

## ترابرد در دیودهای تونل‌زنی تشدیدی نقطه کوانتومی

محمدتقی آصف‌پور، پیمان صاحب‌سرا\*

دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان، ایران

### چکیده

در این مقاله با استفاده از رهیافت تابع گرین، یک دیود تونل‌زنی تشدیدی را شبیه‌سازی نموده‌ایم. از نتایج محاسبات بر روی این دیودها می‌توان در محاسبه جریان تاریک سلول‌های خورشیدی استفاده نمود. برای این منظور ابتدا هامیلتونی دستگاه را در تقریب تنگابست نوشته و تابع گرین را برای آن محاسبه کردیم. سپس با استفاده از مؤلفه‌های تابع گرین محاسبه شده، چگالی موضعی حالت‌ها و چگالی جریان را به‌دست آوردیم. نتایج نشان می‌دهند به‌دلیل وجود یک میدان الکتریکی طولی، چگالی محلی حالت‌ها متناسب با پتانسیل اعمال شده تغییر می‌کند. مشخصه جریان-ولتاژ دستگاه نیز نشان‌دهنده وجود رفتار غیر اهمی در دستگاه دیود تونل‌زنی تشدیدی است. همچنین با وارد نمودن نقاط کوانتومی، مقاومت دیفرانسیلی منفی قابل مشاهده است. این مقاومت ناشی از پدیده تونل‌زنی تشدیدی است.

**کلیدواژگان:** دیود تونل‌زنی تشدیدی، تابع گرین، نقطه کوانتومی، ترابرد.

بخش دوم اشاره‌ای به هامیلتونی مدل و روش محاسبه ترابرد در دیودهای تونل‌زنی تشدیدی نموده‌ایم و آنها را با یک دیود معمولی مقایسه کرده‌ایم. در بخش چهارم نیز به بحث در مورد نتایج به‌دست آمده پرداخته‌ایم.

### مقدمه

اولین بار در سال ۱۹۷۴ دیودهای تونل‌زنی تشدیدی توسط چانگ، ایساکی و تسو معرفی شدند [۱]. فرمول‌بندی مورد استفاده ایشان بر مبنای نظریه پاسخ خطی استوار بود. آنها همچنین با استفاده از روش انتقال ماتریسی در کنار این رهیافت، جریان تونل‌زنی تشدیدی در ساختارهایی با دو سد پتانسیل را محاسبه نمودند. از این دیودها می‌توان به‌عنوان مقاومت متغیر در فرکانس‌های ماکروویو و در ساخت مدارهای دیجیتال سرعت بالا و فوتودیود استفاده نمود [۲]. همچنین یکی از مهمترین کاربردهای این دیودها، ساخت سلول‌های خورشیدی با بهره بالا می‌باشد [۳]. از جمله روش‌های مرسوم جهت محاسبه ترابرد در این دستگاه‌ها می‌توان به روش لاندائتر-بوتیکر اشاره نمود [۴]. در این مقاله قصد داریم تا با استفاده از نظریه تابع گرین، ترابرد در این دستگاه‌ها را محاسبه کنیم. در

### هامیلتونی مدل

ساختار کلی یک دیود تونل‌زنی تشدیدی از یک نیم‌رسانای نوع p، یک نیم‌رسانای نوع n و یک نیم‌رسانای ذاتی در میان آنها تشکیل شده است. برای نوشتن هامیلتونی مدل این دستگاه، می‌توان آن را به یک ناحیه میانی، هادی راست و هادی چپ تقسیم‌بندی نمود. اگر هامیلتونی هادی چپ را با  $H_0^L$ ، هامیلتونی هادی راست را با  $H_0^R$  و هامیلتونی ناحیه میانی را با  $H_0^D$  نشان دهیم، هامیلتونی کل دستگاه به‌صورت زیر در می‌آید:

$$H_0 = H_0^D + H_0^R + H_0^L + H_0^{LD} + H_0^{RD}, \quad 1$$

که در آن  $A = i(G^R - G^A)$  تابع پاسخ و  $S$  مساحت سطح مقطع دیود مورد نظر است.

### روش محاسبه خود انرژی مرزی

یک شبکه گسسته و یک بعدی در جهت محور  $z$  را در نظر می‌گیریم. با توجه به این که فقط همسایگان اول در نظر گرفته می‌شوند، تعداد نزدیک‌ترین همسایه‌ها برابر ۲ است. هامیلتونی تنگابست این شبکه را می‌توان به صورت زیر نوشت [۸]:

$$H_0^D(k_{\parallel}, k_z) = E_s + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_{\parallel}} + \sum_{i=1}^2 t e^{ik_z R_i} \\ = E_s + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_{\parallel}} + 2t \cos(k_z a) \quad ۸$$

که در آن  $E_s$  انرژی درون جایگاهی و  $a$  ثابت شبکه است. جزئیات محاسبه خود انرژی مرزی در مرجع [۹] آمده است. برای محاسبه خود انرژی مرزی نیاز به تابع گرین سطحی است. در ادامه برای نمونه به نحوه محاسبه تابع گرین مرزی در سمت چپ اشاره می‌کنیم. تابع گرین سطحی در هادی سمت چپ به صورت زیر است:

$$g_{-K,-K}^R = (E - E_s + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_{\parallel}} - t_{-K,-K-1} e^{ik_z a})^{-1}. \quad ۹$$

اثر جفت‌شدگی بین هادی‌ها و ناحیه میانی را با  $H_0^{LD}$  و  $H_0^{RD}$  نشان می‌دهیم. با استفاده از تقریب تنگابست، در صورتی که تنها پرش بین همسایگان اول را در نظر بگیریم، خواهیم داشت [۵]:

$$H_0 = \sum_i D_i c_i c_i^{\dagger} + t \sum_{\langle ij \rangle} c_i c_j^{\dagger}. \quad ۲$$

در رابطه فوق  $t$  انتگرال پرش بین جایگاه  $i$  و  $j$  و  $D$  شامل انرژی درون جایگاهی و پتانسیل هارتری است.  $c$  و  $c^{\dagger}$  نیز به ترتیب عملگرهای خلق و فنا فرمیونی هستند. شماره جایگاه‌ها را برای هادی چپ، ناحیه مرکزی و هادی راست به ترتیب با  $\{N+1, \dots, M\}$ ،  $\{1, \dots, N\}$ ، و  $\{-K, \dots, 0\}$  برچسب می‌زنیم. با استفاده از روابط زیر مؤلفه‌های مختلف تابع گرین به دست می‌آید [۶]:

$$G^R(k_{\parallel}, E) = [(E + i\varepsilon)I - H_0^D(k_{\parallel}) - \Sigma^{RB}]^{-1} \quad ۳$$

$$G^A(k_{\parallel}, E) = (G^R(k_{\parallel}, E))^{\dagger} \quad ۴$$

$$G^<(k_{\parallel}, E) = G^R(k_{\parallel}, E) \Sigma^{<B} G^A(k_{\parallel}, E) \quad ۵$$

$\Sigma^{(\alpha)B}$  ( $R$  یا  $<$ ) توابع خود انرژی مرزی هستند که جفت‌شدگی حالت‌های کوانتومی ناحیه میانی به هادی‌ها را نشان می‌دهد.

با استفاده از معادلات ۳ تا ۵ و محاسبه توابع گرین می‌توان چگالی موضعی حالت‌ها و چگالی جریان را در هر لایه از طریق روابط زیر به دست آورد [۷]:

$$\rho_L(E) = \sum_{k_{\parallel}} \text{Tr}(A_{L,L}(k_{\parallel}, E)), \quad ۶$$

$$J_L = \frac{2e}{\hbar S} \sum_{k_{\parallel}} \mathcal{G}(k_{\parallel}), \quad ۷$$

که در آن  $\mathcal{G}(k_{\parallel})$  به صورت زیر تعریف می‌شود

$$\mathcal{G}(k_{\parallel}) = \int \frac{dE}{2\pi} 2\text{Re}\{\text{Tr}[t_{L,L+1} G_{L+1,L}^<(k_{\parallel}, E)]\}$$

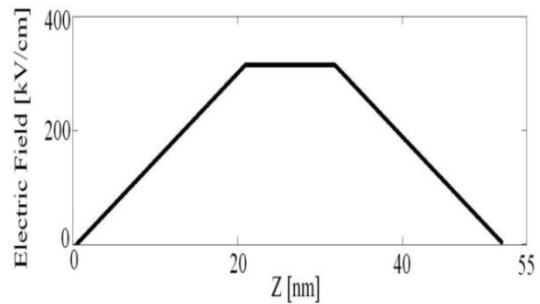
اکنون با استفاده از معادله بازگشتی  
 $f_{FD}$  تابع توزیع فرمی-دیراک است. به شیوه مشابه می‌توان خود انرژی مرزی راست را نیز به دست آورد. حال با استفاده از رابطه ۳ می‌توان تابع گرین تأخیری و در نتیجه سایر کمیت‌های فیزیکی مورد نظر را محاسبه نمود.

### نتایج

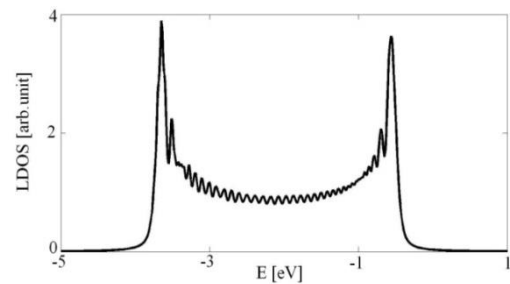
دیود چند اتصال  $p-i-n$  با مشخصات  $N=20$ ،  $K=38$ ،  $M=38$  را در نظر می‌گیریم. ثابت شبکه برابر با  $0.54$  نانومتر و مساحت سطح مقطع نیز  $1 \text{ cm}^2$  است. در این دیود  $N_V=1/1 \times 10^{25} \text{ m}^{-3}$  و  $N_A=10^{24} \text{ m}^{-3}$  و  $N_C=2/9 \times 10^{25} \text{ m}^{-3}$  است. نحوه تغییرات میدان الکتریکی در طول دیود در شکل ۱ نشان داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود میدان در ناحیه ذاتی دارای مقدار ثابت  $320 \frac{\text{KV}}{\text{cm}}$  است. با توجه به پتانسیل هارتری، چگالی موضعی در لایه‌های میانی دستگاه، در شکل ۲ رسم شده است. این در حالی است که اگر مدل مورد استفاده را تغییر دهیم و شبکه‌ای یک بعدی با پایه دو اتمی فرض کنیم، که انرژی درون جایگاهی آنها به ترتیب  $E_S$  و  $E_{p_z}$  باشد، آنگاه نمودار چگالی موضعی حالت‌ها به صورت شکل ۳ در خواهد آمد. این وضعیت دیود را به یکی از گزینه‌های مناسب برای ساخت سلول‌های خورشیدی تبدیل می‌نماید، زیرا با تغییر مناسب شکاف انرژی می‌توان طیف‌های مختلف نور خورشید را جذب نمود و بدین ترتیب بازده سلول را افزایش داد.

$$g_{L,L}^R = (E - E_S + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_{\parallel}} - t_{L,L+1} g_{L+1,L+1}^R t_{L+1,L})^{-1},$$

تابع گرین  $g_{0,0}^R$  به دست می‌آید. در روابط فوق  $k_z$  عدد موج طولی است که از رابطه ۸ قابل محاسبه است. در نهایت با توجه به این که تمامی عناصر ماتریس خود انرژی به جز عناصر  $(1,1)$  و  $(N,N)$  صفر هستند.



شکل ۱. نحوه تغییرات میدان الکتریکی برای دیود  $p-i-n$ .



شکل ۲. چگالی موضعی حالت‌ها برای یک دیود  $p-i-n$  با  $N=20$ .

بدین ترتیب، با استفاده از روابط زیر می‌توان خود انرژی مرزی هادی سمت چپ را به دست آورد:

$$\Sigma_L^{RB} = t_{1,0} g_{0,0}^R t_{0,1} \quad (11)$$

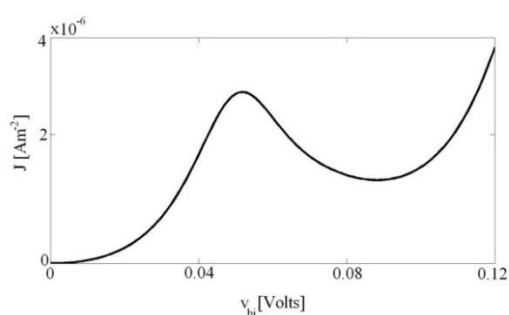
$$\Sigma_L^{<B} = i f_{FD} \Gamma_L^B. \quad (12)$$

که در آن داریم

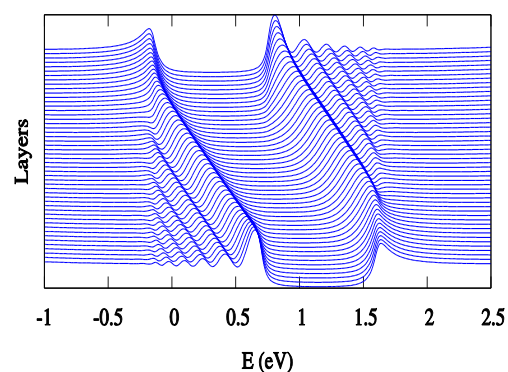
$$\Gamma_L^B = i [\Sigma_L^{RB} - (\Sigma_L^{RB})^\dagger]. \quad (13)$$

مشخصه جریان-ولتاژ این دیود نیز در شکل ۵ آورده شده است. با وارد نمودن یک چاه پتانسیل در میان دستگاه، حامل‌های بار در جهت جریان، تونل‌زنی کوانتومی انجام می‌دهند. در این ولتاژ افزایش ناگهانی در مقدار جریان دیده می‌شود. این پدیده تونل‌زنی تشدیدی نام دارد. در اینجا یک مقاومت دیفرانسیلی منفی نیز رخ می‌دهد. به این معنا که با افزایش ولتاژ بیش از  $0.6$  ولت چگالی جریان کاهش می‌یابد.

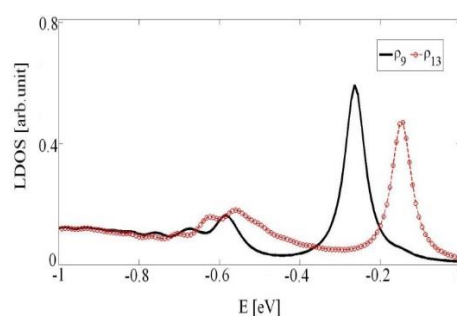
عوامل متعددی می‌توانند بر افزایش بیشینه جریان در دیودهای تونل‌زنی تشدیدی اثر بگذارند. از جمله این عوامل می‌توان به افزایش ضخامت سد و یا افزایش پهنای چاه اشاره نمود. نحوه تأثیر این عوامل در شکل ۶ آورده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود با افزایش ضخامت سد و یا افزایش پهنای چاه بیشینه جریان کاهش می‌یابد. با افزایش تعداد نقاط کوانتومی مشاهده شد که تعداد قله‌ها در مشخصه جریان-ولتاژ افزایش می‌یابد [۱۰].



شکل ۵. مشخصه جریان-ولتاژ در یک دیود نقطه کوانتومی تکی با ضخامت  $2.7$  نانومتر.



شکل ۳. چگالی موضعی حالت‌ها برای یک دیود با  $N = 100$ . شکل برای شکاف انرژی  $E_g = 0.9$  eV رسم شده است.



شکل ۴. چگالی موضعی حالت‌ها در ابتدا و انتهای چاه برای  $N=20$  و  $M=K=38$ .

مشخصه جریان-ولتاژ این دیود در حالی که هیچ گونه محدودیتی در ناحیه ذاتی وجود نداشته باشد، رفتاری غیر خطی از خود نشان می‌دهد، که این رفتار غیر اهمی یکی از ویژگی‌های اصلی دیودهاست [۹]. با استفاده از رهیافت گرین، می‌توان این ویژگی را تأیید نمود.

با وارد نمودن نقطه کوانتومی در ناحیه ذاتی، می‌توان محاسبات را تکرار نمود. همان‌طور که شکل ۴ نشان می‌دهد، با ورود تک نقطه کوانتومی، حالت‌های کوانتومی در ناحیه چاه پتانسیل جایگزیده می‌شوند. در وضعیتی مشابه می‌توان حالت‌های گسسته کوانتومی متعددی در سلول خورشیدی ایجاد نمود، که با توجه به مقادیر مختلف انرژی فوتونی ( $E = h\nu$ ) و افزایش تولید حامل‌ها، بهره آن را افزایش داد.

## مرجع‌ها

[1] L.L. Chang, L Esaki, R Tsu, Resonant tunneling in semiconductor double barriers, *Applied Physics Letters* 24 (1974) 593-595.

[2] H. Mizota, T. Tanoue, The physics and applications of resonant tunneling diodes, Cambridge University Press (2006).

[3] A. Luque, A. Martí, E. Antolín, P.G. Linares, I. Tobías, I. Ramiro, E. Hernandez, New Hamiltonian for a better understanding of the quantum dot intermediate band solar cells, *Solar Energy Materials & Solar Cells* 95 (2011) 2095-2101.

[4] S. Datta, *Electron Transport in Mesoscopic System*, Cambridge University Press (1995).

[5] M. Luisier, *Quantum Transport Beyond the Effective Mass Approximation*, PhD Thesis, Swiss Federal Institute of Technology, Zurich (2007).

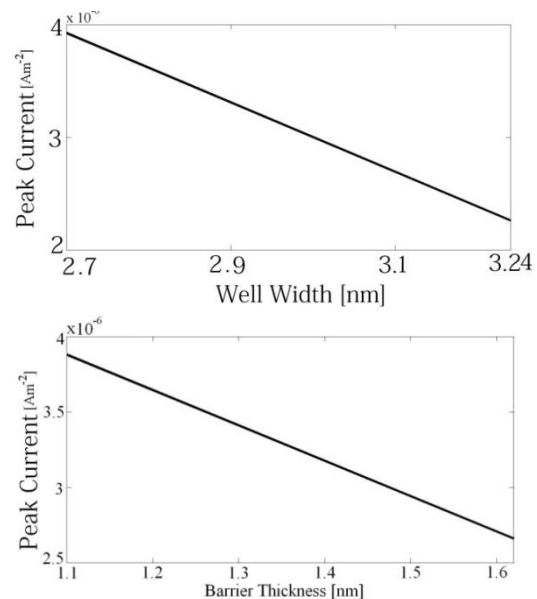
[6] U. Aeberhard, Effective microscopic theory of quantum dot superlattice solar cells, *Optical and Quantum Electronics* 44 (2012) 133-140.

[7] M. Ogawa, T. Sugano, T. Miyoshi, Full multiband simulation of quantum electron transport in resonant tunneling devices, *Solid-State Electronics* 44 (2000) 1939-1940.

[8] G. Grosso, G.P. Parravicini, *Solid State Physics*, Academic Press (2014).

[9] R. Lake, G. Klimeck, R.C. Bowen, D. Jovanovic, Quantitative simulation of a resonant tunneling diode, *Journal of Applied Physics* 81 (1997) 7845-7869.

[۱۰] م.ت. آصف‌پور، روش تابع گرین غیرتبادلی در محاسبه ترابرد دیودهای چاه کوانتومی، پایان‌نامه کارشناسی ارشد، دانشگاه صنعتی اصفهان (۱۳۹۳).



شکل ۶. بیشینه جریان برحسب ضخامت سد (منحنی بالا) و پهنای چاه (منحنی پایین).

## نتیجه‌گیری

در این پژوهش نشان دادیم که با وارد نمودن نقطه کوانتومی در ناحیه ذاتی، می‌توان حالت‌های گسسته کوانتومی متعددی ایجاد نمود، که با توجه به مقادیر مختلف انرژی فوتونی ( $E = h\nu$ ) و افزایش تولید حامل‌ها، بهره در سلول خورشیدی افزایش می‌یابد. همچنین با اضافه نمودن تعداد نقاط کوانتومی بیشتر در ناحیه ذاتی، که منجر به افزایش تعداد قله‌های جریان می‌شود، می‌توان از این دیودها در ساخت مدارات منطقی استفاده نمود.

## **Transport in quantum dots resonant tunneling diodes**

**\*Peiman Sahebsara, Mohammad Taghi Asefpour**

**Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan, Iran**

### **Abstract**

In this paper, we simulate a resonant tunneling diode (RTD). Using Green's function method for the tight-binding approximation, we calculate local density of states and current-voltage characteristic by the Green function components of the system. Results show a non-Ohmic behavior and negative differential resistance in RTD. As a result of a longitudinal electric field, the local density of states varies by changing the applied potential. Moreover, we study the effect of changing the physical parameters on the current of the device. Entering quantum dots in the middle of device causes a negative differential resistance, which is a consequence of resonant tunneling phenomenon.

**Keywords:** resonant tunneling diode, Green function, quantum dots, transport