

УДК 535.215

## МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУР ТИПА МЕТАЛЛ–ДИЭЛЕКТРИК–МЕТАЛЛ ДЛЯ ДЕТЕКТИРОВАНИЯ ТЕРАГЕРЦОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

© 2021 г. К. Т. Ч. Ву<sup>1</sup>, \*, Г. М. Казарян<sup>1</sup>, В. Л. Саввин<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования  
“Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова”, Физический факультет, Москва, Россия

\*E-mail: kt.vu@physics.msu.ru

Поступила в редакцию 20.07.2020 г.

После доработки 28.08.2020 г.

Принята к публикации 28.09.2020 г.

Структуры типа металл–диэлектрик–металл являются перспективным кандидатом на роль эффективного выпрямляющего элемента в терагерцовом диапазоне. Рассматривается численная модель подобной структуры, использующая метод конечных элементов в формализме неравновесной функции Грина.

DOI: 10.31857/S0367676521010300

### ВВЕДЕНИЕ

Терагерцевый диапазон является важным объектом исследования в наше время в силу его многочисленных потенциальных применений в медицине, материаловедении, энергетике и других областях. Детектирование излучения в этом диапазоне – сложная задача. Он расположен между микроволновым и инфракрасным диапазоном, методы которых плохо работают для терагерцевых частот. Например, энергия квантов электромагнитного поля, соответствующая этому диапазону, меньше энергии теплового шума при комнатной температуре, что делает применение фотоэлементов неэффективным [1, 2].

В качестве альтернативы были предложены использовать так называемые ректенны [3, 4], т.е. выпрямляющие антенны. Эти устройства представляют собой антенну, соединенную с выпрямляющим элементом. При преобразовании энергии электромагнитной волны в электрический ток эффективность ректенн в микроволновом диапазоне может достигать 70–90% [4, 5]. Их эффективность для более высоких частот является предметом споров. Пессимистичная оценка, полагающая справедливость применения предела Шокли–Квайссера, составляет примерно 30% [6]. Экспериментальные же работы демонстрируют эффективность порядка единиц процентов в лучшем случае. Улучшение этого показателя во многом зависит от нахождения эффективного выпрямляющего элемента.

Большое количество современных исследований предлагают в качестве этого элемента использовать структуры типа металл–диэлектрик–металл. Они, по существу, представляют собой диоды, механизмом переноса заряда в которых является квантовое туннелирование. Теоретически, это позволяет им работать на частотах, достигающих среднего инфракрасного диапазона и, согласно некоторым работам, даже оптического [7–9].

Для структур типа металл–диэлектрик–металл, использующих один слой диэлектрика, было показана невозможность одновременного достижения низкого сопротивления и высокой чувствительности [10]. Предполагается, что применение нескольких диэлектрических слоев или использование асимметричной геометрии их расположения может помочь улучшить эти показатели [10–12]. Эти предложения приводят к существенному усложнению структур, делая их аналитическое рассмотрение очень сложным.

Эта работа посвящена построению численной модели структуры типа металл–диэлектрик–металл с использованием метода конечных элементов в формализме неравновесной функции Грина [13–15]. Метод конечных элементов позволяет строить сетки произвольных форм, что может в перспективе облегчить рассмотрение многомерных структур. Формализм неравновесной функции Грина позволяет получить наиболее детальные сведения о характеристиках структур, что мо-

жет оказаться чрезвычайно полезным при их анализе.

### ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И МЕТОДОЛОГИЯ

Постановка задачи начинается с определения области  $\Omega$ , которая состоит из конечной подобласти  $\Omega_D$  и бесконечных подобластей  $\Omega_\alpha$ . Область  $\Omega_D$  соответствует пространству, заполненному диэлектриками, т.е. расчетной области. Области  $\Omega_\alpha$  соответствуют металлическим проводникам. Для данной энергии  $E$  функция Грина  $G(\vec{r}, \vec{r}'; E)$  определяется как

$$(E - H)G(\vec{r}, \vec{r}'; E) = \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad \vec{r}, \vec{r}' \in \Omega, \quad (1)$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2} \nabla \left( \frac{1}{m(\vec{r})} \nabla \right) + V(\vec{r}). \quad (2)$$

Здесь  $H$  – гамильтониан всей системы,  $m(\vec{r})$  – эффективная масса частицы (электрона в этой задаче),  $V(\vec{r})$  – профиль потенциальной энергии внутри системы,  $\delta(\vec{r})$  – дельта-функция Дирака. Функция Грина полагается равной нулю всюду на границе  $\partial\Omega$  области  $\Omega$  и удовлетворяет условиям излучения Зоммерфельда на бесконечности. Задача (1) может быть переписана в виде

$$(E - H^0 - \Sigma)G(\vec{r}, \vec{r}'; E) = \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad \vec{r}, \vec{r}' \in \Omega_D, \quad (3)$$

где  $H^0$  – гамильтониан расчетной области, а  $\Sigma$  описывает взаимодействие проводников и диэлектрической подобласти. Величина  $\Sigma$  называется собственной энергией [13]. Собственная энергия может также учитывать различные взаимодействия частиц внутри расчетной области, но в баллистическом приближении ими можно пренебречь. В этом случае собственную энергию можно представить как сумму собственных энергий  $\Sigma^\alpha$ , соответствующих проводникам.

Для решения этой задачи методом конечных элементов ее удобно представить в матричном виде:

$$G(E) = \left( EI - H^0(E) - \sum_\alpha \Sigma^\alpha(E) \right)^{-1}, \quad (4)$$

где  $I$  – единичная матрица. Явный вид матриц  $H^0$  и  $\Sigma^\alpha$  можно получить обычным способом, используя в методе конечных элементов, то

есть применяя формулу Грина к слабой форме задачи (4):

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega_D} (E - V(\vec{r}))G(\vec{r}, \vec{r}'; E)\phi(\vec{r}) dr - \\ & - \int_{\Omega_D} \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla G(\vec{r}, \vec{r}'; E), \nabla \phi(\vec{r})) dr - \\ & - \int_{\partial\Omega_D} \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla G(\vec{r}, \vec{r}'; E), \vec{n})\phi(\vec{r}) ds = \phi(\vec{r}'), \\ & \vec{r}, \vec{r}' \in \Omega_D, \end{aligned} \quad (5)$$

где  $\phi(\vec{r})$  – пробная функция,  $\vec{n}$  – внешняя нормаль к границе  $\partial\Omega_D$ . На этом этапе следует выбрать базисные функции и разложить по нему все неизвестные величины.

$$\begin{aligned} \phi(\vec{r}) &= \sum_p \phi_p(\vec{r}); \quad G(\vec{r}, \vec{r}'; E) = \\ &= \sum_k G_k(\vec{r}'; E)\phi_k(\vec{r}) = \sum_{k,l} G_{k,l}(E)\phi_l(\vec{r}')\phi_k(\vec{r}), \end{aligned} \quad (6)$$

где  $\phi_p(\vec{r})$  – базисные функции, которые в простейшем случае выбираются кусочно-линейными, а  $G_{k,l}(E)$  – коэффициенты разложения функции Грина по этому базису.

Подставляя эти выражения в (5) можно получить явные выражения для матриц, используемых в (4):

$$\begin{aligned} H_{k,l}^0 &= \int_{\Omega_D} V(\vec{r})\phi_k\phi_l dr + \int_{\Omega_D} \frac{\hbar^2}{2m} \nabla\phi_k \nabla\phi_l dr; \\ ES_{k,l} &= \int_{\Omega_D} E\phi_k\phi_l dr; \quad \Sigma_{k,l} = \int_{\partial\Omega_D} \Sigma(\vec{r})\phi_k\phi_l ds; \end{aligned} \quad (7)$$

Матрица  $S_{k,l}$  является своеобразным аналогом единичной матрицы в выбранном базисе.

Собственные энергии соответствуют интегралу по границе в выражении (5), но в то же время требуют знания производной по нормали функции Грина. Для ее нахождения в общем случае требуется решить задачу для вспомогательной функции Грина внутри полубесконечных областей, соответствующих проводникам. В одномерном же случае влияние собственных энергий в контексте метода конечных элементов проявляется в виде граничных условий Робена [13]:

$$\begin{aligned} & \int_{\partial\Omega_D} \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla G(\vec{r}, \vec{r}'; E), \vec{n})\phi(\vec{r}) ds = \\ &= \sum_\alpha \int_{\Omega_D} -\frac{i\hbar^2}{2m_\alpha} \sqrt{\frac{2m_\alpha(E - V_\alpha)}{\hbar^2}} G(\vec{r}, \vec{r}'; E)\phi(\vec{r}) ds; \quad (8) \\ & \Sigma_{k,l}^\alpha = \int_{\partial\Omega^\alpha} -\frac{i\hbar^2}{2m_\alpha} \sqrt{\frac{2m_\alpha(E - V_\alpha)}{\hbar^2}} \phi_k\phi_l ds, \end{aligned}$$

где  $\partial\Omega^\alpha$  – граница раздела между расчетной областью и проводником,  $m_\alpha$  – эффективная масса электрона в проводнике  $\alpha$ ,  $V_\alpha$  – значение потенциала в соответствующем проводнике.

Коэффициент прохождения  $T(E)$  и электрический ток  $J$  через структуру могут быть найдены из выражений

$$T(E) = \text{tr}(\Gamma^1 G \Gamma^2 G^+); \quad \Gamma^\alpha = -i(\Sigma^\alpha - \Sigma^{\alpha+});$$

$$\alpha = 1, 2, \quad J = \frac{e}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} T(E) (f_{FD}(E - \mu_1) - f_{FD}(E - \mu_2)) dE, \quad (9)$$

где  $e$  – заряд электрона,  $\Gamma^\alpha$  – диссипативная функция уширения,  $\mu_\alpha$  – химический потенциал соответствующего проводника,  $f_{FD}(E)$  – функция распределения Ферми–Дирака. Верхний индекс + обозначает эрмитово сопряжение. Для удобства можно принять уровень энергии Ферми одного из проводников равным нулю и отсчитывать все энергии от него. Таким образом, выражение для плотности тока можно переписать в виде

$$J = \frac{e}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} T(E) (f_{FD}(E) - f_{FD}(E - eV_b)) dE, \quad (10)$$

где  $V_b$  – напряжение смещения между проводниками.

Следует отметить, что в силу характера распределения Ферми–Дирака лишь конечный диапазон энергий вносит существенный вклад в выражение (10). Особое внимание следует также уделить пикам коэффициента пропускания  $T(E)$ , приходящимся на упомянутый диапазон. Эти пики могут быть учтены путем применения адаптивного шага дискретизации по энергии, как в работе [10], или через следующую задачу на собственные значения

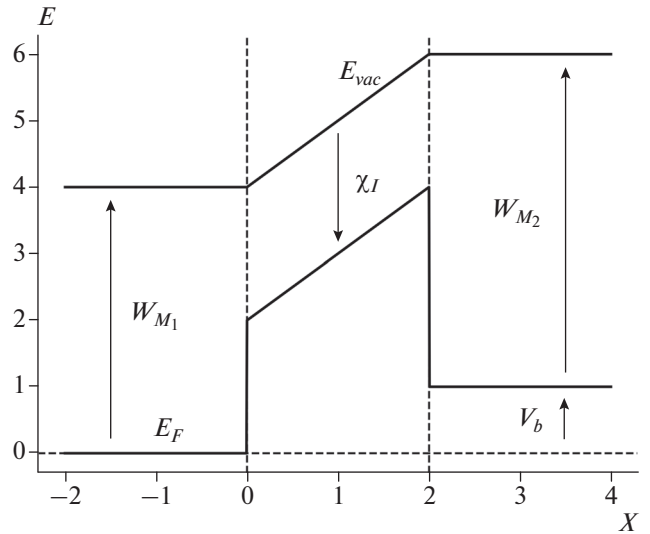
$$H^0 \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}), \quad \vec{r} \in \Omega_D, \quad (11)$$

$$\psi(\vec{r}) = 0, \quad \vec{r} \in \partial\Omega_D.$$

Эта задача также может быть решена численно. Профиль потенциального барьера может быть представлен как

$$V(\vec{r}) = V_0(\vec{r}) + U_0(\vec{r}), \quad \vec{r} \in \Omega_D, \quad (12)$$

где  $U_0$  – внешний приложенный потенциал, а  $V_0$  – профиль потенциала в структуре в отсутствие смещения. Потенциал  $V_0$  может быть получен из характеристик материалов, если допустить, что все электроны перемещаются по зонам проводимости (рис. 1).



**Рис. 1.** Профиль потенциального барьера в структуре типа металл–диэлектрик–металл. Область внутри пунктирных вертикальных линий соответствует диэлектрическому слою.  $E_F$  – уровень энергии Ферми металлов,  $E_{vac}$  – уровень энергии вакуума,  $W_{M_{1,2}}$  – работы выхода соответствующих металлов,  $\chi_I$  – средство к электрону для данного диэлектрика,  $V_b$  – приложенное напряжение,  $x$  – условная координата.

Приложенный потенциал  $U_0$  удовлетворяет уравнению Пуассона

$$\nabla(\epsilon_0 \epsilon(\vec{r}) \nabla(U_0(\vec{r}))) = en(\vec{r}), \quad \vec{r} \in \Omega_D, \quad (13)$$

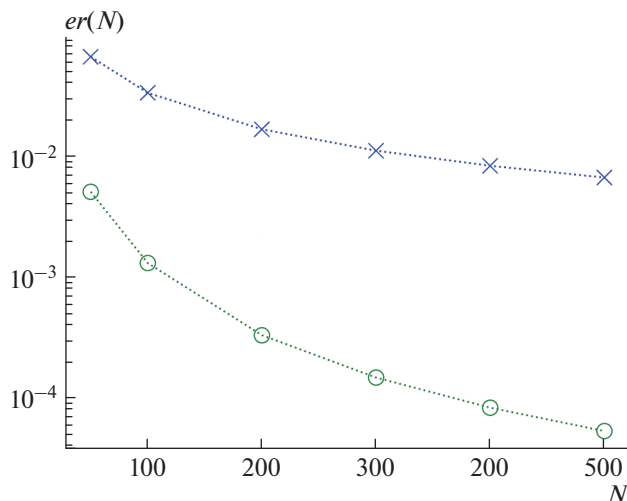
где  $n(\vec{r})$  – плотность заряда в структуре,  $\epsilon_0$  – диэлектрическая постоянная, а  $\epsilon$  – относительная диэлектрическая проницаемость. В одномерном случае при учете потенциала зарядов-изображений выражение для потенциала приобретает вид [13]:

$$V(x) = V_0(x) + U_0(x) - \frac{e^2}{16\pi\epsilon_0} \times$$

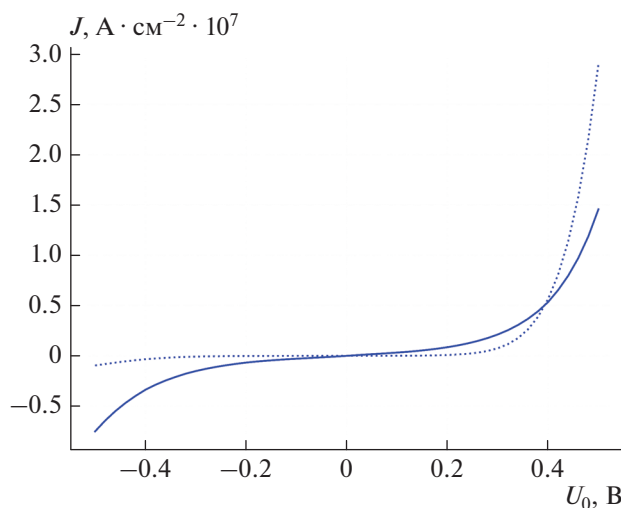
$$\times \left( \frac{1}{\int_0^x \epsilon(x') dx'} + \frac{1}{\int_x^L \epsilon(x') dx'} \right), \quad (14)$$

где  $x$  – координата внутри области расчета,  $L$  – длина структуры.

Если зарядов внутри структуры нет, задача – одномерна, а диэлектрическая проницаемость имеет кусочно-постоянный характер, то выражение для потенциала можно получить аналитически. В этой работе для сохранения общности подхода задача для потенциала решалась численно, методом конечных элементов.



**Рис. 2.** Зависимость метрики ошибки  $er(N)$  от числа узлов в сетке пространственного разбиения  $N$  для тестовых задач: прямоугольный потенциальный барьер (крестики), барьер-ступенька (кружки).



**Рис. 3.** Полученные зависимости плотности тока  $J$  от приложенного напряжения  $U_0$  для структур металл–диэлектрик–металл с учетом потенциала зарядов изображений. Сплошная линия – структура  $W-Nb_2O_5(1 \text{ нм})-Ta_2O_5-(1 \text{ нм})-W$ , пунктирная –  $W-Nb_2O_5(3 \text{ нм})-Ta_2O_5-(1 \text{ нм})-W$ .

Расчеты производились с использованием вычислительной платформы FEniCS. С ее помощью решалась задача для потенциала и получались матричные выражения для нахождения функции Грина. Описание компонентов платформы можно найти в [16–21].

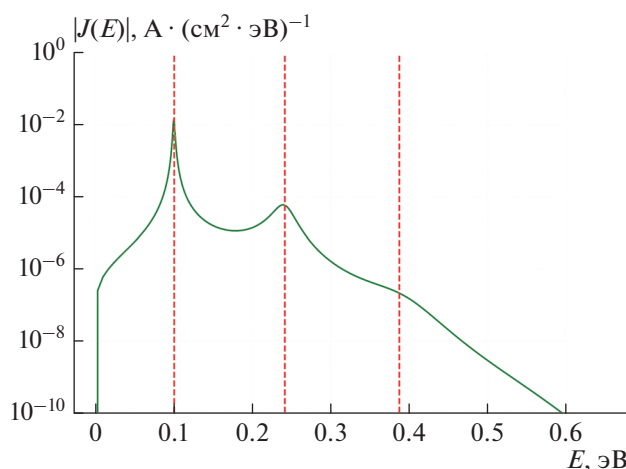
## РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Модель была протестирована на двух задачах, имеющих хорошо известное решение: задача о туннелировании через прямоугольный потенциальный барьер и задача о туннелировании через

барьер-ступеньку. Полученный при моделировании коэффициент прохождения сравнивался с точными выражениями при одних и тех же значениях энергии. Для оценки ошибки вычислений используется следующая формула [22]:

$$er(N) = \max_E |T(E) - T_0(E)|, \quad (15)$$

где  $N$  – число узлов в сетке,  $T(E)$  – полученный при моделировании коэффициент прохождения,  $T_0(E)$  – точное выражение для коэффициента прохождения для данного барьера, а значение энергии  $E$  ограничено величинами, использован-



**Рис. 4.** Абсолютная величина распределения электрического тока  $|J(E)|$  по энергии  $E$  для резонансной структуры при фиксированном напряжении смещения 0.5 В. Вертикальные пунктирные линии отмечают собственные значения гамильтониана расчетной области  $H^0$ .

ными при моделировании. Результаты представлены на рис. 2.

Также было проведено сравнение между результатами, полученными от данной модели, и данными работы [12] для структур  $W-Nb_2O_5$  (1 нм)– $Ta_2O_5$ –(1 нм)– $W$  и  $W-Nb_2O_5$  (3 нм)– $Ta_2O_5$  (1 нм)– $W$ . Последняя структура характеризуется как резонансная. Полученные для этих структур вольт-амперные характеристики представлены на рис. 3. Они хорошо согласуются с известными данными.

Можно также показать, что пики зависимости коэффициента пропускания и плотности тока от энергии для резонансной структуры соответствуют собственным значениям задачи (11), как видно на рис. 4.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе была представлена одномерная модель переноса заряда посредством квантового туннелирования в структурах типа металл–диэлектрик–металл, использующая метод конечных элементов и формализм неравновесной функции Грина. Модель была проверена на тестовых задачах. Полученные при моделировании результаты хорошо соответствуют известным для этих задач решениям.

Замечено, что задача на собственные значения, связанная с профилем потенциального барьера, может дать приблизительные энергии пиков зависимости коэффициента пропускания от энергии электронов. Эта информация может помочь сделать расчеты более точными и производительными, например, путем сокращения количества разбиений диапазона энергий, для которого производятся вычисления.

Модель также может быть расширена на большее число пространственных измерений без существенных изменений в постановке задачи. Как показано в работе [13], собственные энергии металлических контактов могут быть выражены через собственные функции подводящих проводов, например, представляя их в виде полубесконечных полос. При этом вычислительная сложность должна резко вырасти, поскольку такой характер имеют часто используемые в данной модели матричные операции. Правильная дискретизация диапазона энергии, используемого в расчете, может помочь сохранить точность и замедлить рост требуемых вычислительных ресурсов.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Shank J., Kadlec E.A., Jarecki R.L. et al. // Phys. Rev. Appl. 2018. V. 9. Art. No 054040.
2. Zhu Z., Joshi S., Moddel G. // IEEE J. Sel. Top. Quant. 2014. V. 20. Art. No 3801409.
3. Bailey R. // J. Eng. Power. 1972. V. 94. P. 73.
4. Shinohara N. // IEICE Electron. Expr. 2013. V. 10. Art. No 20132009.
5. Douyère A., Lan Sun Luk J.D., Alicapala F. // Electron. Lett. 2008. V. 44. P. 1409.
6. Joshi S., Moddel G. // J. Phys. D. 2016. V. 49. Art. No 265602.
7. Mitrovic I.Z., Weerakkody A.D., Sedghi N. et al. // Appl. Phys. Lett. 2018. V. 112. Art. No 012902.
8. Hartman T.E. // J. Appl. Phys. 1962. V. 33. Art. No 3427.
9. Moddel G., Grover S. Rectenna solar cells. N.Y.: Springer, 2013.
10. Shin J.H., Yang J.H., Heo S.J., Jang J.E. // AIP Adv. 2017. V. 7. Art. No 105307.
11. Grover S., Moddel G. // Sol. St. Electron. 2012. V. 67. P. 94.

12. Jiang H., Shao S., Cai W., Zhang P. // J. Comput. Phys. 2008. V. 227. P. 6553.
13. Havu P., Havu V., Puska M.J., Nieminen R.M. // Phys. Rev. B. 2004. V. 69. Art. No 115325.
14. Polizzi E., Datta S. // Proc. Third IEEE Conf. Nanotechnol (San Francisco, 2003). V. 2. P. 40.
15. Alnaes M.S., Blechta J., Hake J. et al. // Arch. Numer. Software. 2015. V. 3. Art. No 20553.
16. Logg A., Mardal K.-A., Wells G.N. et al. Automated solution of differential equations by the finite element method. Springer, 2012.
17. Kirby R.C., Logg A. // ACM Transact. Math. Software. 2011. V. 32. No 3. P. 417.
18. Alnaes M.S., Logg A., Olgaard K. et al. // ACM Transact. Math. Software. 2014. V. 40. P. 1.
19. Kirby R.C. // ACM Transact. Math. Software. 2004. V. 30. P. 502.
20. Alnaes M.S., Logg A., Mardal K.-A. et al. // Inter. J. Comp. Sci. Engin. 2009. V. 4. No 4. P. 231.
21. Abdolkader T.M., Shaker A., Alahmadi A.N.M. // Eur. J. Phys. 2018. V. 39. No 4. Art. No 045402.

## Metal-insulator-metal structures modelling for terahertz radiation detection

**K. T. C. Vu<sup>a,\*</sup>, G. M. Kazaryan<sup>a</sup>, V. L. Savvin<sup>a</sup>**

<sup>a</sup>*Lomonosov Moscow State University, Faculty of Physic, Moscow, 119991 Russia*

*\*E-mail: kt.vu@physics.msu.ru*

Received July 20, 2020; revised August 28, 2020; accepted September 28, 2020

Metal–insulator–metal structures are considered to be a promising candidate for rectifying elements in terahertz rectennas. This study considers a numerical model of such a structure that implements finite-element method in non-equilibrium Green's function formalism.