

Мустафаев А.Г., Мустафаев Г.А.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ЧИСЛЕННЫЙ РАСЧЕТ РЕЗОНАНСНО-ТУННельНОГО ЭФФЕКТА

Аннотация: В работе рассмотрен один из физических эффектов нанoeлектроники - резонансное туннелирование. Проводится численный расчет конструкции диода, сформированного на МДП-структуре и моделирование его характеристик. Подобной структурой на кремнии обладает структура металл– оксид кремния- полупроводник в режиме сильного обеднения вблизи поверхности легированного полупроводника. Построена зонная диаграмма МДП-структуры, определены энергетические уровни и волновые функции электрона в квантовой яме и при туннелировании, вычислена вероятность туннелирования от величины приложенного напряжения. При проведении расчетов использовалась визуальная среда математического моделирования и инженерных вычислений PTC Mathcad Prime 3.1. В результате компьютерного моделирования определены предельные внешние напряжения, до пробоя диэлектрика. Кроме того, выявлен качественный вид зависимости тока МДП-структуры от высоты и ширины энергетического барьера. Разработанная модель позволяет учитывать совместное влияние нескольких факторов, что подтверждается согласованием расчетных ВАХ с экспериментальными.

Ключевые слова: резонансно-туннельный диод, моделирование, квантовая яма, зонная диаграмма, МДП-структура, волновая функция, нанoeлектроника, полупроводниковый прибор, квантовый перенос, квантовый эффект

Abstract: The research is devoted to one of the physical nanoelectronic effect – resonant tunneling. The authors provide numerical calculations for constructing the MIS-structure based diode and modeling its characteristics. The metal-oxide-silicon semiconductor in the severe depletion mode next to the doped semiconductor has a similar structure. The authors establish the MIS-structure energy band diagram, define energy levels and wave functions of an electron in the quantum well and during tunneling and calculate the probability of tunneling based on the amount of the voltage applied. In the course of calculations the authors use the PTC Mathcad Prime 3.1 visual environment for mathematical modeling and technical computing. The results of the computer modeling allow to define external limit voltage including the amount of voltage that leads to the dielectric breakdown. In addition, the authors define the qualitative dependency between the MIS-structure voltage and the height and width of the energy barrier. The model developed by the authors takes into account the joint influence of several factors which is proved by the coordination of recorded current voltage characteristic with the experimental characteristics.

Keywords: nanoelectronics, wave function, MIS structure, energy band diagram, quantum well, modeling, resonant tunnelling diode, semiconductor device, quantum transport, quantum effect

Одним из путей улучшения качества радиоэлектронных средств является использование полупроводниковых приборов, функционирующих на основе квантоворазмерных эффектов. К таким приборам относятся резонансно-туннельные диоды. Изменяя параметры слоев структуры резонансно-туннельного диода (толщину, химический состав), можно управлять формой его вольт-амперной характеристики. Интерес к двухбарьерным квантовым структурам обусловлен видом их N-образной вольт-амперной характеристики с участком отрицательного дифференциального сопротивления и малой инерционностью процесса туннелирования (порядка 10-13 сек). Эти свойства резонансно-туннельных диодов делают их перспективными для создания высокоскоростных приборов терагерцового диапазона и цифровых устройств с временем переключения порядка 10-12 сек и менее.

Одним из способов улучшения характеристик прибора является его теоретическое изучение, в частности, с помощью компьютерного моделирования. В работе проведен расчет элементов конструкции резонансно-туннельного диода, сформированного на МДП-структуре и моделирование характеристик резонансно-туннельного диода. Резонансно-туннельный диод представляет собой двухбарьерную структуру с квантовой ямой, находящейся между барьерами [1].

Подобным строением обладает структура металл-оксид кремния- кремний в режиме сильного обеднения вблизи поверхности сильнолегированного полупроводника. Роль квантовой ямы в ней выполняет область обеднения. В МДП-структуре, при условии сильного легирования полупроводника и достаточно тонкого диэлектрика, резонансное туннелирование электронов может происходить из валентной зоны кремния через дискретные уровни энергии квантовой ямы, которые локализуются в обедненном слое вблизи границы кремний-SiO₂, и туннельный барьер SiO₂ в металлический контакт.

Оптимизируя характеристики слоев барьеров и ямы, можно получить необходимые значения коэффициентов прохождения электронов через барьеры, и как следствие, нужной величину туннельного тока при заданном значении напряжения на контактах прибора [2-4].

Моделирование резонансно-туннельного эффекта в МДП резонансно-туннельном диоде сводится к проведению расчетов в следующей последовательности [5]:

1. Построение зонной диаграммы МДП структуры и получение зависимостей глубины и ширины квантовой ямы от уровня легирования полупроводника и толщины диэлектрика и напряжения смещения между металлом и полупроводником.
2. Вычисление положения уровней энергии и волновых функций электрона в квантовой яме в зависимости от параметров структуры и напряжения смещения между металлом и полупроводником.
3. Вычисление волновых функций электрона при туннелировании через диэлектрик.
4. Построение суммарной волновой функции электрона и вычисление вероятности туннелирования в зависимости от приложенного к структуре напряжения.

В математической модели учитывались соотношения для расчета падения напряжения на диоксиде кремния и на объеме кремния при различных внешних напряжениях. В результате появилась возможность расчета параметров квантовой ямы, которая фор-

мируется вблизи границы диоксид кремния-кремний. При этом использовались безразмерные энергия и координата и встроенная в Mathcad функция для численного решения дифференциальных уравнений [6].

После проведения моделирования и расчетов значений уровней энергии в квантовой яме было проведено моделирование туннелирования электронов через барьер диоксида кремния из квантовой ямы в металл. Для моделирования и расчета параметров структуры металл-оксид кремния-р⁺кремний была составлена программа, в пакете Mathcad, для построения зонной диаграммы структуры и расчёта параметров квантовой ямы в зависимости от приложенного внешнего напряжения.

Моделирование туннелирования электронов через барьер является классической задачей квантовой механики, которая может быть решена в аналитическом виде.

Зависимости глубины и ширины квантовой ямы на уровне энергии потолка валентной зоны от внешнего напряжения при различной толщине оксида кремния представлены на рис. 1.

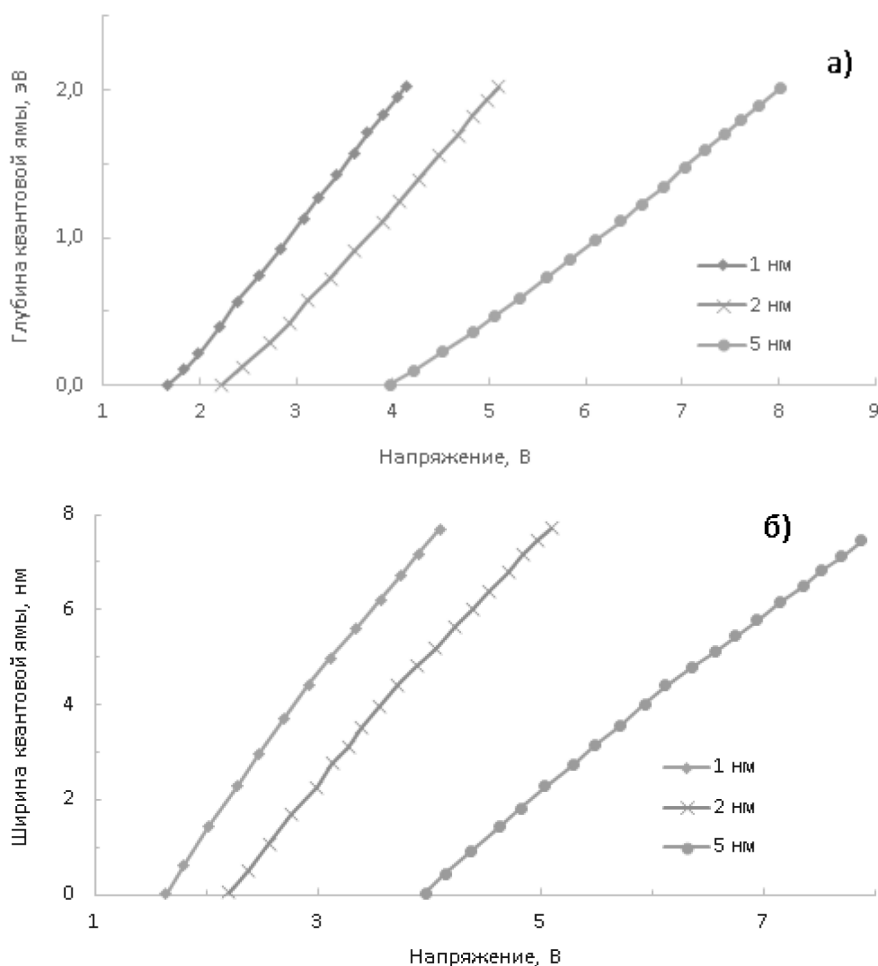


Рис. 1. Глубина (а) и ширина квантовой ямы (б) при различном внешнем напряжении на МДП-структуре и толщине оксида кремния

Одновременно, рассчитывались падения напряжения на диоксиде кремния и высота барьера SiO_2 при туннелировании электронов через диэлектрик МДП-структуры. Зависимости высоты барьера на слое SiO_2 от внешнего напряжения при различной толщине оксида кремния представлены на рис. 2.

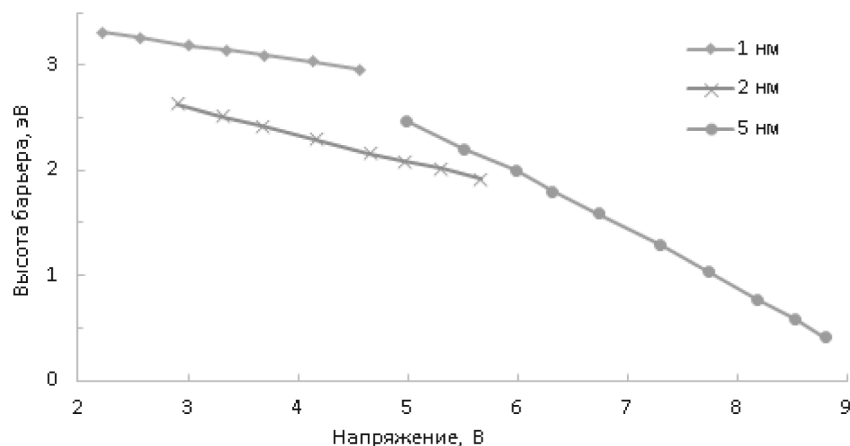


Рис. 2. Высота барьера при туннелировании электронов через диэлектрик в МДП-структуре при различном внешнем напряжении и толщине оксида кремния

На основе расчета напряженности электрического поля в диэлектрике были определены предельные внешние напряжения, которые могут быть поданы на структуру до пробоя диэлектрика.

Для расчета количества и значений энергии уровня в квантовой яме, возникающей на границе $\text{SiO}_2\text{-Si}$ в режиме обеднения при подаче внешнего смещения, было численно решено уравнение Шредингера для потенциальной функции треугольной формы [7].

На рис. 3 представлены значения первых пяти уровней энергии и вид волновой функции для второго уровня энергии в квантовой яме треугольного профиля в безразмерных координатах. Параметры квантовой ямы соответствуют МДП-структуре с толщиной диэлектрика 5 нм.

После подстановки численных значений констант, с учетом вычисленных значений уровней энергии в квантовой яме можно построить зависимости

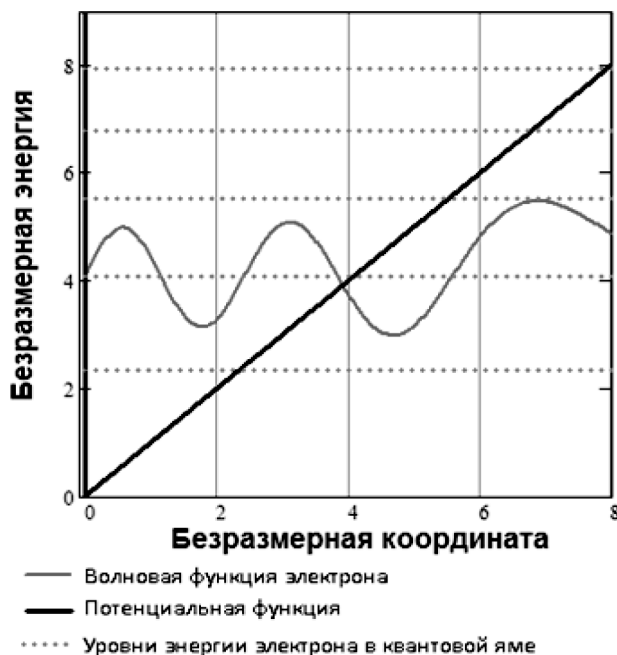


Рис. 3. Значения пяти первых уровней энергии электрона в треугольной квантовой яме и волновая функция электрона для второго уровня энергии

коэффициента прохождения электронов через барьер от энергии электрона, высоты и ширины барьера.

На основании моделирования туннелирования электронов через квантовую яму треугольной формы и барьер из диоксида кремния получить вид зависимости тока МДП – структуры в аналитическом виде не удастся. Необходимо провести ряд дополнительных вычислений, связанных с вычислениями динамических характеристик структуры и решением уравнений переноса носителей заряда. Однако можно представить качественный вид этой зависимости с учетом вычисленных характеристик структуры. ВАХ МДП резонансно-туннельного диода для толщины диэлектрика 1, 2 и 5 нм представлен на рис. 4.

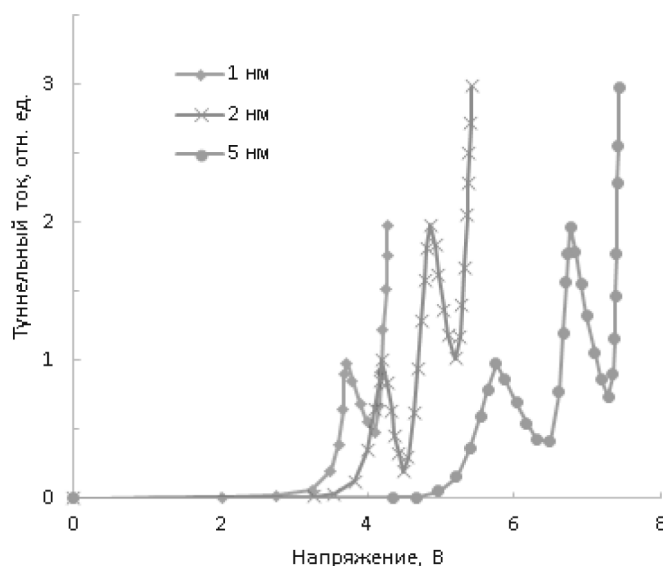


Рис. 4. ВАХ МДП резонансно-туннельного диода при различной толщине оксида кремния

Как видно из ВАХ МДП резонансно-туннельной структуры для структур с толщиной диоксида кремния 1, 2 и 5 нм должны наблюдаться области с отрицательным сопротивлением в соответствующих диапазонах внешнего напряжения, что является характерным для резонансно-туннельных структур, которое может определить использование данной структуры в новых типах приборов.

Библиография :

1. Алкеев Н.В., Аверин С.И., Дорофеев А.А., Гладышева Н.Б., Торгашин М.Ю. Резонансно-туннельный диод на основе гетеросистемы GaAs/ AlAs для субгармонического смесителя // Микроэлектроника. 2010. Т. 39, № 5. С. 356-365.
2. Абрамов И.И., Гончаренко И.А., Коломейцева Н.В. Комбинированная модель резонансно-туннельного диода // Физика и техника полупроводников. 2005. Т. 39, вып. 9. С. 1138-1145.

3. Иванов Ю.А., Мешков С.А., Синякин В.Ю., Федоркова Н.В., Фёдоров И.Б., Шашурин В.Д., Федоренко И.А. Повышение показателей качества радиоэлектронных систем нового поколения за счет применения резонансно-туннельных нанодиодов // *Наноинженерия*, 2011, № 1, С. 34-43.
4. Федяй А.В., Тисный И.С. Моделирование резонансно-туннельного диода методом функций Эйри // *Н.–техн. сб. «Электроника и связь», тематический выпуск «Электроника и нанотехнологии», ч.1.* – 2009. – № 2-3, С. 19–21.
5. Мустафаев Г.А., Панченко Д.В., Панченко В. А., Ефимов М.Ю., Уянаева М.М. Расчет и моделирование уровней размерного квантования в структуре GaN-GaSb-GaN. *Известия КБГУ, том 1, №3, Нальчик*, 2011, с. 66-71.
6. Мустафаев Г.А., Панченко В.А., Мустафаев А.Г., Панченко Д.В., Черкесова Н.В. Моделирование ионизационных потерь ТТЛШ логического элемента // *Современные проблемы науки и образования.* – 2015. – № 1; URL: www.science-education.ru/121-19357 (дата обращения: 08.10.2015).
7. Флюгге З. *Задачи по квантовой механике. Том 1. Пер. с англ. М.: Мир*, 1974. - 341 с.

References:

1. Alkeev N.V., Averin S.I., Dorofeev A.A., Gladysheva N.B., Torgashin M.Yu. Rezonansno-tunnel'nyi diod na osnove geterosistemy GaAs/ AlAs dlya subgarmonicheskogo smesitelya // *Mikroelektronika*. 2010. T. 39, № 5. S. 356-365.
2. Abramov I.I., Goncharenko I.A., Kolomeitseva N.V. Kombinirovannaya model' rezonansno-tunnel'nogo dioda // *Fizika i tekhnika poluprovodnikov*. 2005. T. 39, вып. 9. S. 1138-1145.
3. Ivanov Yu.A., Meshkov S.A., Sinyakin V.Yu., Fedorkova N.V., Fedorov I.B., Shashurin V.D., Fedorenko I.A. Povyshenie pokazatelei kachestva radioelektronnykh sistem novogo pokoleniya za schet primeneniya rezonansno-tunnel'nykh nanodiodov // *Nanoinzheneriya*, 2011, № 1, S. 34-43.
4. Fedyai A.V., Tisnyi I.S. Modelirovanie rezonansno-tunnel'nogo dioda metodom funktsii Eiri // *Н.–техн. сб. «Электроника и связь», тематический выпуск «Электроника и нанотехнологии», ч.1.* – 2009. – № 2-3, С. 19–21.
5. Mustafaev G.A., Panchenko D.V., Panchenko V. A., Efimov M.Yu., Uyanaeva M.M. Raschet i modelirovanie urovnei razmernogo kvantovaniya v strukture GaN-GaSb-GaN. *Izvestiya KBGU, tom 1, №3, Na'chik*, 2011, s. 66-71.
6. Mustafaev G.A., Panchenko V.A., Mustafaev A.G., Panchenko D.V., Cherkesova N.V. Modelirovanie ionizatsionnykh poter' TTLSh logicheskogo elementa // *Sovremennye problemy nauki i obrazovaniya.* – 2015. – № 1; URL: www.science-education.ru/121-19357 (data obrashcheniya: 08.10.2015).
7. Flyugge Z. *Zadachi po kvantovoi mekhanike. Tom 1. Per. s angl. М.: Мир*, 1974. - 341 с.