

3. Они же. // ФТП. 1980. Т.14. В.5. С.825.
4. Ермолаев О. П. // Весті АН Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. 1995. №1. С.70.
5. Звягин И. П. Кинетические явления в неупорядоченных полупроводниках. М., 1984.
6. Кожух М.Л., Липкина Н.С. // ФТП. 1987. Т.21. В.2. С.284.
7. Мотт Н.Ф. Переходы металл-изолятор. М., 1979.
8. Abrahams E., Anderson P.W., Licciardello D.C., Ramakrishnan T.V. // Phys. Rev. Lett. 1979. V.42. №10. С.673.
9. Mobius A. // J. Non. Cryst. Solids. 1987. V.97-98. Pt.1. P.225.

Поступила в редакцию 09.06.97.

УДК 621.382.537

*В.М.БОРЗДОВ, М.М.ВРУБЕЛЬ, С.Г.МУЛЯРЧИК, А.В.ХОМИЧ*

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПРОЦЕССОВ РАССЕЯНИЯ НА ВОЛЬТ-АМПЕРНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ РЕЗОНАНСНЫХ ТУННЕЛЬНЫХ ДИОДОВ

The possibility to use Monte-Carlo method for simulation of electron scattering processes in the quantum well of double barrier resonant tunneling diode is discussed.

Особенностям процессов резонансного туннелирования электронов через двухбарьерные резонансно-туннельные структуры (ДБРТС) на основе GaAs к настоящему времени посвящено достаточно большое количество работ (см., напр., [1-3]). Это связано прежде всего с тем, что подобные исследования являются научной основой для разработки и проектирования новых высокоскоростных полупроводниковых приборов [4].

Известно, что на резонансное прохождение электронов через систему потенциальных барьеров значительное влияние могут оказывать процессы их рассеяния, поскольку эти процессы могут приводить к изменению энергии туннелирующих электронов и нарушению когерентности электронных волн и, как следствие, к изменению вероятности резонансного туннелирования. Поскольку на аналитическом уровне строгий теоретический анализ данных эффектов выполнить достаточно сложно, весьма перспективным представляется использование для этой цели численного метода Монте-Карло, подтвердившего свою эффективность при решении задач, связанных с моделированием процессов переноса носителей заряда в квантоворазмерных полупроводниковых приборных структурах [5-7].

В работе [7] с помощью метода Монте-Карло изучалось, в частности, влияние рассеяния туннелирующих электронов на ионизированной примеси и полярных оптических фононах на вольт-амперную характеристику (ВАХ) ДБРТС со структурой AlAs/GaAs/AlAs. Сравнение результатов моделирования с экспериментальными данными показало их хорошее совпадение. Однако это совпадение обусловлено не только учетом влияния рассеяния, но и введением в расчетные формулы определенных на основе эксперимента поправочных коэффициентов. При этом полученные в [7] результаты представлены таким образом, что остается неясным, какой именно из отмеченных факторов оказывает доминирующее влияние на изменения ВАХ.

Цель настоящей работы — оценить степень влияния процессов рассеяния на перенос электронов в рамках описанной в [7] схемы, предполагающей изменение направления движения и энергии электрона при рассеянии и не учитывающей возможности нарушения когерентности электронных волн.

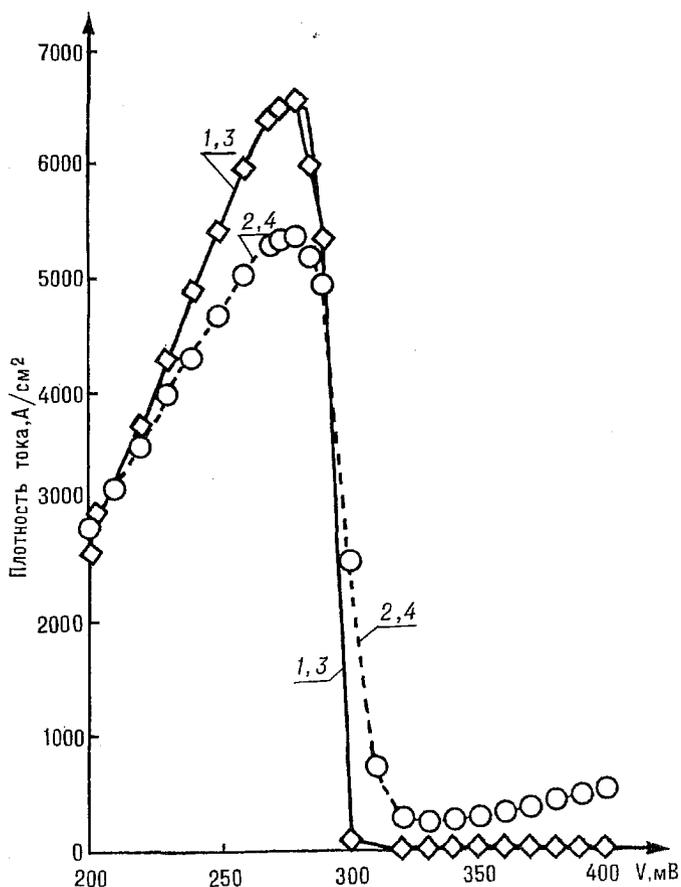
Рассматривались симметричные двухбарьерные AlGaAs/GaAs/AlGaAs диоды со следующими параметрами: толщина барьеров и ширина квантовой ямы составляли 5 нм, концентрация донорной примеси в контактах  $N_D = 10^{21} \text{ м}^{-3}$ ,

эффективная масса электрона  $m^*=0,068 m_0$ , где  $m_0$  — масса свободного электрона; высота квантового барьера  $V_0=370$  мэВ; относительная диэлектрическая постоянная  $\epsilon=11,9$ ; концентрация примеси в электродных слоях  $N_i=10^{24}$  м<sup>-3</sup>.

Потенциальный профиль исследуемой структуры был рассчитан путем самосогласованного решения уравнений Шредингера и Пуассона в соответствии с алгоритмом [7]. Плотность туннельного тока без учета рассеяния определялась по известной формуле:

$$j = \frac{m^* e k_B T}{2 \hbar^3 \pi^2} \int_{\psi(0)}^{\infty} dE T(E) / h \left( \frac{1 + \exp((E_{EF}(0) - E(0))/k_B T)}{1 + \exp((E_{EF}(L) - E(L))/k_B T)} \right), \quad (1)$$

где коэффициент прохождения  $T(E)$  равен отношению квадрата амплитуд прошедшей и падающей электронных волн, умноженному на отношение скоростей прошедшего и падающего электронов;  $E(L)$  — значение составляющей энергии электрона в коллекторе в продольном направлении,  $E(0)$  — значение составляющей энергии электрона в эмиттере в том же направлении.



Вольт-амперные характеристики ДБРТД: 1 — 77К с учетом рассеяния, 2 — 300К с учетом рассеяния, 3 — 77К без учета рассеяния, 4 — 300К без учета рассеяния.

Влияние процессов рассеяния учитывалось в соответствии с предложенной в [7] моделью. Рассматривались два механизма рассеяния: на примесях и на полярных оптических фононах. Предполагалось, что при движении через квантовую яму каждый электрон претерпевает только один акт рассеяния в

ее центре. Направление движения и значение энергии электрона после рассеяния определялось по формулам, приведенным в [8]. При этом выбиралось конкретное значение энергии в продольном направлении, а величина энергии в поперечном направлении определялась статистически в соответствии с локальным распределением Ферми-Дирака для электронов, находящихся в эмиттере. Конкретный тип рассеяния разыгрывался статистически в соответствии с его интенсивностью [8]. Вклад в плотность тока электронов с данной продольной составляющей энергии рассчитывался путем усреднения среди большого числа частиц с различными поперечными составляющими энергии. Предполагалось, что рассеяние не влияет на величину коэффициента прохождения и изменяет только значение продольной составляющей энергии в коллекторе.

На рисунке приведены рассчитанные для двух различных температур вольт-амперные характеристики с учетом и без учета процессов рассеяния. Легко заметить, что включение рассеяния в описанную выше физико-статистическую модель, исключая использование подгоночных под эксперимент параметров, практически не влияет ни на пиковый, ни на долинный токи. Амплитуда пикового тока сильно уменьшается с температурой, но в рамках данной модели, как следует из поведения представленных на рисунке кривых, это изменение вызвано не рассеянием электронов, а другими возможными факторами, в частности перераспределением заряда внутри структуры и изменением формы потенциального профиля.

Таким образом, полученные результаты свидетельствуют о том, что в рамках подхода, не учитывающего разрушения когерентности электронных волн, приводящего к изменению коэффициента прохождения под действием рассеяния, влияние рассеяния на перенос электронов в ДБРС не может быть оценено адекватно. Учет этого важнейшего факта при моделировании методом Монте-Карло переноса электронов в квантовой яме двухбарьерной структуры является предметом наших дальнейших исследований.

1. Тагер А. С. // Электронная техника. Сер. Электроника СВЧ. 1987. №9. С.29.
2. Бузанева Е. В. Микроструктуры интегральной электроники. М.: Радио и связь, 1990.
3. Врубель М. М., Борздов В. М. // ФТП. 1994. Т.28. №10. С.1852.
4. Vate R. T. // Nanotechnology. 1990. V.1. №1. P.1.
5. Борздов В. М., Петрович Т. А. // ФТП. 1997. Т.31. №1. С.89.
6. Борздов В. М., Жевняк О. Г., Мулярчик С. Г., Хомич А. В. // Письма в ЖТФ. 1997. Т.23. №3. С.22.
7. Fu Y., Chen Q., Wilander M., Brugger H. et al. // J.Appl.Phys. 1993. V.74. №3. P.1874.
8. Fawset W., Boardman A.O., Swain S. // J.Phys.Chem.Sol. 1970. V.31. P.1963.

Поступила в редакцию 27.06.97.

УДК 666.3

А.П.НОВИКОВ, Г.А.ГУСАКОВ, Е.А.ШИЛОВА

## ИССЛЕДОВАНИЕ ПОРИСТОСТИ ЭЛЕМЕНТОВ ЯЧЕЙКИ ВЫСОКОГО ДАВЛЕНИЯ, ИЗГОТОВЛЕННЫХ НА ОСНОВЕ СТАБИЛИЗИРОВАННОГО $ZrO_2$

The fireproof ceramics based on the stabilized  $ZrO_2$  has been investigated in this work as the high pressure cell (HPC) material. The HPC details has been saturated with CsCl for the improvement of their mechanical properties and pressure transmission to the synthesis zone. The change of porosity in consequence of saturation has been studied. The spatial distribution of CsCl has been investigated by the electron microprobe.

The theoretical calculation of the CsCl distribution and the value of the residual porosity has been carried out on the base of percolation theory. The results of calculation are in a good agreement with the experimental data.