

5. Noya E. G., Srivastava D., Chernozatonskii L. A. et al. Thermal conductivity of carbon nanotube peapods // Phys. Rev. B. 2004. V. 70. N 11. P. 115416(5).

6. Girifalco L. A., Hodak M. One-dimensional statistical mechanics models with application to peapods // Appl. Phys. A. 2003. V. 76. P. 487–498.

7. Lee C. H., Kang K. T., Park K. S. et al. The nano-memory devices of a single wall and peapod structural carbon nanotube field effect transistor Jpn // Appl. Phys. 2003. V. 42. P. 5392–5394.

8. Porto M., Urbakh M., Klafter J. Atomic Scale Engines: Cars and Wheels // Phys. Rev. Lett. 2000. V. 84. N 26(1). P. 6058–6061.

9. Глухова О. Е., Жбанов А. И., Резков А. Г. Исследование вращения внутренней оболочки наночастицы $C_{20}@C_{80}$ // ФТТ. 2005. Т. 47. № 2. С. 376–382.

10. Krause M., Nuhman M., Kuzmany H. et al. Fullerene Quantum Gyroscope // Phys. Rev. Lett. 2004. V. 93. N 13. P. 137403(4).

11. Хохряков Н. В., Савинский С. С., Молина Дж. М. Фотонные спектры углеродных нанотрубок // Письма в ЖЭТФ. 1995. V. 62. № 7. С. 595–598.

12. Глухова О. Е., Жбанов А. И. Равновесное состояние нанокластеров C_{60} , C_{70} , C_{72} и локальные дефекты молекулярного остова // ФТТ. 2003. V. 45. № 1. С. 180–186.

13. Copley J. R. D., Neumann D. A., Cappelletti R. L., Kamitakahara W. A. Neu-

tron scattering studies of C_{60} and its compounds // Phys. Chem. Solids. 1992. V. 53. N 1. P. 1353–1356.

14. Qian D., Liu W. K., Ruoff R. S. Mechanics of C_{60} in Nanotubes // J. Phys. Chem. B. 2001. V. 105. P. 10753–10758.

15. Глухова О. Е., Дружинин А. А., Жбанов А. И., Резков А. Г. Структура фуллеренов высоких групп симметрии // ЖСХ. 2005. Т. 46. № 3. С. 514–520.

16. Xia Y., Xing Y., Tan C., Mei L. Dimerization and fusion of C_{60} molecules caused by molecular collision // Phys. Rev. B. 1996. V. 53. N 20. P. 13871–138765.

17. Ландау Л. Д., Лившиц Е. М. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. Теоретическая физика. Т. 3. М.: Наука, 1989. 768 с.

УДК 621.382

И. И. Абрамов, д-р физ.-мат. наук, проф.,
Белорусский государственный университет
информатики и радиоэлектроники, Минск,
Республика Беларусь

ПРОБЛЕМЫ И ПРИНЦИПЫ ФИЗИКИ И МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРИБОРНЫХ СТРУКТУР МИКРО- И НАНОЭЛЕКТРОНИКИ*.

V. Резонансно-туннельные структуры

В данной части работы систематизированы и проанализированы модели резонансно-туннельных структур твердотельной наноэлектроники.

Введение

Основными приборами на эффекте резонансного туннелирования в многослойных твердотельных структурах [1–3] являются диоды и транзисторы [1–5]. С использованием резонансно-туннельных диодов (РТД) и транзисторов (РТТ) разработано большое число разнообразных аналоговых, цифровых и аналого-цифровых схем [4–8]. Обращают на себя внимание удачные примеры интеграции РТД и РТТ с такими приборными структурами микроэлектроники, как диоды Шоттки, КМОП-элементы, гетероструктурные биполярные транзисторы, гетероструктурные полевые транзисторы с селективным легированием и др. Более того, возможно создание функционально-интегрированных элементов, включающих РТД, РТТ и элементы микроэлектроники. В данных случаях речь часто идет об элементах гибридной наноэлектроники.

В целом схемы, включающие РТД и РТТ, обладают следующими основными достоинствами, на-

пример, по сравнению с традиционными логическими схемами (КМОП и др.), а именно [6]:

- относительно меньшей сложностью схем на одну выполняемую функцию;
- более низкой мощностью;
- повышенным быстродействием.

Отметим, что в настоящее время созданы РТД с частотами функционирования более 2 ТГц. Это самые быстродействующие приборы твердотельной электроники. Рассмотренные причины и привели к выводу [8], что РТД является "наиболее "созревшей" из всех приборных технологий" наноэлектроники. Необходимо отметить перспективность использования резонансно-туннельных структур и в оптоэлектронике [9]. Принципиально важным является работоспособность ряда приборных структур наноэлектроники данного типа при комнатных температурах.

Проанализируем модели РТД, как наиболее развитые в настоящее время среди моделей не только резонансно-туннельных приборов, но и других приборных структур наноэлектроники. Это, с одной стороны, позволит провести достаточно полную систематизацию моделей, а с другой — прогнозировать основные направления создания моделей элементов наноэлектроники других типов, а также выделить перспективные принципы их моделирования.

Несмотря на, казалось бы, относительно простой принцип функционирования РТД [1–3] протекающие в реальном приборе физические процессы, как правило, существенно усложняются вследствие следующих факторов:

- прибор является квантовой открытой системой, так как имеет место обмен энергией и частицами, в частности, с источником питания, а следовательно, принципиально важны его взаимодействия с окружением (включая влияние температуры окружающей среды);

* См. Ч. I и II в № 8, 9 за 2006 г., Ч. III и IV в № 1, 2 за 2007 г.

- электроны в приборе могут рассеиваться на фонах, неровностях поверхностей раздела, примесях, дефектах, электронах и др.;
- значительное влияние могут оказывать различного рода флуктуации (толщин слоев, распределения примеси, состава и др.);
- важна реальная зонная структура исследуемой системы;
- значительное влияние могут оказывать заряды на поверхностях раздела и др.

Эти факторы существенно усложняют задачу, приводят к дополнительным резонансному и последовательному туннелированию механизмов транспорта и делают ее фактически неразрешимой в строгом виде даже для РТД. К сожалению, практически невозможна и строгая постановка задачи моделирования конкретного РТД.

Как же поступить в данном случае? На помощь приходит понятие грубости модели [10]. Использование трех методов синтеза моделей [11, 12] приводит также к созданию моделей двух основных разновидностей [12]: физико-топологических и электрических. При этом в рамках рассмотренных формализмов [13] могут быть, в принципе, построены подобные (полуклассическому подходу [12]) иерархии моделей (см. ниже).

Упрощенные модели (см., например, обзоры в [14–19]), которые в соответствии с определением [12] могут быть названы физико-топологическими, к сожалению, дают малоудовлетворительные результаты. Они, как правило, приводят лишь к грубым качественным оценкам. Так, при расчете таких важных характеристик РТД, как контрастность и крутизна вольт-амперных характеристик (ВАХ), предельная частота генерации, погрешность может достигать 100 % и намного больше. Для получения удовлетворительных результатов согласования с экспериментальными данными даже по отдельным характеристикам ряд исходных параметров моделей становится чисто подгоночным. Причиной этого является излишне идеализированный характер упрощенных физико-топологических моделей. В них, как правило, учтен лишь основной принцип функционирования РТД. При этом не учитывается большинство из отмеченных факторов. В результате *в настоящее время нет упрощенных моделей, с помощью которых можно было бы удовлетворительно относительно экспериментальных данных рассчитать ВАХ приборных структур на эффекте резонансного туннелирования в более или менее широком диапазоне прикладываемых напряжений, технологических и электрофизических параметров.* Ситуация здесь подобна с некоторыми упрощенными физико-топологическими моделями элементов микроэлектроники. Электрические же модели в основном предназначены для анализа схем, включающих резонансно-туннельные структуры. Поэтому далее рассмотрим вопросы численного моделирования с применением более адекватных распределенных дискретных моделей.

Модели формализма волновых функций

При использовании этого формализма не решается многочастичная задача, которую, строго говоря, необходимо было бы рассматривать при моделировании резонансно-туннельных приборных структур. Традиционным стало применение одночастичного приближения и метода эффективной массы в усредненном поле частиц в приборе (эффективный учет и многочастичных эффектов), приводящих к более простому уравнению Шредингера. В результате многие микроскопические детали не нужны, а следовательно, они теряются. Преимуществом является то, что такие численные модели относительно просты, могут быть практически реализованы на современных ЭВМ, однако, к сожалению, часто приводят к малоудовлетворительным результатам. Несмотря на то, что в рамках данных моделей доминирующий эффект резонансного туннелирования, в принципе, описывается верно, для адекватного моделирования ВАХ приборных структур необходимо учесть, по крайней мере, некоторые из отмеченных ранее факторов.

Основным исходным уравнением в стационарном случае в одночастичном приближении при использовании метода эффективной массы является уравнение Шредингера следующего вида [20]:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \quad (1)$$

где \hbar — постоянная Планка, деленная на 2π ; \mathbf{r} — радиус-вектор пространства; m^* — эффективная масса частицы; $V(\mathbf{r})$ — потенциал (эффективный), характеризующий влияние внешних полей; $\psi(\mathbf{r})$ — одночастичная волновая функция; E — энергия частицы. Традиционно рассматривается одномерный случай.

В классической упрощенной модели Тсу—Есаки [2] было использовано более десяти физических предположений. Кроме отмеченных, дополнительно применялись следующие допущения:

- пренебрегалось изменением эффективных масс от слоя к слою;
- период решетки меньше, чем длина свободного пробега носителей;
- слои моделируются потенциальными барьерами и ямами постоянной высоты и глубины;
- перенос заряда преимущественно осуществляется одним типом носителей (электронами);
- поле в структуре однородное;
- нет источников и стоков на переходных слоях и др.

Интересно заметить, что несмотря на то, что "сценарий развития" моделей в рамках данного формализма фактически происходил по пути уменьшения числа предположений модели Тсу—Есаки, некоторые из них остались и в самых высокоадекватных дискретных моделях рассматри-

ваемого формализма (хорошие обзоры численных моделей приведены в [16, 21]). Причина этого в исключительно высокой степени сложности задачи (большая чувствительность к различным воздействиям и др.) и невозможности учета влияния всех отмеченных ранее факторов в полном объеме.

В соответствии с основным уравнением моделей данного формализма (1) две величины обычно и определяют их адекватность — это потенциал $V(\mathbf{r})$ и эффективная масса m^* . Поэтому главные проблемы здесь связаны с заданием именно этих двух величин. Многое, конечно, зависит от корректности постановки граничных условий. Так как туннелирование — это фактически частный случай одномерного рассеяния, то основные сложности все же связаны с заданием $V(\mathbf{r})$. К сожалению, строгое определение этой величины практически невозможно, хотя бы вследствие ее эффективного характера. В [21] приведен перечень ее составляющих, определяемых сдвигом зон на гетеропереходах, прикладываемым напряжением к прибору, профилем легирования и подвижными зарядами, корреляционными и обменными взаимодействиями. В целом, данный потенциал должен учитывать не только эти, но и другие факторы из отмеченных ранее, что значительно усложняет описание поведения РТД. К сожалению, этого пока никто не сделал!

Вначале были попытки задать потенциал $V(\mathbf{r})$ в (1) с помощью простых аналитических аппроксимаций. В результате задача сильно упрощается и необходимо решать только уравнение Шредингера (1). Традиционно при этом считается, что носители движутся баллистически в различных областях структуры. При введении дальнейших упрощений для построения моделей часто используются следующие хорошо известные и отработанные методы: Вентцеля—Крамерса—Бриллюэна, матриц переноса, сильной связи, аналогии с расчетом линий передач. Более строгие модели обычно основаны на численном решении уравнения Шредингера с помощью методов конечных разностей или матриц переноса (см., например, [16, 21]). К сожалению, модели, в которых применяются простые аналитические аппроксимации потенциала $V(\mathbf{r})$, как правило, дают неудовлетворительные результаты согласования с экспериментом. Очевидно, что это связано с низкой точностью задания $V(\mathbf{r})$.

В более строгих моделях для нахождения потенциала дополнительно обычно используется уравнение Пуассона [21]. При этом для концентраций подвижных носителей заряда применяются квантовомеханические соотношения, по крайней мере, в квантовой яме (см., например [21—24]). Далее электростатический потенциал ϕ используется для нахождения $V(\mathbf{r})$. Таким образом, необходимо решать систему уравнений Шредингера и Пуассона, т. е. самосогласованную задачу. После этого проходящий ток вычисляется на основе известного строгого квантовомеханического соотношения [21] или с помощью формулы Тсу—Есаки [2].

Так как нет работ, в которых учитывалась бы вся гамма отмеченных ранее факторов, то имеется много не только относительно простых, но и численных моделей, плохо согласующихся с экспериментальными данными. Удовлетворительное согласование может быть получено с использованием моделей, в которых учитываются, по крайней мере, следующие факторы: заряд квантовой ямы, последовательные сопротивления пассивных областей, рассеяние в квантовой яме. Это достигается с помощью некоторых численных моделей [21—23, 25].

Учет заряда в пассивных областях и квантовой яме важен при расчете ВАХ РТД [21]. Не менее важно представление при моделировании структуры РТД в виде подобластей, в частности, где имеет место тепловое равновесие, где можно использовать полуклассический подход (макроскопические области), где принципиально необходимо применять квантовомеханический подход, так как разбиение обычно сильно влияет на заряд в квантовой яме и плотность проходящего тока. Как проводить это разбиение? В настоящее время не совсем ясно, так как оно зависит от таких факторов, как структура, прикладываемые смещения и температура. Интересно заметить, что *разработка таких комбинированных моделей, в которых применяются полуклассический и квантовомеханический подходы, фактически обязательна* не только для экономии вычислительных ресурсов ЭВМ, но и вследствие возможных численных проблем при использовании только квантовомеханического подхода для всего прибора.

Учет неупругого рассеяния обычно также является важным [21]. Один из наиболее экономичных подходов здесь основан на введении комплексной составляющей в эффективный гамильтониан [21, 25, 26]. В ряде случаев важен учет многозонных эффектов [21], второго измерения [27], поверхностного заряда на границах раздела [25, 28]. Более того, возможно "усиление" влияния при одновременном учете некоторых из отмеченных факторов, например, температуры и эффектов рассеяния [29], что еще больше усложняет задачу.

Кратко о другой величине. Метод эффективной массы, как известно, является приближенным и, строго говоря, применим в окрестности экстремумов зон полупроводника. Кроме того, m^* — это тензор, а следовательно, использование изотропных по слоям величин при моделировании РТД, по крайней мере, не совсем корректно. Ситуация еще более усложняется вследствие того, что при расчетах эффективные массы берутся равными значениями для соответствующих объемных материалов. Не вызывает сомнений то, что для низкоразмерных областей эти величины могут отличаться от указанных. Вследствие изложенного *при моделировании РТД эффективные массы целесообразно задавать в качестве подгоночных параметров при согласовании с экспериментом, особенно в упрощенных моделях.*

К сожалению, по описанным причинам в настоящее время в рамках рассматриваемого формализма пока не создано модели РТД для расчета ВАХ, которая могла бы быть применима в широком диапазоне конструктивно-технологических параметров и воздействий и при этом дающая хорошее согласование с экспериментом. Несмотря на это модели данного формализма широко используются ввиду их относительной простоты, вычислительной эффективности и, по крайней мере, возможности правильного предсказания качественного поведения электрических характеристик приборов. В целом, здесь предстоит еще многое сделать.

Кардинальное направление качественного улучшения моделей формализма волновых функций должно быть, по-видимому, в переходе к решению многочастичной задачи и в отказе от использования метода эффективной массы. Серьезные опасения [30] вызывает и обычное применение формулы Тсу—Есаки для плотности тока одномерного приближения. Желательна и разработка двух- и трехмерных моделей. Необходимо также создание более совершенных комбинированных моделей, описывающих взаимодействие классических и квантовомеханических областей на основе иерархии моделей, обладающих требуемой адекватностью моделирования для соответствующих областей прибора. Возможно более строгое рассмотрение и на основе системы уравнений Шредингера, описывающих все подсистемы (например, электроны, дырки, фононы и т. п.), входящие в исследуемую приборную структуру и оказывающие влияние на ее функционирование. Ясно, что эта система уравнений должна учитывать хотя бы определяющие взаимодействия между подсистемами. В целом, модели, базирующиеся на формализме волновых функций, целесообразно по-прежнему развивать для приборных структур на эффекте резонансного туннелирования несмотря на встречающиеся сложности на данном пути.

Модели формализма матриц плотности

Данный формализм при моделировании РТД используется нечасто (см., например, [31, 32]). При этом обычно рассматривается одночастичная матрица плотности и применяется приближение эффективной массы, а следовательно, упрощенное кинетическое уравнение, которое, строго говоря, необходимо вывести из уравнения Лиувилля—фон Неймана (2) из [13]. Интересный возможный вариант такого подхода описан в книге [32]. Кинетическое уравнение для одночастичной матрицы плотности $\rho(x, x', t)$ записывается в виде [32]

$$i\hbar \frac{\partial \rho(x, x', t)}{\partial t} = - \left\{ \frac{\hbar^2}{2m^*} (\nabla_x^2 - \nabla_{x'}^2) + V(x) - V(x') \right\} \times \rho(x, x', t) + i\hbar \left\{ \frac{\partial \rho(x, x', t)}{\partial t} \right\}_c, \quad (2)$$

где t — время; i — мнимая единица; m^* предполагается независимой от координаты x , а последний член в (2) является общим представлением рассеяния, который записывается в полуклассической манере [12, 32]. Это позволяет легко ввести в уравнение квазиуровни Ферми, что существенно облегчает анализ. При моделировании РТД получаемое из (2) уравнение решается совместно с уравнением Пуассона. Основными дополнительными ограничениями данного подхода являются следующие [32]: не включаются антисимметричные компоненты в решаемое уравнение для матрицы плотности; для задания граничных условий на контактах для матрицы плотности используется равновесная функция распределения Ферми—Дирака. К сожалению, в настоящее время не исследована допустимость этих предположений при моделировании приборных структур наноэлектроники. Справедливости ради отметим, что аналогичные недостатки, как правило, характерны и для формализма функций Вигнера (одночастичный случай). Сложности также возникают при задании тока на границах. Чтобы избежать их, необходимо вывести дополнительное соотношение, что несложно в одномерном случае. В [32] не приведено сравнение результатов моделирования с экспериментальными данными, что не позволяет оценить реальные возможности описанного подхода.

К сожалению, формализм матриц плотности при моделировании резонансно-туннельных приборных структур не получил такого широкого распространения, как в физике твердого тела. Считается [31], однако, что решить уравнение для матрицы плотности проще, чем для функции распределения Вигнера.

Модели формализма функций Вигнера

Данный формализм при моделировании РТД используется достаточно часто. Впервые он применялся в работе [33], однако без уравнения Пуассона. В дальнейшем [34, 35] начали использовать кинетическое уравнение для функции Вигнера совместно с уравнением Пуассона. Несмотря на то, что вигнеровское представление квантовой механики эквивалентно традиционному, считается, что для формализма функций Вигнера в рассматриваемых задачах следующие основные достоинства: хорошая применимость для моделирования переходных процессов и малосигнального анализа; наиболее естественный учет процессов рассеяния.

Анализ переходных процессов чрезвычайно важен именно для наноэлектронных приборных структур, хотя бы вследствие высокой чувствительности данных структур к разнообразным взаимодействиям (возможны, например, различные внутренние неустойчивости, флуктуации на границах). Так, в работах [36, 37] было показано, что для адекватного моделирования области отрицательной дифферен-

циальной проводимости ВАХ ("плато", гистерезис, область внутренней бистабильности) целесообразно исследование переходных процессов. В области "плато", в частности, возникают осцилляции очень высокой частоты (терагерцового диапазона) при постоянных смещениях на РТД. "Плато" же на ВАХ, по-видимому, получается фактически в результате усреднения во времени. Таким образом, для глубокого исследования этих областей желателен нестационарный анализ. Кроме того, необходимо констатировать, что модели формализма волновых функций в настоящее время для анализа переходных процессов менее развиты, хотя и требуют меньше вычислительных ресурсов ЭВМ [21, 24].

Учет рассеяния также часто принципиально необходим для нанoeлектронных приборов, и формализм функций Вигнера позволяет сделать это достаточно естественно. Это связано с отмеченной ранее определенной аналогией получаемых квантовых кинетических уравнений данного формализма с кинетическим уравнением Больцмана (КУБ) [13]. Вспомним, что в полуклассическом подходе учет рассеяния относительно неплохо отрабатан [12]. Поэтому возможно использование уже наработанных подходов. По описанной причине формализм функций Вигнера более удобен по сравнению с эквивалентным формализмом матриц плотности.

Рассмотрим кратко дискретные модели формализма функций Вигнера. И здесь *ключевыми являются одночастичное приближение и приближение эффективной массы* [21]. В результате квантовое кинетическое уравнение для одночастичной функции Вигнера может быть получено из уравнения Лиувилля—фон Неймана несколькими путями [34], включая вывод с помощью формализма неравновесных функций Грина. Удобной для анализа является следующая форма записи кинетического уравнения (сравни с (2)) для одночастичной функции Вигнера f [38]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\hat{L}f}{i\hbar} + \hat{C}f, \quad (3)$$

где \hat{L} — оператор, описывающий баллистическое движение носителей заряда, а \hat{C} — оператор соударений. В соответствии с видом (3) *одной из главных проблем при разработке моделей данного формализма является поиск операторов \hat{L} и \hat{C} , адекватно описывающих физические процессы, протекающие в нанoeлектронной приборной структуре, включая диссипативные.*

Традиционно при моделировании РТД используется следующий более конкретный вид (соответствующий оператор \hat{L}) кинетического уравнения в одномерном случае [21]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(x, k, t)}{\partial t} = & -\frac{\hbar k}{m^*} \frac{\partial f(x, k, t)}{\partial x} - \\ & - \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dk' \left\{ 2 \int_{-\infty}^{\infty} dy \sin[(k - k')y] \left[V\left(x + \frac{y}{2}\right) - \right. \right. \\ & \left. \left. - V\left(x - \frac{y}{2}\right) \right] \right\} f(x, k', t) + \left(\frac{\partial f(x, k, t)}{\partial t} \right)_c, \quad (4) \end{aligned}$$

где k — волновое число; $V(x)$ — потенциальная энергия; $(\partial f/\partial t)_c$ — столкновительный член. Видно, что данное уравнение подобно КУБ (1) в [12]. Для более полного учета влияния электрического поля необходимо решать (4) совместно с уравнением Пуассона. Хотя кинетическое уравнение вида (4) может быть выведено достаточно строго, получаемые выражения для столкновительного члена не используются. Это связано с чрезвычайной сложностью и громоздкостью данных соотношений. Поэтому традиционным стало фактически полуклассическое включение столкновительного члена в модель [21]. В результате выражение для интеграла столкновений принимает вид (3) в [12]. Хотя в литературе иногда и приводятся несколько возможных аппроксимаций для него [38], при расчетах, как правило, применяется приближение времени релаксации [21].

Остановимся на основных проблемах численного моделирования РТД. Их первопричиной является, конечно же, очень высокая степень сложности физических процессов в приборной структуре, приводящая к необходимости рассмотрения многочастичной задачи, а также учета влияния сильных полей, различного рода неоднородностей, диссипативных процессов.

Одним из наиболее важных и сложных вопросов является постановка *граничных условий*. Это связано с необходимостью учета двух групп диссипативных процессов при моделировании элемента нанoeлектроники, а именно:

- *внутренних*, вызванных взаимодействием электронов с другими видами частиц и между собой (в меньшей степени) собственно в самом элементе;
- *внешних*, определяемых обменом, взаимодействием носителей заряда с внешней схемой, а в более широком смысле — с окружением (резервуаром).

Особая сложность рассмотрения диссипативных процессов для нанoeлектронных приборных структур заключается в том, что эти две группы процессов могут быть здесь гораздо более взаимосвязанными по сравнению с элементами микроэлектроники. В результате для корректной постановки граничных условий требуется знание состояния системы на границе, определяемое не только окружением, но и процессами внутри самого прибора. Иными словами, строго говоря, необходимо знать "точное" решение полной самосогла-

сованной задачи для всей замкнутой системы "прибор—окружение". Очевидно, что в общем случае этого добиться невозможно. При моделировании собственно элемента возможно несколько подходов [33, 35, 39]:

- расширить области решения достаточно далеко от источника квантовых эффектов, так чтобы дополнительные области характеризовались классическим поведением, т. е. равновесной функцией распределения;
- использовать другие уравнения, модели в целях определения функции Вигнера на границе.

Так, если при постановке граничных условий не учитывать характер нанoeлектронного прибора как открытой системы, то в процессе их моделирования могут возникать неустойчивости [33, 39]. Чтобы этого не происходило, необходимо вводить диссипативность через граничные условия. К сожалению, это достаточно сложная задача, которая, в принципе, должна решаться путем рассмотрения микроскопической модели взаимодействия контактов, т. е. резервуара, дополняющего нашу открытую систему, в данном случае — активную часть приборной структуры, до замкнутой системы (второй подход). Поэтому традиционно используется первый подход, в частности, считается, что контакты — идеальные резервуары для носителей заряда, т. е. все частицы в контактах приходят в равновесное состояние, характерное для данных резервуаров. В результате функция распределения Вигнера на контактах, как правило, задается с помощью равновесных функций распределения Ферми—Дирака, Больцмана или смещенных распределений. Такая модель контактов полностью соответствует используемой в рамках полуклассического подхода [12] и у ряда специалистов вызывает опасения в случае моделирования РТД. Этими серьезными опасениями являются возможные нарушения соотношения неопределенностей и ухудшения согласования с экспериментом [33, 39]. Поэтому в работе [33] справедливо отмечается, что используемые граничные условия достаточно грубые, хотя и описывают основные качественные особенности взаимодействия "открытая система—резервуар" в данном случае. Рассмотренный упрощенный (первый) подход является во многом вынужденным, так как получение строгой модели взаимодействия резервуара с открытой системой на основе матрицы плотности (функции Вигнера) практически невозможно [13]. В связи с этим целесообразна разработка лишь более простых моделей в рамках второго подхода. Таким образом, при постановке граничных условий ситуация весьма далека от завершенной. Перспективным, по-видимому, и здесь будет являться разработка комбинированных моделей, сочетающих элементы первого и второго подходов.

Две другие проблемы связаны с видом оператора \hat{L} в кинетическом уравнении (4). Первая серьез-

ная проблема заключается в возможной потере, иногда очень существенной, информации о квантовом характере поведения системы. О том, что решения уравнения для функции Вигнера "могут не соответствовать квантовомеханическим задачам, если на начальные условия к нему не наложено дополнительное ограничение, определяющее допустимый класс квантовых распределений", отмечалось в обзоре [40]. Так, оказывается, что уравнение (4) не описывает квантовые закономерности, характерные для гармонического осциллятора [35, 40]. В частности, после подстановки потенциала соответствующей квадратичной зависимости [41] в (4) получается классическое решение, так как (4) переходит в КУБ. В результате не описывается физически правильное поведение одного из самых простых объектов квантовой механики! Следствием этой проблемы является то, что для детального анализа энергетических состояний квантовых ям в РТД приходится дополнительно решать уравнение Шредингера [37]. Следовательно, фактически необходимо строить комбинированную модель, основанную на двух формализмах.

Вторая проблема связана с учетом зависимости эффективной массы от координаты в \hat{L} . Оказывается, что в работах, в которых используется уравнение (4), эффективная масса берется постоянной по всему прибору. Ясно, что это не соответствует действительности. В работах [42, 43] были выведены кинетические уравнения для функции Вигнера, позволяющие учитывать зависимость эффективной массы от координаты. К сожалению, модифицированные кинетические уравнения сильно усложняются по сравнению с (4). Были получены результаты с их применением в случае неучета рассеяния [42], а также без учета уравнения Пуассона [43]. Не было проведено и сравнение с экспериментальными данными. И тем не менее, в работах [42, 43] показана важность учета зависимости эффективной массы от координаты (как и в формализме волновых функций [21]) при расчете ВАХ РТД путем сравнения с другими, более простыми моделями. В то же время использование упрощенного кинетического уравнения, подобного (4), может приводить к отрицательным значениям тока долины и контрастности ВАХ [43], т. е. физически бессмысленным результатам.

Проблематичным в настоящее время является и задание оператора \hat{C} в кинетических уравнениях, т. е. учет рассеяния. С одной стороны, важная мотивировка использования формализма функций Вигнера — удобство учета рассеяния, а с другой стороны — применяются полуклассические подходы его учета. При этом параметры (времена релаксации, скорости рассеяния) для каждого из механизмов рассеяния задаются, как правило, постоянными для всего прибора, соответствующими объемным материалам. Так как обычно используется

приближение времени релаксации, то суммарное время релаксации при учете нескольких механизмов рассеяния определяется согласно (10) в [12]. При таких подходах эти фактически макроскопические параметры носят явно подгоночный характер при моделировании РТД. В то же время не вызывает сомнения, что для адекватного анализа резонансно-туннельных структур учет рассеяния принципиально необходим вследствие чрезвычайной чувствительности поведения структур к его влиянию [21, 34, 35, 37]. Желательно было бы также принимать во внимание и электрон-электронное взаимодействие. В этом случае в кинетическое уравнение необходимо вводить двухчастичную функцию Вигнера и использовать дополнительные приближения и соотношения. В настоящее время, к сожалению, этого никто не сделал для рассматриваемой задачи. Следует также напомнить о том, что полуклассическое "раскрытие" $(\partial f/\partial t)_c$ фактически приводит к единственному источнику квантовомеханических коррекций в решениях, определяемому членом, содержащим потенциал в (4). Опасности этого уже отмечались. По изложенным причинам весьма актуальной является задача разработки более адекватных квантовомеханических подходов к учету рассеяния при моделировании РТД.

Достаточно серьезная проблема — создание численных методов решения рассматриваемой самосогласованной задачи. Главной объективной причиной этого является то, что даже в стационарном одномерном случае (см. (4)) модель фактически двумерная (по пространству x и волновому числу k , т. е. в фазовом пространстве). Здесь уместно отметить, что для формализма волновых функций, несмотря на осуществляемый перебор по энергиям (на контактах), а точнее k , задача для каждого из значений энергии все же одномерная. В случае необходимости моделирования переходных процессов модель еще более усложняется. Заметим также, что с помощью некоторых численных моделей формализма функций Вигнера стационарный анализ проводится путем расчета установившегося переходного процесса, т. е. через динамику. В итоге, для моделирования РТД в рамках данного формализма требуется применение вычислительных систем высокой производительности: суперЭВМ и др. Поэтому *повышение эффективности используемых численных методов является весьма актуальной задачей.*

Приходится констатировать, что исследования данного рода очень малочисленны. Так, при конечно-разностной аппроксимации применяются, как правило, стандартные методы [44], в частности, используются разностные отношения против потока для члена, содержащего градиент в (4), а для уравнения Пуассона — центрально-разностные отношения второго порядка точности. Вначале при аппроксимации градиента в (4) применялись разностные отношения против потока первого порядка [35, 42]. Однако впоследствии было по-

казано, что такие аппроксимации могут приводить не только к количественным, но и качественным ошибкам даже при нулевых смещениях РТД [45]. Очень значительные погрешности получаются и при расчете ВАХ и моделировании переходных процессов в РТД [45]. Поэтому целесообразно использовать разностные отношения против потока не первого, а второго порядка точности [37, 45, 46]. В работе [39] было показано, что построение дискретных моделей РТД требует особого внимания, так как могут возникать немалые ошибки усечения в выполнении ряда физически важных соотношений, включая некоторые законы сохранения. Так, возможен ощутимый "ненулевой ток" при нулевых прикладываемых смещениях. Поэтому необходим обязательный контроль шагов сетки дискретизации в фазовом пространстве. Теоретический анализ различных моделей РТД [39], включая модель формализма матриц плотности [31], по ошибкам усечения при выполнении указанных соотношений позволил установить [39], что в зависимости от задачи исследования та или иная дискретная модель может иметь определенные преимущества и недостатки. Это целесообразно учитывать при их использовании.

К сожалению, *физические подходы типа [10] к построению дискретных моделей данного формализма пока не разрабатываются.* Можно лишь предположить, что после разработки таких новых конечно-разностных аппроксимаций рассматриваемой самосогласованной задачи нас могут ожидать подобные отмеченным выше разочарования по поводу полученных ранее результатов. Определенные основания к этому есть — относительно небольшое число узлов сеток дискретизации, как правило, используемое в упомянутых моделях как по x (до 90), так и по k (до 90), причем традиционно равномерных. Заметим, что такое ограничение по числу узлов в некоторых моделях может быть следствием возможностей даже достаточно мощных вычислительных систем (см., например [45]). Нормальную точность расчета при таком малом числе узлов равномерной сетки пространственной дискретизации можно получить, судя по всему, рассматривая только активную область прибора и пренебрегая протяженными пассивными областями [47]. Влияние же последних может быть важным, особенно при согласовании с экспериментом.

При моделировании переходных процессов используются как явные, так и неявные методы интегрирования по времени для кинетического уравнения [35—37, 45, 47], причем *предпочтение отдается неявным разностным схемам.*

Крайне слабо разработаны и исследованы методы итерационного решения нелинейных уравнений дискретной модели, а жаль. Отмечу, пожалуй, единственную серьезную работу [46] в данном направлении. В ней сравнивались по эффективности, точности и надежности четыре итерационных метода, а именно: последовательной и одновре-

менной концепций для анализа стационарных и переходных процессов. В качестве теста осуществлялся расчет ВАХ РТД. Особую сложность при этом представляет моделирование "плато" в области отрицательной дифференциальной проводимости. Было показано, что каждый из методов при решении данной задачи имеет свои достоинства и недостатки. Поэтому в программах численного моделирования РТД желательно иметь реализацию нескольких итерационных методов, в частности, для анализа как стационарных, так и переходных процессов. Обычная же практика — использование методов для анализа либо стационарных, либо переходных процессов. В [46] показано, что это опасная практика, так как в некоторых случаях физически корректные результаты могут быть получены только лишь с помощью определенного итерационного метода из четырех исследованных.

Очень важным, как отмечалось в [46], является и выбор критерия сходимости внешних итераций. Так, оказывается, что сходимость для уравнения Пуассона даже с относительно высокой точностью (по невязке) не является достаточной в некоторых случаях. Более удовлетворительно дополнительное использование критерия по изменению приращению электростатического потенциала до относительно малых значений (меньше 10^{-6} В). Однако и применение данных двух критериев бывает недостаточным, например, при анализе стационарных режимов через динамику. В этих случаях необходимо уменьшать изменение плотности тока по длине прибора до относительно малого значения [46]. Таким образом, данный критерий во многом подобен описанному и рекомендованному ранее [10]. Отметим, что при поиске решения в областях неустойчивостей и устойчивых высокочастотных осцилляций числовые значения верхних границ оцениваемых погрешностей должны быть иногда на четыре порядка меньше [46] по сравнению с другими областями ВАХ РТД, т. е. задача сильно усложняется в математическом плане. При этом для расчетов иногда необходимо использовать суперЭВМ. В целом, результаты [46] убедительно доказывают *высокую актуальность разработки и глубокого исследования численных методов реализации дискретных моделей нанозлектронных приборных структур несмотря на возможные серьезные проблемы на этом пути.*

Следствием описанных проблем является то, что *с применением дискретных моделей формализма функций Вигнера практически нет убедительных примеров согласования результатов расчета ВАХ РТД с экспериментальными данными** [21], т. е. эти модели еще достаточно грубы. По этой причине, по-видимому, не надо бояться введения дополнительных зависимостей согласующих параметров моделей, в частности, эффективных масс, времен ре-

лаксации, скоростей рассеяния и др., от режима работы приборной структуры нанозлектроники и иных факторов. Напомним, что это уже давно традиционный методический подход для электрических моделей МОП- и биполярных транзисторов кремниевых ИС, например для коэффициентов передачи [48]. Почему подобные методики не могут использоваться и здесь? Автор не видит к этому никаких серьезных оснований. Главный же аргумент в пользу данного подхода — чрезвычайно высокая степень сложности задачи. Поэтому мы фактически еще *находимся в начале очень сложного пути построения адекватных дискретных моделей нанозлектронных приборных структур и методик идентификации их параметров.*

Рассмотрение данного формализма завершим следующей цитатой из работы [40]: "сама по себе функция Вигнера лишена физического смысла, и наглядность вигнеровского представления в значительной степени является кажущейся".

Модели формализма функций Грина

Общепризнанным в квантовой механике является то, что для описания систем одинаковых частиц наиболее удобен метод вторичного квантования [41]. Его особая ценность заключается в применимости для систем с несохраняющимся числом частиц. В данном методе в качестве независимых переменных вместо полного набора механических величин того или иного индивидуального состояния частиц берутся числа заполнения частиц в этих состояниях. В результате гамильтониан системы выражается через операторы рождения и уничтожения. Решение же задачи при этом обычно упрощается.

Функции Грина в рассмотрение вводятся как средние величины (с точностью до коэффициента, в который входит мнимая единица) от различных произведений гейзенберговских операторов рождения и уничтожения частиц в методе вторичного квантования. В результате, например, одночастичные функции Грина зависят уже от двух пространственно-временных точек, т. е. число временных координат, вообще говоря, удваивается по сравнению с одночастичными матрицей плотности и функцией Вигнера! Так как функции Грина связаны достаточно простыми соотношениями с матрицами плотности, функциями Вигнера, то получаемые уравнения движения, к сожалению, обладают тем же серьезным недостатком [13]. В частности, в уравнения движения для одночастичных функций Грина входят двухчастичные функции Грина и т. д. (иерархия уравнений). В связи с этим для получения из цепочек уравнений упрощенных кинетических уравнений для одночастичных функций Грина введение аппроксимаций для двухчастичных функций является, по существу, также обязательным [49, 50].

*Сравнение обычно проводится для фактически активной области (длиной до 60 нм) РТД работы [47].

Кроме отмеченного недостатка, заключающегося в появлении дополнительных временных координат, для формализма функций Грина характерно и увеличение числа уравнений движения. Так, для одночастичных функций Грина получаются четыре уравнения Каданова—Бейма [50], точные в термодинамическом пределе. В данные уравнения входят также собственно энергетические функции, которые могут быть выражены через те же функции Грина и для которых необходимо получать дополнительные соотношения. В этом случае набор уравнений Каданова—Бейма можно считать замкнутым. Определенное ослабление отмеченного недостатка было достигнуто в рамках диаграммной техники Л. В. Келдыша [51]. Так, путем введения трех функций Грина (опережающей, запаздывающей и корреляционной) удается систему четырех очень сложных интегро-дифференциальных уравнений свести к двум независимым уравнениям. Поэтому в литературе данный, наиболее эффективный, подход получил название формализма Келдыша—Каданова—Бейма и часто используется в задачах физики твердого тела.

Здесь следует обратить внимание на одно замечание работы [51], касающееся диаграммной техники вообще. Смысл его в том, что получаемые с ее помощью результаты корректны для времен, больших по сравнению с временем релаксации. Возможна же и такая постановка вопроса, когда в момент времени t_0 задана произвольная матрица плотности $\rho(t_0)$ и необходимо проанализировать релаксацию этого состояния к установившемуся. Такая задача, судя по всему, не может быть описана любыми диаграммными техниками, так как в их основе лежит аппроксимация двух-, трех- и т. д. частичных функций Грина с помощью одночастичных, по крайней мере, в виде бесконечного ряда. Следовательно, *при моделировании переходных процессов с помощью одночастичных функций Грина очень осторожно необходимо относиться к результатам, полученным при малых временах, меньших времени релаксации системы. Аналогичное заключение, по-видимому, справедливо и для других рассмотренных ранее формализмов, так как они обычно основываются на одночастичных приближениях.*

Несмотря на отмеченное повышение эффективности формализма функций Грина с помощью диаграммной техники Л. В. Келдыша использование получаемых уравнений для моделирования нанoeлектронных приборов, к сожалению, очень сложно даже в стационарном случае. Интересный приближенный метод, приводящий к неплохим результатам, был развит в работах Датты (S. Datta) с соавторами [52—54]. В его основе лежит известный подход Ландауэра—Буттикера (R. Landauer, M. Büttiker). Так, для тока (в точке контакта \mathbf{r}) на единицу энергии и объема обосновано уравнение

$$I(\mathbf{r}, E) = \frac{e}{2\pi\hbar} \int d\mathbf{r}' T(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E) [f(\mathbf{r}, E) - f_{\tau}(\mathbf{r}', E)], \quad (5)$$

где e — заряд электрона; $T(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E)$ — коэффициент происхождения; $f(\mathbf{r}, E)$ — функция заполнения; $f_{\tau}(\mathbf{r}', E)$ — эффективная функция заполнения, учитывающая процессы неупругого рассеяния. Для вычисления коэффициента прохождения, функции заполнения и скоростей рассеяния (входят в $f_{\tau}(\mathbf{r}', E)$) в рамках формализма Келдыша—Каданова—Бейма получена система замкнутых уравнений [55], в которую входит и упрощенное кинетическое уравнение для Фурье-образа одночастичной функции Грина. Основными физическими допущениями в данной стационарной одномерной модели РТД являются:

- справедливы одночастичное приближение и метод эффективной массы;
- моделируется электронный транспорт в одной зоне проводимости;
- предполагается специальный вид потенциалов для нескольких учитываемых механизмов неупругого рассеяния.

При численном решении кинетического уравнения для Фурье-образа запаздывающей функции Грина используются элементы метода сильной связи (при аппроксимации закона дисперсии на соответствующей сетке), что приводит к уравнениям, характеризующим разреженной матрицей. Это значительно упрощает численное решение кинетического уравнения.

Хотя метод и позволяет вычислять концентрацию подвижных электронов и плотность тока внутри структуры, для него свойственно нарушение консервативности плотности тока на границе "прибор—контакт" [53]. Кроме того, эффективная масса берется постоянной по всей структуре, а интенсивность неупругого рассеяния подбирается с помощью "некоторой функции" [53]. Модель, к сожалению, требует для реализации очень больших вычислительных ресурсов ЭВМ.

Последний недостаток рассмотренного приближенного метода в значительной степени усугубляется тем, что в РТД традиционно существуют достаточно протяженные пассивные области. Желательно также учесть большее число механизмов рассеяния. Для ослабления первого недостатка используется достаточно *общий подход*, часто применяемый в рамках формализма волновых функций, а именно: *протяженные пассивные области РТД рассматриваются как продолжение контактов и для них строится более простая модель*. Таким образом, *необходимо разрабатывать комбинированную модель, требующую меньших вычислительных ресурсов ЭВМ*.

Данный эффективный подход в рамках формализма функций Грина был реализован в работах [56, 57]. В частности, прибор был разбит на два "больших резервуара" (эмиттерный и коллекторный) и "короткий прибор". Для "больших резервуаров" использованы простые соотношения, справедливые при ряде предположений. Фактически эти области трактуются как продолжение контак-

тов. Введение допущений в "коротком приборе" позволило получить кинетические уравнения для одночастичных функций Грина в приближении эффективной массы с учетом влияния этих протяженных контактов. В результате "несамосогласованных аппроксимаций" выведены и упрощенные соотношения для необходимых собственно энергетических функций для различных механизмов рассеяния только в "коротком приборе", а именно: на полярных оптических фононах, на акустических фононах, на неоднородностях соединений, на шероховатостях границ раздела и на ионизированных примесях. Поэтому отметим достоинство модели, заключающееся в учете широкого спектра механизмов рассеяния в рамках единого формализма. При задании закона дисперсии в дискретной модели возможно применение одно-, двух- и десятизонной моделей с использованием элементов метода сильной связи [57]. В более сложных моделях по отношению к однозонной учитывается непараболичность зон. Для вычисления тока получена обобщенная интегральная формула для туннельного тока непосредственно через функции Грина в случае неучета рассеяния. Она подобна формуле Тсу—Есаки [2].

В рамках формализма функций Грина с применением десятизонной модели был учтен дополнительный эффект в РТД на основе GaAs/AlAs, связанный с нарушением трансляционной симметрии на гетерогранице [58]. Хотя в этой работе проведено и несколько других модификаций по сравнению с моделью [57], включая самосогласование, авторами [58] не учитывались механизмы рассеяния и влияние "температурных эффектов", поэтому не проводилось сравнение результатов расчета ВАХ с экспериментальными данными. Другая модификация модели [57] — использование уравнения для плотности тока диффузионно-дрейфовой модели в "больших резервуарах" эмиттера и коллектора — не привела к подтверждению принципиальной необходимости решения такой более строгой задачи в этих протяженных областях по сравнению с ранее применяемым квазиравновесным предположением в них [59]. Заметим, что это очень важный результат, так как данное предположение обычно используется и в комбинированных моделях РТД, основанных на формализме волновых функций. По-видимому, оно допустимо для данных приборов в макроскопических областях эмиттера и коллектора.

Анализ показывает, что к основным недостаткам моделей формализма функций Грина следует отнести: несогласованность аппроксимаций, применяемых на различных этапах построения модели; громоздкость; требуемые большие вычислительные ресурсы ЭВМ. Первый недостаток наиболее серьезен и характерен не только для моделей нанoeлектронных приборных структур, основанных на формализме функций Грина, но и вообще для рассматриваемого формализма в целом в различных зада-

чах. Он связан с крайней громоздкостью подхода и большим числом исходных уравнений. Поэтому для существенных, вынужденных упрощений и приходится применять самые разнообразные аппроксимации на различных этапах построения моделей, к сожалению, часто не согласованных между собой, а иногда просто противоречащих друг другу. Результатом являются такие очень серьезные недостатки моделей нанoeлектронных элементов, как отсутствие баланса в равновесных условиях (при нулевых смещениях!) [57], возможное нарушение консервативности плотности тока [53, 57]. В общей теории формализма функций Грина рекомендуется такие сложные ситуации обходить с помощью дополнительного использования законов сохранения [50], что, строго говоря, справедливо для замкнутых систем и добавляет в модель новые уравнения и, естественно, еще больше ее усложняет. В отмеченных моделях вместо этого применяются лишь простые качественные физические соображения, что весьма опасно именно для нанoeлектронных приборных структур как открытых систем.

Несмотря на повышение эффективности модели [57] по сравнению с рассмотренной ранее [53, 55], число уравнений дискретной модели все же просто огромное. Так, в случае учета только упругого рассеяния в однозонной модели типичные числа таковы [57]: $N_L = 50$ (число слоев); $N_k = 200$ (число узлов сетки по импульсу), что приводит к полной матрице, характеризующей систему линейных алгебраических уравнений с 10^8 элементами! Для решения таких огромных систем используется "медленный" итерационный метод, в частности, метод Якоби в сочетании с последовательной верхней релаксацией [57]. При учете неупругого рассеяния задача, конечно же, еще более усложняется, по крайней мере, в 3 раза увеличивается число уравнений [57]. Все это и приводит к значительным затратам вычислительных ресурсов ЭВМ как по памяти, так и по времени. В итоге модель сложна в использовании, требует большого числа согласующих параметров, т. е. ее применение, вообще говоря, — искусство. В связи с изложенным *модели данного формализма пока, к сожалению, явно не предназначены для широкого использования.*

Анализ моделей РТД рассматриваемого формализма целесообразно завершить цитатой из книги [49]: "*... метод функций Грина ... в расчетном отношении ... отнюдь не обязательно является самым простым. Иногда он позволяет решить задачу только с помощью довольно "лихих" аппроксимаций*". Комментарии, как говорится, излишни.

Таким образом, возлагаемые, очень большие надежды на кинетические модели РТД, основанные на формализмах функций Вигнера и Грина, пока, к сожалению, не оправдались. Для них в той или иной мере характерны следующие серьезные недостатки: громоздкость; большие затраты вычислительных ресурсов ЭВМ (даже для одномерных стацио-

нарных моделей); часто неудовлетворительное согласование с экспериментом.

Главным направлением развития кинетических моделей в рамках формализмов функций Грина и Вигнера, судя по всему, будет разработка комбинированных моделей, т. е. реализация отмеченного ранее эффективного подхода. Определенные положительные результаты уже получены и для формализма функции Вигнера для модели, в которой решается кинетическое уравнение для функций Вигнера в квантовой (активной) области прибора и используется метод Монте-Карло в макроскопических областях [60, 61]. В разработанных комбинированных моделях обоих формализмов имеется ряд недостатков, в частности, согласующими параметрами являются ширины барьеров и ям, уровни легирования (!) [62], высота барьера [61], что в целом нехорошо. С одной стороны, все же существуют определенные сложности в экспериментальном определении этих исходных данных. С другой стороны, экспериментальные исследования позволили также установить очень высокую чувствительность ВАХ РТД к изменению ширин барьеров, квантовых ям, мольной фракции и уровней легирования (см., например [63]). Кроме того, в комбинированной модели [60, 61] могут возникать проблемы и со сходимостью для реальных концентраций примесей. И несмотря на недостатки отмеченных комбинированных моделей подход, бесспорно, перспективен ввиду существенной экономии вычислительных ресурсов ЭВМ без существенной потери точности моделирования.

Для реализации моделей РТД различных формализмов иногда применяются методы Монте-Карло [64–66]. Это так называемые "квантовые методы Монте-Карло", в отличие от рассмотренных в [12] "классических (полуклассических) методов Монте-Карло". Так же, как и ранее, возможны два варианта, а именно: 1) метод Монте-Карло используется в качестве численного метода решения интегродифференциальных уравнений; 2) метод Монте-Карло применяется как метод имитации движения частиц. Здесь есть одна проблема методологического характера, состоящая в неприменимости понятия "траектория" в квантовой механике. Ее можно, однако, обойти, например, с помощью использования "траекторий Бома", вычисляемых на основе волновых функций [64, 65]. Метод Монте-Карло в результате становится более формальным по сравнению с полуклассическим случаем. К сожалению, квантовые методы Монте-Карло требуют при реализации просто огромных затрат вычислительных ресурсов ЭВМ, что приводит к необходимости введения существенных приближений и применения суперЭВМ. При этом обычно используются теория возмущений и диаграммная техника. Серьезные проблемы возникают и со сходимостью методов [66]. Большая экономичность алгоритмов характерна при учете рассеяния в квантовой яме в рамках формализма волновых

функций [29], а также в рамках комбинированной модели [60, 61] в данных случаях, однако при использовании классических методов Монте-Карло. Как и ранее, все же имеется значительный резерв повышения эффективности моделей, основанных на квантовых методах Монте-Карло, в частности, путем построения комбинированных моделей. Определенные положительные результаты в этом направлении уже достигнуты [64, 65].

Итак, главным направлением практического усовершенствования моделей всех (!) формализмов, судя по всему, будет создание комбинированных моделей. Именно такие модели, как правило, и позволяют получить удовлетворительное согласование с экспериментом. Бесспорно, важными для РТД будут являться следующие основные направления повышения адекватности моделей:

- отказ от одночастичного и переход к многочастичным приближениям (сначала к двух- и трехчастичным);
- отказ от метода эффективной массы;
- переход к анализу многомерных и переходных физических процессов;
- более полный учет влияния контактов, приконтактных и других пассивных областей, границ раздела;
- более детальное описание процессов рассеяния;
- более детальный учет реальных электрофизических свойств низкоразмерной системы, входящей в приборную структуру;
- более детальный учет взаимодействия прибора с окружением.

Важным является и повышение экономичности моделей.

К сожалению, даже отдельные из отмеченных направлений повышения адекватности приводят к неизбежному усложнению моделей (не говоря о всех направлениях, учитываемых совместно), а следовательно, к дальнейшему понижению их эффективности. В этой связи уместно привести некоторые данные из работы [21] по сравнению моделей

Сравнение моделей различных формализмов

Искомая функция	Модель формализма			
	Волновая	Матрица плотности	Вигнера	Грина
Учет рассеяния	Да	Да	Да	Да
Трактовка рассеяния	Различные аппроксимации	Аппроксимация времени релаксации	Аппроксимация времени релаксации	Собственно энергетические функции
Переходной анализ	Да	Да	Да	Нет
Вычислительные ресурсы ЭВМ	Незначительные	Средние	Средние	Значительные

рассмотренных формализмов (см. таблицу). Хотя приведенные сведения и носят скорее качественный характер, они, тем не менее, полезны, так как в целом характеризуют достигнутые успехи в разработке моделей различных формализмов повышенной адекватности. Выбирать читателю.

Итак, более реальным является другой подход, особенно при отсутствии высокопроизводительной вычислительной техники, — переход к еще более простым по сравнению с отмеченными основными уравнениям, т. е. дальнейшая эксплуатация свойства грубости модели.

Модели на основе других уравнений

Привлекательный путь заключается в поиске относительно простых уравнений и в разработке на их основе моделей повышенной эффективности, обладающих в то же время требуемой степенью адекватности моделирования. *Наиболее естественное здесь направление — использование более простых кинетических уравнений по сравнению с рассмотренными. Интерес для моделирования приборов нанoeлектроники могут представить следующие уравнения: основное (управляющее*) кинетическое уравнение Паули; обобщенное основное кинетическое уравнение Ван Хофа; обобщенное основное кинетическое уравнение Пригожина—Ресибуа; обобщенное кинетическое уравнение Больцмана и др.*

Из отмеченных кинетических уравнений для анализа РТД применялось основное уравнение Паули [67]. В модели [67] осуществляется самосогласованное решение этого уравнения, уравнений Шредингера и Пуассона. Отмечается, что использование основного уравнения Паули допустимо в случае, когда можно пренебречь влиянием недиагональных членов в матрице плотности. Это обычно справедливо для слабых взаимодействий и не очень быстрых адиабатических процессов. Для решения основного уравнения Паули применяется метод Монте-Карло. Модель использовалась для одномерного анализа стационарных процессов в РТД. "Метод Монте-Карло, применяемый здесь, ... вносит элемент неустойчивости и осцилляционного поведения" [67] в решение. Это характерно для данного метода и в других моделях, что, вообще говоря, затрудняет обработку полученных результатов. Несмотря на это метод Монте-Карло при решении основного уравнения Паули требует все же более или менее реальных затрат вычислительных ресурсов ЭВМ [67].

Другое важное направление связано с уравнениями квантовой гидродинамики. Данные уравнения можно выводить из уравнения Шредингера, Лиувилля—фон Неймана и кинетических в различных формализмах отличающимися способами. В результате можно получать разные системы уравне-

ний, причем со своими дополнительными соотношениями, а следовательно, и параметрами. С помощью моделей, основанных на таких уравнениях, допустимо, в принципе, учитывать многомерные эффекты. К сожалению, полная система квантовых гидродинамических уравнений для моделирования РТД использовалась нечасто. Иногда применяются уравнения только для нулевого и первого моментов [32, 68].

И. А. Обухов с соавторами [69] поставили еще более интересную задачу, а именно: *получить квантовый аналог фундаментальной системы уравнений [12], т. е. обобщить эту систему.* Для этих целей можно просто использовать некоторые из уравнений квантовой гидродинамики с дополнительными соотношениями. Однако был выбран отличающийся от традиционно применяемого подход [69]. Замечу, что и в этом случае уравнение (2) из [70] для каждого сорта частиц ("самостоятельная фаза для некоторого квантового газа" [70]) имеет традиционный вид уравнения для нулевого момента (см. (11) из [12])*. Подход, однако, позволил получить явные выражения для столкновительных членов через химический потенциал каждого сорта частиц. Именно это является чрезвычайно важным. Поэтому уравнение непрерывности для плотности электронов каждого сорта ("фазы") частиц является, по существу, уравнением, определяющим химический потенциал соответствующего сорта частиц. Здесь необходимо отметить, что в ряде даже высокоадекватных моделей формализмов волновых функций и функций Грина для химического потенциала обычно используются различные аппроксимации. Хотя и показана их допустимость для РТД [59], однако это все же аппроксимации. На данном этапе недостатком модели [69, 70] являются необходимость решать уравнение Шредингера с детерминированным потенциалом для каждой "фазы" для всего прибора, включая и протяженные макроскопические области, а также задание "некоторого известного потенциала, отвечающего за тот или иной вид случайного взаимодействия" [70]. Бесспорным достоинством модели является хорошее согласование расчетов ВАХ РТД с экспериментальными данными [69, 70]. Подчеркну, что удовлетворительное согласование с экспериментом в настоящее время достигается только с помощью нескольких комбинированных моделей формализма волновых функций [21, 25, 28], функций Грина и Вигнера [57, 61, 62]. Кроме того, на основе модели [69, 70] построена комбинированная модель, учитывающая двумерные эффекты в РТД, в частности, было оценено влияние подложки [69, 70].

Рассмотренная модель [69, 70] интересна и в методологическом плане, так как подтверждает положение (недостающее звено), что и для нанoeлектронных приборных структур (на примере РТД)

*Речь идет о "master equation". В русскоязычной специальной литературе используются два названия, а именно: "основное уравнение" или "управляющее уравнение".

*Вид уравнений для нулевого момента в квантовом и полуклассическом случаях одинаков.

можно на практике построить подобную иерархию (по крайней мере основных) классов моделей, как и для элементов микроэлектроники [12], а именно: квантовые кинетические* модели, квантовые методы Монте-Карло; квантовые гидродинамические модели; квантовые квазигидродинамические модели; квантовые диффузионно-дрейфовые модели; комбинированные модели. Причины этого уже разяснялись. Заметим, что отличие в названиях классов моделей по сравнению с ранее рассмотренными [12] обычно в добавлении одного слова — "квантовые". Важным в этих классах моделей является то, что при определенных предположениях (в макроскопических областях) они переходят в соответствующие классы моделей полуклассического подхода (нет лишь прямого аналога у моделей формализма волновых функций, хотя и для них существует квазиклассическое приближение). Таким образом, в рамках единого формализма можно описывать как квантовые, так и классические области. В итоге, более рационально возможно также строить комбинированные модели, в частности, задавать границы областей применимости различных моделей, т. е. для решения главной проблемы данного класса моделей.

В заключение необходимо отметить, что для других уравнений, используемых при моделировании РТД, крайне желательно получить оценки допустимых диапазонов их применимости, как это было сделано для моделей полуклассического подхода [12]. Такая оценка в настоящее время сделана только лишь для основного уравнения Паули [67].

Итак, какой из формализмов использовать? Ответить на этот вопрос непросто, так как каждый из рассмотренных формализмов имеет свои достоинства и недостатки. Решать самому читателю. Здесь еще раз обратим внимание на одно достоинство формализма волновых функций — относительно высокая экономичность моделей. По крайней мере, более или менее строгий двух- и трехмерный квантовомеханический анализ переходных процессов в приборных структурах осуществлялся только с помощью уравнения Шредингера.

Читателю также следует помнить, что при использовании других формализмов с нелинейными функциями (от волновых функций) возможны потери при описании некоторых важнейших свойств квантовых объектов. В этих случаях применение комбинации формализмов с обязательным привлечением волновых функций фактически является вынужденным!

Автор считает своим приятным долгом выразить искреннюю признательность профессорам И. Г. Не-

*Несколько неудачно это название для моделей формализма волновых функций. Здесь, однако, следует вспомнить, что уравнение Шредингера описывает и явления переноса. Традиционно также используется и одночастичное приближение, характерное для кинетических моделей.

известному, Г. И. Haddad, А. Seabaugh, доктору Г. Klimeck, канд. физ.-мат. наук И. А. Обухову за любезно предоставленные публикации, а также моим ученицам И. А. Гончаренко и Н. В. Коломейцевой, совместно с которыми были проведены исследования по моделированию РТД и частично описанные в работах [23, 25, 28].

Список литературы

1. Иогансен Л. В. О возможности резонансного прохождения электронов в кристаллах через системы барьеров // ЖЭТФ. 1963. Т. 45. Вып. 2. С. 207—213.
2. Tsu R., Esaki L. Tunneling in a finite superlattice // Appl. Phys. Lett. 1973. V. 22. N 11. P. 562—564.
3. Chang L. L., Esaki L., Tsu R. Resonant tunneling in semiconductor double barriers // Appl. Phys. Lett. 1974. V. 24. N 12. P. 593—595.
4. Resonant tunneling device with multiple negative differential resistance: Digital and signal processing applications with reduced circuit complexity / S. Sen, F. Capasso, A. Y. Cho, D. Sivco // IEEE Trans. 1987. V. ED-34. N 10. P. 2185—2191.
5. Quantum functional devices: Resonant-tunneling transistors, circuits with reduced complexity, and multiple-valued logic / F. Capasso, S. Sen, F. Beltram, L. M. Lunardi, A. S. Vengurlekar, P. R. Smith, N. J. Shah, R. J. Malik, A. Y. Cho // IEEE Trans. 1989. V. ED-36. N 10. P. 2065—2082.
6. Digital circuit applications of resonant tunneling devices / P. Mazumder, S. Kulkarni, M. Bhattacharya, J. P. Sun, G. I. Haddad // Proc. IEEE. 1998. V. 86. N 4. P. 664—686.
7. Resonant-tunneling mixed-signal circuit technology / A. Seabaugh, B. Brar, T. Broekaert, F. Morris, P. van der Wagt, G. Frazier // Solid-State Electron. 1999. V. 43. P. 1355—1365.
8. Technology Roadmap for Nanoelectronics / Ed. by R. Compaño // EC IST programme Future and Emerging Technologies, Second Edition, 2000. 104 p.
9. Алферов Ж. И. История и будущее полупроводниковых гетероструктур // ФТП. 1998. Т. 32. Вып. 1. С. 3—18.
10. Абрамов И. И. Проблемы и принципы физики и моделирования приборных структур микро- и нанoeлектроники. III. Численное моделирование в рамках полуклассического подхода // Нано- и микросистемная техника. 2007. № 1. С. 36—46.
11. Абрамов И. И. Проблемы и принципы физики и моделирования приборных структур микро- и нанoeлектроники. I. Основные положения // Нано- и микросистемная техника. 2006. № 8. С. 34—37.
12. Абрамов И. И. Проблемы и принципы физики и моделирования приборных структур микро- и нанoeлектроники. II. Модели полуклассического подхода // Нано- и микросистемная техника. 2006. № 9. С. 26—36.
13. Абрамов И. И. Проблемы и принципы физики и моделирования приборных структур микро- и нанoeлектроники. IV. Квантовомеханические формализмы // Нано- и микросистемная техника. 2007. № 2. С. 24—32.
14. Тагер А. С. Размерные квантовые эффекты в субмикронных полупроводниковых структурах и перспектива их применения в электронике СВЧ. Ч. 1. Физические основы // Электронная техника. Сер. Электроника СВЧ. 1987. Вып. 9. С. 21—34.
15. Пожела Ю. Физика быстродействующих транзисторов. Вильнюс: Моклас, 1989. 264 с.
16. Долманов И. Н., Толстихин В. И., Еленский В. Г. Полупроводниковые приборы с резонансным туннелированием электронов // Зарубежная радиоэлектроника. 1990. № 7. С. 66—89.
17. Бузанева Е. В. Микроструктуры интегральной электроники. М.: Радио и связь. 1990. 304 с.
18. Драгунов В. П., Неизвестный И. Г., Гридчин В. А. Основы нанoeлектроники: Учеб. пособие. Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2000. 332 с.
19. Демиховский В. Я., Вугальтер Г. А. Физика квантовых низкоразмерных структур. М.: Логос, 2000. 248 с.
20. Киреев П. С. Физика полупроводников. М.: Высшая школа, 1975. 584 с.
21. Resonant Tunneling diodes: Models and properties / J. P. Sun, G. I. Haddad, P. Mazumder, J. N. Schuhman // Proc. IEEE. 1998. V. 86. N 4. P. 641—661.

22. **Gawlinski E., Dzurak T., Tahir-Kheli R. A.** Direct and exchange-correlation carrier interaction effects in a resonant tunnel diode // *J. Appl. Phys.* 1992. V. 72. N 8. P. 3562—3569.
23. **Абрамов И. И., Гончаренко И. А.** Численная комбинированная модель резонансно-туннельного диода // *Электромагнитные волны и электронные системы.* 2002. Т. 7. № 3. С. 54—60.
24. **Pinaud O.** Transient simulation of a resonant tunneling diode // *J. Appl. Phys.* 2002. V. 92. N 4. P. 1987—1994.
25. **Абрамов И. И., Гончаренко И. А., Коломейцева Н. В.** Комбинированная модель резонансно-туннельного диода // *ФТП.* 2005. Т. 39. Вып. 9. С. 1138—1145.
26. **Sun J. P., Haddad G. I.** Self-consistent scattering calculation of resonant tunneling diode characteristics // *VLSI Design.* 1997. V. 3. P. 1—4.
27. **Peak** width analysis of current-voltage characteristics of triple-barrier resonant tunneling diodes / M. Nagase, M. Suhara, Y. Miyamoto, K. Furuya // *Jpn. J. Appl. Phys.* 2000. V. 39. Part 1. N 6A. P. 3314—3318.
28. **Abramov I. I., Goncharenko I. A., Kolomejtseva N. V.** The influence of classical and quantum-mechanical regions interaction on IV-characteristics of RTD, based on different materials // *Proc. SPIE* 2004. V. 5401. P. 482—487.
29. **Influence** of impurity and phonon scattering effects in resonant tunneling structures / Y. Fu, Q. Chen, W. Willander, H. Brugger, U. Meiners // *J. Appl. Phys.* 1993. V. 74. N 3. P. 1874—1878.
30. **Boykin T. B., Carnahan R. E., Martin K. P.** Inadequacy of the one-dimensional approximation for resonant-tunneling diode current-voltage calculations // *Phys. Rev. B.* 1995. V. 51. N 4. P. 2273—2281.
31. **Frensley W. R.** Simulation of resonant-tunneling heterostructure devices // *J. Vac. Sci. Technol. B.* 1985. V. 3. N 4. P. 1261—1266.
32. **Quantum** transport in ultrasmall devices / Ed. by D. K. Ferry, H. L. Grubin, C. Jacoboni, A.-P. Jauho, New York, London: Plenum Press, 1995. NATO ASI Ser. B. V. 342. 544 p.
33. **Frensley W. R.** Transient response of a tunneling device obtained from the Wigner function // *Phys. Rev. Letters.* 1986. V. 57. N 22. P. 2853—2856.
34. **Quantum** tunneling properties from a Wigner function study / N. C. Klusdahl, A. M. Krivan, C. Ringhofer, D. K. Ferry // *Solid-State Electron.* 1988. V. 31. N 3/4. P. 743—746.
35. **Self-consistent** study of the resonant-tunneling diode / N. C. Klusdahl, A. M. Krivan, D. K. Ferry, C. Ringhofer // *Phys. Rev. B.* 1989. V. 39. N 11. P. 7720—7735.
36. **Jensen K. L., Buot F. A.** Numerical simulation of intrinsic bistability and high-frequency current oscillations in resonant tunneling structures // *Phys. Rev. Letters.* 1991. V. 66. N 8. P. 1078—1081.
37. **Creation** and quenching of interference-induced emitter-quantum wells within double-barrier tunneling structures / P. Zhao, D. L. Woolard, B. L. Gelmont, H.-L. Cui // *J. Appl. Phys.* 2003. V. 94. N 3. P. 1833—1849.
38. **Frensley W. R.** Quantum transport modeling of resonant-tunneling devices // *Solid-State Electron.* 1988. V. 31. N 3/4. P. 739—742.
39. **Frensley W. R.** Boundary conditions for open quantum systems driven far from equilibrium // *Rev. of Modern Physics.* 1990. V. 62. P. 745—791.
40. **Татарский В. И.** Вигнеровское представление квантовой механики // *УФН.* 1983. Т. 139. Вып. 4. С. 587—619.
41. **Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.** Квантовая механика. Нерелятивистская теория: Учеб. пос. М.: Наука, 1974. 752 с.
42. **Tsuchiya H., Ogawa M., Miyoshi T.** Simulation of quantum transport in quantum devices with spatially varying effective mass // *IEEE Trans.* 1991. V. ED-38. N 6. P. 1246—1252.
43. **Shih J.-J., Huang H.-C., Wu G. Y.** Effect of mass discontinuity in the Wigner theory of resonant-tunneling diodes // *Phys. Rev. B.* 1994. V. 50. N 4. P. 2399—2405.
44. **Роч П.** Вычислительная гидродинамика. М.: Мир, 1980. 616 с.
45. **Buot F. A., Jensen K. L.** Lattice Weyl-Wigner formulation of exact many-body quantum-transport theory and applications to novel solid-state quantum-based devices // *Phys. Rev. B.* 1990. V. 42. N 15. P. 9429—9457.
46. **Biegel B. A., Plummer J. D.** Comparison of self-consistency iteration options for the Wigner function method of quantum device simulation // *Phys. Rev. B.* 1996. V. 54. N 11. P. 8070—8082.
47. **Jensen K. L., Buot F. A.** The methodology of simulating particle trajectories through tunneling structures using a Wigner distribution approach // *IEEE Trans.* 1991. V. ED-38. N 10. P. 2337—2347.
48. **Абрамов И. И.** Лекции по моделированию элементов интегральных схем. Москва-Ижевск: НИЦ "Регулярная и хаотическая динамика", 2005. 152 с.
49. **Займан Дж.** Современная квантовая теория. М.: Мир, 1971. 288 с.
50. **Каданов Л., Бейм Г.** Квантовая статистическая механика. Методы функций Грина в теории равновесных и неравновесных процессов. М.: Мир, 1964. 256 с.
51. **Келдыш Л. В.** Диаграммная техника для неравновесных процессов // *ЖЭТФ.* 1964. Т. 47. Вып. 4. С. 1515—1527.
52. **Datta S.** Steady-state quantum kinetic equation // *Phys. Rev. B.* 1989. V. 40. N 8. P. 5830—5833.
53. **Datta S.** A simple kinetic equation for steady-state quantum transport // *J. Phys.: Condens. Matter.* 1990. V. 2. P. 8023—8052.
54. **Lake R. K., Datta S.** Nonequilibrium Green's-function method applied to double-barrier resonant-tunneling diodes // *Phys. Rev. B.* 1992. V. 45. N 12. P. 6670—6685.
55. **Quest: User's manual / G. Klimeck, R. K. Lake, M. J. McLennan, S. Datta // Technical report TR-EE 93-17, School of Electrical Engineering, Purdue University, West Lafayette, IN 47907-1285; April, 1993. 118 p.**
56. **Quantum** device simulation with a generalized tunneling formula / G. Klimeck, R. Lake, R. C. Bowen, W. R. Frensley, T. S. Moise // *Appl. Phys. Lett.* 1995. V. 67. N 17. P. 2539—2541.
57. **Single** and multiband modeling of quantum electron transport through layered semiconductor devices / R. Lake, G. Klimeck, R. C. Bowen, D. Jovanovic // *J. Appl. Phys.* 1997. V. 81. N 12. P. 7845—7869.
58. **Ogawa M., Sugano T., Miyoshi T.** Full multiband simulation of quantum electron transport in resonant tunneling devices // *Solid-State Electron.* 2000. V. 44. P. 1939—1947.
59. **Klimeck G.** Quantum and semi-classical transport in NEMO-1D // *J. of Comput. Electron.* 2003. V. 2. P. 177—182.
60. **Coupling** between the Liouville equation and a classical Monte Carlo solver for the simulation of electron transport in resonant tunneling diodes / F. Martin, J. Garcia-Garcia, X. Oriols, J. Suñé // *Solid-State Electron.* 1999. V. 43. P. 315—323.
61. **Garcia-Garcia J., Martin F.** Simulation of multilayered resonant tunneling diodes using coupled Wigner and Boltzmann distribution function approaches // *Appl. Phys. Lett.* 2000. V. 77. N 21. P. 3412—3414.
62. **Resonant-tunneling** diodes with emitter prewells / T. B. Boykin, R. C. Bowen, G. Klimeck, K. L. Lear // *Appl. Phys. Lett.* 1999. V. 75. N 9. P. 1302—1304.
63. **Experimental** sensitivity analysis of pseudomorphic InGaAs/AlAs resonant-tunneling diodes / T. S. Moise, Y.-C. Cao, A. J. Katz, T. P. E. Broekaert, F. G. Celii // *J. Appl. Phys.* 1995. V. 78. N 10. P. 6305—6317.
64. **Bohm** trajectories for the Monte Carlo simulation of quantum-based devices / X. Oriols, J. J. Garcia-Garcia, F. Martin, J. Suñé, T. González, J. Mateos, D. Pardo // *Appl. Phys. Lett.* 1998. V. 72. N 7. P. 806—808.
65. **Towards** the Monte Carlo simulation of resonant tunneling diodes using time-dependent wavepackets and Bohm trajectories / X. Oriols, J. J. Garcia-Garcia, F. Martin, J. Suñé, J. Mateos, T. González, D. Pardo, O. Vanbésien // *Semicond. Sci. Technol.* 1999. V. 14. P. 532—542.
66. **Jacoboni C., Bordone P.** The Wigner-function approach to nonequilibrium electron transport // *Rep. Prog. Phys.* 2004. V. 67. N 7. P. 1033—1071.
67. **Fischetti M. V.** Theory of electron transport in small semiconductor devices using the Pauli master equation // *J. Appl. Phys.* 1998. V. 83. N 1. P. 270—291.
68. **Grubin H. L., Kreskovsky J. P.** Quantum moment balance equations and resonant tunneling structures // *Solid-State Electron.* 1989. V. 32. N 12. P. 1071—1075.
69. **Обухов И. А.** Моделирование переноса заряда в мезоскопических структурах. Севастополь: Вебер, 2005. 226 с.
70. **Обухов И. А.** Моделирование статистических характеристик резонансно-туннельных приборов // *Микросистемная техника.* 2001. № 2. С. 23—28.