

---

---

**МІКРОЕЛЕКТРОННА ТА НАНОЕЛЕКТРОННА ТЕХНІКА**

УДК 621.372.543

**КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ КВАНТОВОРОЗМІРНИХ  
СТРУКТУР В СЕРЕДОВИЩІ МАТЛАВ**

*Бабушкін А. М., магістрант,*

*Нелін Є. А., д. т. н., професор*

*Національний технічний університет України*

*“Київський політехнічний інститут”, м. Київ, Україна*

**Вступ**

Квантоворозмірні структури (КРС) складають основу наноелектронних пристроїв обробки сигналів. Розробку таких пристроїв в значній мірі визначає побудова або вибір математичної та комп'ютерної моделей. Імпедансна модель дозволяє узагальнити аналіз КРС, дає можливість отримати аналітичні вирази для характеристик та власних значень структур [1]. Середовище Matlab забезпечує «інтелектуалізацію» комп'ютерного моделювання КРС.

**Постановка задачі**

Розробка КРС для наноелектронних пристроїв виконується синтезом через аналіз. Таку процедуру зручно реалізувати за допомогою інтерактивного інтерфейсу, що відображає структуру, її модель і характеристику. Параметри структури задаються безпосередньо на графічному зображенні КРС введенням їх значень у відповідні поля. Інтерфейс дає можливість наочно дослідити взаємозв'язок параметрів структури, моделі і характеристики.

**Двобар'єрні КРС**

Особливість фізичних ефектів нанодіапазону обумовлена хвильовими властивостями електронів. Ключовий фізичний ефект цього діапазону — резонансне тунелювання електронів (РТЕ), що спостерігається в двобар'єрній структурі (ДБС). Така структура — базова для розуміння фізичних основ формування зонних діаграм кристалів та кристалоподібних структур, принципів наноелектронних пристроїв і їх конструювання.

Рис. 1 ілюструє залежності потенціалу для різних ДБС. На рис. 1, а показано модель лінії передачі для симетричної ДБС з симетричними бар'єрами. Області бар'єра і зовнішнього середовища мають різні імпеданси. Аналіз ДБС зводиться до аналізу відповідної неоднорідної лінії передачі. Симетрична ДБС з несиметричними бар'єрами (рис. 1, б) і несиметрична ДБС (рис. 1, в) [2] розширюють можливості в формуванні характеристик наноелектронних пристроїв.

**Однobar'єрні КРС та двоямний потенціал**

На рис. 2, а і б приведено залежності потенціалу для симетричних однobar'єрних структур, запропонованих в [3]. Однobar'єрні структури, що можуть бути і несиметричними, доповнюють можливості ДБС. При моделюванні молекул і квантових обчислень використовують двоямний потенціал (рис. 2, в) [4].

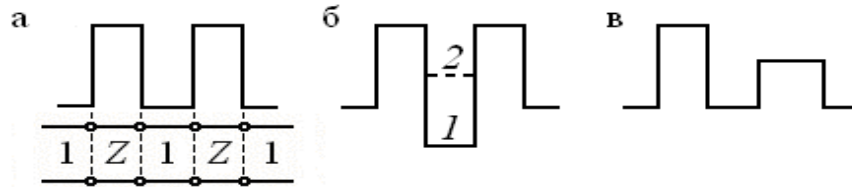


Рис. 1. Двobar'єрні КРС: а - симетрична ДБС з симетричними бар'єрами, 1 і Z – нормовані імпеданси зовнішнього середовища і бар'єра; б – симетрична ДБС з несиметричними бар'єрами, 1 і 2 – варіанти розташування дна потенціальної ями; в – несиметрична ДБС

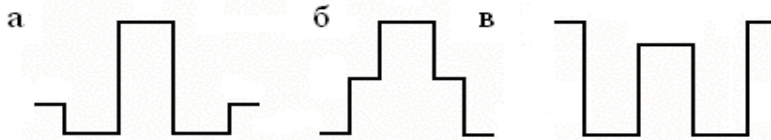


Рис. 2. Однobar'єрні КРС та двоямний потенціал: а – симетрична однobar'єрна структура з потенціальними ямами; б – симетрична однobar'єрна структура з потенціальними сходами; в – двоямний потенціал

Структури, приведені на рис. 1 і 2, – тришарові. В рамках імпедансного підходу всі ці структури мають однакову модель у вигляді неоднорідної лінії передачі, утвореної трьома відрізками. Хвильовий імпеданс і хвильове число кожного відрізка визначаються потенціалом і ефективною масою електрона.

**Matlab-модель тришарової КРС**

Рис. 3 ілюструє інтерфейс комп'ютерної моделі тришарової КРС, розроблений в середовищі Matlab. Задані параметри відповідають симетричній ДБС з несиметричними бар'єрами. Товщина і потенціал кожного шару вводяться у відповідні поля на зображенні структури, а ефективна маса електрона (кг, значення перед множителем  $10^{-31}$ ) вводиться у поле під зображенням шару. Поле зі списком у правому верхньому куті області побудови характеристики дозволяє вибрати розрахунок залежності коефіцієнта проходження або коефіцієнта відбиття від енергії електрона. Поля під областю побудови характеристики призначені для початкового значення енергії електрона, кроку розрахунку та кінцевого значення. Маркер у вигляді вертикальної лінії дозволяє поточно аналізувати характеристику. Значення в точці виводяться поруч. Для значення енергії в цій точці на зображенні моделі КРС виводяться значення нормованого вхідного опору на

вході кожного з шарів.

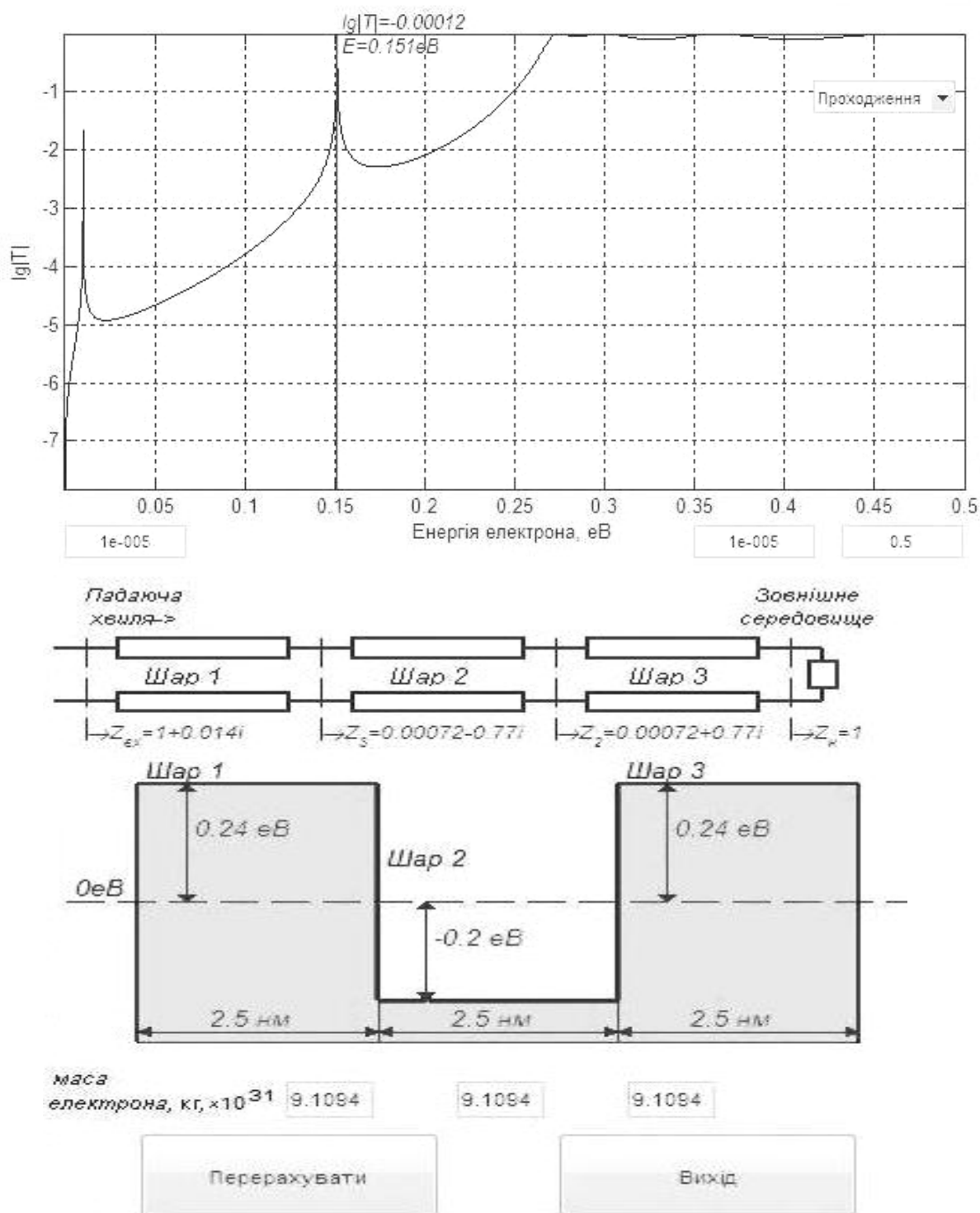


Рис. 3. Ліва і права частини інтерфейсу комп'ютерної Matlab-моделі тришарової КРС.

Максимуми коефіцієнта проходження на рис. 3 відповідають власним рівням ДБС. Якщо значення енергії дорівнює власному рівню, спостерігається РТЕ, при якому коефіцієнт проходження  $T=1$ . Маркер суміщено з

другим максимумом. Як бачимо з моделі ДБС, в цій точці вхідний опір ДБС дорівнює опору зовнішнього середовища. Наявність незначної реактивної складової вхідного опору пояснюється тим, що положення маркера не може точно співпасти з положенням максимуму внаслідок дискретності значень енергії при моделюванні. За рахунок стоячої хвилі в потенціальній ямі при РТЕ ДБС повністю узгоджена з зовнішнім середовищем і відбита хвиля відсутня.

Перший власний рівень більш високочастотний, ніж другий. Внаслідок цього, а також дискретності моделювання перший максимум не доходить до нуля. Для детального аналізу характеристики в області першого максимуму необхідно вибрати відповідні межі і крок розрахунку (рис. 4).

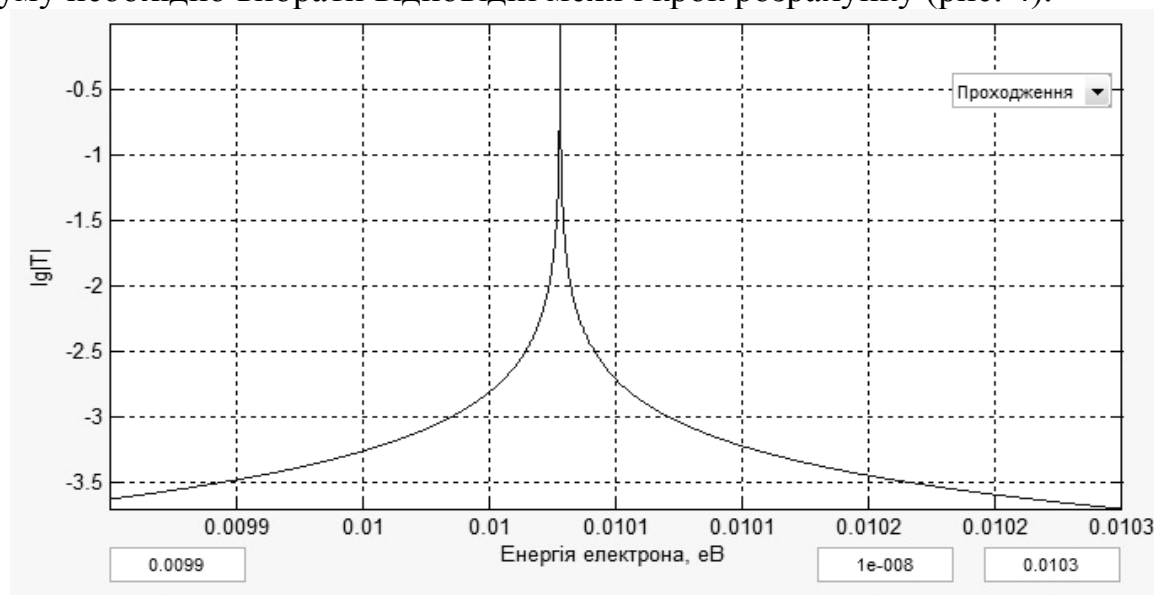


Рис. 4. Детальне зображення характеристики в області першого максимуму

### Висновки

Розроблена програма з графічним інтерфейсом забезпечує зручний інтерактивний синтез КРС з заданими характеристиками. Методику, закладену в програму, зручно використовувати для моделювання інших наноелектронних структур та проектування пристроїв на їх основі.

### Література

1. Нелін Є.А. Радіотехнічні та оптичні моделі в наноелектроніці // Вісн. НТУУ «КПІ». Серія — Радіотехніка. Радіоапаратобудування. — 2010, вип. 43. — С. 32–50.
2. Нелин Е.А. Резонансные параметры двухбарьерных структур // Письма в ЖТФ. — 2009. — Т. 35, вып. 10. — С. 6–11.
3. Нелин Е.А. Импедансная модель для «барьерных» задач квантовой механики // УФН. — 2007. — Т. 177. — №3. — С. 307–313.
4. Basdevant J.-L. Lectures on quantum mechanics. — New York: Springer. — 2007. — 308 p.

Бабушкін А.М., Нелін Є.А. **Комп'ютерне моделювання квантоворозмірних структур в середовищі Matlab.** Розглянуто особливості комп'ютерного моделювання квантоворозмірних структур (КРС) в середовищі Matlab. Інтерфейс програми відображає структуру, її модель і характеристику. Такий інтерфейс зручний при проектуванні наноелектронних пристроїв, а також при вивченні їх принципів у навчальному процесі. Інтерфейс розроблено на прикладі тришарової КРС, що включає симетричні і несиметричні одно- і двобар'єрні структури та структуру з двоямним потенціалом. Розглянуто приклад аналізу симетричної двобар'єрної структури з несиметричними бар'єрами. Звернуто увагу на особливості комп'ютерного моделювання КРС, характеристик КРС та параметрів її моделі при резонансному тунелюванні електронів.

**Ключові слова:** квантоворозмірна структура, одnobар'єрна структура, двобар'єрна структура, резонансне тунелювання електронів, наноелектроніка, Matlab.

Бабушкин А.М., Нелин Е.А. **Компьютерное моделирование квантоворазмерных структур в среде Matlab.** Рассмотрены особенности компьютерного моделирования квантоворазмерных структур (КРС) в среде Matlab. Интерфейс программы отображает структуру, ее модель и характеристики. Такой интерфейс удобен при проектировании нанoeлектронных устройств, а также при изучении их принципов в учебном процессе. Интерфейс разработан на примере трехслойной КРС, включающей симметричные и несимметричные одно- и двухбарьерные структуры, а также структуру с двумя ямным потенциалом. Рассмотрен пример анализа симметричной двухбарьерной структуры с несимметричными барьерами. Обращено внимание на особенности компьютерного моделирования КРС, характеристик КРС и параметров ее модели при резонансном тунелировании электронов.

**Ключевые слова:** квантоворазмерная структура, одnobарьерная структура, двухбарьерная структура, резонансное тунелирование электронов, нанoeлектроника, Matlab.

Babushkin A.M. Nelin E.A. **Computer simulation of quantum-size structures in the Matlab environment.** The features of computer modeling of quantum-size structures (QSS) in the Matlab environment are discussed. The program's interface represents the structure, its model and characteristics. Such an interface is useful for designing nanoelectronic devices, as well as the study of their principles in the educational process. The interface is designed for a three-layer sample of QSS, including symmetric and asymmetric single- and double-barrier structures, as well as the structure with two-well potential. An example of analysis of symmetrical double-barrier structure with asymmetric barriers is discussed. Attention is paid to the features of computer modeling of QSS, QSS's characteristics and parameters of its model at resonance tunneling of electrons.

**Keywords:** quantum-size structure, single-barrier structure, double-barrier structure, resonant tunneling of electrons, nanoelectronics, Matlab.