Учреждение образования
БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАТИКИ И РАДИОЭЛЕКТРОНИКИ

Объект авторского права
УДК 537.311.1, 537.311.5, 537.312.7, 621.315.56, 621.315.592, 621.382.323

ПОЗДНЯКОВ
Дмитрий Викторович

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ И ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ПРИБОРНЫХ СТРУКТУР НА ОСНОВЕ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ КВАНТОВЫХ ПРОВОЛОК И МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ОДНОСТЕННЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

по специальности 05.27.01 – твердотельная электроника, радиоэлектронные компоненты, микро- и наноэлектроника, приборы на квантовых эффектах

Минск 2026

Научная работа выполнена в Белорусском государственном университете

Научный консультант: **Борздов Владимир Михайлович**, доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой физической электроники и нанотехнологий Белорусского государственного университета

Официальные оппоненты: **Абрамов Игорь Иванович**, доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры микро- и наноэлектроники учреждения образования «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники»

Максименко Сергей Афанасьевич, доктор физико-математических наук, профессор, директор НИУ «Институт ядерных проблем» Белорусского государственного университета

Соловьев Ярослав Александрович, доктор технических наук, доцент, заведующий отраслевой лабораторией новых технологий и материалов научно-технического центра ОАО «ИНТЕГРАЛ» – управляющая компания холдинга «ИНТЕГРАЛ»

Оппонирующая организация: ГНПО «Научно-практический центр НАН Беларуси по материаловедению»

Защита состоится «05» марта 2026 г. в 14:00 на заседании совета по защите диссертаций Д 02.15.03 при учреждении образования «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники» по адресу: 220013, г. Минск, ул. П. Бровки 6, 1 учебный корпус, ауд. 232. E-mail: dissovet@bsuir.by, тел. 293-89-89.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке учреждения образования «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники».

Автореферат разослан «04» февраля 2026 г.

Ученый секретарь совета
по защите диссертаций Д 02.15.03,
кандидат технических наук, доцент Г.А. Пискун

ВВЕДЕНИЕ

К настоящему времени ресурс классических конструктивно-технологических решений для типовых кремниевых (Si) полевых транзисторов с изолированным затвором, являющихся базовыми переключающими элементами в современных цифровых сверхбольших и ультрабольших интегральных схемах (СБИС и УБИС), практически полностью исчерпан по причине невозможности их дальнейшей миниатюризации в силу фундаментальных ограничений по некоторым физико-топологическим параметрам этих транзисторов. Выход за рамки таких ограничений либо обусловливает их функциональную непригодность в качестве ключей электрического тока, в частности из-за перекрытия истоковой и стоковой областей пространственного заряда, либо приводит к деградации электрических характеристик транзисторов вплоть до выхода их из строя, например под воздействием горячих носителей заряда. Указанные проблемы решаются несколькими способами. Во-первых, путем кардинального изменения геометрии транзисторов. Во-вторых, за счет использования иных базовых материалов, например таких, как арсенид галлия (GaAs). В-третьих, и это основной путь решения проблем, посредством изменения топологии миниатюризируемых транзисторов, иногда с одновременным использованием альтернативных материалов. Но так или иначе, чем меньше геометрические размеры транзисторов, тем большее влияние оказывают квантово-размерные эффекты на перенос носителей заряда в такого рода приборных структурах, в том числе эффекты, характерные для низкоразмерных электронных газов. Данные обстоятельства ставят перед разработчиками базовых элементов СБИС и УБИС целый ряд новых задач. Дело в том, что в рамках современного подхода к производству СБИС и УБИС неотъемлемой частью процесса их разработки и изготовления является как этап моделирования производственных техпроцессов, так и этап моделирования функционирования базовых элементов СБИС и УБИС. В частности, путем ненатурного прототипирования полупроводниковых транзисторов с помощью хорошо себя зарекомендовавших коммерческих систем автоматизированного проектирования (САПР) от таких известных во всем мире компаний, как SILVACO и SYNOPSYS, можно быстро устанавливать зависимости выходных электрических характеристик транзисторных структур от их физико-топологических параметров. И хотя САПР успешно решают задачи моделирования типовых (макроскопических) базовых элементов СБИС и УБИС и содержат модули для вполне адекватного моделирования ультраминиатюрных (микроскопических) приборов, функционирующих в режиме баллистического переноса электронов, в то же время заложенные в основу таких САПР физико-математические модели в большинстве слу-

чаев не позволяют получать адекватные результаты при моделировании мезоскопических систем, к которым в том числе относятся приборные структуры на основе квантовых проводников с одномерным электронным газом. Отмеченные обстоятельства обусловливают необходимость решения, как минимум, следующих двух очень важных задач. Первая связана с разработкой более строгих физико-математических моделей, которые, с одной стороны, позволяли бы достаточно точно рассчитывать электрофизические и выходные электрические характеристики моделируемых приборов, а с другой стороны, не были бы чересчур сложными с вычислительной точки зрения. Вторая сопряжена как с выбором подхода к описанию физических явлений, так и выбором численных методов реализации разработанных моделей в виде алгоритмов и конечного программного обеспечения. К примеру, перенос электронов в объемном полупроводнике можно одинаково успешно промоделировать в рамках как феноменологического подхода путем прямого численного решения уравнения непрерывности, так и кинетического подхода либо путем прямого численного решения уравнения Больцмана, либо путем имитационного моделирования переноса носителей заряда методом Монте-Карло. И каждый такой вариант решения задачи в сравнении с другими двумя методами имеет как свои преимущества, так и свои недостатки.

Анализ состояния проблемы численного моделирования функционирования базовых элементов современных СБИС и УБИС показывает, что:

– одним из наиболее перспективных методов моделирования переноса носителей заряда в такого рода приборных наноструктурах является метод Монте-Карло;

– получение с помощью данного метода результатов моделирования, которые бы хорошо согласовывались с экспериментальными данными, обусловливает необходимость учета как волновых свойств носителей заряда, так и вторичных квантовых эффектов в теории рассеяния;

– адекватное моделирование баллистического переноса носителей заряда в приборных наноструктурах с одномерным электронным газом обусловливает необходимость учета волновых свойств частиц, и по этой причине физико-математические модели, описывающие такой режим переноса, должны базироваться на уравнении Шредингера;

– в ряде важных случаев отсутствуют необходимые численные модели переноса носителей заряда в наноструктурах с одномерным электронным газом, позволяющие рассчитывать электрофизические и выходные электрические характеристики моделируемых приборов с требуемой точностью.

Таким образом, диссертационная работа посвящена теоретическому изучению механизмов переноса носителей заряда в приборных структурах с одномерным электронным газом, электрофизических свойств этих структур и

оценке влияния на эти свойства особенностей рассеяния носителей заряда. Решение вышеуказанных и других смежных проблем будет способствовать дальнейшему прогрессу в области микро- и наноэлектроники и успешной разработке новых приборов и приборных структур на квантовых эффектах. Все вышесказанное обусловливает актуальность темы диссертации.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Связь работы с научными программами (проектами), темами

Диссертационная работа выполнена на кафедре физической электроники и нанотехнологий факультета радиофизики и компьютерных технологий Белорусского государственного университета в рамках плана НИР БГУ. Тема диссертации соответствует перечню приоритетных направлений фундаментальных и прикладных научных исследований Республики Беларусь на 2002–2005 годы, утвержденному постановлением Совета Министров Республики Беларусь № 111 от 29.01.2002; на 2006–2010 годы, утвержденному постановлением Совета Министров Республики Беларусь № 512 от 17.05.2005; перечню приоритетных направлений научных исследований на 2011–2015 годы, утвержденному постановлением Совета Министров Республики Беларусь № 886 от 09.06.2010; на 2016–2020 годы, утвержденному постановлением Совета Министров Республики Беларусь № 190 от 12.03.2015; приоритетным направлениям научной, научно-технической и инновационной деятельности на 2021–2025 годы, утвержденным Указом Президента Республики Беларусь № 156 от 07.05.2020; на 2026–2030 годы, утвержденным Указом Президента Республики Беларусь № 135 от 01.04.2025, в частности, пунктам 1. «Цифровые технологии и искусственный интеллект (подпункты: «программное обеспечение и программно-технические средства»; «математические теории и методы, высокопроизводительные вычислительные системы, цифровые модели и двойники»)» и 2. «Инновационные технологии в промышленности (подпункт «фотоника, микроэлектроника, сенсорика и СВЧ-технологии»)».

Часть результатов диссертационной работы были получены при выполнении следующих НИР в БГУ: «Моделирование электрофизических свойств полупроводниковых приборных структур с низкоразмерным электронным газом», договор с БГУ № НИР-1798 от 14.04.2004 (№ГР 20042136, 2004 г.); «Провести численное моделирование влияния квантово-размерных эффектов на перенос электронов в полупроводниковых квантовых проволоках», задание 6.05.2 ГПОФИ «Наноматериалы и нанотехнологии» (№ГР 20014929, 2001–2005 гг.); «Формирование квантовых точек моноклинного GeAs в слоях $Si_{1-X}Ge_X$ сплавов и моделирование электрофизических свойств квантовых структур», задание 4.19 ГПОФИ «Наноматериалы и нанотехнологии»

(№ГР 2004974, 2003–2005 гг.); «Разработать модели функционирования и программное обеспечение для расчета электрических характеристик короткоканальных транзисторных структур с одномерным электронным газом», задание 14.1 ГПОФИ «Электроника» (№ГР 20042569, 2003–2005 гг.); «Разработать модели переноса носителей заряда в углеродных нанотрубках и приборных структурах на их основе, а также методы характеризации таких объектов», задание №БЭ 04.53 ГНТП «БЕЛЭЛЕКТРОНИКА» (2004–2005 гг.); «Численное моделирование электрофизических свойств полупроводниковых структур с одномерным электронным газом», договор с БРФФИ №Ф04-261 от 03.05.2004 (№ГР 20042590, 2004–2006 гг.); задание 3.06.3 «Формирование магнитных наноструктурных пленок и нанопроволок в матрице анодного оксида алюминия, исследование их физических свойств и моделирование ряда приборных структур на их основе для перспективных конструкций сверхплотной записи-считывания информации» (№ГР 20061219), задание 4.04.3 «Разработка методов получения и исследование массивов унифицированных углеродных нанотрубок и органических молекулярных кристаллитов, а также суспензий на их основе, для коммерческого использования и приложения в области создания нанотранзисторов, автоэмиссионных дисплеев, солнечных батарей, газо-, хемо-, биосенсоров и топливных элементов» (№ГР 20061220) и задание 6.03.2 «Разработать модели и программное обеспечение для расчета характеристик приборов на системах с низкоразмерным электронным газом с размерами активных областей 100-10 нанометров» (№ГР 20061221) ГКПНИ «Наноматериалы и нанотехнологии» (2006–2010 гг.); «Моделирование электрофизических процессов в полупроводниковых нанопроволоках и углеродных нанотрубках», договор с БРФФИ №Ф08М-007 от 01.04.2008 (№ГР 20081674, 2008–2010 гг.); «Моделирование транзисторных структур на основе углеродных нанотрубок с металлическим типом проводимости», отдельный научно-исследовательский проект БГУ, финансировавшийся Министерством образования Республики Беларусь (№ГР 20090750, 2009–2010 гг.); задание 1.6.03 «Построение и программная реализация параллельных алгоритмов для решения задач диффузии примесных атомов и электропереноса носителей заряда в полупроводниковых приборных структурах интегральной электроники» подпрограммы «Информатика» ГПНИ «Научные основы и инструментальные средства информационных и космических технологий» (№ГР 20114797, 2011–2013 гг.); задание 2.09.3 «Моделирование процессов генерации электрических колебаний терагерцового диапазона в полупроводниковых приборных наноструктурах» подпрограммы «Наноструктурные материалы, нанотехнологии, нанотехника («Наноструктура»)» ГПНИ «Материаловедение, новые материалы и технологии» (№ГР 20211463, 2021–2025 гг.).

Цель, задачи, объект и предмет исследования

Целью диссертационной работы является построение физико-математических моделей процессов переноса носителей заряда в приборных структурах с одномерным электронным газом с учетом квантово-размерных и вторичных квантовых эффектов, а также разработка алгоритмов и программных средств для численного моделирования электрофизических свойств и электрических характеристик этих структур.

Достижение поставленной цели подразумевает решение следующих задач:

– развитие теории рассеяния носителей заряда в полупроводниковых квантовых проволоках для доминирующих в таких проволоках механизмов рассеяния;

– развитие теории рассеяния электронов в металлических одностенных углеродных нанотрубках для доминирующих в таких нанотрубках механизмов рассеяния;

– разработка физико-математической модели переноса носителей заряда в полупроводниковых квантовых проволоках;

– разработка физико-математической модели переноса электронов и фононов в металлических одностенных углеродных нанотрубках;

– разработка численных моделей переноса носителей заряда в баллистических полевых транзисторах с барьерами Шоттки в одномерных проводящих каналах.

Объектом исследования являются приборные структуры с одномерным электронным газом. В частности, полупроводниковые квантовые проволоки, металлические одностенные углеродные нанотрубки и приборы на их основе.

Предметом исследования являются процессы переноса и рассеяния носителей заряда в этих структурах, их электрофизические свойства и электрические характеристики.

Научная новизна

Научная новизна результатов диссертационной работы заключается в следующих достижениях:

– развита теория рассеяния носителей заряда на шероховатостях поверхности, ионизированной примеси и фононах в полупроводниковых квантовых проволоках с учетом квантово-размерных и вторичных квантовых эффектов;

– развита теория рассеяния электронов на фононах в металлических одностенных углеродных нанотрубках с учетом квантово-размерных эффектов;

– разработана физико-математическая модель переноса носителей заряда в полупроводниковых квантовых проволоках, учитывающая квантово-размерные и вторичные квантовые эффекты;

– разработана физико-математическая модель переноса электронов и фононов в металлических одностенных углеродных нанотрубках, учитывающая квантово-размерные эффекты;

– разработаны учитывающие квантово-размерные и вторичные квантовые эффекты численные модели переноса носителей заряда в баллистических полевых транзисторах с барьерами Шоттки в проводящих каналах на основе полупроводниковых квантовых проволок и металлических одностенных углеродных нанотрубок.

Положения, выносимые на защиту

1. Метод расчета интенсивности рассеяния носителей заряда на шероховатостях поверхности полупроводниковой квантовой проволоки, основанный на трансляционной инвариантности соответствующего матричного элемента рассеяния и теореме о свертке, отличающийся от известных использованием реального двумерного возмущающего потенциала вместо его одномерных приближений, а также учетом межподзонных квантовых переходов носителей заряда наряду с их внутриподзонными переходами, и позволяющий осуществлять расчет зависимости интенсивности рассеяния носителей заряда от их энергии с использованием топологических параметров шероховатостей, а не вводимых подгоночных параметров для их приближенного описания.

2. Метод учета влияния вторичных квантовых эффектов, включающих столкновительное уширение и смещение уровней энергии носителей заряда, на процессы их переноса в полупроводниковых квантовых проволоках, отличающийся от известных использованием приближения стабильных квантовых состояний при фиксированной величине уширения уровней энергии частиц по максимальному значению ее неопределенности, позволяющий повысить адекватность моделирования этих процессов в рамках формализма кинетического уравнения Больцмана и, в частности, установить, что для арсенид-галлиевой квантовой проволоки сечением 1×1 нм^2 при температуре 400 К оценка верхней границы относительной погрешности расчета интенсивности рассеяния электронов на размерно-ограниченных модах полярных оптических фононов относительно соответствующих значений, рассчитанных в рамках формализма уравнения Лиувилля – фон Неймана с использованием приближения затухающих квантовых состояний, не превышает 7% и уменьшается со снижением температуры проволоки и увеличением площади ее поперечного сечения, не опускаясь ниже 5%.

3. Физико-математическая модель переноса носителей заряда в полупроводниковых квантовых проволоках, основанная на численном решении кинетического уравнения Больцмана, учитывающая все доминирующие механизмы рассеяния заряженных частиц, непараболичность зонной структуры полупроводников и вторичные квантовые эффекты, позволившая повысить адекватность моделирования процессов переноса носителей заряда в полупроводниковых квантовых проволоках и, в частности, теоретически установить, что в нелегированных арсенид-галлиевых квантовых проволоках с гладкими гетерограницами и с площадью поперечного сечения около 20×20 нм^2 низкополевая подвижность электронов при комнатных температурах достигает максимума и превышает их подвижность в объемном полупроводнике в 2.3 раза.

4. Принцип управления дрейфовой скоростью носителей заряда в полупроводниковых квантовых проволоках с пространственно-неоднородной поверхностью, основанный на эффекте изменения интенсивности рассеяния частиц на шероховатостях границ проволок при варьировании напряженности внешнего поперечного электрического поля, позволивший предложить конструкцию четырехэлектродного электронного удвоителя частоты нового типа.

5. Физико-математическая модель переноса электронов и фононов в металлических одностенных углеродных нанотрубках типа «armchair», основанная на численном решении системы кинетических уравнений Больцмана для электронов и фононов, отличающаяся от известных рассмотрением полной электронной и фононной зонных структур нанотрубок, учетом всех значимых фононных мод нанотрубок в приближении «вмороженных» в кристаллическую решетку графена фононов, а также процессов фононного рассеяния электронов с перебросом, позволившая повысить адекватность моделирования электрофизических свойств таких нанотрубок и теоретически установить то, что в областях их температур ниже 200 и выше 2500 К низкополевое погонное сопротивление нанотрубок прямо пропорционально их температуре и обратно пропорционально их диаметру.

6. Метод расчета оптимального пространственного изменения доли Al в составе $Al_XGa_{1-X}As$ вдоль одномерного цилиндрического канала полевого транзистора на основе арсенида галлия с барьером Шоттки в его проводящем канале, обеспечивающего полное снятие квантового барьера для электронов положительным затворным напряжением, позволивший установить оптимальные значения физико-топологических параметров транзистора, при которых и величина проводимости его канала, и величина обратной подпороговой крутизны его ВАХ минимально отличны приблизительно на 6% от своих предельных теоретических значений при 300 К.

Личный вклад соискателя ученой степени

Все основные научные результаты и выводы, изложенные в диссертации, включая выносимые на защиту положения, получены лично соискателем. Вклад научного консультанта, д.ф.-м.н., профессора Борздова В.М. заключается в определении направлений исследований, обсуждении полученных результатов, сделанных выводов и сформулированных положений. Вклад в совместные исследования, посвященные, в том числе, расчету электрофизических параметров и электрических характеристик GaAs квантовых проволок и приборных структур на их основе, к.ф.-м.н., доцента Жевняка О.Г., к.ф.-м.н. Борздова А.В. и к.ф.-м.н. Галенчика В.О. состоит: в реализации программных средств для моделирования методом Монте-Карло электрофизических свойств таких проволок и структур на основе разработанных соискателем физико-математических моделей и алгоритмов; в проведении вычислительных экспериментов; в обсуждении как промежуточных, так и конечных результатов этих экспериментов. Их вклад в совместные научно-исследовательские работы по другим темам, равно как и вклад д.ф.-м.н., профессора, академика НАН Беларуси Комарова Ф.Ф., д.т.н., профессора, академика НАН Беларуси Лабунова В.А., д.т.н., профессора, академика РАН Орликовского А.А., к.ф.-м.н. Вьюркова В.В., к.ф.-м.н. Сперанского Д.С., а также вклад всех остальных соавторов коллективных работ в основном связан с обсуждением полученных соискателем результатов. В диссертацию вошли лишь те из них, в которые личный вклад ее автора является определяющим.

Апробация результатов диссертации и информация об использовании ее результатов

Результаты диссертационной работы были представлены на следующих 26 научных конференциях, симпозиумах и ассамблеях: 49-й Международный симпозиум «The International Symposium on Optical Science and Technology» (Denver, 2004); Международные конференции «Nanomeeting» (Минск, 2005, 2007); Международные конференции «Микро- и наноэлектроника» (Звенигород, 2005, 2007, 2009, 2012, 2023; Ярославль, 2025); 4-я и 6-я Международные конференции «New Electrical and Electronic Technologies and their Industrial Implementation» (Zakopane, 2005, 2009); IV Международный симпозиум «Fullerenes and Fullerene-like Structures in Condensed Matter» (Минск, 2006); Международный симпозиум «SPIE Optics & Photonics» (San Diego, 2006); VI Международная конференция по квантовой электронике (Минск, 2006); 16–20-я и 23-я Международные Крымские конференции «Microwave & Telecommunication Technology» (Севастополь, 2006, 2007, 2008, 2009, 2010, 2013); II Всероссийская конференция по наноматериалам «НАНО 2007» (Новосибирск, 2007); Харьковская нанотехнологическая ассамблея (Харьков,

2008); III Международная научная конференция «Материалы и структуры современной электроники» (Минск, 2008); Первая международная научная конференция «Наноструктурные материалы – 2008: Беларусь – Россия – Украина (НАНО–2008)» (Минск, 2008); XIII Международная научная конференция «Фуллерены и наноструктуры в конденсированных средах» (Минск, 2023); XV Международная научно-техническая конференция «Квантовая электроника» (Минск, 2025).

Ряд полученных при выполнении диссертационной работы результатов внедрен в образовательный процесс кафедры физической электроники и нанотехнологий факультета радиофизики и компьютерных технологий БГУ (4 акта о внедрении результатов НИР в образовательный процесс и 2 свидетельства о добровольной регистрации и депонировании объектов авторского права в виде компьютерных программ).

Опубликованность результатов диссертации

По теме диссертации опубликованы 53 печатные работы, в числе которых 1 монография общим объемом 10.1 авторского листа, 21 статья в научных изданиях, включенных в перечень изданий, и в иностранных научных изданиях в соответствии с п. 19 Положения о присуждении ученых степеней и присвоении ученых званий, общим объемом 17.0 авторского листа, 3 статьи в других научных изданиях, 20 статей в сборниках материалов научных конференций и 8 тезисов докладов на научных конференциях.

Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из введения, общей характеристики работы, пяти глав с выводами по каждой главе, заключения, списка использованных источников и приложения. Общий объем диссертации составляет 189 страниц и содержит 53 рисунка на 50 страницах, 1 таблицу на 1 странице, список использованных источников из 321 наименования на 25 страницах, включающий библиографический список из 268 наименований и список публикаций соискателя ученой степени из 53 наименований, 1 приложение на 11 страницах.

ОСНОВНАЯ ЧАСТЬ

В первой главе даны основные выкладки, необходимые для разработки физико-математических моделей, описывающих процессы переноса носителей заряда в полупроводниковых приборных структурах с одномерным электронным газом. Приведены уравнение Пуассона и стационарное уравнение Шредингера, учитывающее непараболичность зонной структуры полупроводника и описывающее баллистический перенос частиц. Показано, что при кусочно-постоянном потенциале вдоль проводника с одномерным электронным

газом, последнее может быть решено строго методом передаточных матриц. Приведено кинетическое уравнение Больцмана, описывающее диффузионный перенос частиц. Также представлены выражения, с помощью которых при известной функции распределения носителей заряда можно рассчитать их линейную концентрацию, дрейфовую скорость и силу электрического тока, протекающего в одномерных проводящих каналах. Приведены уравнения движения и дисперсионные соотношения для носителей заряда в таких каналах.

В рамках теории возмущений сделаны необходимые выкладки применительно к вычислению интенсивности рассеяния носителей заряда в приборных структурах с одномерным электронным газом. В этих же рамках сформулирован подход к учету влияния на интенсивность рассеяния носителей заряда таких вторичных квантовых эффектов, как столкновительное уширение и смещение уровней (неопределенность) энергии частиц из-за затухания их квантовых состояний, обусловленного конечностью времени их свободного пробега.

Сформулированы основные процедуры моделирования процессов переноса носителей заряда методом Монте-Карло. Этот метод, в основе которого лежит вычислительная процедура расчета изменения во времени t энергии подзоны E_{nl} (n и l – квантовые числа), кинетической энергии E, волнового вектора k и координаты x каждой частицы моделируемого ансамбля при ее движении в пространстве импульсов и координат совместно со статистическим накоплением этих параметров, является одним из наиболее перспективных подходов к моделированию приборных структур наноэлектроники с одномерным электронным газом. Подробно описаны как сам алгоритм, так и его составляющие: модуль розыгрыша времени свободного пробега частицы, модуль моделирования ее свободного пробега и модуль определения ее состояния после рассеяния.

Вторая глава посвящена анализу доминирующих механизмов рассеяния носителей заряда в приборных структурах с одномерным электронным газом, оценке величин интенсивностей их рассеяния при тех или иных значениях расчетных параметров, а также исследованию условий применимости различных приближений, широко используемых для уменьшения вычислительной сложности алгоритмов расчета зависимостей интенсивностей рассеяния частиц от их кинетической энергии.

Рассмотрены основные аспекты взаимодействия одномерных носителей заряда с полярными и неполярными оптическими и акустическими фононами. Представлены все необходимые соотношения в общем виде, позволяющие рассчитывать интенсивности рассеяния носителей заряда на фононах различного типа. Для акустических фононов исследованы пределы применимости таких широко используемых приближений, как приближение упругого рассеяния заряженных частиц и приближение равнораспределения их рассеяния по

процессам испускания и поглощения фононов (далее для краткости «упругого рассеяния и равнораспределения»). Установлено, что оценка влияния рассеяния электронов на акустических фононах на электрофизические свойства полупроводниковых квантовых проволок для кремния будет адекватной лишь с привлечением более строгой теории рассеяния, в то время как для арсенида галлия она будет оставаться вполне адекватной и в рамках приближений упругого рассеяния и равнораспределения.

На примере GaAs также исследована применимость тех или иных приближений, используемых для расчета интенсивностей рассеяния электронов на полярных акустических и оптических фононах. Показано, что использование приближений упругого рассеяния и равнораспределения не приводит к потере адекватности в описании взаимодействия электронов с полярными акустическими фононами в арсенид-галлиевых квантовых проволоках. При этом в отличие от акустических фононов, основной вклад в интенсивность рассеяния электронов на полярных акустических фононах вносят поперечные колебания кристаллической решетки полупроводника, а не продольные. Установлено, что пренебрежение интерфейсными модами полярных оптических фононов ведет к существенной недооценке интенсивности рассеяния носителей заряда. Более того, в GaAs квантовых проволоках с малой площадью поперечного сечения $S < 100$ нм^2 рассеяние носителей заряда на интерфейсных модах полярных оптических фононов доминирует над их рассеянием на размерно-ограниченных модах. В случае неограниченного увеличения поперечного сечения арсенид-галлиевой квантовой проволоки вклад интерфейсных фононных мод в суммарную интенсивность рассеяния электронов на полярных оптических фононах становится исчезающе малым и стремиться к нулю.

Помимо неполярных акустических, полярных акустических и оптических фононов рассмотрены неполярные оптические и междолинные фононы. Приведены выражения, необходимые для расчета интенсивности рассеяния на них носителей заряда. На примере кремниевой квантовой проволоки сечением 5×5 нм^2 и температурой 300 К рассчитаны зависимости интенсивности рассеяния электронов на междолинных фононах g-типа от кинетической энергии носителей заряда, находящихся в основном квантовом состоянии.

Для всех фононных механизмов проверена осуществимость предельного перехода между зависимостью интенсивности рассеяния частиц от их энергии в одномерном электронном газе, находящемся в полупроводниковой квантовой проволоке с неограниченными поперечными размерами, и соответствующей зависимостью, характерной для объемного полупроводника.

Рассмотрена теория рассеяния электронов на ионизированной примеси в полупроводниковых квантовых проволоках. Развит математический аппарат

применительно к расчету зависимостей интенсивности внутриподзонного рассеяния электронов фоновыми примесными ионами при их низкой линейной концентрации N_L в этих проволоках ($N_L << S^{-1/2}$). Приведены соответствующие формулы для расчета матричного элемента рассеяния в различных приближениях. Показано, что в отличие от широко используемого приближения для квадрата волновой функции в поперечном сечении квантовой проволоки в виде δ-функции Дирака, расчет матричного элемента рассеяния в приближении постоянной плотности электронов по сечению квантовой проволоки наряду с квантово-механическим приближением парных столкновений обеспечивает, во-первых, отсутствие расходимости матричного элемента рассеяния «вперед», а также «назад» при устремлении кинетической энергии частиц E к нулю, и, во-вторых, совпадение асимптотик для его квадрата при $E \to 0$ и $E \to \infty$ с соответствующими асимптотиками для квадрата матричного элемента рассеяния носителей заряда либо «вперед», либо «назад» на примесных ионах в объемном полупроводнике.

Исследована зависимость интенсивности рассеяния носителей заряда на пространственно-неоднородных границах полупроводниковых квантовых проволок – шероховатостях их поверхности. При этом был рассмотрен двумерный возмущающий потенциал для шероховатостей, а не широко используемые его одномерные приближения, и получены выражения для расчета матричного элемента рассеяния частиц на шероховатостях поверхности проволок в зависимости от их поперечных размеров и параметров шероховатостей для характеризующей их пространственное распределение экспоненциальной автокорреляционной функции. В частности, рассеяние заряженных частиц на верхней границе квантовой проволоки (индекс 1z на рисунке 1) описывается следующим матричным элементом:

$$\left|M_{nl}^{n'l'}(k,k')\right|^2 = \frac{\Delta_{2\mathrm{D},1z}^2 \Lambda_{1z}^2 \delta_{ll'}}{L_x L_y} \left|\frac{\partial E_{nl}}{\partial L_z}\right|_{z=L_z}^2 \int_0^\infty \frac{(4nn')^2 \pi^4 \zeta^2 \left(1-(-1)^{n+n'}\cos(\zeta)\right)}{\left(\zeta^4 - 2[n^2+(n')^2]\pi^2\zeta^2 + [n^2-(n')^2]^2\pi^4\right)^2} \times$$

$$\times \left(1 + \Lambda_{1z}^2 (k-k')^2 + \Lambda_{1z}^2 L_y^{-2} \zeta^2\right)^{-3/2} d\zeta\,, \qquad (1)$$

где штрихом обозначено конечное состояние частицы после рассеяния, Δ – среднеквадратическая высота шероховатостей; Λ – их корреляционная длина; L_x, L_y и L_z – поперечные размеры проволоки; $\delta_{ll'}$ – символ Кронекера. Здесь и во всех последующих формулах размерности физических величин соответствуют международной системе единиц (СИ).

На рисунке 2 для примера представлены результаты расчета суммарной интенсивности рассеяния электронов на четырех шероховатых границах GaAs

квантовой проволоки сечением $10\times10\,\text{нм}^2$ при одинаковой для всех границ проволоки среднеквадратической высоте шероховатостей, соответствующей трем атомным слоям полупроводника ($\Delta = 0.85$ нм). Корреляционная длина шероховатостей также одинакова для всех границ и отвечает середине диапазона измеряемых значений для квантовых слоев с двумерным электронным газом ($\Lambda = 8.9$ нм). На данном рисунке сплошная кривая отвечает расчету с использованием равенства (1), штриховая кривая отвечает расчету с использованием равенства (1) при $L_y \to \infty$ или $L_z \to \infty$, пунктирная кривая – расчет согласно предложенному в статье [13–А] приближению.

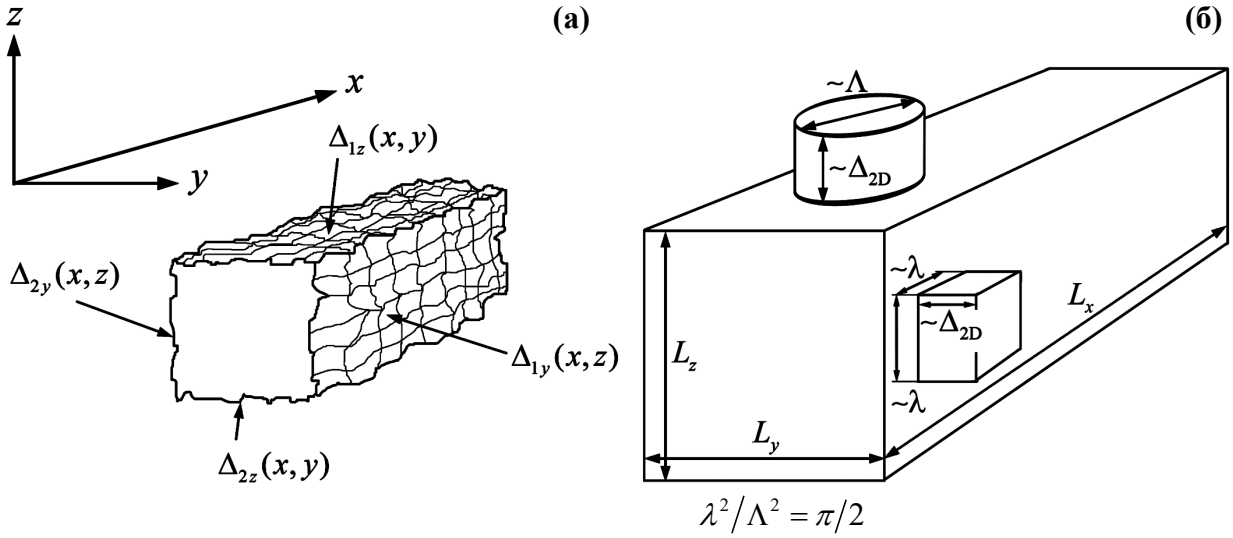


Рисунок 1 – Полупроводниковая квантовая проволока с шероховатой поверхностью в виде четырех границ (а) и условная геометрия ее шероховатостей (б)

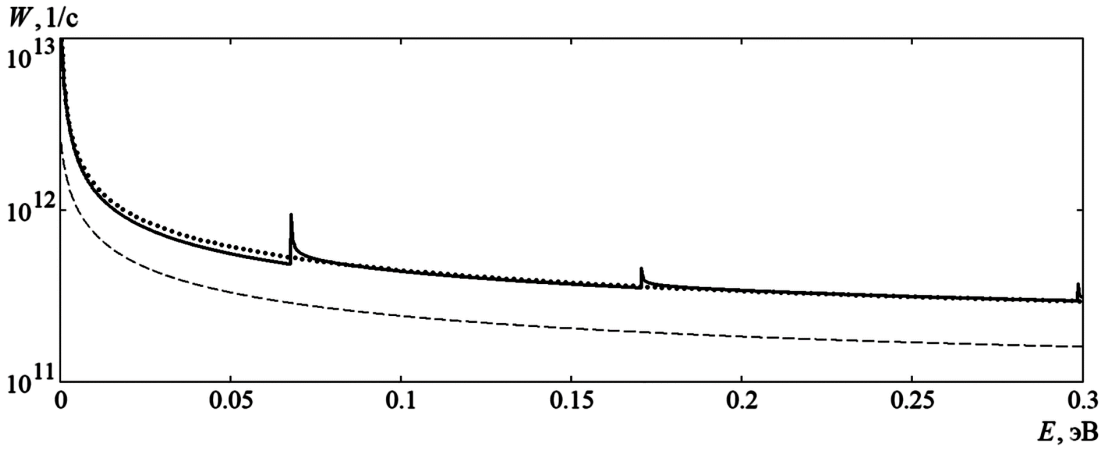


Рисунок 2 – Зависимость интенсивности рассеяния электронов на шероховатостях поверхности GaAs квантовой проволоки от кинетической энергии частиц

Показано, что как и для фононных механизмов рассеяния носителей заряда в полупроводниковых квантовых проволоках, при рассмотрении двумерного возмущающего потенциала для шероховатостей их поверхности имеет место предельный переход между зависимостями интенсивностей рассеяния частиц от их энергии в проволоках предельно большой высоты ($L_z \to \infty$) или

ширины ($L_y \to \infty$) и в неограниченных по двум направлениям квантовых слоях соответствующей толщины (L_y или L_z; переход от сплошной к штриховой кривой на рисунке 2). Для широко используемых одномерных приближений двумерного возмущающего потенциала шероховатостей такой предельный переход не наблюдается.

Наряду с развитием теории рассеяния носителей заряда в одномерных системах с затухающими квантовыми состояниями и выводом соответствующих формул, описывающих процессы рассеяния носителей заряда в полупроводниковых квантовых проволоках с одномерным электронным газом и непараболической зонной структурой,

$$W_i^{\mathrm{f/b}} \approx \frac{L_x}{\hbar^2}\left|M_i^{\mathrm{f/b}}\left(\sqrt{(p \mp p')^2 + 4m^*(\Gamma + \Gamma')}\right)\right|^2 \frac{1 - f(p')}{u(E', \Gamma + \Gamma')}, \tag{2}$$

$$p(E) = \hbar k(E) = \int_0^E u^{-1}(\zeta, \Delta E(\zeta))d\zeta, \tag{3}$$

$$u\left(E, \Delta E\right) = \frac{\sqrt{2(\gamma + \alpha E)(E^2 + \Delta E^2)/m^*}\left((E^2 + \Delta E^2)^{1/2} + \Delta E\right)^{3/2}}{(\gamma + 2\alpha E)E^2 + (2\gamma + 3\alpha E)\left((E^2 + \Delta E^2)^{1/2} + \Delta E\right)\Delta E}, \tag{4}$$

$$2\Gamma(E)/\hbar = \sum_{i,\mathrm{f,b}} W_i^{\mathrm{f/b}}(E), \tag{5}$$

$$\gamma = 1 + 2\alpha E_{nl}, \tag{6}$$

где W – интенсивность внутриподзонного внутридолинного рассеяния частиц «вперед/назад» («f/b») по i-тому механизму, $\hbar$ – постоянная Планка, m^* – эффективная масса носителей заряда в полупроводнике, α – параметр непараболичности его зонной структуры, Γ – полуширина Лоренцевской спектральной функции для уширенного уровня энергии носителей заряда в квантовой проволоке с затухающими квантовыми состояниями, f – функция распределения носителей заряда по импульсу p (волновому вектору k), получены выражения

$$\frac{p^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = (\gamma + \alpha E)\left(\sqrt{E^2 + \Gamma_0^2} - \Gamma_0\right) = \frac{(\gamma + \alpha E)E^2}{\Gamma_0 + \sqrt{E^2 + \Gamma_0^2}}, \tag{7}$$

$$E^2 = p^2\left(2(\gamma + \alpha E)m^*\right)^{-1}\left(p^2\left(2(\gamma + \alpha E)m^*\right)^{-1} + 2\Gamma_0\right), \tag{8}$$

$$v(E) = u(E, \Gamma_0), \tag{9}$$

$$\Gamma_0 = \mathrm{const} = \max_{E \in [0, +\infty)}\left(\Gamma(E)\right), \tag{10}$$

в приближении стабильных квантовых состояний, связывающие между собой групповую скорость частицы v, ее импульс p и кинетическую энергию E внутри заданной подзоны (n, l) в заданной долине полупроводника. Данные

выражения позволяют аналитически учесть такие вторичные квантовые эффекты, как столкновительное уширение Γ и смещение Δ ($\Delta = -\Gamma_0$) уровней энергии носителей заряда при моделировании их свободного пробега и рассеяния в полупроводниковых квантовых проволоках либо методами прямого численного решения кинетического уравнения Больцмана, либо методом Монте-Карло с сохранением вычислительной сложности соответствующих моделей. При этом, в отличие от прочих подходов по искусственному ограничению зависимостей интенсивностей рассеяния носителей заряда от их энергии теми или иными фиксированными конечными значениями, в рамках предложенного метода не возникает несоответствия между функцией Ферми-Дирака и рассчитываемой функцией распределения частиц по их энергии для термодинамически равновесного одномерного электронного газа в квантовой проволоке, к которой не приложено внешнее продольное электрическое поле.

Для примера на рисунке 3 представлены результаты расчета интенсивностей внутриподзонного рассеяния невырожденных электронов, находящихся в основном квантовом состоянии в GaAs квантовой проволоке сечением 10×10 нм^2 при комнатной температуре ($T = 300$ К), на основной размерно-ограниченной моде полярных оптических фононов. На этом рисунке штриховая кривая отвечает расчету согласно золотому правилу Ферми, сплошная серая кривая отвечает расчету по формулам (2) – (6) в приближении затухающих начальных и конечных квантовых состояний, пунктирная кривая – расчет согласно [10–А] в приближении эффективного затухания начальных квантовых состояний, приведенного к затуханию начальных и конечных квантовых состояний, сплошная черная кривая – расчет по формулам (2), (4) – (10) в приближении стабильных квантовых состояний ($\Gamma + \Gamma' = \Gamma_0$).

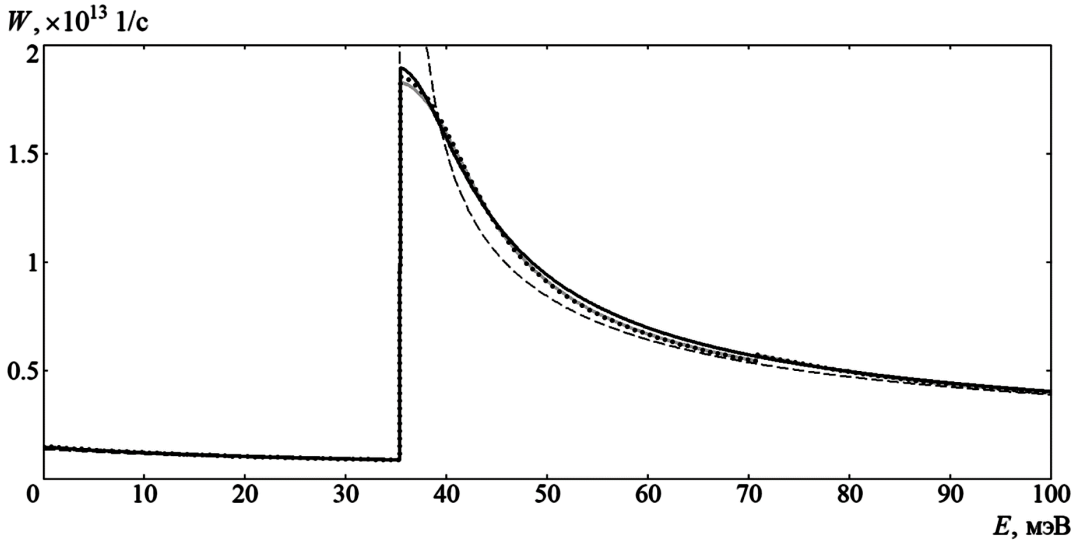


Рисунок 3 – Зависимость суммарной интенсивности внутриподзонного рассеяния невырожденных электронов на полярных оптических фононах в GaAs квантовой проволоке от кинетической энергии носителей заряда

Как следует из полученных теоретических результатов, зависимости интенсивностей рассеяния электронов от их кинетической энергии в двух различных приближениях затухающих квантовых состояний практически совпадают друг с другом. Результаты расчета в предложенном в статье [19–A] приближении стабильных квантовых состояний хорошо согласуются с результатами расчетов согласно более строгим теориям.

Рассчитана электронная зонная структура металлических одностенных углеродных нанотрубок типа «armchair» (A-нанотрубок) в рамках подхода «скрутки электронной зонной структуры» графена, рассчитанной, в свою очередь, в приближении сильной связи атомов углерода. Рассчитана фононная зонная структура A-нанотрубок в рамках подхода «скрутки фононной зонной структуры» графена, полученной, в свою очередь, из первых принципов. Учтены все доминирующие фононные механизмы рассеяния электронов в основных 1-й и 2-й подзонах A-нанотрубок: продольные акустические (LA), продольные оптические (LO), тангенциальные поперечные акустические (TA) и тангенциальные поперечные оптические (TO) фононы. Для учета не только нормальных процессов рассеяния носителей заряда на фононах, но и электрон–фононного рассеяния с перебросом, рассматривалась модифицированная зона Бриллюэна для фононов в A-нанотрубках.

Из полученных Ганликке, Лоулером и Уайтом выражений для расчета интенсивности рассеяния электронов в графене в приближении «вмороженных» в его кристаллическую решетку фононах, основанном на квантово-механических расчетах из первых принципов с использованием приближения линейного возмущения гамильтониана сильной связи по смещениям атомов углерода из положения равновесия, были выведены формулы для расчета интенсивности рассеяния электронов на фононах, «вмороженных» в кристаллическую решетку (N, N) A-нанотрубки:

$$W_{\xi}^{\mathrm{e/a}}(k)=\frac{J_0 w_N}{\hbar\omega_{\xi}^{\mathrm{e/a}}}\left(n_{\xi}(q_{\xi}^{\mathrm{e/a}})+\frac{1}{2}\pm\frac{1}{2}\right)F\left(\frac{a(k_{\xi}^{\mathrm{e/a}}-k)}{4},\frac{a(k_{\xi}^{\mathrm{e/a}}+k)}{4}\right)\left|\csc\left(\frac{ak_{\xi}^{\mathrm{e/a}}}{2}\right)\right|, \quad (11)$$

$$w_N=\frac{1}{N}\frac{\hbar q_0^2}{2m_{\mathrm{C}}}, \quad (12)$$

$$k_{\xi}^{\mathrm{e/a}}=k+q_{\xi}^{\mathrm{e/a}}, \quad (13)$$

$$E_{1,2}(k_{\xi}^{\mathrm{e/a}})=E_{1,2}(k)\mp\hbar\omega_{\xi}^{\mathrm{e/a}}(q_{\xi}^{\mathrm{e/a}}), \quad (14)$$

где $\xi = \{$«LA», «LO», «TA», «TO»$\}$; F – интеграл перекрытия волновых функций; $J_0 = 4.326\cdot10^{-19}$ Дж – постоянная π-связи атомов углерода в графене; ω и q – соответственно циклическая частота и волновой вектор фононов; n – их функция распределения; m_{C} – масса атома углерода; $a = 0.246$ нм – постоянная

решетки графена; $q_0 = 21.6\,\text{нм}^{-1}$ – ее деформационная постоянная; N – индекс хиральности А-нанотрубки; индексы 1 и 2 отвечают ее 1-й и 2-й подзоне; индексами «е» и «а» обозначено рассеяние электронов соответственно с испусканием и поглощением фононов. Рассеяние электронов на LA- и TO-фононах является внутриподзонным (подзона 1 ↔ подзона 1; подзона 2 ↔ подзона 2), а на TA- и LO-фононах – межподзонным (подзона 1 ↔ подзона 2).

Показано, что для всех фононных механизмов рассеяния электронов в А-нанотрубках доминирует их рассеяние «назад». При этом рассеяние электронов «назад» на LA-, LO- и TO-фононах – сильно неупругое. А их рассеяние «назад» на TA-фононах является почти упругим. В связи с этим для такого механизма рассеяния могут быть использованы приближения упругого рассеяния и равнораспределения как при моделировании процессов рассеяния носителей заряда, так и при расчете интенсивностей этих процессов.

Третья глава посвящена расчету электрофизических параметров длинных арсенид-галлиевых квантовых проволок прямоугольного поперечного сечения при различных значениях их геометрических параметров, а также физических параметров, характеризующих состояние, в котором в них находится одномерный электронный газ в условиях электрического квантового предела во внешнем пространственно однородном электрическом поле. Расчеты выполнялись как методом прямого численного решения кинетического уравнения Больцмана для электронов

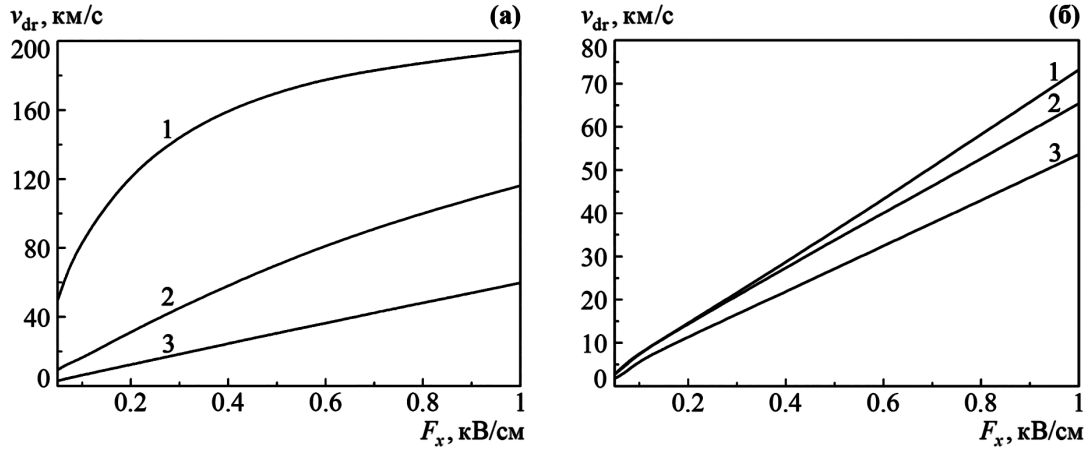
$$\frac{\partial f(k)}{\partial t} - \frac{e}{\hbar} F_x(t) \frac{\partial f(k)}{\partial k} = \\ = \sum_{k'} \left[W(k',k) f(k') \left(1 - f(k)\right) - W(k,k') f(k) \left(1 - f(k')\right) \right], \qquad (15)$$

где e – абсолютное значение электрического заряда электрона, F_x – значение напряженности тянущего продольного электрического поля в квантовой проволоке, в том случае, когда был необходим учет вырожденности электронного газа, так и методом Монте-Карло, когда такой необходимости не было. Учитывались все доминирующие механизмы рассеяния носителей заряда, характерные для интегральных приборных наноструктур на основе GaAs квантовых проволок внутри AlAs или Al_2O_3: шероховатости гетерограниц проволок, полярные оптические и акустические фононы. При проведении расчетов учитывалась непараболичность зонной структуры полупроводника и такие вторичные квантовые эффекты, как столкновительное уширение и смещение уровней энергии носителей заряда.

Установлено, что, как и в объемном арсениде галлия, подвижность электронов уменьшается с увеличением температуры. При этом она может быть в разы меньше по величине чем подвижность электронов в объемном GaAs

(около 0.85 $м^2В^{-1}с^{-1}$ при 300 К). Это объясняется тем, что, во-первых, в квантовых проволоках сильное влияние на кинетические процессы имеет поверхность (рассеяние на шероховатостях поверхности и поверхностных модах полярных оптических фононов). Во-вторых, при довольно малых значениях площади поперечного сечения такого рода структур время релаксации импульса электронов, обусловленное их рассеянием на акустических фононах, меньше чем соответствующее время релаксации их импульса в объемном GaAs.

На рисунке 4 приведены полученные методом Монте-Карло результаты расчета дрейфовой скорости электронов в нелегированных арсенид-галлиевых квантовых проволоках сечением 10×10 нм^2 при $\Lambda = 6$ нм.



кривые 1 – $\Delta = 0$, кривые 2 – $\Delta = 0.5$ нм, кривые 3 – $\Delta = 1$ нм

Рисунок 4 – Зависимости дрейфовой скорости электронов v_{dr} в GaAs квантовой проволоке от напряженности продольного электрического поля F_x при $T = 77$ К (а) и $T = 300$ К (б)

Установлено, что сильно шероховатые гетерограницы полупроводниковой квантовой проволоки достаточно малого сечения будут вносить основной вклад в релаксацию импульса носителей заряда при температурах 280–300 К. При температурах ниже 77 К неидеальная поверхность такой проволоки почти полностью определяет величину времени релаксации импульса частиц одномерного электронного газа.

Также установлено, что при температурах 280–300 К низкополевая ($F_x \to 0$) подвижность электронов в нелегированных GaAs квантовых проволоках сечением от 9×9 нм^2 до 10×10 нм^2 сравнима по величине с их подвижностью в объемном GaAs. При сечениях проволок менее 9×9 нм^2 квантово-размерные эффекты обуславливают снижение подвижности носителей заряда значительно ниже их подвижности в объемном GaAs. В диапазоне сечений проволок от 10×10 нм^2 до 20×20 нм^2 наблюдается наиболее высокая низкополевая подвижность электронов. В квантовых проволоках с гладкими гетерограницами и сечением около 20×20 нм^2 подвижность электронов достигает

максимума, превышая их подвижность в объемном GaAs почти в 2.3 раза. При дальнейшем увеличении сечения проволок ($> 20 \times 20$ нм^2) происходит постепенное уменьшение подвижности электронов вплоть до характерной для них подвижности в объемном GaAs за счет постепенного нарастания интенсивности межподзонных переходов частиц по различным фононным механизмам.

Теоретически изучено влияние степени вырождения электронного газа, непараболичности зонной структуры полупроводника и вторичных квантовых эффектов на переходные процессы в одномерном электронном газе, находящемся в условиях электрического квантового предела в длинных арсенид-галлиевых квантовых проволоках с различным поперечным сечением при различной температуре, после приложения к ним постоянного, импульсного или гармонического продольного электрического поля. Установлено, что временные зависимости дрейфовой скорости электронов в квантовых проволоках на основе GaAs соответствуют длинным проводникам, характеризующимся погонными сопротивлением и индуктивностью. В частности, соотношения между временными зависимостями напряженности электрического поля и дрейфовой скорости частиц отвечают типичным соотношениям между входным и выходным сигналами для интегрирующих RL-цепей.

На примере длинных нелегированных арсенид-галлиевых квантовых проволок прямоугольного поперечного сечения с шероховатыми границами теоретически исследовано влияние напряженности поперечного электрического поля F_z на подвижность и дрейфовую скорость электронов в таких проволоках. На рисунке 5 представлены результаты расчетов, полученные при $L_y = L_z = 10$ нм и $\Lambda = 6$ нм.

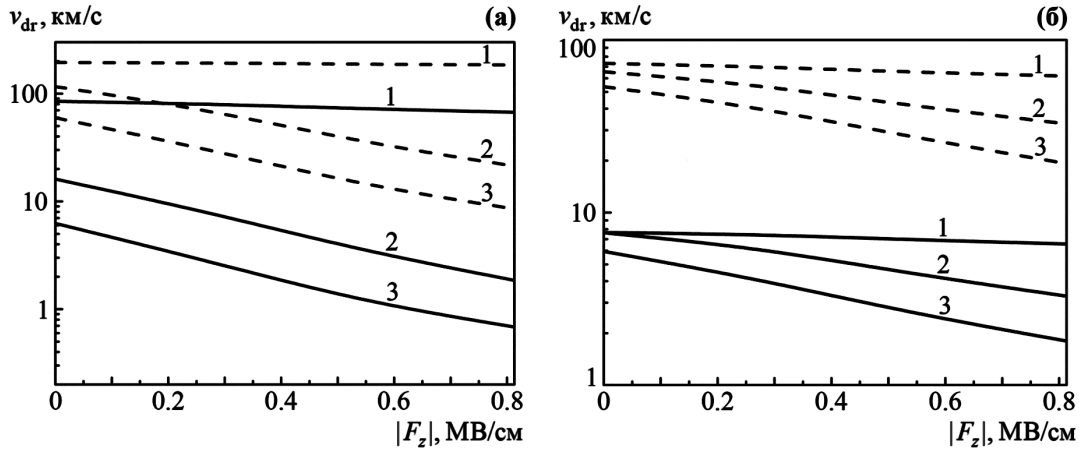


Рисунок 5 – Зависимости дрейфовой скорости электронов v_{dr} в GaAs квантовой проволоке от абсолютного значения напряженности поперечного электрического поля F_z при $T = 77$ К (а) и $T = 300$ К (б)

На рисунке 5 кривые 1, 2 и 3 отвечают соответственно $\Delta = 0$, 0.5 и 1 нм; сплошные и штриховые кривые отвечают соответственно $F_x = 0.1$ и 1 кВ/см. Как видно из рисунка при увеличении абсолютного значения напряженности

поперечного электрического поля наблюдается некоторое снижение подвижности и дрейфовой скорости электронов в GaAs квантовой проволоке с гладкими границами, вызванное в основном искажением волновых функций и, как следствие, увеличением интегралов их перекрытия, что и обусловливает увеличение интенсивности фононного рассеяния частиц. В случае шероховатых границ проволоки увеличение напряженности поперечного электрического поля ведет к значительному увеличению интенсивности рассеяния электронов на шероховатостях ее поверхности и, в итоге, к существенному уменьшению подвижности и дрейфовой скорости частиц.

Показано, что при одинаковых параметрах Δ и Λ для границ проволоки, перпендикулярных вектору напряженности поперечного электрического поля, рост интенсивности рассеяния носителей заряда на шероховатостях этих границ пропорционален квадрату напряженности поля. В результате, протекающий в проволоке электрический ток I определяется выражением

$$I(F_z) = I(0)\left(1 + C^2 F_z^2\right)^{-1} = I_0\left(1 + C^2 F_z^2\right)^{-1}, \qquad (16)$$

где C – практически постоянная величина при $L_y >> (L_z, \Lambda)$ с размерностью м/В. Если поперечное электрическое поле меняется по гармоническому закону с циклической частотой ω и амплитудой напряженности $F_0 \to 0$, то в квантовой проволоке доминирует гармоника тока на удвоенной частоте 2ω:

$$I\left(F_z(t)\right) = \frac{I_0}{1 + C^2 F_0^2 \sin^2(\omega t)} \overset{F_0 \to 0}{\approx} \left(1 - \frac{C^2 F_0^2}{2}\right) I_0 + \frac{C^2 F_0^2}{2} I_0 \cos(2\omega t). \qquad (17)$$

С учетом этого эффекта предложена конструкция четырехэлектродного электронного прибора на основе расположенной между двумя затворами шероховатой квантовой проволоки. Такой прибор в режиме слабого сигнала управления будет представлять собой удвоитель частоты, а в режиме очень сильного сигнала управления – удвоитель частоты с преобразованием гармонического сигнала в периодический сигнал в виде достаточно коротких импульсов. При этом управление дрейфовой скоростью электронов и, фактически, электрическим током в полупроводниковой квантовой проволоке или в полупроводниковом квантовом слое будет настолько энергоэффективным в квантово-механическом представлении, насколько это только возможно в силу абсолютно упругого характера рассеяния носителей заряда на шероховатых границах приборной структуры.

Четвертая глава посвящена расчету электрических характеристик длинных А-нанотрубок при различных значениях их диаметра, а также физических параметров, характеризующих состояние находящегося в них одномерного электронного газа в условиях электрического квантового предела во

внешнем пространственно однородном электрическом поле. При этом рассматривалось стандартное приближение идеального термоконтакта атомов А-нанотрубки с окружающими ее атомами изолятора, в частности, подложки. Расчеты выполнялись методом прямого численного решения системы кинетических уравнений Больцмана для электронов и фононов

$$\begin{cases} \dfrac{\partial f_{1,2}}{\partial t} = \dfrac{eF_x(t)}{\hbar}\dfrac{\partial f_{1,2}}{\partial k} - \mathrm{Sc}_f\left[f_{1,2}\right], \\ \dfrac{\partial n_{\mathrm{LA,LO,TO}}}{\partial t} = \dfrac{n^{(0)}_{\mathrm{LA,LO,TO}} - n_{\mathrm{LA,LO,TO}}}{\tau_{\mathrm{ph}}} - \mathrm{Sc}_n\left[n_{\mathrm{LA,LO,TO}}\right], \end{cases} \tag{18}$$

где Sc_f – оператор рассеяния электронов на фононах (определяется равенствами (11) – (14)); Sc_n – оператор генерации фононов электронами (может быть выражен через соотношения (11) – (14)); $n^{(0)} = \mathrm{const}$ – равновесная функция распределения фононов по их волновому вектору (функция Бозе–Эйнштейна); τ_{ph} – среднее время релаксации неравновесных фононов, которое в разработанной модели считалось константой и выступало в качестве подгоночного параметра модели; индексами 1 и 2, как и ранее, обозначены первая и вторая подзоны зонной структуры А-нанотрубок (совокупность ближайших к уровню Ферми подзон в валентной зоне и зоне проводимости). Идеальный термоконтакт атомов А-нанотрубки с атомами окружающего ее изолятора означает, что справедливы равенства $n_{\mathrm{TA}} = n^{(0)}_{\mathrm{TA}}$ и $n_{\mathrm{LA}}\left(|qa| << \pi\right) = n^{(0)}_{\mathrm{LA}}$. То есть, длинноволновые акустические фононы находятся в термодинамическом равновесии с фононным газом изолятора (термостата).

Подстановка в выражение

$$I(t) = \frac{eaJ_0}{\pi\hbar}\int\limits_{-\pi/a}^{+\pi/a}\left(f_1(k,t) - f_2(k,t)\right)\sin\left(ak/2\right)dk \tag{19}$$

найденных при решении системы (18) функций распределения электронов f_1 и f_2 позволяет рассчитать протекающий в А-нанотрубке электрический ток I.

Рассчитано низкополевое погонное сопротивление ρ А-нанотрубок различного диаметра. Установлено, что произведение низкополевого ($F_x \to 0$) погонного сопротивления А-нанотрубок на их диаметр (индекс хиральности N) не зависит ни от чего другого, кроме как от их температуры T. Это обусловливает возможность применения А-нанотрубок известной длины и диаметра в качестве миниатюрного резистивного датчика температуры. Причем, если А-нанотрубка будет защищена от окружающей среды каким-либо оксидом, например Al_2O_3, то с учетом явного вида установленной зависимости $\rho(T)$ и температур плавления металлов, применяемых в качестве контактов к А-

нанотрубкам (Ti, Pd, Pt), она может быть использована в качестве высокочувствительного резистивного датчика температуры (термистора) в диапазоне температур приблизительно от 250 до 1900 К.

На рисунке 6 изображены зависимости силы электрического тока, протекающего по длинным А-нанотрубкам, от напряженности продольного электрического поля при $T = 290$ К и $\tau_{ph} = 2.2$ пс. Эти зависимости рассчитывались по формуле (19) после численного решения системы уравнений (18) при нулевых левых частях уравнений. На данном рисунке черные маркеры отвечают усредненным экспериментальным данным для (N, N) А-нанотрубок различной длины и диаметром от ≈ 2 до ≈ 2.5 нм ($N = 13$–18), а границы диапазонов отвечают соответственно минимальным и максимальным измеренным значениям электрического тока, серые маркеры – экспериментальные данные для (13, 13) нанотрубок различной длины. Зависимости $I(F_x)$ хорошо согласуются с измеряемыми вольт-амперными характеристиками (ВАХ) достаточно длинных металлических одностенных углеродных нанотрубок ($L >> 100$ нм).

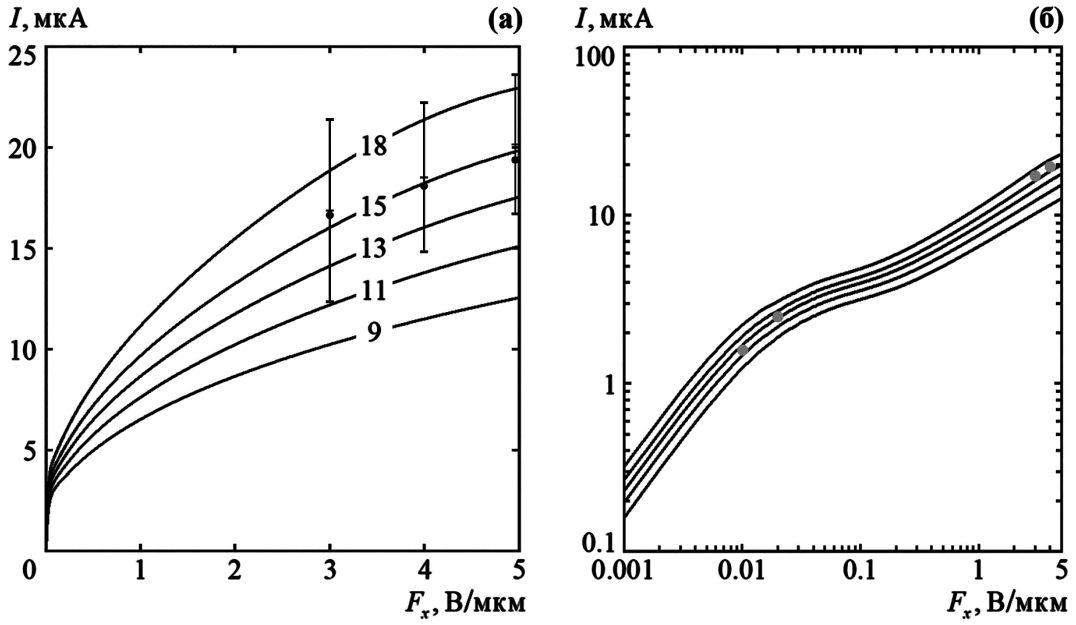


Рисунок 6 – Зависимости электрического тока I в (N, N) А-нанотрубках от напряженности продольного электрического поля F_x в линейном (а) и логарифмическом (б) масштабах ($N = 9, 11, 13, 15, 18$)

Кроме численного расчета электрического тока в длинных А-нанотрубках с помощью выражений (11) – (14), (18) и (19), также были проведены его оценки путем применения различных широко используемых аппроксимаций указанных выражений. Установлена степень влияния этих приближений на отклонение оценочных ВАХ от ВАХ, рассчитанных в рамках более строгой теории. Показано, что только в рамках расчетов по формулам (11) – (14), (18) и (19) для А-нанотрубок достигается согласование рассчитанных значений электрического тока, дифференциального погонного сопротивления, средней

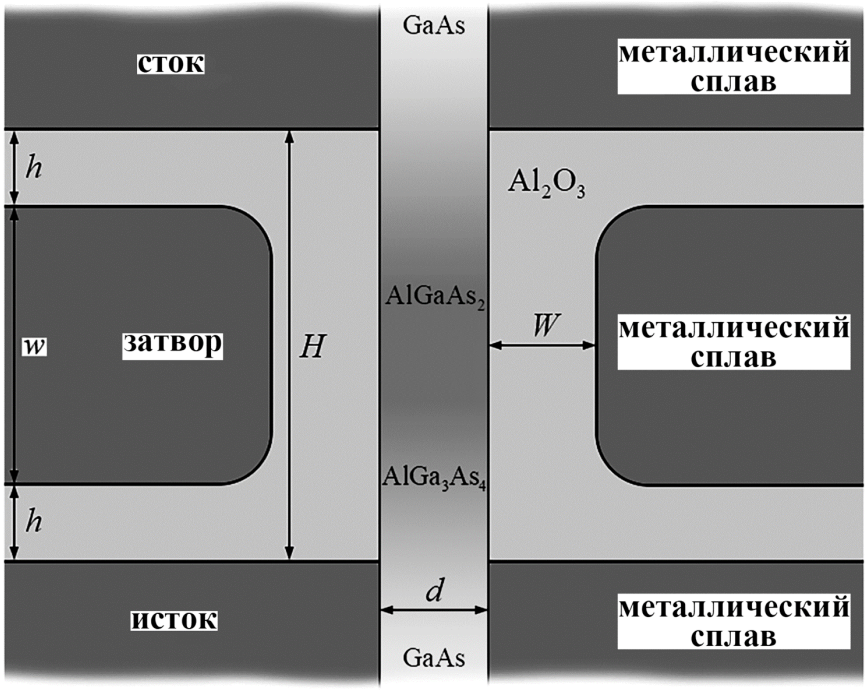
длины свободного пробега электронов, времени релаксации неравновесных фононов и напряженности поля термического разрушения нанотрубок протекающим по ним электрическим током с соответствующими значениями указанных параметров, рассчитанных из первых принципов и/или измеренных для углеродных нанотрубок и графена.

Теоретически изучены переходные процессы в одномерном электронном газе, находящемся в условиях электрического квантового предела в длинных A-нанотрубках различного диаметра при различных значениях времени релаксации в них неравновесных фононов и температуры подложки, после приложения к нанотрубкам постоянного, импульсного или гармонического продольного электрического поля. Установлено, что временные зависимости силы протекающего по A-нанотрубкам электрического тока соответствуют длинным проводникам, характеризующимся погонными сопротивлением и индуктивностью. Как и для полупроводниковых квантовых проволок, соотношения между временными зависимостями напряженности электрического поля и силы электрического тока отвечают типичным соотношениям между входным и выходным сигналами для интегрирующих RL-цепей.

В пятой главе рассмотрены интегральные квантово-барьерные баллистические полевые транзисторные ключи на основе проводников с одномерным электронным газом, в частности, транзисторы на основе $Al_X Ga_{1-X} As$ квантовых проволок и транзисторы на основе металлических одностенных углеродных нанотрубок типа «zigzag» (Z-нанотрубок) с барьерами Шоттки в их проводящих каналах. Оптимизированы конструктивно-топологические и физические параметры транзисторов с точки зрения практического достижения предельных величин тока насыщения, проводимости их канала, отношения токов в открытом и закрытом состояниях транзисторов, а также обратной подпороговой крутизны их ВАХ. Рассчитаны выходные и проходные ВАХ рассмотренных транзисторов при их оптимальных конструктивно-топологических параметрах. Расчеты проведены в рамках подхода Ландауэра–Буттикера с использованием метода передаточных матриц с учетом непараболичности зонных структур материалов одномерных проводящих каналов, вторичных квантовых эффектов, а также учетом с помощью метода Монте-Карло влияния на перенос носителей заряда их фононного рассеяния в этих каналах.

Предложено конструктивно-топологическое решение для нормально разомкнутого транзисторного ключа в виде вертикального квантово-барьерного баллистического полевого транзистора на основе цилиндрической полупроводниковой квантовой проволоки внутри цилиндрического металлического затвора (рисунок 7). Обоснован выбор конструктивных материалов транзистора. В рамках решения многокритериальной многопараметрической

задачи найдены, в том числе, оптимальные значения диаметра и длины проводящего канала транзистора.



d = 10 нм, H = 30 нм, w = 24 нм, h = W = 3 нм; металлический сплав – Sc_3Ti_2

Рисунок 7 – Сечение транзистора на основе $Al_XGa_{1-X}As$ квантовой проволоки с оптимальными размерами и стехиометрией в содержащей её ось плоскости

В рамках предложенного принципа достижения баллистического переноса носителей заряда в режиме как минимум одной плоской подзоны в транзисторе на основе полупроводниковой квантовой проволоки с пространственно изменяющейся стехиометрией и/или площадью поперечного сечения сформулирован критерий для определения оптимальной зависимости доли алюминия в соединении $Al_XGa_{1-X}As$ от координаты z ($z = 0$ соответствует началу проводящего канала транзистора на границе истока, а $z = H$ – его концу на границе стока). Найденный оптимальный профиль $X(z)$ для заданной величины затворного напряжения полного открытия транзистора V_{G0} = 0.4 В обеспечивает полное снятие потенциального барьера для электронов в его канале и максимальные значения вероятности их прохождения через канал в баллистическом режиме для всех значений кинетической энергии частиц: при нулевом напряжении на стоке ($V_D = 0$) обеспечивается режим плоской подзоны для основного квантового состояния электронов в Г-долине $Al_XGa_{1-X}As$ по всей длине проводящего канала транзистора.

Разработана физико-математическая модель переноса электронов в проводящем канале транзистора, основанная на численном решении уравнения Лапласа в цилиндрических координатах для электрического потенциала φ и численном расчете в рамках формализма Ландауэра–Буттикера величины протекающего в транзисторе электрического тока

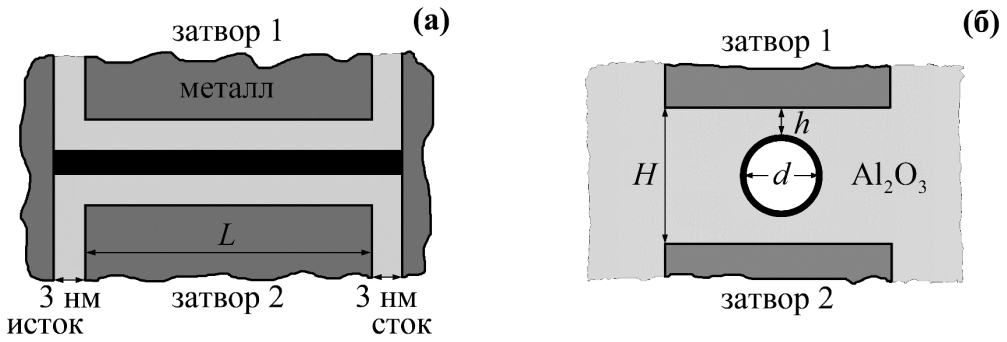
$$I = \frac{e}{\pi\hbar}\int_0^{\infty}\Big(f_{FD}\left(E,E_F\right)t_{sc}^{\mathrm{S}}(E) - f_{FD}\left(E,E_F - eV_{\mathrm{D}}\right)t_{sc}^{\mathrm{D}}(E)\Big)t_{ch}(E)dE\,, \qquad (20)$$

где f_{FD} – функция Ферми–Дирака; E – уровень кинетической энергии электрона в истоке; E_F – энергия Ферми относительно уровня энергии основного квантового состояния электронов в истоке; t_{ch} – вероятность когерентного прохождения электроном области между электродами проводящего канала транзистора; $t_{sc}^{\mathrm{S/D}}$ – вероятность переноса электрона без рассеяния через классически доступные области в канале со стороны истока (S) или стока (D).

В рамках разработанной модели обоснован расчет зависимости $t_{ch}(E)$ методом передаточных матриц и зависимости $\varphi(r,z)$ путем численного решения уравнения Лапласа, а не численного самосогласованного решения уравнений Шредингера и Пуассона. Разработанная модель позволяет учесть непараболичность зонной структуры материала проводящего канала транзистора, а также такие вторичные квантовые эффекты, как уширение и смещение уровней энергии носителей заряда в этом канале. Для расчета зависимости $t_{sc}(E)$ методом Монте-Карло моделировался перенос электронов в классически доступных для них областях проводящего канала транзистора с учетом как возможности их рассеяния на размерно-ограниченных модах полярных оптических и акустических фононов, так и возможности их обусловленного запретом Паули свободного пробега без рассеяния в классически доступных областях.

С помощью разработанной физико-математической модели рассчитаны выходные и проходные ВАХ квантово-барьерного полевого транзистора на основе $\mathrm{Al}_X\mathrm{Ga}_{1-X}\mathrm{As}$ квантовой проволоки цилиндрического сечения с оптимальными размерами и стехиометрией. Установлено, что для такого транзистора почти достигаются предельно возможные теоретические значения его электрофизических параметров по отношению к параметрам идеального электронного ключа. Согласно результатам моделирования максимум тока насыщения составляет около 89% от предельно возможного тока в его канале. Максимальная проводимость его канала превышает 89% от максимально возможного квантово-механического значения ($e^2\pi^{-1}\hbar^{-1}$) и превышает 94% от предельной величины для $\mathrm{Al}_X\mathrm{Ga}_{1-X}\mathrm{As}$ квантовой проволоки с меняющейся вдоль ее оси стехиометрией ($0.95\cdot e^2\pi^{-1}\hbar^{-1}$ при 300 К). Обратная подпороговая крутизна его проходных ВАХ не превышает 106% относительно минимально возможной классической теоретической величины (59.53 мВ/дек при 300 К). Отношение величины электрического тока, протекающего в открытом транзисторе I_{on} ($V_{\mathrm{G}} = V_{\mathrm{G0}}$), к величине тока в закрытом транзисторе I_{off} ($V_{\mathrm{G}} = 0$) – не хуже $2\cdot10^5$. При этом его топология и размеры не выходят за рамки возможностей современных технологий, используемых при производстве цифровых СБИС и УБИС.

Предложено конструктивно-топологическое решение для нормально замкнутого транзисторного ключа в виде квантово-барьерного баллистического полевого транзистора на основе Z-нанотрубки, находящейся в изоляторе между двумя металлическими затворами с плоскими поверхностями (рисунок 8). Обоснован выбор конструктивных материалов для транзистора. В рамках решения многокритериальной многопараметрической задачи найдены, в том числе, оптимальные значения диаметра и длины проводящего канала транзистора. Затворное управление протекающим по Z-нанотрубке током осуществляется за счет такого вторичного квантового эффекта, как деформация зонной структуры нанотрубки вплоть до появления в ней запрещенной зоны вследствие поляризации находящегося в нанотрубке одномерного электронного газа под действием электрического поля между затворами, характеризуемого разностью приложенных к затворам потенциалов ΔV_{G}.



L = 24 нм, d = 2.11 нм (N = 27), h = 2 нм, H = 6.11 нм; металл – сплав PdAg

Рисунок 8 – Поперечное сечение транзистора на основе Z-нанотрубки вдоль (а) и поперек (б) его проводящего канала

Разработана физико-математическая модель переноса носителей заряда в транзисторе, основанная на приближенном решении двумерного уравнения Лапласа и расчете в рамках формализма Ландауэра–Буттикера величины протекающего в проводящем канале транзистора электрического тока по формуле

$$I = \frac{4e}{\pi\hbar}\int_0^{\infty}\Big(f_{FD}\left(E, eV_{\mathrm{D}}/2\right)t_{sc}^{\mathrm{S}}(E) - f_{FD}\left(E, -eV_{\mathrm{D}}/2\right)t_{sc}^{\mathrm{D}}(E)\Big)t_{ch}(E)dE\,, \qquad (21)$$

учитывающей как вырождение по паре точек Дирака, так и амбиполярный дрейф электронов и дырок. В равенстве (21) энергия частиц E отсчитывается от середины запрещенной зоны Z-нанотрубки в точке, лежащей на одинаковом расстоянии от истока и стока.

В рамках разработанной модели зависимость $t_{ch}(E)$ рассчитывалась методом передаточных матриц, зависимость $t_{sc}(E)$ находилась с помощью метода Монте-Карло путем моделирования переноса носителей заряда в классически

доступных для них областях канала транзистора с учетом как их рассеяния на LA-, LO-, TA- и TO-фононах, так и учетом принципа запрета Паули.

Согласно разработанной модели рассчитаны выходные и проходные ВАХ квантово-барьерного полевого транзистора на основе Z-нанотрубки с оптимальными размерами. Установлено, что максимальная проводимость его канала превышает 99% от максимально возможной квантово-механической величины ($2e^2\pi^{-1}\hbar^{-1}$) при $T = 300$ К и $\Delta V_G = V_D = 0$. Однако, значения обратной подпороговой крутизны проходных ВАХ транзистора не превышают -0.44 В/дек при $T = 300$ К, а отношение I_{on}/I_{off} в его оптимальной рабочей точке по стоковому напряжению ($V_D = 0.15$ В) менее 2000. И это с учетом того, что эффект формирования запрещенной зоны в Z-нанотрубке оценивался сверху в соответствии с моделью Чжоу–Чэня–Чжун-цаня. Если бы он оценивался снизу согласно модели Ли–Роткина–Равайоли, то уже невозможно было бы получить хоть сколь-нибудь приемлемые отношения I_{on}/I_{off} и значения обратной подпороговой крутизны ВАХ, чтобы можно было говорить о транзисторе на основе Z-нанотрубки, как об эффективном электронном ключе при сравнении такого рода транзистора с полевыми транзисторами с одномерными полупроводниковыми каналами, находящимися внутри затворов в виде полых параллелепипедов или цилиндров.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Основные научные результаты диссертации

1. Предложен учитывающий межподзонные квантовые переходы носителей заряда метод расчета интенсивности их рассеяния на шероховатостях поверхности полупроводниковой квантовой проволоки, основанный на трансляционной инвариантности соответствующего матричного элемента рассеяния, теореме о свертке и использовании модельного двумерного возмущающего потенциала вместо его одномерных приближений. На примере GaAs квантовой проволоки проведены расчеты интенсивности рассеяния электронов на шероховатостях ее гетерограниц в ряде приближений. Показано, что в рамках предложенного метода расчета интенсивности рассеяния носителей заряда на шероховатостях имеет место предельный переход, когда при устремлении одного из поперечных размеров полупроводниковой квантовой проволоки к бесконечности зависимость интенсивности рассеяния электронов на шероховатостях ее гетерограниц от кинетической энергии частиц сходится к соответствующей зависимости для полупроводникового квантового слоя [1–А; 4–А; 5–А; 6–А; 9–А; 12–А; 13–А; 17–А; 20–А; 25–А; 29–А; 46–А; 51–А].

2. Предложен метод учета влияния таких вторичных квантовых эффектов, как столкновительное уширение и смещение уровней энергии носителей

заряда на процессы их переноса в полупроводниковых квантовых проволоках, использующий приближение стабильных квантовых состояний при фиксированной величине уширения уровней энергии частиц по максимальному значению ее неопределенности. Показано, что путем незначительного видоизменения известных соотношений, связывающих между собой импульс, волновой вектор, групповую скорость и кинетическую энергию носителей заряда, можно с достаточным уровнем точности аналитически учесть влияние столкновительного уширения на интенсивность их рассеяния в полупроводниковых квантовых проволоках. Это дает возможность разработки более строгих кинетических моделей переноса носителей заряда в приборных структурах с одномерным электронным газом на основе методов численного решения кинетического уравнения Больцмана и метода Монте-Карло, которые с точки зрения вычислительной сложности имеют близкую эффективность к широко используемым приближенным моделям, не учитывающим вторичные квантовые эффекты. На примере арсенид-галлиевых квантовых проволок рассчитана интенсивность рассеяния электронов на полярных оптических фононах с учетом вторичных квантовых эффектов и показано, что получаемые с помощью предложенного метода оценки хорошо согласуются с результатами более строгих расчетов. Установлено, что для таких проволок сечением 1×1 нм^2 при температуре 400 К оценка верхней границы относительной погрешности расчета интенсивности рассеяния электронов на размерно-ограниченных модах полярных оптических фононов в приближении стабильных квантовых состояний относительно соответствующих значений, рассчитанных в приближении затухающих квантовых состояний в рамках формализма уравнения Лиувилля – фон Неймана, не превышает 7% и уменьшается с уменьшением температуры проволоки и увеличением площади ее сечения, не опускаясь ниже 5% [1–А; 3–А; 4–А; 5–А; 6–А; 9–А; 10–А; 12–А; 13–А; 19–А; 46–А; 51–А; 52–А].

3. Разработана физико-математическая модель переноса носителей заряда в полупроводниковых квантовых проволоках, основанная на численном решении кинетического уравнения Больцмана, учитывающая все доминирующие механизмы рассеяния заряженных частиц, непараболичность зонной структуры полупроводников и вторичные квантовые эффекты. Получаемые с помощью этой модели распределения носителей заряда по энергии в термодинамически равновесных фермионных ансамблях всегда подчиняются статистике Ферми-Дирака, в отличие от соответствующих распределений частиц по энергии, рассчитываемых с помощью других учитывающих вторичные квантовые эффекты моделей. На основе предложенной модели разработаны алгоритмы и реализующие их программные средства для моделирования процессов переноса электронов в длинных арсенид-галлиевых проводящих каналах с одномерным электронным газом, находящимся в условиях электрического

квантового предела. С помощью созданного программного обеспечения исследовано влияние различных физических и геометрических параметров, характеризующих арсенид-галлиевые квантовые проволоки, на подвижность и дрейфовую скорость движущихся в них электронов в условиях как стационарного, так и нестационарного переноса. Теоретически установлено, что в нелегированных арсенид-галлиевых квантовых проволоках с гладкими гетерограницами и с площадью поперечного сечения от 10×10 нм^2 до 20×20 нм^2 при комнатных температурах достигается очень высокая низкополевая подвижность электронов, превышающая их подвижность в объемном полупроводнике соответственно от ×1.4 до максимум ×2.3 раза [1–A; 2–A; 3–A; 4–A; 5–A; 6–A; 9–A; 11–A; 12–A; 13–A; 16–A; 19–A; 23–A; 28–A; 32–A; 33–A; 43–A; 46–A; 47–A; 48–A; 49–A; 51–A; 52–A].

4. На примере арсенид-галлиевых квантовых проволок в арсениде или оксиде алюминия исследовано влияние как разности потенциалов на затворах двухзатворных транзисторных структур, так и напряженности внешнего поперечного электрического поля на зависимости интенсивностей рассеяния электронов от их кинетической энергии в соответствующих одномерных проводящих каналах на основе GaAs для различных механизмов рассеяния, а также на подвижность и дрейфовую скорость носителей заряда при различных физических и геометрических параметрах, характеризующих состояние одномерного электронного газа в таких проводящих каналах. Предложен принцип управления дрейфовой скоростью носителей заряда в полупроводниковых квантовых проволоках с пространственно-неоднородной поверхностью, основанный на эффекте изменения интенсивности рассеяния частиц на шероховатостях границ проволок при варьировании напряженности внешнего поперечного электрического поля. С учетом этого эффекта предложена конструкция четырехэлектродного электронного удвоителя частоты нового типа [1–A; 3–A; 6–A; 9–A; 11–A; 12–A; 14–A; 26–A; 29–A; 33–A; 35–A; 38–A; 39–A; 44–A; 45–A; 46–A; 48–A; 49–A; 51–A].

5. Разработана физико-математическая модель переноса электронов и фононов в A-нанотрубках, основанная на численном решении системы соответствующих кинетических уравнений Больцмана и учитывающая полную электронную и фононную зонные структуры нанотрубок, все их значимые фононные моды в приближении «вмороженных» в кристаллическую решетку графена фононов, а также процессы фононного рассеяния электронов с перебросом. На основе этой модели разработаны алгоритмы и реализующие их программные средства для моделирования процессов переноса электронов и фононов в длинных A-нанотрубках в условиях электрического квантового предела. С помощью созданного программного обеспечения исследовано вли-

яние различных физических параметров и диаметра нанотрубок на силу протекающего по ним электрического тока в условиях как стационарного, так и нестационарного переноса электронов и фононов. Показано, что все рассчитанные в рамках разработанной модели значения электрофизических параметров А-нанотрубок согласуются со значениями аналогичных параметров графена. В силу установленных особенностей влияния диаметра и температуры А-нанотрубок на их низкополевое погонное сопротивление предложено использовать такие нанотрубки в качестве миниатюрных резистивных датчиков температуры в широком диапазоне изменения температур приблизительно от 250 до 1900 К [1–А; 6–А; 7–А; 8–А; 11–А; 12–А; 15–А; 24–А; 27–А; 30–А; 31–А; 34–А; 36–А; 37–А; 40–А; 41–А; 46–А; 48–А; 50–А; 51–А].

6. Предложено конструктивно-топологическое решение для новой разновидности полевого транзистора с барьером Шоттки в его проводящем канале в виде вертикального баллистического квантово-барьерного полевого транзистора на основе цилиндрической нелегированной GaAs–$Al_XGa_{1-X}As$–GaAs квантовой проволоки в оксиде алюминия, окруженной цилиндрическим металлическим затвором. Предложен метод расчета оптимального пространственного изменения доли алюминия в составе полупроводника вдоль канала транзистора, обеспечивающего полное снятие квантового барьера для электронов положительным затворным напряжением и минимально возможное электрическое сопротивление проводящего канала. Проведена оптимизация физико-топологических параметров транзистора, заключавшаяся, в том числе, в определении значений длины и диаметра его проводящего канала, при которых и величина проводимости канала транзистора, и величина обратной подпороговой крутизны его ВАХ минимально отличны приблизительно на 6% от своих предельных теоретических значений при 300 К. Рассчитаны ВАХ транзистора на основе $Al_XGa_{1-X}As$ квантовой проволоки с оптимальными размерами и стехиометрией в рамках разработанной комбинированной физико-математической модели, описывающей перенос электронов в проводящем канале транзистора с учетом их рассеяния на фононах, непараболичности зонной структуры полупроводника, квантово-размерных и вторичных квантовых эффектов [1–А; 3–А; 5–А; 6–А; 9–А; 18–А; 19–А; 21–А; 46–А; 52–А; 53–А].

7. Изучена одна из возможных конструкций двухзатворного квантово-барьерного полевого транзистора на основе Z-нанотрубки. Проведена оптимизация его конструктивно-топологических параметров, состоявшая, в том числе, в определении значений длины и диаметра Z-нанотрубки, при которых достигается максимальная обратная подпороговая крутизна ВАХ транзистора при минимальной напряженности электрического поля в межзатворном изоляторе. Рассчитаны ВАХ транзистора с оптимальными размерами его прово-

дящего канала в рамках разработанной комбинированной физико-математической модели, описывающей перенос носителей заряда в этом канале с учетом как квантово-размерных и вторичных квантовых эффектов, так и фононного рассеяния частиц. Теоретически установлено, что двухзатворный квантово-барьерный полевой транзистор на основе Z-нанотрубки, функционирующий на эффекте появления запрещенной зоны в ее зонной структуре под действием внешнего поперечного электрического поля, представляет собой электронный ключ с низкой эффективностью переключения [1–А; 22–А; 42–А].

Рекомендации по практическому использованию результатов

Разработанные в диссертации методы и физико-математические модели целесообразно использовать в САПР новых наноразмерных элементов СБИС и УБИС на основе приборных структур с одномерным электронным газом, например, полевых транзисторов с одномерными проводящими каналами внутри трубчатых затворов. Эти методы и модели, положенные в основу САПР, могут повысить точность и эффективность прогнозирования электрофизических параметров и электрических характеристик проектируемых приборов и приборных структур наноэлектроники. В свою очередь, более точное прогнозирование их электрофизических свойств позволит значительно снизить материальные затраты на их натурное прототипирование.

Предложенные методы и конструктивно-топологические решения открывают перспективу производства таких новых высокоэффективных приборов и приборных структур микро- и наноэлектроники, как резистивные датчики температуры на основе металлических одностенных углеродных нанотрубок типа «armchair», четырехэлектродные удвоители частоты на основе полупроводниковых квантовых проволок или слоев с изменяющимся поперечным сечением их проводящих каналов, полевые транзисторы на основе соединений полупроводников с полностью снимаемыми полями затворов барьерами Шоттки в их проводящих каналах.

Полученные результаты представляют интерес для предприятий и организаций электронной промышленности. Ряд результатов используется в учебном процессе на кафедре физической электроники и нанотехнологий факультета радиофизики и компьютерных технологий БГУ (4 акта о внедрении результатов НИР в образовательный процесс и 2 свидетельства о добровольной регистрации и депонировании объектов авторского права в виде компьютерных программ).

СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ СОИСКАТЕЛЯ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ

Монография

1–А. Поздняков, Д.В. Моделирование электрофизических свойств приборных структур с одномерным электронным газом / Д.В. Поздняков, В.М. Борздов. – Мн.: БГУ, 2025. – 191 с.

Статьи в научных изданиях в соответствии с п. 19 Положения о присуждении ученых степеней и присвоении ученых званий

2–А. Space-averaged electron drift velocity in GaAs-quantum wires / V. Borzdov, O. Zhevnyak, V. Galenchik, D. Pozdnyakov, F. Komarov // Proc. SPIE. – 2004. – Vol. 5509. – P. 206–215.

3–А. Self-consistent calculations of phonon scattering rates in the GaAs transistor structure with one-dimensional electron gas / A.V. Borzdov, D.V. Pozdnyakov, V.O. Galenchik, V.M. Borzdov, F.F. Komarov // Phys. Status Solidi (b). – 2005. – Vol. 242, № 15. – P. R134–R136.

4–А. Ionized impurity and surface roughness scattering rates of electrons in semiconductor structures with one-dimensional electron gas and broadened energy levels / D.V. Pozdnyakov, V.O. Galenchik, V.M. Borzdov, F.F. Komarov, O.G. Zhevnyak // Phys. Low-Dim. Struct. – 2006. – № 1. – P. 19–24.

5–А. Pozdnyakov, D.V. Electron scattering in thin GaAs quantum wires / D.V. Pozdnyakov, V.O. Galenchik, A.V. Borzdov // Phys. Low-Dim. Struct. – 2006. – № 2. – P. 87–90.

6–А. Monte Carlo simulation of device structures with one-dimensional electron gas / V. Borzdov, F. Komarov, V. Galenchik, D. Pozdnyakov, A. Borzdov, O. Zhevnyak // Proc. SPIE. – 2006. – Vol. 6260. – P. 1N-1–11.

7–А. Peculiar properties of electron transport in single-wall armchair carbon nanotubes / D.V. Pozdnyakov, V.O. Galenchik, V.M. Borzdov, F.F. Komarov // Proc. SPIE. – 2006. – Vol. 6328. – P. 0Y-1–9.

8–А. Electron transport in armchair single-wall carbon nanotubes / D.V. Pozdnyakov, V.O. Galenchik, F.F. Komarov, V.M. Borzdov // Physica E. – 2006. – Vol. 33, № 2. – P. 336–342.

9–А. Борздов, А.В. Рассеяние электронов в транзисторной структуре GaAs/AlAs / А.В. Борздов, Д.В. Поздняков // ФТТ. – 2007. – Т. 49, № 5. – С. 913–916.

10–А. Influence of scattering processes on electron quantum states in nanowires / D. Pozdnyakov, V. Galenchik, A. Borzdov, V. Borzdov, F. Komarov // Nanoscale Res. Lett. – 2007. – Vol. 2, № 4. – P. 213–218.

11–А. Modeling of non-stationary electron transport in semiconductor nanowires and carbon nanotubes / D. Pozdnyakov, A. Borzdov, V. Borzdov, F. Komarov // Proc. SPIE. – 2008. – Vol. 7025. – P. 1S-1–9.

12–A. Calculation of electrophysical parameters of thin undoped GaAs-in-Al_2O_3 quantum nanowires and single-wall armchair carbon nanotubes / D. Pozdnyakov, A. Borzdov, V. Borzdov, V. Labunov // Proc. SPIE. – 2010. – Vol. 7521. – P. 0S-1–9.

13–A. Pozdnyakov, D. Influence of surface roughness scattering on electron low-field mobility in thin undoped GaAs-in-Al_2O_3 nanowires with rectangular cross-section / D. Pozdnyakov // Phys. Status Solidi B. – 2010. – Vol. 247, № 1. – P. 134–139.

14–A. Моделирование влияния поперечного электрического поля на дрейфовую скорость электронов в GaAs квантовой проволоке / А.В. Борздов, Д.В. Поздняков, В.М. Борздов, А.А. Орликовский, В.В. Вьюрков // Микроэлектроника. – 2010. – Т. 39, № 6. – С. 436–442.

15–A. Pozdnyakov, D. Validity of approximations applied in calculations of single-wall metallic carbon nanotube current-voltage characteristics / D. Pozdnyakov // J. Comp. Electron. – 2012. – Vol. 11, № 4. – P. 397–404.

16–A. Pozdnyakov, D. Scattering of electrons by ionized impurities in semiconductors: quantum-mechanical approach to third body exclusion / D. Pozdnyakov // J. Comp. Electron. – 2014. – Vol. 13, № 1. – P. 338–351.

17–A. Поздняков, Д.В. Особенности переноса электронов через области контакта между полупроводниковыми квантовыми проволоками с различным поперечным сечением / Д.В. Поздняков, А.В. Борздов, В.М. Борздов // Нано- и микросистем. техн. – 2023. – Т. 25, № 6. – С. 259–266.

18–A. Поздняков, Д.В. Моделирование вертикального баллистического квантово-барьерного полевого транзистора на основе нелегированной $Al_xGa_{1-x}As$ квантовой нанопроволоки / Д.В. Поздняков, А.В. Борздов, В.М. Борздов // Микроэлектроника. – 2023. – Т. 52, № 6. – С. 459–468.

19–A. Pozdnyakov, D.V. Calculation of electrophysical characteristics of semiconductor quantum wire device structures with one-dimensional electron gas / D.V. Pozdnyakov, A.V. Borzdov, V.M. Borzdov // Rus. Microelectronics. – 2023. – Vol. 52, Suppl. 1. – P. S20–S29.

20–A. Pozdnyakov, D.V. Peculiarities of electron transport through the contact regions between semiconductor quantum wires with different cross sections / D.V. Pozdnyakov, A.V. Borzdov, V.M. Borzdov // Nanobiotechnology Reports. – 2024. – Vol. 19, Suppl. 1. – P. S117–S123.

21–A. Pozdnyakov, D.V. Simulation of a quasi-ballistic quantum-barrier field-effect transistor based on GaAs quantum wire / D.V. Pozdnyakov, A.V. Borzdov, V.M. Borzdov // Nanosystems: Phys. Chem. Math. – 2025. – Vol. 16, № 2. – P. 183–191.

22–А. Поздняков, Д.В. Моделирование баллистического квантово-барьерного полевого транзистора на основе металлической одностенной углеродной нанотрубки типа zigzag / Д.В. Поздняков, А.В. Борздов, В.М. Борздов // Изв. НАН Беларуси. Сер. физ.-мат. наук. – 2025. – Т. 61, № 2. – С. 139–148.

Статьи в других научных изданиях

23–А. Моделирование переходных процессов в GaAs-квантовой проволоке с учетом уширения энергетических уровней / О.Г. Жевняк, Д.В. Поздняков, А.В. Борздов, В.М. Борздов, В.О. Галенчик // Лазерная и оптико-электронная техника: сб. науч. ст. / Академия управления при Президенте Республики Беларусь; под ред. И.С. Манака [и др.]. – Мн., 2006. – Вып. 10 – С. 147–150.

24–А. Electron transport properties of armchair carbon nanotubes / V.O. Galenchik, D.V. Pozdnyakov, F.F. Komarov, V.M. Borzdov // Углеродные наноструктуры: сб. науч. тр. / ИТМО НАН Беларуси. – Мн., 2006. – С. 75–80.

25–А. Поздняков, Д.В. Перенос электронов через области контакта между GaAs-квантовыми проволоками с различным поперечным сечением / Д.В. Поздняков, А.В. Борздов, В.М. Борздов // Фуллерены и наноструктуры в конденсированных средах: сб. науч. ст. / Институт тепло- и массообмена им. А.В. Лыкова НАН Беларуси; под ред. П.А. Витязя [и др.]. – Мн., 2023. – С. 271–276.

Статьи в сборниках материалов научных конференций

26–А. An influence of the gate voltage on formfactors in GaAs transistors with one-dimensional electron gas / V.M. Borzdov, A.V. Borzdov, O.G. Zhevnyak, V.O. Galenchik, D.V. Pozdnyakov, F.F. Komarov // Physics, Chemistry and Application of Nanostructures. Reviews and Short Notes to Nanomeeting – 2005 / World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd.; eds. V.E. Borisenko, S.V. Gaponenko, V.S. Gurin. – Singapore, 2005. – P. 567–570.

27–А. Electron-phonon coupling in armchair single-wall carbon nanotubes / D.V. Pozdnyakov, V.O. Galenchik, F.F. Komarov, V.M. Borzdov, P. Zukowski, J. Partyka, P. Wegierek // New Electrical and Electronic Technologies and their Industrial Implementation. IV International Conference NEET’2005 / PRINT-6; eds. P. Wegierek, T. Koltunowicz. – Lublin, 2005. – P. 270–274.

28–А. Расчет подвижности электронов в тонких нелегированных GaAs квантовых проволоках / Д.В. Поздняков, А.В. Борздов, В.О. Галенчик, В.М. Борздов // 16-ая Международная Крымская конференция «СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии». Материалы конференции КрыМиКо’2006. В 2 т. / Вебер. – Севастополь, 2006. – Т. 2. – С. 657–658.

29–А. Влияние затворного напряжения на интенсивность рассеяния электронов на шероховатостях поверхности в GaAs/AlAs транзисторных структурах / А.В. Борздов, Д.В. Поздняков, В.О. Галенчик, В.М. Борздов // 16-

ая Международная Крымская конференция «СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии». Материалы конференции КрыМиКо’2006. В 2 т. / Вебер. – Севастополь, 2006. – Т. 2. – С. 659–660.

30–А. Modeling of non-stationary electron-phonon transport in armchair single-wall carbon nanotubes / D.V. Pozdnyakov, V.O. Galenchik, A.V. Borzdov, V.M. Borzdov, F.F. Komarov // Physics, Chemistry and Application of Nanostructures. Reviews and Short Notes to Nanomeeting – 2007 / World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd.; eds. V.E. Borisenko, S.V. Gaponenko, V.S. Gurin. – Singapore, 2007. – P. 245–248.

31–А. Поздняков, Д.В. Моделирование переходных процессов в углеродных нанотрубках с металлическим типом проводимости / Д.В. Поздняков, В.М. Борздов, Ф.Ф. Комаров // 17-ая Международная Крымская конференция «СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии». Материалы конференции КрыМиКо’2007. В 2 т. / Вебер. – Севастополь, 2007. – Т. 2. – С. 584–586.

32–А. Поздняков, Д.В. Расчет дрейфовой скорости электронов в нелегированных GaAs нанопроволоках / Д.В. Поздняков, А.В. Борздов, В.М. Борздов // 17-ая Международная Крымская конференция «СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии». Материалы конференции КрыМиКо’2007. В 2 т. / Вебер. – Севастополь, 2007. – Т. 2. – С. 598–600.

33–А. Борздов, А.В. Моделирование нестационарного переноса электронов в GaAs/ AlAs квантовой проволоке методом Монте-Карло / А.В. Борздов, Д.В. Поздняков, В.М. Борздов // 17-ая Международная Крымская конференция «СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии». Материалы конференции КрыМиКо’2007. В 2 т. / Вебер. – Севастополь, 2007. – Т. 2. – С. 595–597.

34–А. Поздняков, Д.В. Влияние процессов релаксации LA- и LO-фононов на электрофизические свойства одностенных углеродных нанотрубок «armchair»-типа / Д.В. Поздняков, В.М. Борздов, Ф.Ф. Комаров // Сборник докладов Харьковской нанотехнологической ассамблеи – 2008. В 2 т. / ННЦ ХФТИ; под ред. И.М. Неклюдова, В.М. Шулаева. – Харьков, 2008. – Т. 2. – С. 215–218.

35–А. Борздов, А.В. Управление дрейфовой скоростью электронов в транзисторной структуре на основе GaAs-квантовой проволоки / А.В. Борздов, Д.В. Поздняков, В.М. Борздов // 18-ая Международная Крымская конференция «СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии». Материалы конференции КрыМиКо’2008. В 2 т. / Вебер. – Севастополь, 2008. – Т. 2. – С. 588–590.

36–А. Поздняков, Д.В. Расчет электрофизических параметров одностенных углеродных нанотрубок «armchair»-типа / Д.В. Поздняков // 18-ая

Международная Крымская конференция «СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии». Материалы конференции КрыМиКо’2008. В 2 т. / Вебер. – Севастополь, 2008. – Т. 2. – С. 591–593.

37–А. Поздняков, Д.В. Расчет электрофизических параметров углеродных нанотрубок типа «armchair» / Д.В. Поздняков, В.М. Борздов // Материалы и структуры современной электроники: сб. науч. тр. III Междунар. науч. конф. / БГУ; под ред. В.Б. Оджаева [и др.]. – Мн., 2008. – С. 207–209.

38–А. Влияние поперечного электрического поля на дрейфовую скорость электронов в тонкой GaAs квантовой проволоке / А.В. Борздов, Д.В. Поздняков, Д.С. Сперанский, В.М. Борздов // Материалы и структуры современной электроники: сб. науч. тр. III Междунар. науч. конф. / БГУ; под ред. В.Б. Оджаева [и др.]. – Мн., 2008. – С. 209–213.

39–А. Борздов, А.В. Перенос электронов в транзисторной структуре на основе GaAs/AlAs квантовой проволоки в периодическом электрическом поле / А.В. Борздов, Д.В. Поздняков, В.М. Борздов // 19-ая Международная Крымская конференция «СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии». Материалы конференции КрыМиКо’2009. В 2 т. / Вебер. – Севастополь, 2009. – Т. 2. – С. 648–649.

40–А. Поздняков, Д.В. Моделирование переноса электронов в одностенных металлических углеродных нанотрубках в СВЧ-поле / Д.В. Поздняков, В.М. Борздов // 19-ая Международная Крымская конференция «СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии». Материалы конференции КрыМиКо’2009. В 2 т. / Вебер. – Севастополь, 2009. – Т. 2. – С. 650–652.

41–А. Поздняков, Д.В. Расчет проводимости металлических одностенных углеродных нанотрубок / Д.В. Поздняков // 19-ая Международная Крымская конференция «СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии». Материалы конференции КрыМиКо’2009. В 2 т. / Вебер. – Севастополь, 2009. – Т. 2. – С. 661–662.

42–А. Поздняков, Д.В. Расчет вольт-амперных характеристик баллистического транзистора на основе металлической одностенной углеродной нанотрубки / Д.В. Поздняков // 20-ая Международная Крымская конференция «СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии». Материалы конференции КрыМиКо’2010. В 2 т. / Вебер. – Севастополь, 2010. – Т. 2. – С. 869–871.

43–А. Поздняков, Д.В. Влияние неопределенности энергии электронов на их дрейфовую скорость в GaAs квантовой нанопроволоке / Д.В. Поздняков, А.В. Борздов, В.М. Борздов // 23-я Международная Крымская конференция «СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии». Материалы конференции КрыМиКо’2013. В 2 т. / Вебер. – Севастополь, 2013. – Т. 2. – С. 875–876.

44–А. Борздов, А.В. Модуляция дрейфовой скорости электронов в МДП-транзисторной структуре с одномерным электронным газом / А.В. Борздов, Д.В. Поздняков, В.М. Борздов // 23-я Международная Крымская конференция «СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии». Материалы конференции КрыМиКо'2013. В 2 т. / Вебер. – Севастополь, 2013. – Т. 2. – С. 877–878.

45–А. Борздов, А.В. Влияние шероховатостей поверхности на дрейфовую скорость электронов в транзисторной структуре с одномерным проводящим каналом / А.В. Борздов, В.М. Борздов, Д.В. Поздняков // Материалы XV Международной научно-технической конференции «Квантовая электроника» / БГУ. – Мн., 2025. – С. 270–272.

Тезисы докладов на научных конференциях

46–А. Monte Carlo simulation of device structures with one-dimensional electron gas / V. Borzdov, F. Komarov, V. Galenchik, D. Pozdnyakov, A. Borzdov, O. Zhevnyak // International Conference «Micro- and nanoelectronics – 2005». Book of Abstracts. – Moscow–Zvenigorod, 2005. – P. O2-02.

47–А. Поздняков, Д.В. Влияние квантовых эффектов на переходные электронные процессы в арсенид галлиевых нанопроволоках в матрице оксида алюминия при включении внешнего электрического поля / Д.В. Поздняков, В.М. Борздов, Ф.Ф. Комаров // II Всероссийская конференция по наноматериалам: сб. тез. / Инст. хим. тв. тела и механохимии. – Новосибирск, 2007. – С. 482.

48–А. Modeling of non-stationary electron transport in semiconductor nanowires and carbon nanotubes / D.V. Pozdnyakov, A.V. Borzdov, V.M. Borzdov, F.F. Komarov // International Conference «Micro- and nanoelectronics – 2007». Book of Abstracts. – Moscow–Zvenigorod, 2007. – P. O2-19.

49–А. Борздов, В.М. Моделирование переноса электронов в квантовой проволоке на основе гетероструктуры $GaAs/Al_XGa_{1-X}As$ / В.М. Борздов, А.В. Борздов, Д.В. Поздняков // Материалы первой международной научной конференции «Наноструктурные материалы – 2008: Беларусь – Россия – Украина» / Белорусская наука. – Мн., 2008. – С. 146–147.

50–А. Pozdnyakov, D. Calculation of conductivity of the armchair single-wall carbon nanotubes / D. Pozdnyakov, F. Komarov, C. Karwat // New Electrical and Electronic Technologies and their Industrial Implementation. 6th International Conference NEET'2009 / Printing House Ex-libris; edited by T. Koltunowicz. – Lublin, 2009. – P. 25.

51–А. Calculation of electrophysical parameters of thin undoped GaAs-in-Al_2O_3 quantum nanowires and single-wall armchair carbon nanotubes / D.V. Pozdnyakov, A.V. Borzdov, V.M. Borzdov, V.A. Labunov // International

Conference «Micro- and nanoelectronics – 2009». Book of Abstracts. – Moscow–Zvenigorod, 2009. – P. 2-09.

52–A. Pozdnyakov, D.V. Calculation of electrophysical characteristics of semiconductor quantum wire device structures with one-dimensional electron gas / D.V. Pozdnyakov, A.V. Borzdov, V.M. Borzdov // International Conference «Micro- and nanoelectronics – 2023». Book of Abstracts. – Moscow–Zvenigorod, 2023. – P. O1-18.

53–A. Pozdnyakov, D. Simulation of a ballistic GAAFET based on $Al_xGa_{1-x}As$ quantum wire / D. Pozdnyakov, A. Borzdov, V. Borzdov // 16th Valiev International Conference «Micro- and nanoelectronics – 2025». Book of Abstracts. – Moscow, 2025. – P. 62–63.

РЕЗЮМЕ

Поздняков Дмитрий Викторович

Моделирование электрофизических свойств и электрических характеристик приборных структур на основе полупроводниковых квантовых проволок и металлических одностенных углеродных нанотрубок

Ключевые слова: рассеяние частиц, уравнение Шредингера, уравнение Больцмана, полупроводниковые квантовые проволоки, одностенные углеродные нанотрубки, баллистические полевые транзисторы

Цель работы: построение физико-математических моделей процессов переноса носителей заряда в приборных структурах с одномерным электронным газом с учетом квантово-размерных и вторичных квантовых эффектов, а также разработка алгоритмов и программных средств для численного моделирования электрофизических свойств и электрических характеристик этих структур.

Методы исследования: методы квантовой теории возмущений, методы численного решения кинетического уравнения Больцмана, метод Монте-Карло, методы статистической физики, метод передаточных матриц.

Полученные результаты и их новизна: развита теория рассеяния носителей заряда в полупроводниковых квантовых проволоках и металлических одностенных углеродных нанотрубках для доминирующих в таких наноструктурах механизмов рассеяния; разработаны учитывающие квантово-размерные и вторичные квантовые эффекты физико-математические модели переноса носителей заряда в полупроводниковых квантовых проволоках и металлических одностенных углеродных нанотрубках; разработаны учитывающие фононное рассеяние, квантово-размерные и вторичные квантовые эффекты численные модели переноса носителей заряда в баллистических полевых транзисторах с барьерами Шоттки в проводящих каналах на основе полупроводниковых квантовых проволок и металлических одностенных углеродных нанотрубок.

Рекомендации по использованию: разработанные методы и физико-математические модели целесообразно использовать в САПР новых наноразмерных элементов СБИС и УБИС на основе приборных структур с одномерным электронным газом; эти методы и модели, положенные в основу САПР, могут повысить точность и эффективность прогнозирования электрофизических параметров и электрических характеристик проектируемых приборов и приборных структур наноэлектроники; более точное прогнозирование их электрофизических свойств позволит значительно снизить материальные затраты на их натурное прототипирование.

Область применения: полученные результаты представляют интерес для предприятий и организаций электронной промышленности; также они могут найти свое применение в учебном процессе ВУЗов при чтении таких курсов лекций, как «физика низкоразмерных систем» и «наноэлектроника».

РЭЗЮМЭ

Пазнякоў Дзмітрый Віктаравіч

Мадэляванне электрафізічных уласцівасцяў і электрычных характарыстык прыборных структур на аснове паўправадніковых квантавых правадоў і металічных аднастенных вугляродных нанатрубак

Ключавыя словы: рассеянне часціц, раўнанне Шродзінгера, раўнанне Больцмана, паўправадніковыя квантавыя правады, аднасценныя вугляродныя нанатрубкі, балістычныя палявыя транзістары

Мэта працы: пабудова фізіка-матэматычных мадэляў працэсаў пераносу носьбітаў зараду ў прыборных структурах з аднамерным электронным газам з улікам квантава-памерных і другасных квантавых эфектаў, а таксама распрацоўка алгарытмаў і праграмных сродкаў для лікавага мадэлявання электрафізічных уласцівасцяў і электрычных характарыстык гэтых структур.

Метады даследавання: метады квантавай тэорыі ўзрушэнняў, метады лікавага рашэння кінетычнага раўнання Больцмана, метад Монтэ-Карла, метады статыстычнай фізікі, метад перадаткавых матрыц.

Атрыманыя вынікі і іх навізна: развіта тэорыя рассеяння носьбітаў зараду ў паўправадніковых квантавых правадах і металічных аднасценных вугляродных нанатрубках для дамінуючых у такіх нанаструктурах механізмаў рассеяння; распрацаваны ўлічваючыя квантава-размерныя і другасныя квантавыя эфекты фізіка-матэматычныя мадэлі пераносу носьбітаў зараду ў паўправадніковых квантавых правадах і металічных аднасценных вугляродных нанатрубках; распрацаваны ўлічваючыя фаноннае рассеянне, квантава-размерныя і другасныя квантавыя эфекты лікавыя мадэлі пераносу носьбітаў зараду ў балістычных палявых транзістарах з бар’ерамі Шоткі ў праводзячых каналах на аснове паўправадніковых квантавых правадоў і металічных аднасценных вугляродных нанатрубак.

Рэкамендацыі па выкарыстанню: распрацаваныя метады і фізіка-матэматычныя мадэлі мэтазгодна выкарыстоўваць у САПР новых нанапамерных элементаў ЗВІС і УВІС на аснове прыборных структур з аднамерным электронным газам; гэтыя метады і мадэлі, пакладзеныя ў аснову САПР, могуць павысіць дакладнасць і эфектыўнасць прагназавання электрафізічных параметраў і электрычных характарыстык праектуемых прыбораў і прыборных структур нанаэлектронікі; больш дакладнае прагназаванне іх электрафізічных уласцівасцей дазволіць значна знізіць матэрыяльныя выдаткі на іх натурнае прататыпаванне.

Галіна прымянення: атрыманыя вынікі прадстаўляюць цікавасць для прадпрыемстваў і арганізацый электроннай прамысловасці; таксама яны могуць знайсці сваё прымяненне ў вучэбным працэсе ВНУ пры чытанні такіх курсаў лекцый, як «фізіка нізкаразмерных сістэм» і «нанаэлектроніка».

SUMMARY

Dmitry V. Pozdnyakov

Modeling of electrophysical properties and electrical characteristics of device structures based on semiconductor quantum wires and metallic single-walled carbon nanotubes

Keywords: particle scattering, Schrödinger equation, Boltzmann equation, semiconductor quantum wires, single-wall carbon nanotubes, ballistic field-effect transistors

Research purpose: development of physico-mathematical models of charge carrier transport processes in device structures with a one-dimensional electron gas, taking into account quantum-dimensional and secondary quantum effects, as well as the implementation of algorithms and software tools for numerical simulation of the electrophysical properties and electrical characteristics of these structures.

Research methods: methods of quantum perturbation theory, methods of numerical solution of the Boltzmann transport equation, Monte Carlo method, methods of statistical physics, transfer matrix method.

The obtained results and their novelty: the theory of charge carrier scattering in semiconductor quantum wires and metallic single-wall carbon nanotubes for dominant scattering mechanisms in such nanostructures has been developed; physico-mathematical models of charge carrier transport in semiconductor quantum wires and metallic single-walled carbon nanotubes, accounting for quantum-dimensional and secondary quantum effects, have been developed; numerical models considering phonon scattering, quantum-dimensional and secondary quantum effects for charge carrier transport in ballistic field-effect transistors with Schottky barriers in conducting channels based on semiconductor quantum wires and metallic single-wall carbon nanotubes have been developed.

Recommendations for use: the developed methods and physico-mathematical models are advisable to use in CAD tools for new nanoscale elements of VLSI and ULSI circuits based on the device structures with one-dimensional electron gas; these methods and models, when used in CAD, can enhance the accuracy and efficiency of predicting the electrophysical parameters and electrical characteristics of designed devices and device structures of nanoelectronics; more accurate prediction of their electrophysical properties will allow material costs for their physical prototyping to be significantly reduced.

Scope of application: the results are of interest to enterprises and organizations in the electronics industry; they can also be used in higher education courses such as «Physics of low-dimensional systems» and «Nanoelectronics».

Научное издание

Поздняков Дмитрий Викторович

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ И ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ПРИБОРНЫХ СТРУКТУР НА ОСНОВЕ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ КВАНТОВЫХ ПРОВОЛОК И МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ОДНОСТЕННЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук
по специальности 05.27.01 – твердотельная электроника, радиоэлектронные компоненты, микро- и наноэлектроника, приборы на квантовых эффектах

Подписано в печать 27.01.2026. Формат 60×84 1/16. Бумага офсетная. Гарнитура Таймс.
Отпечатано на ризографе. Усл. печ. л. 2,79. Уч.-изд. л. 2,5. Тираж 60. Заказ 14.

Издатель и полиграфическое исполнение: учреждение образования
«Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники».
Свидетельство о государственной регистрации издателя, изготовителя,
распространителя печатных изданий №1/238 от 24.03.2014,
№2/113 от 07.04.2014, №3/615 от 07.04.2014.
Ул. П. Бровки, 6, 220013, г. Минск