

基于非平衡格林函数的共振隧穿二极管模型

王令全 王 燕 陈培毅 余志平

(清华大学微电子学研究所, 北京 100084)

摘要: 应用非平衡格林函数方法对共振隧穿二极管(RTD)内部的载流子分布和势场情形进行了研究,给出了应用该模型计算 AlGaAs/GaAs/AlGaAs 的 RTD 结构在不同阱宽和不同垒宽情形下的电流-电压曲线. 为验证该数值模型的正确性,文中还给出了基于 Wigner 函数的解析模型,将两者的结果进行了对比,并对其结果进行了分析.

关键词: 非平衡格林函数法; 共振隧穿二极管; Schrödinger-Poisson 方程

PACC: 7320D; 0230

中图分类号: TN313⁺.2

文献标识码: A

文章编号: 0253-4177(2003)S0-0132-04

1 引言

随着分子束外延(MBE)与超高真空化学气相淀积(UHVCVD)技术的日益成熟,基于量子效应的量子器件得到了飞速的发展. 量子阱、量子线、量子点器件在替代传统 MOS 结构方面表现出相当强的潜力. 作为量子阱器件中的典型,共振隧穿二极管(RTD)已在多个领域得到应用,相应的实验也取得了一定的成功. 相比于实验的进展,RTD 的模型发展相对滞后. 在目前的模型中,Envelop 函数只能求解弹道输运情形^[1],但是仍然作为平衡系统进行处理,未能计入系统的耗散性,这与输运的非平衡本质相互抵触;基于密度矩阵和 Wigner 函数需要求解刘维尔方程,求解该时空耦合的微分方程相对困难^[2],尽管上述两种模型考虑到了系统的耗散性,但其耗散性的求解体现于解的时域部分,在实现上有一定难度;基于非平衡格林函数方法的模型亦可分为两种:一种为在二次量子化的基础上利用 Dyson 方程求解出格林函数并进而求得电流电压特性^[3],该方法仍然显式地含时;另一种则直接关心模空间的格林函数,隐式含时,并较前者可省却很多计算. 本文即采用最后一种方法对 RTD 器件进行了建模工作,并将其结果与文献中的结果进行了比较,得到比较一致的结论. 该模型的初步结果与实验结果大

致吻合.

2 非平衡格林函数理论

2.1 自能矩阵和非平衡格林函数^[4,5]

对于小尺寸特别是处于电子 Debroglie 波长尺度的器件,我们需要通过对 Schrödinger 方程和 Poisson 方程进行自洽求解来确定器件内部各处的载流子分布和相应的电势能分布情况,进而求得器件的 $I-V$ 特性. 非平衡格林函数方法的基本想法有两点:首先将器件作为一个整体的系统进行了解,关心其对于外加激励信号的响应. 由于器件与外界的连通(与电极、导线的接触),器件内部原有的束缚态变为扩展态,这种变化明显地体现在无限深势阱能级无展宽到有限方势阱中能级有展宽的变化上. 非平衡格林函数采用引入自能矩阵的方式将这种变化体现在 Schrödinger 方程的求解中,从而恰当地描述了与外界连通有载流子交换这一本质问题. 同时,正如我们所知,电子的输运过程本身是一能量耗散过程,因而是一非平衡过程,应采用非平衡统计的方式描述,这也是采用非平衡格林函数方法的原因之一. 其次,在非平衡格林函数方法中,我们采用紧束缚近似(tight-binding approximation)的方法,只考虑紧邻格点对于所关心格点的作用.

在上述的考虑下,将 Schrödinger 方程离散为下式:

$$[H_L \phi]_n = -t\phi_{n-1} + (E_C + 2t + U_n)\phi_n - t\phi_{n+1} \quad (1)$$

$$H_L = \begin{bmatrix} & |1\rangle & |2\rangle & \dots & |N-1\rangle & |N\rangle \\ |1\rangle & E_C + 2t + U_1 & -t & & & \\ |2\rangle & -t & E_C + 2t + U_2 & & & \\ & & & & & \\ |N-1\rangle & 0 & 0 & & E_C + 2t + U_{N-1} & -t \\ |N\rangle & 0 & 0 & & -t & E_C + 2t + U_N \end{bmatrix} \quad (2)$$

使用自能矩阵来表达由开放性边界条件所带来的影响,对于两端器件,我们引入 Σ_1 和 Σ_2 分别代表左、右电极引起的对哈密顿量的修正项,如下式所示:

$$H'_L = H_L + \Sigma_1 + \Sigma_2 \quad (3)$$

对于自能矩阵 Σ 的确定,采用不同的模型假设可以得到不同的结论. 参照一个简单的电阻模型,假定连接其两侧的电极是高掺杂的半无限长晶体,对于左侧可以得到下面的自能矩阵形式:

$$\Sigma = \begin{bmatrix} & |1\rangle & |2\rangle & \dots & |N-1\rangle & |N\rangle \\ |1\rangle & -t \exp(ik_0 a) & 0 & \dots & 0 & 0 \\ |2\rangle & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots \\ |N-1\rangle & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ |N\rangle & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (4)$$

经过修正的哈密顿量如(3)式所示,据此可以求出相应的本征态. 由于在这里采用的是矩阵方法求解 Schrödinger 方程,并不需要显式地求出本征态和相应的本征能量,因此引入格林函数以方便计算密度矩阵:

$$[G(E)] = [EI - H_L - \Sigma_1 - \Sigma_2]^{-1} \quad (5)$$

2.2 密度矩阵

密度矩阵可用于分析空间各处载流子浓度分布. 在坐标表象之下,用下式计算密度矩阵:

$$\rho = \int \frac{dE}{2\pi} [F_0(E - \mu_1)A_1 + F_0(E - \mu_2)A_2] \quad (6)$$

式中 F_0 函数表示输运方向动能为 E 的载流子占据空态的几率; A 函数表示能量间隔中载流子的分布密度,其脚标分别表达左、右电极; μ_1, μ_2 分别表示左右电极的费米能级. A 函数由下式计算:

式中 t 为一常数,与采用的离散步长有关;下脚标表示格点序号; E_C 表示导带底的能量. 将(1)式写为矩阵形式:

$$A_1 = G\Gamma_1 G^+; \quad A_2 = G\Gamma_2 G^+ \quad (7)$$

其中 $\Gamma_i = \frac{\Sigma_i - \Sigma_i^+}{2} \quad i = 1, 2$

计算出的密度矩阵将给出格点处的载流子分布情况,结合 Poisson 方程的求解即可得到相应的电势能情形,两方程迭代自洽求解,可最终确定器件内部的电势能分布状况.

3 RTD 模型建立及其结果

应用非平衡格林函数对于 RTD 器件进行建模,将 RTD 的双垒单阱部分视为所研究的系统,而其中形成的异质结为突变结;同时假定 RTD 器件两端为重掺杂区(与实际情形相符). 在此基础上,我们可以认为器件两端(电极)向器件内部注入载流子时,电极仍然近似地处于热平衡状态,并由此应用涨落定理,最终求解电流电压曲线. 整个求解的过程如图 1 所示.

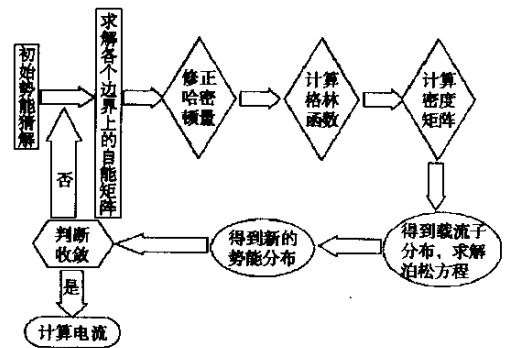


图 1 基于非平衡格林函数方法的 RTD 模型求解过程的框图

Fig. 1 Flowchart of solving process for RTD model based on non-equivalent Green function

需要说明的是,上述模型首先通过自洽求解出在外加一定偏压之下双垒单阱结构内部的势场分布,继而通过下式求解该偏压下的电流:

$$I = -2q \int T(E)(F_1(E) - F_2(E))dE \quad (8)$$

式中 $T(E)$ 为输运方向动能为 E 载流子隧穿双垒单阱结构的几率. 式中乘以 2 是考虑到电子自旋的原故.

选用模型的参数为:双垒单阱结构由 AlGaAs/GaAs 异质结构成;势垒中的电子有效质量为 $0.092m$,势阱中的电子有效质量为 $0.067m$,其中 m 是电子的静止质量;势垒高度 (band-offset) 为 0.2133eV .

图 2 是器件电流峰位及电流峰半宽随势阱宽度变化的关系. 其中,取势垒宽度均为 2nm ,并变化势阱宽度以体现该参数对于 RTD 电流电压特性的影响. 从图中可以看出,随着势阱宽度变大,器件的第一共振峰向电压减小的方向移动;随势阱宽度变大,在所模拟的电压范围内出现了第二共振峰(势阱宽度为 8.5nm). 上述变化趋势均符合理论上的推断. 此外,模拟中电流共振峰的位置与使用转移矩阵方法所得的势阱中分立能级的位置一一对应.

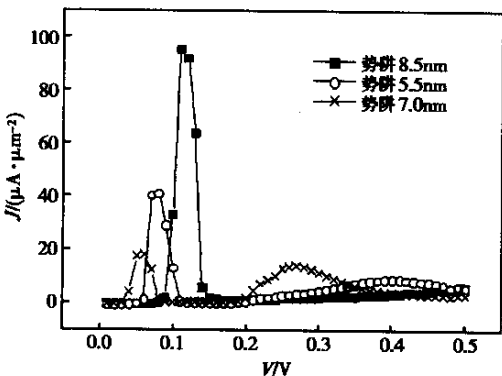


图 2 共振隧穿二极管的电流电压特性随势阱宽度的变化

Fig. 2 I - V characteristics vs widths of potential well for RTD

为了更加清晰地体现势垒宽度对共振峰半宽度的影响,我们观察势阱宽度分别为 6.5nm 和 8.0nm 第二共振峰的情形,仍然固定势垒宽度为 3.0nm . 从图 3 中可以清楚地看到,阱宽的增加直接导致半宽的降低. 事实上,若不考虑电势场的影响,可以得到共振峰半宽与阱宽的 1.5 次方成反比.

图 4 展示了固定势阱宽度为 5.0nm 的条件下,

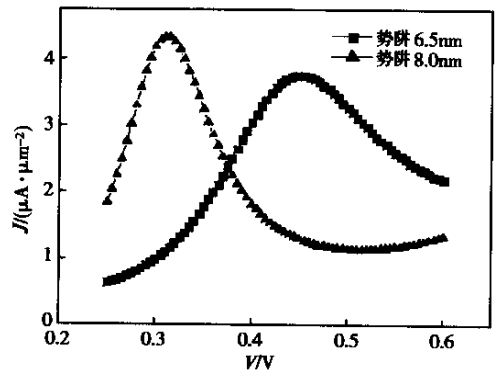


图 3 共振峰半宽度随势阱宽度的增大而减小

Fig. 3 I - V characteristics with different widths of potential well

变化势垒宽度得到的结论. 从图中可以看出,势垒宽度的主要作用是限制共振峰宽和共振峰的高度,随着势垒宽度的增大,共振峰宽减小,同时共振峰的高度也有了明显的下降. 从图中还可以看到,加宽的势垒将抑止谷值电流的值,这在实际应用中是相当重要的. 在基于 RTD 器件的存储单元中,为了降低功耗,必须控制电流的大小,尤其是谷值电流的大小(谷值电流的大小将很大程度上决定静态功耗的大小). 当计入声助隧穿的效应时,适当增大势垒宽度将对减小静态有较大助益.

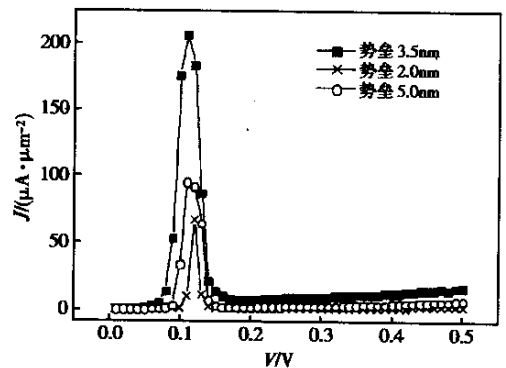


图 4 势垒宽度对于共振隧穿器件电流电压特性的影响

Fig. 4 I - V characteristics with different heights of potential barrier

将基于非平衡格林函数方法的模型结果与基于 Breit-Wigner 函数(BWF)的模型结果进行比较^[6]. 计算的器件参数为势垒宽度为 3.0nm 而势阱宽度为 5.0nm . 两种方法给出的共振峰位置稍有偏离,约为 10mV . 这是由于 BWF 方法中并未考虑外加偏压所带来的势能分布变化情况. 而两者给出的峰值

基本一致,分别为 $3720\text{A}/\text{cm}^2$ 和 $3850\text{A}/\text{cm}^2$. 该峰值数值与当前所报道的试验值在量级上是吻合的. 此外, BWF 只能模拟第一共振峰的情形,而非平衡格林函数方法则可以给出多个共振峰的位置和峰值大小(如图 2 所示).

致谢 在建立模型的过程中,清华大学微电子所的邵雪同学与我们进行了许多有益的讨论,在此谨表示深挚的谢意!

参考文献

[1] Altarelli M. Band structure, impurities and excitons in superlattices. In: *Heterostructures and Semiconductor Superlattices*, edited by Allan G, Bastard G. Berlin: Springer-Verlag, 1996

- [2] Ferry D K, Grubin H L, Jacoboni C. Density matrix simulations of semiconductor devices in quantum transport in ultra-small devices. *NATO ASI Series B: Physics*, 1995, 342: 241
- [3] Economou E N. *Green's functions in quantum physics*. Berlin: Springer-Verlag, 1983
- [4] Datta S. *Electronic Transport in mesoscopic systems*. Edited by Ahmed H, Pepper M, Broers A. Cambridge: Cambridge University Press, 1995
- [5] Haug H. *Quantum kinetics in transport and optics of semiconductors*. Edited by Cardona M, Fulde P, Von Klitzing K, et al. Heidelberg: Springer Press, 1997
- [6] Ogawa M, Tominaga R, Miyoshi T. Multi-band simulation of interband tunneling devices reflecting realistic band structure. 2000 International Conference on SISPAD, 2000: 66

Resonant Tunneling Diode Model Based on Non-Equilibrium-Green's-Function

Wang Lingquan, Wang Yan, Chen Peiyi and Yu Zhiping

(*Institute of Microelectronics, Tsinghua University, Beijing 100084, China*)

Abstract: The Non-Equilibrium-Green's-Function (NEGF) based model of resonant tunneling diode (RTD) is studied. By calculating the distribution of electron densities inside the devices using the NEGF method, I - V characteristics of the RTD is depicted. A AlGaAs/GaAs/AlGaAs sandwiched RTD structure is the chosen as the object of the calculation. By varying parameters, comparison is made to explicate the influence of the width of the barrier and well. The correctness of the results are explained theoretically and compared with a analytical model based on Wigner function.

Key words: non-equilibrium Green's function; resonant tunneling diode; Schrödinger-Poisson equation

PACC: 7320D; 0230

Article ID: 0253-4177(2003)S0-0132-04