МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського» Радіотехнічний факультет Кафедра радіоконструювання та виробництва радіоапаратури

Моделювання мікро- та наноструктур

Методичні вказівки до виконання практичних робіт для студентів радіотехнічного факультету, спеціальності 172 Телекомунікації та радіотехніка, спеціалізація «Інтелектуальні технології мікросистемної радіоелектронної техніки»

Рекомендовано вченою радою радіотехнічного факультету

Київ 2016 Моделювання мікро- та наноструктур: метод. вказівки до виконання практичних робіт для студентів радіотехнічного факультету спеціальності 172 Телекомунікації та радіотехніка, спеціалізація «Інтелектуальні технології мікросистемної радіоелектронної техніки» / Уклад.: Є.А. Нелін, А.В. Ляшок — К.: НТУУ «КПІ ім. Ігоря Сікорського», 2016. — 19 с.

Гриф надано вченою радою радіотехнічного факультету НТУУ «КПІ ім. Ігоря Сікорського» (Протокол № 11/2016 від 28 листопада 2016)

Рекомендовано навчально-методичною комісією радіотехнічного факультету (Протокол № 11/2016 від 25 листопада 2016)

Навчальне видання

Моделювання мікро- та наноструктур

Методичні вказівки до виконання практичних робіт для студентів радіотехнічного факультету, спеціальності 172 Телекомунікації та радіотехніка, спеціалізація «Інтелектуальні технології мікросистемної радіоелектронної техніки

Укладач: Нелін Євгеній Андрійович, док. тех. наук., професор Ляшок Аліна Вікторівна, канд. тех. наук., асистент

Рецензент: Мірських Георгій Олександрович, канд. тех. наук., доцент

Відповідальний редактор: Нелін Євгеній Андрійович, док. тех. наук., професор

НТУУ «КПІ ім. Ігоря Сікорського» Радіотехнічний факультет 03056, Київ, вул. Політехнічна, 12, корп. 17 Тел./факс (044) 204-92-93

3MICT

ВСТУП
Практична робота №1.
Моделювання та дослідження двобар'єрних структур б
Практична робота №2
Моделювання та дослідження надґрат10
Практична робота №3
Моделювання та дослідження одно- та двофазних кристалоподібних
структур14
Практична робота №4
Амплітудна аподизація кристалоподібних структур 17
Література19

ВСТУП

Цикл практичних робіт складається з чотирьох робіт, що охоплюють основні питання з з дисципліни «Моделювання мікро- та наноструктур». Практичні роботи спрямовані на вивчення особливостей моделей, які використовується для моделювання мікро- та наноструктур та виконання комп'ютерного моделювання в середовищі Mathcad.

Невід'ємний етап моделювання — аналіз достовірності його результатів, аналіз відповідності результатів моделювання очікуваним. Основні складові такого аналізу такі.

1. Перевірка розмірності величин.

2. Отримання відомих результатів для відомого випадку.

3. Аналіз характеру залежностей на відповідність теоретично очікуваному.

4. Перевірка результатів в окремих точках.

5. Перевірка розрахунків з різним кроком.

6. Аналіз взаємної відповідності результатів.

7. Перевірка результатів з різними вихідними даними.

Необхідно враховувавати, що комп'ютерне моделювання дискретне і тому вузькосмугова особливість характеристики може бути пропущена. Крім того, внаслідок комп'ютерного обмеження діапазону представлення чисел можуть виникати похибки розрахунків, обумовлені цим обмеженням.

При виконанні комп'ютерного моделювання необхідно звернути увагу на особливості отриманих залежностей і більш детально їх проаналізувати у відповідних інтервалах зміни параметрів.

Отримані результати мають бути проаналізовані у висновках. Висновки оформлюються списком: 1., 2. і т. д. Кожний висновок складається з двох частин. У першій частині фіксується особливість

4

залежності, у другій пояснюється причина цієї особливості. Пояснення має грунтуватися на фізичних уявленнях.

Отримані під час виконання практичних робіт знання та навички дозволять в подальшому проводити самостійне моделювання різноманітних мікро- та наноструктур.

ПРАКТИЧНА РОБОТА № 1

МОДЕЛЮВАННЯ ТА ДОСЛІДЖЕННЯДВОБАР'ЄРНИХ СТРУКТУР

Мета роботи: вивчити особливості моделювання двобар'єрних квантово-механічних структур, розробити комп'ютерну модель двобар'єрної структури, дослідити особливості характеристик проходження та відбиття.

Стислі теоретичні відомості

Двобар'єрна структура (ДБС) для електронів утворена двома потенціальними бар'єрами та ямою між ними (рис. 1). ДБС є базовою для наноелектроніки. Потенціальна яма як будь-який резонатор характеризується резонансними частотами. Частота та енергія електрона як хвилі де Бройля зв'язані формулою Планка, тому резонансним частотам відповідають власні рівні енергії електрона.



Рисунок 1 — Двобар'єрна структура. V — висота бар'єра, 1 і Z_a — нормовані хвильові імпеданси зовнішнього середовища, ями та бар'єра

Якщо енергія електрона співпадає з власним рівнем ДБС, спостерігається резонансне тунелювання електронів (РТЕ) — базовий ефект наноелектроніки. При РТЕ |*T*]=1, де *T* — коефіцієнт проходження ДБС.

На рис. 1 показано еквівалентну неоднорідну лінію передачі, що моделює ДБС. Квантово-механічний імпеданс визначається виразом

$$Z_{\rm KB} = 2\sqrt{2(E-V)/m}$$
, (1)

де *Е* — енергія електрона; *V* — потенціальна енергия; *m* — ефективна маса електрона.

Для спрощення моделювання імпеданс бар'єра необхідно пронормувати до імпедансу зовнішнього середовища, в якому V=0.

Згідно (1), нормований імпеданс бар'єра дорівнює

$$Z_a = \sqrt{(E-V)m_b / Em_a},$$

де m_b — ефективна маса електрона в зовнішньому середовищі і в області ями; m_a — ефективна маса електрона в області бар'єра. Якщо $m_a=m_b$, то

$$Z_a = \sqrt{(E-V)/E} \; .$$

Потенціальні бар'єр або яма моделюють відрізком лінії передачі. Вхідний імпеданс відрізка лінії передачі визначається виразом

$$Z_{i} = Z_{l} \frac{Z_{\mu} - Z_{l} \operatorname{th}(ikl)}{Z_{l} - Z_{\mu} \operatorname{th}(ikl)}, \qquad (2)$$

де Z_l і l — хвильовий імпеданс і довжина відрізка; $Z_{\rm H}$ — імпеданс навантаження; k — хвильове число. Квантово-механічне хвильове число дорівнює $k=\sqrt{2m(E-V)}/\hbar$. Аналіз неоднорідної лінії передачі зводиться до послідовного розрахунку вхідного імпедансу її відрізків, починаючи з крайнього правого, згідно (2). Імпедансом навантаженя є вхідний імпеданс попереднього відрізка.

Згідно (2), нормований вхідний імпеданс правого бар'єра ДБС визначається виразом

$$Z_i = Z_a \frac{1 - Z_a A}{Z_a - A},\tag{3}$$

де A=th(ik_aa); k_a i a — хвильове число в області бар'єра та його товщина; $k_a = \sqrt{2m_a(E-V)} / \hbar$. Звернемо увагу, що при E < V значення Z_a і k_a уявні, що відповідає тунелюванню електронів.

Вхідний імпеданс на межі лівого бар'єра і ями дорівнює

$$Z_{ii} = \frac{Z_i - B}{1 - Z_i B},\tag{4}$$

де B=th(i $k_b b$)=itg $k_b b$; k_b і b — хвильове число в області ями та її ширина; $k_b = \sqrt{2m_b E} / \hbar$. Вхідний імпеданс ДБС визначається виразом

$$Z_{\rm BX} = Z_a \frac{Z_{ii} - Z_a A}{Z_a - Z_{ii} A}.$$
(5)

Коефіцієнт відбиття від ДБС дорівнює

$$R = \frac{1 - Z_{\rm BX}}{1 + Z_{\rm BX}}.$$
 (6)

Оскільки згідно закону збереження енергії коефіцієнти відбиття та проходження зв'язані співвідношенням $|R|^2 + |T|^2 = 1$, коефіцієнт проходження дорівнює

$$|T| = \sqrt{1 - |R|^2}$$
 (7)

На рис. 2 приведено залежності коефіцієнта проходження ДБС та поодиного бар'єра, що відповідає ДБС без потенціальної ями. Власні значення ДБС дорівнюють 0,03 еВ і 0,13 еВ. Ці значення відповідають РТЕ. Залежності рис. 2 необхідно використати як тестові для перевірки розробленої програми.



Рисунок 2 — Залежності коефіцієнта проходження ДБС (1) та потенціального бар'єра подвійної товщини (2). V=0,24 eB, a=b=2,5 нм, $m_a=m_b=m_0$. де m_0 — маса електрона

Значення необхідних констант: постійна Планка $h=6,62606957 \times 10^{-34}$ Дж·с; маса електрона $m_0=9,10938291 \times 10^{-31}$ кг; елементарний заряд $e=1,602176565 \times 10^{-19}$ Кл.

Особливості моделювання ДБС в середовищі Mathcad. Для розрахунку коефіцієнта відбиття ДБС згідно (3) — (6) необхідно використати *підпрограму-функцію*.

Завдання до практичної роботи

- 1. Ознайомитися зі стислими теоретичним відомостями.
- 2. Виконати узгодження розмірностей величин в системі СІ (еВ, Дж, нм).
- 3. Виконати програмування рівнянь (3)—(7).
- 4. Виконати тестовий розрахунок.
- 5. Виконати розрахунок коефіцієнта відбиття ДБС з тестовими параметрами.
- 6. Дослідити залежність власних рівнів ДБС від ширини ями, товщини та висоти бар'єрів.
- 7. За результатами п. 6 побудувати графіки залежностей.
- 8. Проаналізувати залежності на їх відповідність очікуваним та взаємну відповідність.
- 9. Зробити висновки за результатами дослідження.

ПРАКТИЧНА РОБОТА № 2

МОДЕЛЮВАННЯ ТА ДОСЛІДЖЕННЯ НАДГРАТ

Мета роботи: розробити комп'ютерну модель надґрат, дослідити особливості формування характеристик надґрат.

Стислі теоретичні відомості

До просторово-періодичних структур з квантовими розмірами (період сумірний з довжиною хвилі електрона) відносять природні структури кристалічні ґрати твердих тіл, а також штучні — надґрати (НГ). Кристалічні ґрати утворені періодично розташованими атомами або молекулами, а НГ — шарами напівпровідників з відмінною шириною забороненої зони.

Електричні, оптичні, теплові та інші властивості кристалічних твердих Ηſ визначаються енергетичним спектром електронів ЦИХ тіл та періодичних структур. Спектр електронів складається із зон дозволених та заборонених енергій. Розрахунок спектра електронів базується на розгляді руху електрона в одновимірному потенціальному полі, утвореному періодично розташованими прямокутними потенціальними бар'єрами та ямами (рис. 1, модель Кроніга-Пенні). Потенціальні ями відповідають атомам, розташованим у вузлах кристалічних ґрат. При переході від атома до атома електрон долає потенціальний бар'єр. Для НІ бар'єри і ями відповідають шарам напівпровідників 3 широкою та вузькою забороненими зонами. Якщо енергія електрона E > V, то електронна хвиля проходить над бар'єром, частково відбивається від нього. При Е <V електрони частково відбиваються і з відмінною від нуля імовірністю тунелюють крізь бар'єр.



Рисунок 1 — Потенціальна модель кристала та НГ. V, U_{Π} , U_{B} та U_{пр} — висота бар'єра, амплітуди падаючої, відбитої хвилі та хвилі, що пройшла; *а* і *b* — товщина бар'єра і ширина ями

Зручна, наочна модель НГ — неоднорідна лінія передачі, утворена відрізками з хвильовими імпедансами 1 і Z_a, що, як і в практичній роботі № 1, відповідають нормованим хвильовим імпедансам ями та бар'єра (рис. 2). Значення Z_a визначається формулою $Z_a = \sqrt{(E-V)m_b/Em_a}$, де $m_{b,a}$ ефективна маса електрона в області ями та бар'єра. При E<V опір Z_a уявний, що відповідає тунелюванню електронів. Розрахунок характеристик знаходження вхідного опору лінії Z_{вх} послідовним зводиться до розрахунком вхідних опорів її відрізків, починаючи з крайнього правого. Знайдений вхідний опір відрізка використовується як опір навантаження наступного відрізка. Коефіцієнти відбиття і проходження НГ визначаються формулами:

$$R = \frac{1 - Z_{_{BX}}}{1 + Z_{_{BX}}}, \quad |T| = \sqrt{1 - |R|^2}$$





Рисунок 2 — Модель неоднорідної Рисунок 3 — Модель ТФ. t₂,...,t_N лінії передачі. 1,..., N — хвилі, відбиті від меж бар'єрів.

елементи затримки, $h_1, \dots h_N$ — вагові коефіцієнти, *N* — кількість відводів.

Якщо модуль коефіцієнта відбиття малий: |R(E)| <<1 (інтерференція слабких або деструктивна інтерференція сильних відбитих хвиль), достатньо враховувати тільки однократно відбиті хвилі від бар'єрів (при E < V) або від їх меж (при E > V). У цьому випадку НҐ можна моделювати трансверсальним фільтром (ТФ) (рис. 3). Падаюча хвиля розглядається як вхідний сигнал ТФ, який поширюється вздовж лінії затримки з відводами без втрат. Відводи забезпечують вибірку сигналу. При E > V вагові коефіцієнти h_n прямо пропорційні модулю амплітудного коефіцієнта відбиття від n-ї межі бар'єрів. Вихідний сигнал ТФ (сумарна відбита хвиля НҐ) формується суперпозицією хвиль, відбитих від кожної межі (рис. 2).

Для періодичного ТФ з $h_1 = ... = h_N$ та $T = 1/f_0$, $H(f) = \operatorname{sinc} x$, де $x = N\pi (f - f_0)/f_0$; f_0 — середня частота. На рис. 4 наведено залежність модуля коефіцієнта відбиття від енергії електрона для НГ, що відповідає такому ТФ. Кількість бар'єрів — 5. Бар'єри і ями утворено шарами Al_xGa_{1-x}As та GaAs завтовшки відповідно 6 та 10 товщин моношару GaAs у напрямку [100] (що дорівнює 2,82665 Å). Ефективна маса електрона в області ями та бар'єра дорівнює відповідно 0,0665 m_0 та (0,0665+0,0835x) m_0 , де m_0 — маса електрона. Висота бар'єра V = 0,1eB. V та x зв'язані співвідношенням V = 0,7731x.





Особливості моделювання НІ в середовищі Mathcad. Програму необхідно побудувати на основі *циклу*.

Завдання до лабораторної роботи

- 1. Ознайомитися зі стислими теоретичним відомостями.
- 2. Вивчити програмні особливості **Mathcad**, необхідні для виконання роботи.
- 3. Виконати тестовий розрахунок (рис. 4).
- 4. Скласти план досліджень НҐ, утвореної шарами Al_xGa_{1-x}As і GaAs. План досліджень включає:
 - 4.1 номінальні значення кількості бар'єрів *N*, висоти бар'єра *V*, товщини бар'єра *a*, ширини ями *b*;
 - 4.2 діапазон зміни енергії для дослідження залежностей *R*(*E*) і *T*(*E*);
 - 4.3 діапазон зміни N для дослідження залежностей R(E) і T(E) від N;
 - 4.4 діапазон зміни *a* і *b* для дослідження особливостей залежностей R(E) і T(E).
- 5. Виконати моделювання згідно з планом досліджень. Побудувати графіки залежностей.
- 6. Зробити висновки з аналізом результатів на їх відповідність очікуваним та взаємну відповідність.

ПРАКТИЧНА РОБОТА № 3

МОДЕЛЮВАННЯ ТА ДОСЛІДЖЕННЯ ОДНО- ТА ДВОФАЗНИХ КРИСТАЛОПОДІБНИХ СТРУКТУР

Мета роботи: розробити комп'ютерну модель одно- та двофазних кристалоподібних структур, дослідити особливості формування характеристик структур.

Стислі теоретичні відомості

Кристалоподібні структури (КС) — напівпровідникові надґрати, фотонні і фононні кристали — базові структури наноелектроніки. Принципові особливості кристалів і КС проявляються в одновимірних структурах. Згідно моделі Кроніга – Пенні залежність потенціалу в кристалі відповідає рис. 1,*а*. Таку залежність має і квантово-механічний імпеданс в кристалі або хвильової імпеданс в КС будь-якої природи. Зонна діаграма кристала формується в результаті взаємодії полів падаючої і відбитої бар'єрами хвиль. Імпедансний бар'єр моделює неоднорідність КС. В кристалах і в традиційних КС неоднорідності ідентичні з коефіцієнтами відбиття однієї фази. Такі КС однофазні — КСs (single-phase).



Рисунок 1 — Потенціальна або імпедансна залежність для кристала і КС: кристал і однофазна КС (*a*), *d* — період, 1 і 2 — відбиті хвилі; двофазна КС (*б*)

Штучна КС може мати і більш складну імпедансну залежність, що відкриває додаткові можливості у формуванні її зонної діаграми. Для практичних застосувань значний інтерес становить зниження частот заборонених зон при заданих габаритах КС. Таке зниження забезпечує КС, утворена високо- і низькоімпедансними неоднорідностями, що чергуються (рис. 1, σ). Позначимо ці неоднорідності і індекси їх параметрів буквами h і l (high- i low-impedance). Хвильові імпеданси h- i l-неоднорідностей, нормовані до імпедансу однорідного середовища, відповідають умові $Z_h>1>Z_l$.

Оскільки коефіцієнт відбиття від межі між однорідним середовищем і неоднорідністю з імпедансом Z дорівнює $r_Z=(1-Z)/(1+Z)$, відповідні межі hі l-неоднорідностей як джерела відбитих хвиль протифазні.

При виконанні амплітудних і фазових умов

$$Z_h = Z_l^{-1} \text{ i } \varphi_h = \varphi_l, \tag{1}$$

де $\varphi = ka$ — фазова довжина неоднорідності, k і a — хвильове число і довжина неоднорідності, для коефіцієнтів відбіття від неоднорідностей маємо $r_h = -r_l$.

У цьому випадку протифазні хвилі, відбиті h- і l-неоднорідностями, рівні по амплітуді. Оскільки бреггівський набіг фаз у заборонених зонах з парними номерами кратний 2π радіан, такі хвилі взаємно компенсуються і ці зони в спектрі КС відсутні.

Для моделювання КС необхідно використати модель неоднорідної лінії передачі, розглянуту в роботі 2.

Завдання до практичної роботи

- 1. Ознайомитися зі стислими теоретичним відомостями.
- 2. Розробити програму для моделювання однофазної КС, утвореної чвертьхвильовими шарами.
- 3. Виконати тестовий розрахунок при кількості шарів *N*=11 і *Z*=3.
- 4. Розробити програму для моделювання двофазної КС з $\phi_{h0}=\phi_{l0}=\pi/4$, де ϕ_0
 - фазова довжина неоднорідності на середній частоті першої

забороненої зони.

- 5. Виконати розрахунок згідно програми 4 при N=11 і $Z_h=Z_l^{-1}=3$.
- 6. Розробити програму для моделювання двофазної КС з φ_{h0}=φ_{l0}=π/3.
- 7. Виконати розрахунок згідно програми 6 при N=9 і $Z_h=Z_l^{-1}=3$.
- 8. Зробити висновки з аналізом результатів на їх відповідність очікуваним та взаємну відповідність.

ПРАКТИЧНА РОБОТА № 4 АМПЛІТУДНА АПОДИЗАЦІЯ КРИСТАЛОПОДІБНИХ СТРУКТУР

Мета роботи: розробити комп'ютерну модель амплітудної аподизації кристалоподібних структур, дослідити особливості аподизації.

Стислі теоретичні відомості

Термін «аподизація» використовується в математиці та різних технічних областях і означає вибір необхідної функції, що характеризує пропускання або фільтрацію. Ця процедура фактично є фундаментальною при розробці різноманітних хвильових структур як відомих, так і новітніх. При синтезі нових структур використовують розроблені методи аподизації з урахуванням конкретної її конструктивної реалізації. Важливий аспект реалізації — необхідність врахування конструктивно-технологічних обмежень аподизації при конкретному її застосуванні.

Аподизація кристалоподібних структур (КС) виконується в рамках моделі трансверсального фільтра (ТФ) (див. практичну роботу № 2). Частотна характеристика ТФ та часова або просторова функція, що відповідає його структурі, зв'язані перетворенням Фур'є:

$$H(f) = \sum_{1}^{N} h_n \exp(i\varphi_n); \qquad h(t) = \sum_{1}^{N} h_n \delta(t - T_n),$$

де $\phi_n = \omega T_n$; $T_n = \sum_{2}^{n} t_n$, $T_1 = 0$, h(t) — імпульсна характеристика (IX) ТФ; $\delta(t)$ —

δ-функція.

Структура ТФ відповідає його IX, а значення вагових коефіцієнтів прямо пропорційні значенням дискретної IX. Синтез ТФ зводиться до знаходження необхідної IX оберненим перетворенням Фур'є від частотної характеристики. Аподизація відповідає реалізації отриманої IX. При амплітудній аподизації значення вагових коефіцієнтів h_n прямо пропорційні значенням IX.

Амплітудна аподизація КС виконується вибором відносного імпедансу Z_n шару з умови, що коефіцієнт відбиття від межі шарів прямо пропорційний значенню h_n (див. лекційне питання «Амплітудна аподизація»). Для розрахунку коефіцієнта відбиття КС необхідно використати модель неоднорідної лінії передачі.

Завдання до практичної роботи

- 1. Ознайомитися зі стислими теоретичним відомостями.
- Скористатися програмою для однофазної неаподизованої КС (робота №3) з чергуванням шарів з відносними імпедансами Z₀ і 1 і розрахувати коефіцієнт відбиття (в децибелах) при значеннях N=21 (кількість шарів) і Z₀=2, розглянутих на лекції.
- Розробити програму для розрахунку коефіцієнта відбиття амплітудноаподизованої КС і виконати розрахунок з аподизацією згідно функції Хеммінга при N=21 і Z₀=2 (див. лекцію).
- 4. Виконати розрахунок і побудувати залежність *Z_n(n)* для КС, розрахованої в п. 3.
- 5. Дослідити залежність рівня бокових пелюсток від N і Z₀.
- б. Зробити висновки з аналізом результатів на їх відповідність очікуваним та взаємну відповідність.

ЛІТЕРАТУРА

1. Markos P. Wave propagation from electrons to photonic crystals and lefthanded materials / P. Markos, C. M. Soukoulis. — Princeton and Oxford: Princeton University Press, 2008. — 352 p.

2. Basdevant J.-L. Lectures on quantum mechanics / J.-L. Basdevant. — N. Y.: Springer, 2007. — 308 p.

3. Нелин Е. А. Импедансная модель для «барьерных» задач квантовой механики / Е. А. Нелин // УФН. — 2007. — Т. 177, №3. — С. 307 – 313.

4. Korvink J., Haber O. MEMS a practical guide to design, analysis, and applications / J. Korvink, O. Haber. — N. Y.: William Andrew, Inc., Springer, 2006. — 965 p.

5. Власов А. И. Основы моделирования микро- и наносистем : учеб. пособие / А. И. Власов, А. В. Назаров. — М. : Изд-во МГТУ им. Н. Э. Баумана. — 2011. — 144 с.

6. Усанов Д. А. Компьютерное моделирование наноструктур: Учеб. пособие для студентов факультета нано- и биомедицинских технологий / Д. А. Усанов, Ал. В. Скрипаль, Ан. В. Скрипаль, А. В. Абрамов. — Саратов, 2013. — 100 с.: ил. Электронное издание