail.com

Мешков Сергей Анатольевич

к.т.н., доцент

Московский гос. технич. университет им Н.Э.Баумана
5/1, ул. 2-я Бауманская, Москва 105005, Россия
sb67241@mail.ru

Пчелинцев Кирилл Павлович

ассистент

Московский гос. технич. университет им Н.Э.Баумана
5/1, ул. 2-я Бауманская, Москва 105005, Россия
pkp@bmstu.ru

Шашурин Василий Дмитриевич

д.т.н., проф.

Московский гос. технич. университет им Н.Э.Баумана
5/1, ул. 2-я Бауманская, Москва 105005, Россия
schashurin@bmstu.ruMODELING OF CURRENT TRANSFER IN AlAs/GaAs HETEROSTRUCTURES
WITH ACCOUNTING FOR INTERVALLEY SCATTERING

Nataly A. Vetrova, Yuri A. Ivanov, Evgeny V. Kuimov, Mstislav O. Makeev, Sergey A. Meshkov, Kirill P. Pchelintsev, Vasily D. Shashurin

Bauman Moscow State Technical University, <http://www.bmstu.ru>

vetrova@bmstu.ru, y-a-ivanov@mail.ru, ekjmo@mail.ru, mc.stiv@gmail.com, sb67241@mail.ru, pkp@bmstu.ru, schashurin@bmstu.ru

Abstract. When modeling devices based on AlAs/GaAs heterostructures, an important factor to consider is intervalley electron scattering at heterointerfaces. This paper shows an approach to modeling such processes using the Schrödinger equations for the open reservoir-channel-reservoir system. The problem of modeling the intervalley scattering of electrons in the case when the profile of the aluminum fraction is continuous when there are no pronounced heterointerfaces is considered. For the numerical solution of the equations obtained, the method of finite differences is used without reducing the accuracy of the difference scheme to the first order when boundary conditions are considered. The methods of composing the elements of the matrices of system of linear equations to reduce the temporal complexity of the algorithm are considered. Based on the results of the calculation in the two-valley approximation, in comparison with single-valley calculations, it was concluded that this model can be used to calculate the current-voltage characteristics of AlAs/GaAs heterostructures, taking into account the manufacturing technology and the patterns of degradation during operation, and also in evaluating the reliability parameters of nanoelectronics devices.

Keywords: heterostructures, nanoelectronic, math modeling, electrons intervalley scattering, two-valley approximation

UDC 004.052, 538.91

Bibliography - 9 references

RENSIT, 2018, 10(1):71-76

Received 18.05.2018

DOI: 10.17725/rensit.2018.10.071