Πανεπιστήμιο Κρήτης
Σχολή Θετικών και τεχνολογικών Επιστημών
Τμήμα Φυσικής

Μελέτη διόδων φαινομένου συντονισμού σήραγγας ημιαγωγών III-Νιτριδίων

Χρήστος Δήμιζας

Μεταπτυχιακό Πρόγραμμα:

Μικροηλεκτρονικής & Οπτοηλεκτρονικής

ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΔΙΑΤΡΙΒΗ

Επιβλέπων καθηγητής: Ελευθέριος Ηλιόπουλος

2011

Ευχαριστίες

Πρώτον και κυριότερων θα ήθελα να ευχαριστήσω τον επιβλέποντα καθηγητή μου Ελευθέριο Ηλιόπουλο για την πολύτιμη βοήθειά του, την καθοδήγησή του καθώς και την ενθάρρυνσή του που μου προσέφερε καθ' όλη την πορεία αυτής της μεταπτυχιακής διατριβής. Είναι βέβαιο πως χωρίς την υποστήριξή του δεν θα μπορούσα να επιτύχω τους στόχους μου.

Θέλω να ευχαριστήσω την οικογένειά μου για την αμέριστη υποστήριξη και καθοδήγηση που μου προσέφεραν, με κατανόηση και υπομονή, όλα αυτά τα χρόνια.

Τέλος, θέλω να ευχαριστήσω τις φίλες και τους φίλους που όλα αυτά τα χρόνια είναι και θα είναι για πάντα στο πλευρό μου.

Περιεχόμενα

Εισαγωγή **6**

1. Ημιαγωγοί III-Νιτριδίων **7**

1.1 Εισαγωγή 7

1.2 Φυσικές ιδιότητες 8

- *Κρυσταλλική Δομή* 8
- *Ενεργειακό χάσμα* 8
- *Πλεγματικές σταθερές III-N κραμάτων* 10
- *Πολικότητα* 10
- *Πεδία πόλωσης* 11
  - Αυθόρμητη πόλωση 11
  - Πιεζοηλεκτρική πόλωση 12
- *2DEG λόγο αυθόρμητης και πιεζοηλεκτρικής πόλωσης* 14
  - Επιφανειακό φορτίο εξαιτίας της πόλωσης 14

1.3 Διατάξεις βασισμένες σε ημιαγωγούς III-Νιτριδίων 16

1.4 Αναφορές 19

2. Δίοδοι Συντονισμού Φαινομένου Σήραγγας (RTDs) **21**

2.1 Εισαγωγή 21

2.2 Φυσική των RTD 21

2.3 III-As και άλλα συστήματα 30

2.4 Φαινόμενα Διστάθειας, Πολυστάθειας, Υστέρησης 31

2.5 Απόπειρες δημιουργίας III-N RTDs 35

2.6 Αναφορές 37

3. Πειραματικά αποτελέσματα **39**

3.1 Εισαγωγή 39

3.2 Περιγραφή διαδικασιών και περιπτώσεις δομών 41

3.3 Αποτελέσματα μετρήσεων 41

a) Περιπτώσεις σταδιακής ελάττωσης της αγωγιμότητας 41

b) Περιπτώσεις πολλαπλής ευστάθειας του ρεύματος 48

c) Περιπτώσεις απότομης αλλαγής της αγωγιμότητας 50

4. Θεωρητική Ανάλυση 51

4.1 Εισαγωγή 51

4.2 Εξισώσεις Schrödinger, Poisson και Boltzmann. Αυτοσυνεπής λύση 51

Βασικές Εξισώσεις 52

- Εξίσωση Schrodinger 52
- Εξίσωση Poisson 53
- Εξίσωση Boltzmann 53

Αυτοσυνεπής λύση Schrödinger-Poisson-Boltzmann 54

4.3 NEXTNANO^3 - Σύντομη Περιγραφή 55

- Υπολογιστικό Πλάνο Προγράμματος 56

4.4 Βαλλιστική κβαντική διάδοση (NEGF) 57

- Η μέθοδος “Επίλυση μέσω συναρτήσεων Green εκτός ισορροπίας” (NEGF) 58
  - *Βασική Περιγραφή* 58
  - *Απόκριση σε εισερχόμενο κύμα* 60
  - *Ρεύμα πιθανότητας* 61
  - *Ηλεκτρικό ρεύμα* 61
- Προσεγγιστική μεθοδολογία Contact Block Reduction (CBR) 63
  - *Βασική Περιγραφή* 63
  - *Τοπική Πυκνότητα Καταστάσεων (LDOS)* 64
  - *Πυκνότητα φορέων* 65
- *Αυτοσυνεπής CBR αλγόριθμος* 66

4.5 Αναφορές 67

5. Αποτελέσματα προσομοιώσεων 68

5.1 Εισαγωγή 68

5.2 Αυτοσυνεπής λύση Schrodinger-Poisson-Boltzmann 68

- *Επιπτώσεις Πιεζοηλεκτρικού Πεδίου* 68
- *Επιπτώσεις Προσθήκης Σταθερού Φορτίου* 70

- *Προσπάθεια αντιμετώπισης Πιεζοηλεκτρικών «επιπτώσεων»* 72

5.3 Αυτοσυνεπής λύση φαινομένων βαλλιστικής μεταφοράς 73

5.4 Δομές με προσθήκη αντισταθμιστικών περιοχών InGaN 78

5.5 Αποτελέσματα υπολογισμών στις νέες δομές με προσθήκη περιοχών InGaN 80

- Περίπτωση δομής I 80
- Περίπτωση δομής II 82
- Περίπτωση δομών III και IV 84

Επίλογος 89

Εισαγωγή

Στην παρούσα εργασία θα μιλήσουμε για την μελέτη και τον χαρακτηρισμό Διοδικών διατάξεων φαινομένου συντονισμού σήραγγας βασισμένες σε ημιαγωγούς III-Νιτριδίων.

Στο πρώτο κεφάλαιο θα αναφερθούμε στους σύνθετους ημιαγωγούς της ομάδας III του περιοδικού πίνακα με προσθήκη Αζώτου. Θα μιλήσουμε για τις βασικές ιδιότητες των ημιαγωγών τέτοιου είδους, όπως το άμεσο ενεργειακό χάσμα που μπορεί να επιτευχθεί, εν δυνάμει, με αυτούς και την κρυσταλλική τους δομή. Κυρίως έμφαση, θα δώσουμε στα πολύ ισχυρά πεδία αυθόρμητης και πιεζοηλεκτρικής πόλωσης που εμφανίζονται σε αυτούς τους ημιαγωγούς καθώς και στις ετεροδομές, που μπορούν να επιτευχθούν με αυτούς.

Εν συνεχεία, στο δεύτερο κεφάλαιο, θα αναφερθούμε στην βασική φυσική που διέπει τις διόδους συντονισμού φαινομένου σήραγγας (RTDs). Θα μιλήσουμε για τα δυναμικά φαινόμενα που εμφανίζονται σε τέτοιες διατάξεις, όπως φαινόμενα διστάθειας και πολλαπλής ευστάθειας του ρεύματος. Επίσης θα μιλήσουμε για τις χαρακτηριστικές ρεύματος τάσης που χαρακτηρίζουν διατάξεις συντονισμού που περιέχουν διπλό φράγμα δυναμικού, η οποίες και εμφανίζουν περιοχές αρνητικής διαφορικής αντίστασης.

Στο τρίτο κεφάλαιο θα δούμε τα πειραματικά αποτελέσματα μετρήσεων ρεύματος-τάσης σε RTD διατάξεις AlN/GaN διπλού φράγματος δυναμικού. Θα δούμε τα φαινόμενα ακραίας διστάθειας/φόρτισης που εμφανίστηκαν σε αυτές, με αποτέλεσμα την μη επαναληψιμότητα των ιδιοτήτων των διατάξεων, καθώς επίσης και τα φαινόμενα πολλαπλής ευστάθειας της αγωγιμότητας και των απότομων μεταπτώσεων αυτής που παρατηρήθηκαν για πρώτη φορά.

Στο τέταρτο και προ τελευταίο κεφάλαιο θα μιλήσουμε για την θεωρητική μελέτη ετεροδομών διπλού φράγματος δυναμικού βασισμένους σε ημιαγωγούς III Νιτριδίων. Πιο συγκεκριμένα θα αναφερθούμε στην “αυτοσυνεπή λύση των εξισώσεων Schrodinger-Poisson-Συνέχειας Ρεύματος“ που μας παρέχει μια ικανοποιητική εικόνα για το προφίλ του δυναμικού στην περίπτωση της μη ισορροπίας, αγνοώντας φαινόμενα μεταφοράς. Επίσης θα αναφερθούμε και στην περίπτωση του υπολογισμού φαινομένων βαλλιστικής διέλευσης (I-V χαρακτηριστικές) με την μέθοδο “συναρτήσεων Green σε μη-ισορροπία (NEGF)” και πιο συγκεκριμένα στην υπολογιστική προσεγγιστική μεθοδολογία CBR.

Στο πέμπτο και τελευταίο κεφάλαιο θα παραθέσουμε τα αποτελέσματα των θεωρητικών υπολογισμών των μεθόδων που αναφέρθηκαν στο τέταρτο κεφάλαιο. Θα δούμε τον ρόλο των πιεζοηλεκτρικών πεδίων σε RTD διατάξεις AlN/GaN και τα θεωρητικά και πειραματικά αποτελέσματα σε διατάξεις AlGaN/GaN με φράγματα δυναμικού διαβαθμισμένης σύστασης βασισμένα στην αυτοσυνεπή λύση των εξισώσεων Schrodinger-Poisson-Συνέχειας Ρεύματος αγνοώντας φαινόμενα μεταφοράς φορέων. Επίσης θα δούμε τις προσομοιώσεις I-V χαρακτηριστικών που έγιναν σε RTD διατάξεις AlGaN/GaN με εμφανή την παρουσία των προβλημάτων που εμφανίζονται εξαιτίας των πιεζοηλεκτρικών πεδίων. Προβλήματα τέτοιου είδους οδήγησαν σε προσομοιώσεις με χρήση αντισταθμιστικών περιοχών $In_xGa_{1-x}N$, πολλά υποσχόμενων ως προς την αντιμετώπιση αυτών.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1^{ο}

Ημιαγωγοί III-Νιτριδίων

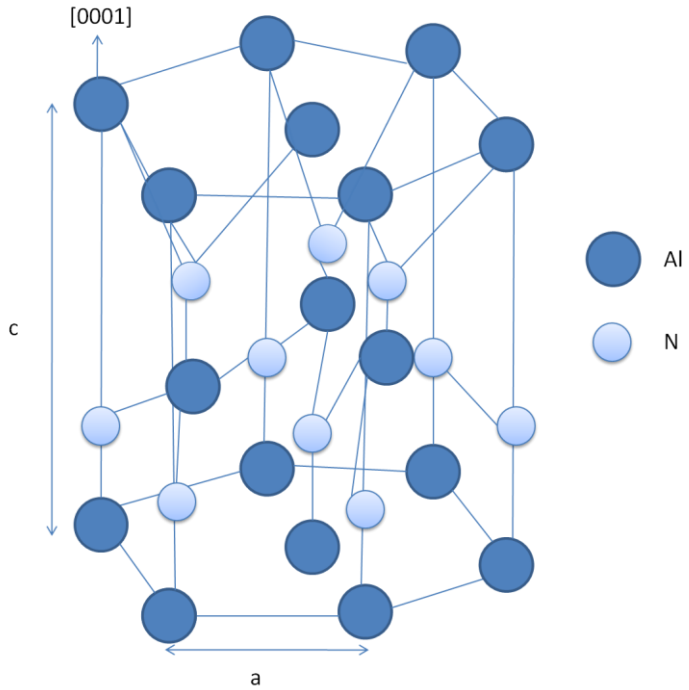
1.1-Εισαγωγή

Τα τελευταία είκοσι χρόνια οι σύνθετοι III-V ημιαγωγοί βασισμένοι σε Άζωτο (N) είναι το επίκεντρο έντονου ερευνητικού ενδιαφέροντος ανά τον κόσμο. Ο λόγος είναι οι εξαιρετικές φυσικές τους ιδιότητες και η μεγάλη δυναμική των εφαρμογών που μπορούν να πραγματοποιηθούν με αυτούς.
Το νιτρίδιο του αλουμινίου (AlN), το νιτρίδιο του γαλλίου (GaN), το νιτρίδιο του ινδίου (InN) καθώς και τα μεταξύ τους κράματα (AlGaN,InGaN κλπ.) είναι γνωστά ως ημιαγωγοί III-Νιτριδίων (III-N). Η κρυσταλλική δομή τέτοιων ημιαγωγών είναι αυτή του Βουρτσίτη (Wurtzite), με εξαγωνική συμμετρία. Διαθέτουν εξαιρετικές φυσικές ιδιότητας, με κυρίαρχη το μεγάλο ενεργειακό χάσμα (AlN,GaN), όπως και το ιδιαίτερα ευρύ φάσμα ενεργειακών χασμάτων που μπορούν να επιτύχουν στα κράματά τους με InN. Αυτό τους κάνει ιδανικούς για την κατασκευή μεγάλου αριθμού οπτικών και ηλεκτρονικών διατάξεων με μεγάλο εύρος εφαρμογών.
Τα III-Νιτρίδια, σαν υλικά, έχουν αναπτυχθεί εδώ και πολλά χρόνια. Πιο συγκεκριμένα το AlN πρωτοεμφανίστηκε το 1907 [1], το InN το 1910 [2] και το GaN το 1932 [3] και τα τρία σε πολυκρυσταλλική μορφή βέβαια, κάτι που δεν τα καθιστούσε χρήσιμα για την κατασκευή ημιαγωγικών διατάξεων.
Τη δεκαετία 1990 δύο πρωτοποριακά επιτεύγματα, στον τομέα των ημιαγωγών III-N, οδήγησαν στην ανανέωση του ενδιαφέροντος για την εκ νέου ενασχόληση με αυτούς.
Η πρώτη ήταν η επίτευξη μη πολυκρυσταλλικών III-N υποστρωμάτων ανάπτυξης [31,32] και η δεύτερη ήταν η επίτευξη p-τύπου doping σε III-N υλικά [30]. Έτσι άνοιξε ο δρόμος για τη βελτίωση της κρυσταλλικής δομής αυτών των υλικών, της ηλεκτρονικής και της οπτικής τους ποιότητάς.
Τώρα η έρευνα που αφορά τα III-Νιτρίδια έγινε ξεχωριστό πεδίο, με πολλές διατάξεις διαθέσιμες ήδη εμπορικά. Για παράδειγμα όλη η περιοχή του φάσματος, από το UV έως το κόκκινο θα μπορούσε θεωρητικά να καλυφθεί με III-N οπτικές διατάξεις, κάτι που δεν ήταν δυνατόν με τους III-V ημιαγωγούς βασισμένους σε GaAs, AlAs, GaP, InAs (και στα σχετικά κράματα αυτών).Ήδη υπάρχουν εμπορικά διαθέσιμα, δίοδοι εκπομπής φωτός (LED) και ημιαγωγικά Laser, στο κοντινό υπεριώδες και μπλε περιοχές του φάσματος, βασισμένα στους ημιαγωγούς III-N. Επίσης, τα III-N transistors αναμένεται να είναι ανώτερα των αντίστοιχων προκατόχων τους, κατασκευασμένων από πυρίτιο (Si) και άλλων III-V υλικών, όσων αφορά την συχνότητα λειτουργίας, την ισχύ, την ενεργειακή κατανάλωση και την περιοχή θερμοκρασίας στην οποία λειτουργούν.
Έχει προβλεφθεί από την θεωρία, και έχει αποδειχθεί πειραματικά, ότι τα InN, GaN και AlN με wurtzite κρυσταλλική δομή είναι πυροηλεκτρικά υλικά [4-7]. Τα χαρακτηριστικά τέτοιων κρυστάλλων, ειδικά για το AlN, είναι οι μεγάλες τιμές της αυθόρμητης πόλωσης. Όμως οι πυροηλεκτρικοί κρύσταλλοι είναι πάντα και πιεζοηλεκτρικοί ανάλογα με την διεύθυνση ανάπτυξής τους.

1.2-Φυσικές ιδιότητες

- ***Κρυσταλλική Δομή***

Αντίθετα με τους συμβατικούς ημιαγωγούς, όπως το Πυρίτιο (Si) ή το Αρσενίδιο του Γαλλίου (GaAs) που έχουν κρυσταλλική δομή κυβικής συμμετρίας, οι ημιαγωγοί Νιτριδίων έχουν δομή Βουρτσίτη με εξαγωνική συμμετρία.



Εικόνα 1.2.1 – AlN Wurtzite κρυσταλλική δομή εξαγωνικής συμμετρίας.

Οι εξαγωνικές κρυσταλλικές δομές δεν έχουν κατοπτρική συμμετρία με αποτέλεσμα την ανάπτυξη πόλωσης στον κρύσταλλο [8]. Αποτέλεσμα αυτού είναι οι δομές αυτές να αποκτούν Πιεζοηλεκτρικές και Πυροηλεκτρικές ιδιότητες. Γενικά οι ημιαγωγοί νιτριδίων μπορούν να αναπτυχθούν με δύο είδη κρυσταλλικών δομών. Την δομή Βουρτσίτη με εξαγωνική συμμετρία, που είναι θερμοδυναμικά σταθερότερη , και την κυβική δομή του Σφαλερίτη (Θειούχος Ψευδάργυρος) που επιτυγχάνεται με την ανάπτυξή τους πάνω σε υποστρώματα κυβικής συμμετρίας όπως αυτή του Πυριτίου (Si) ή του Αρσενιδίου του Γαλλίου (GaAs) στο (001) κρυσταλλικό επίπεδο.

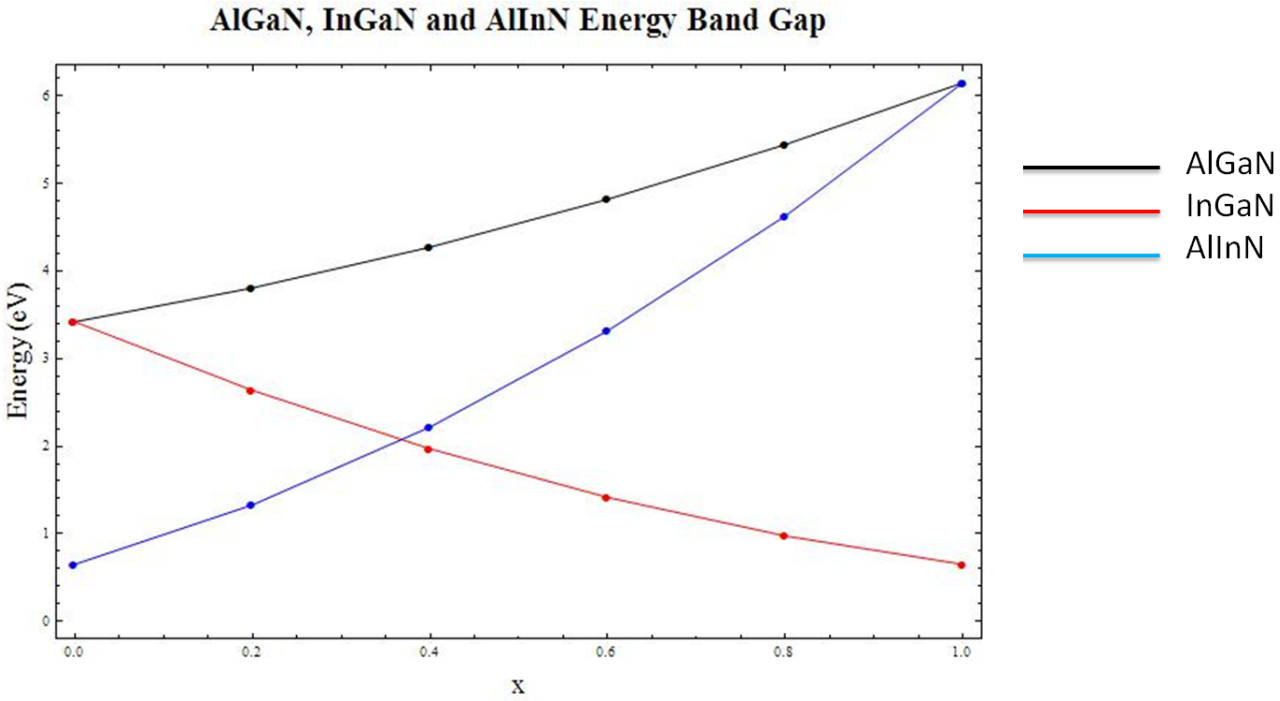
- ***Ενεργειακό χάσμα***

Η μεγάλη διαφορά της ηλεκτραρνητικότητας μεταξύ των στοιχείων της ομάδας III και V του περιοδικού πίνακα έχει σαν αποτέλεσμα την δημιουργία πολύ ισχυρών χημικών δεσμών μεταξύ τους. Άμεσο αποτέλεσμα αυτού είναι το μεγάλο ενεργειακό χάσμα όπως επίσης και η φυσική (υψηλές θερμοκρασίες τήξης, μηχανική αντοχή) και χημική σταθερότητά τους. Οι ημιαγωγοί III-Νιτριδίων έχουν ενεργειακό χάσμα που κυμαίνεται από τα 0.65eV έως και τα 6.2eV που αντιστοιχεί σε μήκος κύματος φωτονίων από 1900nm έως 200nm. Αυτό το φασματικό

εύρος καλύπτει το φάσμα από το βαθύ υπεριώδες έως το κοντινό υπέρυθρο. Το ενεργειακό χάσμα αυτών των ημιαγωγών είναι άμεσο που είναι σημαντικό για την δημιουργία οπτικών διατάξεων.
Ενδεικτικά, το ενεργειακό χάσμα των III-N κραμάτων συναρτήσει της περιεκτικότητας σε θερμοκρασία δωματίου είναι [10,11,12] :

$$\begin{aligned} E^{g}_{AlGaN}(x) &= [6.15x + 3.42(1-x) - 1.0x(1-x)]eV \\ E^{g}_{InGaN}(x) &= [0.65x + 3.42(1-x) - 1.43x(1-x)]eV \\ E^{g}_{InAlN}(x) &= [6.15x + 0.65(1-x) - 2.63x(1-x)]eV \end{aligned} \qquad (1.2.1)$$

Με τις αντίστοιχες γραφικές απεικονίσεις:



Εικόνα 1.2.2 – Ενεργειακό χάσμα των III-N κραμάτων συναρτήσει της περιεκτικότητας.

Ο παρακάτω πίνακας περιέχει συνοπτικά τις φυσικές ιδιότητες των III-N ημιαγωγών σε θερμοκρασία δωματίου που περιλαμβάνουν τις πλεγματικές σταθερές Βουρτσίτη, τις ενεργούς μάζες, καθώς και την θερμική αγωγιμότητα και την θερμοκρασία τήξης.

	GaN	AlN	InN
Πλεγματική σταθερά, α (Å)	3.189[a]	3.112	3.535[c]
Πλεγματική σταθερά, c (Å)	5.186[a]	4.982	5.699[c]
Ενεργός μάζα ηλεκτρονίου, m_e (m_0)	0.2	0.4[b]	0.11
Ενεργός μάζα οπής, m_h (m_0)	0.8		0.5 (m_{hh}) 0.17 (m_{lh})
Θερμική αγωγιμότητα, κ (W/cm K)	1.3	2.0	
Σημείο τήξης (^oC)	>1700	3000	1100

Πίνακας 1.2.1 – Φυσικές ιδιότητες των III-N ημιαγωγών [24,25] εκτός [a] [26] , [b] [27] και [c][29]

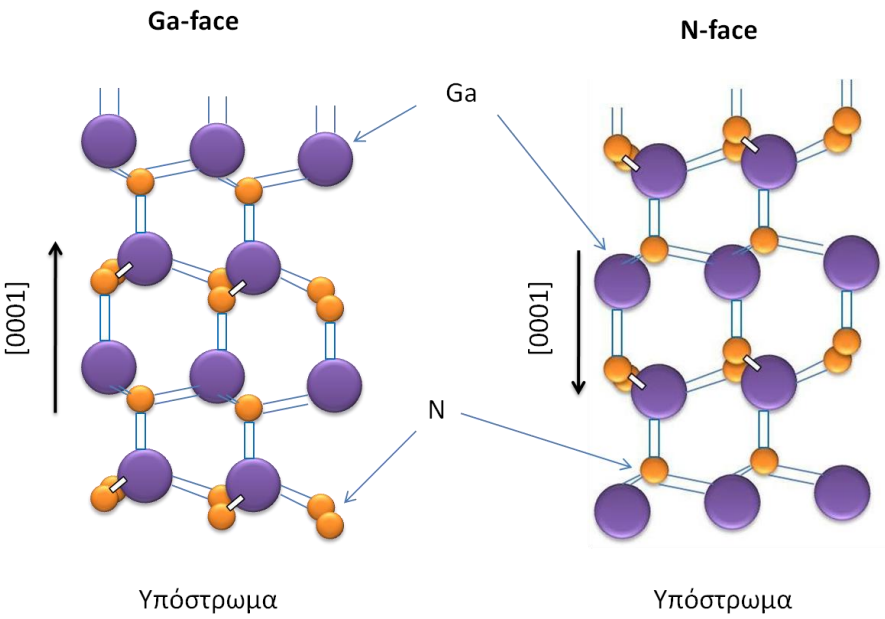
- ***Πλεγματικές σταθερές III-N κραμάτων***

Οι πλεγματικές σταθερές a(x) και c(x) για τη δομή wurtzite της III-N ομάδας κραμάτων $A_xB_{(1-x)}N$ ($Al_xGa_{(1-x)}N$, $In_xGa_{(1-x)}N$, $Al_xIn_{(1-x)}N$) ακολουθούν τον νόμο γραμμικότητας του Vegard (σύμφωνα με τα παρόντα πειραματικά δεδομένα) μεταξύ των δυαδικών συνθέσεων AN και BN [24,25,26,27,29]:

$$\begin{aligned} \alpha_{AlGaN}(x) &= (3.189 - 0.0891x)\text{Å} & c_{AlGaN}(x) &= (5.186 - 0.2323x)\text{Å} \\ \alpha_{InGaN}(x) &= (3.189 + 0.366x)\text{Å} & c_{InGaN}(x) &= (5.186 + 0.513x)\text{Å} \\ \alpha_{InAlN}(x) &= (3.112 + 0.423x)\text{Å} & c_{InAlN}(x) &= (4.982 + 0.717x)\text{Å} \end{aligned} \qquad (1.2.2)$$

- ***Πολικότητα***

Ένα επιπρόσθετο και σημαντικό χαρακτηριστικό των III-N wurtzite δομών, που επηρεάζει τον προσανατολισμό της αυθόρμητης και της πιεζοηλεκτρικής πόλωσης, είναι η κρυσταλλική διεύθυνση ανάπτυξης αυτών.
Η εξαγωνικής συμμετρίας κρύσταλλοι εμπεριέχουν δύο διαφορετικές ακολουθίες διαδοχικών ατομικών στρωμάτων (Εικόνα 1.2.1 ή 1.2.3). Για παράδειγμα, η ανάπτυξη GaN με δομή Βουρτσίτη στον άξονα c ενός υποστρώματος μπορεί να γίνει με δύο τρόπους ή ποιο σωστά, με δύο δυνατούς προσανατολισμούς. Στην μια περίπτωση κατά την διεύθυνση [0001] του υποστρώματος και στην άλλη κατά την διεύθυνση $[000\bar{1}]$ του υποστρώματος. Οι δύο αυτοί τρόποι προσανατολισμού είναι γνωστοί ως Ga-face και N-face αντίστοιχα. Η Ga-face πολικότητα χαρακτηρίζεται από μονούς δεσμούς από άτομα Γαλλίου προς άτομα Αζώτου κατά μήκος της [0001], ενώ η N-face πολικότητα αντιστοιχεί σε μονούς δεσμούς από άτομα Αζώτου προς άτομα Γαλλίου κατά μήκος της $[000\bar{1}]$.



Εικόνα 1.2.3 – Διαφορετικές πολικότητες (Ga- και N-faced) GaN σε δομή wurtzite.

Είναι σημαντικό να τονίσουμε ότι η (0001) και η $(000\bar{1})$ επιφάνειες του GaN δεν είναι ισοδύναμες και διαφέρουν στις χημικές και φυσικές τους ιδιότητες.

- ***<u>Πεδία πόλωσης</u>***
  - <u>Αυθόρμητη πόλωση</u>

Εν γένει, η Αυθόρμητη πόλωση σχετίζεται με την απόκλιση των κρυσταλλικών πλεγματικών σταθερών μιας δομής από αυτές της ιδανικής περίπτωσης. Κατ αυτόν τον τρόπο δημιουργούνται μοριακά δίπολα που συνεπάγουν δημιουργία ηλεκτρικού πεδίου [9].
Η αυθόρμητη πόλωση,P^{SP}, των τριαδικών συνθέσεων της οικογένειας των νιτριδίων μπορεί να γραφτεί ως (σε μονάδες Cm^{-2}) [14]:

$$\begin{aligned} P_{ABN}^{SP}(x) &= P_{AN}^{SP}x + P_{BN}^{SP}(1-x) + bx(1-x) \\ P_{AlGaN}^{SP}(x) &= -0.090x - 0.034(1-x) + 0.021x(1-x) \\ P_{InGaN}^{SP}(x) &= -0.042x - 0.034(1-x) + 0.037x(1-x) \\ P_{AlInN}^{SP}(x) &= -0.090x - 0.042(1-x) + 0.070x(1-x) \end{aligned} \qquad (1.2.3)$$

Οι δύο πρώτοι όροι των εξισώσεων είναι οι συνήθεις γραμμικές συνεισφορές των δυαδικών μερών. Ο τρίτος περιέχει περιπτώσεις μη γραμμικότητας. Ο υπολογισμός μόνο της αυθόρμητης πόλωσης δεν είναι αρκετός ώστε να περιγραφούν όλες οι Πολωτικές ιδιότητες των III-N κραμάτων.
Οι βασιζόμενες σε ημιαγωγούς III-N ετεροδομές και νανοδομές συνήθως αναπτύσσονται ψευδομορφικά σε υποστρώματα με σημαντικές διαφορές των πλεγματικών σταθερών. Η αλλαγή της συμμετρίας εξαιτίας της διαφορές των πλεγματικών σταθερών επάγει αλλαγή στην κρυσταλλική δομή και στην πόλωση, πράγμα που συνεπάγει πιεζοηλεκτρική πόλωση.
Έτσι η πόλωση κάθε στρώματος ετεροδομής είναι ένας συνδυασμός αυθόρμητης και πιεζοηλεκτρικής πόλωσης.

- Πιεζοηλεκτρική πόλωση

Εξαιτίας της μεγάλης διαφοράς των πλεγματικών σταθερών μεταξύ των III-N ημιαγωγών, οι περισσότερες ετεροδομές που βασίζονται σε τέτοια συστήματα εμφανίζονται με αλλοιωμένες πλεγματικές σταθερές. Το μέτρο που προσδιορίζει το ποσό της αλλαγής τους ονομάζεται ένταση (strain) και συμβολίζεται με ε_{ij} , όπου τι i, j=x, y, z. Για παράδειγμα, το strain κατά το μήκος του c-άξονα μιας εξαγωνικής κρυσταλλικής δομής είναι : $\varepsilon_{zz}= \varepsilon_3 =(c-c_0)/c_0$, με τις αντίστοιχες για το α-επίπεδο να είναι: $\varepsilon_{xx}=\varepsilon_1 = \varepsilon_{yy}=\varepsilon_2 = (\alpha-\alpha_0)/\alpha_0$ όπου α και c είναι οι μεταβλημένες πλεγματικές σταθερές και α_0, c_0 είναι αυτές της ιδανικής περίπτωσης, απουσία φαινομένων αλλοίωσης (strain). Τα περισσότερα από αυτά τα φαινόμενα εμφανίζονται κατά την διάρκεια μείωσης της θερμοκρασίας μετά την διαδικασία της ανάπτυξης εξαιτίας της διαφοράς των τιμών των συντελεστών θερμικής διαστολής των υποστρωμάτων. Το πιεζοηλεκτρικό πεδίο πόλωσης μπορεί να εκφραστεί ως:

$$\overrightarrow{P_{pz}} = \vec{e} \otimes \vec{\varepsilon} \tag{1.2.4}$$

με e_{ij} να είναι ο πιεζοηλεκτρικός τανυστής και το ε_{kl} ο τανυστής του strain. Συνήθως οι όροι του τανυστή του strain που δεν αφορούν τις κύριες κατευθύνσεις xx, yy και zz θεωρούνται αμελητέοι. Έτσι η Εξίσωση (1.2.3) γίνεται:

$$P_{pz}\,\vec{c} = \left(e_{33}\varepsilon_3 + e_{31}(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)\right)\vec{c} \tag{1.2.5}$$

Όπου το ε_3 εκφράζει το strain κατά τον c-άξονα και τα ε_1, ε_2 που θεωρούνται ίσα, κατά το α-επίπεδο. Σε ένα σύστημα Βουρτσίτη ανεπτυγμένο κατά τον c-άξονα το ε_3 σχετίζεται με το ε_1 μέσο της σχέσης:

$$\varepsilon_3 = -2\frac{C_{13}}{C_{33}}\varepsilon_1 \tag{1.2.6}$$

όπου ο C_{nm} είναι ο τανυστής ελαστικότητας. Έτσι η πιεζοηλεκτρική πόλωση μπορεί να γραφτεί ως:

$$P_{pz} = 2\varepsilon_1(e_{31} - e_{33}\frac{C_{13}}{C_{33}}) \tag{1.2.7}$$

με διεύθυνση κατά τον c-άξονα.
Ο παρακάτω πίνακας περιέχει της τιμές του πιεζοηλεκτρικού τανυστή και του τανυστή ελαστικότητας.

Hexagonal Crystal Property	AlN	GaN	InN
C_{11} [GPa]	410 [a]	370 [a]	223 [c]
C_{12} [GPa]	140 [a]	145 [a]	115 [c]
C_{13} [GPa]	100 [a]	110 [a]	92 [c]
C_{33} [GPa]	390 [a]	390 [a]	224 [c]
C_{44} [GPa]	120 [a]	90 [a]	48 [c]
e_{31} [C m^{-2}]	-0.58 [b]	-0.34 [c]	-0.41 [c]
e_{33} [C m^{-2}]	1.55 [b]	0.67 [c]	0.81 [c]
e_{15} [C m^{-2}]	-0.48 [b]	-0.30 [d]	-

[a] [15], [b] [16], [c] [14], [d] [18]

Πίνακας 1.2.1 - Τιμές του πιεζοηλεκτρικού τανυστή και του τανυστή ελαστικότητας

Αξίζει να σημειώσουμε ότι παρόλο που η πιεζοηλεκτρική πόλωση κατά μήκος του c-άξονα εξαρτάται γραμμικά με την πλεγματική σταθερά a, το P_3^{PZ} είναι πάντα αρνητικό για layers υπό strain εκτόνωσης (λόγο επίταξης ημιαγωγού πάνω σε υπόστρωμα με μεγαλύτερες πλεγματικές σταθερές) και το αντίθετο για κρυστάλλους υπό strain συμπίεσης (λόγο επίταξης ημιαγωγού πάνω σε υπόστρωμα με μικρότερες πλεγματικές σταθερές). Έτσι το P^{SP} και το P^{PZ} δείχνουν προς την $[000\bar{1}]$ διεύθυνση υπό strain εκτόνωσης, ενώ στην περίπτωση που έχουμε strain συμπίεσης μόνο το P^{PZ} δείχνει προς την [0001] διεύθυνση (αντιπαράλληλο με το P^{SP}).
Θα δούμε τώρα πως μπορούμε να γράψουμε το P_3^{PZ} για κράματα ψευδομορφικά ανεπτυγμένα πάνω σε relaxed InN, GaN και AlN layers. Μπορούμε να υπολογίσουμε ξανά το strain ως:

$$\varepsilon_1 = \frac{a_{buffer} - a(x)}{a(x)} \tag{1.2.8}$$

Όπου οι πλεγματικές σταθερές, οι πιεζοηλεκτρικές και ελαστικές σταθερές των κραμάτων είναι προσεγγιστικά γραμμικές με την περιεκτικότητα. Έτσι η πιεζοηλεκτρική πόλωση είναι μη γραμμική και δίνεται από τις παρακάτω εξισώσεις συναρτήσει της περιεκτικότητας [14].

$$\begin{aligned} P^{pz}_{AlGaN\backslash InN}(x) &= [-0.28x - 0.113(1-x) + 0.042x(1-x)]C\ m^{-2} \\ P^{pz}_{AlGaN\backslash GaN}(x) &= [-0.0525x + 0.0282x(1-x)]C\ m^{-2} \\ P^{pz}_{AlGaN\backslash AlN}(x) &= [0.026(1-x) + 0.0248x(1-x)]C\ m^{-2} \end{aligned} \tag{1.2.9}$$

$$\begin{aligned} P^{pz}_{InGaN\backslash InN}(x) &= [-0.113(1-x) - 0.0276x(1-x)]C\ m^{-2} \\ P^{pz}_{InGaN\backslash GaN}(x) &= [0.148x - 0.0424x(1-x)]C\ m^{-2} \\ P^{pz}_{InGaN\backslash AlN}(x) &= [0.182x + 0.026(1-x) - 0.0456x(1-x)]C\ m^{-2} \end{aligned} \tag{1.2.10}$$

$$\begin{aligned} P^{pz}_{AlInN\backslash InN}(x) &= [-0.28x + 0.104x(1-x)]C\ m^{-2} \\ P^{pz}_{AlInN\backslash GaN}(x) &= [-0.0525x + 0.148(1-x) + 0.0938x(1-x)]C\ m^{-2} \\ P^{pz}_{AlInN\backslash AlN}(x) &= [0.182(1-x) + 0.092x(1-x)]C\ m^{-2} \end{aligned} \tag{1.2.11}$$

Για ετεροδομές με φράγματα δυναμικού υπό μετριασμένο strain οι παραπάνω μπορούν να χρησιμοποιηθούν απευθείας, είτε σαν πόλωση, είτε, όπως θα δούμε και πιο μετά, σαν ενδο-επιφανιακό δέσμιο φορτίο, αναλόγως με το μοντέλο επίλυσης της self-consistent Schrodinger-Poisson (effective mass ή tight-binding).

- ***2DEG λόγο αυθόρμητης και πιεζοηλεκτρικής πόλωσης***

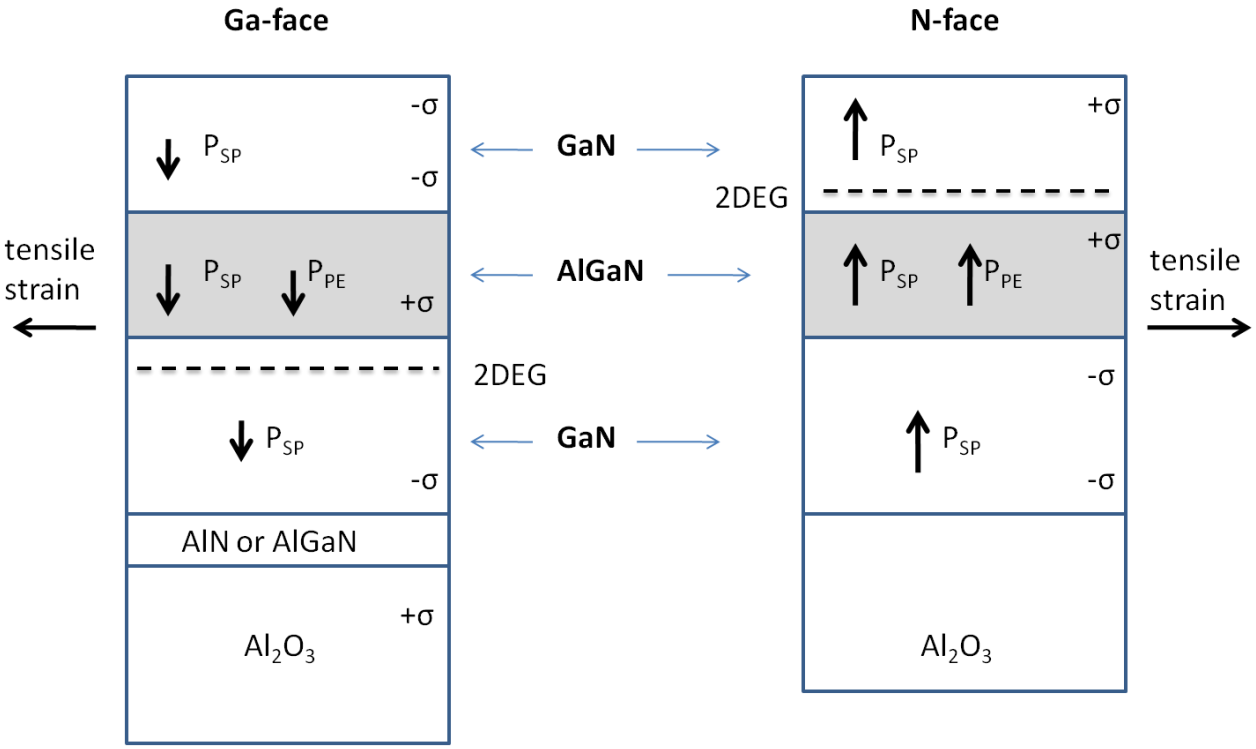
Τα πιεζοηλεκτρικά φαινόμενα προκαλούν σημαντική επιρροή στην συγκέντρωση και την κατανομή των ελεύθερων φορέων σε III-N ετεροδομές. Το φαινόμενο αυτό γίνεται ακόμα πιο εμφανές σε ψευδομορφικές wurtzite AlGaN/GaN διατάξεις. Τα ηλεκτρικά πεδία που προέρ-χονται από την πόλωση οδηγούν στην ραγδαία αύξηση της δισδιάστατης συγκέντρωσης φορέ-ων και στον πιο στενό χωρικό περιορισμό τους.
Σημαντικό ρόλο επίσης, παίζει και η αυθόρμητη πόλωση μιας και στις III-N wurtzite δομές είναι πολύ μεγάλη, αυξανόμενη από το GaN προς το InN με την μεγαλύτερη τιμής στο AlN, έχοντας ως αποτέλεσμα παραπάνω αύξηση των πολωτικών φαινομένων.

Επιφανειακό φορτίο εξαιτίας της πόλωσης

Ως παράδειγμα θα αναφέρουμε μια GaN/AlGaN/GaN ετεροεπαφή ανεπτυγμένη πάνω σε Οξείδιο του Αλουμινίου (Al_2O_3) ή Ζαφείρι. Όταν AlGaN barriers αναπτύσσονται πάνω σε GaN υποστρώματα βρίσκονται πάντα υπό strain εκτόνωσης. Σε αυτή την περίπτωση η πιεζο-ηλεκτρική και η αυθόρμητη πόλωση έχουν την ίδια κατεύθυνση, με την συνολική πόλωση να δίνεται από το άθροισμά τους:

$$P = P^{PZ} + P^{SP} \tag{1.2.12}$$

Όπως βλέπουμε και στην παρακάτω εικόνα, για την Ga-faced πολικότητα του κρυστάλλου, η ολική πόλωση έχει κατεύθυνση προς το οξείδιο του Αλουμινίου με το 2DEG να δημιουργείται στην κάτω GaN/AlGaN ετεροεπαφή. Στην N-face πολικότητα η πόλωση έχει κατεύθυνση προς την πάνω επιφάνεια με το 2DEG τώρα να δημιουργείται στην πάνω AlGaN/GaN ετεροεπαφή.



Εικόνα 1.2.4 – Ga- και N-faced πολικότητες μιας GaN/AlGaN/GaN ετεροεπαφής.

Η ύπαρξη του ενδιάμεσου AlN ή AlGaN layer στο αριστερό μέρος της εικόνας 1.2.4 έχει σκοπό της επίτευξη της Ga-face πολικότητας.
Η κλίση της πόλωσης στον χώρο εκφράζει την παραγόμενη πυκνότητα φορτίου και δίνεται από την σχέση:

$$\rho_P = -\nabla P \tag{1.2.13}$$

Σε μια ενδοεπιφάνεια μιας ετεροδομής (π.χ. ABN/GaN) η πόλωση αλλάζει απότομα προκαλώντας μια σταθερή συγκέντρωση φορτίου πόλωσης που καθορίζεται από την σχέση:

$$\begin{aligned}\sigma(P^{SP}+P^{PZ}) &= P(GaN)-P(ABN)\\ &= \{P^{SP}(GaN)+P^{PZ}(GaN)\}-\{P^{SP}(ABN)+P^{PZ}(ABN)\}\\ &= \{P^{PZ}(GaN)-P^{PZ}(ABN)\}+\{P^{SP}(GaN)-P^{SP}(ABN)\}\\ &= \sigma(P^{PZ})+\sigma(P^{SP})\end{aligned} \tag{1.2.14}$$

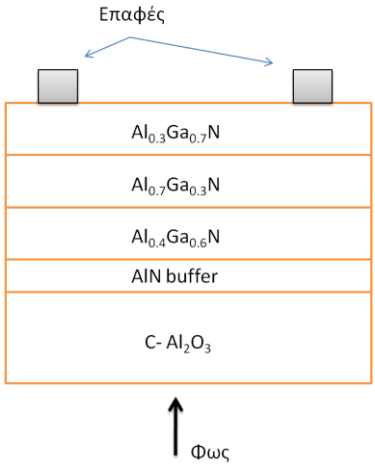
Αν αυτή η πυκνότητα είναι θετική (+σ), ελεύθερα ηλεκτρόνια θα προσπαθήσουν να εξομαλύνουν τα φορτία πόλωσης με αποτέλεσμα συσσώρευση ηλεκτρονίων και σχηματισμό ενός 2DEG. Κατ' αναλογία μια αρνητική πυκνότητα επιφανειακού φορτίου (-σ) μπορεί να προκαλέσει συσσώρευση οπών στην ενδοεπιφάνεια.
Ο σχηματισμός των 2DEG εκτίνεται στο κάτω μέρος μιας AlGaN/GaN ενδοεπιφάνειας και στο πάνω μέρος της GaN/AlGaN για Ga- και N-face GaN/AlGaN/GaN ετεροδομή αντίστοιχα (Εικόνα 1.2.4).

1.3-Διατάξεις βασισμένες σε ημιαγωγούς III-Νιτριδίων

Τα III-N υλικά αποτελούν ένα πολύ ενδιαφέρων κομμάτι για εφαρμογές σε οπτικές και ηλεκτρονικές διατάξεις.
Από την μεριά των οπτικών εφαρμογών το ενδιαφέρον επικεντρώνεται στο γεγονός ότι η ανάπτυξη οπτικών συστημάτων-διατάξεων μπορεί, ενδυνάμη, να γίνει για εφαρμογές από το κοντινό υπέρυθρο (IR) έως το βαθύ υπεριώδες (DUV), δεδομένων των ενεργειακών χασμάτων της οικογένειας των III-N ημιαγωγών .
Στο πεδίο των ηλεκτρονικών διατάξεων το κυρίως ενδιαφέρων επικεντρώνεται σε ενισχυτές ισχύος υψηλής συχνότητες, όπου απ' ότι φαίνεται θα επισκιάσουν τα ήδη υπάρχοντα συστήματα των «κλασσικών» υλικών και Διοδικών Διατάξεων Συντονισμού Φαινομένου Σήραγγας.
Όλες αυτές οι διατάξεις βασίζονται σε ετεροεπαφές ή σε δομές κβαντικών πηγαδιών.

Οπτικοί Ανιχνευτές

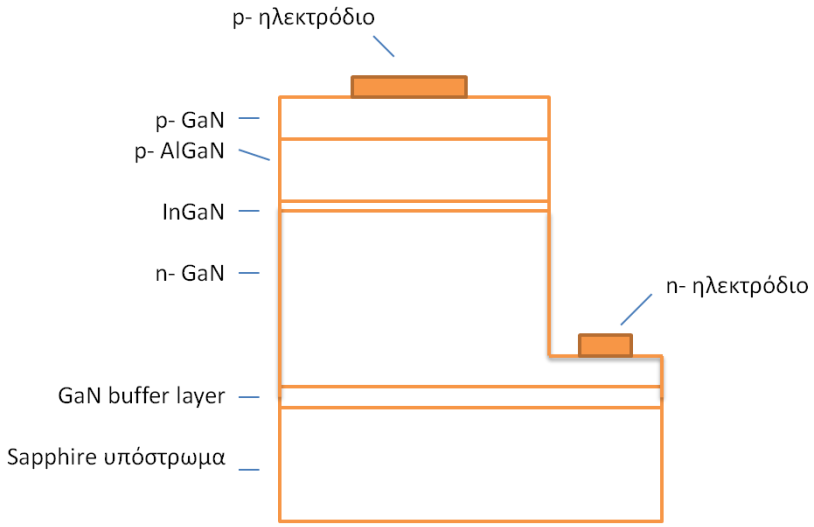
Οι πιο απλές εφαρμογές με την χρήση των III-N ημιαγωγών είναι οι φωτοανιχνευτές. Ένας AlGaN φωτοανιχνευτής, στην ουσία είναι ένας «τυφλός» ανιχνευτής ως προς το ορατό φώς [21]. Μια δομή AlGaN/GaN χρησιμοποιείται όταν θέλουμε να ανιχνεύσουμε πιο βαθιά στην UV περιοχή.



Εικόνα 1.3.1 – Τυπική δομή ενός AlGaN φωτοανιχνευτή.

Δίοδοι εκπομπής φωτός (LEDs)

Τα μπλε LEDs ήταν οι πρώτες III-N οπτικές διατάξεις που έγιναν εμπορικά διαθέσιμες [19]. Από τότε η βελτίωση, όσων αφορά την αποδοτικότητά τους έγινε με πολύ γρήγορου ρυθμούς. Στην Εικόνα 1.3.1 φαίνεται μια τέτοια διάταξη.



Εικόνα 1.3.2 – Απεικόνιση δομής πράσινου SQW LED [20].

Διοδικά Lasers(LDs)

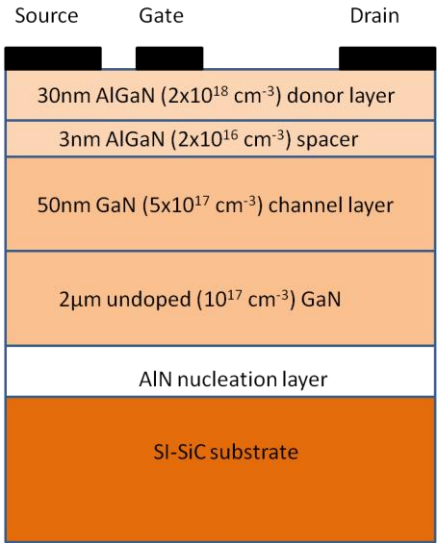
Τα διοδικά laser βασισμένα σε InGaN Multiple Quantum Wells (MQW) έχουν εμφανιστεί από το 1996 με πολύ υψηλό βαθμό βελτίωσης. Είναι βασισμένα σε παραδοσιακές γεωμετρίες και υπόσχονται μέχρι και 10000 ώρες λειτουργίας σε θερμοκρασία δωματίου [18]. Μέχρι στιγμής τα InGaN διοδικά laser έχουν παρουσιαστεί για μήκος κύματος μέχρι τα 400nm (βιολετή laser). Εφαρμογές που σχετίζονται με τα LDs είναι η οπτική αποθήκευση δεδομένων (περίπου 50GB για έναν δίσκο 12cm), εκτύπωση laser και μελλοντικές 3D laser προβολές.

Optical Modulator

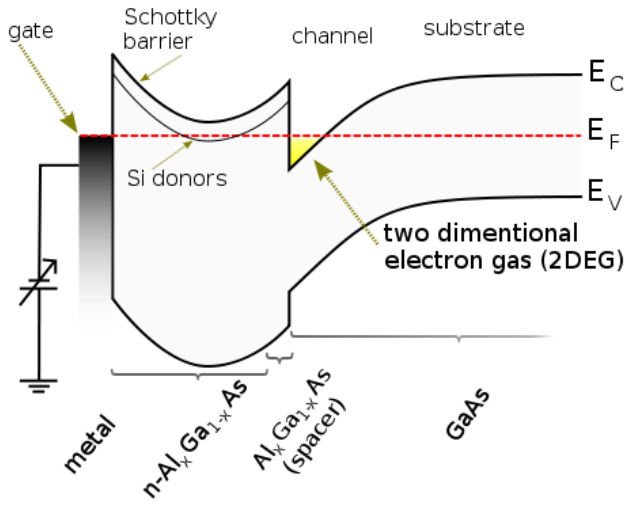
Αρκετά σημαντικές διατάξεις για πιο γρήγορες οπτικές επικοινωνίες. Μια ιδέα για τα νιτρίδια είναι η εφαρμογή του Φαινομένου Κβαντικού Περιορισμού Stark (Quantum Confined Stark Effect) σε πολλαπλά InGaN κβαντικά πηγάδια. Εδώ το εσωτερικό ηλεκτρικό πεδίο λόγο του πιεζοηλεκτρικού φαινομένου δημιουργεί ένα τριγωνικό δυναμικό που επιτρέπει ισχυρά ηλεκτρο-οπτικά φαινόμενα [22]. Η προβλεπόμενη μεταβολή του συντελεστή απορρόφησης και του δείκτη διάθλασης με την εφαρμογή ηλεκτρικού πεδίου είναι αρκετά μεγάλη κοντά στη περιοχή του χάσματος που υπόσχεται modulators ηλεκτρο-απορρόφησης στην περιοχή του μπλε-βιολετί. Παρόμοιο ενδιαφέρον δείχνουν και modulators με χρήση κβαντικών τελειών για οπτική απορρόφηση με χαμηλές ενέργειες αποκοπής για GaN/InGaN QD συστήματα, σε αναλογία με έρευνες για IR μήκους κύματος υλικά.

High Frequency transistors

Τα τρανζίστορ ετεροεπαφής, επίδρασης πεδίου (HFET ή HEMT) είναι από τα πιο διαδεδομένα III-N τρανζίστορ. Το κυριότερο χαρακτηριστικό τους είναι ότι εκμεταλλεύονται την πιεζοηλεκτρική πόλωση που εμφανίζεται στις διευθύνσεις ανάπτυξης των III-N ημιαγωγών για την δημιουργία του δισδιάστατου ηλεκτρονιακού αερίου (2DEG), σε αντίθεση με τα III-As HEMTs που το πετυχαίνουν με υψηλότερο doping του barrier(Εικόνα 1.3.3).

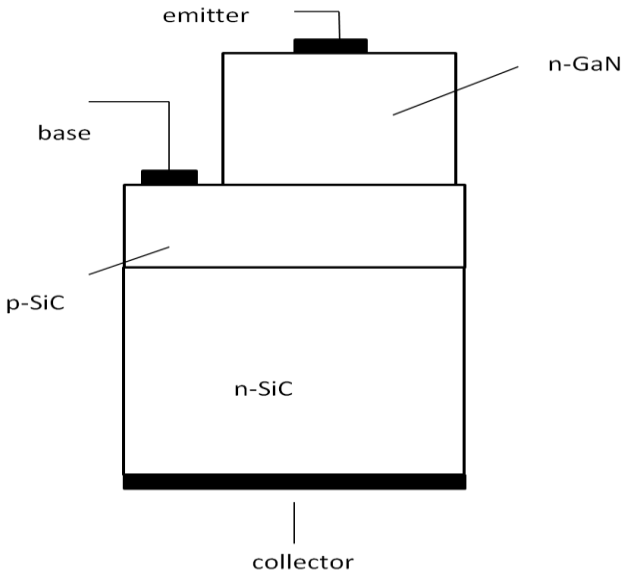


Εικόνα 1.3.3 – AlGaN/GaN HFET.



Εικόνα 1.3.4 – Δομή Ενεργειακών Ζωνών ενός AlGaAs/GaAs HEMT.

Υβριδικά διπολικά τρανζίστορ (HBTs) έχουν παρουσιαστεί, με n-GaN Εκπομπό, p-SiC Βάση και SiC Συλλέκτη (Εικόνα 1.3.4) [23].



Εικόνα 1.3.5- Υβριδικό διπολικό τρανζίστορ (HBTs).

Μια σημαντική εφαρμογή, σε αυτό το σημείο, θα ήταν οι επίγειες και διαστημικές τηλεπικοινωνίες όπου υψηλής ισχύος μικροκυματικοί ενισχυτές είναι απαραίτητοι. Ένα ακόμα πλεονέκτημα των III-N υλικών (όπως και του SiC) σε σχέση με το GaAs και το Si είναι η εξαιρετική θερμική αγωγιμότητα και η υψηλή αντοχή τους στην θερμοκρασία.

Resonant Tunneling Diode

Οι Δίοδοι Διέλευσης Συντονισμού (RTDs) είναι διατάξεις που περιλαμβάνουν ένα ή και περισσότερα κβαντικά πηγάδια μεταξύ δύο φραγμάτων δυναμικού. Η λειτουργία τους βασίζεται στον ενεργειακό συντονισμό ηλεκτρονίων της ζώνης αγωγιμότητας με μια από τις δέσμιες καταστάσεις που σχηματίζονται στο κβαντικό πηγάδι.

1.4 – Αναφορές:

1. F.Fichter and Z.Anorg, Chem. 54, 332 (1907)
2. F. Fischer and R. Schröter: Ber. Dtsch. Chem. Ges. 43 (1910) 1465
3. W.C.Johnson, J.B. Parsons and M.C. Crew, "Nitrogen compounds of gallium III. Gallic nitride," J. Phys. Chem. 36,2561 (1932).
4. Bernardini F, Fiorentini V and Vanderbilt D 1997 *Phys. Rev.* B **56** R10 024
5. Zoroddu A, Bernardini F, Ruggerone P and Fiorentini V 2001 *Phys. Rev.* B **64** 45 208
6. Ambacher O 1998 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **31** 2653
7. Dubois M-A and Muralt P 1999 *Appl. Phys. Lett.* **74** 3032
8. B. Daudin, J.L. Rouviere, and M. Arlery, "Polarity determination of GaN films by ion channeling and convergent electron diffraction", Appl. Phys. Lett. 69, 2480 (1996)
9. J.F. Nye, Physical Properties of Crystals, Oxford University Press, Oxford, 1985.
10. Bernardini F and Fiorentini V 2001 *Phys. Rev.* B **64** 85 207
11. E. Iliopoulos, A. Adikimenakis, C. Giesen, M. Heuken, and A. Georgakilas1, Appl. Phys. Lett. **92**, 191907 (2008)
12. G. Franssen, I. Gorczyca, T. Suski, A. Kamińska, J. Pereiro, E. Muñoz,, E. Iliopoulos, A. Georgakilas, S. B. Che, Y. Ishitani, A. Yoshikawa, N. E. Christensen and A. Svane J. Appl. Phys. **103**, 033514 (2008)
13. Brunner D, Angerer H, Bustarret E, H¨opler R, Dimitrov R, Ambacher O and Stutzmann M 1997 *J. Appl. Phys.* **82** 5090
14. O. Ambacher *et al* J. Phys.: Condens. Matter **14** (2002) 3399–3434
15. Deger C, Born E, Angerer H, Ambacher O, Stutzmann M, Hornsteiner J, Riha E and Fischerauer G 1998 *Appl. Phys. Lett.* **72** 2400
16. Tsubouchi K, Sugai K and Mikoshiba N 1981 *IEEE Ultrason. Symp.* **90** 375
17. Shur M S, Bykhovski A D and Gaska R 1999 *Mater. Res. Soc. Int. J. Nitr. Semicond. Res.* S **41** G16
18. S. Nakamura, M. Senoh, S. Nagahama, N. Iwasa, T. Yamada, T. Matsushita, H. Kiyoku, Y. Sugimoto, T. Kozaki, H. Umemoto, M. Sano, K. Chocho, Applied Physics Letters 72 (1998) 2638.
19. S. Nakamura, T. Mukai, M. Senoh, Applied Physics Letters 64 (1994) 1687.
20. S. Nakamura, G. Fasol, The Blue Laser Diode, Springer, Heidelberg, 1997.
21. Q. Chen, J.W. Yang, A. Osinsky, S. Gandopadhyay, B. Lim, M.Z. Anwar, M.A. Khan, D. Kuksenkov H. Temkin, Applied Physics Letters 70 (1997) 2277.
22. H. Jiang, J. Singh, Applied Physics Letters 75 (1999) 1932.
23. J.I. Pankove, M. Leksono, S.S. Chang, C. Walker, B. Van Zeghbroeck, MRS Internet Journal of Nitride Semiconducting Research 1 (1996) 39.
24. Semiconductors: group IV elements and III-V compounds, edited by O.Madelung, Springer-Verlag, Berlin, 1991.
25. O. Madelung, Semiconductors – Basic Data, 2nd edition, Springer-Verlag, Berlin, 1996
26. M. Leszczynski, T. Suski, P. Perlin, H. Teisseyre, I. Grzegory, M. Bockowski, J. Jun, S.Porowski, and J.Major, "Lattice constants, thermal expansion and compressibility of gallium nitride", J. Phys. D 28, A149 (1995).
27. Suzuki, M., Uenoyama T., Strain effect on electronic and optical properties of GaN/AlGaN quantum-well lasers. *J. Appl. Phys.* **80, 12** (1996), 6868-6874.
28. Mohammad S N, Salvador A A and Morkoc H 1995 *Proc. IEEE* **83** 1306.
29. E. Dimakis, E. Iliopoulos, K. Tsagaraki, A. Adikimenakis, and A. Georgakilas Appl. Phys. Lett. **88**, 191918 (2006).

30. S. Nakamura, T. Mukai, M. Senoh and N. Iwasa, "Thermal annealing effects on p-type Mg-doped GaN Films," Jpn.J.Appl.Phys. 31, L139 (1992)
31. H. Amino, N. Sawaki, I.Akasaki and Y. Toyoda, "Metalorganic vapor phase epitaxial growth of a high quality GaN film using an AlN buffer layer," Appl. Phys. Lett. 48, 353 (1986).
32. P. Kung, C.J. Sun, A. saxler, H. Ohsato and M. Razeghi, "Crystallography of epitaxial growth of wurtzite-type thin films on sapphire substrates," J.Appl. Phys. 75, 4515 (1994).

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2^{ο}

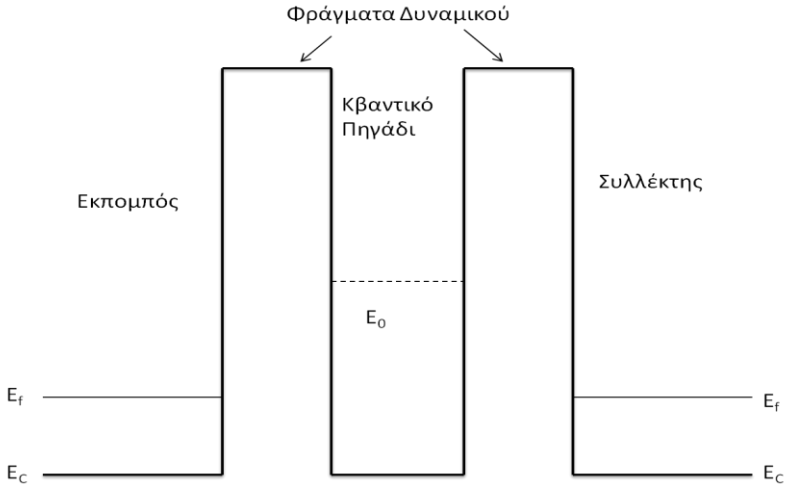
Δίοδοι Συντονισμού Φαινομένου Σήραγγας (RTDs)

2.1- Εισαγωγή

Οι Δίοδοι Συντονισμού Φαινομένου Σήραγγας (Resonant Tunneling Diodes) , είναι δομές πολλαπλών φραγμάτων δυναμικού, που εμφανίστηκαν στα μέσα του 1970 και εκμεταλλεύονται τον κυματικό συντονισμό των ηλεκτρονίων.
Η ιδέα της Διέλευσης Συντονισμού μέσο φαινομένου Σήραγγας σε πεπερασμένα ημιαγωγικά συστήματα προτάθηκε αρχικά από τους Tsu και Esaki το 1973 [1] λίγο μετά την εμφάνιση της μεθόδου Επίταξης με Μοριακές Δέσμες (Molecular Beam Epitaxy) στην έρευνα της κρυσταλλικής ανάπτυξης. Από θεωρητικής άποψης ηλεκτρόνια θα μπορούσαν να διέλθουν μέσα από μια δομή που περιλαμβάνει ένα κβαντικό πηγάδι μεταξύ δύο φραγμάτων δυναμικού, όπως για παράδειγμα μια AlGaAs/GaAs/AlGaAs ετεροδομή. Η διέλευση των ηλεκτρονίων γίνεται μέσο του φαινομένου σήραγγας και βασίζεται στον κυματικό συντονισμό αυτών με τις καταστάσεις του πηγαδιού, όπως ακριβώς συμβαίνει και σε ένα πείραμα Fabry-Perot της οπτικής. Η εξάρτηση της εφαρμοζόμενης τάσης με το ρεύμα σήραγγος για μια ετεροδομή με δύο φραγμούς δείχνει αρνητική διαφορική αντίσταση (negative differential resistance) NDR σαν αποτέλεσμα διέλευσης μέσω συντονισμού.

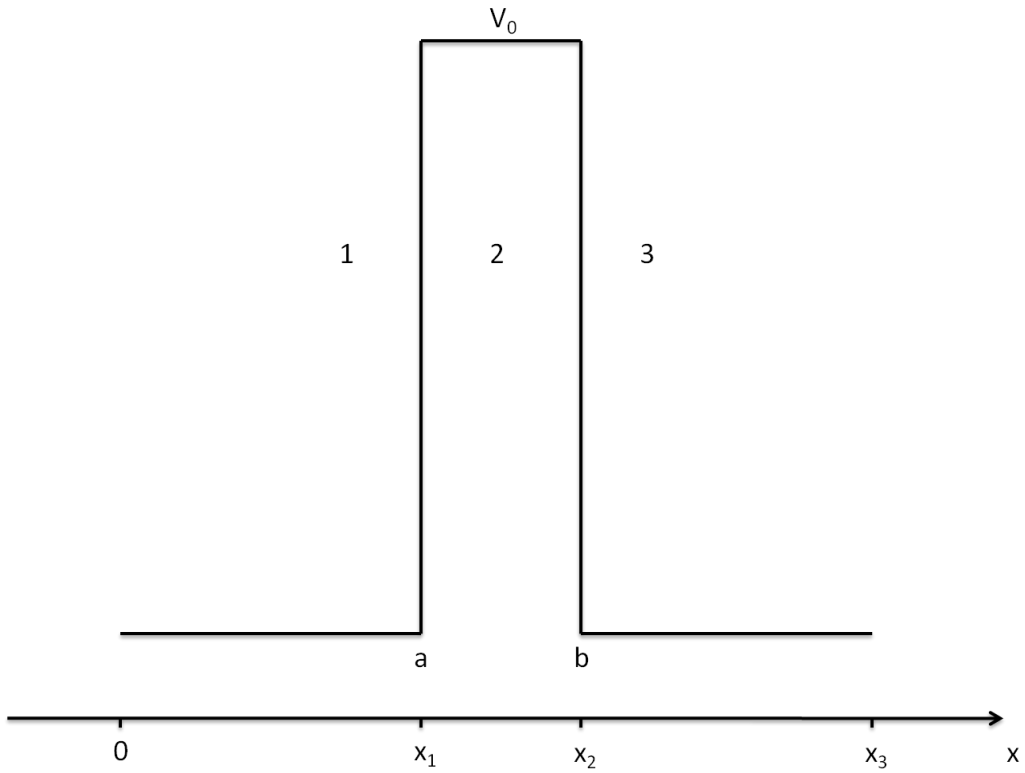
2.2- Φυσική των RTD

Η δομή ενός RTD, στην πιο απλή μορφή της, αποτελείται από ένα κβαντικό πηγάδι που περικλείεται από δύο φράγματα δυναμικού και τις περιοχές του Εκπομπού και του Συλλέκτη.



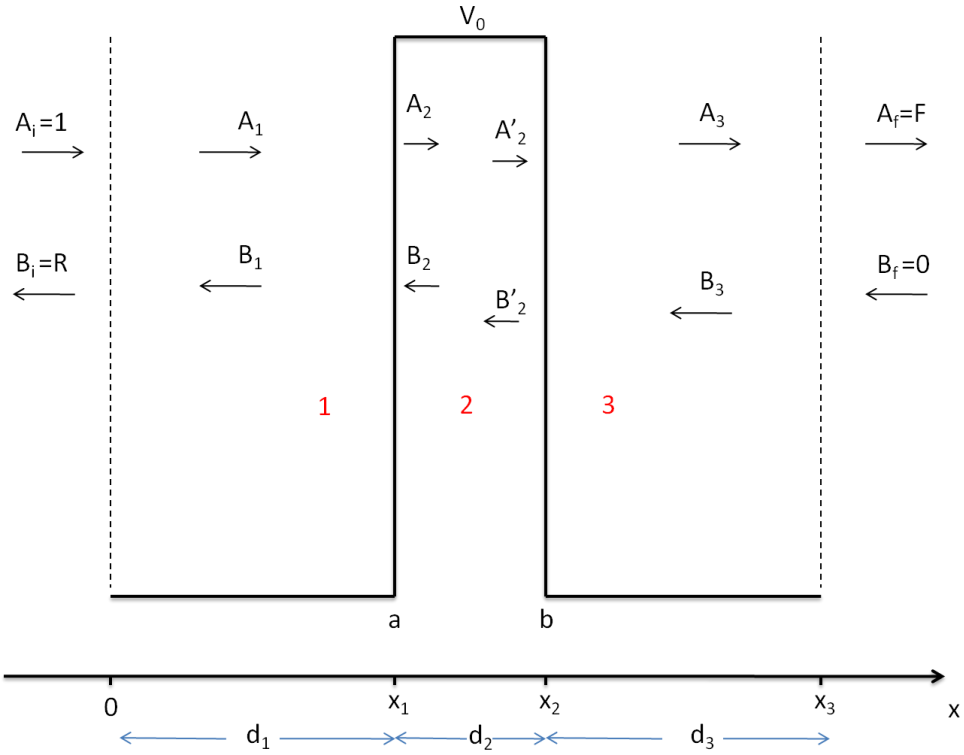
Εικόνα 2.2.1 – DB-RTD σε ισορροπία

Κάτω από συνθήκες ισορροπίας, χωρίς δηλαδή την εφαρμογή εξωτερικής τάσης, και αγνοώντας τυχών ατέλειες, το σύστημα βρίσκεται σε κατάσταση επίπεδης ζώνης (flat band), όπως φαίνεται στην Εικόνα 2.2.1. E_0 θεωρούμε την χαμηλότερη δέσμια κατάσταση του πηγαδιού και E_f, την στάθμη Fermi στην περιοχή του Εκπομπού και του Συλλέκτη. Διέλευση συντονισμού μέσο φαινομένου Σήραγγας, διαμέσου των φραγμάτων δυναμικού παρατηρούμε όταν η ενέργεια των προσπίπτοντων ηλεκτρονίων, που φτάνουν από τον Εκπομπό, γίνει ίση με την δέσμια κατάσταση E_0, του κβαντικού πηγαδιού. Για να γίνει πιο κατανοητό το παραπάνω θα επιχειρήσουμε να υπολογίσουμε τον συντελεστή διέλευσης σε δύο περιπτώσεις. Στην πρώτη περίπτωση θα υπολογίσουμε τον συντελεστή διέλευσης συναρτήσει της ενέργειας μέσα από ένα φράγμα δυναμικού πεπερασμένου πλάτους και ύψους, ενώ στην δεύτερη μέσα από δύο φράγματα δυναμικού που απέχουν μεταξύ τους κάποια απόσταση x.
Αρχικά, θεωρούμε ένα φράγμα δυναμικού πλάτους 5nm και ύψους V_0=0.22eV. Για να ανάγουμε το παράδειγμα σε ένα πιο πρακτικό επίπεδο, θα θεωρήσουμε ότι έχουμε την ζώνη αγωγιμότητας μιας ετεροδομής της μορφής GaAs/$Al_{0.2}Ga_{0.8}$As/GaAs. Σε αυτή την περίπτωση το $Al_{0.2}Ga_{0.8}$As είναι το φράγμα δυναμικού μιας και ενεργειακά βρίσκεται 0.22eV πάνω από το GaAs (Εικόνα 2.2.2).



Εικόνα 2.2.2 – Δομή GaAs(10nm)/$Al_{0.2}Ga_{0.8}$As(5nm)/GaAs(10nm).

Θεωρούμε ότι ηλεκτρόνια ενέργειας E, εισέρχονται στο σύστημα της εικόνας 2.2.2 από την αριστερή πλευρά (x=0). Τα ηλεκτρόνια, σαν κύματα, έχουν μια πιθανότητα να ανακλαστούν και μια πιθανότητα να περάσουν μέσα από το φράγμα δυναμικού. Τα ηλεκτρόνια οδεύοντας από την περιοχή 1 προς την περιοχή 2, εν μέρει διέρχονται και εν μέρει ανακλώνται (όμοια και από την 2 στην 3), όπως φαίνεται και στην εικόνα 2.2.3.



Εικόνα 2.2.3 – Ανάκλαση και διάδοση ηλεκτρονίου σε ετεροδομή.

Από την λύση της εξίσωσης Schrödinger:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2}\frac{\vartheta}{\vartheta x}\left(\frac{1}{m^*}\frac{\vartheta}{\vartheta x}\right)+V(x)\right]\psi(x)=E\psi(x)$$

για κάθε μια από τις τρείς παραπάνω περιοχές προκύπτει ότι η κυματοσυναρτήσεις των ηλεκτρονίων έχουν την μορφή:

$$\psi(x)=A_m\,e^{ik_m(x-x_m)}+B_m\,e^{-ik_m(x-x_m)} \qquad (2.2.1)$$

όπου το m εκφράζει την κάθε περιοχή, το x_m είναι η απόσταση από το μηδέν μέχρι την m ετεροεπιφάνεια και $k_m=\sqrt{\frac{2\,m_m^*}{\hbar^2}(E-V_m)}$ είναι το κυματάνυσμα της κυματοσυνάρτησης σε κάθε περιοχής, με m_m^* να είναι η ενεργός μάζα του ηλεκτρονίου στην m περιοχή και V_m το αντίστοιχο ηλεκτροστατικό δυναμικό (ελάχιστο ζώνης αγωγιμότητας).
Με την χρήση των οριακών συνθηκών που εκφράζουν την συνέχεια της κυματοσυνάρτησης, $\psi_{m=i}(x_\iota)=\psi_{m=i+1}(x_\iota)$, και του ρεύματος, $\frac{1}{m_{m=i}^*}\frac{d}{dx}\psi_{m=i}(x_\iota)=\frac{1}{m_{m=i+1}^*}\frac{d}{dx}\psi_{m=i+1}(x_\iota)$, για τις ενδοεπιφάνειες a,b προκύπτει ότι όταν τα ηλεκτρόνια περνούν από μια περιοχή σε μια άλλη, οι συντελεστές A_mκαι B_m σε αυτές τις δυο περιοχές συνδέονται μέσο της σχέσης:

$$\begin{pmatrix} A'_m \\ B'_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1+\Delta_m}{2} & \frac{1-\Delta_m}{2} \\ \frac{1-\Delta_m}{2} & \frac{1+\Delta_m}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{m+1} \\ B_{m+1} \end{pmatrix} \quad (2.2.2)$$

όπου $\Delta_m = \frac{k_{m+1}}{k_m} \frac{m_m^*}{m_{m+1}^*}$

Οι αντίστοιχοι συντελεστές για την ελεύθερη διάδοση σε μια περιοχή, στην αρχή και στο τέλος της περιοχής, συνδέονται μεταξύ τους μέσο της:

$$\begin{pmatrix} A_m \\ B_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-ik_m d_m} & 0 \\ 0 & e^{ik_m d_m} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A'_m \\ B'_m \end{pmatrix} \quad (2.2.3)$$

όπου το d_m εκφράζει το πάχος της m περιοχής.

Κατ αυτόν τον τρόπο η έκφραση που εκφράζει την ολική διάδοση και ανάκλαση ηλεκτρονίων στο παραπάνω σύστημα από την στιγμή που μπήκαν σε αυτό έως την στιγμή που βγήκαν από αυτό μπορεί να γραφτεί σαν μια ακολουθία διαδοχικών πινάκων ως:

$$\begin{pmatrix} A \\ R \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-ik_1 d_1} & 0 \\ 0 & e^{ik_1 d_1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1+\Delta_1}{2} & \frac{1-\Delta_1}{2} \\ \frac{1-\Delta_1}{2} & \frac{1+\Delta_1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-ik_2 d_2} & 0 \\ 0 & e^{ik_2 d_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1+\Delta_2}{2} & \frac{1-\Delta_2}{2} \\ \frac{1-\Delta_2}{2} & \frac{1+\Delta_2}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-ik_3 d_3} & 0 \\ 0 & e^{ik_3 d_3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.2.4)$$

Όπου A είναι ο συντελεστής της προσπίπτουσας κυματοσυνάρτησης των ηλεκτρονίων, B είναι ο συντελεστής της ολικής ανάκλασης, και F ο συντελεστής της ολικής διέλευσης. Να σημειώσουμε σε αυτό το σημείο πως θεωρούμε ότι δεν έχουμε προσπίπτων ηλεκτρόνια από το δεξί μέρος. Κατ αυτόν τον τρόπο μπορούμε να θεωρήσουμε τον συντελεστή του «ανακλώμενου» κύματος στο τέλος του συστήματος ίσο με το μηδέν.

Ο πίνακας που προκύπτει από τον πολλαπλασιασμό των παραπάνω πινάκων ονομάζεται πίνακας διάδοσης τ. Έτσι η παραπάνω μπορεί να πάρει την μορφή:

$$\begin{pmatrix} A \\ R \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tau_{11} & \tau_{12} \\ \tau_{21} & \tau_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.2.5)$$

από την οποία:

$$A = \tau_{11} F \quad (2.2.6)$$

$$R = \tau_{21} F \quad (2.2.7)$$

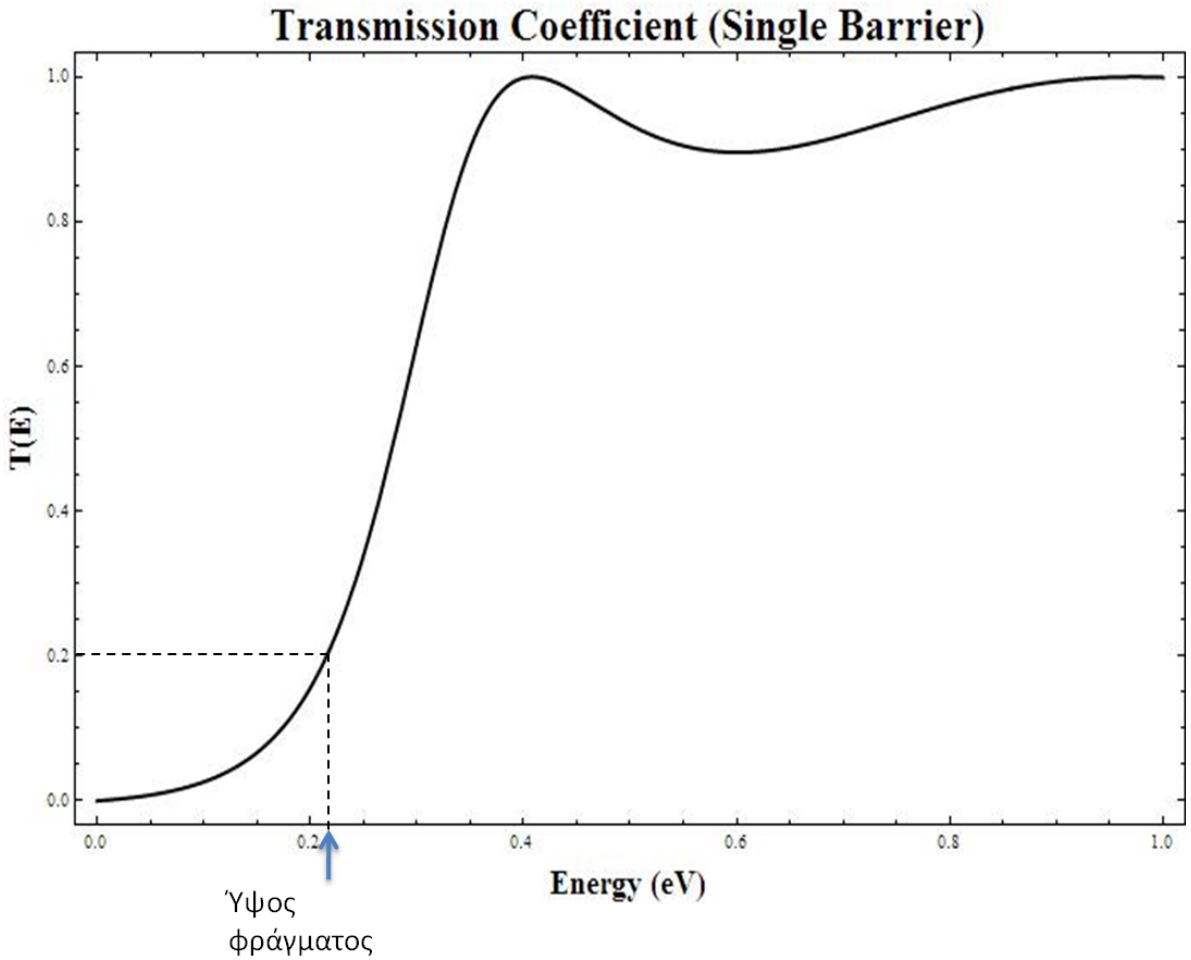
Ο συντελεστής διέλευσης T, ορίζεται από τον λόγο του ρεύματος πιθανότητας του διερχόμενου κύματος στην έξοδο προς το ρεύμα πιθανότητας του εισερχόμενου κύματος στο σύστημα. Δηλαδή:

$$T = \frac{j_F}{j_i} = \frac{\frac{\hbar\, k_F}{m_F} |F|^2}{\frac{\hbar\, k_i}{m_i} |A|^2} \quad (2.2.8)$$

Όμως από την διατήρηση του ρεύματος $j_T + j_R = j_i$, και από τις εξισώσεις (2.2.6) και (2.2.7) προκύπτει ότι:

$$T(E) = 1 - \frac{|\tau_{21}|^2}{|\tau_{11}|^2} \tag{2.2.9}$$

Έτσι λοιπόν, αρκεί να υπολογίσουμε τα στοιχεία του πίνακα $\begin{pmatrix} \tau_{11} & \tau_{12} \\ \tau_{21} & \tau_{22} \end{pmatrix}$ για να προσδιορίσουμε τον συντελεστή διέλευσης.
Με την χρήση της Mathematica για την ετεροδομή GaAs(10nm)/$Al_{0.2}Ga_{0.8}As$(5nm)/GaAs(10nm) με $m^*_{GaAs} = 0.063m_0$ και $m^*_{Al_{0.2}Ga_{0.8}As} = (0.063 + 0.083 * 0.2)m_0$ με m_0 να είναι η μάζα ηρεμίας του ηλεκτρονίου προκύπτει ότι ο συντελεστής διέλευσης συναρτήσει της ενέργειας του ηλεκτρονίου έχει την μορφή:

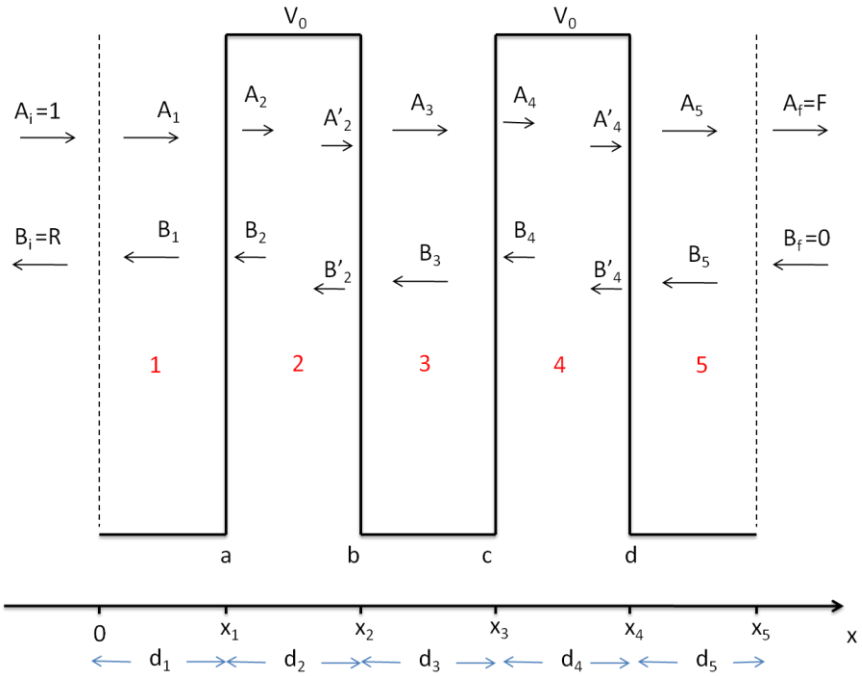


Εικόνα 2.2.4 - Συντελεστής διέλευσης ηλεκτρονίου σε σύστημα μονού φράγματος δυναμικού συναρτήσει της ενέργειας.

Παρατηρούμε πως μέχρι τα 0.2eV η τιμή του T(E) δεν ξεπερνά το 20% παρά μόνο όταν το ηλεκτρόνιο αρχίζει να αποκτά ενέργεια αρκετά μεγαλύτερη από το ύψος του φράγματος δυναμικού.

Στην περίπτωση διπλού φράγματος δυναμικού τα αποτελέσματα που προκύπτουν είναι τελείως διαφορετικά λόγο του φαινομένου συντονισμού με τις ιδοκαταστάσεις του προκύπτοντος, “εν δυνάμει” κβαντικού πηγαδιού. Αν θεωρήσουμε την ετεροδομή:

GaAs(5nm)/$Al_{0.2}Ga_{0.8}As$(5nm)/GaAs(5nm) /$Al_{0.2}Ga_{0.8}As$(5nm)/GaAs(5nm) που φαίνεται και στην εικόνα 2.2.5



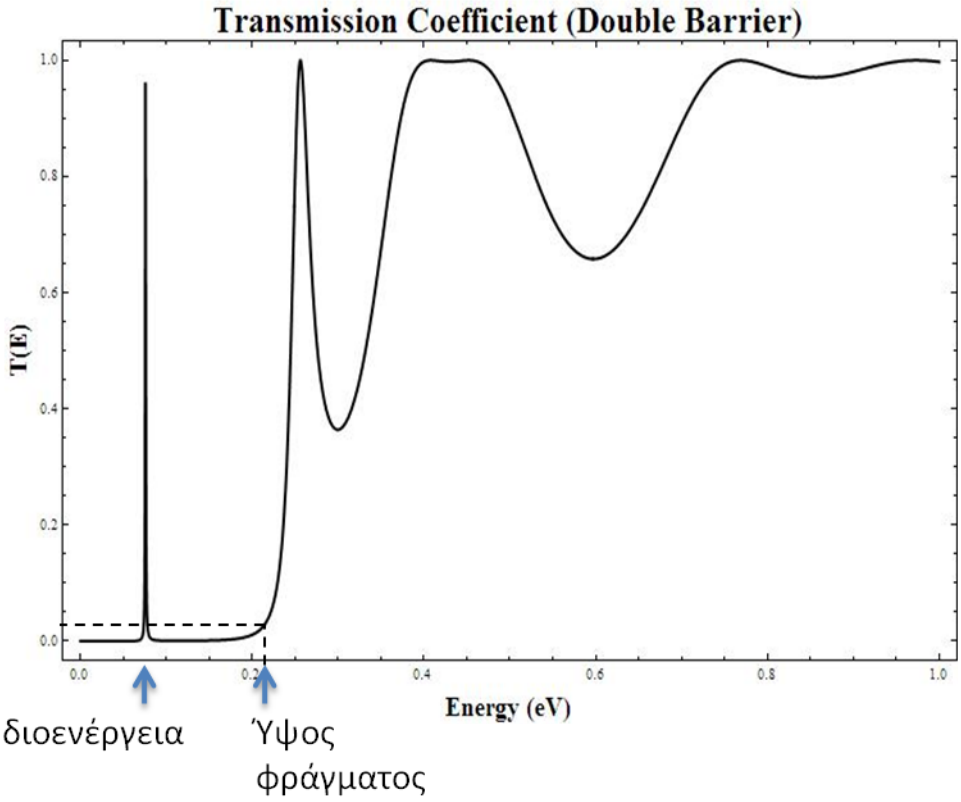
Εικόνα 2.2.5 – Δομή GaAs(5nm)/$Al_{0.2}Ga_{0.8}As$(5nm)/GaAs(5nm) /$Al_{0.2}Ga_{0.8}As$(5nm)/GaAs(5nm).

Ομοίως με την Εξίσωση 2.2.4, η έκφραση που εκφράζει την ολική διάδοση και ανάκλαση του ηλεκτρονίου στο παραπάνω σύστημα έχει την μορφή:

$$\begin{pmatrix} A \\ R \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-ik_1 d_1} & 0 \\ 0 & e^{ik_1 d_1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1+\Delta_1}{2} & \frac{1-\Delta_1}{2} \\ \frac{1-\Delta_1}{2} & \frac{1+\Delta_1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-ik_2 d_2} & 0 \\ 0 & e^{ik_2 d_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1+\Delta_2}{2} & \frac{1-\Delta_2}{2} \\ \frac{1-\Delta_2}{2} & \frac{1+\Delta_2}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-ik_3 d_3} & 0 \\ 0 & e^{ik_3 d_3} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \frac{1+\Delta_3}{2} & \frac{1-\Delta_3}{2} \\ \frac{1-\Delta_3}{2} & \frac{1+\Delta_3}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-ik_4 d_4} & 0 \\ 0 & e^{ik_4 d_4} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1+\Delta_4}{2} & \frac{1-\Delta_4}{2} \\ \frac{1-\Delta_4}{2} & \frac{1+\Delta_4}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-ik_5 d_5} & 0 \\ 0 & e^{ik_5 d_5} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.2.10)$$

Έτσι λοιπόν, ο συντελεστής διέλευσης T(E) στην περίπτωση του διπλού φράγματος δυναμικού έχει την μορφή:

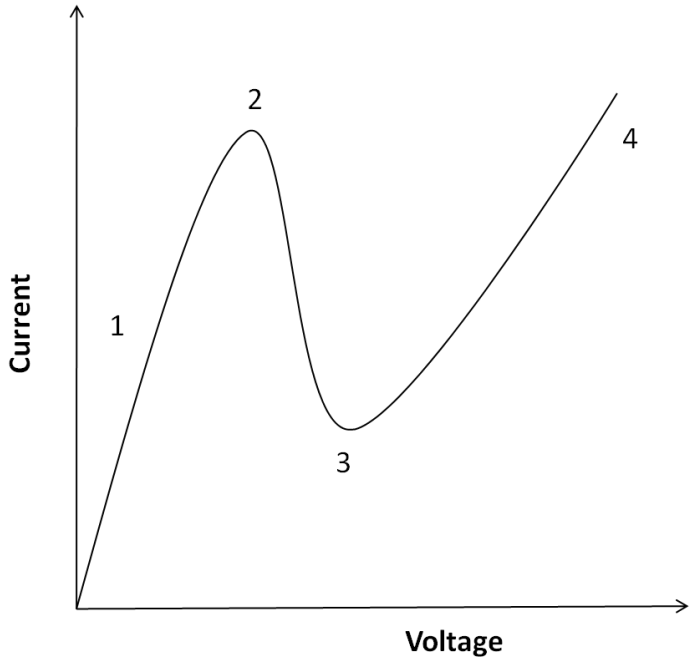


Εικόνα 2.2.6 - Συντελεστής διέλευσης ηλεκτρονίου σε σύστημα διπλού φράγματος δυναμικού συναρτήσει της ενέργειας

Βλέπουμε την απότομη αύξηση της τιμής του T(E) στα 0.07eV, περίπου, η οποία φτάνει στο 100% , την πτώση του αμέσως μετά στην τιμή μηδέν και την αύξησή του μετά τα 0.2eV.
Ο λόγος που παρατηρούμε αυτήν την τόσο υψηλή διαπερατότητα του συστήματος σε αυτή την ενέργεια είναι γιατί αυτή, είναι μια (η πρώτη σε αυτή την περίπτωση) από τις ιδιοενέργειες που χαρακτηρίζουν τις στάσιμες καταστάσεις του “εν δυνάμει” κβαντικού πηγαδιού. Αυτός ο τρόπος διέλευσης ονομάζεται διέλευση συντονισμού. Έτσι λοιπόν όταν ηλεκτρόνια από τον Εκπομπό με μια ενέργεια που είναι ίση με μια από τις ιδιοενέργειες του κβαντικού πηγαδιού τότε η πιθανότητα διέλευσής του από αυτό, μέσο φαινομένου Σήραγγας, μεγιστοποιείται.

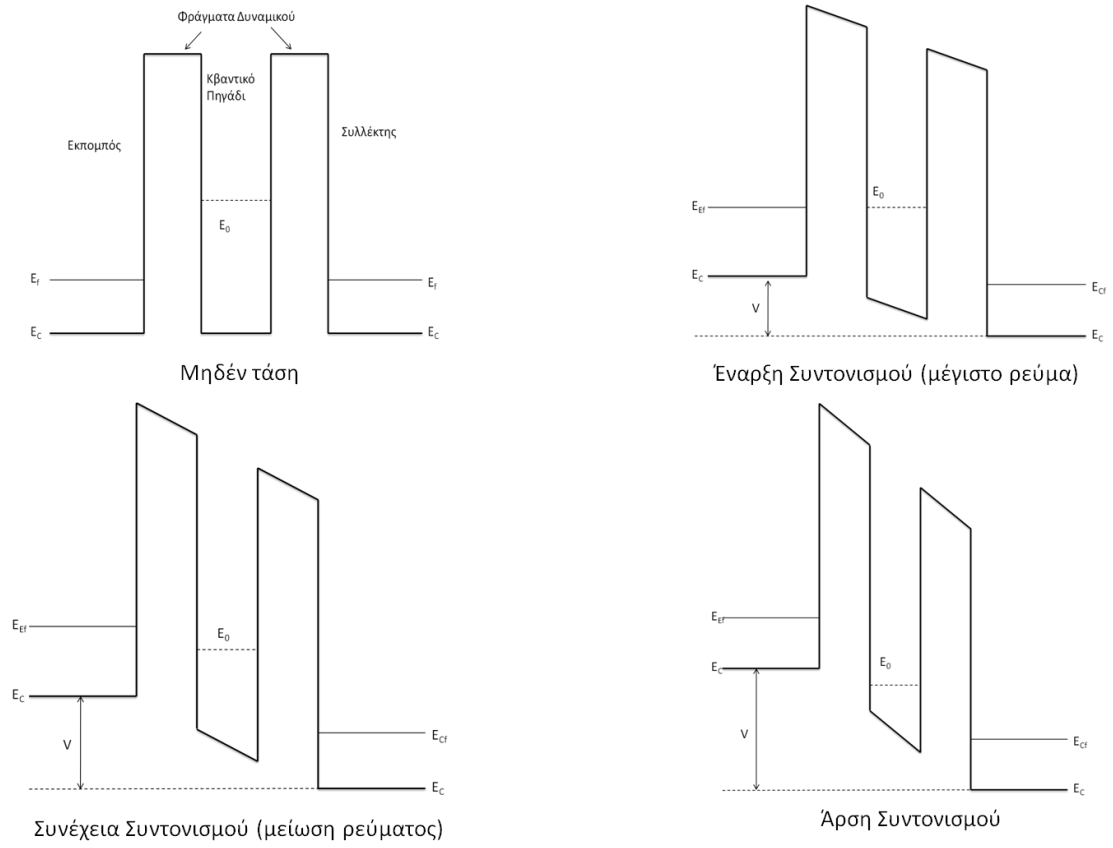
Αυτή είναι και η βασική αρχή λειτουργίας ενός RTD με διπλό φράγμα δυναμικού στο οποίο φαινόμενο συντονισμού μπορούμε να παρατηρήσουμε μόνο αν εφαρμόσουμε εξωτερική τάση σε αυτό. Ο λόγος είναι, η ενεργειακή απόσταση που υπάρχει μεταξύ της στάθμης Fermi του Εκπομπού για παράδειγμα, με τις δέσμιες καταστάσεις του πηγαδιού (Εικόνα 2.2.1). Η εξωτερική τάση δρα με τέτοιον τρόπο ώστε να μειώσει την μεταξύ τους απόσταση με σκοπό της παρατήρηση φαινομένου συντονισμού.

Το ρεύμα σαν συνάρτηση της εφαρμοζόμενης τάσης φαίνεται στην Εικόνα 2.2.7. Το σύστημα ξεκινά από την ισορροπία με το ρεύμα να είναι μηδέν. Καθώς η τάση εφαρμόζεται το κβαντικό πηγάδι πέφτει ενεργειακά μέχρις ότου η κβαντική κατάστασή του να βρεθεί στην ίδια ευθεία με την ενέργεια Fermi του Εκπομπού. Μέχρι να συμβεί αυτό το ρεύμα σήραγγας που παρατηρείται συνεχώς αυξάνεται, όπως φαίνεται και στην Εικόνα 2.2.3 στην περιοχή 1. Όταν η τάση είναι τέτοια ώστε η κβαντική κατάσταση του πηγαδιού είναι πολύ κοντά στο επίπεδο Fermi του Εκπομπού, το ρεύμα που διαπερνά το σύστημα μεγιστοποιείται εξαιτίας του φαινομένου συντονισμού (περιοχή 2). Καθώς η τάση αυξάνεται και άλλο, η κβαντική κατάσταση πέφτει κάτω από το επίπεδο Fermi του Εκπομπού με αποτέλεσμα ο συντονισμός να αρχίσει να χάνεται και το ρεύμα να μειώνεται.



Εικόνα 2.2.7 – Ρεύμα συναρτήσει εφαρμοζόμενης τάσης μιας DB-RTD δομής. Τέσσερες διαφορετικές περιοχές είναι τονισμένες στην εικόνα. Η πρώτη αντιστοιχεί στην περίπτωσης όπου το κβαντικό επίπεδο βρίσκεται πάνω από το επίπεδο Fermi του Εκπομπού. Η δεύτερη περιοχή αντιστοιχεί στην περίπτωση της ευθυγράμμισης των δύο. Η τρίτη στην περίπτωση όπου το κβαντικό επίπεδο βρίσκεται πλέον κάτω από την ασυνέχεια της ζώνης αγωγιμότητας. Τέλος, η τέταρτη περιοχή αντιστοιχεί σε θερμιονική εκπομπή.

Όσο η τάση συνεχίζει να αυξάνετε παραπέρα, η κβαντική κατάσταση του πηγαδιού πέφτει κάτω από την άκρη της ζώνης αγωγιμότητας στην περιοχή του Εκπομπού, βρισκόμενη πλέον στην περιοχή του χάσματος όπου δεν υπάρχουν επιτρεπόμενες ενεργειακές καταστάσεις με αποτέλεσμα το ρεύμα να φτάνει σε μια ελάχιστη τιμή (περιοχή 3). Τέλος, καθώς η τάση αυξάνεται κι άλλο το ρεύμα γίνεται πάλι πολύ μεγάλο (περιοχή 4). Το υψηλό ρεύμα στην περιοχή 4 οφείλεται σε ρεύμα θερμιονικής εκπομπής που διαρρέεται πάνω από τα φράγματα δυναμικού μιας και η τάση είναι τόσο υψηλή ώστε το δυναμικό των φραγμάτων να έχει τραβηχτεί κάτω από το ενεργειακό επίπεδο Fermi του Εκπομπού.



Εικόνα 2.2.8 – Ζώνη Αγωγιμότητας ενός τυπικού RTD σε τέσσερες ενδεικτικές τιμές εφαρμοζόμενης τάσης

Υπάρχουν όμως και περιπτώσεις όπου η διέλευση των ηλεκτρονίων από το σύστημα του διπλού φραγμού δεν γίνεται επ' ακριβώς μέσο του φαινομένου συντονισμού. Για να έχουμε διέλευση συντονισμού πρέπει οι κυματοσυναρτήσεις των ηλεκτρονίων να είναι σύμφωνες μεταξύ τους. Αυτό σημαίνει πως όλες οι διαδικασίες σκέδασης περιγράφονται από μια κυματοσυνάρτηση από την αρχή έως το τέλος του συστήματος. Η προηγούμενη περιγραφή αντιστοιχεί στην περίπτωση αυτή (αγνοώντας περιπτώσεις σκέδασης).

Αν υπάρχουν ισχυρά φαινόμενα σκέδασης όπως από κρυσταλλικές ατέλειες, αλληλεπίδραση με το πλέγμα (φωνόνια), ξένες προσμίξεις ή ακόμα και από ηλεκτρόνια μέσα στο πηγάδι, η διαδικασία διέλευσης αντιστοιχεί σε διαδικασία δύο βημάτων. Αρχικά έχουμε διέλευση από τον Εκπομπό διαμέσου του πρώτου φράγματος δυναμικού. Στην συνέχεια παρατήρηση σημαντικών διαδικασιών σκέδασης που οδηγούν σε διέλευση από ψευδοστάσιμες καταστάσεις του πηγαδιού διαμέσου του δεύτερου φράγματος δυναμικού σε ελεύθερα ηλεκτρόνια στον Συλλέκτη (Εικόνα 2.2.9).

Το κβαντικό πηγάδι φιλοξενεί ηλεκτρόνια που έχουν διέλθει από τον Εκπομπό για ένα συγκεκριμένο χρονικό διάστημα, τ_{dwell}, που είναι χαρακτηριστικό του συστήματος. Εν γένει το τ_{dwell} προκύπτει από την αρχή απροσδιοριστίας και είναι αντιστρόφως ανάλογο του Full Width at Half Maximum, Γ, του συντελεστή διέλευσης κατά τον συντονισμό ($\tau_{dwell}=\hbar/\Gamma$) (Αναφορά [15], Section-2.3). Ο συντελεστής διέλευσης T(E) μπορεί να εκφραστεί στην μορφή που περιέχει το Γ ως (Αναφορά [15], Section-2.2.1):

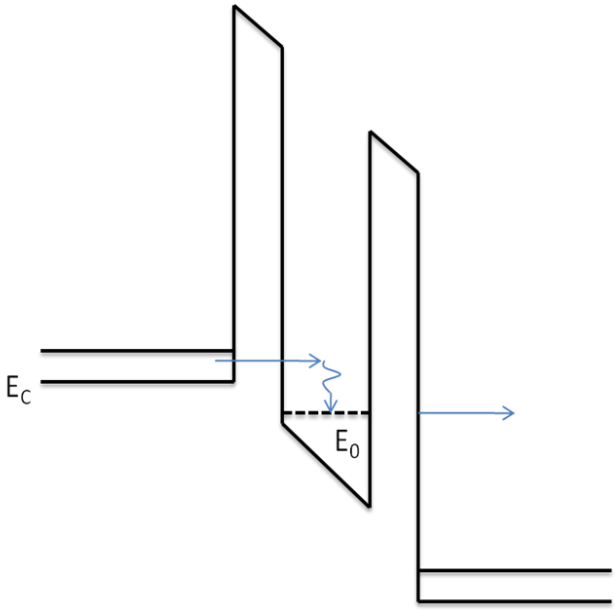
$$T(E) = \frac{\Gamma^2}{(E - E_0)^2 + \Gamma^2} \qquad (2.2.11)$$

Όπου E_0 είναι η ψευδοδέσμια κατάσταση του πηγαδιού. Βλέπουμε πως στον συντονισμό το T(E) γίνεται μονάδα κάτι που υποδηλώνει πως οι συντελεστές διέλευσης των δύο φραγμάτων δυναμικού είναι ίσοι μεταξύ τους. Οι M.Jonson και A.Grincwajg [16] εξέφρασαν την παραπάνω σχέση στην περίπτωση της διαδοχικής διέλευσης εισάγοντας έναν παράγοντα που επιτρέπει τυχαίες αλλαγές της φάσης της κυματοσυνάρτησης. Έτσι η παραπάνω σχέση μπορεί να γραφτεί και ως:

$$T(E) = \frac{\Gamma}{\Gamma_{tot}} \frac{\Gamma_{tot}^2}{(E - E_0)^2 + \Gamma_{tot}^2} \qquad (2.2.12)$$

Όπου $\Gamma_{tot} = \Gamma + \Gamma_s$ με Γ_s να εκφράζει την περίπτωση σκέδασης. Κατ αναλογία με τον χρόνο διέλευσης των ηλεκτρονίων μέσα από το πηγάδι, ο χρόνος στον οποίο παρατηρούνται φαινόμενα σκέδασης είναι $\tau_{SC} = \hbar / \Gamma_s$.

Αν φαινόμενα σκέδαση εμφανίζεται πιο συχνά (τ_{SC}) από αυτό το χρονικό διάστημα παραμονής στο πηγάδι ($\tau_{SC} < \tau_{dwell}$), τότε η διέλευση των ηλεκτρονίων γίνεται με διαδοχικό τρόπο.



Εικόνα 2.2.9 – Διαδοχική διέλευση

2.3- III-As και άλλα συστήματα

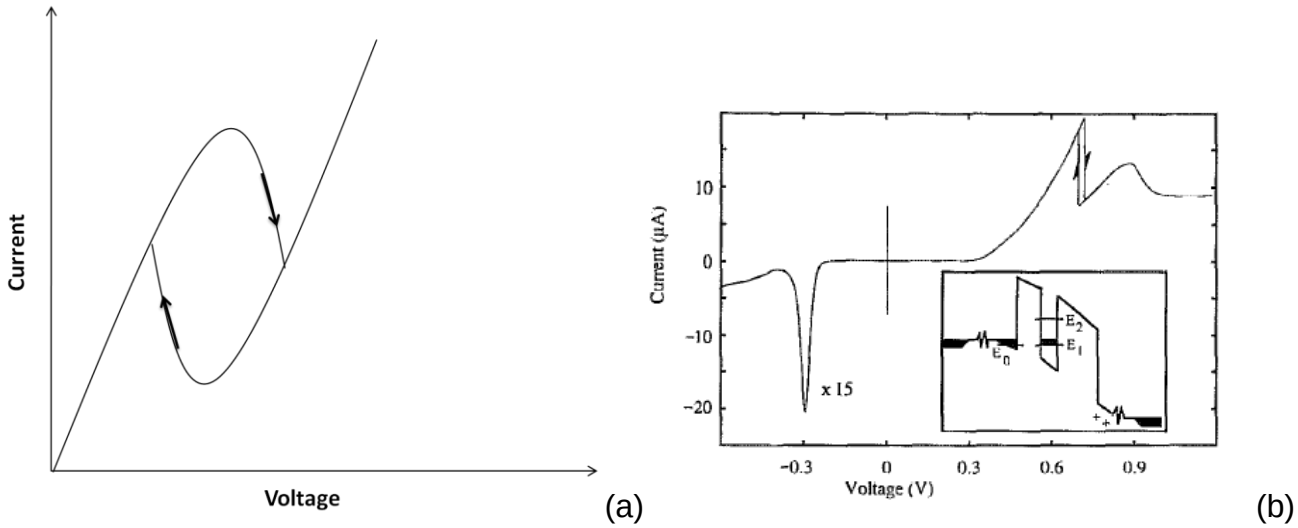
Στην περίπτωση των III-As DB-RTDs συστημάτων οι μελέτες και οι προσπάθειες που έχουν γίνει ως τώρα ξεκινούν από την δεκαετία του 1980. Τα σημαντικότερα συστήματα που έχουν κατασκευαστεί έχουν παρουσιάσει ξεκάθαρη Αρνητική Διαφορική Αντίσταση (NDR) με τυπικές τιμές του peak-to-valley current ratio (PVR) από 1 έως και 50 σε θερμοκρασία δωματίου. Με τον όρο peak-to-valley current ratio εννοούμε τον λόγο μεταξύ του ρεύματος στην τάση που ξεκινά ο συντονισμός με αυτού στην τάση που άρετε.

Το 1984 μια μελέτη σε δομή GaAs/AlGaAs έγινε η πρώτη παρατήρηση NDR φαινομένου σε θερμοκρασία δωματίου [2]. Οι PVR αναλογίες για θερμοκρασία δωματίου που παρατηρήθηκαν ήταν 1.3:1 και 4:1 σε θερμοκρασία 77^{o}K. Το ποσοστό του αλουμινίου ήταν περίπου 25%. Το 1990 επιχειρήθηκε η κατασκευή InAs/AlSb RTDs για την μελέτη τους σε θερμοκρασία

δωματίου [3]. Επίσης παρουσιάστηκε και σύγκριση των πειραματικών αποτελεσμάτων με ένα θεωρητικό μοντέλο υπολογισμού των I-V χαρακτηριστικών δομών διέλευσης συντονισμού. Τα αποτελέσματα έδειξαν διαφοροποιήσεις της τάξεως του 20%. Οι πειραματικές NDR κυμαίνονταν από 2.7 έως 3.5 (σε διαφορετικά devices). Την επόμενη χρονιά έγινε η παρατήρηση NDR φαινομένων σε δομή $In_{0.53}Ga_{0.47}As/AlAs/InAs$ RTD με PVR της τάξης του 50:1σε θερμοκρασία δωματίου [4]. Το 1993 παρατηρήθηκε διστάθεια του ρεύματος σε InAs/AlGaSb RTD δομή που αποδόθηκε στην ταυτόχρονη συσσώρευση ηλεκτρονίων και οπών στις αντίστοιχες περιοχές [5].

2.4- Φαινόμενα Διστάθειας, Πολυστάθειας, Υστέρησης

Τα DB-RTDs συχνά παρουσιάζουν φαινόμενα υστέρησης του ρεύματος στην περιοχή της NDR ανάλογα με την φορά της εφαρμοζόμενης τάσης. Αν για παράδειγμα η εφαρμογή της εξωτερικής τάσης έχει αυξητικό χαρακτήρα τότε η I-V χαρακτηριστική της διόδου θα έχει την μορφή της Εικόνας 2.2.7. Έχει παρατηρηθεί όμως, πως αν έπειτα από την μέτρηση του ρεύματος με τον αυξητικό χαρακτήρα, επιχειρήσουμε να μειώσουμε την τάση επαναφέροντάς την στην αρχική της τιμή τότε η I-V χαρακτηριστική που προκύπτει έχει διαφορετική μορφή (Εικόνα 2.4.1, σχηματική απεικόνιση) με περιοχές διστάθειας του ρεύματος (για μια τάση αντιστοιχούν δύο τιμές του ρεύματος).

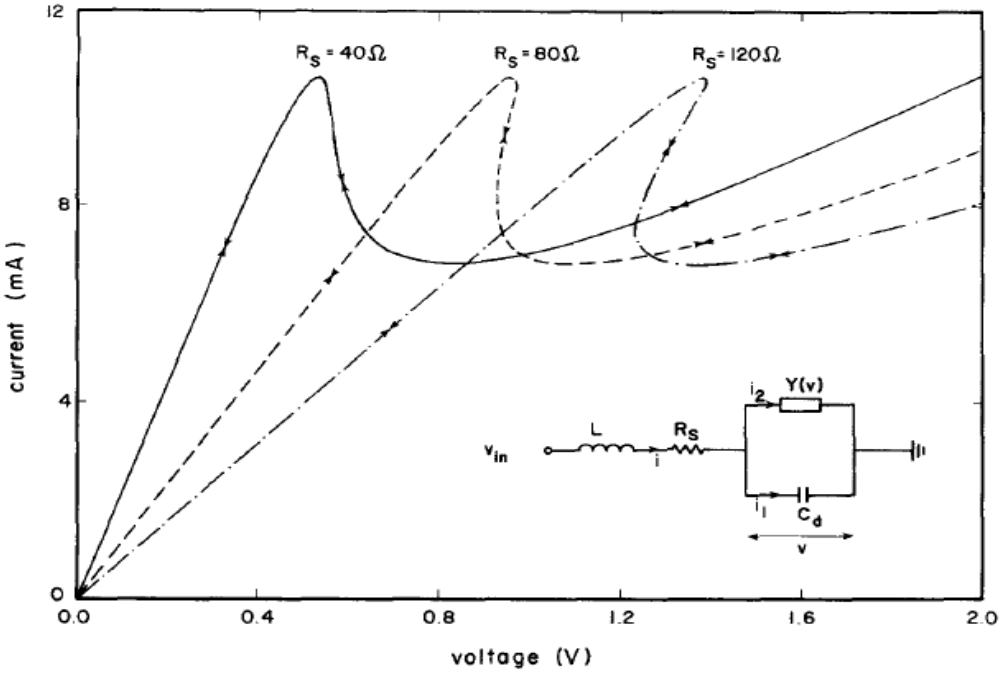


Εικόνα 2.4.1 – (a): Σχηματική απεικόνιση διστάθειας του ρεύματος και (b) I-V χαρακτηριστική ασύμμετρου DB-RTD στους 2^oK [18] .

Μια απλή εξήγηση για την ύπαρξη αυτής της είναι η εξωτερική σειριακή αντίσταση που εφαρμόζεται στη διάταξη είτε στα σημεία των επαφών είτε στο εξωτερικό κύκλωμα με το οποίο γίνεται η μέτρηση.

Η διστάθεια του ρεύματος λόγο της εξωτερικής αντίστασης είναι πολύ κοινή για τις διατάξεις με παρουσία NDR, χαρακτηριστικό όχι μόνο των RTDs. Αναφέρεται ως *εξωγενής διστάθεια* για να ξεχωρίζει από μια άλλη μορφή διστάθειας(την *ενδογενή)*. Στην Εικόνα 2.4.2 βλέπουμε πως όσο αυξάνεται η τιμή της εξωτερικής αντίστασης, η I-V χαρακτηριστική τείνει να εμφανίσει περιοχές τριστάθειας του ρεύματος μιας και σε μια εφαρμοζόμενη τάση είναι δυνατόν να αντιστοιχούν τρείς τιμές του ρεύματος (S-shaped NDR) [17]. Η παρατήρηση τέτοιων περιπτώσεων στο εργαστήριο είναι αρκετά δύσκολη υπόθεση μιας και απαιτούνται ειδικά εξωτερικά κυκλώματα και κατάλληλη διαχείριση της εφαρμοζόμενης τάσης. Η αύξηση της τιμής της

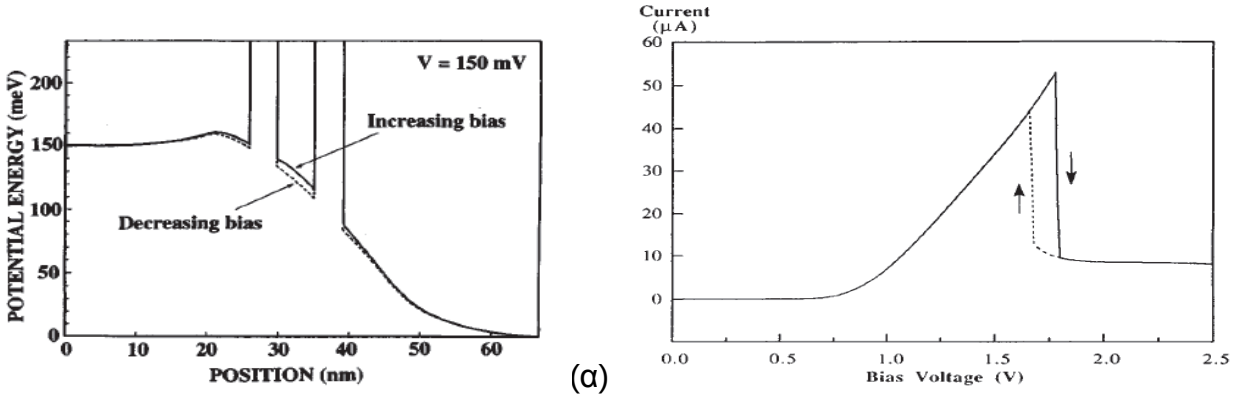
εξωτερικής αντίστασης συνεπάγει μείωση του ρεύματος που εισέρχεται στο παράλληλο κύκλωμα (στο εσωτερικό της Εικόνας 2.4.2) που περιέχει την αντίστροφη εμπέδηση, Y(v), που περιγράφει τα ενδογενή χαρακτηριστικά του RTD και τον πυκνωτή C_d που περιγράφει την χωρητικότητα της διάταξης. Συνέπεια αυτής της μείωσης είναι η μετάβαση από περιοχές διστάθειας του ρεύματος σε περιοχές τριστάθειας όπου πλέον δεν παρατηρείται αρνητική διαφορική αντίσταση.



Εικόνα 2.4.2 – Επίδραση της εξωτερικής σειριακής αντίστασης στα I-V χαρακτηριστικά μιας RTD δομής.

Με άλλα λόγια, η ύπαρξη μιας εξωτερικής σειριακής αντίστασης σε μια RTD διάταξη δημιουργεί μια πτώση τάσης στα άκρα της (υποθέτοντας πως η μια πλευρά της διάταξης είναι στην γείωση).

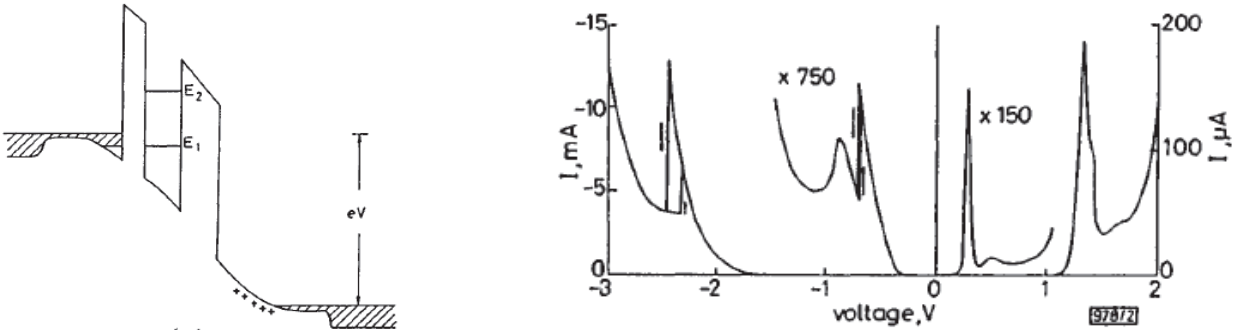
Η ενδογενής διστάθεια, από την άλλη, οφείλεται στην ενδυνάμη αύξηση και προσαύξηση του φορτίου στην περιοχή του κβαντικού πηγαδιού. Η επιφανειακή συγκέντρωση των ηλεκτρονίων που έχουν συσσωρευτεί στο πηγάδι είναι ανάλογη με την πυκνότητα του ρεύματος διέλευσης μέσο συντονισμού και τον χρόνο στον οποίο τα ηλεκτρόνια παραμένουν στο πηγάδι (τ_{dwell}). Αυτό σημαίνει πως η επιφανειακή αυτή πυκνότητα εξαρτάται, αλλά και επιδρά στο ρεύμα. Η ηλεκτροστατική επίδραση μεταξύ των ηλεκτρονίων που βρίσκονται στο πηγάδι δημιουργεί μεταβολή της ζώνης αγωγιμότητας στο πηγάδι καθώς και κοντά στα φράγματα δυναμικού. Αποτέλεσμα αυτού είναι η ενεργειακή μετατόπιση των δέσμιων καταστάσεων του πηγαδιού που με την σειρά της προκαλεί μεταβολή του ρεύματος. Έτσι δημιουργείται η πιθανότητα υπάρξεις συντονισμού μετατοπισμένο ως προς τον προηγούμενο.



(α) (β)

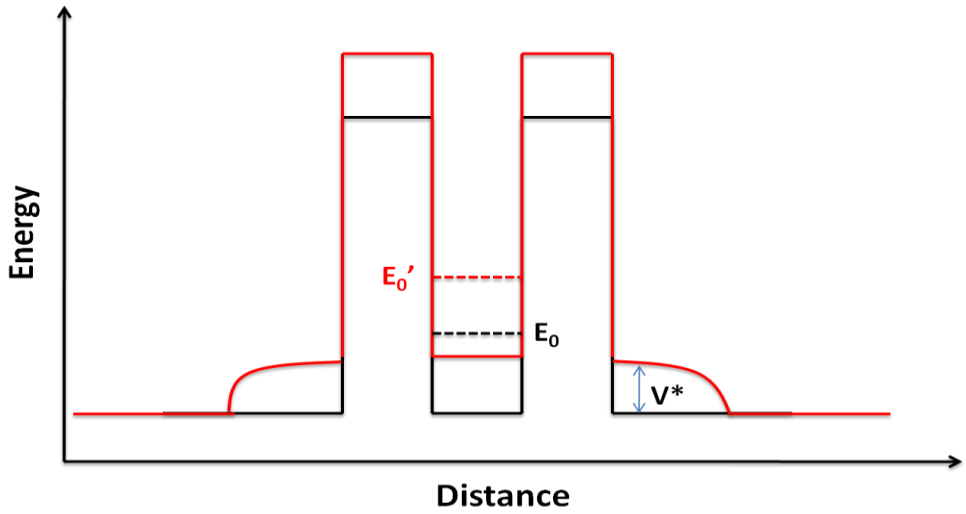
Εικόνα 2.4.3 – Παρατήρηση ενδογενούς διστάθειας εξαιτίας της συσσώρευσης ηλεκτρονίων στο πηγάδι [20(α),19(β)].

Για να επιβεβαίωση των παραπάνω οι E.S.Alves, et al [11] και M.L.Leadbeater, et al [12] κατασκεύασαν διατάξεις RTD με ασύμμετρα φράγματα δυναμικού εκμεταλλευόμενοι έτσι τους διαφορετικούς χρόνους παραμονής των ηλεκτρονίων στο πηγάδι ανάλογα με την φορά της εφαρμοζόμενης τάσης. Όπως φαίνεται και από την Εικόνα 2.4.4 κατά την θετική φορά της τάσης δεν παρατηρήθηκε κάποιο φαινόμενο υστέρησης μιας και τα ηλεκτρόνια παραμένουν για μικρότερο χρονικό διάστημα στο πηγάδι εξαιτίας του στενότερου φράγματος δυναμικού. Αντίθετα, κατά την αρνητική φορά της τάσης, φαινόμενα υστέρησης ήταν αρκετά εμφανή εξαιτίας του μεγαλύτερου χρόνου παραμονής των ηλεκτρονίων στην περιοχή του πηγαδιού προερχόμενη από το φράγμα δυναμικού με το μεγαλύτερο πλάτος.



Εικόνα 2.4.4 – RTD δομή με ασύμμετρα φράγματα δυναμικού [11,12].

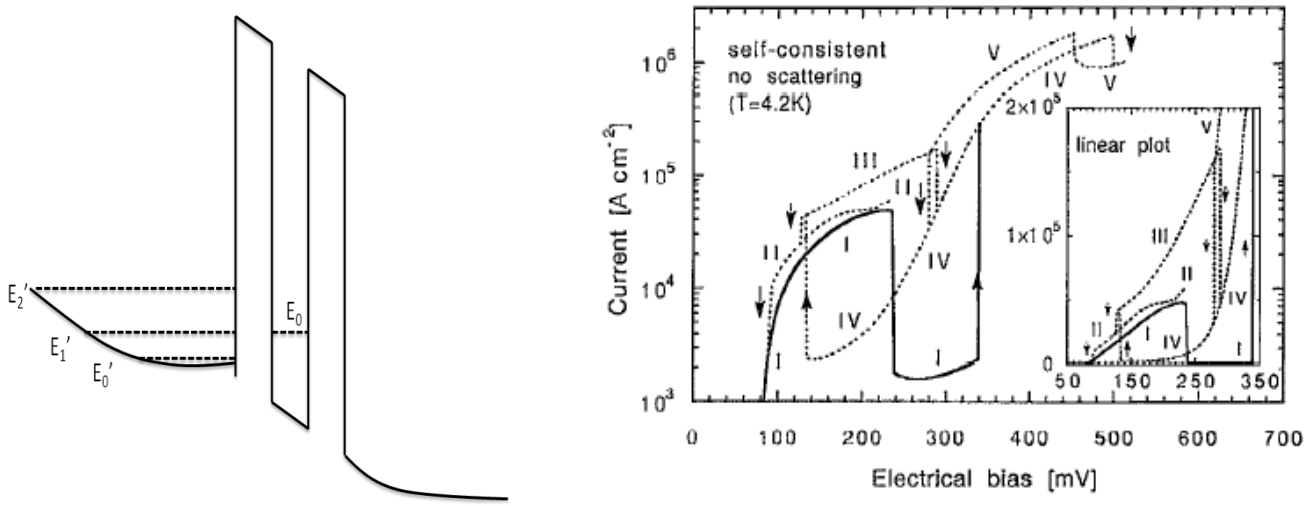
Επίσης, έχει παρατηρηθεί πως η προσθήκη ενός ενδογενούς (ή χαμηλότερης συγκέντρωσης δοτών) στρώματος ημιαγωγού (spacer) πριν από το πρώτο και(ή) μετά από το δεύτερο φράγμα δυναμικού επιδρά στα παρατηρούμενα φαινόμενα υστέρησης.



Εικόνα 2.4.5 – Σχηματική αναπαράσταση RTD δομής με προσθήκη στρώματος ημιαγωγού χαμηλότερης πυκνότητας εμπλουτισμού πριν και μετά από το πρώτο και το δεύτερο φράγμα δυναμικού αντίστοιχα.

Η προσθήκη των στρωμάτων ημιαγωγού χαμηλότερης πυκνότητας εμπλουτισμού (spacers) έχει σαν αποτέλεσμα την ενεργειακή ανύψωση της ζώνης αγωγιμότητας μιας και ηλεκτρόνια διαχέονται από τον Εκπομπό (υψηλότερος εμπλουτισμός) προς το spacer (χαμηλότερος εμπλουτισμός) δημιουργώντας μεταβολή του δυναμικού (αντίστοιχα και για την περιοχή του Συλλέκτη) πράγμα που συνεπάγει την ενεργειακή μεταβολή των ιδιοκαταστάσεων του πηγαδιού. Αύξηση του πλάτους των spacers συνεπάγει σμίκρυνση του βρόγχου υστέρησης [13]. Ένας πιθανός λόγος για τον οποίο μπορεί να συμβαίνει αυτό είναι το ότι η αύξηση του πλάτους των spacers συνεπάγει και περεταίρω ενεργειακή ανύψωση της ζώνης αγωγιμότητας κατά V*. Το δυναμικό V* έχει χαρακτήρα φράγματος για τα ηλεκτρόνια που φτάνουν από τον Εκπομπό. Αν δεν μπορούν να το ξεπεράσουν το παρατηρούμενο ρεύμα θα είναι μικρότερο σε σχέση με αυτό που θα είχαμε χωρίς τα spacers. Κατά συνέπεια από την Εξίσωση 2.2.11, η επιφανειακή πυκνότητα, σ_w, των ηλεκτρονίων στο πηγάδι θα είναι μικρότερη που συνεπάγει και μικρότερη μεταβολή των ιδιοκαταστάσεων του πηγαδιού εξαιτίας των ηλεκτροστατικών αλληλεπιδράσεων με αποτέλεσμα την μείωση των υστερητικών φαινομένων.

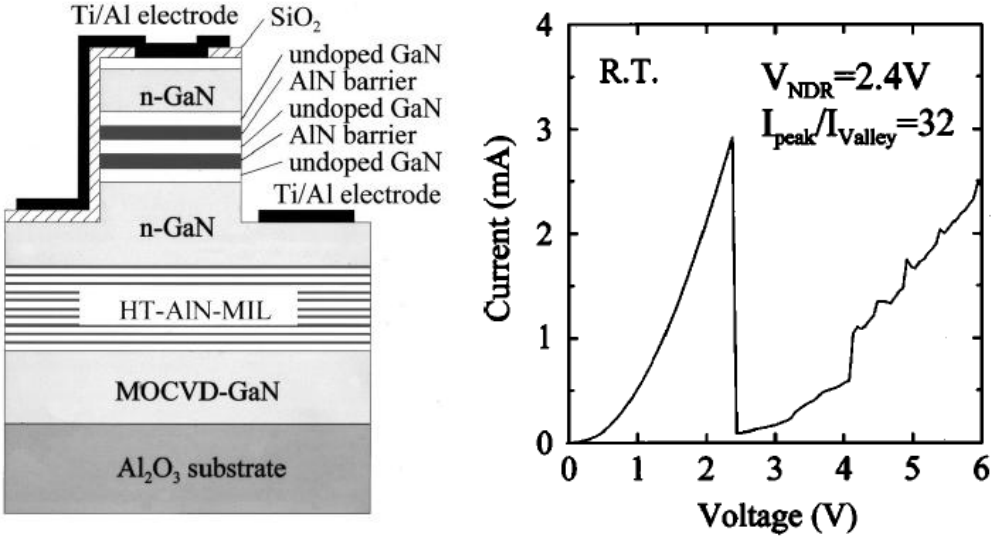
Τέλος θα αναφερθούμε σε περιπτώσεις πολλαπλής ευστάθειας του ρεύματος. Κατά την εφαρμογή εξωτερικής τάσης στα άκρα της διάταξης υπάρχει περίπτωση να δημιουργηθούν εικονικές δέσμιες καταστάσεις στην περιοχή του Εκπομπού, που προκαλούνται από την ανάκλαση ηλεκτρονίων στο πρώτο φράγμα δυναμικού. Η ύπαρξη αυτών των καταστάσεων είναι ικανή να προκαλέσει πολλαπλή ευστάθεια της αγωγιμότητας. Οι M.Wagner και H.Mizuta [14] σε μια προσπάθεια να κατανοήσουν τον ρόλο αυτών των δέσμιων καταστάσεων στην περιοχή του Εκπομπού έδειξαν πως η ύπαρξή τους επιτρέπει πολλές σταθερές λύσεις του δυναμικού συστήματος των συζευγμένων εξισώσεων Schrodinger-Poisson εξαιτίας της μεγάλης μεταβολής της τοπικής πυκνότητας καταστάσεων (LDOS), πράγμα που οδηγεί σε πολύ διαφορετικές τιμές της αγωγιμότητας.



Εικόνα 2.4.6 - Παρατήρηση πολλαπλής ευστάθειας του ρεύματος εξαιτίας του σχηματισμού ψευδοστάσιμων καταστάσεων πριν από το πρώτο φράγμα δυναμικού λόγο της εφαρμογής εξωτερικής τάσης [14].

2.5- Απόπειρες δημιουργίας III-N RTDs

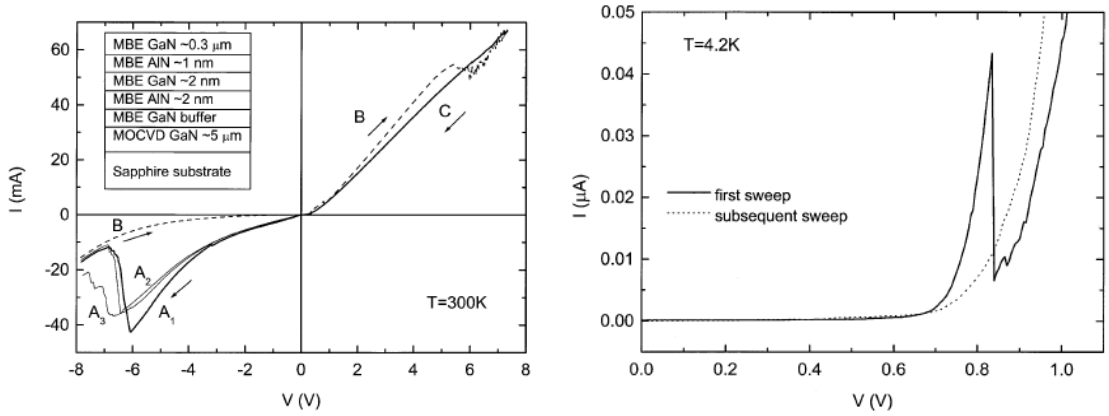
Οι πρώτες προσπάθειες, κατασκευής RTDs Νιτριδίων φαίνονται στην δημοσίευση [6]. Σε αυτήν, AlN/GaN DB-RTDs δημιουργήθηκαν πάνω σε (0001) Al_2O_3 υπόστρωμα με την MBE μέθοδο χρησιμοποιώντας μια RF-Plasma πηγή αζώτου. Τα AlN/GaN DB-RTDs σχεδιάστηκαν έτσι ώστε να έχουν πάχος κβαντικού πηγαδιού GaN ίσο με 3-ML και πάχος φραγμάτων AlN ίσο με 4-ML τα οποία και βρίσκονται ανάμεσα σε Si-doped n-τύπου GaN. Οι χαρακτηριστικές IV (Εικόνα 2.5.1) φαίνεται να εμφάνισαν Αρνητική Διαφορική Αντίσταση (NDR) σε θερμοκρασία δωματίου, παρατηρούμενη στα 2.4V με μέγιστο ρεύμα 2.9mA που αντιστοιχεί σε 180A/cm^2 και peak-to-valley αναλογία ρεύματος ίση με 32.



Εικόνα 2.5.1 –Δομή της διάταξης και χαρακτηριστική ρεύματος-τάσης της αναφοράς [6].

Γεγονός είναι όμως πως η εφαρμογή της τάσης φαίνεται να έγινε μόνο μια φορά χωρίς να γίνει κάποια προσπάθεια ώστε να φανεί αν αυτή η I-V συμπεριφορά μπορεί να επαναληφθεί. Σημαντικό είναι και το γεγονός πως σε αυτή τη προσπάθεια δεν παρατηρήθηκε NDR σε αρνητικές τάσεις πράγμα που προσδιοριστικέ στην ασυμμετρία του δυναμικού λόγο του πιεζοηλεκτρικού πεδίου και/ή στη επανορθωτική ιδιότητα του κάτω ηλεκτροδίου, όπως επίσης πως η μετάβαση της διάταξης στην κατάσταση χαμηλής αγωγιμότητας ήταν πολύ απότομη.

Εν συνεχεία παρουσιάστηκαν τα αποτελέσματα I-V μετρήσεων σε GaN/AlN DB-RTD δομές [7], παρόμοιες με αυτές της αναφοράς [6]. Μια εικόνα για την I-V συμπεριφορά σε διαφορετικές διαδοχικές πολώσεις είναι η επόμενη (Εικόνα 2.5.2, από την δημοσίευση)



Εικόνα 2.5.1 – I-V χαρακτηριστική σε GaN/AlN DB-RTD δομές [7].

Οι πρώτες τρεις σαρώσεις (A1, A2, A3) δείχνουν χαρακτήρα φαινομένου συντονισμού σε τάσεις από -6V έως και -7V, με την τέταρτη να επιστρέφει από τα -8V στα 0V χωρίς την παρατήρηση κάποιας απότομης αλλαγής του ρεύματος. Η τέταρτη σάρωση, συνεχίζοντας από τα 0V στα 7V εμφάνισε κάποια πτώση στο ρεύμα στα 5V περίπου. Τέλος η πέμπτη σάρωση από τα 7V στα 0V έδειξε σχεδόν ωμική συμπεριφορά. Βλέπουμε λοιπόν την εμφάνιση μιας προοδευτικής NDR η οποία μετά από τρεις προσπάθειες εξαφανίζεται. Χαρακτηριστική είναι η υψηλή τάση που χρειάστηκε για την παρατήρηση των παραπάνω, συγκριτικά με την διαφορά χάσματος AlN και GaN. Επίσης η I-V συμπεριφορά σε χαμηλές θερμοκρασίες είναι τελείως διαφορετική, παρόμοια με αυτή της αναφοράς [6].

Τα ποιο ενδιαφέρων αποτελέσματα φάνηκαν σε μια μελέτη πάνω σε GaN/AlGaN DB-RTD πάνω σε bulk (0001) GaN πολύ χαμηλής πυκνότητας ατελειών (TD~10^2 cm^{-2}) [8]. Οι I-V χαρακτηριστικές των διαφορετικών διατάξεων που χρησιμοποιήθηκαν (Εικόνα 2.5.3) εμφάνισαν περιοχές φαινόμενης αρνητικής διαφορικής αντίστασης. Στην προσπάθειά τους να επαναφέρουν την τάση στην αρχική της τιμή η αγωγιμότητα και των τεσσάρων διατάξεων που αναφέρονται έδειξε μείωση της αγωγιμότητας στην περιοχή της NDR, κάτι που αποδόθηκε στην πιθανή ύπαρξη κάποιας μορφής παγίδευσης των φορέων κατά την μέτρηση στην ορθή φορά της τάσης.

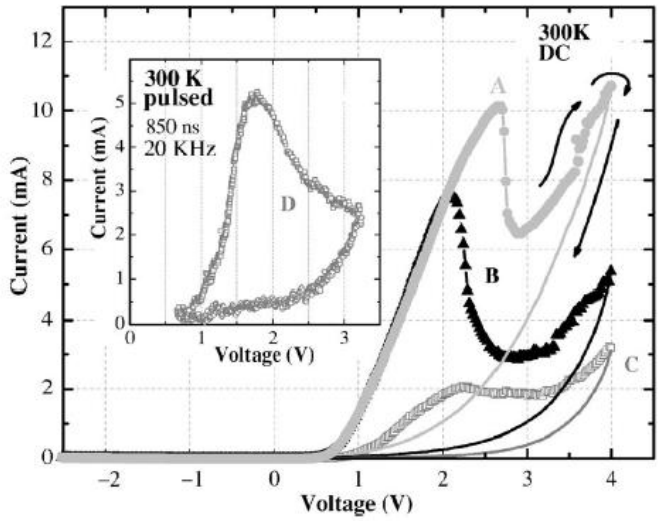


FIG. 2. Room temperature *IV* characteristics of three different devices A, B, and C that are all in close proximity of 400 μm to each other. Voltage (for definition see Fig. 1) is traced from −4 to +4 V and then retraced immediately. For better visibility the retraces are drawn as straight lines and the current of device C is multiplied by 5 in the figure. All these mesas are nominally identical and 6 μm in diameter. The inset shows another device D that has been measured in a pulsed mode.

Εικόνα 2.5.3 – I-V χαρακτηριστική σε GaN/AlGaN DB-RTD [8].

Επίσης, αναφέρθηκε πως μπορεί να γίνει επανάκτηση της NDR (υστερώντας σε ρεύμα, περίπου κατά 10 φορές λιγότερο) εκθέτοντας τις δομές σε θερμοκρασία 350 ^{o}C σε ατμόσφαιρα N_2. Τέλος η ίδια συμπεριφορά παρατηρήθηκε και σε συνεχεία αλλά και σε παλμικές μετρήσεις με την παρουσία εξαιρετικά υψηλής πυκνότητας ρεύματος (10^5 A/cm^2). Γι' αυτόν τον λόγο χρησιμοποιήθηκαν δίοδοι επιφάνειας 6x6 μm^2

Άλλες μελέτες επικεντρώθηκαν σε διαφορετική μέθοδο ανάπτυξης των στρωμάτων. Συγκεκριμένα μια μελέτη βασίστηκε στην ανάπτυξη AlN/GaN DB-RTDs με την μέθοδο της Metal-Organic Chemical Vapor Deposition (MOCVD) που έδειξε να είναι ικανή να επιτύχει υψηλής ποιότητας AlN και GaN επιταξιακές επιφάνειες [9].

2.6 - Αναφορές:

1. R. Tsu and L. Esaki, Tunneling in a finite superlattice, *Appl Phys. Lett*, 22, 562,1973.
2. T. J. Shewchuk, P. C. Chapin, and P. D. Coleman, W. Kopp, R. Fischer, and H. Morkoc, Appl. Phys. Lett. 46 (5), 1 March 1985
3. J. R. Soderstrom, E. R. Brown, C. D. Parker, and L. J. Mahoney, J. Y. Yao and T. G. Andersson, T. C. McGill, Appl. Phys. Lett. 58 (3), 21 January 1991
4. Jurgen H. Smet, Tom P. E. Broekaert, and Clifton G. Fonstad J. Appt. Phys., Vol. 71, No. 5, 1 March 1992.
5. D. H. Chow and J. N. Schulman Appl. Phys. Lett., Vol. 64, No. 1, 3 January 1994
6. Akihiko Kikuchi Ryo Bannai, και Katsumi Kishino (Appl. Phys. Lett., Vol. 81, No. 9, 26 August 2002)
7. A.E. Belyaev, O. Makarovsky, D.J. Walker, L. Eaves, C.T. Foxon, S.V. Novikov, L.X. Zhao, R.I. Dykeman, S.V. Danylyuk, S.A. Vitusevich, M.J. Kappers, J.S. Barnard, C.J. Humphreys, Physica E 21 (2004) 752 – 755

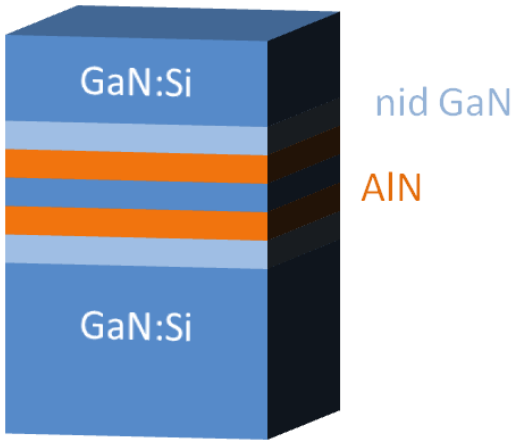
8. S. Golka, C. Pflügl, W. Schrenk, and G. Strasser, C. Skierbiszewski, M. Siekacz, I. Grzegory, and S. Porowski, Appl. Phys. Lett. **88**, 172106 (2006)
9. C. Bayram, Z. Vashaei, and M. Razeghi Appl. Phys. Lett. **96**, 042103 (2010).
10. D. H. Chow and J. N. Schulman Appl. Phys. Lett. 64 (I), 3 January 1994
11. E. S. Alves, L. Eaves, M. Henini, O. H. Hughes, M. L. Leadbeater, F. W. Sheard, G. A. Toombs, G. Hill and M. A. Pate, Observation of intrinsic bistability in resonant tunnelling devices, *Electron. Lett, 2A*, 1190, 1988.
12. M. L. Leadbeater, E. S. Alves, L. Eaves, M. Henini, O. H. Hughes, F. W. Sheard and G. A. Toombs, Charge build-up and intrinsic bistability in an asymmetric resonant-tunnelling structure, *Semicond. Sci. TechnoL,* 3, 1060,1988.
13. M. M. Vrubel', V. M. Borzdov, and F. F. Komarov Tech. Phys. Lett. **23** (11), November 1997
14. M. Wagner and H. Mizuta Appl. Phys. Lett. 63, 2268 (1993)
15. Physics and applications of RTD – H.Mizuta and T.Tanoue
16. M. Johnson and A. Grincwajg, Effect of inelastic scattering on resonant and sequential tunneling in double barrier heterostructures, *Appl. Phys. Lett*, 51,1729,1987.
17. B. Jogai - EXTRINSIC TRISTABILITY AS THE CAUSE OF BISTABILITY IN RTDs, *Superlattices and Microstructures, Vol. 11, No. 4, 1992*
18. A.D. Martian, M.L.F. Lerch and P.E. Simmonds "Observation of intrinsic tristability in a Resonant Tunneling Structure" , *Appl. Phys. Lett. Vol.64, No.10, 7 March 1994.*
19. C. J. Goodings, H. Mizuta and J. R. A. Cleaver, Electrical studies of charge build-up and phonon-assisted tunnelling in double-barrier materials with thick spacer layers, /. *Appl. Phys.*, 75, 2291,1994.
20. H. Mizuta and C. J. Goodings, Transient quantum transport simulation, based on the statistical density matrix, /. *Phys.: Condens. Matter,* 3, 3739, 1991

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3ο

Πειραματικά αποτελέσματα

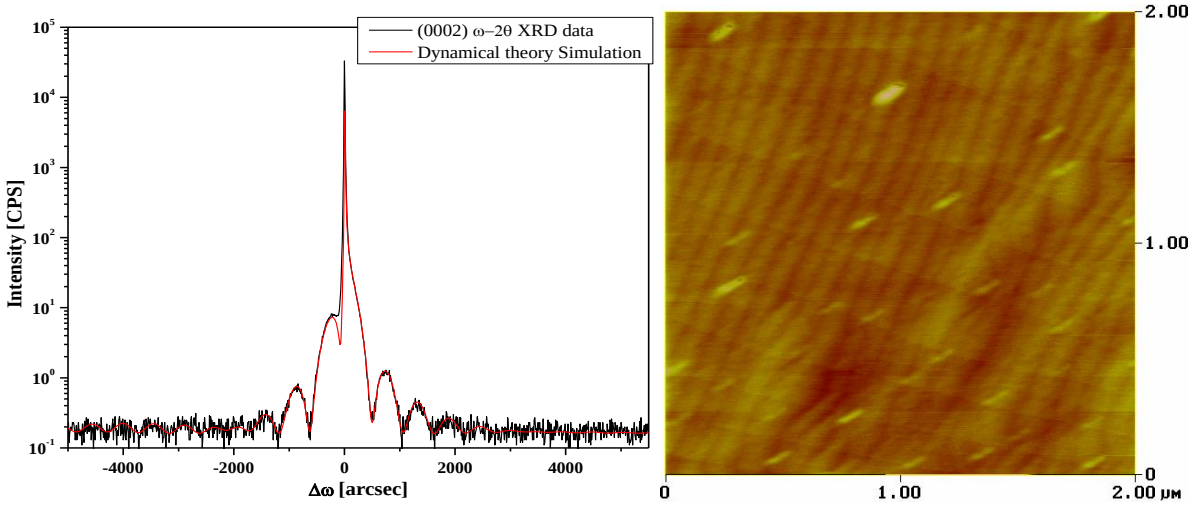
3.1 – Εισαγωγή

Με την μέθοδο “πλάσματος υποβοηθούμενης επίταξης με μοριακές δέσμες” (RF-MBE) αναπτύχθηκαν δομές διπλού φράγματος δυναμικού AlN/GaN σε συνήθεις συνθήκες ανάπτυξης σε ψευδοϋποστρώματα GaN πολικότητας (0001)/sapphire και πυκνότητας νηματικών εξαρθρώσεων της τάξεως του 10^8 cm^{-2}.



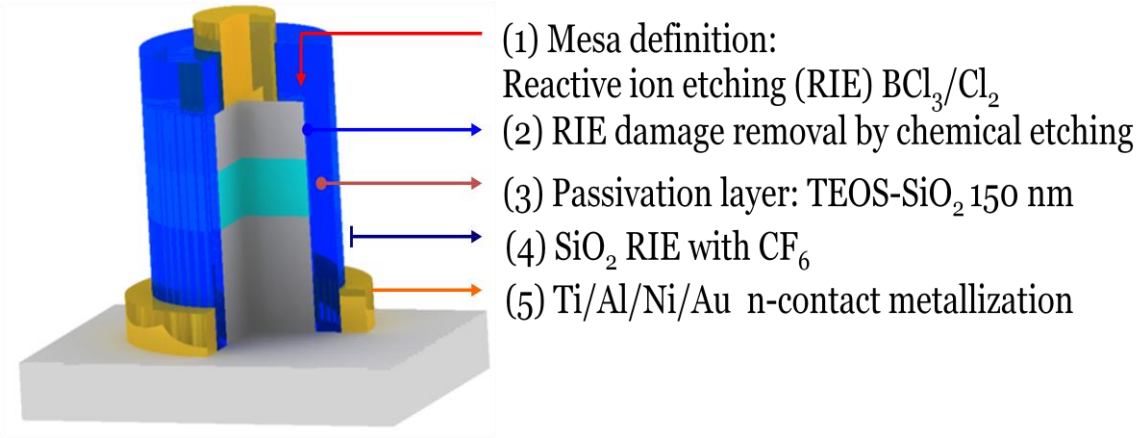
Εικόνα 3.1.1 – Σχηματική απεικόνιση RTD δομών AlN/GaN διπλού φράγματος δυναμικού.

Αναπτύχθηκαν δομές με διαφορετικά πάχη AlN φραγμάτων δυναμικού, από 1 έως 3 nm, διαφορετικά πάχη GaN κβαντικών πηγαδιών, από 1 έως 3 nm με την προσθήκη ή μη, μη εμπλουτισμένων GaN περιοχών (spacers) πριν και μετά από το πρώτο και το δεύτερο φράγμα δυναμικού αντίστοιχα.
Οι επιταξιακές ετεροδομές που επιτεύχθηκαν εμφάνισαν υψηλής ποιότητας κρυσταλλικά και μορφολογικά χαρακτηριστικά όπως φαίνεται και από την Εικόνα 3.1.2. Σε αυτήν βλέπουμε τα δεδομένα Περίθλασης Ακτίνων Χ (XRD) [σάρωση ω-2θ γύρω από την (0002) GaN κορυφή Bragg] σε μια ετεροδομή AlN/GaN διπλού φράγματος δυναμικού και η σύγκρισή τους με την θεωρητική πρόβλεψη, υπολογισμένη με βάση την θεωρία Δυναμικής Περίθλασης ακτίνων-Χ, για την “ονομαστική δομή”. Στην ίδια εικόνα παρουσιάζεται και η μικρογραφία της επιφανειακής μορφολογίας, ληφθείσα μέσο της Μικροσκοπίας Ατομικής Δύναμης (AFM) σε μια επιφάνεια 2x2 μm^2 όπου παρατηρούμε μικρή τραχύτητα της επιφάνειας με RMS τιμή ίση με 0.5nm.

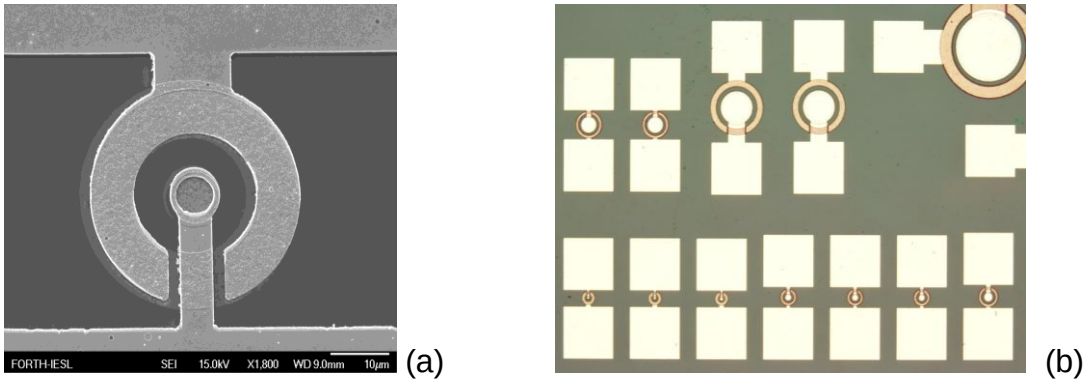


Εικόνα 3.1.2 – XRD και AFM αποτελέσματα ετεροδομών AlN/GaN διπλού φράγματος δυναμικού.

Η υλοποίηση των διατάξεων (διόδων) έγινε με συνήθεις τεχνικές σχηματοποίησης, με ξηρή χάραξη και αδρανοποίηση των πλευρικών περιοχών με την εναπόθεση Διοξειδίου του Πυριτίου (SiO_2). Η σχηματική περιγραφή της διαδικασίας σχηματοποίησης και της δομής των κατασκευασθέντων διόδων, παρουσιάζεται στην Εικόνα 3.1.3

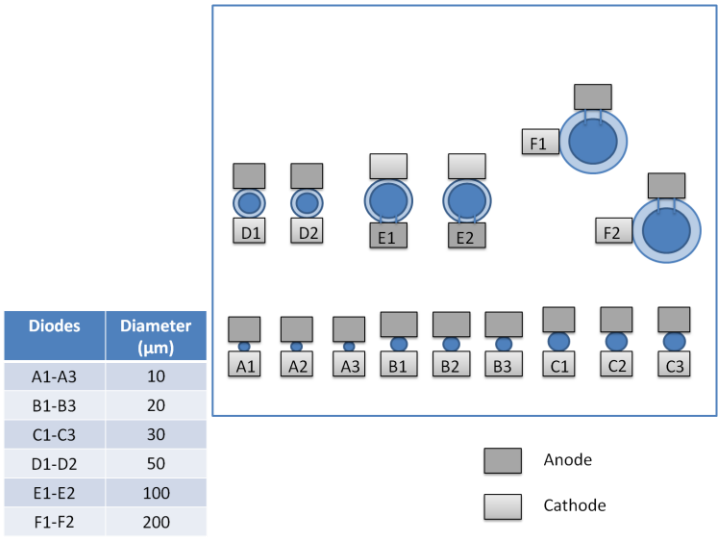


Εικόνα 3.1.3 – Περιγραφή διαδικασίας κατασκευής των διοδικών διατάξεων (processing).



Εικόνα 3.1.4 – Απεικόνιση μιας διόδου 10μm (SEM) και μιας περιόδου (φωτογραφεία από μικροσκόπιο).

Τα δείγματα που κατασκευάστηκαν περιέχουν κατά μέσο όρο 30 όμοιες περιόδους, με την κάθε περίοδο να περιέχει 15 διόδους διαφορετικής διαμέτρου. Μια σχηματική αναπαράσταση μιας περιόδου είναι αυτή που φαίνεται στην Εικόνα 3.1.5. Όπως φαίνεται και στην παρακάτω εικόνα η διάμετρος των διόδων ποικίλει από 10μm έως και 200μm.



Diodes	Diameter (μm)
A1-A3	10
B1-B3	20
C1-C3	30
D1-D2	50
E1-E2	100
F1-F2	200

Εικόνα 3.1.5 – Σχηματική απεικόνιση μιας περιόδου.

Στην Εικόνα 3.1.4 (a) φαίνεται η επιφανειακή όψη μιας διόδου 10μm με εμφανείς τις επαφές της ανόδου (κάθετη γκρι περιοχή προς την περιοχή της διόδου) και της καθόδου(γκρι περιοχή περιφερειακά της διόδου). Η εικόνα έχει παρθεί με την βοήθεια Μικροσκοπίου Σάρωσης Ηλεκτρονίων (**S**canning **E**lectron **M**icroscopy). Η Εικόνα 3.1.4 (b) περιέχει την όψη μιας περιόδου ενός δείγματος με εμφανείς τις διόδους διαφορετικών διαμέτρων. Μια όμοια σχηματική απεικόνιση αυτής φαίνεται και στην Εικόνα 3.1.5.

3.2 – Περιγραφή διαδικασιών και περιπτώσεις δομών

Οι μετρήσεις που πραγματοποιήθηκαν έγιναν υπό χαμηλό φωτισμό, σε θερμοκρασία δωματίου (περίπου 25^{o}C ελεγχόμενο από A/C). Πραγματοποιήθηκαν μετρήσεις συνεχούς (DC) σάρωσης της τάσης, καθώς και παλμικές μετρήσεις σάρωσης τάσης. Στην δεύτερη περίπτωση οι παλμοί είχαν διάρκεια 50ms, και χρονική απόσταση 250ms.

3.3 – Αποτελέσματα μετρήσεων

a) Περιπτώσεις σταδιακής ελάττωσης της αγωγιμότητας

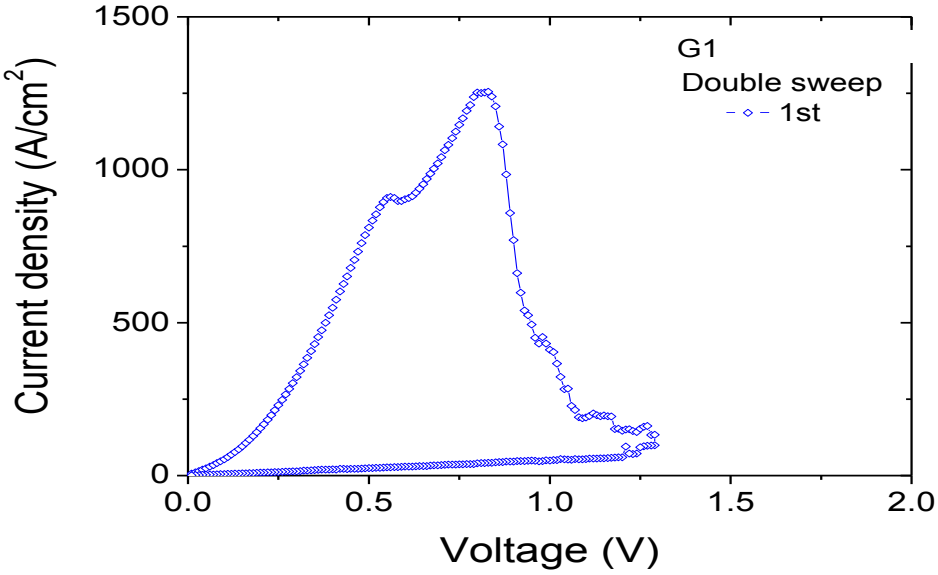
Τα πρώτα αποτελέσματα που θα παραθέσουμε αναφέρονται σε διόδους διαφορετικών διαμέτρων (από 10μm έως 100μm) και αντιστοιχούν σε δομές παρόμοιες με αυτή της Εικόνας 3.3.1 την οποία και θα αναφέρουμε σαν Δομή Α. Η σχηματική αναπαράσταση της ετεροδομής, στην περίπτωση αυτή, φαίνεται στην Εικόνα 3.3.1. Το πηγάδι GaN έχει πλάτος ~3nm, ενώ τα φράγματα AlN ~1nm.

25nm **GaN** (10^{19}cm^{-3} n-type doping)
1nm **AlN** (NID) BARRIER
3nm **GaN** (NID) WELL
1nm **AlN** (NID) BARRIER
100nm **GaN** (10^{19}cm^{-3} n-type doping)
GaN (0001) Substrate

Εικόνα 3.3.1 – Σχηματική απεικόνιση ετεροδομής AlN/GaN DB-RTD (Δομή Α).

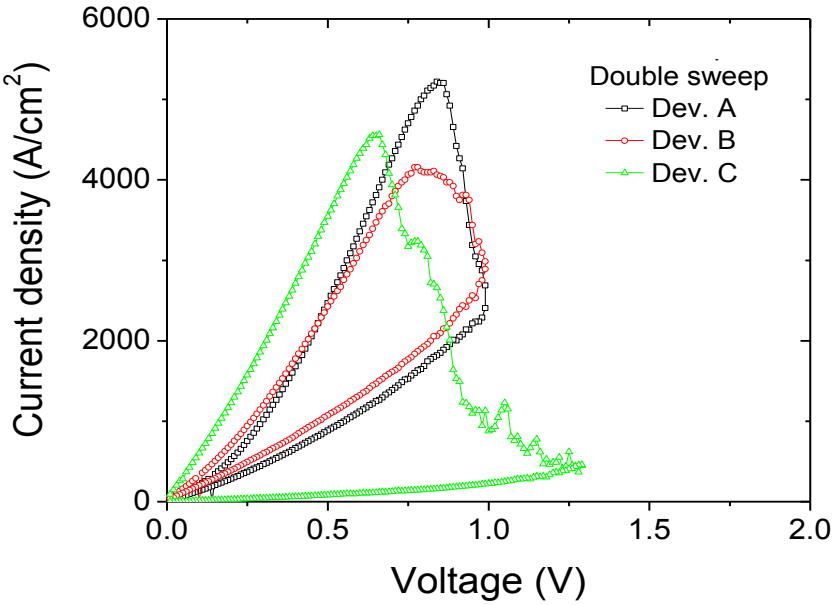
Με τα αρχικά NID (Non Intentionally Doped) για τον προσδιορισμό του εμπλουτισμού εννοούμε πως δεν έγινε εσκεμμένος εμπλουτισμός του στρώματος.

Θα ξεκινήσουμε με τα αποτελέσματα των μετρήσεων που πήραμε από μια δίοδο Δομής Α και διαμέτρου 30μm. Όπως φαίνεται και από την Εικόνα 3.3.2 ξεκινάμε να εφαρμόζουμε την τάση από τα 0V έως περίπου τα 1.3V (ορθή φορά) παρατηρώντας την πυκνότητα του ρεύματος να φτάνει σε μια μέγιστη τιμή και σταδιακά να ελαττώνεται μέχρις ότου να φτάσει σε μια ελάχιστη τιμή. Μια τέτοια συμπεριφορά θα μπορούσε να αποδοθεί σε διέλευση ηλεκτρονίων μέσο φαινομένου συντονισμού με συνέπεια την εμφάνιση φαινομένου Αρνητικής Διαφορικής Αντίστασης (NDR). Στη συνέχεια κατά την επιστροφή της τιμής της τάσης (ανάστροφη φορά) στα 0V (με τον ίδιο ρυθμό με τον οποίο την αυξήσαμε) παρατηρήθηκε πως πλέον η αγωγιμότητα της διόδου είχε ελαττωθεί σχεδόν κατά δύο τάξεις μεγέθους. Παρατηρούμε ότι κατά την φθίνουσα φορά σάρωσης της τάσης, η δίοδος παραμένει σε κατάσταση μικρής αγωγιμότητας και δε ακολουθεί I-V χαρακτηριστικά που λαμβάνονται κατά την αύξουσα φορά της σάρωσης τάσης.



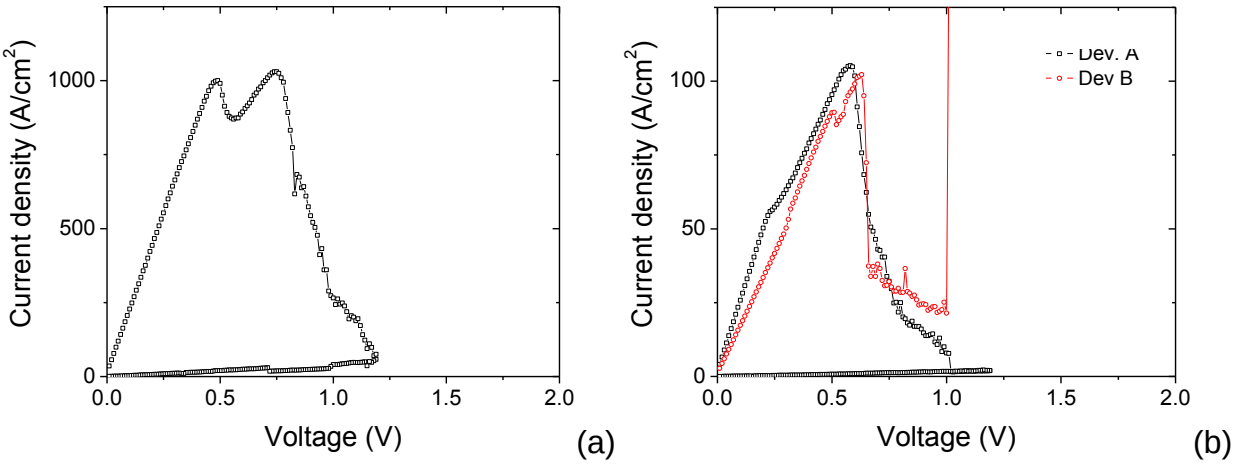
Εικόνα 3.3.2 (a) – I-V χαρακτηριστική DB-RT διόδου, Δομής Α, διαμέτρου 30μm

Η χαρακτηριστική αυτή, υστερητική, συμπεριφορά είναι η συνήθης συμπεριφορά που παρατηρήθηκε σε διόδους διπλού φράγματος δυναμικού AlN/GaN. Στην Εικόνα 3.3.2 (a και b) παρουσιάζονται τα I-V χαρακτηριστικά τριών διαφορετικών διόδων, διαμέτρου 30μm και 10μm, από το ίδιο δισκίο.



Εικόνα 3.3.2 (a) – I-V χαρακτηριστικές τριών DB-RT διόδων, Δομής Α, διαμέτρου 10μm.

Παρόμοια συμπεριφορά παρατηρήθηκε και σε διόδους με παρόμοιες ετεροδομές AlN/GaN διπλού φράγματος δυναμικού.
Στην περίπτωση της Εικόνας 3.3.2, η δομή των διόδων που μετρήθηκαν είναι παρόμοια με αυτή της Α (Εικόνα 3.3.1) με την μόνη διαφορά πως το πάχος των AlN φραγμάτων είναι 1.5nm και το πλάτος του GaN πηγαδιού 2nm. Ενδεικτικά θα την ονομάσουμε δομή Β. Στην περίπτωση που φαίνεται στην Εικόνα 3.3.3, η δομή περιέχει 1.5nm πάχους AlN φράγμα, 3nm πλάτους GaN πηγάδι καθώς και περιοχές μη εμπλουτισμένου GaN (spacers), πλάτους 2nm, πριν το πρώτο και μετά το δεύτερο φράγμα αντίστοιχα (Δομή Γ).
Όπως φαίνεται και από τις Εικόνες 3.3.2 (a,b) η ελάττωση της αγωγιμότητας της διόδου, παρουσιάζεται και σε αυτή την περίπτωση πολύ έντονη.

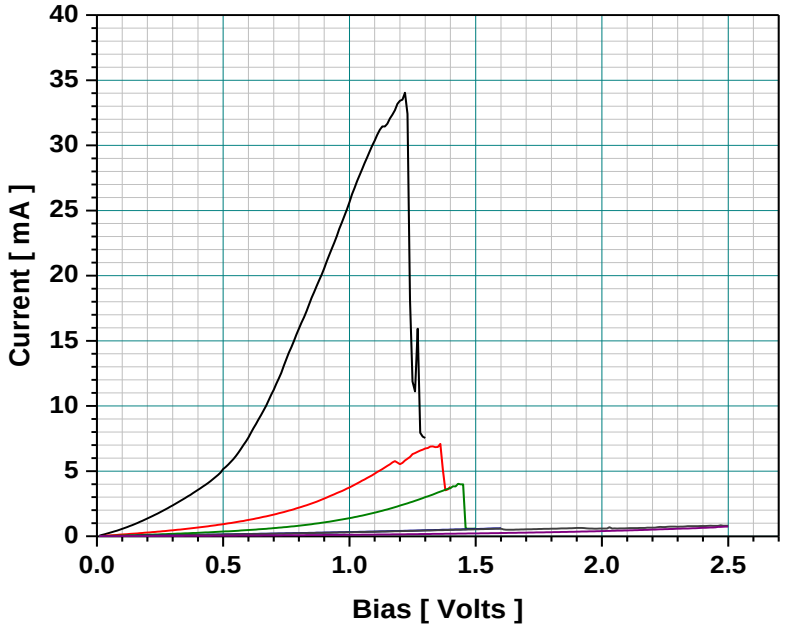


Εικόνα 3.3.3 – I-V χαρακτηριστικές DB-RT διόδου, (a) Δομής Β και διαμέτρου 30μm, (b) Δομής Γ και διαμέτρου 100μm.

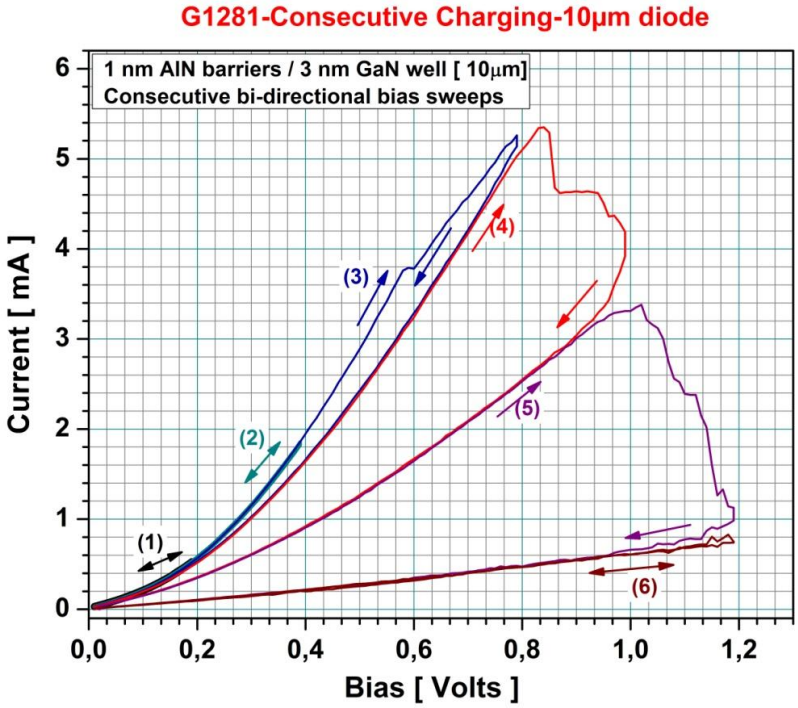
.

Όπως φαίνεται και στις προηγούμενες μετρήσει, οι δίοδοι διπλού φράγματος δυναμικού AlN/GaN, εμφανίζουν ένα είδος «φόρτισης» κατά την εφαρμογή της τάσης, αποκτώντας «μνήμη» ως προς τον τρόπο με τον οποίο έχει γίνει η εφαρμογή της τάσης, κάτι που δεν επιτρέπει την επαναλαμβανόμενη παρατήρηση της περιοχής NDR. Αυτή ήταν μια τυπική συμπεριφορά σε τέτοιες διατάξεις. Στις δύο επόμενες μετρήσεις η εφαρμογή της τάσης γίνεται με διαδοχικό τρόπο που κάνει αρκετά εμφανές τον τρόπο με τον οποίο η τάση επιδρά στις ιδιότητες των διατάξεων αυτών. Στην μελέτη αυτή εφαρμόστηκαν διαδοχικές σαρώσεις τάσεις, με συνεχώς αυξανόμενο μέγιστο πλάτος εφαρμοζόμενης τάσης.

Στην πρώτη εξ' αυτών, η δομή της διόδου που μετρήθηκε βασίζεται σε αυτή της δομής Α με 2nm πλάτους GaN πηγάδι και προσθήκη spacer περιοχών με τον ίδιο τρόπο όπως και στις άλλες περιπτώσεις (Δομή Δ). Όπως φαίνεται και στις ηλεκτρικές μετρήσεις της διόδου στην Εικόνα 3.3.4 η τάση εφαρμόστηκε με διαδοχικό τρόπο. Κατά την πρώτη προσπάθεια, από τα 0V έως τα 1.3V (μαύρη γραμμή) παρατηρούμε μέγιστο του ρεύματος διέλευσης και σταδιακή μείωση αυτού μετά τα 1.2V περίπου. Πριν η αγωγιμότητα ελαττωθεί αρκετά η διαδικασία σταματά, ακολουθούμενη από μια εκ νέου μέτρηση του ίδιου χαρακτήρα από τα 0V έως τα 1.4V (κόκκινη γραμμή). Βλέπουμε πως το ρεύμα που μετράμε, αυτήν την φορά, έχει μειωθεί κατά εφτά φορές περίπου με την μόνη διαφορά πως μπορούμε να παρατηρήσουμε ξανά κάποιας μορφής αρνητικής διαφορικής αντίστασης με το μέγιστο του ρεύματος να εμφανίζεται σε μεγαλύτερη τάση. Σταματώντας πάλι την διαδικασία πριν η αγωγιμότητα χαθεί τελείως και επαναλαμβάνοντας την μέτρηση από τα 0V έως τα 1.5V αυτή την φορά (πράσινη γραμμή) παρατηρούμε εκ νέου μέγιστο και ελάχιστο του ρεύματος τα οποία είναι και πάλι μετατοπισμένα προς μεγαλύτερες τάσεις σε σχέση με τις προηγούμενες προσπάθειες. Στην τελευταία μέτρηση, το ελάχιστο του ρεύματος είχε σχεδόν μηδενική τιμή και προσπαθώντας να επαναλάβουμε την διαδικασία μέχρι τα 2.5V αυτή τη φορά δεν μπορέσαμε να ανακτήσουμε τα NDR χαρακτηριστικά της διόδου με αποτέλεσμα να μετράμε μια πολύ μικρή αγωγιμότητα.



Εικόνα 3.3.4 – I-V χαρακτηριστικές DB-RT διόδου, Δομής Δ.



Εικόνα 3.3.5 – I-V χαρακτηριστικές DB-RT διόδου, Δομής Α και διαμέτρου 10μm.

Παρατηρώντας τα παραπάνω αποτελέσματα και βλέποντας τον καθοριστικό ρόλο που παίζει ο τρόπος με τον οποίο εφαρμόζεται η τάση, επιχειρήσαμε κάτι παρόμοιο για μια δίοδο Δομής Α και διαμέτρου 10μm σε διαφορετική περίοδο του δείγματος. Όπως φαίνεται και από την I-V χαρακτηριστική της Εικόνας 3.3.5, η τάση και σε αυτή την περίπτωση έχει εφαρμοστεί με διαδοχικό τρόπο, κατά αναλογία με την προηγούμενη περίπτωση, αλλά με κυκλικές σαρώσεις τη τάσης. Η διαφορά εδώ έγκειται στο γεγονός πως η τάση είχε και αύξουσα αλλά και φθίνουσα φορά. Και σε αυτή την περίπτωση παρατηρούμε διαδοχική «φόρτιση» της διόδου κατά την παρατήρηση της φαινόμενης NDR περιοχής. Αυτό που πρέπει να σημειώσουμε σε αυτήν την περίπτωση είναι πως, κατά την $5^{η}$ σάρωση της διόδου, το ρεύμα που παρατηρούμε στην αύξουσα φορά της τάσης είναι ακριβός το ίδιο με αυτό που μετρήσαμε στην φθίνουσα φορά της τάσης της $4^{ης}$ σάρωσης. Το ίδιο ακριβώς παρατηρούμε και μεταξύ της $6^{ης}$ και $5^{ης}$ σάρωσης, ακόμα και αν η μέτρηση δεν ακολουθείτε από κάποιου είδους αρνητικής αντίστασης. Αυτή η περίπτωση κάνει αρκετά εμφανές την ιδιαιτερότητα της απόκτησης κάποιου είδους «μνήμης» της διόδου μετά την διαδοχική εφαρμογή της τάσης. Μια πιθανή εξήγηση είναι η ύπαρξη κάποιου είδους παγίδευσης των φορέων μέσα στην διάταξη που έχει σαν αποτέλεσμα την σταδιακή ελάττωση του μετρούμενου ρεύματος και της μη ανάκτησης των ιδιοτήτων της διόδου. Με κάποιον τρόπο, σε κάποιο σημείο και με κάποιον μηχανισμό, άγνωστο μέχρι στιγμής, οι φορείς φαίνεται να συγκρατούνται από την διάταξη χωρίς να έχει φανεί ως τώρα κάποια περίπτωση όπου μπορούμε να παρατηρήσουμε κάποιου είδους «εκφόρτισης».

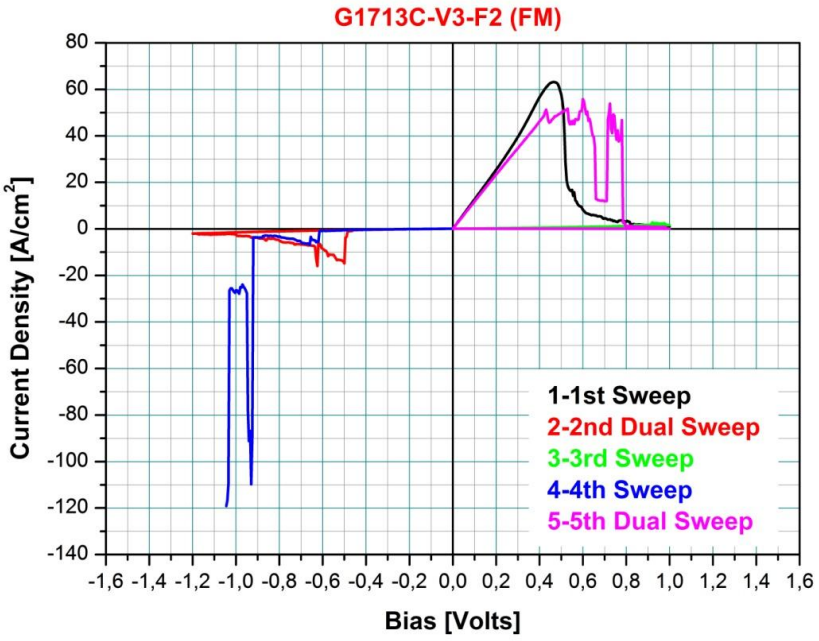
Εν γένει, η μετάπτωση της συμπεριφοράς των διόδων σε καταστάσεις μειωμένης αγωγιμότητας με απουσία NDR χαρακτηριστικών ήταν μη-αναστρέψιμη. Εφαρμογή (σάρωση) τάσης κατά την αντίθετη φορά (< 0V) δεν ήταν ικανή να επαναφέρει την αρχική I-V συμπεριφορά. Μόνο σε μια περίπτωση εφαρμογής ανάστροφης τάσης επανήλθε, μερικώς, η μετρούμενη δίοδος σε κατάσταση υψηλότερης αγωγιμότητας. Σε αυτή την περίπτωση η δομή της διόδου που μετρήθηκε είναι αυτή της Εικόνας 3.3.6 που περιλαμβάνει 1nm AlN φράγματα,

3nm GaN πηγάδι και 5nm spacer περιοχές πριν και μετά από το πρώτο και το δεύτερο φράγμα αντίστοιχα (Δομή Ε) και διαμέτρου 200μm.

25nm **GaN** (10^{19}cm^{-3} n-type doping)
5nm **GaN** (NID)
1nm **AlN** (NID) BARRIER
3nm **GaN** (NID) WELL
1nm **AlN** (NID) BARRIER
5nm **GaN** (NID)
100nm **GaN** (10^{19}cm^{-3} n-type doping)
GaN (0001) Sudstrate

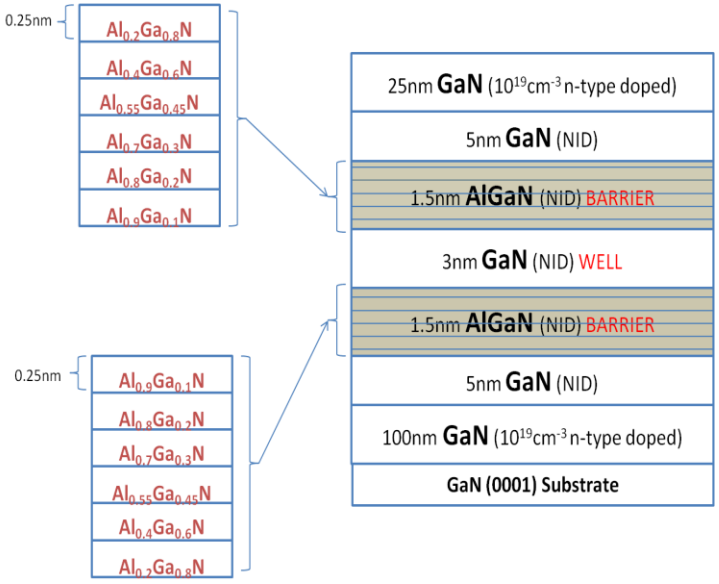
Εικόνα 3.3.6 – Σχηματική απεικόνιση AlN/GaN DB-RT διόδου, Δομής Ε και διαμέτρου 200μm.

Η I-V χαρακτηριστική, αυτής φαίνεται στην Εικόνα 3.3.7. Κατά την πρώτη σάρωση (θετική) η δίοδος εμφάνισε NDR περιοχή ακολουθούμενη από σχεδόν μηδενισμό του ρεύματος. Εφαρμόζοντας ανάστροφη πόλωση (ορθή και ανάστροφη φορά) στην δίοδο παρατηρήσαμε πως το ρεύμα αν και μικρότερο (κατά έξη φορές περίπου) εμφάνισε περιοχή με μικρή αρνητική διαφορική αντίσταση. Στην προσπάθεια να μετρήσουμε ξανά για θετική φορά της τάσης το ρεύμα ήταν σχεδόν μηδέν. Σε μια προσπάθεια αντιστροφής, πάλι, της τάσης ενώ το ρεύμα στην αρχή ήταν πάρα πολύ μικρό, ξαφνικά παρατηρήθηκε μια απότομη αύξησή που όπως φαίνεται και από την 5^{η} σάρωση επανέφερε, μερικός, τον NDR χαρακτήρα της διόδου. Ήταν η πρώτη φορά που παρατηρήθηκε ανάκτηση των ιδιοτήτων της διάταξης, κάτι που ίσως να οφείλεται στην αποδέσμευση των φορέων από κάποιου είδους μορφής παγίδευσης, χαρακτηρίζοντας την διαδικασία ως «μερική αποφόρτιση».



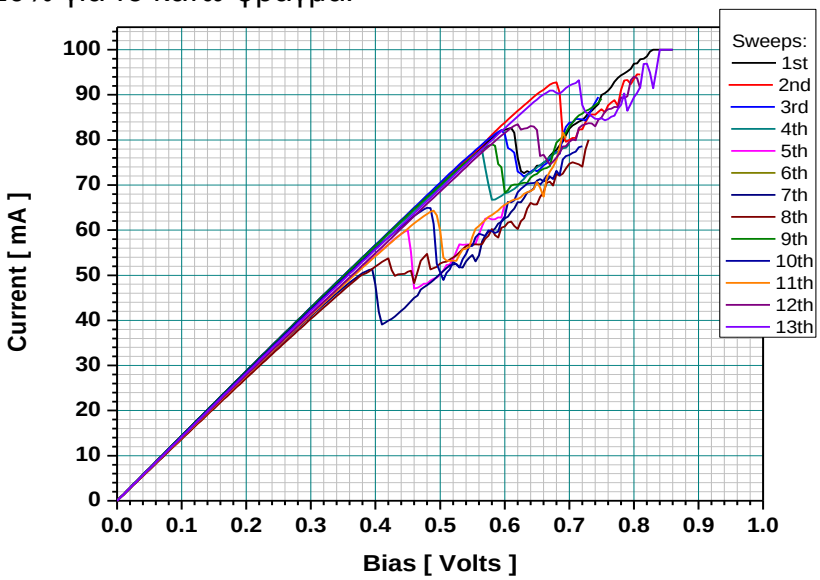
Εικόνα 3.3.7 – I-V χαρακτηριστική Δομής Ε σε μια FM περίοδο.

Τέλος, θα αναφερθούμε σε μια περίπτωση, όπου παρατηρήθηκε υψηλή επαναληψιμότητα των NDR φαινομένων της διάταξης χωρίς την εμφάνιση σταδιακής μείωσης του ρεύματος. Η δομή αυτή υλοποιήθηκε έπειτα από την θεωρητική της μελέτη, όπως θα φανεί και στο επόμενο κεφάλαιο, από την οποία προέκυψε η μείωση των επιπτώσεων που επιφέρουν τα πιεζο-ηλεκτρικά πεδία σε δομές AlN/GaN RTD διπλού φράγματος δυναμικού.
Η δομή της διάταξης είναι κατά πολύ τροποποιημένη σε σχέση με τις προηγούμενες, όσων αφορά τα φράγματα δυναμικού. Επί της ουσίας είναι μια AlGaN/GaN RT διάταξη όπου το κάθε φράγμα δυναμικού αποτελείται από στρώματα $Al_xGa_{(1-x)}N$ διαβαθμισμένης σύστασης. Στην Εικόνα 3.3.8 φαίνεται αυτή η δομή την οποία ενδεικτικά θα την ονομάσουμε Δομή Z.



Εικόνα 3.3.8 – Σχηματική απεικόνιση AlGaN/GaN DB-RT διόδου, Δομής Z (Symmetric graded DB-RTD).

Όπως βλέπουμε και από την εικόνα τυπικά αυτή η δομή διαφέρει μόνο ως προς την δομή των φραγμάτων. Το κάθε φράγμα αποτελείται από έξι mono-layers $Al_xGa_{(1-x)}N$ των 0.25nm και περιεκτικότητες Αλουμινίου που ξεκινούν από 20% και φτάνουν τα 90% για το επάνω φράγμα και από 90% έως 20% για το κάτω φράγμα.

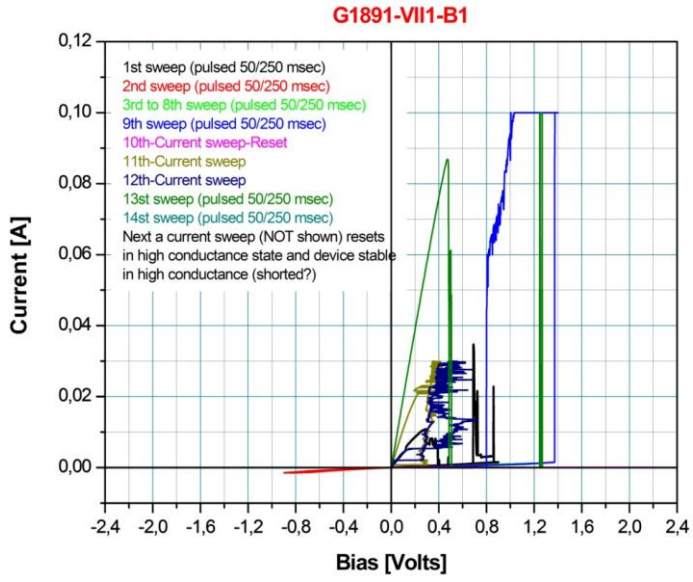


Εικόνα 3.3.9 – I-V χαρακτηριστική της Δομής Z. Επαναλαμβανόμενες NDRs.

Όπως βλέπουμε και από την Εικόνα 3.3.9 η διάταξη εμφάνισε επαναλαμβανόμενα NDR (δέκα τρία όπως φαίνεται και από την εικόνα) χαρακτηριστικά χωρίς να εμφανίζεται σταδιακή ελάττωση του ρεύματος μετά από κάθε εφαρμογή της τάσης, όπως είδαμε στα παραπάνω. Στην περίπτωση αυτή όμως παρατηρήθηκε ότι η μετάπτωση (NDR) εμφανιζόταν κάθε φορά σε διαφορετική θέση της εφαρμοζόμενης τάσης. Μια τέτοια NDR συμπεριφορά θα μπορούσε ίσως, να αποδοθεί στην παραμένουσα μερική φόρτιση της διάταξης, που επιφέρει μια δισταθή συμπεριφορά της διόδου μετατοπίζοντας κάθε φορά την θέση των κορυφών. Στο τελευταίο κεφάλαιο θα επιχειρήσουμε τον υπολογιστικό υπολογισμό αυτής της δομής μέσο της αυτοσυνεπούς λύσης του συστήματος των εξισώσεων Schrodinger και Poisson και θα παρατηρήσουμε τις διαφορές τους σε σχέση με αυτών με AlN φράγματα δυναμικού.

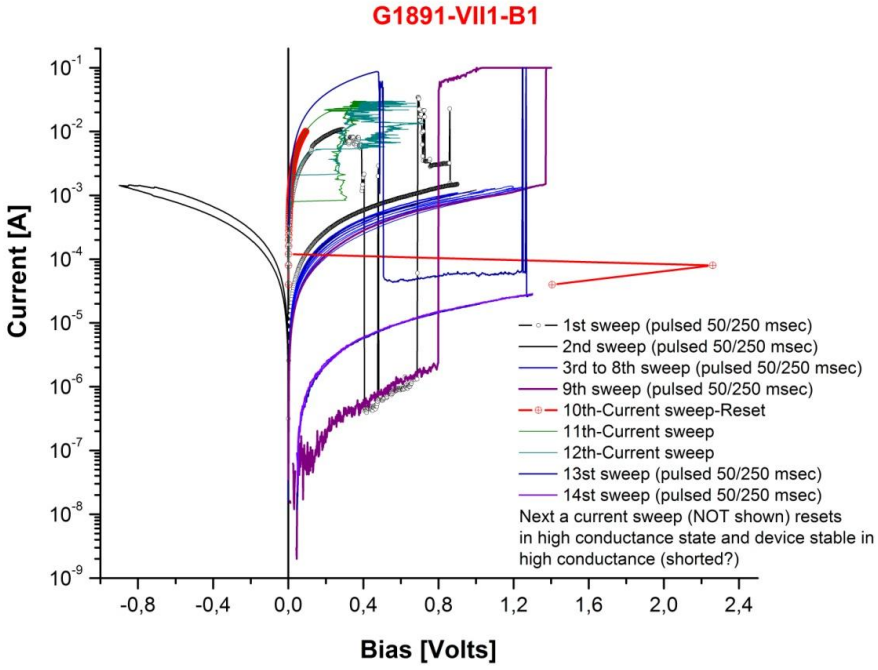
b) Περιπτώσεις πολλαπλής ευστάθειας του ρεύματος

Πέρα από την προηγούμενη αναφερθείσα τυπική υστερητική συμπεριφορά παρατηρήθηκαν και περιπτώσεις όπου η αγωγιμότητα κάποιον διατάξεων παρουσιάζει μια εικόνα πολλαπλής ευστάθειας παρόμοια με αυτή που θεωρητικά περιέγραψαν οι Mathias Wagner και Hiroshi Mizuta το 1993 [M. Wagner and H. Mizuta Appl. Phys. Lett. 63, 2268 (1993)]. Μια τέτοια περίπτωση φαίνεται στην Εικόνα 3.3.10. Η δίοδος αυτή βασίζεται σε δομή όμοια με αυτή της Εικόνας 3.3.6 με μειωμένο εμπλουτισμό της περιοχής του Εκπομπού και του Συλλέκτη καθώς και αυξημένου πλάτους spacers. Παρατηρώντας την I-V χαρακτηριστική αυτής βλέπουμε πως το προφίλ των μετρούμενων ρευμάτων σε κάθε περίπτωση της εφαρμοζόμενης τάσης δεν εμφανίζει κάποια από τα χαρακτηριστικά των προαναφερθέντων περιπτώσεων. Αντίθετα, παρατηρούμε σχεδόν μια τυχαία συμπεριφορά των ρευμάτων κάθε φορά τα οποία σε κάθε περίπτωση μπορεί να διαφέρουν και τάξεις μεγέθους μεταξύ τους. Ένας πιθανός λόγος για μια τέτοιου είδους συμπεριφορά μπορεί να οφείλεται στον ρόλο που μπορεί να παίξει η πιθανή ύπαρξη εικονικών ή ψευτοδέσμιων καταστάσεων στην περιοχή του Εκπομπού όπως αναφέραμε και στο Κεφάλαιο 2. Η ύπαρξη τέτοιων καταστάσεων δημιουργεί μεγάλη μεταβολή της τοπικής πυκνότητας καταστάσεων στην περιοχή του Εκπομπού που μπορεί να οδηγήσει σε πολύ διαφορετική συμπεριφορά της αγωγιμότητας, με σχεδόν τυχαίο τρόπο, ανάλογα με το πώς αυτές αλληλεπιδρούν με τις ψευδοδέσμιες καταστάσεις του πηγαδιού.



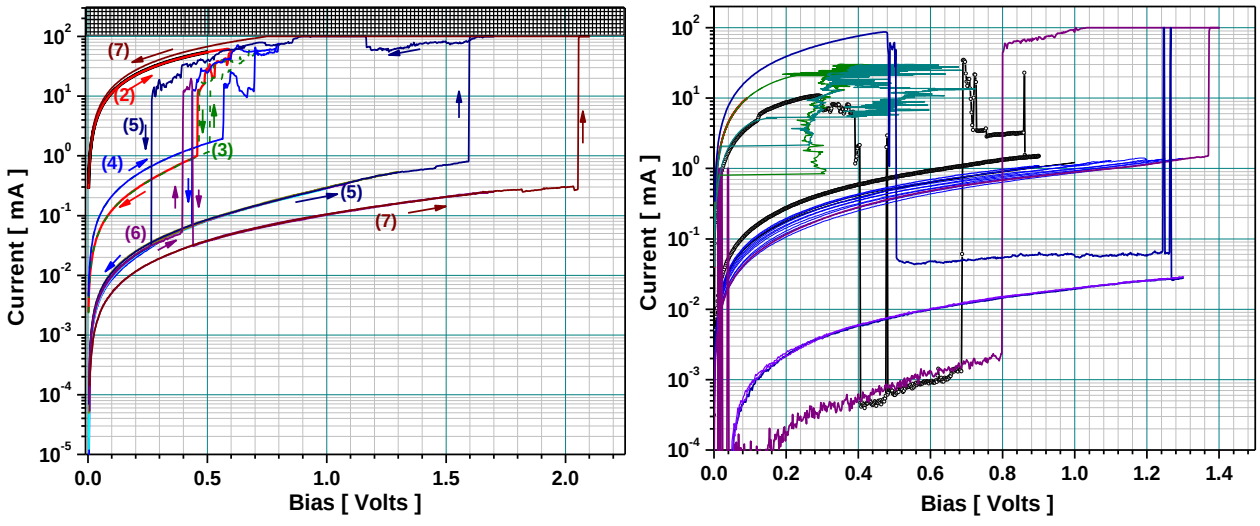
Εικόνα 3.3.10 – I-V χαρακτηριστική Δομής Ε και διαμέτρου 20nm.

Η Εικόνα 3.3.11 αντιστοιχεί στην Εικόνα 3.3.10 αλλά σε λογαριθμική κλίμακα που κάνει εμφανές το πόσο πολύ μπορούν να απέχουν οι τιμές του ρεύματος σε κάθε περίπτωση της εφαρμοζόμενης τάσης.
Να τονίσουμε σε αυτό το σημείο πως η διαφορά αυτών των δομών σε σχέση με τις προηγούμενες είναι ο μειωμένος εμπλουτισμός Πυριτίου (Si), περίπου 10^{18} cm^{-3} , και το μεγαλύτερο πλάτος περιοχών GaN spacers πριν και μετά το πρώτο και δεύτερο φράγμα δυναμικού (περίπου 5 nm).



Εικόνα 3.3.11 – I-V χαρακτηριστική Δομής Ε και διαμέτρου 20nm σε λογαριθμική κλίμακα.

Επίσης, ακόμα δύο παραδείγματα τέτοιων δομών φαίνονται στη Εικόνα 3.3.12, όπου όπως και πριν είναι εμφανής η πολλαπλή ευστάθεια του ρεύματος και η συνεχείς μετάπτωση της διάταξης από καταστάσεις υψηλής, σε καταστάσεις χαμηλής αγωγιμότητας και αντίστροφα σχεδόν με τυχαίο τρόπο.

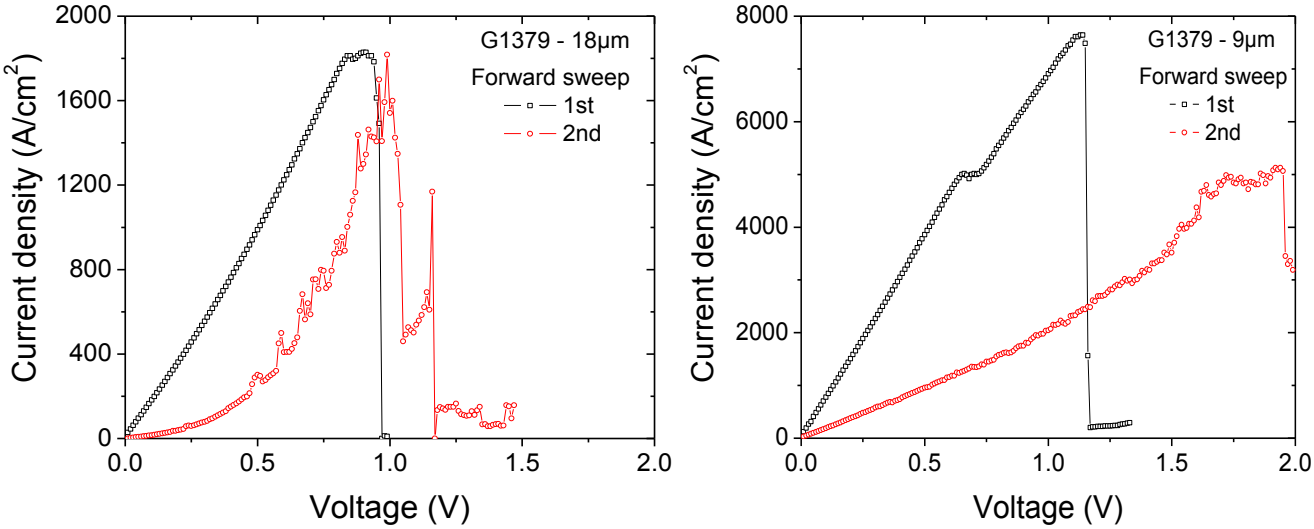


.

Εικόνα 3.3.12 – I-V χαρακτηριστική διόδου πολλαπλής ευστάθειας.

c) Περιπτώσεις απότομης αλλαγής της αγωγιμότητας

Ακόμα μια περίπτωση συμπεριφοράς που παρατηρήθηκε είναι αυτή της Εικόνας 3.3.13. Σε αυτήν, οι δομές που μετρήθηκαν είναι παρόμοιες με αυτή της Εικόνας 3.3.6 με την μόνη διαφορά πως το πάχος των AlN φραγμάτων είναι 3nm, το πλάτος του GaN πηγαδιού 3nm και το πλάτος των spacers 2nm. Σε αυτές φάνηκαν πολύ απότομες αλλαγές της αγωγιμότητας χωρίς όμως την παρατήρηση της μετάπτωσης της διόδου σε μια κατάσταση χαμηλής αγωγιμότητας μετά το πέρας της πρώτης σάρωσης της τάσης.



Εικόνα 3.3.13 – I-V χαρακτηριστική Δομής Η και διαμέτρου 20nm και 10nm αντίστοιχα.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4ο

Θεωρητική Ανάλυση

4.1 - Εισαγωγή

Σε αυτό το κεφάλαιο θα αναφερθούμε στην βασική θεωρία που διέπει τον θεωρητικό υπολογισμό των ιδιοτήτων ετεροεπιταξιακών διατάξεων διπλού φράγματος δυναμικού για τον καθορισμό του ρόλου του πιεζοηλεκτρικού πεδίου όπως και των φαινομένων μεταφοράς των φορέων (I-V χαρακτηριστικές) σε διατάξεις τέτοιου είδους.
Πιο συγκεκριμένα, θα αναφερθούμε στην μέθοδο αυτοσυνεπούς επίλυσης των εξισώσεων Schrodinger-Poisson-Boltzmann για τον καλύτερο υπολογισμό των δυναμικών υπό την επίδραση εξωτερικής τάση, χωρίς να λαμβάνουμε υπόψη μας φαινόμενα βαλλιστικής μεταφοράς των φορέων.
Εν συνεχεία, με λίγα λόγια θα αναφερθούμε στο λογισμικό NextNano^3 που χρησιμοποιήσαμε για την επίτευξη των παραπάνω.
Τέλος, θα αναφερθούμε στην μέθοδο επίλυσης με την χρήση συναρτήσεων Green σε μη-ισορροπία (**N**on **E**quilibrium **G**reen **F**unctions) για τον καθορισμό των I-V χαρακτηριστικών στο όριο της βαλλιστικής διέλευσης (απουσία φαινομένων σκέδασης), με την χρήση της υπολογιστικής προσεγγιστικής μεθοδολογίας **C**ontact **B**lock **R**eduction για πιο ρεαλιστικούς χρόνους προσομοίωσης.

4.2 - Εξισώσεις Schrödinger, Poisson και Boltzmann. Αυτοσυνεπής λύση.

Η ανάγκη διερεύνησης της συμπεριφοράς των RTD διατάξεων βασισμένες σε ημιαγωγούς III-Νιτριδίων οδήγησε στην θεωρητική μελέτη αυτών με την χρήση της αυτοσυνεπούς λύσης των εξισώσεων Schrodinger-Poisson και Boltzmann εξαιτίας των ηλεκτροστατικών αλληλεπιδράσεων των φορέων και της ανάγκης προσδιορισμού μιας πιο σαφής εικόνας του προφίλ του δυναμικού σε περιπτώσεις μη-ισορροπίας (εφαρμογή εξωτερικής τάσης).
Μια συμβατική προσέγγιση για την επίλυση διαφορικών εξισώσεων είναι η Μέθοδος Πεπερασμένων Διαφορών (***F**inite-**D**ifference **M**ethod)*. Η F.D.M. είναι μια τεχνική που χρησιμοποιείται στην αριθμητική ανάλυση ώστε να παράγει μια εκτίμηση της παραγώγου μιας μαθηματικής συνάρτησης χρησιμοποιώντας τιμές της ίδιας της συνάρτησης.
Έτσι μπορούμε να εκφράσουμε την πρώτη παράγωγο μιας συνάρτησης f(x) στο σημείο x_i καθώς και την δεύτερη παράγωγο ως:

$$\frac{\partial f(x_i)}{\partial x} = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2\,\Delta x} + O(\Delta x^2) \qquad (4.2.1)$$

και

$$\frac{\partial^2 f(x_i)}{\partial x^2} = \frac{f(x_{i+1}) + f(x_{i-1}) - 2\,f(x_i)}{\Delta x^2} + O(\Delta x^3) \qquad (4.2.2)$$

Θεωρώντας πως τα σημεία $x_{i-1}, x_i, x_{i+1}, \ldots$ απέχουν απόσταση ίση με Δx.
Για τον αριθμητικό υπολογισμό, για παράδειγμα, της εξίσωσης Schrodinger, ξεκινάμε χωρίζοντας τον πραγματικό χώρο (στην περίπτωσή μας τον 1-D χώρο) σε N διακριτά πλεγματικά σημεία. Στην συνέχεια, λύνοντας την εξίσωση Schrodinger μέσα σε αυτά τα

διαστήματα έχουμε ως αποτέλεσμα N λύσεις για την κυματοσυνάρτηση Ψ, με N αντίστοιχες ιδιοτιμές λ. Ανάγοντας, λοιπόν την μορφή αυτών των N λύσεων σε μορφή πίνακα τότε θα μπορούσαμε να ξαναγράψουμε την εξίσωση Schrödinger σε μια έκφραση της μορφής:

$$A\,\Psi = \lambda\,\Psi \tag{4.2.3}$$

όπου ο A είναι τελεστής πίνακας (διατάσεων NxN) και λ οι ιδιοτιμές της ενέργειας οι οποίες προκύπτουν από την διαγωνιοποίηση του πίνακα A .
Συνήθως η χρήση της FDM μεθόδου εκμεταλλεύεται πλεγματικά σημεία που ισαπέχουν μεταξύ τους ώστε ο πίνακας A να είναι πραγματικός και συμμετρικός.
Όμως υπάρχουν περιπτώσεις όπου μια κυματοσυνάρτηση μπορεί να μεταβάλλεται πιο γρήγορα σε μια περιοχή και πιο αργά σε μια άλλη. Έτσι σε μια τέτοια περίπτωση, μια πιο ιδανική κατάσταση θα ήταν η χρήση μεταβλητής πλεγματικής απόστασης. Τότε, η κλίση μεταξύ των σημείων $(x\text{-}h_1, f(x\text{-}h_1))$ και $(x\text{-}h_2, f(x\text{-}h_2))$ θα είναι:

$$\frac{f(x+h_2)-f(x-h_1)}{h_1+h_2} \tag{4.2.4}$$

Η χρήση όμως μεταβλητού πλέγματος απαιτεί πολύ προσεκτική αντιμετώπιση στην αριθμητική περιγραφή, ιδιαίτερα στα σημεία όπου συνενώνονται δύο διαφορετικές πλεγματικές αποστάσεις που συνεπάγει την καταστροφή της συμμετρίας του πίνακα A και κάνει τον υπολογισμό των ιδιοσυναρτήσεων πιο δύσκολο.

ΒΑΣΙΚΕΣ ΕΞΙΣΩΣΕΙΣ

- Εξίσωση Schrodinger

Στις περιπτώσεις που ασχοληθήκαμε σε αυτή την εργασία αρκεστήκαμε στην προσέγγιση “ενεργού μάζας”(Effective Mass Approximation) για τον καθορισμό της Χαμιλτονιανής του συστήματος μιας και
οι ημιαγωγοί νιτριδίων πάνω σε δομή wurtzite παρουσιάζουν ζώνες αγωγιμότητας με ελάχιστο στο σημείο Γ της ζώνης Brillouin το οποίο μπορεί να περιγραφεί ικανοποιητικά μέσο της EMA. Έτσι η μονοδιάστατη εξίσωση Schrodinger μπορεί να γραφεί ως:

$$-\frac{\hbar^2}{2}\frac{d}{dz}\left(\frac{1}{m^*(z)}\frac{d}{dz}\right)\Psi_k(z)+V(z)\Psi_k(z)=E_k\Psi_n(z) \tag{4.2.5}$$

όπου: $m^*(z)$→ ενεργός μάζα συναρτήσει της θέσης
$V(z)$ → Δυναμικό
E_k → Ενέργεια ηλεκτρονίου
$\Psi_k(z)$ → Κυματοσυνάρτηση

Το δυναμικό $V(z)$, εν γένει, αποτελείται από δύο μέρη:
Α) Το δυναμικό ετεροεπαφής ($\Delta E_C(z)$) λόγω της διαφοράς των άκρων των ενεργειακών ζωνών στην ετεροεπαφή
Β) Το δυναμικό αλληλεπίδρασης ηλεκτρονίων ($\varphi(z)$) το οποίο και περιέχει την ηλεκτρομαγνητική αλληλεπίδραση μεταξύ φορτισμένων σωματιδίων και οποιαδήποτε εξωτερικά εφαρμοζόμενη τάση ($V_{applied}$).

Στην περίπτωση που έχουμε ένα κβαντικό πηγάδι με τυχαίο προφίλ του δυναμικού $V(z)$, το δυναμικό σχετίζεται με το ηλεκτροστατικό δυναμικό $\varphi(z)$ μέσω της σχέσης:

$$V(z) = -q\varphi(z) + \Delta E_C(z) \tag{4.2.6}$$

- Εξίσωση Poisson

Στην περίπτωση ανάπτυξης ημιαγωγών νιτριδίων σε δομή Βουρτσίτη, η παρουσία τυχαίας και Πιεζοηλεκτρικής Πόλωσης συνεπάγει ότι η εξίσωση Poisson πρέπει να λυθεί ως προς το πεδίο μετατόπισης D(z) το οποίο περιλαμβάνει και την ολική πόλωσης:

$$\frac{d}{dz}D(z) = \frac{d}{dz}\left(-\varepsilon(z)\frac{d}{dz}\varphi(z) + P(z)\right) = 4\pi e[p(z) - n(z) + N_D^+ - N_A^-] \tag{4.2.7}$$

όπου: $\varphi(z)$ → Ηλεκτροστατικό δυναμικό
$\varepsilon(z)$ → Διηλεκτρική συνάρτηση
P(z) → Ολική Πόλωση
n, p → Συγκέντρωση ηλεκτρονίων, οπών
N_D^+ , N_A^- → Πυκνότητα ιονισμένων δοτών, αποδεκτών

Η ολική πόλωση μπορεί να γραφτεί ως το άθροισμα της τυχαίας πόλωσης, P_{spont}, και της πιεζοηλεκτρικής πόλωσης, P_{piezo}.

$$P = P_{piezo} + P_{spont} \tag{4.2.8}$$

Η πιεζοηλεκτρική πόλωση (P_{piezo}) κατά τον c-άξονα στην δομή Βουρτσίτη, που είναι και ο συνήθεις άξονας ανάπτυξης, μπορεί να γραφτεί ως :

$$P_{piezo} = -2\left(e_{33}\left(\frac{c_{13}}{c_{33}}\right) - e_{31}\right)\varepsilon_1 \tag{4.2.9}$$

όπου e_{ij} και c_{ij} είναι ο παράγοντας πιεζοηλεκτρικής έντασης και η ελαστική σταθερά αντίστοιχα και ε_1 να εκφράζει το μέτρο της έντασης (strain) κατά το α-επίπεδο της δομής Βουρτσίτη εξαγωνικής συμμετρίας.

- Εξίσωση Boltzmann

Η εξίσωση Boltzmann συμπεριλαμβάνεται στην διαδικασία της αυτοσυνεπούς λύσης μιας και είναι απαραίτητη για τον καλύτερο υπολογισμό των δυναμικών υπό την επίδραση εξωτερικής τάσης.
Η εξίσωση Boltzmann εκφράζει την συνέχεια του ρεύματος σύμφωνα με την σχέση:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{J}(z) = 0 \tag{4.2.10}$$

Όπου το ρεύμα (ημικλασσική περίπτωση) είναι ίσο με το άθροισμα του ρεύματος διάχυσης και του ρεύματος ολίσθησης στην περίπτωση μη θερμοδυναμικής ισορροπίας (εφαρμογή εξωτερικής τάσης) που συνεπάγει τον σχηματισμό ψευδοστάθμης Fermi. Έτσι, το ρεύμα για τα ηλεκτρόνια μπορεί να εκφραστεί σύμφωνα με την σχέση:

$$J(z) = \mu_n n(z) \frac{\partial}{\partial z} E_{QF_n}(z) \tag{4.2.11}$$

Όπου μ_n είναι η ευκινησία των ηλεκτρονίων, $n(z)$ είναι η χωρική πυκνότητα των ηλεκτρονίων και $E_{QF_n}(z)$ είναι η χωρικά, πλέον, εξαρτώμενη ψευδοστάθμη Fermi για τα ηλεκτρόνια (Quasi-Fermi).

Η κυματοσυνάρτηση $\Psi_k(z)$ και η πυκνότητα των ηλεκτρονίων $n(z)$ στην περίπτωση όπου οι φορείς είναι μόνο ηλεκτρόνια, συνδέονται μέσο της σχέσης :

$$n(z) = \sum_{k=1}^{m} \Psi_k^*(z)\Psi_k(z)n_k \tag{4.2.12}$$

Όπου m είναι ο αριθμός των δέσμιων καταστάσεων και n_k είναι η ηλεκτρονιακή κατάληψη για κάθε κατάσταση που δίνεται από τη σχέση:

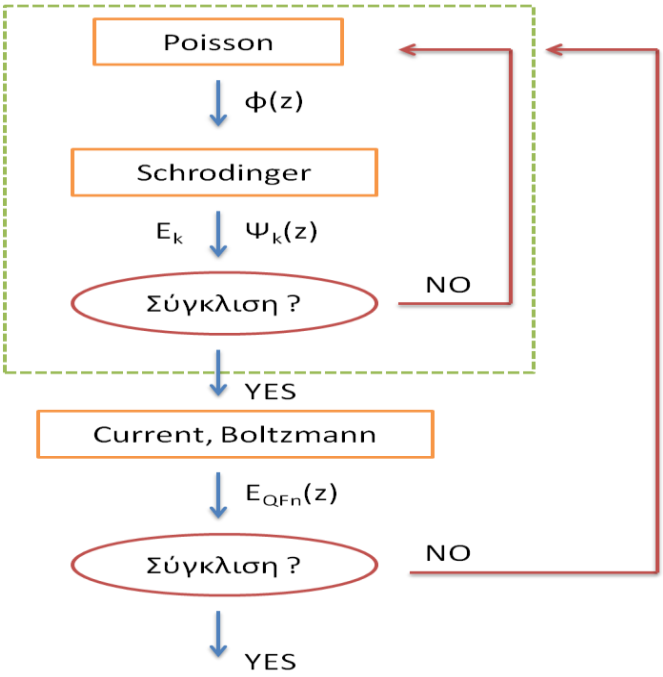
$$n_k = \frac{m^*(z)}{\pi\hbar^2} \int_{E_\kappa}^{\infty} \frac{1}{1 + e^{(E-E_{QF})/k_B T}} dE \; = \frac{m^*(z) k_B T}{\pi\hbar^2} ln\left(1 + e^{-\frac{E_k - E_{QF}}{k_B T}}\right) \tag{4.2.13}$$

με E_k να εκφράζει την ιδιοενέργεια της k-κατάστασης, E_{QF} η ψευδοστάθμη Fermi των ηλεκτρονίων και k_B η σταθερά Boltzmann.

Τι ακριβώς εννοούμε όμως με την έννοια αυτοσυνεπής λύση?
Αυτοσυνεπής επίλυση των εξισώσεων Schrödinger και Poisson σημαίνει την εύρεση των ιδιοσυναρτήσεων (και αντίστοιχων ιδιοτιμών) του συστήματος και της προκύπτουσας χωρικής συγκέντρωσης των φορέων $(n(z))$, έτσι ώστε οι εξισώσεις Schrodinger και Poisson να ικανοποιούνται ταυτόχρονα.

Αυτοσυνεπής λύση Schrödinger-Poisson-Boltzmann

Η αυτοσυνεπής επίλυση των εξισώσεων Schrödinger και Poisson δίνει μια αρκετά ικανοποιητική περιγραφή των δομών της ζώνης σθένους και αγωγιμότητας, όπως επίσης και της κβαντομηχανικής περιγραφής του συστήματος που μελετάμε στην περίπτωση της ισορροπίας, στην περίπτωση δηλαδή όπου η ψευδοστάθμη Fermi ή στάθμη Fermi πιο συγκεκριμένα είναι σταθερή με αποτέλεσμα το ολικό ρεύμα να είναι μηδέν. Σε περιπτώσεις, όμως, όπου μας ενδιαφέρει ο υπολογισμός των δυναμικών υπό την επίδραση εξωτερικής τάσης είναι απαραίτητη η χρήση και της εξίσωσης Boltzmann. Σε αυτές τις περιπτώσεις, με την εφαρμογή της εξωτερικής τάσης μεταβάλουμε την θέση της στάθμης Fermi (ανάλογα με την διαφορά δυναμικού που εφαρμόζουμε) κάνοντάς την να διαφέρει (χωρικά) κατά μήκος της μελετώμενης διάταξης. Είναι σημαντικό να υπολογίσουμε την χωρική εξάρτηση της ψευδοστάθμης Fermi μιας και όπως φαίνεται και από την εξίσωση 4.2.13, συμμετέχει ενεργά στην πυκνότητα των φορέων (ηλεκτρόνια). Το ρεύμα σε αυτή την περίπτωση υπολογίζεται ημικλασσικά, από το άθροισμα του ρεύματος διάχυσης και ολίσθησης στην περίπτωση της μη ισορροπίας.
Ο τρόπος με τον οποίο πετυχαίνουμε την αυτοσυνεπή λύση των τριών αυτών εξισώσεων φαίνεται σχηματικά από την παρακάτω εικόνα.



Εικόνα 4.1.1 – Σχηματική αναπαράσταση του τρόπου επίτευξης αυτοσυνεπής λύσης των εξισώσεων Schrodinger-Poisson-Boltzmann.

Όπως φαίνεται και από την εικόνα η διαδικασία αυτοσυνεπούς επίλυσης χωρίζεται σε δύο κυκλικές διεργασίες.
Αρχικά, στην πρώτη διεργασία, η διαδικασία ξεκινά με μια τυχαία πρόβλεψη για την τιμή της πυκνότητας των. Στη συνέχεια και με την βοήθεια της πυκνότητας των ηλεκτρονίων προσδιορίζεται το ηλεκτροστατικό δυναμικό $\varphi(z)$ μέσο της εξίσωσης Poisson. Έπειτα υπολογίζονται οι ιδιοενέργειες E_k και οι κυματοσυναρτήσεις $\Psi_k(z)$ από την εξίσωση Schrodinger και του ηλεκτροστατικού δυναμικού, από τις οποίες και υπολογίζεται εκ νέου η πυκνότητα των ηλεκτρονίων (Εξ. 4.2.12). Αν ή αρχική πρόβλεψη για την πυκνότητα των ηλεκτρονίων και η καινούρια πυκνότητα ηλεκτρονίων από την εξίσωση Schrödinger, διαφέρουν λιγότερο ή και ίσο με μια ελάχιστη τιμή που έχουμε ορίσει εξ αρχής τότε θεωρούμε πως η λύση συγκλίνει σε μια αυτοσυνεπή λύση που ικανοποιεί ταυτόχρονα τις εξισώσεις Schrödinger και Poisson. Αν όχι τότε η διαδικασία επαναλαμβάνεται για μια καινούρια και "καλύτερη" πρόβλεψη για την πυκνότητα των ηλεκτρονίων μέχρις ότου επιτευχθεί σύγκλιση. Στην δεύτερη διεργασία, με την χρήση της αυτοσυνεπούς, πλέων, χωρικής πυκνότητας των ηλεκτρονίων (ως προς τις εξισώσεις Schrödinger και Poisson) και από την λύση της εξίσωσης Boltzmann, προσδιορίζεται η καινούρια χωρική κατανομή της ψευδοστάθμης Fermi των ηλεκτρονίων η οποία αν εισαχθεί στην Εξ. (4.2.12) και δώσει την ίδια πυκνότητα ηλεκτρονίων με αυτή της αυτοσυνεπούς λύσεως τότε η λύση του προβλήματος είναι πλέον αυτοσυνεπής και ως προς τις τρείς εξισώσεις. Αν όχι τότε η διαδικασία επαναλαμβάνεται εκ νέου με την χρήση της καινούριας ψευδοστάθμης Fermi.

4.3 - NEXTNANO^3 - Σύντομη Περιγραφή

Το Nextnano^3 αποτελεί ένα πρόγραμμα προσομοίωσης για τον υπολογισμό, με συνεπή τρόπο, μιας οποιαδήποτε ρεαλιστικής ηλεκτρονικής δομής τρισδιάστατων, δισδιάστατων και μονοδιάστατων κβαντικών στοιχείων ετεροεπαφής που βρίσκεται σε μη θερμοδυναμική

ισορροπία (υπό την επίδραση εξωτερικής τάσης) καθώς και της πυκνότητας ρεύματος κοντά στην ισορροπία.
Η ηλεκτρονική δομή υπολογίζεται εξολοκλήρου κβαντομηχανικά, ενώ το ρεύμα καθορίζεται ημικλασσικά μέσο της ιδέας ότι τα επίπεδα Fermi έχουν υπολογιστεί με αυτοσυνεπή τρόπο (self-consistently).

- ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΟ ΠΛΑΝΟ ΤΟΥ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΟΣ

Το πρόγραμμα λύνει με αυτοσυνέπεια και κατ επανάληψη τις εξισώσεις Schrodinger και Poisson καθώς και την εξίσωση συνέχειας του ρεύματος.
Όλες οι εξισώσεις διαμορφώνονται σύμφωνα με την Μέθοδο Πεπερασμένων Διαφορών (Finite Difference Method) που αναφέραμε στην προηγούμενη ενότητα. Το ακαθόριστο πλέγμα διαχωρισμού διατηρείται σταθερό καθ' όλη την διάρκεια του υπολογισμού. Σαν προπαρασκευαστικό βήμα υπολογίζεται το build in δυναμικό για μηδέν εξωτερική τάση μέσω της αυτοσυνεπής λύσης των Schrodinger- Poisson με την χρήση της μεθόδου Predictor-Corrector, θέτοντας το ηλεκτρικό πεδίο ίσο με το μηδέν στις ομικές επαφές. Η μέθοδος Predictor-Corrector είναι πολύ συνηθισμένη για την επίλυση συνήθων διαφορικών εξισώσεων. Επί της ουσίας η μέθοδος αυτή βασίζεται στην αντικατάσταση της χωρικής πυκνότητας των ηλεκτρονίων (Εξ.4.1.10) που είναι ανεξάρτητη του ηλεκτροστατικού δυναμικού, $\varphi(z)$, με μια έκφραση που εισαγάγει μια μορφή εξάρτησης αυτής με το ηλεκτροστατικό δυναμικό [3]. Η αντικατάσταση αυτή οδηγεί σε μια διαδικασία όπου αρχικά γίνεται μια πρόβλεψη (predictor step) του ηλεκτροστατικού δυναμικού από την εξίσωση Poisson με την χρήση της χωρικά εξαρτώμενης πυκνότητας ηλεκτρονίων, η οποία στην συνέχεια διορθώνεται (corrector step) μέσο της εξίσωση Schrodinger από την αυτοσυνεπή επαλήθευση της πυκνότητας ηλεκτρονίων.

Όταν εφαρμόσουμε εξωτερική τάση η στάθμη Fermi και το ηλεκτροστατικό δυναμικό στις επαφές μετατοπίζονται σύμφωνα με το εφαρμοζόμενο δυναμικό το οποίο και καθορίζει της συνοριακές συνθήκες στην εξίσωση Poisson.
Η κυρίως επαναλαμβανόμενη διαδικασία αποτελείται από δύο μέρη.

I. Στο πρώτο, οι κυματοσυναρτήσεις και το δυναμικό παραμένουν σταθερά και υπολογίζονται τα quasi-Fermi levels από την αυτοσυνεπή λύση της εξίσωσης συνέχειας του ρεύματος.
II. Στο δεύτερο, τα quasi-Fermi levels παραμένουν σταθερά και υπολογίζεται η πυκνότητα και το δυναμικό από την αυτοσυνεπή λύση των συζευγμένων εξισώσεων Schrodinger- Poisson

Η εξίσωση Schrodinger διαγωνοποιείται εξαγάγοντας έτσι τις απαιτούμενες ιδιοτιμές και ιδιοσυναρτήσεις. Με σκοπό την μείωση των απαιτούμενων διαγωνοποιήσεων το πρόγραμμα εφαρμόζει την μέθοδο predictor-corrector που αναφέραμε για τον υπολογισμό του ηλεκτροστατικού δυναμικού από τη μη γραμμική εξίσωση Poisson.
Σε αυτή την προσέγγιση οι κυματοσυναρτήσεις παραμένουν αμετάβλητες σε μια επανάληψη και οι πυκνότητες υπολογίζονται από τις κυματοσυναρτήσεις μιας προηγούμενης επανάληψης.
Η μη γραμμική εξίσωση Poisson λύνεται με την χρήση της μεθόδου Newton.

Ο κλασσικός υπολογισμός του ρεύματος περιορίζει τη χρήση αυτού του μοντέλου ως προς την αντιμετώπιση προβλημάτων κβαντομηχανικής φύσεως (φαινόμενα μεταφοράς φορέων). Στην παρούσα εργασία έχουμε να κάνουμε με διάδοση ηλεκτρονίων μέσω του φαινομένου σήραγγος, ενός φαινομένου κβαντομηχανικής φύσεως, πράγμα που δεν μπορεί να

αντιμετωπίσει το πρόγραμμα μέσω αυτών των διεργασιών, όσων αφορά την διάδοση των φορέων.
Για να επιτύχουμε κάτι τέτοιο είναι απαραίτητη η χρήση ενός υπολογιστικού μοντέλου όπου το ρεύμα υπολογίζεται κβαντομηχανικά. Ένα τέτοιο μοντέλο είναι αυτό που εκμεταλλεύεται την μέθοδο των συναρτήσεων Green για την επίλυση της εξίσωσης Schrodinger*. Βέβαια και σε αυτή την περίπτωση με το μόνο που μπορούμε να ασχοληθούμε είναι το όριο της βαλλιστικής διάδοσης των φορέων μέσω της μεθόδου **Contact Block Reduction** (**CBR**) που παρέχεται στο Nextnano[3]. Η μέθοδος αυτή αποτελεί μια πολύ ικανοποιητική προσέγγιση του πιο σωστού και ολοκληρωμένου μοντέλου σε αυτές τις περιπτώσεις, αυτό του **Non Equilibrium Green Function** Method (**NEGF**).*
Στην επόμενη ενότητα θα ασχοληθούμε εξολοκλήρου με την περιγραφή αυτής (CBR) καθώς και με των δυνατοτήτων και ιδιοτήτων της.

4.4 - Βαλλιστική κβαντική διάδοση (NEGF)

Η μέθοδος επίλυσης με την χρήση συναρτήσεων Green σε μη ισορροπία συνήθως χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό του ρεύματος και της πυκνότητας των φορέων σε αγωγούς (και ημιαγωγούς) υπό την επίδραση τάσης. Πρωτοεμφανίστηκε το 1964 από τον L.V Keldysh [1] και ελαφρός τροποποιημένη, και ανεξάρτητα από τους L. P. Kadanoff και G. Baym [2]Η πιο χρήσιμη θεωρητική προσέγγιση που περιγράφει μεσοσκοπική διάδοση παρουσιάστηκε πρώτη φορά από τους Landauer και Buttiker [6,7,8,9].
Επί της ουσίας είναι ισοδύναμη με τον φορμαλισμό των εξισώσεων Green σε μη-ισορροπία στο όριο που δε λαμβάνουμε υπόψη μας φαινόμενα σκέδασης. Η βασική ιδέα πίσω από τον L-B φορμαλισμό είναι πως το ρεύμα διαμέσου ενός βαλλιστικού αγωγού καθορίζεται από τις πιθανότητες των ηλεκτρονίων να διαδοθούν ή να ανακλαστούν μέσα σε αυτό. Να σημειώσουμε σε αυτό το σημείο ότι με τον όρο βαλλιστική διάδοση εννοούμε πως η μέση ελεύθερη διαδρομή ενός ηλεκτρονίου που διαδίδεται σε ένα μέσο είναι μεγαλύτερη από το μέγεθος αυτού. Έτσι το ηλεκτρόνιο μπορεί να αλλάξει την πορεία του μόνο όταν φτάσει και ανακλαστεί στα σύνορα του μέσου.
Γυρνώντας πάλι πίσω, οι επαφές του αγωγού θεωρούνται σαν μεγάλες «δεξαμενές» ηλεκτρονίων σε ισορροπία, έτσι ώστε κάθε επαφή να χαρακτηρίζεται από την δική της κατανομή Fermi με ένα αντίστοιχο χημικό δυναμικό μ. Η διαφορά των χημικών δυναμικών κάθε επαφής εκφράζει την εξωτερική εφαρμοζόμενη τάση.
Το ρεύμα, όπως θα δείξουμε και στη συνέχεια δίνεται από την σχέση:

$$\mathrm{I}_{\lambda\lambda'} = \frac{\mathrm{g}_S\,\mathrm{e}}{\mathrm{h}} \int \mathrm{T}_{\lambda\lambda'}(\mathrm{E})\,[\mathrm{f}(\mathrm{E},\mu_\lambda) - \mathrm{f}(\mathrm{E},\mu_{\lambda'})]\mathrm{dE} \qquad (4.4.1)$$

όπου: $\mathrm{I}_{\lambda\lambda'}$ → Το ρεύμα μεταξύ της επαφής λ και λ'
$\mathrm{T}_{\lambda\lambda'}(\mathrm{E})$ → Συντελεστής διέλευσης
$\mu_\lambda, \mu_{\lambda'}$ → Χημικό δυναμικό της λ και λ' επαφής
$\mathrm{g}_S = 2$ → Εκφυλισμός ηλεκτρονίων λόγο του spin

Η κατανομή Fermi έχει την μορφή:

$$f(E,\mu_\lambda) = \frac{1}{1 + e^{(E-\mu_\lambda)/k_B T}} \qquad (4.4.2)$$

- **<u>Η μέθοδος "Επίλυση μέσω συναρτήσεων Green εκτός ισορροπίας" (NEGF)</u>**

  - ***<u>Βασική Περιγραφή</u>***

Αρχικά ξεκινούμε θεωρώντας μια διάταξη (device) το οποίο και χωρίζουμε σε N_T πλεγματικά σημεία. Η διάταξη αυτή στην οποία δεν έχουμε βάλει επαφές, χαρακτηρίζοντάς την έτσι σαν ένα «κλειστό» σύστημα περιγράφεται από ένα πίνακα Χαμιλτονιανής H_d μεγέθους N_D (D: Device). Έχει ακριβείς ιδιοενέργειες (ιδιοτιμές της H_d) και τα ηλεκτρόνια περιγράφονται από κυματοσυναρτήσεις (ιδιοσυναρτήσεις της H_d).
Αν τώρα προσθέσουμε επαφές και χωρίσουμε την διάταξη εκ νέου σε πλεγματικά σημεία με N_C (C: Contacts) πλεγματικά σημεία για τις επαφές και N_D για την διάταξη τότε:

$$N_T = N_C + N_D \tag{4.4.3}$$

Τα πλεγματικά σημεία N_C των επαφών είναι τα συνοριακά σημεία της διάταξης που επικαλύπτονται με τα leads (reservoir ηλεκτρονίων).
Η ένωση της διάταξης με επαφές οδηγεί στο «άνοιγμα» διεύρυνση των ιδιοενεργειών, που σημαίνει ότι το διακριτό φάσμα των ενεργειών μετατρέπεται σε μια συνεχής πυκνότητα καταστάσεων. Αυτό περιγράφεται όπως θα δείξουμε και αργότερα από τον πίνακα διεύρυνσης (broadening matrix) $\Gamma(E)$, με μονάδες ενέργειας που έχει το ίδιο μέγεθος με την Χαμιλτονιανή H_d, και μπορεί να υπολογιστεί άμεσα από τον πίνακα αυτοενέργειας (self-energy) $\Sigma(E)$. Ο $\Sigma(E)$, είναι προϊόν της προσθήκης επαφών στο κλειστό σύστημα της H_d ως αποτέλεσμα καινούριων συνοριακών συνθηκών.
Με τον τρόπο αυτό οι ιδιοτιμές γίνονται μιγαδικές πράγμα που συνεπάγει την διεύρυνση της πυκνότητας καταστάσεων (DOS) και την εισαγωγή πεπερασμένου χρόνου ζωής των ιδιοκαταστάσεων. Συνέπεια αυτού είναι η «διαρροή» των κυματοσυναρτήσεων στις επαφές (ανοιχτό σύστημα).
Η εξίσωση Schrodinger μπορεί να γραφτεί υπό την μορφή:

$$H\,|\Psi> = E|\Psi> \tag{4.4.4}$$

Θεωρώντας την μονοδιάστατη περίπτωση (δύο επαφές) και χωρίζοντας την Χαμιλτονιανή H και τις κυματοσυναρτήσεις του συστήματος σε αυτές που αφορούν τις επαφές ($H_{1,2}$, $|\psi_{1,2}>$) και σε αυτές που αφορούν μόνο την διάταξη (H_d, $|\psi_d>$) μπορούμε να ξαναγράψουμε την Εξ.(4.4.4) ως:

$$\begin{pmatrix} H_1 & \tau_1 & 0 \\ \tau_1^+ & H_d & \tau_2^+ \\ 0 & \tau_2 & H_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\psi_1> \\ |\psi_d> \\ |\psi_2> \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} |\psi_1> \\ |\psi_d> \\ |\psi_2> \end{pmatrix} \tag{4.4.5}$$

όπου οι πίνακες $\tau_{1,2}$ περιγράφει την αλληλεπίδραση της διάταξης με τις επαφές. Για να φτάσουμε στην μορφή της εξίσωσης (4.4.5) πήραμε την εξίσωση Schrodinger ξεχωριστά για τις επαφές και την διάταξη συμπεριλαμβάνοντας όμως και τον τρόπο με τον οποίο οι επαφές αλληλεπιδρούν με το σύστημα. Γενικά θα είχαμε N επαφές (H_1,…,H_N) να συνδέουν ($\tau_1, \dots, \tau_N$) την διάταξη (H_d) με τα reservoirs. Εδώ υποθέτουμε πως οι επαφές είναι ανεξάρτητες μεταξύ τους και γι' αυτό ΔΕΝ έχουμε επιπλέον όρους τ που να συσχετίζουν αλληλεπιδράσεις μεταξύ αυτών. Η συνάρτηση Green καθορίζεται ως εξής:

$$(E - H)G(E) = \mathbb{I} \tag{4.4.6}$$

Ο λόγος που υπολογίζουμε τις συναρτήσεις Green είναι το γεγονός πως είναι ευκολότερο από το να λύσουμε απευθείας την εξίσωση Schrodinger. Επίσης η συνάρτηση Green για την διάταξη (G_d) μπορεί να υπολογιστεί ξεχωριστά χωρίς να χρειάζεται να υπολογίσουμε την συνάρτηση Green όλου του συστήματος.
Έτσι, από τον ορισμό της συνάρτησης Green (4.4.6) και χωρίζοντάς την σε όρους που αφορούν την διάταξη, τις επαφές και του τρόπου αλληλεπίδρασης μεταξύ τους, παίρνουμε:

$$\begin{pmatrix} E - H_1 & -\tau_1 & 0 \\ -\tau_1^+ & E - H_d & -\tau_2^+ \\ 0 & -\tau_2 & E - H_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_1 & G_{1d} & G_{12} \\ G_{d1} & G_d & G_{d2} \\ G_{21} & G_{2d} & G_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbb{I} & 0 & 0 \\ 0 & \mathbb{I} & 0 \\ 0 & 0 & \mathbb{I} \end{pmatrix} \tag{4.4.7}$$

Από τις τρείς εξισώσεις στην δεύτερη στήλη του δεύτερου πίνακα της αριστερής πλευράς της Εξ.(4.4.7) έχουμε:

$$\begin{cases} (E - H_1)G_{1d} - \tau_1 G_d = 0 & (4.4.8) \\ -\tau_1^+ G_{1d} + (E - H_d)G_d - \tau_2^+ G_{2d} = \mathbb{I} & (4.4.9) \\ (E - H_2)G_{2d} - \tau_2 G_d = 0 & (4.4.10) \end{cases}$$

και λύνοντας τις Εξ.(4.4.8) και Εξ.(4.4.10) ως προς G_{1d} και G_{2d} παίρνουμε:

$$G_{1d} = g_1 \tau_1 G_d \tag{4.4.11}$$
$$G_{2d} = g_2 \tau_2 G_d \tag{4.4.12}$$

όπου $g_{1,2}$ είναι οι συναρτήσεις Green των απομονωμένων επαφών 1 και 2 : $(E\text{-}H_{1,2})g_{1,2} = \mathbb{I}$
Αντικαθιστώντας στην Εξ.(4.4.9) τις (4.4.11) και (4.4.12) καταλήγουμε στην:

$$-\tau_1^+ g_1 \tau_1 G_d + (E - H_d)G_d - \tau_2^+ g_2 \tau_2 G_d = \mathbb{I} \tag{4.4.13}$$

απ' την οποία η συνάρτηση Green της «ανοιχτού» διάταξης, G_d, είναι:

$$G_d = (E - H_d - \Sigma_1 - \Sigma_2)^{-1} \tag{4.4.14}$$

όπου τα $\Sigma_1 = \tau_1^+ g_1 \tau_1$ και $\Sigma_2 = \tau_2^+ g_2 \tau_2$ είναι οι επονομαζόμενες self-energies στην περίπτωση που το σύστημα έχει δύο επαφές.
Στην βαλλιστική περίπτωση, όλοι οι εξαγόμενοι υπολογισμοί μπορούν να προκύψουν από την (retarded) συνάρτηση Green, G_d, του ανοιχτού συστήματος:

$$G_d(E) = (E\,\mathbb{I} - H_d - \Sigma)^{-1} \tag{4.4.15}$$

Η οποία μπορεί να εκφραστεί σε όρους κλειστού συστήματος με την βοήθεια της εξίσωσης Dyson [10] ως:

$$G_d = A^{-1} G^0 = (\mathbb{I} - G^0 \Sigma)^{-1} G^0 \tag{4.4.16}$$

$$G^0(E) = (E\,\mathbb{I} - H_d + iO^+) = \sum_n \frac{|\psi_{d_n}><\psi_{d_n}|}{E - E_n + iO^+} \tag{4.4.17}$$

Ο όρος iO^+ της Εξ.(4.4.17) μπορεί να αγνοηθεί αν $E \neq E_n$. Επίσης αν οι κυματοσυναρτήσεις ψ_{d_n} είναι πραγματικές τότε οι συναρτήσεις Green του κλειστού συστήματος είναι και αυτές πραγματικές με αποτέλεσμα να γίνονται ίσες με τις Advanced συναρτήσεις Green του κλειστού συστήματος. Άπαξ και υπολογιστεί ο πίνακας $\Sigma(E)$, η εκτίμηση της G_d (του ανοιχτού συστήματος), γενικά, απαιτεί την αντιστροφή ενός μεγάλου πίνακα Α μεγέθους N_T x N_T.

- ***<u>Απόκριση σε εισερχόμενο κύμα</u>***

Στην περίπτωση όπου δεν βρισκόμαστε πλέον σε ισορροπία τα reservoirs (επαφές) με διαφορετικό χημικό δυναμικό θα εμβάλλουν ηλεκτρόνια και θα καταλάβουν καταστάσεις που αντιστοιχούν σε εισερχόμενα κύματα στις επαφές. Θα επιχειρήσουμε να βρούμε αυτές τις λύσεις που αντιστοιχούν σε αυτά τα εισερχόμενα κύματα.
Αρχικά, θα θεωρήσουμε την επαφή 1 απομονωμένη από τις άλλες επαφές και την διάταξη. Σε κάποια συγκεκριμένη ενέργεια, έχουμε λύσεις που αντιστοιχούν σε ένα εισερχόμενο κύμα το οποίο και ανακλάται πλήρως στο τέλος της επαφής. Θα ονομάσουμε αυτές τις λύσεις $|\psi_{1,n}>$, όπου το 1 δηλώνει τον αριθμό της επαφής και το n τον κβαντικό αριθμό (μπορεί να έχουμε πάνω από έναν στις επαφές).
Συνδέοντας, τώρα, τις επαφές στην διάταξη μπορούμε να υπολογίσουμε τις κυματοσυναρτήσεις όλου του συστήματος(εξαιτίας του εισερχομένου κύματος στην επαφή 1). Μια τέτοια λύση θα έχει την μορφή $|\psi_{1,n}> + |\psi^R>$ όπου η $|\psi_{1,n}>$ είναι το ολικό ανακλώμενο κύμα και $|\psi^R>$ είναι η retarded απόκριση του όλου συστήματος. Βάζοντας αυτήν τη λύση στην Εξ.(4.4.5) έχουμε:

$$\begin{pmatrix} H_1 + \tau_1 + \\ H_d + \tau_1^+ + \tau_2^+ + \\ H_2 + \tau_2 \end{pmatrix} (\,|\psi_{1,n}> + |\psi^R>) = E\,(\,|\psi_{1,n}> + |\psi^R>) \tag{4.4.18}$$

$$\begin{pmatrix} E\,|\psi_{1,n}> \\ \tau_1^+|\psi_{1,n}> \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} H_1 + \tau_1 + \\ H_d + \tau_1^+ + \tau_2^+ + \\ H_2 + \tau_2 \end{pmatrix} |\psi^R> = E\,(\,|\psi_{1,n}> + |\psi^R>) \tag{4.4.19}$$

$$H\,|\psi^R> = E\,|\psi^R> - \tau_1^+\,|\psi_{1,n}> \tag{4.4.20}$$

Βλέπουμε, λοιπόν, πως η $|\psi^R>$ μας δίνει την απόκριση όλου του συστήματος σε μια διαταραχή της μορφής $-\tau_1^+\,|\psi_{1,n}>$. Άρα:

$$|\psi^R> = G\tau_1^+|\psi_{1,n}> \tag{4.4.21}$$

Να σημειώσουμε ότι έχουμε επιλέξει της retarded απόκριση, πράγμα που σημαίνει πως το μόνο κομμάτι του κύματος που οδεύει προς την διάταξη είναι το εισερχόμενο κύμα (κομμάτι του $|\psi_{1,n}>$).
Επίσης, θα ήταν χρήσιμο αν είχαμε και την έκφραση για την κυματοσυνάρτηση στην διάταξη ($|\psi_d>$) καθώς και για τις επαφές ($|\psi_{1,2}>$).
Για την διάταξη από την Εξ.(4.4.21) έχουμε:

$$|\psi_d> = G_d\tau_1^+|\psi_{1,n}> \tag{4.4.22}$$

Από την Εξ.(4.4.5) και την Εξ.(4.4.22) η κυματοσυνάρτηση της επαφής 2 μπορεί να εκφραστεί στην μορφή:

$$|\psi_2> = g_2\tau_2|\psi_d> = g_2\tau_2 G_d\tau_1^+|\psi_{1,n}> \tag{4.4.23}$$

Για την επαφή 1 η λογική παραμένει η ίδια, όμως πρέπει να προσέξουμε να συμπεριλάβουμε και το εισερχόμενο κύμα $|\psi_{1,n}>$:

$$|\psi_1> = (1 + g_1\tau_1 G_d\tau_1^+)\,|\psi_{1,n}> \tag{4.4.24}$$

- ***<u>Ρεύμα πιθανότητας</u>***

Με την ύπαρξη διαφορετικού χημικού δυναμικού στα reservoirs αμέσως συνεπάγεται και ρεύμα.
Από την εξίσωση συνέχειας (έχοντας δύο επαφές) έχουμε:

$$\frac{\partial \sum_i |\psi_i|^2}{\partial t} = 0 = \sum_i \frac{\partial <\psi|i><i|\psi>}{\partial t} = \sum_i (\frac{\partial <\psi|i>}{\partial t} <i|\psi> + <\psi|i> \frac{\partial <i|\psi>}{\partial t}) \tag{4.4.25}$$

$$= \frac{i}{\hbar}\sum_i [<\psi|H|i><i|\psi> - <\psi|i><i|H|\psi>]$$

$$= \frac{i}{\hbar}[<\psi|H|\psi_d> - <\psi_d|H|\psi>] \tag{4.4.26}$$

$$= \frac{i}{\hbar}[<\psi|H_d + \tau_1 + \tau_2|\psi_d> - <\psi_d|H_d + \tau_1^+ + \tau_2^+|\psi>] \tag{4.4.27}$$

$$= \frac{i}{\hbar}([<\psi_1|\tau_1|\psi_d> - <\psi_d|\tau_1^+|\psi_1>] + [<\psi_2|\tau_2|\psi_d> - <\psi_d|\tau_2^+|\psi_2>]) \tag{4.4.28}$$

Στην Εξ(4.4.28) ο πρώτος όρος της παρένθεσης εκφράζει το εισερχόμενο ρεύμα πιθανότητας στην διάταξη, από την επαφή 1 και ο δεύτερος από την επαφή 2 αντίστοιχα.
Γενικεύοντας, για μια τυχαία επαφή j το ηλεκτρικό ρεύμα (σε μια ενέργεια) είναι:

$$i_j = -\frac{ie}{\hbar}(<\psi_j|\tau_j|\psi_d> - <\psi_d|\tau_j^+|\psi_j>) \tag{4.4.29}$$

Θεωρούμε το i_j ως θετικό για ρεύμα από τις επαφές στην διάταξη.

- ***<u>Ηλεκτρικό ρεύμα</u>***

Από τις εξισώσεις (4.4.22) και (4.4.23), η (4.4.29) για εισερχόμενο κύμα από την επαφή 1, ενέργειας E κατά μήκος της σύζευξης τ_2,γίνεται:

$$i_{2(from\,1)} = -\frac{ie}{\hbar}[< \psi_2|\tau_2|\psi_d > - < \psi_d|\tau_2^+|\psi_2 >] \quad (4.4.30)$$

$$= -\frac{ie}{\hbar}\left[< \psi_{1,n}|\tau_1 G_d^+ \tau_2^+ g_2^+ \tau_2 G_d \tau_1^+|\psi_{1,n} > - < \psi_{1,n}|\tau_1 G_d^+ \tau_2^+ g_2 \tau_2 G_d \tau_1^+|\psi_{1,n} >\right] \quad (4.4.31)$$

$$= -\frac{ie}{\hbar}\left[< \psi_{1,n}|\tau_1 G_d^+ \tau_2^+ (g_2^+ - g_2)\tau_2 G_d \tau_1^+|\psi_{1,n} >\right] \quad (4.4.32)$$

$$= \frac{e}{\hbar}\left[< \psi_{1,n}|\tau_1 G_d^+ \Gamma_2 G_d \tau_1^+|\psi_{1,n} >\right] \quad (4.4.33)$$

Το οποίο εκφράζει το ρεύμα στην επαφή 2 προερχόμενο από το εισερχόμενο κύμα $|\psi_{1,n} >$ στην επαφή 1. Το Γ_2 είναι ο πίνακας διεύρυνσης στην επαφή 2 και ορίζεται ως:

$$\Gamma_2 = i(\Sigma_1 - \Sigma_1^+) = i\,\tau_2^+(g_2^+ - g_2)\tau_2 \quad (4.4.34)$$

Προσθέτοντας, τώρα, σε όλες τις καταστάσεις n και υποθέτοντας ότι όλα τα ενεργειακά επίπεδα είναι γεμάτα (από το reservoir της επαφής 1) έχουμε (2→spin):

$$I_{2(from\,1)} = 2\frac{e}{\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} f(E,\mu_1)\sum\nolimits_n \delta(E - E_n) < \psi_{1,n}|\tau_1 G_d^+ \Gamma_2 G_d \tau_1^+|\psi_{1,n} > dE \quad (4.4.35)$$

$$= 2\frac{e}{\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} f(E,\mu_1)\sum\nolimits_{n,m} \delta(E - E_n) < \psi_{1,n}|\tau_1|m >< m|G_d^+ \Gamma_2 G_d \tau_1^+|\psi_{1,n} > dE \quad (4.4.36)$$

$$= 2\frac{e}{\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} f(E,\mu_1)\sum\nolimits_m < m|G_d^+ \Gamma_2 G_d \tau_1^+ \left(\sum\nolimits_n \delta(E - E_n)\,|\,\psi_{1,n} >< \psi_{1,n}|\right)\,\tau_1|m > dE \quad (4.4.37)$$

$$= 2\frac{e}{\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} f(E,\mu_1)\sum\nolimits_m < m|G_d^+ \Gamma_2 G_d \tau_1^+\,\frac{s_1}{2\pi}\,\tau_1|m > dE \quad (4.4.38)$$

$$= \frac{e}{\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} f(E,\mu_1)\,Tr\{G_d^+ \Gamma_2 G_d \Gamma_1\}\,dE \quad (4.4.39)$$

Να σημειώσουμε σε αυτό το σημείο πως ο όρος $\sum_n \delta(E - E_n)\,|\,\psi_{1,n} >< \psi_{1,n}|$ εκφράζει έναν πιο γενικό όρο που ονομάζεται “φασματική συνάρτηση” (spectral function) και ορίζεται ως:

$$S = i(G - G^+) = \sum\nolimits_n \delta(E - E_n)\,|\,n >< n| \quad (4.4.40)$$

που δίνει την Πυκνότητα Καταστάσεων (DOS) και όλες τις λύσεις της εξίσωσης Schrodinger !
Το ολικό ρεύμα εκφράζεται από την διαφορά του $I_{2(from\,1)}$ με το ρεύμα από την επαφή 2 ($I_{1(from\,2)}$) ως:

$$I = \frac{e}{\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}[f(E,\mu_1) - f(E,\mu_2)]\,Tr\{G_d^+ \Gamma_2 G_d \Gamma_1\}\,dE \quad (4.4.41)$$

Που είναι ακριβώς η έκφραση Landauer-Buttiker για το ρεύμα που αναφέραμε και στην Εξ.-(4.3.1) με τον συντελεστή διέλευσης να δίνεται από την σχέση:

$$T_{12} = Tr\{G_d^+ \Gamma_2 G_d \Gamma_1\} \tag{4.4.42}$$

και να εκφράζεται από την διαγώνιο του γινομένου πινάκων της συνάρτησης Green της διάταξης και του πίνακα διεύρυνσης των επαφών.

- **<u>Προσεγγιστική μεθοδολογία **C**ontact **B**lock **R**eduction (CBR)</u>**

  - ***<u>Βασική Περιγραφή</u>***

Η ουσία της μεθόδου CBR κρύβεται στην αποδόμηση της G_d σε φραγμούς (blocks) περιγράφοντας με την βοήθεια των συναρτήσεων Green το τι συμβαίνει, ξεχωριστά για την κυρίως διάταξη, ξεχωριστά για τις επαφές καθώς επίσης και ξεχωριστά για τον τρόπο με τον οποίο αυτά αλληλεπιδρούν. Οι φραγμοί αυτοί είναι τέτοιοι ώστε ο συντελεστής διέλευσης του ανοιχτού συστήματος να υπολογίζεται αντιστρέφοντας μόνο μικρούς πίνακες. Στο όριο της βαλλιστικής διάδοσης, που περιγράφεται από την CBR μέθοδο, για τον υπολογισμό του ρεύματος ή του συντελεστή διέλευσης δεν είναι απαραίτητο να γνωρίζει κανείς την συνάρτηση Green, G(E), που περιγράφει όλο το σύστημα. Θα συζητήσουμε αναλυτικά παρακάτω πώς θα υπολογίσουμε τον συντελεστή διάδοσης $T(E)$, τα Local Density of States (LDOS) και την πυκνότητα των ηλεκτρονίων n(x) από την retarded συνάρτηση Green G_d του ανοιχτού συστήματος, την οποία και μπορούμε να γράψουμε υπό μορφή πίνακα ως [4]:

$$G_d = \begin{pmatrix} G_C^R & G_{CD}^R \\ G_{DC}^R & G_D^R \end{pmatrix} \tag{4.4.43}$$

όπου ο δείκτης C υποδηλώνει contact block και ο δείκτης D το device.
Ανάγοντας την παραπάνω σε μορφή κλειστού συστήματος (Εξ.(4.4.16)) με:

$$A = \mathbb{I} - G^0 \Sigma \tag{4.4.44}$$

και

$$G^0 = \begin{pmatrix} G_C^0 & G_{CD}^0 \\ G_{DC}^0 & G_D^0 \end{pmatrix} \tag{4.4.45}$$

Επίσης, στην μονοδιάστατη περίπτωση ο πίνακας αυτοενέργειας (self energy matrix) Σ(E) έχει μόνο δύο μη μηδενικούς όρους που ορίζουν την αλληλεπίδραση της διάταξης με τις δύο επαφές. Σε μορφή πίνακα, ο Σ(E) μπορεί να γραφτεί ως:

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \Sigma_C & 0 \\ 0 & 0_D \end{pmatrix} \tag{4.4.46}$$

Όπου Σ_C είναι ένας υποπίνακας διαστάσεων 2 x 2 που περιλαμβάνει τα Σ_1 και Σ_2 και το στοιχείο 0_D είναι ένας τετραγωνικός, μηδενικός πίνακας διαστάσεων $N_D \, x \, N_D$.Έτσι ο πίνακας A γίνεται:

$$A = \begin{pmatrix} I_C - G_C^0 \Sigma_C & 0 \\ -G_{DC}^0 \Sigma_C & I_D \end{pmatrix} \tag{4.4.47}$$

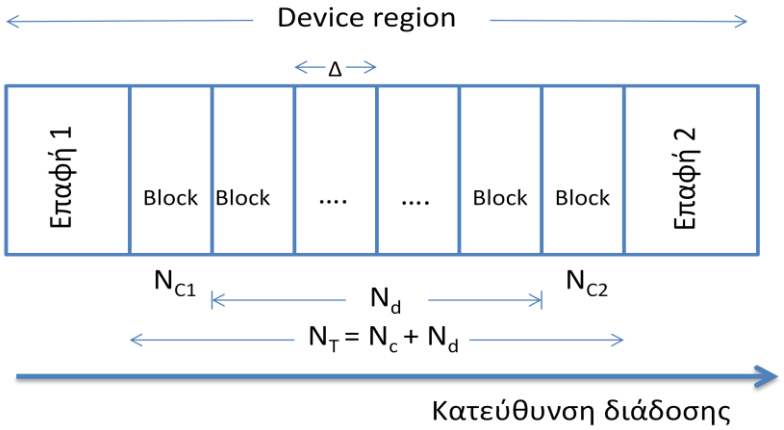
Όπου $A_C = I_C - G_C^0 \Sigma_C$. Αντιστρέφοντας τον παραπάνω πίνακα καταλήγουμε στην μορφή:

$$A^{-1} = \begin{pmatrix} A_C^{-1} & 0 \\ G_{DC}^0 \Sigma_C A_C^{-1} & I_D \end{pmatrix} \tag{4.4.48}$$

Έτσι η Εξ.(4.4.43) μπορεί να γραφτεί από την Εξ.(4.4.45) και Εξ.(4.4.48), ως:

$$G_d = \begin{pmatrix} A_C^{-1} G_C^0 & A_C^{-1} G_{CD}^R \\ G_{DC}^0 \Sigma_C A_C^{-1} G_C^0 + G_{DC}^0 & G_{DC}^0 \Sigma_C A_C^{-1} G_{CD}^0 + G_D^R \end{pmatrix} \tag{4.4.43'}$$

Αυτή η σχέση μας δείχνει πως κάθε στοιχείο/φραγμός της συνάρτησης Green της διάταξης, παρουσία των επαφών, μπορεί να υπολογιστεί αντιστρέφοντας μόνο τον μικρό υποπίνακα A_C. Μια σχηματική αναπαράσταση του όλου συστήματος είναι αυτή που φαίνεται στην Εικόνα 4.4.1.



Εικόνα 4.4.1 – Σχηματική απεικόνιση του όλου συστήματος, στην 1D περίπτωση, και του διαχωρισμού του στους φραγμούς των επαφών και της διάταξης.

Όπως βλέπουμε και από την εικόνα στα μονοδιάστατα συστήματα μπορούμε να έχουμε μόνο δυο reservoir ηλεκτρονίων ή επαφές (leads, L=2) τα οποία και βρίσκονται στα πιο αριστερά και πιο δεξιά συνοριακά σημεία του συστήματος και περιέχουν μόνο ένα πλεγματικό σημείο (N_λ=1). Τα σημεία αυτά (N_{C1} και N_{C2}) συνδέουν τις επαφές με το σύστημα-διάταξη, έτσι ο συνολικός αριθμός των σημείων που ενώνονται με την διάταξη είναι N_C=2. Κατ' αυτόν τον τρόπο οι υπολογισμοί που λαμβάνουν χώρα στη μέθοδο CBR απλοποιούνται σημαντικά μιας και οι διαστάσεις των πινάκων που λαμβάνουν μέρος γίνονται 2x2. Έτσι όταν θελήσουμε, για παράδειγμα, να υπολογίσουμε τον συντελεστή διέλευσης T(E) για κάθε ενέργεια, μόνο 2x2 πίνακες πρέπει να αντιστραφούν.

- ***Τοπική Πυκνότητα Καταστάσεων (LDOS)***

Για τον προσδιορισμό της Τοπικής Πυκνότητας Καταστάσεων (**L**ocal **D**ensity **O**f **S**tates) χρειαζόμαστε το κάτω αριστερό μέρος της G_d της Εξ.(4.4.43) ή (Εξ.(4.4.43')) . Ο όρος G_{DC}^R συσχετίζει την διάταξη με τις επαφές. Οι πίνακες G_{DC}^R και G_{DC}^0 , όμως, δεν είναι τετραγωνικοί μιας και αναμειγνύουν N_D σημεία της διάταξης με N_C σημεία των επαφών. Ο G_{DC}^0 μπορεί να εκφραστεί κατ' αυτόν τον τρόπο ως [5]:

$$G_{DC}^0 = \sum_{n=1}^{n_a} \frac{|\psi_{d_n,D} >< \psi_{d_n,C}|}{E_i - E_n} \tag{4.4.49}$$

που παίρνει την μορφή:

$$G_{DC}^{0}(z,m) = \sum_{n=1}^{n_a} \frac{< z|\psi_{d_n,D} >< \psi_{d_n,C}|m >}{E_i - E_n} \tag{4.4.50}$$

όπου το z εκφράζει τον πραγματικό χώρο (σημεία) της διάταξης και το m των επαφών.
Το LDOS, ρ(z, E), επί της ουσίας είναι η διαγώνιος ενός πιο γενικού όρου που ονομάζεται spectral function S(E)=S(z, z΄, E) ο οποίος από την θεωρία NEGF ορίζεται και ως [4] :

$$S = i\left(G_d - G_d{}^{\dagger}\right) = G_d \Gamma_C G_d{}^{\dagger} \tag{4.4.51}$$

Το LDOS ρ^{λ}, για κάθε επαφή λ, μπορεί εύκολα να υπολογιστεί σε κάθε σημείο z από την retarded συνάρτηση Green $G_{DC}^{R}(z,m)$ και τον πίνακα διεύρυνσης Γ από την σχέση:

$$\rho^{\lambda}(z,E_i) = \frac{1}{2\pi} < z|G_d \Gamma^{\lambda} G_d{}^{\dagger}|z > \tag{4.4.52}$$

$$= \frac{1}{2\pi} \sum_{m=1}^{m_a^{\lambda}} |G_{DC}^{R}(z,m)|^2 \, \Gamma_{mm}^{\lambda} \tag{4.4.53}$$

Το άθροισμα γίνεται πάνω σε όλες τις καταστάσεις m της λ επαφής. Όμως, όπως είπαμε και πριν, στην 1-D περίπτωση υπάρχει μόνο μια κατάσταση για κάθε επαφή, έτσι ο G_{DC}^{R} γίνεται ένας N_Dx2 πίνακας με τον Γ_{mm}^{λ} να είναι η διαγώνιος του Γ^{λ}.
Στην μονοδιάστατη περίπτωση οι μονάδες του LDOS πρέπει να είναι [$eV^{-1}nm^{-1}$], γι' αυτό αν έχουμε κανονικοποιήσει τις κυματοσυναρτήσεις ώστε να είναι αδιάστατες θα πρέπει να διαιρέσουμε τις τιμές του LDOS με την απόσταση των πλεγματικών σημείων Δ για να είμαστε συνεπής.
Το ολικό LDOS δίνεται από το άθροισμα των LDOS για κάθε επαφή, πάνω σε όλες τις επαφές

$$\rho(z,E_i) = \sum_{\lambda=1}^{L} \rho^{\lambda}(z,E_i) \tag{4.4.53}$$

Η πυκνότητα καταστάσεων DOS $D^{\lambda}(E_i)$, με τη σειρά της, για κάθε επαφή μπορεί να υπολογιστεί από το ολοκλήρωμα του LDOS $\rho^{\lambda}(z,E_i)$ για κάθε ενέργεια E_i σε όλο το διάστημα του z:

$$D^{\lambda}(E_i) = \int \rho^{\lambda}(E_i)dz = \Delta \sum_{z=1}^{N} \rho^{\lambda}(E_i) \tag{4.4.54}$$

με ολική πυκνότητα καταστάσεων:

$$D(E_i) = \sum_{\lambda=1}^{L} D^{\lambda}(E_i) \qquad [eV^{-1}] \tag{4.4.55}$$

- ***<u>Πυκνότητα φορέων</u>***

Η πυκνότητα των φορέων μπορεί να υπολογιστεί από τον πίνακα πυκνότητας (πιο σύνηθες σε πιο προχωρημένες και πολύπλοκες μεθόδους όπως η NEGF) ή από το LDOS. Εδώ, την υπολογίσαμε με την βοήθεια του LDOS που είναι πιο προτιμητέα όταν έχουμε προβλήματα

αυτοσυνέπειας μιας και επιτρέπει την χρήση της μεθόδου predictor-corrector που βελτιώνει τη σύγκλιση των αποτελεσμάτων.
Από το LDOS $\rho^{\lambda}(z,E_i)$ της λ επαφής, η τοπική, ενεργειακά εξαρτώμενη, συγκέντρωση φορέων $n_E^{\lambda}(z,E)$ για κάθε επαφή λ, προσδιορίζεται από την κατάληψη του κάθε επιπέδου σύμφωνα με την συνάρτηση κατανομής Fermi $f(E,\mu_{\lambda})$ της αντίστοιχης επαφής, και δίνεται από τη σχέση [5]:

$$n_E^{\lambda}(z,E) = g_S g_V\, \rho^{\lambda}(z,E) f_{dD}(E,\mu_{\lambda}) \tag{4.4.56}$$

όπου το g_S=2 εκφράζει τον εκφυλισμό λόγο του spin και το g_V εκφράζει το valley degeneracy (που σχετίζεται με τον τρόπο αντιμετώπισης των φορέων οι οποίοι δεν βρίσκονται στο κέντρο Γ της ζώνης Brillouin , που συνεπάγει k=0). Η συνάρτηση Fermi για μια διάταξη ομοιογενής στις x και y διευθύνσεις (1-D περίπτωση) για μια ενέργεια E_z, δίνεται από την σχέση:

$$f_{1D}(E_z,\mu) = \frac{m_{||}^{*}\, k_B T}{2\pi\hbar^2} \ln\left[1 + e^{\frac{E_z-\mu}{k_B T}}\right] \tag{4.4.57}$$

όπου $m_{||}^{*}(z)$ είναι ο τανυστής ενεργού μάζας στο xy επίπεδο. Έτσι η τοπική συγκέντρωση φορέων $n^{\lambda}(z)$ για κάθε επαφή δίνεται από το ολοκλήρωμα πάνω στην ενέργεια E:

$$n^{\lambda}(z) = \int n_E^{\lambda}(z,E)\, dE \tag{4.4.58}$$

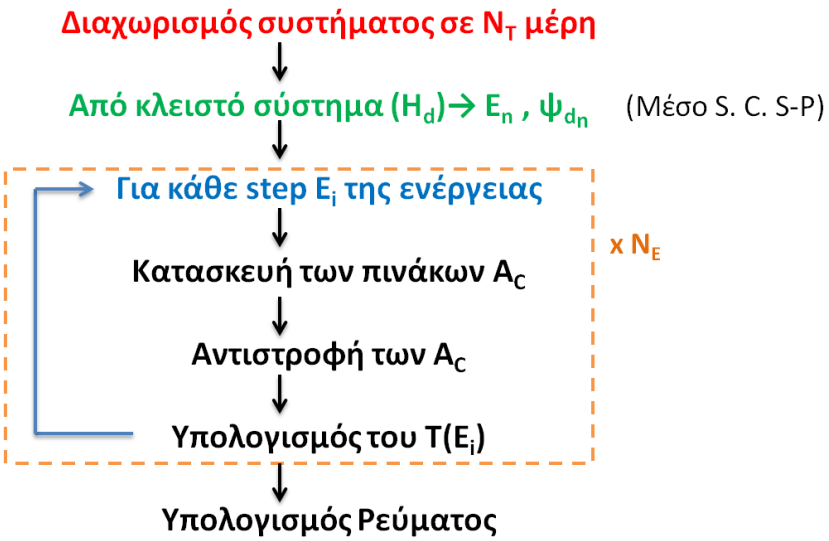
και η ολική πυκνότητα από το άθροισμα της συνεισφοράς όλων των επαφών λ:

$$n(z) = \sum_{\lambda=1}^{L} n^{\lambda}(z) \qquad [1/volume] \tag{4.4.59}$$

Πρέπει να σημειωθεί ότι στα παραπάνω, στην ενέργεια E=E_z δεν λάβαμε υπόψη μας το κομμάτι όπου $k_{||}\neq 0$. Η ολική ενέργεια του ηλεκτρονίου δίνεται από το άθροισμα της ενέργειας κατά τον άξονα z συν την ενέργεια των ηλεκτρονίων στις άλλες δύο διαστάσεις όπου θεωρούνται ελεύθερα (στην μονοδιάστατη περίπτωση). Συνεπώς για να έχουμε μια πιο σαφή εικόνα των αποτελεσμάτων πρέπει πρώτα να υπολογίσουμε το LDOS $\rho(z,E_{total})$ για την ολική ενέργεια, και μετά να υπολογίσουμε την πυκνότητα των φορέων από την Εξ.(4.4.58).

- ***<u>Αυτοσυνεπής CBR αλγόριθμος</u>***

Όπως έχουμε δει και στις προηγούμενες ενότητες, έτσι κι εδώ η λογική για έναν αυτοσυνεπή υπολογισμό της μεθόδου CBR του ανοιχτού συστήματος (με επαφές) απαιτεί την επαναλαμβανόμενη και ταυτόχρονή λύση της εξίσωσης Schrodinger και της εξίσωσης Poisson εξαιτίας της σύζευξή τους μέσω του ηλεκτροστατικού δυναμικού και της κβαντικά υπολογιζόμενης πυκνότητας φορέων. Το βασικό είναι πως και καταστάσεις των επαφών υπολογίζονται αυτοσυνεπώς χρησιμοποιώντας το δυναμικό στις επαφές, υπολογισμένο από τη λύση της εξίσωσης Poisson. Οι αριθμητικές μέθοδοι που χρησιμοποιούνται είναι αυτές που έχουμε ήδη περιγράψει και πιο νωρίς (FDM, Newton, Predictor-Corrector). Μια σχηματική αναπαράσταση για τον τρόπο με τον οποίο γίνεται ο υπολογισμός της πυκνότητας ρεύματος δίνεται από την παρακάτω εικόνα.



Εικόνα 4.4.2 – Σχηματική απεικόνιση διαδικασίας υπολογισμού της πυκνότητας ρεύματος της μεθόδου NEGF (προσεγγιστική μεθοδολογία CBR).

Αρχικά η διαδικασία ξεκινά με τον διαχωρισμό του συστήματος σε N_T πλεγματικά σημεία. Στην συνέχεια υπολογίζονται οι ιδιοενέργειες και οι ιδιοσυναρτήσεις του κλειστού συστήματος (απουσία των σημείων επαφής) μέσο της αυτοσυνεπούς επίλυσης των εξισώσεων Schrodinger και Poisson. Έπειτα επιλέγοντας το ενεργειακό εύρος στο οποίο θέλουμε να υπολογίσουμε τον συντελεστή διέλευσης το διαχωρίζουμε σε N_E σημεία και για κάθε ένα από αυτά κατασκευάζουμε τους πίνακες A_C, τους αντιστρέφουμε και υπολογίζουμε τον συντελεστή διέλευσης $T(E_i)$ σύμφωνα με την εξίσωση (4.4.42). Τέλος υπολογίζουμε την πυκνότητα ρεύματος από την σχέση (4.4.41).

4.5 Αναφορές:

1. L. V. Keldysh, Sov. Phys. JETP 20, 1018 (1965).
2. L. P. Kadanoff and G. Baym, Quantum Statistical Mechanics (W. A. Benjamin, Inc., Menlo Park, California, 1962).
3. A. Trellakis, A.T. Galick, A. Pacelli and U. Ravaioli, J. Appl. Phys. **81**, 7880 (1997)
4. D. Mamaluy and D. Vasileska, M. Sabathil, T. Zibold, and P. Vogl, PHYSICAL REVIEW B **71**, 245321 (2005)
5. Stefan Birner · Christoph Schindler · Peter Greck, Matthias Sabathil · Peter Vogl, J Comput Electron (2009) 8: 267–286
6. Landauer, R.: Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction. IBM J. Res. Develop. **32**,306 (1988)
7. Landauer, R.: Conductance from transmission: common sense points. Phys. Scr. **T42**, 110 (1992)
8. Büttiker, M.: Four-terminal phase-coherent conductance. Phys. Rev. Lett. **57**, 1761 (1986)
9. Büttiker, M.: Symmetry of electrical conduction. IBM J. Res. Develop. **32**, 317 (1988)
10. Nguyen Van Hieu and Nguyen Bich Ha, Advances in Natural Sciences, Vol. 7, No. 1 & 2 (2006) (1 – 12)

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5^{ο}

Αποτελέσματα προσομοιώσεων

5.1- Εισαγωγή

Στο πέμπτο και τελευταίο μέρος αυτής της εργασίας θα παρουσιάσουμε τα αποτελέσματα των πιο ενδιαφερόντων προσομοιώσεων που έχουν γίνει μέχρι στιγμής. Θα ξεκινήσουμε με την παρουσίαση των αποτελεσμάτων της βασικής δομής διπλού φράγματος δυναμικού AlN/GaN με τη χρήση του Nextnano^3 simulator λύνοντας τις συζευγμένες εξισώσεις Schrödinger-Poisson και Boltzmann (Συνέχεια του Ρεύματος), αυτοσυνεπώς, αγνοώντας κατ' αρχάς τα φαινόμενα βαλλιστικής μεταφοράς, όπως περιγράψαμε και στο Κεφάλαιο 4. Θα δούμε πως επηρεάζεται η δομή των ζωνών με την ύπαρξη σταθερού φορτίου στις διεπιφάνειες του κβαντικού πηγαδιού. Στη συνέχεια θα αναφερθούμε σε προσομοιώσεις βαλλιστικής μεταφοράς με την χρήση της μεθόδου Non Equilibrium Green Function (μέσο της προσεγγιστικής μεθοδολογίας CBR) σε παρόμοιες δομές. Θα δούμε τα προβλήματα που προκύπτουν με τις «κλασσικές» αυτές δομές, AlGaN/GaN, και θα τελειώσουμε προτείνοντας νέες δομές με προσθήκη περιοχών $In_xGa_{1-x}N$ με σκοπό την αντιστάθμιση των ανεπιθύμητων Πιεζοηλεκτρικών Πεδίων και των επιπτώσεων αυτών.

5.2- Αυτοσυνεπής λύση Schrodinger-Poisson-Boltzmann

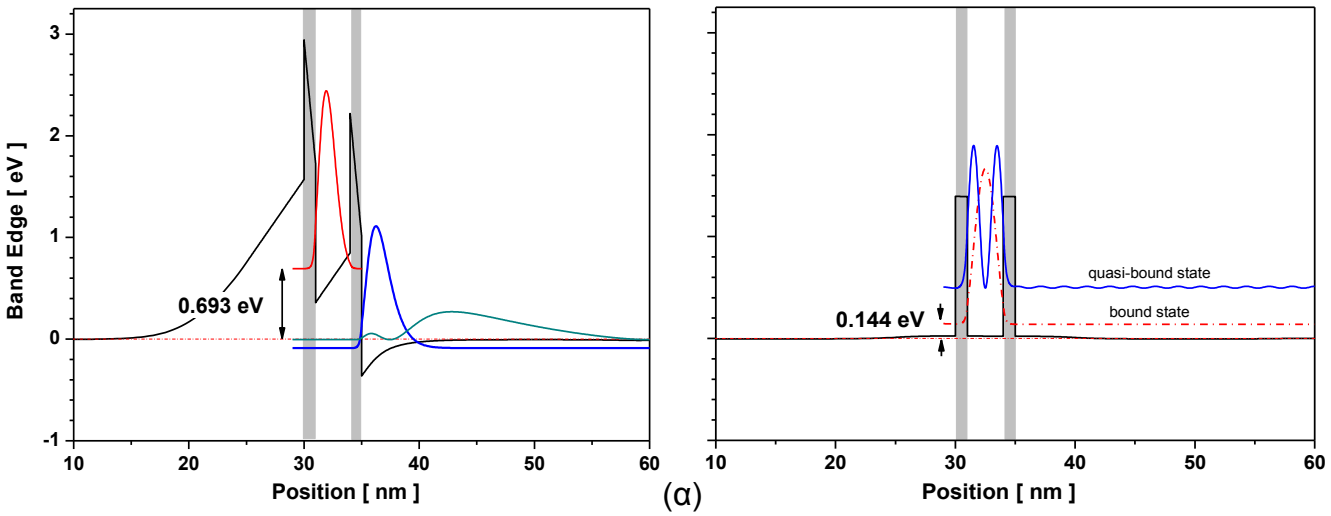
- ***Επιπτώσεις Πιεζοηλεκτρικού Πεδίου***

Η ανάγκη διερεύνησης της "ιδιόμορφης" συμπεριφοράς που παρατηρείται σε RTD δομές AlN/GaN διπλού φράγματος δυναμικού και ιδιαίτερα του ρόλου των πιεζοηλεκτρικών πεδίων σε αυτές, μας οδήγησε σε θεωρητικές μελέτες/προσομοιώσεις των ετεροδομών με την χρήση της αυτοσυνεπούς λύσης των εξισώσεων Schrödinger-Poisson και Boltzmann (Συνέχεια του Ρεύματος). Η εξίσωση Boltzmann είναι απαραίτητη για τον ακριβέστερο υπολογισμό των δυναμικών στην περίπτωση διατάξεων εκτός ισορροπίας (εφαρμογή εξωτερικής τάσης).
Η βασική δομή είναι αυτή που φαίνεται στην Εικόνα 5.2.1.

25nm **GaN** ($10^{19}cm^{-3}$ n-type doping)
5nm **GaN** (NID)
1nm **AlN** (NID) BARRIER
3nm **GaN** (NID) WELL
1nm **AlN** (NID) BARRIER
5nm **GaN** (NID)
100nm **GaN** ($10^{19}cm^{-3}$ n-type doping)
GaN (0001) Sudstrate

Εικόνα 5.2.1 – Σχηματική αναπαράσταση της βασικής πειραματικής δομής με τον αντίστοιχο εμπλουτισμό για κάθε στρώμα.

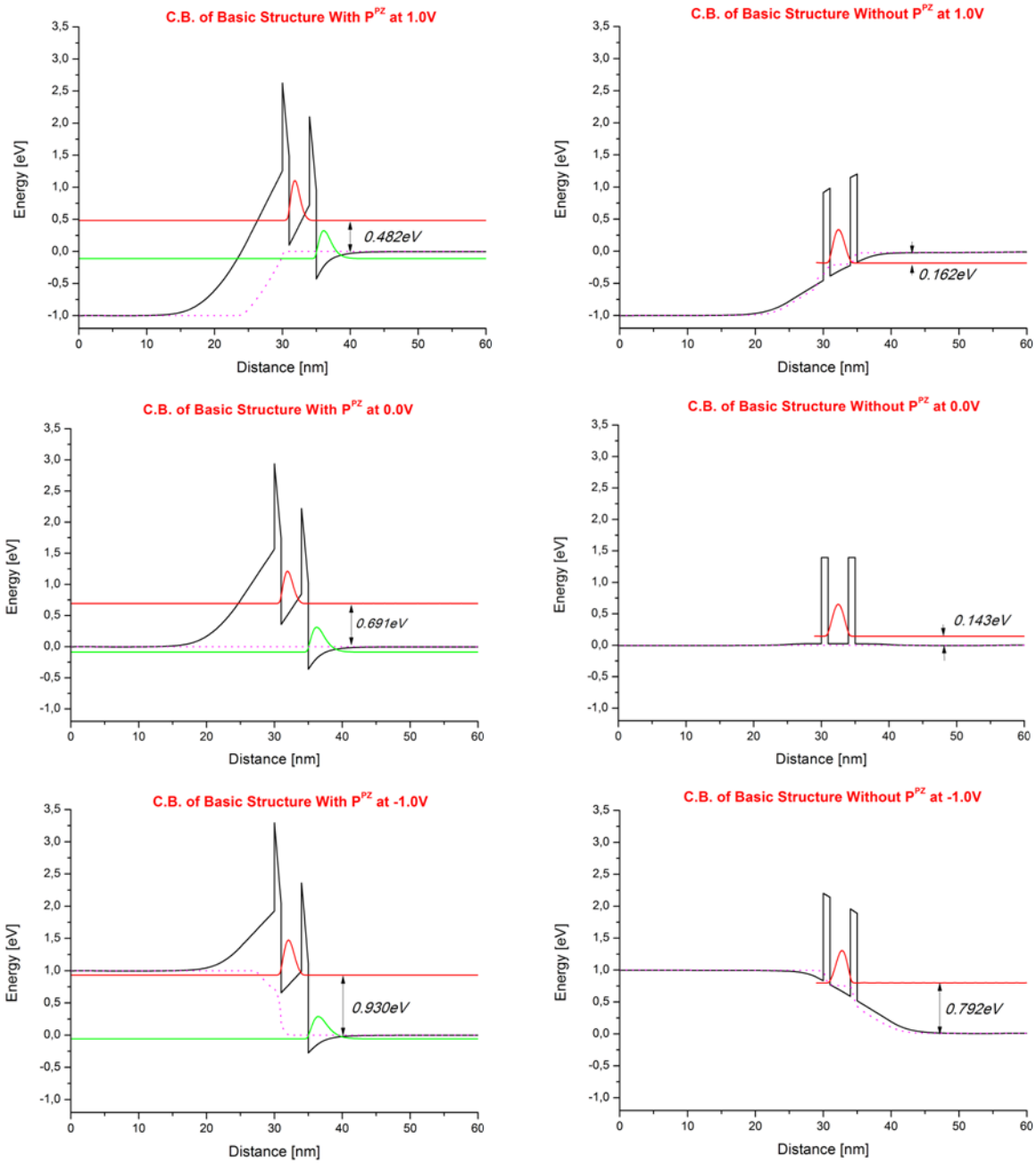
Να τονίσουμε πως στην περίπτωση των προσομοιώσεων ο εμπλουτισμός των στρωμάτων που χαρακτηρίζεται ως NID είναι 10^{16} cm^{-3} .
Όπως βλέπουμε και στην εικόνα, η δομή αυτή αποτελεί μια δίοδο συντονισμού φαινομένου σήραγγος διπλού φράγματος δυναμικού, αποτελούμενου από Νιτρίδιο του Αλουμινίου (AlN) με κβαντικό πηγάδι αποτελούμενου από Νιτρίδιο του Γαλλίου (GaN). Για την καλύτερη κατανόηση του ρόλου που παίζει η ύπαρξη των πιεζοηλεκτρικών πεδίων επιχειρήσαμε τον υπολογισμό της δομής της Εικόνας 5.2.1 με και χωρίς την παρουσία αυτών.
Στην Εικόνα 5.2.2(α) και (β) παρουσιάζεται η χωρική διαμόρφωση του κάτω άκρου της ζώνης αγωγιμότητας, σαν συνάρτηση της απόστασης από την επιφάνεια της ετεροδομής, που υπολογίζεται αυτοσυνεπώς, για τις περιπτώσεις παρουσίας και απουσίας των πιεζοηλεκτρικών πεδίων, αντίστοιχα.



Εικόνα 5.2.2 – Κάτω άκρο της Ζώνης Αγωγιμότητας της δομής της εικόνας 5.2.1 με ή χωρίς την παρουσία των Πιεζοηλεκτρικών Πεδίων στην ισορροπία.

Είναι εμφανές πως στην περίπτωση παρουσίας των πιεζοηλεκτρικών πεδίων, σε αντίθεση με την περίπτωση απουσίας αυτών, εμφανίζεται μια περιοχή δισδιάστατου νέφους ηλεκτρονίων (2DEG) στην δεξιά μεριά και μιας έντονης περιοχής απογύμνωσης στην αριστερή μεριά. Επίσης παρατηρούμε την ισχυρή ασυμμετρία των φραγμάτων δυναμικού καθώς επίσης και την υψηλότερη, ενεργειακά, τιμή τους.
Όπως φαίνεται και από την Εικόνα 5.2.3 κατά την εφαρμογή εξωτερικής τάση (συγκεκριμένα 1.0V, 0.0V και -1.0V) η ζώνη αγωγιμότητας της περίπτωσης με την παρουσία των Πιεζοηλεκτρικών Πεδίων δείχνει να παραμένει άκαμπτη από την δεξιά πλευρά κατά την εφαρμογή της εξωτερικής τάσης. Θα μπορούσε να πει κανείς πως η διαφορά δυναμικού που εισαγάγουμε στα άκρα της διάταξης (στην προκειμένη περίπτωση η δεξιά πλευρά της διάταξης παραμένει γειωμένη) δεν «εφαρμόζεται» με τον ίδιο τρόπο κατά μήκος αυτής, όπως στην περίπτωση απουσίας των Πιεζοηλεκτρικών Πεδίων. Η ύπαρξη αυτών καθώς επίσης και ο σχηματισμός ενός δισδιάστατου νέφους ηλεκτρονίων (2DEG στην δεξιά πλευρά της διάταξης) «καρφώνουν» την δεξιά πλευρά με αποτέλεσμα, να δημιουργείται μεγαλύτερη παραμόρφωση στο κάτω άκρο του κβαντικού πηγαδιού που κατά συνέπεια την αλλαγή της θέσης της ιδιοκατάστασης αυτού. Κάτι τέτοιο έχει σαν αποτέλεσμα την αλλοίωση των ιδιοτήτων της διάταξης ως προς τις συνθήκες συντονισμού με αποτέλεσμα ο προσδιορισμός τους να γίνεται δυσκολότερος. Επίσης παρατηρούμε την έντονη μεταβολή της ψευδοστάθμης Fermi των ηλεκτρονίων στην περιοχή απογύμνωσης (στα αριστερά της διάταξης) η οποία πιθανό να

σχετίζεται με τα φαινόμενα φόρτισης που παρατηρήσαμε κατά την διεξαγωγή της πειραματικής διαδικασίας (Κεφάλαιο 3^{ο}).

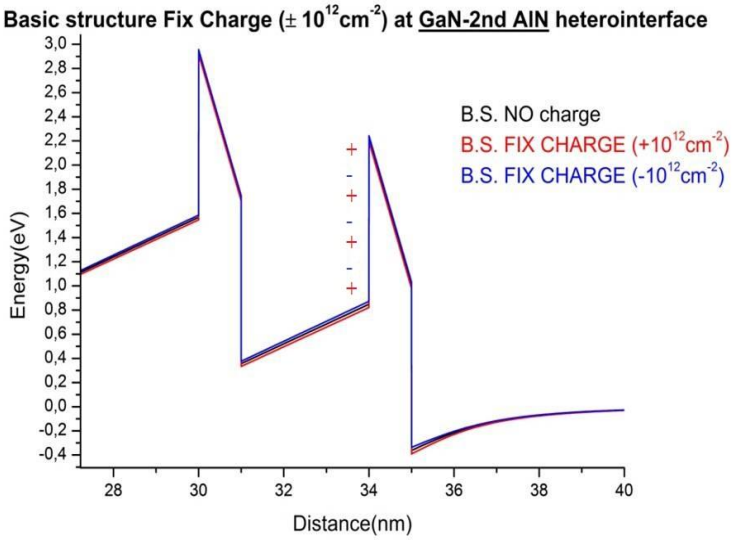


Εικόνα 5.2.3 – Ζώνη αγωγιμότητας και πρώτη κυματοσυνάρτηση του κβαντικού πηγαδιού της δομής της εικόνας 5.2.1 με ή χωρίς την παρουσία των Πιεζοηλεκτρικών Πεδίων σε τρείς διαφορετικές τάσεις.

- ***<u>Επιπτώσεις Προσθήκης Σταθερού Φορτίου</u>***

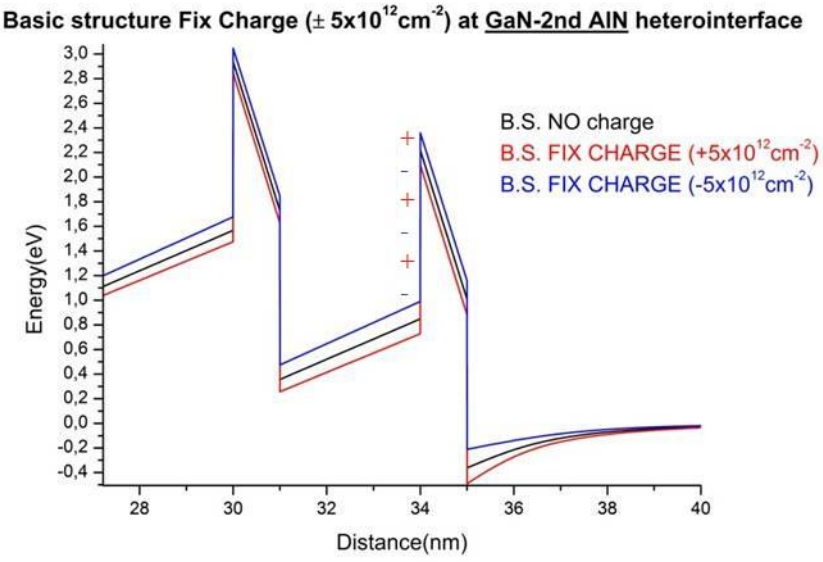
Στη συνέχεια επιχειρήσαμε να εξετάσουμε τι θα μπορούσε να συμβεί αν προσθέταμε κάποιο σταθερό επιφανειακό φορτίο στις περιοχές όπου το πηγάδι έρχεται σε επαφή με τα φράγματα δυναμικού. Δεν θα αναφερθούμε σε I-V χαρακτηριστικές ή σε καταστάσεις συντονισμού μιας και η διαδικασία που ακολουθήσαμε για την επίλυση αυτών των προβλημάτων είναι η ημικλασσική μέθοδος, αλλά κυρίως στο πώς η ύπαρξη αυτού του φορτίου επηρεάζει την ζώνη αγωγιμότητας, σε σχέση με αυτή χωρίς φορτίο.

Ξεκινήσαμε με μια πυκνότητα επιφανειακού φορτίου της τάξεως των $\pm 10^{12}$ cm^{-2} στην περιοχή όπου το πηγάδι (GaN) έρχεται σε επαφή με το δεύτερο φράγμα δυναμικού (AlN), όπως φαίνεται και στην Εικόνα 5.2.4.



Εικόνα 5.2.4 – Προσθήκη επιφανειακού φορτίου $\pm 10^{12}$ cm^{-2} σε ετεροεπαφή

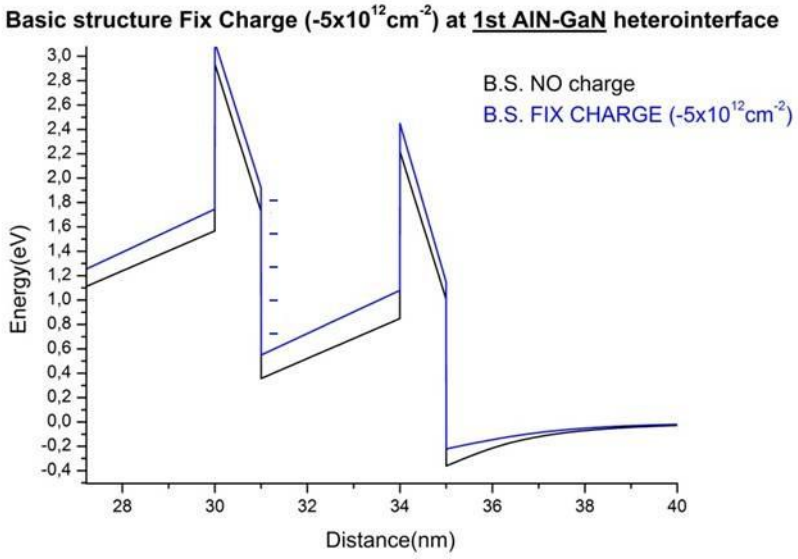
Παρατηρούμε πως η ύπαρξη τέτοιου φορτίου επηρεάζει την δομή της ζώνης αλλά σε μικρό βαθμό μιας και η πυκνότητα αυτού είναι σχετικά μικρή. Όπως φαίνεται και στην εικόνα αν το φορτίο είναι θετικό, η ζώνη παρουσιάζει μια κάμψη προς τα κάτω (κόκκινο χρώμα) σε σχέση με τη μορφή που θα είχε αν δεν υπήρχε φορτίο (μαύρο χρώμα) και μια κάμψη προς τα επάνω αν το φορτίο ήταν αρνητικό (μπλε χρώμα). Αν τώρα αυξήσουμε την πυκνότητα κατά πέντε φορές η κάμψη της ζώνης είναι πολύ πιο εμφανής(Εικόνα 5.2.5).



Εικόνα 5.2.5 - Προσθήκη επιφανειακού φορτίου $\pm 5x10^{12}$ cm^{-2} σε ετεροεπαφή

Όπως βλέπουμε η προσθήκη $-5x10^{12}$ cm^{-2} επιφανειακού φορτίου έφερε το πηγάδι περίπου 0.13eV πιο πάνω από εκεί που θα βρισκόταν αν δεν υπήρχε το φορτίο. Αν τώρα βάλουμε το ίδιο φορτίο (αρνητικό) αλλά στην ετεροεπαφή του πηγαδιού με το πρώτο φράγμα δυναμικού

τότε όπως φαίνεται και στην παρακάτω εικόνα (Εικόνα 5.2.6) το πηγάδι θα βρεθεί περίπου 0.21eV πιο επάνω.

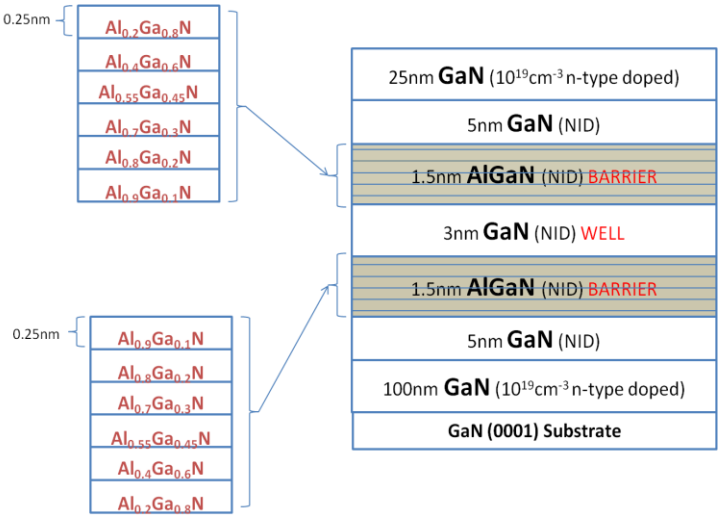


Εικόνα 5.2.6 - Προσθήκη επιφανειακού φορτίου -5x10^{12} cm^{-2} σε ετεροεπαφή

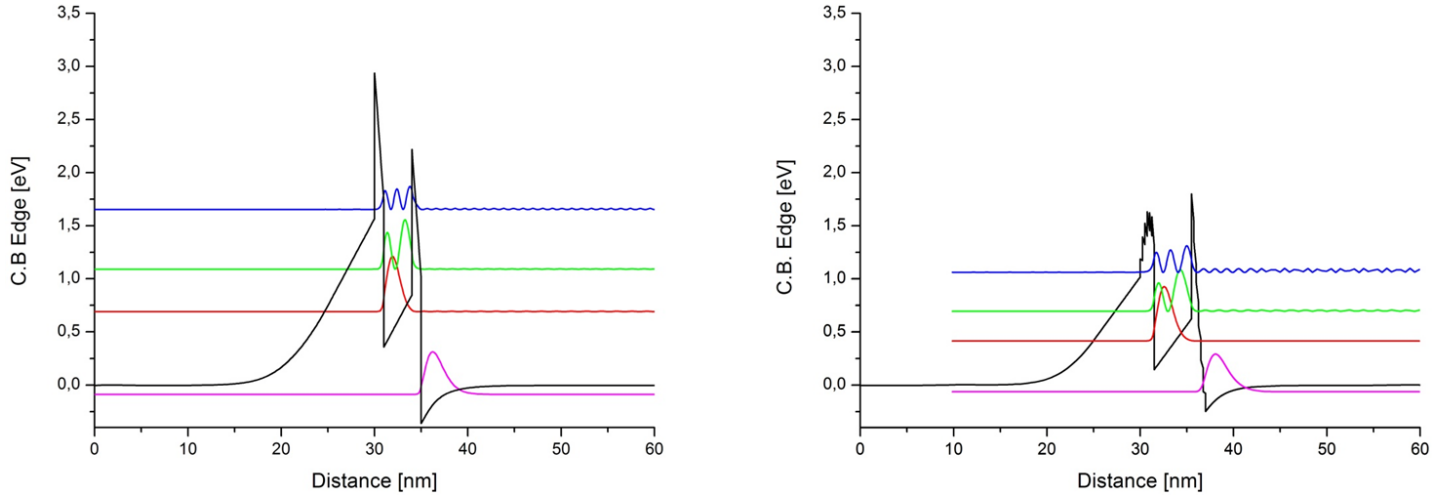
Φαίνεται πως η ύπαρξη σταθερού φορτίου στο πηγάδι (περιοχές επαφής με barriers) επηρεάζει σημαντικά την δομή της ζώνης αγωγιμότητας, σε βαθμό που δεν μπορεί να αγνοηθεί. Ίσως τα φαινόμενα υστέρησης που παρατηρούνται σε τέτοιες δομές να οφείλονται εν μέρει σε τέτοια φορτία. Παγίδευση φορτίων σε βαθιέ παγίδες, είτε στις ετεροεπιφάνειες ή στην παρατηρούμενη περιοχή απογύμνωσης.

- ***Προσπάθεια αντιμετώπισης Πιεζοηλεκτρικών «επιπτώσεων»***

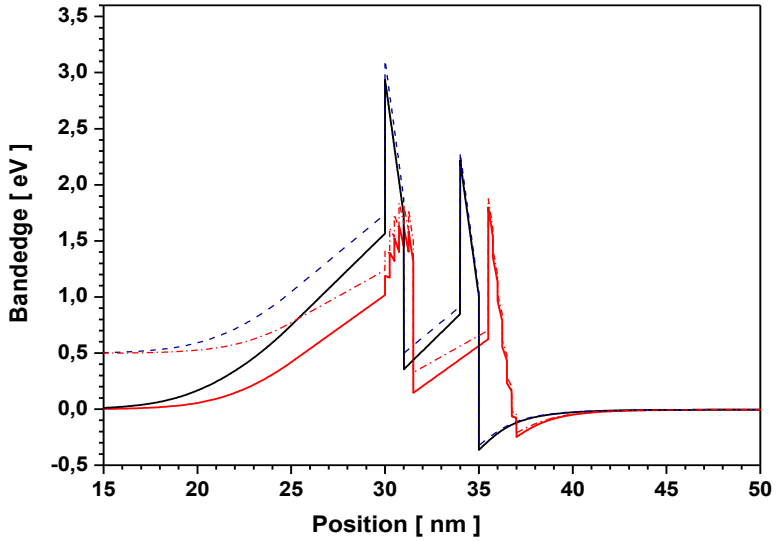
Εν συνεχεία, σε μια προσπάθεια αντιμετώπισης των ανεπιθύμητων επιπτώσεων των πιεζοηλεκτρικών πεδίων μελετήθηκαν τροποποιημένες ετεροδομές, ως προς τη δομή των φραγμάτων. Οι δομές αυτές αποτελούνται AlGaN/GaN RTD διατάξεις, διπλού φράγματος δυναμικού διαβαθμισμένης σύστασης, όπως φαίνεται και στην Εικόνα 5.2.7.



Εικόνα 3.2.7 – Σχηματική απεικόνιση AlGaN/GaN DB-RT διόδου διαβαθμισμένης σύστασης φραγμάτων δυναμικού.



Εικόνα 3.2.7 – Κάτω άκρο ζώνης αγωγιμότητας και οι πρώτες ψευδοδέσμιες ιδοκαταστάσεις μιας : (α) AlN/GaN DB-RTD δομής και (β) μιας AlGaN/GaN symmetric graded barrier DB-RTD δομής στην ισορροπία.



Εικόνα 3.2.8 – Κάτω άκρο ζώνης αγωγιμότητας και οι βασικές κυματοσυναρτήσεις μιας AlN/GaN DB-RTD δομής και μιας AlGaN/GaN symmetric graded barrier DB-RTD δομής στα 0.0V και στα -0.5V.

Όπως βλέπουμε και από τις παραπάνω εικόνες παρατηρούμε πως με την χρήση διαβαθμισμένης σύστασης κράματος AlGaN φράγματα δυναμικού επιτυγχάνεται η μείωση της ασυμμετρίας των φραγμάτων, η μείωση του δισδιάστατου νέφους ηλεκτρονίων και της περιοχής απογύμνωσης. Επίσης παρατηρούμε την μείωση του ύψους των φραγμάτων και της ενεργειακής πτώσης των ψευδοδέσμιων καταστάσεων του πηγαδιού. Με βάση την μελέτη αυτή, ετεροδομές διαβαθμισμένης σύστασης φράγματος δυναμικού αναπτύχθηκαν και σχηματοποιήθηκαν σε διατάξεις διόδων. Τα αποτελέσματα των χαρακτηριστικών ρεύματος- τάσης αναφέρθηκαν στο Κεφάλαιο 3 ενότητα 3.3 Εικόνα 3.3.9.

5.3- Αυτοσυνεπής λύση φαινομένων βαλλιστικής μεταφοράς

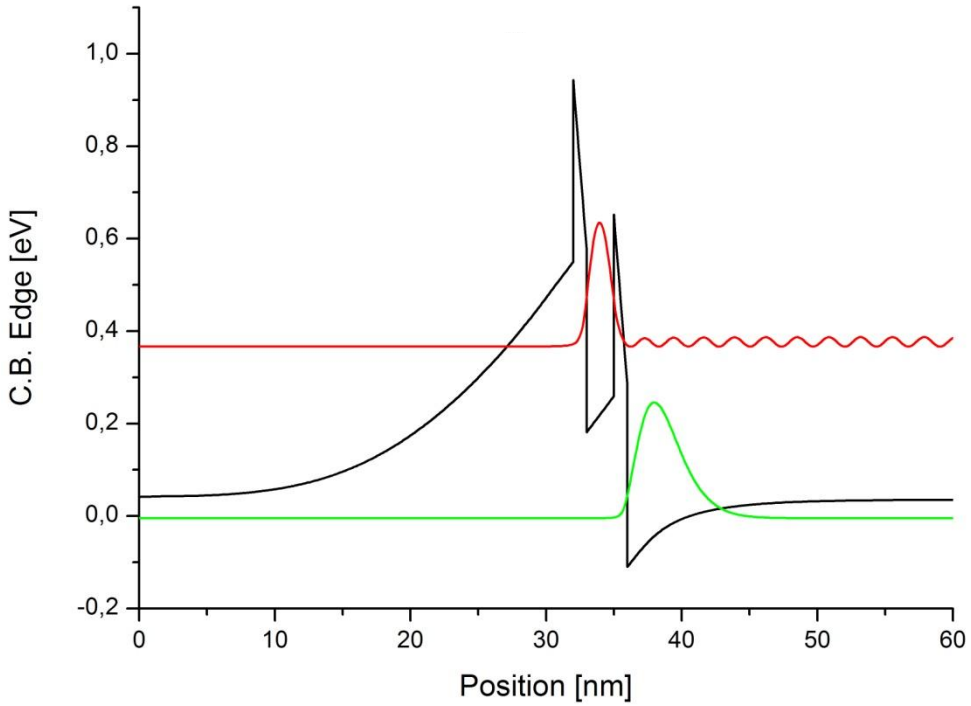
Αρχικά ξεκινήσαμε με την προσομοίωση μιας AlGaN/GaN RTD δομής διπλού φράγματος δυναμικού με σύσταση των κραμάτων φραγμάτων δυναμικού, 40% Al. Μειώσαμε το μήκος της

διόδου κατά 50nm περίπου μειώνοντας το πάχος του τελευταίου GaN στρώματος στα 50nm. Το πλάτος του πηγαδιού είναι 2nm. Μια σχηματική αναπαράσταση των στρωμάτων της δομής και του αντίστοιχου προφίλ του εμπλουτισμού φαίνεται στην Εικόνα 5.3.1

30nm **GaN** ($10^{18}cm^{-3}$ n-type doping)
2nm **GaN** (NID)
1nm $Al_{0.4}Ga_{0.6}N$ (NID) BARRIER
2nm **GaN** (NID) WELL
1nm $Al_{0.4}Ga_{0.6}N$ (NID) BARRIER
50nm **GaN** ($10^{18}cm^{-3}$ n-type doping)
GaN (0001) Substrate

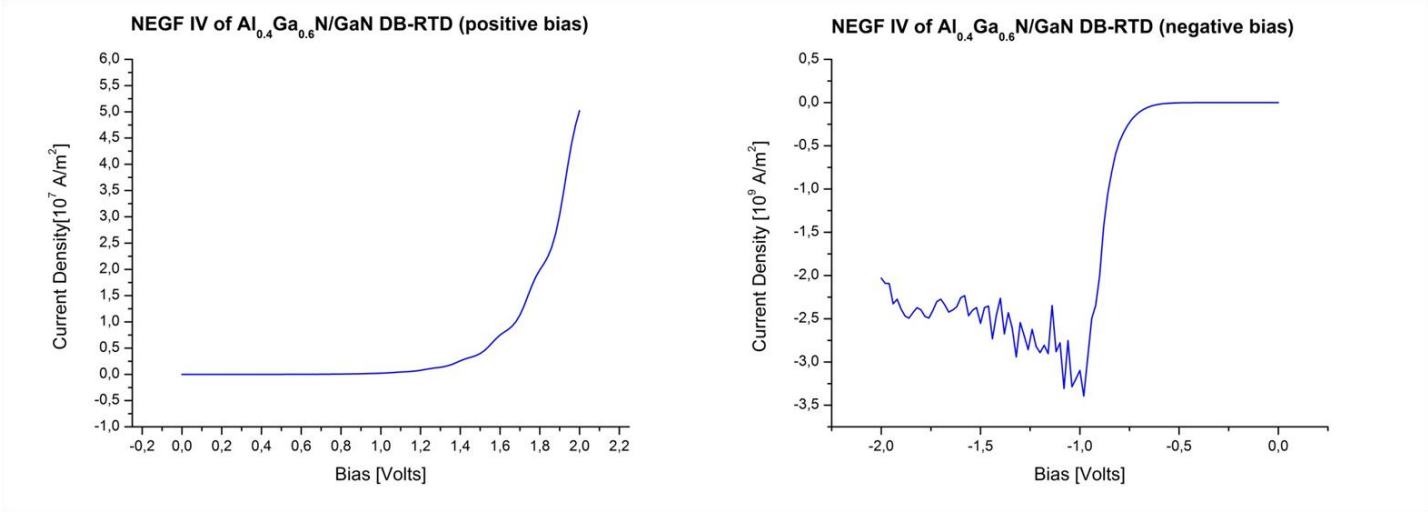
Εικόνα 5.3.2 - Σχηματική αναπαράσταση της δομής με $Al_{0.4}Ga_{0.6}N$ barriers και ο αντίστοιχος εμπλουτισμός κάθε στρώματος.

Στην ισορροπία, το προφίλ του κάτω άκρου της ζώνης αγωγιμότητας και της ψευδοδέσμιας κατάστασης του πηγαδιού φαίνονται στην Εικόνα 5.3.3.



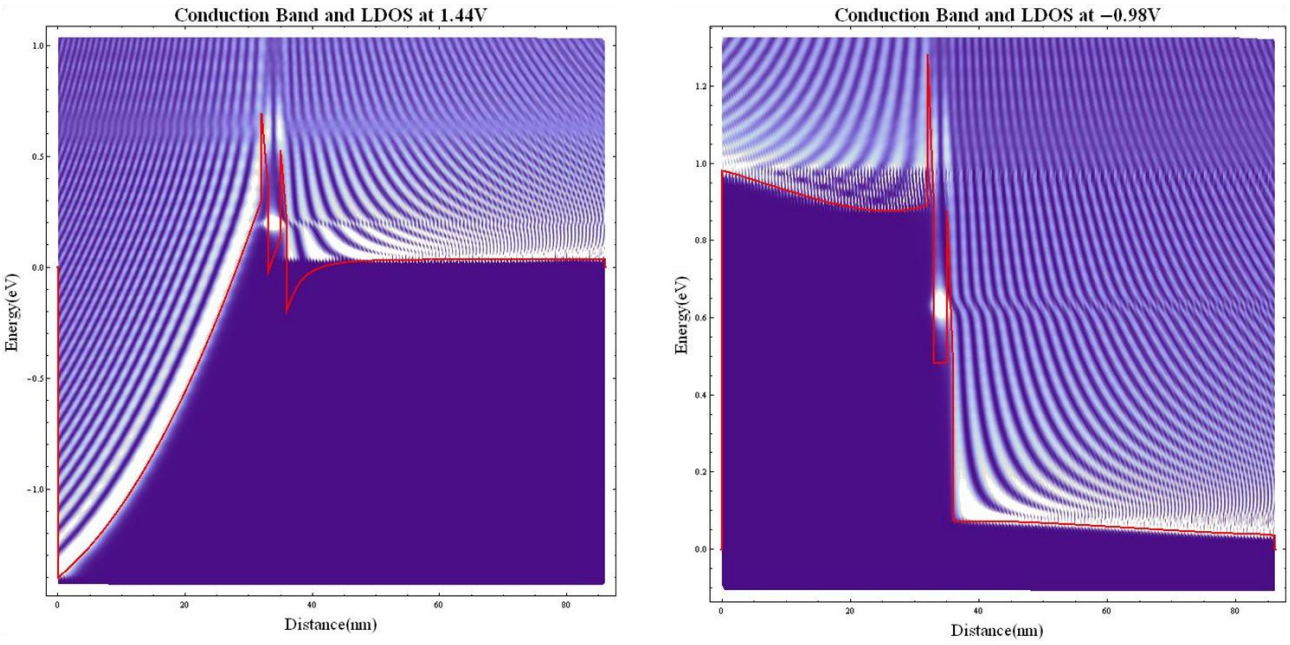
Εικόνα 5.3.3 – Κάτω άκρο ζώνης αγωγιμότητας στην ισορροπία της $Al_{0.4}Ga_{0.6}N$ /GaN DB-RTD δομής.

Η I-V χαρακτηριστική, όπως υπολογίστηκε από την μέθοδο CBR, έχει την παρακάτω μορφή (Εικόνα 5.3.4).



Εικόνα 5.3.4 – NEGF I-V το συμμετρικού Al $_{0.4}$Ga $_{0.6}$N /GaN DB-RTD.

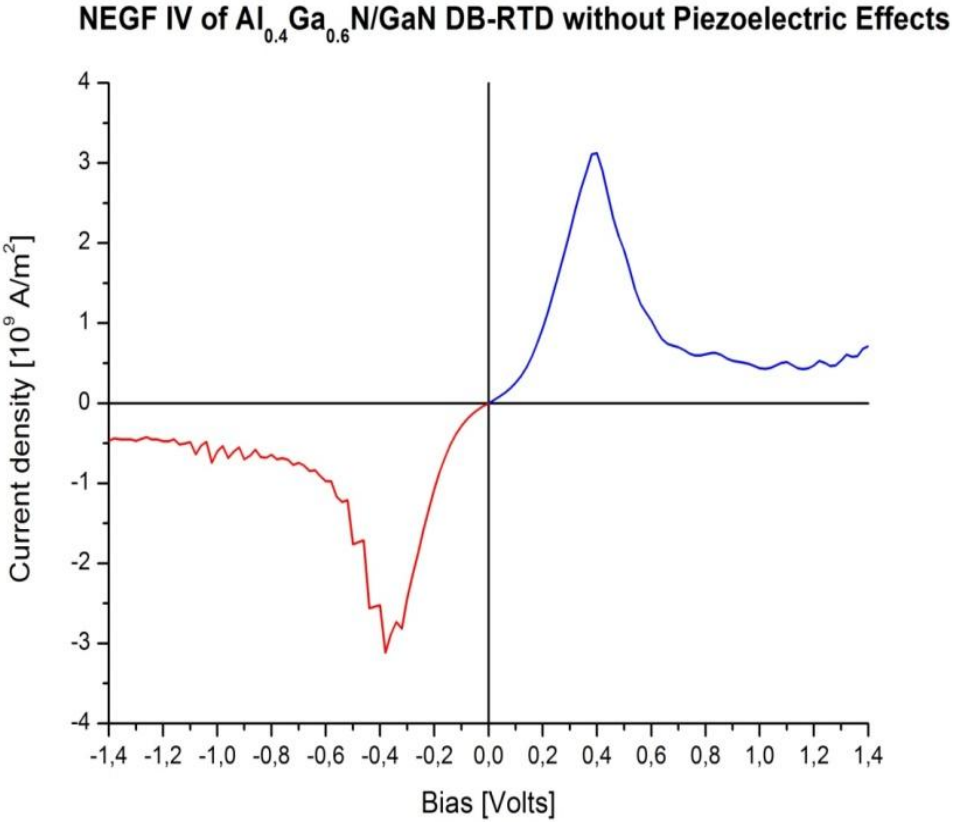
Μπορεί να παρατηρήσει κάποιος πως στα 1.44V εμφανίζεται μια τοπική αύξηση της πυκνότητας ρεύματος η οποία μετά από αυτή την τάση φτάνει σε ένα μικρό πλατό (περίπου μέχρι τα 1.5V). Θα δούμε στην συνέχεια πως μια πιο προσεκτική κατασκευή των ζωνών επιφέρει ριζικές αλλαγές στο πιεζοηλεκτρικό προφίλ και κατά συνέπεια στην εμφάνιση ισχυρών φαινομένων αρνητικής διαφορικής αντίστασης.
Εφαρμόζοντας τώρα αρνητική τάση, όπως φαίνεται και παραπάνω, παρατηρούμε την μεγιστοποίηση της πυκνότητας ρεύματος περίπου στο -1.0V το οποίο οφείλεται σε θερμιονική εκπομπή και την σταδιακή μείωσή του προς μεγαλύτερες τάσεις αλλά όχι με έναν ομαλό τρόπο, κάτι που λογικά οφείλεται στην μη ορθή σύγκληση του υπολογιστικού μοντέλου εξαιτίας της θερμιονικής εκπομπής. Το προφίλ του LDOS στα 1.44V και στα -0.98V φαίνεται στις παρακάτω εικόνες και είναι εμφανές πως η εμφάνιση ισχυρών NDR φαινομένων δεν είναι δυνατή.



Εικόνα 5.3.5 – LDOS [eV^{-1}nm^{-1}] της Al $_{0.4}$Ga $_{0.6}$N /GaN DB-RTD δομής στα 1.44V και -0.98V.

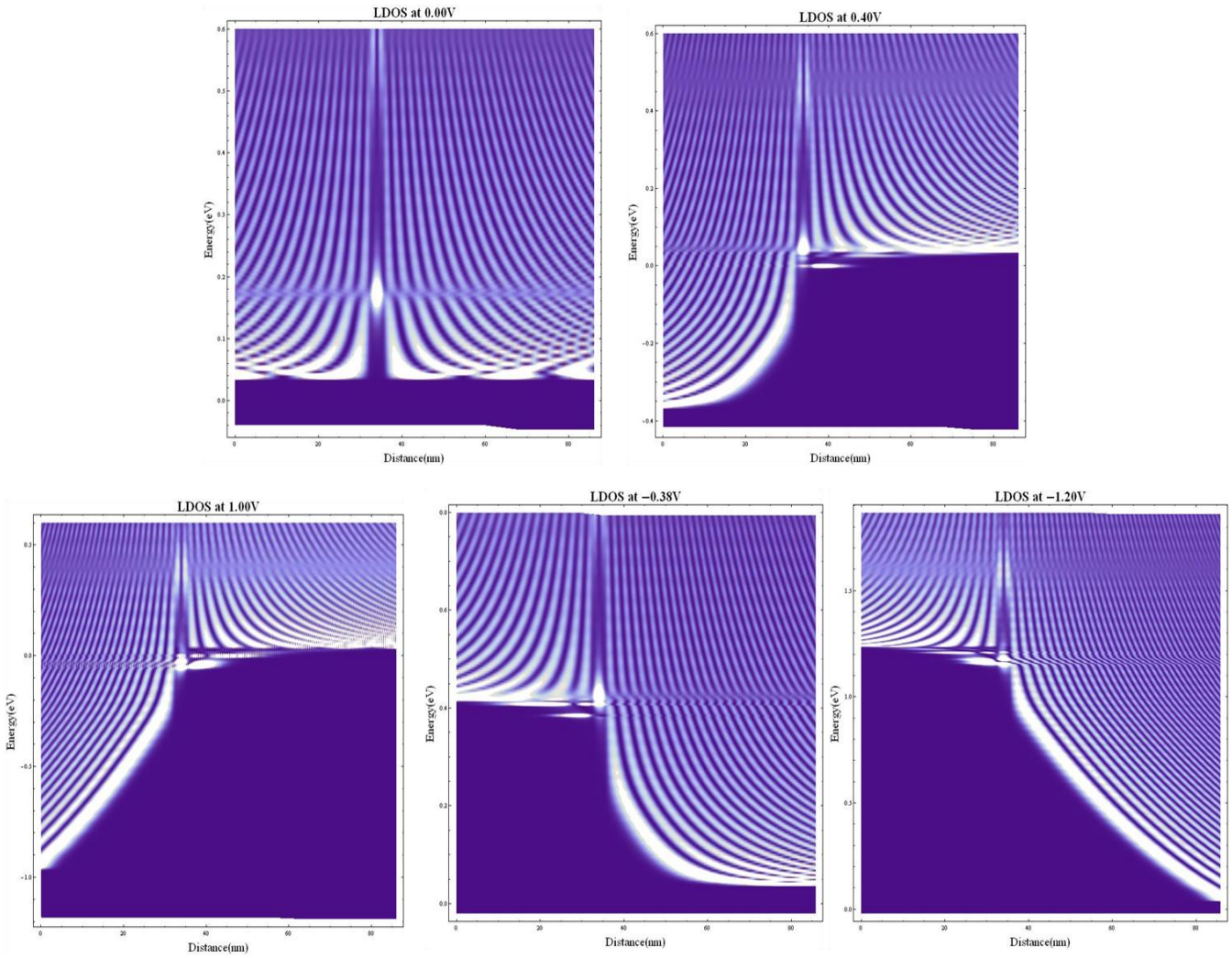
Οι δύο προηγούμενες τάσεις υποδεικνύουν τις μικρές κάμψεις που εμφανίζονται στις I-V χαρακτηριστικές της δομής στην Εικόνα 5.3.2. Αν σε αυτές παρατηρούσαμε φαινόμενο NDR τότε από την τοπική πυκνότητα καταστάσεων θα βλέπαμε την ευθυγράμμιση των ελεύθερων καταστάσεων του εκάστοτε Εκπομπού με τις ελεύθερες καταστάσεις του κβαντικού πηγαδιού (στην περίπτωση που η πυκνότητα του ρεύματος γίνεται μέγιστη) κάτι που υποδεικνύει την μεγιστοποίηση της διέλευσης από τον Εκπομπό στον Συλλέκτη μέσο των ελεύθερων καταστάσεων του πηγαδιού.
Σε αυτό το σημείο να σημειώσουμε, μιας και δεν είναι εμφανές από τις εικόνες των LDOS πως στις άσπρες περιοχές η τοπική πυκνότητα καταστάσεων είναι μεγαλύτερη.

Ενδιαφέρον παρουσιάζει η σύγκριση των προηγουμένων, με την περίπτωση στην οποία εσκεμμένα έχουμε αφαιρέσει κάθε πιεζοηλεκτρικό φαινόμενο από τους υπολογισμούς της $Al_{0.4}Ga_{0.6}N$ /GaN DB-RTD δομής. Όπως θα φανεί και στα παρακάτω γραφήματα η παρουσία ισχυρών NDR φαινομένων καθώς και η συμμετρία της I-V χαρακτηριστικής στην περίπτωση αυτή, υποδεικνύουν τις επιπτώσεις των πιεζοηλεκτρικών πεδίων στα φαινόμενα μεταφοράς τέτοιων διατάξεων. Στην Εικόνα 5.3.11 φαίνεται η υπολογισμένη πυκνότητα ρεύματος συναρτήσει της εφαρμοζόμενης τάσης για θετικές και αρνητικές τιμές αυτής.



Εικόνα 5.3.6 – NEGF I-V της $Al_{0.4}Ga_{0.6}N$ /GaN DB-RTD δομής απουσία Πιεζοηλεκτρικών Φαινομένων.

Το μέγιστο ρεύμα συντονισμού παρατηρείται στα ±0.38V με τον λόγο του ρεύματος κατά τον συντονισμό σε σχέση με την τιμή του ρεύματος κατά την άρση του συντονισμού (Peak to Valley) 7.24 για τις θετικές τάσεις και 6.95 για τις αρνητικές. Στην Εικόνα 5.3.7 φαίνονται τα διαγράμματα της τοπικής πυκνότητας καταστάσεων (LDOS) στις περιπτώσεις του συντονισμού και του αποσυντονισμού στην ορθή και στην ανάστροφη πόλωση της τάσης όπου και φαίνεται η ευθυγράμμιση του εκάστοτε Εκπομπού με τις ψευδοδέσμιες καταστάσεις του πηγαδιού. Επίσης φαίνεται και η τοπική πυκνότητα καταστάσεων στην περίπτωση της ισορροπίας.

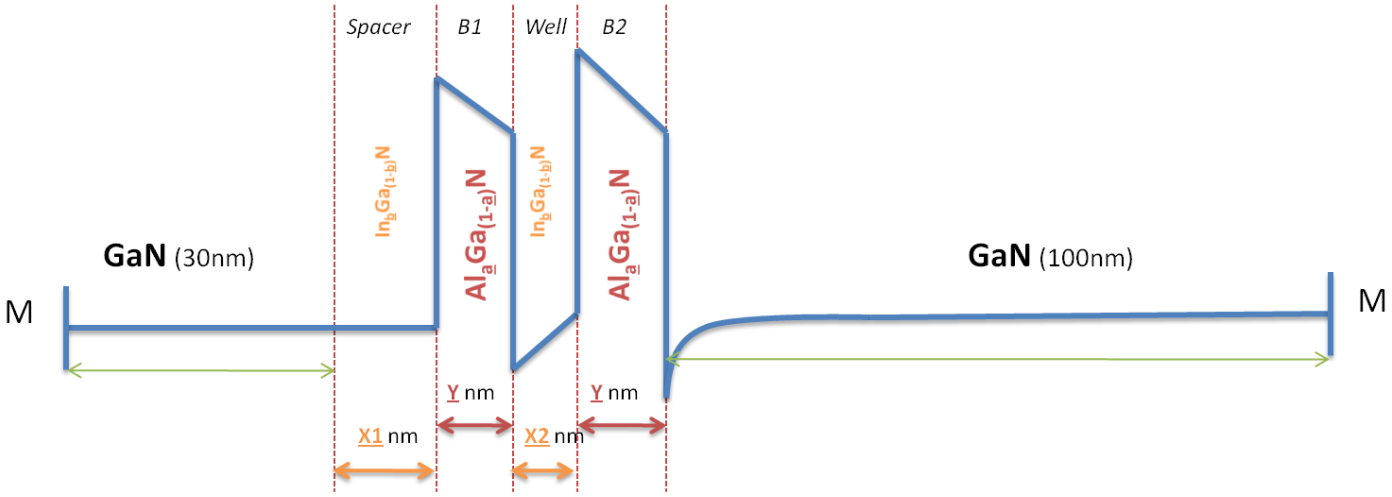


Εικόνα 5.3.7 – LDOS [$eV^{-1}nm^{-1}$] της $Al_{0.4}Ga_{0.6}N$ /GaN DB-RTD δομής χωρίς Πιεζοηλεκτρικά φαινόμενα στις περιπτώσεις συντονισμού και αποσυντονισμού καθώς επίσης και στην ισορροπία.

Συμπερασματικά θα μπορούσαμε να πούμε πως η ασυμμετρία των ζωνών και η ύπαρξη ισχυρών Πιεζοηλεκτρικών Πεδίων επιφέρουν δυσκολίες ως τον προσδιορισμό των ιδιοτήτων μεταφοράς των φορέων. Η κατάλληλη τροποποίηση των δομών, με σκοπό την μείωση των πεδίων , μπορεί να επιφέρει, τουλάχιστον όσων αφορά τα αποτελέσματα των υπολογιστικών μοντέλων που έχουν γίνει ως τώρα, ριζικές αλλαγές στις I-V χαρακτηριστικές τους.
Θα δούμε στη συνέχεια πως η χρήση κραμάτων InGaN στην περιοχή του πηγαδιού και η εισαγωγή λεπτής περιοχής InGaN, πριν από το πρώτο φράγμα δυναμικού, όπως επίσης και η κατάλληλη επιλογή του πάχους και της σύστασης των περιοχών αυτών, μπορούν να δημιουργήσουν συνθήκες συμμετρίας των ζωνών και αναίρεσης της εμφάνισης 2DEG καταστάσεων.

5.4-Δομές με προσθήκη αντισταθμιστικών περιοχών InGaN

Για την ριζική αντιμετώπιση των προβλημάτων εξαιτίας των πιεζοηλεκτρικών πεδίων επιχειρήσαμε την προσομοίωση δομών εισαγάγωγοντας περιοχές αντιστάθμισης των πιεζοηλεκτρικών πεδίων. Η παρακάτω εικόνα παραθέτει ενδεικτικά τις τιμές των διαφορετικών ποσοστών a και b καθώς και τα διαφορετικά πάχη των αντίστοιχων στρωμάτων.



Y= 1 and 1.5nm and

X2(nm) \ X1(nm)	1,	2,	3,	4,	5,
,1	1,1	2,1	3,1	4,1	5,1
,2	1,2	2,2	3,2	4,2	5,2
,3	1,3	2,3	3,3	4,3	5,3
,4	1,4	2,4	3,4	4,4	5,4
,5	1,5	2,5	3,5	4,5	5,5

Εικόνα 5.4.1 – Σχηματική απεικόνιση μιας $Al_aGa_{(1-a)}N/In_bGa_{(1-b)}N$ DB-RTD δομής με τις τιμές των μεταβλητών που χρησιμοποιήθηκαν.

Στην παραπάνω εικόνα βλέπουμε, συνολικά, τις όλες προσπάθειες που έγιναν λαμβάνοντας υπόψη όσο το δυνατών όλες τις παραμέτρους του συστήματος. Ενδεικτικά βλέπουμε τις δύο διαφορετικές συστάσεις κραμάτων των αντισταθμιστικών περιοχών $In_bGa_{1-b}N$ καθώς και των φραγμάτων δυναμικού $Al_aGa_{1-a}N$. Επίσης βλέπουμε και τα διαφορετικά πάχη που θεωρούσαμε κάθε φορά τόσο για τις αντισταθμιστικές περιοχές, όσο και για τα φράγματα δυναμικού. Με Y συμβολίζουμε το πάχος των φραγμών και με x1,x2 το πάχος της InGaN περιοχής πριν από το πρώτο φράγμα δυναμικού και του πηγαδιού, αντίστοιχα. Τα ποιο ενδιαφέροντα αποτελέσματα προήλθαν από τέσσερες περιπτώσεις οι οποίες και παρατίθενται στον παρακάτω πίνακα.

Περίπτωση	a	b	X1(nm)	X2(nm)	Y(nm)
I	0.4	0.10	2	2	1
II	0.4	0.10	2	1	1
III	0.4	0,05	4	4	1
IV	0.5	0.10	4	4	1.5

Πίνακας Α – Συγκεντρωτικός πίνακας περιεκτικοτήτων και παχών των πιο ενδιαφερόντων περιπτώσεων.

Η σχηματική αναπαράσταση της επιταξιακής δομής αυτών φαίνεται στην παρακάτω εικόνα (Εικόνα 5.4.2).

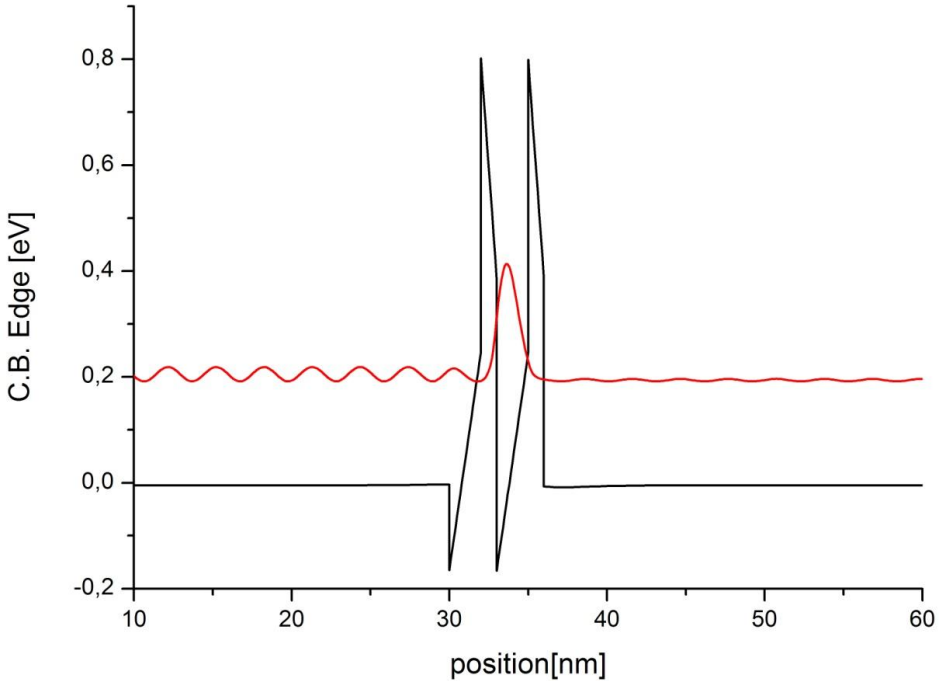
I	II
30nm **GaN** (10^{19}cm^{-3} n-type doping)	30nm **GaN** (10^{19}cm^{-3} n-type doping)
2nm **$In_{0.1}G_{0.9}N$** (NID)	2nm **$In_{0.1}G_{0.9}N$** (NID)
1nm **$Al_{0.4}Ga_{0.6}N$** (NID) **BARRIER**	1nm **$Al_{0.4}Ga_{0.6}N$** (NID) **BARRIER**
2nm **$In_{0.1}G_{0.9}N$** (NID)**WELL**	1nm **$In_{0.1}G_{0.9}N$** (NID)**WELL**
1nm **$Al_{0.4}Ga_{0.6}N$** (NID) **BARRIER**	1nm **$Al_{0.4}Ga_{0.6}N$** (NID) **BARRIER**
100nm **GaN** (10^{19}cm^{-3} n-type doping)	100nm **GaN** (10^{19}cm^{-3} n-type doping)
GaN (0001) Substrate	**GaN (0001) Substrate**
III	**IV**
30nm **GaN** (10^{18}cm^{-3} n-type doping)	30nm **GaN** (10^{19}cm^{-3} n-type doping)
4nm **$In_{0.05}G_{0.95}N$** (NID)	4nm **$In_{0.1}G_{0.9}N$** (NID)
1nm **$Al_{0.4}Ga_{0.6}N$** (NID) **BARRIER**	1.5nm **$Al_{0.5}Ga_{0.5}N$** (NID) **BARRIER**
4nm **$In_{0.05}G_{0.95}N$** (NID)**WELL**	4nm **$In_{0.1}G_{0.9}N$** (NID)**WELL**
1nm **$Al_{0.4}Ga_{0.6}N$** (NID) **BARRIER**	1.5nm **$Al_{0.5}Ga_{0.5}N$** (NID) **BARRIER**
100nm **GaN** (10^{18}cm^{-3} n-type doping)	100nm **GaN** (10^{19}cm^{-3} n-type doping)
GaN (0001) Substrate	**GaN (0001) Substrate**

Εικόνα 5.4.2 – Απεικόνιση ετεροεπιταξιακής δομής των τεσσάρων κυριοτέρων περιπτώσεων

5.5-Αποτελέσματα υπολογισμών στις νέες δομές με προσθήκη περιοχών InGaN

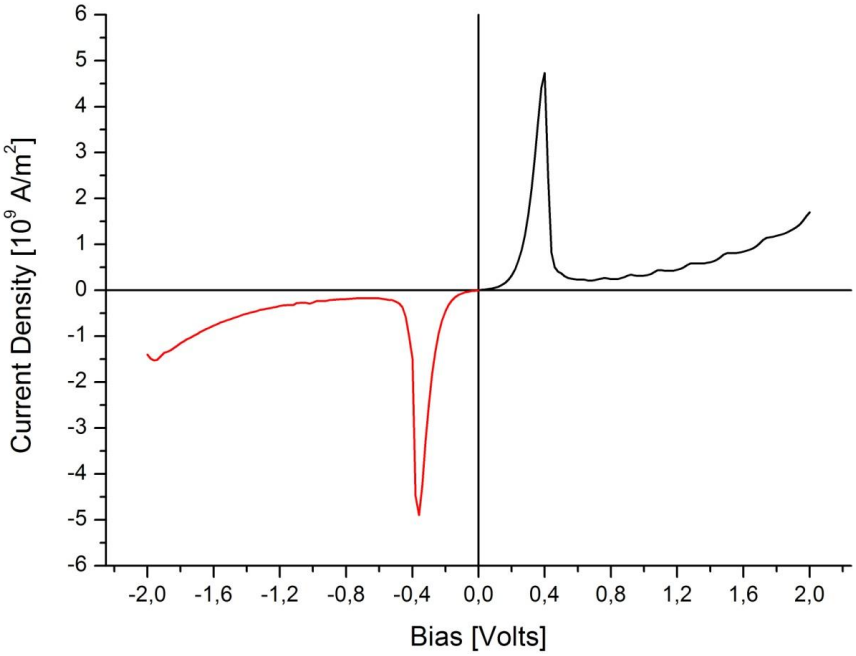
- **Περίπτωση δομής I**

Η περίπτωση της δομής I, αποδείχτηκε η πιο εντυπωσιακή όλων μιας και η συμμετρία των αποτελεσμάτων, όσων αφορά την μορφή της ζώνης αγωγιμότητας και της χαρακτηριστικής ρεύματος-τάσης, είναι πολύ έντονη. Όπως μπορεί να δει κάποιος και στην Εικόνα 5.5.2 η I-V χαρακτηριστική με ίδιο πλάτος πηγαδιού και InGaN περιοχής πριν από το πρώτο φράγμα δυναμικού, με περιεκτικότητες Ινδίου και Αλουμινίου 10% και 40% στις αντισταθμιστικές περιοχές και τους φραγμούς δυναμικού αντίστοιχα, εμφάνισε ισχυρά φαινόμενα NDR, με τάσεις συντονισμού στα 0.4V και -0.36V. Η Εικόνα 5.5.1 δείχνει την υπολογισμό του κάτω άκρου της ζώνης αγωγιμότητας στην ισορροπία.



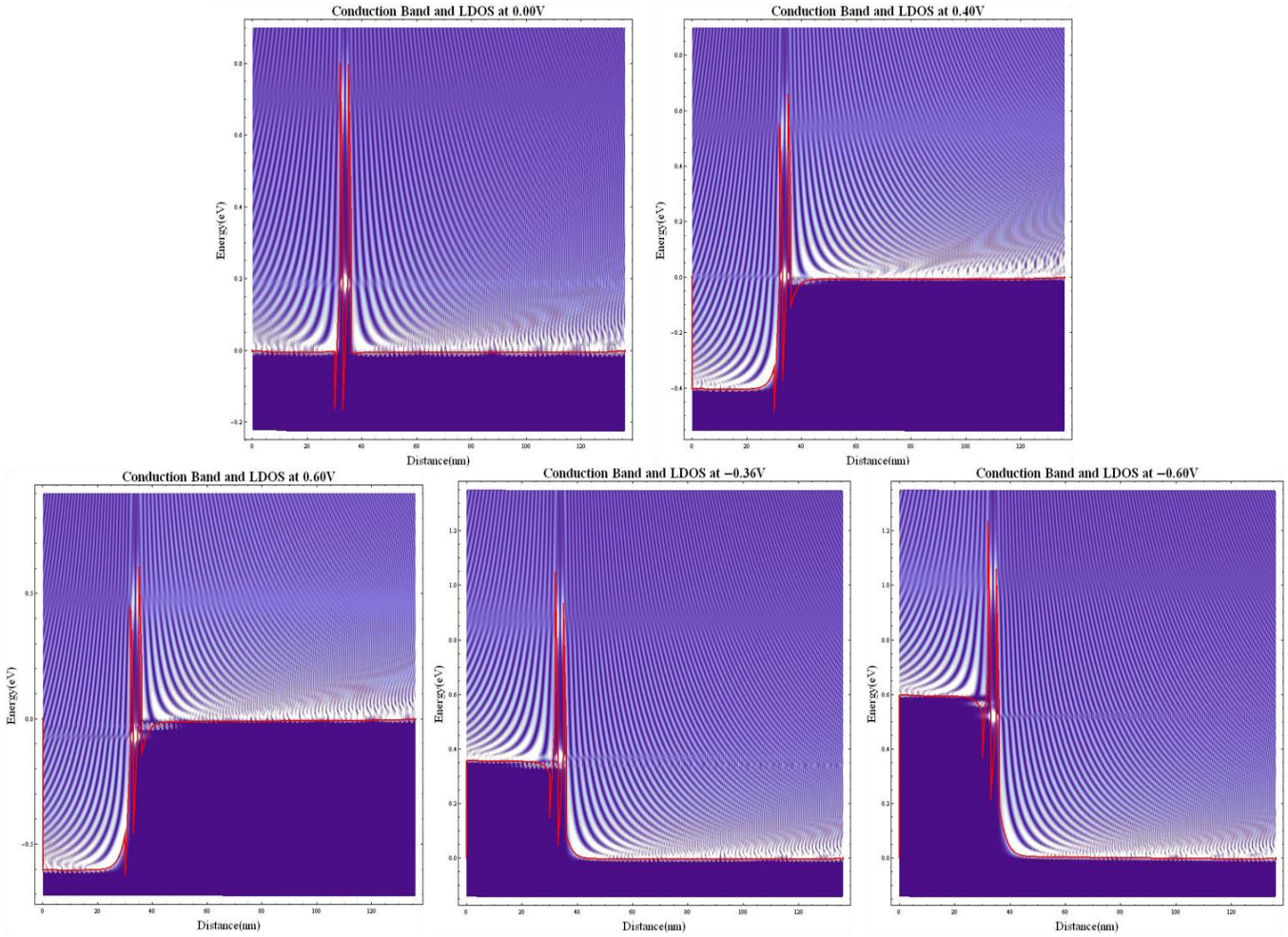
Εικόνα 5.5.1 – Κάτω άκρο της ζώνης αγωγιμότητας και η ψευδοδέσμια κατάσταση του πηγαδιού της περίπτωσης I

Όπως βλέπουμε και από την παραπάνω εικόνα, έχει επιτευχθεί ολοκληρωτική αντιστάθμιση των πιεζοηλεκτρικών επιπτώσεων έχοντας πετύχει την μέγιστη “συμμετροποίηση” των φραγμάτων δυναμικού και την απουσία του δισδιάστατου νέφους ηλεκτρονίων (2DEG). Τα υπολογισμένα I-V χαρακτηριστικά της δομής αυτής παρουσιάζονται στην Εικόνα 5.5.2.



Εικόνα 5.5.2 - Χαρακτηριστική ρεύματος-τάσης της περίπτωσης I

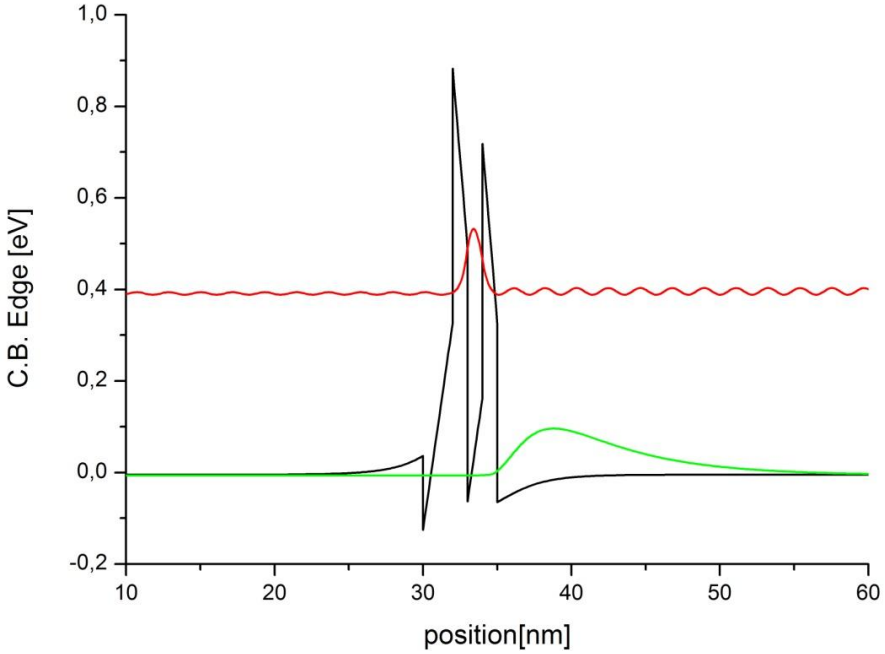
Η αναλογία Peak to Valley για τη θετική σάρωση εφαρμοζόμενης τάσης είναι 20.43 με αντίστοιχη για τις αρνητικές 28.71. Παρακάτω θα παραθέσουμε τα LDOS διαγράμματα αυτής της δομής στην ισορροπία και στις περιπτώσεις συντονισμού και αποσυντονισμού, όπου στις τελευταίες φαίνεται η ευθυγράμμιση και μη των καταστάσεων του εκάστοτε Εκπομπού με αυτές του πηγαδιού.



Εικόνα 5.5.3 – LDOS(z,E) [$eV^{-1}nm^{-1}$] στις καταστάσεις συντονισμού και αποσυντονισμού της περίπτωσης I καθώς επίσης και στην ισορροπία.

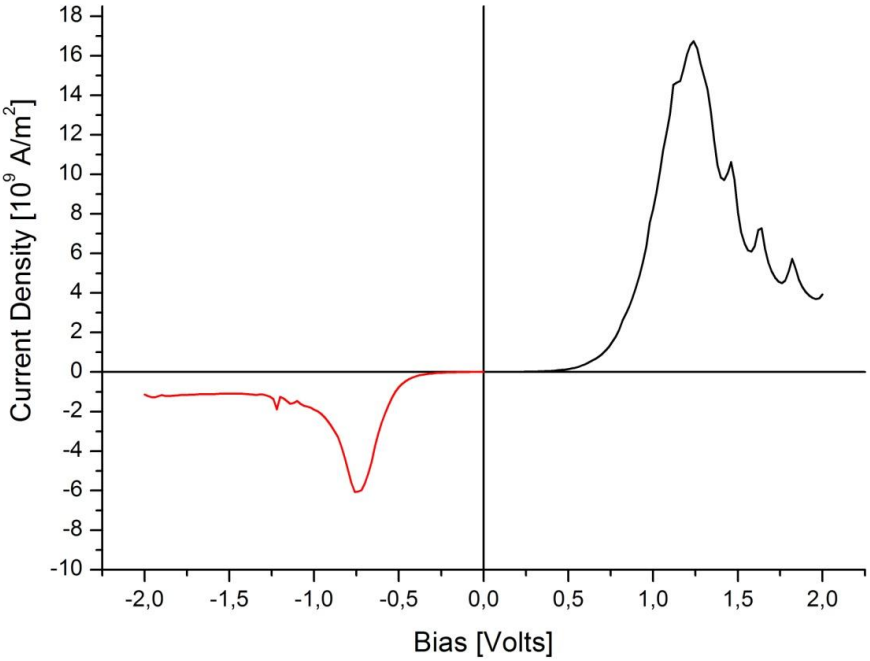
- **<u>Περίπτωση δομής II</u>**

Για να δείξουμε την ευαισθησία στις παραμέτρους των αντισταθμιστικών περιοχών σε τέτοιου είδους δομές, θα δώσουμε ένα ακόμα παράδειγμα στο οποίο προσομοιώσαμε την ίδια δομή με αυτή του προηγούμενου παραδείγματος με την μόνη διαφορά πως το πλάτος του πηγαδιού σε αυτή την περίπτωση έχει μειωθεί κατά 1nm. Σχηματικά η δομή αυτή φαίνεται στην Εικόνα 5.4.2 και είναι η περίπτωση II.
Σε αυτή την περίπτωση το ποσοστό του Ινδίου στο πηγάδι και στην περιοχή πριν το πρώτο φράγμα είναι 10% με το ποσοστό του Αλουμινίου στα φράγματα δυναμικού να είναι 40%. Το πλάτος του λεπτού στρώματος $In_{0.1}Ga_{0.9}N$ πριν από το πρώτο φράγμα δυναμικού είναι διπλάσιο από αυτό του πηγαδιού προκαλώντας μια ασυμμετρία στην δομή της ζώνης αγωγιμότητας κάτι, που όπως θα δούμε και στη συνέχεια προκαλεί με τη σειρά του μια ασυμμετρία στην I-V χαρακτηριστική της δομής (Εικόνα 5.5.5). Η δομή του κάτω άκρου της ζώνης αγωγιμότητας σε αυτή την περίπτωση φαίνεται στην Εικόνα 5.5.4.



Εικόνα 5.5.4 – Κάτω άκρο της ζώνης αγωγιμότητας και η ψευδοδέσμια κατάσταση του πηγαδιού της περίπτωσης II.

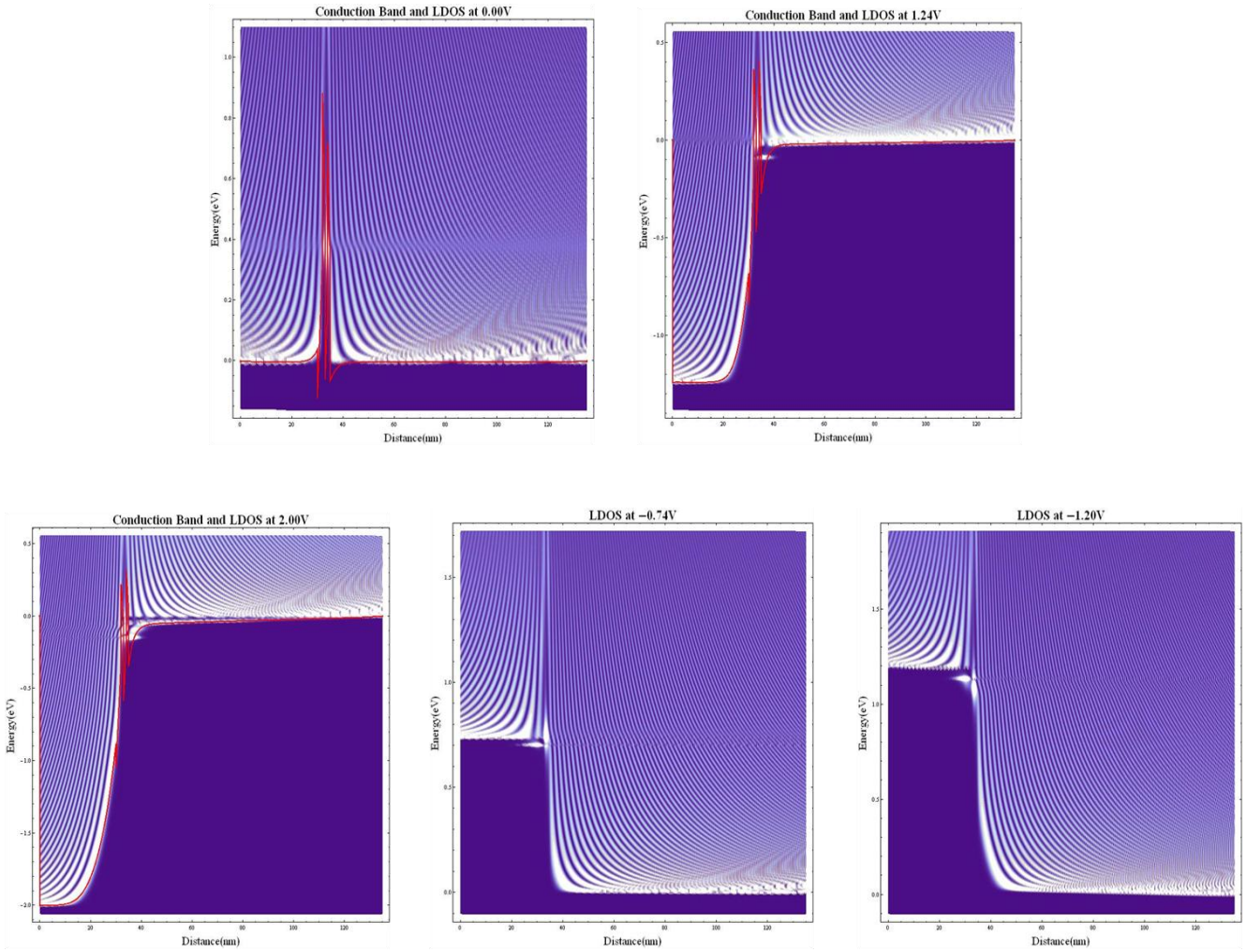
Όπως είναι εμφανές με την μείωση του πάχους του πηγαδιού βλέπουμε την εμφάνιση δισδιάστατου νέφους ηλεκτρονίων στην δεξιά μεριά της δομής της ζώνης αγωγιμότητας, μικρότερο σε σχέση με της μη αντισταθμισμένες δομές, ακολουθούμενο από μερικής μορφής "συμμετροποίησης" των φραγμάτων δυναμικού. Η I-V χαρακτηριστική σε αυτή την περίπτωση φαίνεται στην Εικόνα 5.5.5.



Εικόνα 5.5.5 – Χαρακτηριστική ρεύματος-τάσης της περίπτωσης II.

Όπως φαίνεται και στην παραπάνω εικόνα τα χαρακτηριστικά ρεύματος-τάσης σε αυτή την περίπτωση παρουσιάζουν ισχυρά φαινόμενα NDR με την μόνη διαφορά πως δεν είναι πλέον συμμετρικά. Η ύπαρξη καταστάσεων συντονισμού (στα 1.24V και -0.76V) όπως και ισχυρών

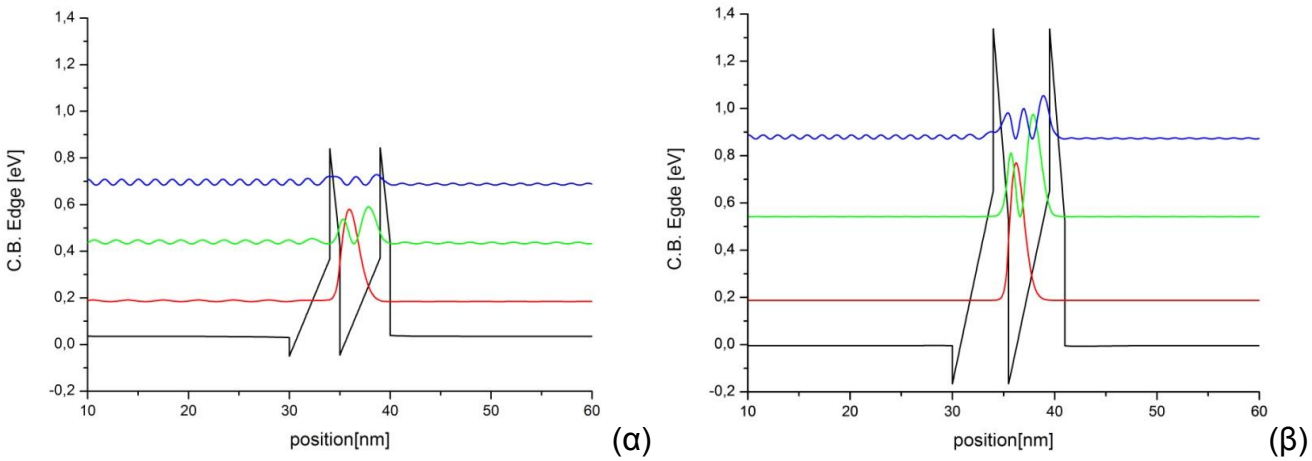
NDR φαινομένων είναι ευδιάκριτες, με Peak to Valley αναλογίες 4.53 για το θετικό sweep και 5.41 για το αρνητικό. Ακολούθως, οι LDOS(z,E) απεικονίσεις στις καταστάσεις συντονισμού και αποσυντονισμού, όπως επίσης και στην ισορροπία επιβεβαιώνουν τα προηγούμενα.



Εικόνα 5.5.6 – LDOS(z,E) [$eV^{-1}nm^{-1}$] στις καταστάσεις συντονισμού και αποσυντονισμού της περίπτωσης II, καθώς επίσης και στην ισορροπία.

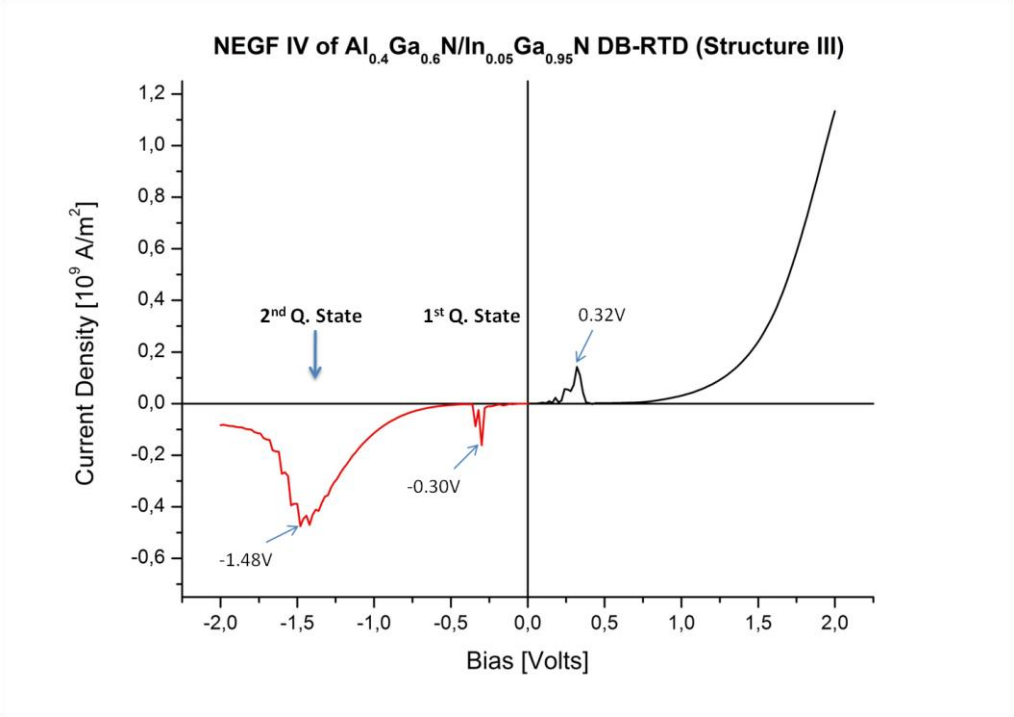
- **<u>Περίπτωση δομών III και IV</u>**

Οι δύο τελευταίες περιπτώσεις με τη σειρά τους, με ελαφρός τροποποιημένες παραμέτρους, εμφάνισαν ικανοποιητικές χαρακτηριστικές I-V, μη συμμετρικές, με τη διαφορά πως και στις δύο εμφανίστηκε φαινόμενο συντονισμού όχι μόνο με μια από τις στάσιμες καταστάσεις του πηγαδιού αλλά και με δεύτερη (στην αρνητική σάρωση της εφαρμοζόμενης τάσης).

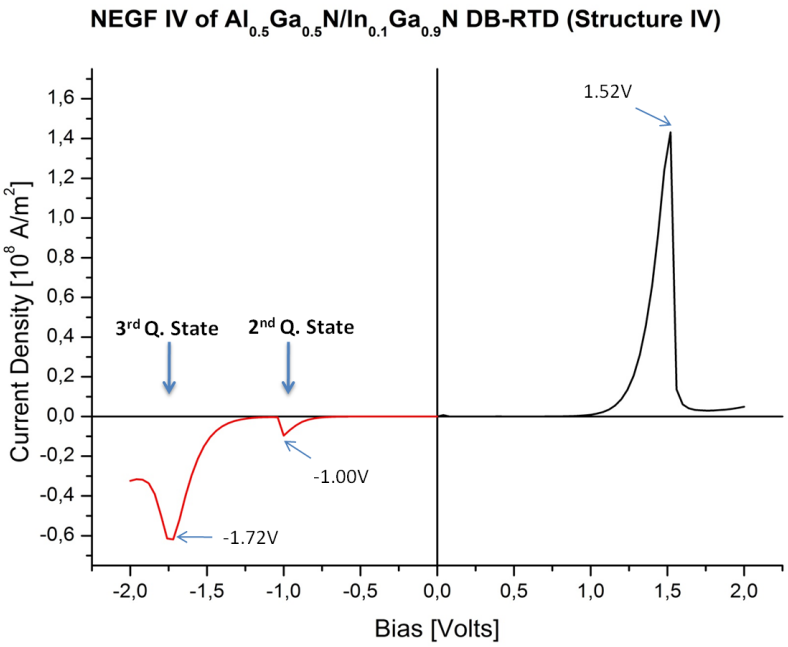


Εικόνα 5.5.7 - Κάτω άκρο της ζώνης αγωγιμότητας και η ψευδοδέσμια κατάσταση του πηγαδιού των περιπτώσεων (α) III και (β) IV.

Παρατηρούμε πως αυτές οι περιπτώσεις αντιστάθμισης παρουσιάζουν ισχυρά συμμετρικούς φραγμούς δυναμικού, απουσία 2DEG καταστάσεων. Επίσης εμφανίζονται τρεις ψευδοδέσμιες καταστάσεις στο πηγάδι.
Η μορφή της χαρακτηριστικής ρεύματος-τάσης αυτών φαίνεται στις δύο ακόλουθες εικόνες με εμφανείς τις παραπάνω καταστάσεις συντονισμού.

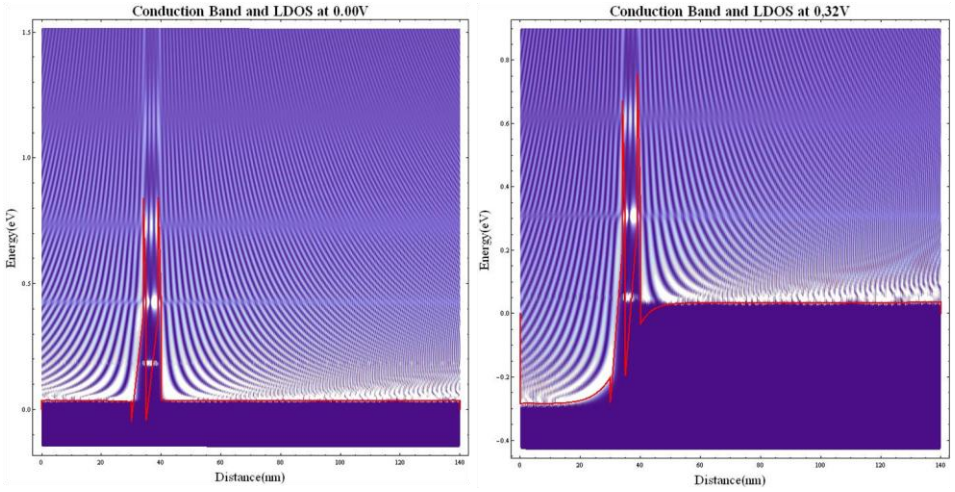


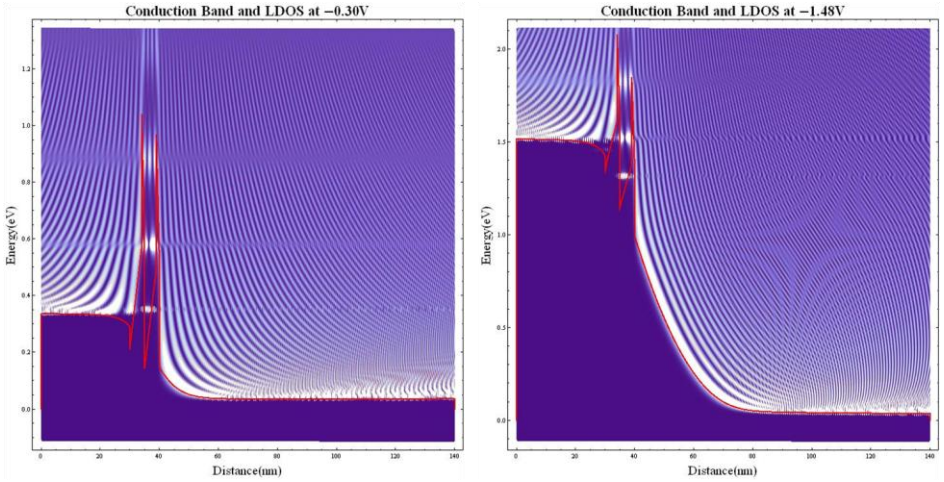
Εικόνα 5.5.8 - Χαρακτηριστική ρεύματος-τάσης της περίπτωσης III.



Εικόνα 5.5.9 - Χαρακτηριστική ρεύματος-τάσης της περίπτωσης IV

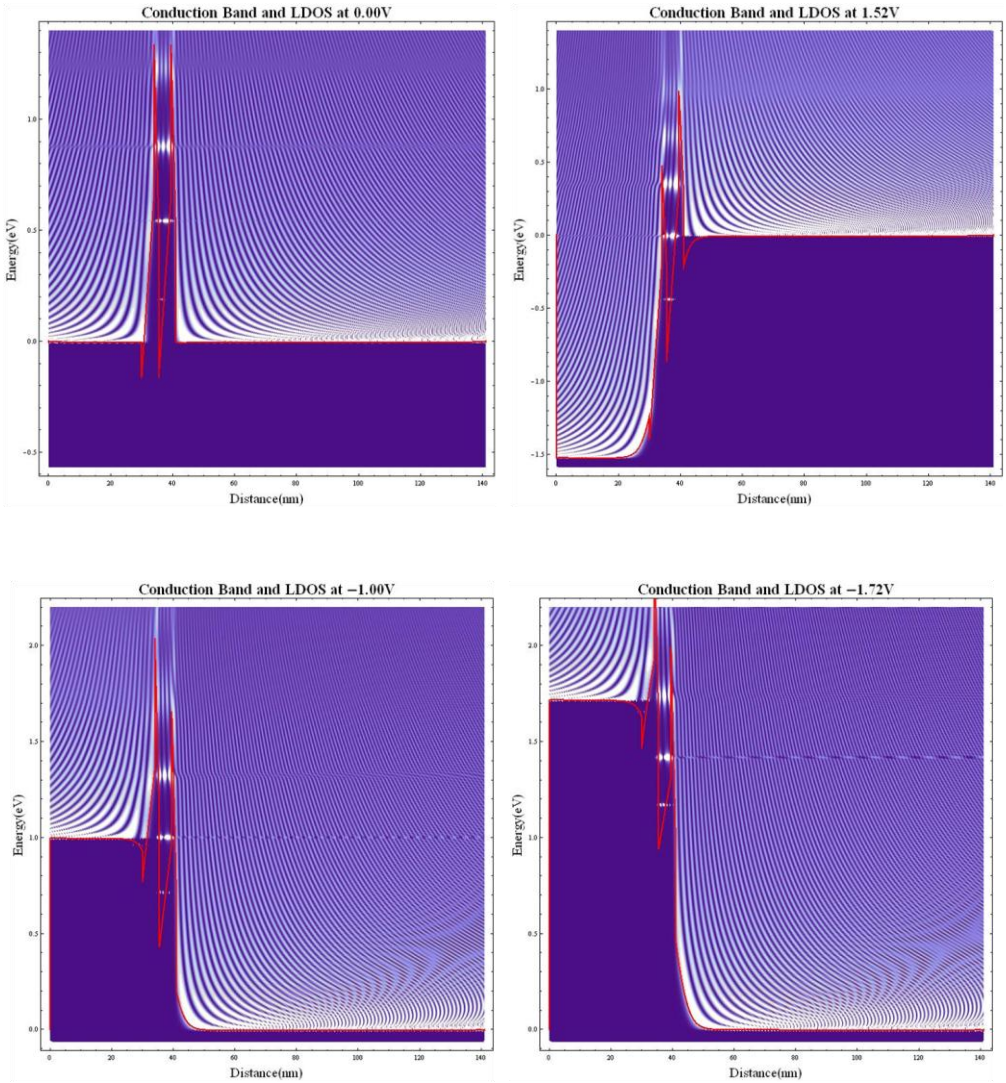
Βλέπουμε πως οι χαρακτηριστικές δεν εμφανίζονται συμμετρικές παρά μόνο στην περίπτωση III για τον συντονισμό με την πρώτη ψευδοδέσμια κατάσταση του πηγαδιού. Στην περίπτωση της δομής III ο συντονισμός στις θετικές τάσεις εμφανίστηκε στα 0.32V με Peak to Valley 57.85 ενώ στις αρνητικές στα -0.30V για την πρώτη κατάσταση του πηγαδιού και στα -1.48V για την δεύτερη, με Peak to Valley 61.92 και 5.78 αντίστοιχα.
Στην περίπτωση της δομής I-V συντονισμός εμφανίστηκε στα 1.52V (δεύτερη κατάσταση του πηγαδιού) με Peak to Valley 48.02 για τις θετικές τάσεις και στα -1.00V (δεύτερη κατάσταση του πηγαδιού) και -1.72V (τρίτη κατάσταση του πηγαδιού) για τις αρνητικές, με Peak to Valley 35.15 και 1.96 κατ' αντιστοιχία. Ακολούθως, οι εικόνες του της τοπικής πυκνότητας καταστάσεων στην ισορροπία και στις περιπτώσεις συντονισμού επιβεβαιώνουν τα παραπάνω με την παρατήρηση της ευθυγράμμισης και μη των ελεύθερων καταστάσεων.





Εικόνα 5.5.10 - LDOS(z,E) [$eV^{-1}nm^{-1}$] στις καταστάσεις συντονισμού και στην ισορροπία της περίπτωσης III.

Και ακολούθως για την περίπτωση της δομής IV:



Εικόνα 5.5.11 - LDOS(z,E) [$eV^{-1}nm^{-1}$] στις καταστάσεις συντονισμού και στην ισορροπία της περίπτωσης IV.

Συνοψίζοντας για τις τέσσερεις παραπάνω περιπτώσεις παραθέτουμε τον παρακάτω πίνακα όπου και αναγράφονται οι τάσεις συντονισμού και τα αντίστοιχα Peak to Valley.

		Resonance Bias [Volts]		**Peak to Valley**	
	Quantum Well State Numbers (or QWN)	Positive	Negative	Positive	Negative
I	1	0.40	-0.36	20.43	28.71
II	1	1.24	-0.76	4.53	5.41
III	3	0.32(1st QBS)	-0.30 (1st QBS)	57.85	61.92,
			-1.48 (2nd QBS)		5.78
IV	3	1.52(2ndQBS)	-1.00 (2ndQBS)	48.02	35.15,
			-1.72 (3rd QBS)		1.96

Πίνακας Β (QBS→ Quasi-Bound State)

Επίλογος

Κλείνοντας αυτή την εργασία θα αναφέρουμε επιγραμματικά τι έχουμε μελετήσει μέχρι στιγμής και παραθέτοντας την “ιδιόμορφη” συμπεριφορά των AlN/GaN RTDs.

Όπως είδαμε και από τα πειραματικά αποτελέσματα (κεφάλαιο 3), μελετώντας τα φαινόμενα μεταφοράς σε AlN/GaN δομές διπλού φράγματος δυναμικού, σε πρώτη ανάγνωση παρατηρήθηκαν ισχυρά φαινόμενα Αρνητικής Διαφορικής Αντίστασης. Σε αυτές φάνηκε μια τυπική συμπεριφορά εμφάνισης ακραίας υστέρησης-φόρτισης των διατάξεων που οδηγούσε σε μη επαναλήψημα χαρακτηριστικά ρεύματος-τάσης. Επίσης σε κάποιες περιπτώσεις παρατηρήθηκαν, για πρώτη φορά ισχυρά φαινόμενα πολυσταθούς συμπεριφοράς της αγωγιμότητας κάτι που ίσως να οφείλεται στην πιθανή ύπαρξη ψευδοδέσμιων καταστάσεων στην περιοχή του Εκπομπού.

Στη συνέχεια, από την θεωρητική μελέτη αυτών των διατάξεων με μεθόδους αυτοσυνεπούς επίλυσης των εξισώσεων Schrodinger-Poisson-Συνέχειας Ρεύματος, διερευνήθηκε η επίδραση των πιεζοηλεκτρικών πεδίων σε αυτές που οδήγησε σε μια πιθανή συσχέτιση των φαινομένων φόρτισης που παρατηρήθηκαν στα πειραματικά αποτελέσματα η οποία ίσως να οφείλεται σε πιθανή παγίδευση των φορέων στην περιοχή απογύμνωσης. Επίσης σχεδιάστηκαν δομές διαβαθμισμένης σύστασης φραγμάτων δυναμικού που οδήγησαν σε μερικώς επαναλήψημα NDR φαινόμενα.

Τέλος, με την προσομοίωση των φαινομένων μεταφοράς με την χρήση της μεθόδου NEGF (βαλλιστική περίπτωση) επιβεβαιώθηκε η ισχυρά αρνητική επίδραση των πιεζοηλεκτρικών φαινομένων με την εμφάνιση μη ισχυρών φαινομένων NDR σε RTD διατάξεις $Al_{0.4}Ga_{0.6}N/GaN$ διπλού φράγματος δυναμικού. Έτσι, σχεδιάστηκαν και μελετήθηκαν (θεωρητικά) δομές αντιστάθμισης των πιεζοηλεκτρικών φαινομένων με την προσθήκη $In_xGa_{1-x}N$ περιοχών στις οποίες εμφανίστηκαν “συμμετρικές” χαρακτηριστικές I-V με έντονη αρνητική διαφορική αντίσταση.