

Р.М. Пелешак, І.І. Лазурчак, М.В. Дорошенко, Н.Я. Кулик

Моделювання розподілу потенціалу в бар'єрній структурі Шотткі з вбудованим шаром квантових точок

*Дрогобицький державний педагогічний університет ім. І. Франка, вул. Стрийська 3, м. Дрогобич, 82100,
e-mail: delenkonadia@mail.ru*

Побудовано математичну модель розподілу електростатичного потенціалу в поверхнево-бар'єрній структурі виду Шотткі з вбудованим шаром квантових точок (КТ). Встановлено, що результуюче електричне поле в бар'єрній структурі виду Шотткі з вбудованим шаром КТ визначається суперпозицією двох полів: електричного поля \vec{E}_{BS} , створеного на межі контакту метал – п-напівпровідник з вбудованим шаром КТ та електричного поля \vec{E}_{QD} , зумовленого на межі поділу КТ – напівпровідникова матриця з КТ. Показано, що потенціал вздовж напрямку розміщення КТ має осциляційний характер. Період осциляції визначається кроком розміщення КТ. У напрямку, перпендикулярному до межі контакту метал – легований п-типу напівпровідник з КТ, потенціал має спадний експоненційний характер.

Ключові слова: математична модель, рівняння Пуассона.

Стаття постуила до редакції 20.07.2014; прийнята до друку 15.09.2014.

Вступ

Інтенсивний розвиток нанотехнологій в останні роки привів до необхідності побудови математичних моделей, які б описували фізико-механічні та електричні властивості наноб'єктів (2D, 1D, 0D - наногетеросистем).

У даній роботі топологія розв'язку двовимірного рівняння Пуассона буде застосована для опису розподілу електростатичного поля в наногетеросистемі з квантовими точками (КТ), зокрема, в діоді Шотткі з вбудованим шаром квантових точок [1-6]. Результати даної роботи можуть бути використані при побудові наноелектронних приладів на основі масивів КТ (InAs/GaAs, CdTe/ZnTe(ZnNe)) для прогнозованого керування їхніми електричними та оптичними характеристиками.

Для розв'язку такого виду задач широке застосування отримали скінченно-різницеві [7-9], варіаційні методи [10], метод інтегральних рівнянь [11] та функціонально-дискретні (FD) методи [12]. У роботах [1, 2] було досліджено для одновимірного випадку, без врахування деформаційних ефектів, розподіл електростатичного потенціалу $j(x)$ в області просторового заряду в околі межі контакту метал – напівпровідник GaAs з шаром квантових точок InAs [2], вольт-фарадні характеристики [2] та розподіл потенціалу і процеси транспорту в кремнієвих діодах Шотткі, які містять масив

нанокластерів германію [1].

Дана робота присвячена побудові математичної моделі та чисельному знаходженню на основі методу послідовних надрелаксацій [9] топології розподілу двовимірного електростатичного потенціалу $j(x, y)$ з врахуванням деформаційних полів, що виникають на межі КТ – матриця (~7% – InAs/GaAs; ~4% CdTe/ZnTe) в площині шару квантових точок, які вбудовані в область просторового заряду бар'єрної структури метал – легований п-напівпровідник .

I. Модель

Геометрична модель структури метал – легований донорною домішкою напівпровідник GaAs(ZnTe) з вбудованим шаром КТ (InAs, CdTe), який розміщений на відстані $x = L_d$ від поверхні металу, представлена на рис. 1. У шарі (напрямок ОУ, рис. 1) квантові точки розміщені періодично на відстані h одна від одної. Початок координати x відраховується від межі контакту метал – напівпровідник у напрямку напівпровідника.

Однією з основних характеристик діода Шотткі є висота потенціального бар'єру j_{BS} на межі метал – напівпровідник. Висоту потенціального бар'єру можна змінювати способом введення в напівпровідникову матрицю (п - GaAs) шару КТ InAs. Границю збідненого шару ($V = 0$) можна

оцінювати із співвідношення
 $W(V=0) \approx \sqrt{(2\epsilon\epsilon_0 / eN_d)(\phi_{BS} - kT / e)}$ [1].

Топологія розподілу потенціалу $j(x, y)$ в бар'єрній структурі метал – n-напівпровідник, який

містить шар квантових точок, пропонується описувати на основі розв'язку такого двовимірного рівняння Пуассона:

$$\frac{\partial^2 \phi_1}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi_1}{\partial y^2} = -\frac{eN_d}{\epsilon_d^{(i)} \epsilon_0} + \frac{eN_{QD}}{\epsilon_d^{(i)} \epsilon_0 L_d} \delta\left(\frac{x}{L_d} - 1\right) \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta\left(\frac{y}{h} - 1\right), \quad i = \begin{cases} 1 \equiv \text{InAs}, \\ 2 \equiv \text{GaAs}, \end{cases} \quad (1)$$

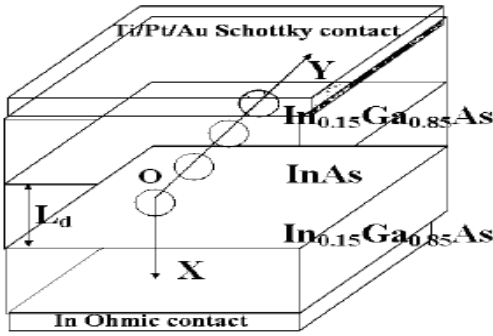


Рис. 1. Геометричне представлення діоду Шотткі – структури метал – напівпровідник з вбудованим шаром квантових точок.

та крайових умов:

$$\begin{aligned} j(0, x) &= j_{BS}, \\ j(L_x, y) &= 0, \\ j(x, 0) &= j_{BS} - \frac{1}{2} \frac{eN_d}{2e\epsilon_0} x^2, \\ j(x, L_y) &= j_{BS} - \frac{1}{2} \frac{eN_d}{2e\epsilon_0} x^2, \end{aligned} \quad (2)$$

де $\epsilon_d^{(i)}$ – відносна діелектрична проникність і-того

матеріалу наногетеросистеми; ϵ_0 – діелектрична стала; e – заряд електрона; N_{QD} – поверхнева густина квантових точок; N_d – концентрація донорів; L_d – відстань від металу до шару КТ; h – відстань між квантовими точками в напрямку OY; j_{BS} – висота потенціального бар'єру на межі метал – напівпровідник.

У правій частині рівняння (1) перший доданок описує густину заряду іонізованої домішки, другий доданок – густину заряду, зумовлену захопленням електронів у стани квантових точок, які виникають за рахунок просторового квантування та виникненням дискретного спектру у квантовій точці. Ці стани локалізовані в просторі, тому густину заряду в квантових точках можна змодельовувати за допомогою суми добутку двох узагальнених функцій.

За правилом сумування за Пуассоном ряд з узагальнених функцій $\sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(y - nh)$ можна звести до вигляду:

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(y - nh) = \frac{1}{|h|} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \delta\left(\frac{y}{h} - z\right) e^{2\pi i k z} dz = \frac{1}{|h|} \left(1 + 2 \sum_{k=1}^{\infty} \cos 2\pi k \frac{y}{h} \right) \quad (3)$$

Підставивши співвідношення (3) у рівняння (1) та здійснивши перехід до безрозмірних величин отримуємо двовимірне рівняння Пуассона:

$$\frac{\partial^2 \phi_1}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi_1}{\partial y^2} = -1 + \frac{N_{QD}}{N_d L_d} \delta\left(\frac{x}{L_d} - 1\right) \left(1 + 2 \sum_{k=1}^{\infty} \cos 2\pi k \frac{y L_d}{h} \right), \quad (4)$$

з такими крайовими умовами:

$$\begin{aligned} \tilde{j}(0, x) &= \tilde{j}_{BS}, \\ \tilde{j}(\tilde{L}_x, y) &= 0, \\ \tilde{j}(x, 0) &= \tilde{j}_{BS} - \frac{1}{2} \tilde{x}^2, \\ \tilde{j}(x, \tilde{L}_y) &= \tilde{j}_{BS} - \frac{1}{2} \tilde{x}^2, \end{aligned} \quad (5)$$

де $\frac{x}{L_d}, \frac{y}{L_d}, \frac{\phi_x}{L_d}, \frac{\phi_y}{L_d}, \frac{\phi}{\phi_0}, \phi_0 = \frac{\epsilon\epsilon_0}{eN_d} \frac{\epsilon\epsilon_0}{eN_d} (L_d)^2$.

Розв'язування крайової задачі (4)–(5) здійснюється на основі методу послідовних надрелаксацій [9]. Для апроксимації двовимірного рівняння Пуассона прямокутна область $(0 \leq x \leq L_x, 0 \leq y \leq L_y)$ розбивається рівномірною

сіткою, на вузлах якої використовується п'ятиточкова різницева схема.

Для знаходження розподілу потенціалу у внутрішніх вузлах сітки використовується наступна ітераційна різницева схема:

$$\phi_{i,j}^{k+1} = \phi_{i,j}^k + p \left(\frac{\phi_{i+1,j}^k + \phi_{i-1,j}^k + \phi_{i,j+1}^k + \phi_{i,j-1}^k - 4\phi_{i,j}^k - h^2 g_{i,j}}{4} \right) = \phi_{i,j}^k + pr_{i,j}^k, \quad (6)$$

де $i = 1, 2, \dots, n-1; j = 1, 2, \dots, m-1, k = 0, 1, \dots; R_0$ – радіус КТ;

$$g_{i,j} = -1 + \frac{N_{OD}}{N_d} \frac{1}{\sqrt{p} R_0} e^{-(L_d / R_0)^2 (\tilde{x}_i - 1)^2} \left(1 + 2 \sum_{k=1}^{\infty} \cos \left(2pk \frac{\tilde{y}_j L_d}{h} \right) \right),$$

а крайові умови представлялись таким чином:

$$\begin{aligned} j_{0,j} &= \tilde{J}_{BS}, \\ j_{n,j} &= 0, \\ j_{i,0} &= \tilde{J}_{BS} - \frac{1}{2} \tilde{x}_i^2, \\ j_{i,m} &= \tilde{J}_{BS} - \frac{1}{2} \tilde{x}_i^2, \\ i &= 1, \dots, n; j = 1, \dots, m. \end{aligned} \quad (7)$$

У методі послідовних надрелаксацій коефіцієнт p може приймати значення $1 \leq p < 2$. Оптимальне значення параметра p обчислюється за допомогою формули (див.[9]):

$$p = \frac{4}{2 + \sqrt{4 - \left(\cos \left(\frac{\pi}{n-1} \right) + \cos \left(\frac{\pi}{m-1} \right) \right)^2}} \quad (8)$$

Умовою зупинки ітераційної розрахункової схеми (6)–(7) є виконання такої нерівності:

$$\|r\| \leq \epsilon, \quad (9)$$

де $\|r\| = \max_{i,j} \left| r_{i,j}^{(k)} \right|, \quad \epsilon > 0.$

II. Аналіз одержаних результатів

Алгоритм (6)–(9) розв'язування рівняння Пуассона (4) з крайовими умовами Діріхле (5) був реалізований в системі комп'ютерної математики (СКМ) Matlab.

На рисунках 2а, 3а приведені чисельні

розрахунки розподілу електростатичного потенціалу $j(x, y)$ в площині XY шару квантових точок (InAs), вбудованих у область просторового заряду в напівпровіднику n-типу (GaAs) на відстанях $0 \leq x \leq W$ від межі контакту метал – легований n-типу напівпровідник. Квантові точки розміром R_0 технологічно вбудовані в шар напівпровідника на відстані $x = L_d$ від металу. Як видно (рис. 2,а, 3,а)

потенціал $j(y)$ (рис. 2,с, $x = \left\{ 50 \text{ \AA}, 100 \text{ \AA}, 150 \text{ \AA}, 200 \text{ \AA}, 250 \text{ \AA}, \right\}$) вздовж

напрямку розміщення КТ в напрямку OY має осциляційний характер з періодом h , причому, період осциляції визначається кроком розміщення КТ, а в напрямку OX, перпендикулярному до межі контакту метал – легований n-типу напівпровідник, потенціал $j(x)$ (рис. 2,д,

$y = \left\{ 50 \text{ \AA}, 100 \text{ \AA}, 150 \text{ \AA}, 200 \text{ \AA}, 250 \text{ \AA}, \right\}$) має

немонотонний характер.

Результати дослідження розподілу електронної густини в околі межі поділу КТ (InAs) – напівпровідникова матриця (GaAs) показали [6], що розподіл поверхневої густини заряду $S(y)$, вздовж періодично розміщених квантових точок, можна представити у вигляді періодичної кусково-постійної функції. В межах цього наближення потенціал $j(x)$ в напрямку, перпендикулярному до межі контакту метал – легований n-типу напівпровідник (OX) описується експоненційною залежністю

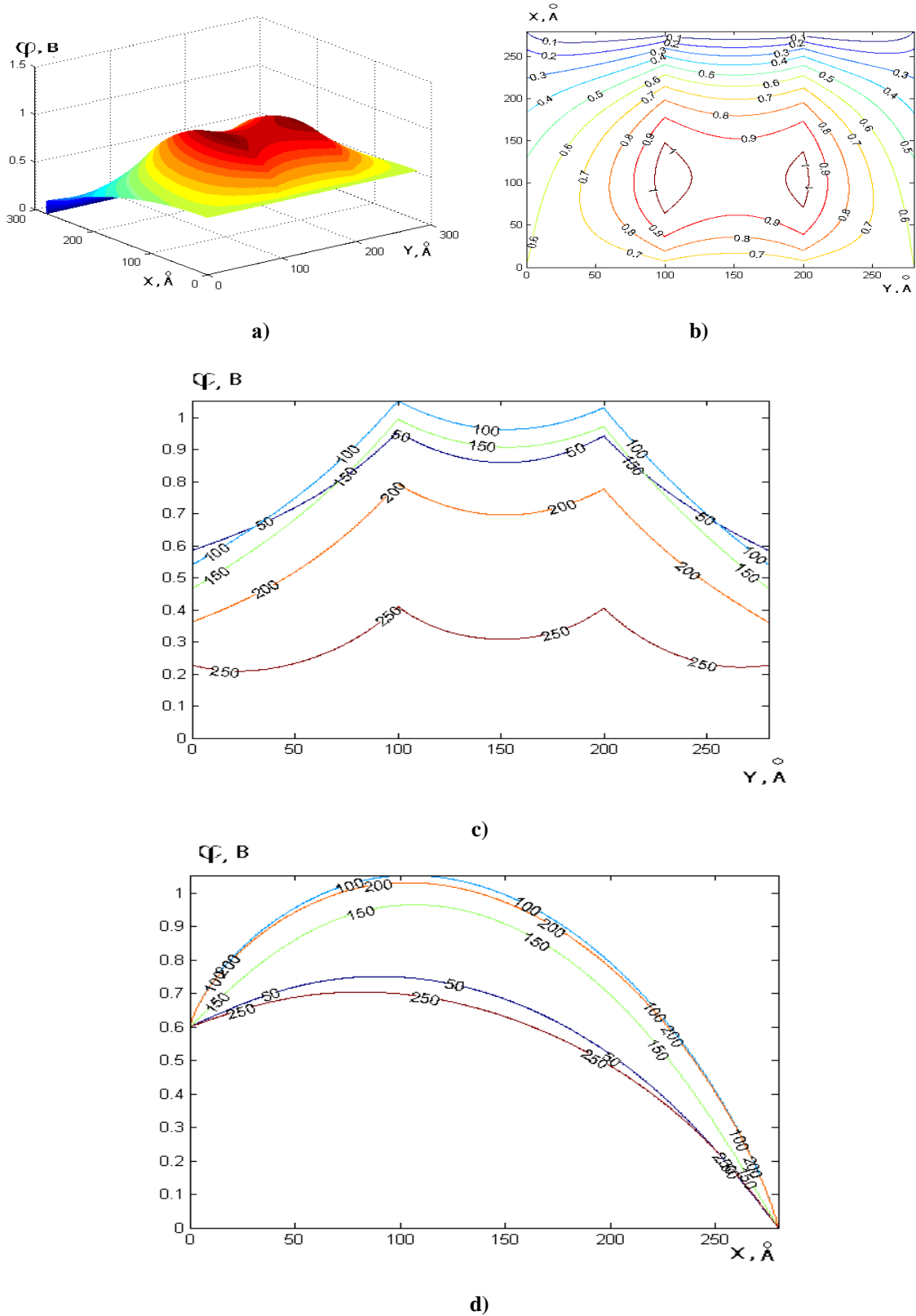


Рис. 2. Топологія розподілу електростатичного потенціалу в бар'єрній структурі Шоткі з вбудованим шаром квантових точок у області просторового заряду (а), екіпотенціальних ліній в околі квантових точок (б), координатна залежність розподілу електростатичного потенціалу вздовж напрямку розміщення КТ в напрямку ОУ (с) та в напрямку, перпендикулярному до межі контакту метал-легований n-типу в напрямку осі ОХ (д)

$$j_{BS} = 0.6B; L_d = 40 \text{ \AA}; h = 100 \text{ \AA}; R_0 = 30 \text{ \AA}; N_d = 10^{18} \text{ cm}^{-3}.$$

$\exp(-\alpha|x|)$ [13].

На рис. 2b,3b приведені числові розрахунки екіпотенціальних ліній в околі квантових точок при різних значеннях параметрів j_{BS}, L_d, h, R_0, N_d , які реалізуються у експерименті [1, 14] (значення цих параметрів приведені у підписах до рисунків). Аналіз розрахунків екіпотенціальних ліній в бар'єрній структурі Шотткі з вбудованим шаром КТ показує (рис.2b, 3b), що крім електричного поля \vec{E}_{BS} , створеного на межі контакту метал – n-напівпровідник існує ще електричне поле \vec{E}_{QD} утворене на межі розділу КТ – напівпровідникова матриця [6]. Результуюче електричне поле в бар'єрній структурі Шотткі з вбудованим шаром КТ визначається суперпозицією цих двох полів $\vec{E}_R = \vec{E}_{BS} + \vec{E}_{QD}$. Топологія розподілу екіпотенціальних ліній (рис. 2,b, 3,b) показує, що x - складова напруженості результуючого електричного поля в області просторового заряду між металом і шаром КТ визначається різницею

складових електричних полів, створених на межі контакту метал – напівпровідник та на межі контакту КТ – матриця $E_R^x = E_{BS}^x + E_{QD}^x$. У напрямку, паралельному до межі розділу метал – n-напівпровідник, у – складова напруженості результуючого електричного поля E_R^y має періодичний характер і в площинах $y_n = (2n+1)\frac{h}{2}$ ($n=0,1,2,\dots$) – $E_R^y = 0$. Зокрема, при значеннях параметрів $j_{BS} = 0.6B, L_d = 40 \text{ \AA}; h = 100 \text{ \AA}; R_0 = 30 \text{ \AA}; N_d = 10^{18} \text{ см}^{-3}$; x – компонента результуючого електричного поля (E_R^x) поблизу межі метал – n- напівпровідник становить $5,5 \cdot 10^5 \text{ В/см}$, а поблизу площини КТ – $4 \cdot 10^5 \text{ В/см}$. З приведених досліджень розподілу електростатичного потенціалу в бар'єрній структурі Шотткі з вбудованим шаром квантових точок випливає, що наявність періодично розміщених

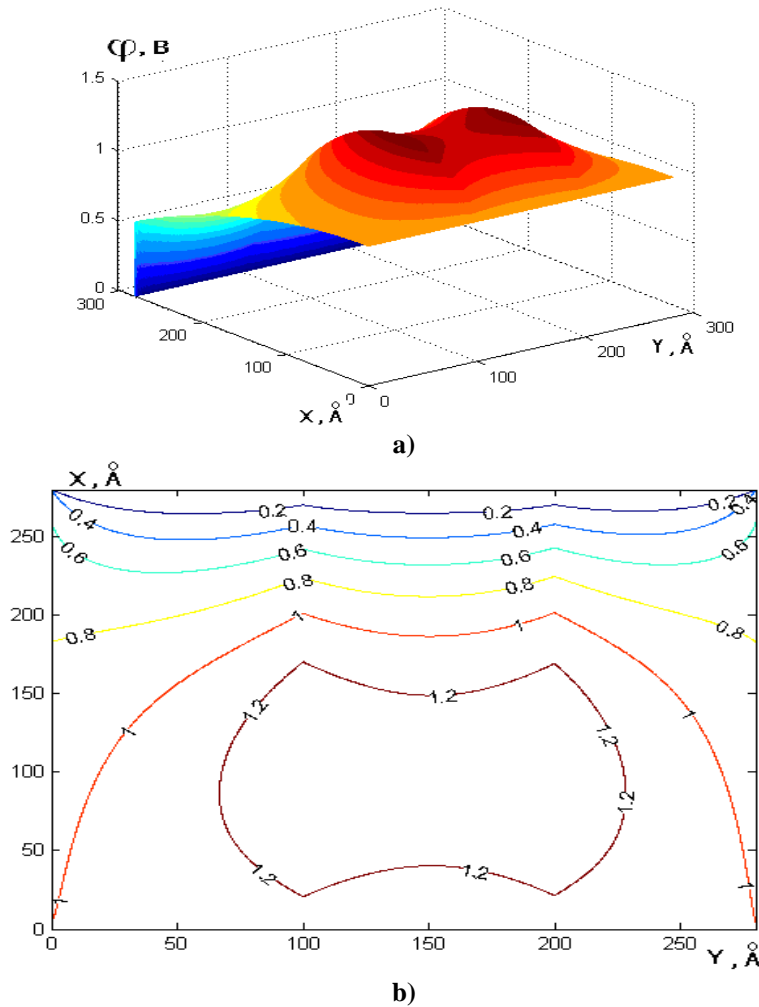


Рис. 3. Топологія розподілу електростатичного потенціалу в бар'єрній структурі Шотткі з вбудованим шаром квантових точок у область просторового заряду (а), екіпотенціальних ліній в околі квантових точок (b) $j_{BS} = 1B ; L_d = 40 \text{ \AA}; h = 100 \text{ \AA}; R_0 = 30 \text{ \AA}; N_d = 10^{18} \text{ см}^{-3}$.

Таблиця 1

Кількість ітерацій при різних значення p

$p = 1$	$p = 1,5$	p – визначається за формулою (8)
1335	1158	1051

квантових точок в області просторового заряду приводить до виникнення в напівпровіднику, паралельно межі контакту метал – напівпровідник, періодичних n - n + або p - n переходів. Крім цього, як показують результати експериментальних досліджень вольт-амперні характеристики діодів Шотткі з вбудованим шаром квантових точок мають S -подібний характер [15] при умові, що шар квантових точок знаходиться на відстанях від межі контакту метал – напівпровідник порядку $(10-30)a_0$ де a_0 – період ґратки напівпровідника.

Завдяки наявності квантових точок в бар'єрній структурі Шотткі можна підвищити коефіцієнт корисної дії (ККД) елементів сонячних батарей, побудованих на основі поверхневих бар'єрних структур з вбудованим шаром КТ [16].

Також були проведені чисельні дослідження швидкості збіжності ітераційної розрахункової схеми (6)–(9) при різних значеннях параметра p (кількість

ітерацій при різних значення p , при якому точність чисельного розв'язку не перевищує 0.0001, приведені в таблиці 1).

Висновки

Побудовано математичну модель розподілу двовимірного потенціалу в діоді Шотткі з вбудованим шаром квантових точок.

Показано, що вздовж напрямку розміщення квантових точок (ОУ) потенціал має осцилюючий характер з періодом h , який визначається характером розміщення квантових точок, а в напрямку, перпендикулярному до межі контакту метал–легований n -типу напівпровідник, описується експоненційною залежністю $e^{-a|x|}$.

Пелешак Р.М. - доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач кафедри загальної фізики;
Лазурчак І.І. - доктор фізико-математичних наук, доцент, завідувач кафедри інформатики та обчислювальної математики;
Дорошенко М.В. - кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри інформатики та обчислювальної математики;
Кулик Н.Я. – аспірант.

- [1] A.I.Jakimov, A.V.Dvurechenskij, A.I. Nikiforov, S.V. Chajkovs'kij, Pis'ma v ZhJeTF 75(2), 113 (2002).
- [2] S.D.Lin, V.V.Ilchenko, V.V.Marin, Appl. Phys. Lett. 90, 263114 (2007).
- [3] A. V. Dvurechenskij, A. I. Jakimov, UFN 171(12), 1371 (2001).
- [4] N.N. Ledencov, V.M. Ustinov, V.A. Shhukin ta insh., FTP 32(4), 385 (1998).
- [5] I.V. Stasjuk, R.M. Peleshhak, UFZh 39(7), 856 (1994).
- [6] R.M. Peleshchak, I.Ya. Bachynsky, Condensed Matter Physics 12(2), 215 (2009).
- [7] V.D. Bejbalaev, Vestn. Sam. gos. tehn. un-ta. Ser. Fiz.- mat. nauki 2(27), 183 (2012).
- [8] M.V. Kutniv, Chisel'ni metodi (Rastr-7, L'viv, 2010).
- [9] D.G. Mjet'juz, K.D. Fink, Chislennye metody. Ispol'zovanie Matlab (Vil'jams, M.-SPb.-K., 2001).
- [10] Ju.T. Glazunov, Variacionnye metody (RHD, Moskva, 2006).
- [11] B.A. Ostudin, Ju.M. Sibil', A.V. Romanenko, Visnik L'viv. un-tu. Ser. prikl. matem. ta inform. 6, (2003).
- [12] V.L. Makarov, DAN SSSR 320(320), 34 (1991).
- [13] V.I. Shashkin, A.V. Murel', V.M. Danil'cev, FTP 36(5), 537 (2002).
- [14] L.I. Antonov, L.G. Dedenko, A.N. Matveev, Metodika reshenija zadach po jelektrichestvu (MGU, Moskva, 1982).
- [15] K.Yoh, H. Kazama, Y. Kitashou, T. Nekano, Phys.Stat.Sol.(b) 204 (1), 378 (1997).
- [16] H.W. Li, T.H. Wang, Physica B: Condensed Matter 301(1-4), 174 (2001).