ИЗВЕСТИЯ ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ
Т. 55, № 9/2 ФИЗИКА 2013
УДК 539.23

А.В. ВОЙЦЕХОВСКИЙ, Д.И. ГОРН***

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ВОЛЬТ-ФАРАДНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК МДП-СТРУКТУР С КВАНТОВЫМИ ЯМАМИ CdHgTe ПРИ ТЕМПЕРАТУРАХ 8–300 К [1]

Представлено описание теоретической модели для анализа вольт-фарадных характеристик гетероструктур на основе $Cd_xHg_{1-x}Te$ (КРТ) с квантовыми ямами (КЯ), выращенных методом молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ), позволяющей производить расчёты различных параметров структуры в широком интервале температур – от 8 до 300 К.

Ключевые слова: *КРТ МЛЭ, квантовая яма, зонная диаграмма, МДП-структура, вольт-фарадная характеристика, вольт-сименсная характеристика.*

В настоящее время всё более доступными становятся экспериментальные методики проведения низкотемпературных исследований ($T \sim 8$ К) полупроводниковых гетероструктур, в том числе с квантовыми ямами, методами спектроскопии полного сопротивления, в том числе методом вольт-фарадных характеристик [1, 2].

В работе [3] приводятся результаты экспериментального исследования адмиттанса структур металл – диэлектрик – полупроводник (МДП) на основе КРТ МЛЭ с квантовыми ямами. Приводятся результаты исследований полной проводимости МДП-структур на основе КРТ МЛЭ с квантовыми ямами при температурах от 8 до 300 К. Рассматриваемые в работе структуры содержали одиночные квантовые ямы на основе HgTe толщиной 5,6 и 7,1 нм. Состав x в барьерных слоях с толщиной 30 нм составлял 0,65 и 0,62 мол. дол. соответственно. При проведении сравнения результатов измерения с данными экспериментальных исследований МДП-структур на основе КРТ без квантовых ям авторами был сделан вывод о том, что при низких температурах, близких к «гелиевым», квантовая яма может оказать существенное влияние на комплексную проводимость структуры.

Однако интерпретировать изменения, вносимые квантовой ямой, крайне сложно. Трудность заключается в том, что на настоящий момент отсутствуют теоретические модели, позволяющие производить точные количественные оценки влияния размерного квантования на свойства гетероэпитаксиальных структур КРТ МЛЭ [4, 5].

В данной работе кратко описаны основные позиции модели самосогласованного потенциала полупроводниковой гетероструктуры, основанные на совместном численном решении уравнений Пуассона и Шрёдингера для структуры с КЯ. Аналогичная модель была использована нами при расчёте спектров фотолюминесценции структур на основе КРТ с потенциальными и квантовыми ямами [6].

Моделирование проводилось с учётом реальных параметров структур, выращенных методом МЛЭ на установке «Обь-М» в Институте физики полупроводников СО РАН (г. Новосибирск). Для расчёта профиля электростатического потенциала решается уравнение Пуассона, которое для структуры КРТ МЛЭ n-типа имеет следующий вид:

$$\frac{d}{dz}\left(\varepsilon(z)\frac{d\varphi(z)}{dz}\right)=\frac{q}{\varepsilon_0}\left[n(z,\varphi)-p(z,\varphi)-N_d^{+\mathrm{int}}(z)-N_d^{+\mathrm{dop}}(z)\right], \quad (1)$$

где φ – электростатический потенциал в структуре; ε – относительная диэлектрическая проницаемость материала; n, p – концентрации электронов и дырок; $N_d^{+\mathrm{int}}$, $N_d^{+\mathrm{dop}}$ – концентрации ионизированных донорных центров, обусловленных собственными дефектами и легирующей примесью соответственно. Композиционная зависимость величины $N_d^{+\mathrm{int}}$ была определена нами ранее и имеет следующий вид [6]:

$$N_d^{+\mathrm{int}}(x)=(1{,}26x-0{,}26)\cdot 10^{16}\ [\text{см}^{-3}]. \quad (2)$$

В структурах, содержащих квантовые ямы, распределение электростатического потенциала в структуре будет определяться также концентрацией носителей заряда в подзонах размерного квантования в КЯ. Для их определения необходимо знать положение уровней размерного квантования и профили огибающих волновых функций носителей на уровнях. Эти величины определяются из одномерного стационарного уравнения Шрёдингера:

[1] Работа выполнялась при финансовой поддержке Минобрнауки РФ (ФЦП Кадры, ГК №14.B37.21.0074).

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*(z)}\frac{d^2}{dz^2}+U(z)\right]\psi_i(z)=E_i\psi_i(z), \tag{3}$$

где $\psi_i(z)$ – волновая функция на i-м уровне размерного квантования; E_i – энергия уровня размерного квантования; $U(z)$ – профиль потенциальной энергии в структуре ($E_c(z)$ для электронов, $E_v(z)$ для дырок).

Используя явный вид для выражений n, p, описывающих распределение концентрации носителей заряда в структуре с неоднородным потенциальным профилем, которые были получены нами ранее в [6], а также выражения для двумерных концентраций электронов и дырок в квантовой яме, описанные в [4], получим общий вид уравнения Пуассона для рассматриваемой структуры:

$$\frac{d^2\varphi(z)}{dz^2}=\frac{1{,}8\cdot10^{-8}}{\varepsilon(z)}\left[\begin{array}{l} n_0\exp\left(\left(q\varphi(z)+\Delta\chi(z)\right)\big/kT\right)\left(\frac{m_c^*(z)}{m_c^*}\right)^{3/2}- \\ -p_0\exp\left(-\left(q\varphi(z)+\Delta\chi(z)+\Delta E_g(z)\right)\big/kT\right)+ \\ +\sum\limits_{n=1}^{2}\frac{m_e^*kT}{\pi\hbar^2}\ln\left(\exp\left[\left(F-E_{en}\right)\big/kT\right]+1\right)\left|\psi_{en}(z)\right|^2- \\ -\sum\limits_{n=1}^{2}\frac{m_{hh}^*kT}{\pi\hbar^2}\ln\left(\exp\left[\left(E_{hhn}-F\right)\big/kT\right]+1\right)\left|\psi_{hhn}(z)\right|^2- \\ -\sum\limits_{n=1}^{2}\frac{m_{hl}^*kT}{\pi\hbar^2}\ln\left(\exp\left[\left(E_{hln}-F\right)\big/kT\right]+1\right)\left|\psi_{hln}(z)\right|^2- \\ -N_d^{+\mathrm{int}}(z)-N_d^{+\mathrm{dop}}(z). \end{array}\right]. \tag{4}$$

Положение уровней размерного квантования E_{en}, E_{hhn} и E_{hln}, а также огибающие волновых функций носителей на соответствующих уровнях ψ_{en}, ψ_{hhn} и ψ_{hln} определяются из решения стационарного одномерного уравнения Шрёдингера (3). Величины $\Delta\chi$ и ΔE_g представляют собой разности между значениями электронного сродства и шириной запрещённой зоны в рассматриваемой точке структуры с координатой z и их значениями в некоторой опорной точке в однородном слое структуры, например в барьере КЯ вдали от гетерограницы, где электростатический потенциал однороден. Композиционные и температурные зависимости для электронного сродства в КРТ, ширины запрещённой зоны и эффективных масс носителей заряда, входящих в (4), описаны в [6]. Уравнение Пуассона решалось в конечных разностях с применением метода квазилинеаризации [7].

Уравнение Шрёдингера преобразовывалось в приближении прямоугольной асимметричной потенциальной ямы с барьерами конечной высоты [5]. В результате получим уравнение для энергий уровней размерного квантования:

$$\mathrm{tg}\left[k_1\left(z-\frac{a}{2}\right)\right]=\frac{m_1^*}{m_2^*}\frac{k_2}{k_1}\ \text{– для чётных,}\ \ \mathrm{ctg}\left[k_1\left(z-\frac{a}{2}\right)\right]=-\frac{m_1^*}{m_2^*}\frac{k_2}{k_1}\ \text{– для нечётных,} \tag{5}$$

где k_1, k_2 – волновые векторы носителей в яме и барьере, а m_1^*, m_2^* – эффективные массы в яме и барьере соответственно.

На рис. 1 представлен пример использования данной методики для расчёта энергетической структуры КЯ на основе КРТ с составом в яме 0,27 и 0,36 мол. дол. и толщиной 10 нм.

Вольт-фарадную характеристику структуры МДП на основе КРТ с КЯ можно рассчитать из уравнения баланса напряжений для структуры:

$$V_{\text{МДП}}=-\frac{\varepsilon\varepsilon_0E_sS_{\text{к}}}{C_i}+\varphi_0, \tag{6}$$

где $V_{\text{МДП}}$ – падение напряжения на МДП-структуре; E_s – величина электрического поля на границе полупроводник – диэлектрик, определяемая на основе самосогласованного потенциала структуры с КЯ; $S_{\text{к}}$ – площадь контакта; C_i – ёмкость диэлектрика; φ_0 – величина поверхностного потенциала (на границе полупроводник – диэлектрик), зависящая от величины приложенного напряжения.

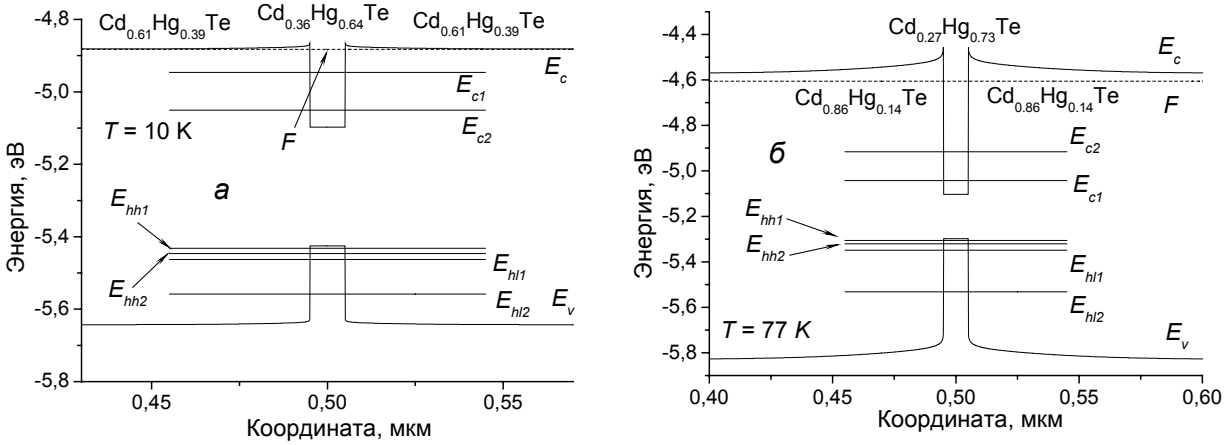

Рис. 1. Профили энергетических зон в структурах с КЯ $Cd_{0,61}Hg_{0,39}Te/Cd_{0,36}Hg_{0,64}$ (*а*) и $Cd_{0,86}Hg_{0,14}Te/Cd_{0,27}Hg_{0,73}Te$ (*б*) с толщиной ямы 10 нм при температурах 10 К (*а*) и 77 К (*б*)

Ёмкость МДП-структуры определяется как

$$C = \frac{C_i C_{\text{ОПЗ}}}{C_i + C_{\text{ОПЗ}}}, \qquad Q_{\text{ОПЗ}} = \varepsilon\varepsilon_0 S_{\text{к}} E_s . \tag{7}$$

При этом ёмкость области пространственного заряда (ОПЗ) определялась как $\Delta Q_{\text{ОПЗ}} / \Delta\varphi_0$.

Таким образом, в данной работе представлено построение физико-математической модели, позволяющей проводить численные расчёты электрофизических параметров структур КРТ МЛЭ, включающих квантовые ямы. В модели учтено наличие размерно-квантованных уровней для электронов, лёгких и тяжёлых дырок в квантовой яме.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Зубков В.И. // Петербургский журнал электроники. – 2006. – № 4. – С. 52.
2. Зубков В.И. // ФТП. – 2007. – Т. 41. – № 4. – С. 331.
3. Дзядух С.М. и др. // Изв. вузов. Физика. – 2013. – Т. 56. – № 7. – С. 56.
4. Шик А.Я. Физика низкоразмерных систем / А.Я. Шик, Л.Г. Бакуева, С.Ф. Мусихин, под. ред. А.Я. Шика. – СПб.: Наука, 2001. – 160 с.
5. Воробьев Л.Е., Ивченко Е.Л., Фирсов Д.А., Шалыгина В.А. Оптические свойства наноструктур: учеб. пособие / под ред. Е.Л. Ивченко и Л.Е. Воробьева. – СПб.: Наука. – 2001. – 188 с.
6. Войцеховский А.В. и др. // Изв. вузов. Физика. – 2012. – № 8. – С. 50.
7. Амосов А.А., Дубинский Ю.А., Копчёнова Н.В. Вычислительные методы для инженеров: учеб. пособие. – М.: Высшая школа, 1994. – 544 с.

*Национальный исследовательский Томский государственный университет,
г. Томск, Россия
**Сибирский физико-технический институт им. В.Д. Кузнецова
Национального исследовательского Томского государственного университета,
г. Томск, Россия
E-mail: vav@elefot.tsu.ru

Поступила в редакцию 15.07.13.

Войцеховский Александр Васильевич, д.ф.-м.н., профессор, зав. кафедрой.
Горн Дмитрий Игоревич, к.ф.-м.н., мл. науч. сотр.

A.V. VOITSEKHOVSKII, D.I. GORN

THERETICAL INVESTIGATION OF CAPACITY-VOLTAGE CHARACTERISTICS FOR MIS-STRUCTURES WITH CDHGTE-BASED QUANTUM WELLS UNDER THE 8–300 K

Description of theoretical model for energy-band spectrum calculation for the heteroepitaxial CdHgTe (MCT) structures grown by molecular-beam epitaxy (MBE) method with the single quantum wells (QW) is presented in this work. This computation model allows to calculate different electro-physical properties of this structures and allows to explain features of their C–V and G–V characteristics in the wide temperature range, i.e. from “helium” till room temperatures.

Keywords: *CdHgTe grown by MBE, quantum well, energy-band diagram,metal-insulator-semiconductor (MIS) structure, C–V characteristic, G–V characteristic.*