

# Квантовый самосогласованный расчет дифференциальной емкости полупроводниковой пленки

© Д.Е. Цуриков<sup>✉</sup>, А.М. Яфясов<sup>✉✉</sup>

Санкт-Петербургский государственный университет (физический факультет),  
198504 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 7 июня 2012 г. Принята к печати 13 декабря 2012 г.)

В рамках самосогласованного решения уравнений Шрёдингера и Пуассона предложена быстрая схема вычисления поверхностной дифференциальной емкости полупроводниковой пленки в случае омического контакта на тыльной стороне. Метод рассмотрен на примере германия. Сравнение с результатами феноменологического расчета выявило специфику влияния эффектов размерного квантования на вольт-фарадную характеристику пленки.

## 1. Введение

Современные технологии позволяют формировать полупроводники с практически идеальной поверхностью (однородной, без поверхностных состояний и дефектов). В совокупности с высокоточными измерениями электрофизических характеристик это дает возможность детально исследовать явление размерного квантования в области пространственного заряда (ОПЗ). В связи с этим возрастают требования к точности сопровождающих эксперимент расчетов.

История расчетов ОПЗ полупроводников с учетом размерного квантования носителей заряда насчитывает более 40 лет [1–11]. Исторически первый метод модельных потенциалов [1,5–7] прост в реализации, но имеет низкую точность. Поэтому он малоприменим для количественного анализа результатов современных экспериментов. Для этих целей предпочтителен подход, основанный на самосогласованном решении уравнений Шрёдингера и Пуассона [2–11]. Однако его применение в режиме реального времени, в частности при автоматизированном измерении дифференциальной емкости в зависимости от поверхностного потенциала, имеет ряд трудностей. Они связаны с низкой скоростью расчетов и с неустойчивостью схемы в широких диапазонах значений параметров задачи. Для решения этих вопросов нужны специальные алгоритмы вычислений на основе оптимальных численных методов.

В данной работе предложена быстрая устойчивая схема квантового самосогласованного расчета вольт-фарадной характеристики (ВФХ) полупроводниковой пленки. Она позволяет корректно проследить специфику перехода от квантовой теории ОПЗ [1–13] к классической [12,14,15]. Подход проиллюстрирован расчетами и сравнительным анализом ВФХ пленки германия.

## 2. Постановка задачи

Рассмотрим однородно легированную полупроводниковую пленку, предполагая отсутствие поверхностных

состояний, полную ионизацию примесей и омический контакт с металлом на тыльной стороне (рис. 1). Найдем ее поверхностную дифференциальную емкость  $C$ :

$$C = -dQ/dV_S, \quad (1)$$

$$Q = \int_0^L dz \rho(z), \quad (2)$$

$$\rho(z) = e_0 n_d - e_0 n_a + e_0 n^+(z) - e_0 n^-(z), \quad (3)$$

где  $Q$  — поверхностная плотность заряда,  $V_S$  — электростатический потенциал на лицевой стороне пленки,  $\rho$  — объемная плотность заряда,  $e_0$  — элементарный заряд,  $n_d$ ,  $n_a$  — концентрации ионизованных донорной и акцепторной примесей соответственно,  $n^\pm$  — концентрации носителей заряда (здесь и везде далее верхний индекс «-» отвечает электронам, «+» — дыркам).

Используя классическое приближение для описания движения носителей заряда в плоскости пленки, выражения для их концентраций запишем в виде [4]

$$n^-(z) = n_{\parallel}^- \sum_{n=1}^{\infty} |\varphi_{\perp n}^-(z)|^2 F_0 \left( \frac{E_F - E_C - E_{\perp n}^-}{k_0 T} \right), \quad (4)$$

$$n^+(z) = n_{\parallel}^+ \sum_{n=1}^{\infty} |\varphi_{\perp n}^+(z)|^2 F_0 \left( \frac{E_V - E_F - E_{\perp n}^+}{k_0 T} \right), \quad (5)$$

$$n_{\parallel}^\pm = \frac{m_{\parallel}^\pm k_0 T}{\pi \hbar^2}, \quad (6)$$

где  $m_{\parallel}^\pm$  — эффективные массы носителей заряда в плоскости пленки,  $k_0$  — постоянная Больцмана,

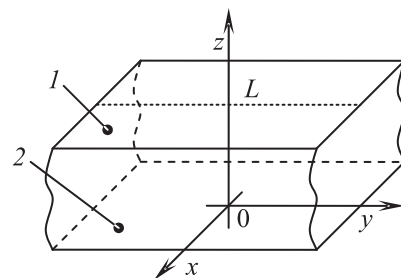


Рис. 1. Условное изображение полупроводниковой пленки: 1 — тыльная сторона, 2 — лицевая сторона,  $L$  — толщина.

<sup>✉</sup> E-mail: DavydTsurikov@mail.ru

<sup>✉✉</sup> E-mail: yafyasov@bk.ru

$T$  — температура кристалла,  $\hbar$  — постоянная Планка,  $F_0(\eta) = \ln(1 + e^\eta)$  — интеграл Ферми–Дирака порядка 0,  $E_F$  — уровень Ферми,  $E_C$  и  $E_V$  — энергии краев зоны проводимости и валентной зоны соответственно. Волновые функции носителей заряда  $\varphi_{\perp}^{\pm}$  и их уровни энергии  $E_{\perp}^{\pm}$  можно найти из уравнения Шрёдингера:

$$\begin{cases} \left[ -\frac{\hbar^2}{2m_{\perp}^{\pm}} \partial_z^2 + U^{\pm}(z) \right] \varphi_{\perp}^{\pm}(z) = E_{\perp}^{\pm} \varphi_{\perp}^{\pm}(z), & z \in (0, L), \\ \varphi_{\perp}^{\pm}(0) = \varphi_{\perp}^{\pm}(L) = 0, \end{cases} \quad (7)$$

$$U^{\pm} = \pm e_0 V, \quad (8)$$

где  $m_{\perp}^{\pm}$  — эффективные массы носителей заряда перпендикулярно пленке,  $V$  — электростатический потенциал.

Согласно (4)–(8),  $n^{\pm}$  неявно зависят от потенциала  $V$ . Его можно найти из уравнения Пуассона:

$$\begin{cases} V''(z) = -\frac{1}{\epsilon \epsilon_0} \rho(z), & z \in (0, L), \\ V(0) = V_S, & V(L) = 0, \end{cases} \quad (9)$$

где  $\epsilon$  — диэлектрическая проницаемость пленки,  $\epsilon_0$  — электрическая постоянная. Потенциал является самосогласованным, так как он определяет пространственное распределение концентраций носителей заряда в пленке и при этом зависит от него.

Самосогласованный расчет потенциала  $V$  осуществляется следующим образом. На первой итерации задается потенциал  $V_1$  как результат численного решения уравнения Пуассона в классическом приближении [15]. На основе  $V_1$  вычисляется объемная плотность заряда  $\rho_1$  согласно (3)–(7). Следующие итерации организуются по схеме

$$V_{n+1} = \frac{1}{2}(V_n + \tilde{V}_{n+1}), \quad (10)$$

$$\begin{cases} \tilde{V}_{n+1}''(z) = -\frac{1}{\epsilon \epsilon_0} \rho_n(z), & z \in (0, L), \\ \tilde{V}_{n+1}(0) = V_S, & \tilde{V}_{n+1}(L) = 0. \end{cases} \quad (11)$$

Интегрируя правую часть уравнения (11) с учетом граничных условий, получим

$$\tilde{V}_{n+1}(z) = V_S + \left[ \int_0^L dz_1 \mathcal{E}_n(z_1) - V_S \right] \frac{z}{L} - \int_0^z dz_1 \mathcal{E}_n(z_1), \quad (12)$$

$$\mathcal{E}_n(z) = \frac{1}{\epsilon \epsilon_0} \int_0^z dz_1 \rho_n(z_1). \quad (13)$$

### 3. Специфика квантового самосогласованного расчета

Перед расчетом ВФХ найдем уровень Ферми в пленке из уравнения электронейтральности:

$$Q = 0, \quad V_S = 0. \quad (14)$$

С учетом (2)–(5) и нормировки волновых функций

$$\int_0^L dz |\varphi_{\perp n}^{\pm}(z)|^2 = 1, \quad n \in \mathbb{N}, \quad (15)$$

поверхностная плотность заряда примет вид

$$\begin{aligned} Q = & e_0(n_d - n_a)L + e_0 n_{\parallel}^{+} \sum_{n=1}^{\infty} F_0\left(\frac{E_V - E_F - E_{\perp n}^{+}}{k_0 T}\right) \\ & - e_0 n_{\parallel}^{-} \sum_{n=1}^{\infty} F_0\left(\frac{E_F - E_C - E_{\perp n}^{-}}{k_0 T}\right). \end{aligned} \quad (16)$$

Согласно (16), уравнение (14) является самосогласованным: при  $V_S = 0$  потенциал в пленке отличен от нуля. Это приводит к изгибу зон [1] и отклонению уровней энергии  $\{E_{\perp n}^{\pm}\}_{n=1}^{\infty}$  от уровней энергии прямоугольной потенциальной ямы:

$$\tilde{E}_{\perp n}^{\pm} = \frac{\hbar^2}{2m_{\perp}^{\pm}} \left(\frac{\pi n}{L}\right)^2, \quad n \in \mathbb{N}. \quad (17)$$

Как показали расчеты, на положение уровня Ферми этот эффект влияет слабо. Поэтому, полагая  $E_{\perp n}^{\pm} \approx \tilde{E}_{\perp n}^{\pm}$ , с учетом (14), (16) и (17) для поиска  $E_F$  можно использовать приближенное уравнение электронейтральности:

$$\begin{aligned} 0 = & e_0(n_d - n_a)L + e_0 n_{\parallel}^{+} \sum_{n=1}^{\infty} F_0\left(\frac{E_V - E_F - \tilde{E}_{\perp n}^{+}}{k_0 T}\right) \\ & - e_0 n_{\parallel}^{-} \sum_{n=1}^{\infty} F_0\left(\frac{E_F - E_C - \tilde{E}_{\perp n}^{-}}{k_0 T}\right). \end{aligned} \quad (18)$$

Оно позволяет повысить скорость вычислений в силу отсутствия самосогласования при поиске уровней энергии.

В численных расчетах для концентраций носителей заряда вместо выражений (4) и (5) используются

$$n_K^{-}(z) = n_{\parallel}^{-} \sum_{n=1}^K |\varphi_{\perp n}^{-}(z)|^2 F_0\left(\frac{E_F - E_C - E_{\perp n}^{-}}{k_0 T}\right), \quad (19)$$

$$n_K^{+}(z) = n_{\parallel}^{+} \sum_{n=1}^K |\varphi_{\perp n}^{+}(z)|^2 F_0\left(\frac{E_V - E_F - E_{\perp n}^{+}}{k_0 T}\right). \quad (20)$$

Верхние пределы суммирования находим, удваивая  $K$ , пока не будет выполнено условие

$$|Q_K^{\pm} - Q_{K/2}^{\pm}| < \delta_Q |Q_{K/2}^{\pm}|, \quad (21)$$

$$Q_K^{\pm} = \pm e_0 \int_0^L dz n_K^{\pm}(z), \quad (22)$$

где  $\delta_Q$  — заданная относительная погрешность вычисления поверхностной плотности заряда. Конечное значение  $K$  может быть различным для электронов и дырок. Это связано с особенностями расположения их уровней

энергии при данном потенциале. Предложенный подход позволяет ограничиться расчетом только тех уровней энергии, которые существенно влияют на заряд в ОПЗ. В результате выражение для объемной плотности заряда в (13) примет вид

$$\rho \approx e_0(n_d - n_a) + e_0n_K^+ - e_0n_K^-. \quad (23)$$

По аналогии с (21) запишем условие выхода их самосогласованной процедуры как

$$|Q_M - Q_{M-1}| < \delta_Q |Q_{M-1}|, \quad (24)$$

где  $Q_M$  — поверхностная плотность заряда, рассчитанная на  $M$ -й итерации.

## 4. Расчет уровней энергии носителей заряда

### 4.1. Безразмерная задача

В основе самосогласованной процедуры расчета лежит численное решение задачи (7). Запишем ее в безразмерном виде. Введем безразмерную координату и толщину пленки,

$$\xi = z/L_D, \quad \lambda = L/L_D, \quad (25)$$

где  $L_D$  — длина дебаевского экранирования [15], энергии и потенциал,

$$\varepsilon = 2m_{\perp}^{\pm} \hbar^{-2} L_D^2 E_{\pm}^{\pm},$$

$$v(\xi) = 2m_{\perp}^{\pm} \hbar^{-2} L_D^2 U^{\pm}(L_D \xi), \quad (26)$$

волновые функции  $\psi$  с нормировкой

$$\int_0^{\lambda} d\xi |\psi(\xi)|^2 = 1. \quad (27)$$

Из (15), (25) и (27) получим

$$\varphi_{\pm}^{\pm}(z) = L_D^{-1/2} \psi(z/L_D). \quad (28)$$

Согласно (25), имеем

$$\partial_z = L_D^{-1} \partial_{\xi}. \quad (29)$$

Тогда безразмерная задача на собственные функции и собственные значения примет вид

$$\begin{cases} [-\partial_{\xi}^2 + v(\xi)]\psi(\xi) = \varepsilon\psi(\xi), & \xi \in (0, \lambda), \\ \psi(0) = 0, & \psi(\lambda) = 0. \end{cases} \quad (30)$$

Задачу (30) будем решать методом стрельбы [16]. Он состоит в решении задачи Коши, поставленной на одном конце интервала  $(0, \lambda)$ , и поиске таких значений  $\varepsilon$ , при которых выполняется граничное условие на другом конце. Потенциал в (30) является монотонным.

Стрельба со стороны его максимального значения  $v_{\max}$  в сторону минимального  $v_{\min}$  даст лучшее выполнение граничного условия. Перед переходом от (7) к (30) применим правило смены системы координат:

$$z \mapsto \begin{cases} z, & \pm V_S \leq 0, \\ L - z, & \pm V_S > 0. \end{cases} \quad (31)$$

Тогда потенциал в (30) всегда будет возрастающим и стрельба будет из точки  $\xi = \lambda$  в точку  $\xi = 0$  (справа налево).

### 4.2. Численное решение задачи Коши

Рассмотрим состояния носителя заряда с энергией  $v_{\min} < \varepsilon < v_{\max}$ . Их волновые функции под потенциальным барьером быстро спадают и вблизи точки  $\xi = \lambda$  могут оказаться пренебрежимо малыми. Организуем алгоритм формального смещения правой границы и выбора на ней значения производной волновой функции в задаче Коши. Это позволит повысить скорость и устойчивость расчетов.

В основе подхода лежит аппроксимация волновой функции в интервале под барьером  $[\xi_+, \lambda]$ , где  $\xi_+$  — правая точка поворота:  $v(\xi_+) = \bar{\varepsilon}$ ,  $\bar{\varepsilon}$  — начальное приближение к собственному значению  $\varepsilon$ . Для оценки ее скорости спада усредним нулевое квазиклассическое приближение [17]:

$$\tilde{\psi}(\xi) = D \operatorname{sh}(\bar{\kappa}[\lambda - \xi]), \quad (32)$$

$$\bar{\kappa} = \frac{1}{\lambda - \xi_+} \int_{\xi_+}^{\lambda} d\xi \kappa(\xi), \quad (33)$$

$$\kappa(\xi) = \sqrt{v(\xi) - \bar{\varepsilon}}. \quad (34)$$

Положив  $\tilde{\psi}'(\xi_+) = 1$ , найдем неизвестную константу  $D$ , и из (32) получим

$$\tilde{\psi}'(\lambda) = \operatorname{ch}^{-1}(\bar{\kappa}[\lambda - \xi_+]). \quad (35)$$

Условием большой толщины положим

$$\bar{\kappa}[\lambda - \xi_+] > \frac{1}{2} \Delta_{\text{exp}}, \quad (36)$$

где  $\Delta_{\text{exp}}$  — максимальный показатель экспоненты для данной ЭВМ, коэффициент  $1/2$  получен эмпирически. При выполнении (36) новое положение правой границы  $\lambda_<$  найдем из уравнения

$$\bar{\kappa}[\lambda_< - \xi_+] = \frac{1}{2} \Delta_{\text{exp}}. \quad (37)$$

Тогда для выбора  $\lambda_<$  получим правило

$$\lambda_< = \begin{cases} \lambda, & \bar{\kappa}[\lambda - \xi_+] \leq \frac{1}{2} \Delta_{\text{exp}}, \\ \xi_+ + \frac{1}{2} \Delta_{\text{exp}} / \bar{\kappa}, & \bar{\kappa}[\lambda - \xi_+] > \frac{1}{2} \Delta_{\text{exp}}. \end{cases} \quad (38)$$

При этом полагаем

$$\forall \xi \in [\lambda_-, \lambda], \quad \psi(\xi) = 0. \quad (39)$$

Таким образом, для решения задачи (30) методом стрельбы имеем задачу Коши:

$$\begin{cases} [-\partial_\xi^2 + v(\xi)]\psi(\xi) = \varepsilon\psi(\xi), & \xi \in (0, \lambda_-), \\ \psi(\lambda_-) = 0, \quad \psi'(\lambda_-) = \text{ch}^{-1}(\bar{\kappa}_-[\lambda_- - \xi_+]), \end{cases} \quad (40)$$

$$\bar{\kappa}_- = \frac{1}{\lambda_- - \xi_+} \int_{\xi_+}^{\lambda_-} d\xi \kappa(\xi). \quad (41)$$

При  $v_{\min} < \varepsilon < v_{\max}$  выбираем предварительно положение правой границы согласно (38) с учетом (33) и (34), а при  $v_{\max} \leq \varepsilon$  полагаем в (40)  $\lambda_- = \lambda$  и  $\psi'(\lambda_-) = 1$ .

Для повышения скорости решения задачи Коши выберем сетку из  $N$  узлов  $\{\xi_n\}_{n=1}^N \subset [0, \lambda_-]$  с постоянным шагом  $h$

$$\xi_n - \xi_{n-1} = h, \quad n = 2, \dots, N. \quad (42)$$

Корректный вид волновых функций в широком диапазоне значений  $\varepsilon$  (устойчивость) обеспечит алгоритм Верле в скоростной форме. При стрельбе справа налево в задаче (40) на правой границе сетки имеем

$$\begin{aligned} \psi_N = 0, \quad \psi'_N = \text{ch}^{-1}(\bar{\kappa}_-[\lambda_- - \xi_+]), \\ \psi''_N = (v_N - \varepsilon)\psi_N = 0, \end{aligned} \quad (43)$$

а значения функции и ее производных в прочих узлах сетки вплоть до левой границы находим последовательно по схеме

$$\begin{aligned} \psi_{n-1} &= \psi_n - \psi'_n h + \frac{1}{2} \psi''_n h^2 \rightarrow \\ \psi''_{n-1} &= (v_{n-1} - \varepsilon)\psi_{n-1} \rightarrow \\ \psi'_{n-1} &= \psi'_n - \frac{1}{2} (\psi''_{n-1} + \psi''_n) h, \end{aligned} \quad (44)$$

где  $\psi_n = \psi(\xi_n)$ ,  $v_n = v(\xi_n)$ .

#### 4.3. Поиск уровней энергии

В методе стрельбы следует найти нули  $\psi(0)$  как функции параметра  $\varepsilon$ :  $\{\varepsilon_n\}_{n=1}^\infty$ . Для их быстрого поиска получим приближения к ним  $\{\tilde{\varepsilon}_n\}_{n=1}^\infty$ .

Из квазиклассического условия квантования [17] найдем  $\{\tilde{\varepsilon}_n\}_{n=1}^3$ :

$$\int_0^{\xi_+} d\xi \sqrt{\tilde{\varepsilon}_n - v(\xi)} = \pi n - \pi/4, \quad n = 1, 2, 3. \quad (45)$$

Уравнение (45) — задача на поиск нуля функции, у которой он только один. Его можно легко найти:  $\tilde{\varepsilon}_1 \in (v_{\min}, v_{\max} + \pi^2/\lambda^2)$ ; для  $\tilde{\varepsilon}_2$  и  $\tilde{\varepsilon}_3$  начальные приближения есть  $\tilde{\varepsilon}_1$  и  $\tilde{\varepsilon}_2$  соответственно.

Для расчета  $\{\tilde{\varepsilon}_n\}_{n=4}^\infty$  экстраполируем  $\varepsilon$  как функцию квантового числа  $n$  по известным  $\varepsilon_{n-3}$ ,  $\varepsilon_{n-2}$ ,  $\varepsilon_{n-1}$  в область следующего уровня энергии:

$$\tilde{\varepsilon}_n = A + Bn + Cn^2. \quad (46)$$

Записав (46) для  $\varepsilon_{n-3}$ ,  $\varepsilon_{n-2}$ ,  $\varepsilon_{n-1}$ , найдем неизвестные коэффициенты и получим

$$\begin{aligned} \tilde{\varepsilon}_n &= \varepsilon_{n-1} + B + C(2n-1), \quad n > 3, \\ B &= \left(\frac{5}{2} - n\right)(\varepsilon_{n-1} - \varepsilon_{n-2}) + \left(n - \frac{3}{2}\right)(\varepsilon_{n-2} - \varepsilon_{n-3}), \\ C &= \frac{1}{2}(\varepsilon_{n-1} - 2\varepsilon_{n-2} + \varepsilon_{n-3}). \end{aligned} \quad (47)$$

С ростом  $n$  точность локализации (47) повышается, так как зависимость энергии от квантового числа стремится к параболической.

Таким образом, схема решения задачи (7) состоит в следующем:

- с учетом правила (31) переход от размерной задачи (7) к безразмерной (30) согласно (25)–(29);
- локализация уровней энергии посредством (45), (47);
- уточнение их положения с помощью метода Ньютона, примененного к методу стрельбы в задаче (40);
- восстановление размерных уровней энергии и волновых функций на основе безразмерных согласно (26), (28) с учетом нормировки (27) и правила (31).

## 5. Вольт-фарадные характеристики германиевой пленки

В последние годы гетеронаноструктуры Ge/Si являются предметом интенсивного исследования. Это связано с возможностью их применения в оптоэлектронике, основанной на кремниевой технологии [18], для создания светодиодов в диапазоне 1.30–1.55 мкм и лазерных диодов [19]. Поэтому наряду с кремнием германий представляет особый интерес для современной полупроводниковой техники.

Применим предложенную самосогласованную процедуру для расчета ВФХ германиевой пленки (111) при  $T = 300$  К:  $\epsilon = 16.2$ ,  $E_g = 0.661$  эВ,  $m_{||}^- = 1.440m_0$ ,  $m_{\perp}^- = 0.0815m_0$ ,  $m_{||}^+ = 0.350m_0$ ,  $m_{\perp}^+ = 0.350m_0$ , где  $m_0$  — масса свободного электрона [20]. Примеси полагаем полностью ионизованными.

Используемые эффективные массы носителей заряда согласно выражению

$$m^\pm = \sqrt[3]{(m_{||}^\pm)^2 m_{\perp}^\pm} \quad (48)$$

находятся в соответствии с эффективными массами, взятыми в работе [15]. Это позволяет провести сравнительный анализ ВФХ, полученных при классическом и квантовом самосогласованном описании ОПЗ.

Для интерпретации результатов введем понятие тепловой длины волны носителей заряда:

$$L_{\perp}^{\pm} = \sqrt{\frac{2\pi^2 \hbar^2}{m_{\perp}^{\pm} k_0 T}}. \quad (49)$$

Здесь ее численные значения следующие:

$$L_{\perp}^{-} = 2.67 \cdot 10^{-8} \text{ м}, \quad L_{\perp}^{+} = 1.29 \cdot 10^{-8} \text{ м}. \quad (50)$$

Учтем значение постоянной решетки германия

$$L_{\text{lat}} = 5.65 \cdot 10^{-10} \text{ м}, \quad (51)$$

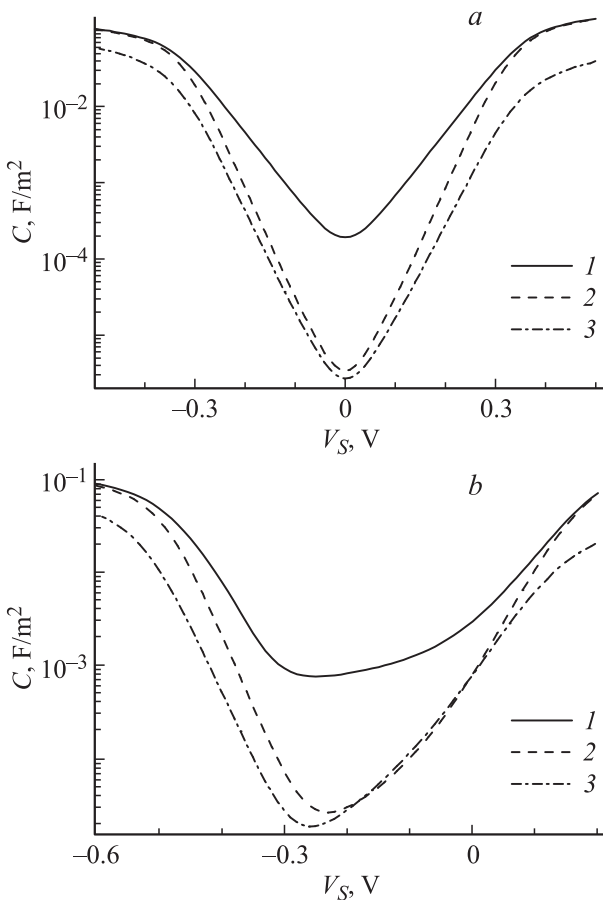
так как условие применимости зонной модели для пленки имеет вид

$$L \gg L_{\text{lat}}. \quad (52)$$

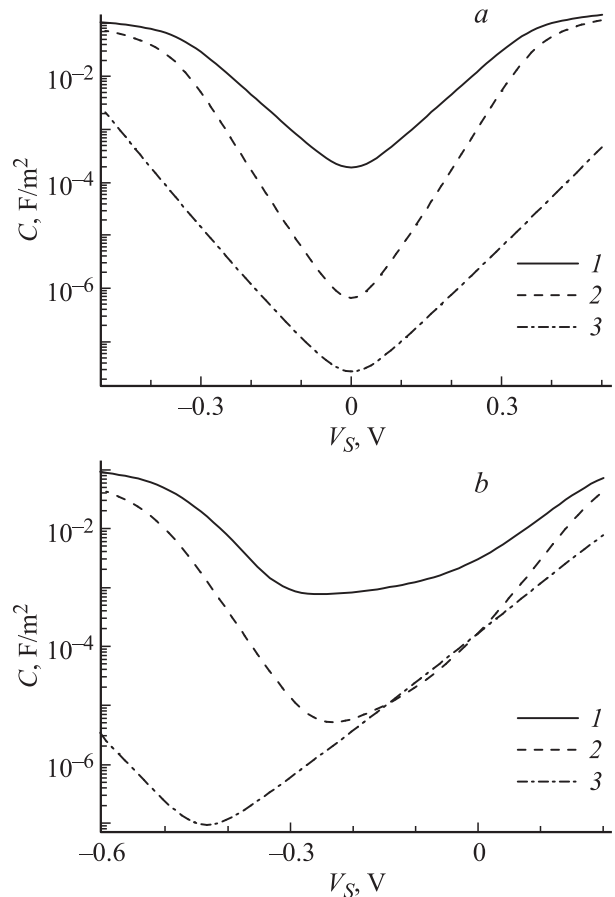
Характерные длины приблизительно соотносятся друг с другом как

$$L_{\perp}^{-} \approx 2L_{\perp}^{+}, \quad L_{\text{lat}} \approx 0.02L_{\perp}^{-}. \quad (53)$$

Поскольку существенное влияние эффектов размерного квантования на ВФХ можно ожидать при  $L \sim L_{\perp}^{\pm}$ , с



**Рис. 2.** Вольт-фарадные характеристики германия: *a* — собственный германий ( $n_a = 0, n_d = 0$ ); *b* — *n*-германий ( $n_d = 10^{22} \text{ м}^{-3}, n_a = 0$ ). 1 — классический расчет при  $L = \infty$ , 2 — классический расчет при  $L = L_{\perp}^{-}$ , 3 — квантовый самосогласованный расчет при  $L = L_{\perp}^{-}$ .



**Рис. 3.** Вольт-фарадные характеристики германия: *a* — собственный германий ( $n_a = 0, n_d = 0$ ); *b* — *n*-германий ( $n_d = 10^{22} \text{ м}^{-3}, n_a = 0$ ). 1 — классический расчет при  $L = \infty$ , 2 — классический расчет при  $L = 0.2L_{\perp}^{-}$ , 3 — квантовый самосогласованный расчет при  $L = 0.2L_{\perp}^{-}$ .

учетом (52) и (53) рассмотрим в расчетах диапазон толщин пленки

$$0.2L_{\perp}^{-} \leq L \leq L_{\perp}^{-}. \quad (54)$$

На рис. 2, *a* и рис. 3, *a* представлены ВФХ собственного германия, полученные в результате классического и квантового самосогласованного расчета. Из них видно, что провал поверхностной дифференциальной емкости в окрестности  $V_S = 0$  вплоть до  $L \sim L_{\perp}^{-}$  хорошо описывается в рамках классической модели. Эффекты размерного квантования обеспечивают асимметричный провал ВФХ при больших отрицательных и положительных напряжениях. Асимметрия связана с тем, что электроны имеют меньшую эффективную массу и, следовательно, большую длину волны де Бройля, чем дырки (50). Поэтому эффекты размерного квантования более существенны для электронов. Это выражается в большем провале ВФХ при положительных напряжениях, чем при отрицательных.

Вольт-фарадные характеристики *n*-германия представлены на рис. 2, *b* и рис. 3, *b*. В обоих случаях присутству-

ет асимметричный провал квантовой емкости со смещением минимума в область двумеризации неосновных носителей заряда. Как показали расчеты, для  $p$ -германия такое смещение больше, чем для  $n$ -германия. Это связано с различием эффективных масс электронов и дырок и различием их длин волн де Бройля (50). Во всех рассмотренных случаях наблюдается хорошее согласие квантовой ВФХ с классической вблизи  $V_S = 0$ . Этот эффект является спецификой легированных пленок.

Заметим, что при  $L < L_{\perp}^{-}$  согласно (53) условие применимости зонной модели твердого тела (52) выполняется плохо. Поэтому рис. 3 носит иллюстративный характер. На качественном уровне он показывает тенденции в ВФХ пленки при уменьшении ее толщины.

## 6. Заключение

В данной работе предложена быстрая схема квантового самосогласованного расчета ВФХ полупроводниковой пленки в случае омического контакта на тыльной стороне. Повышение его скорости и устойчивости достигается за счет следующих решений:

- расчет уровня Ферми на основе уравнения электронейтральности без самосогласования (18);

- при каждом значении поверхностного потенциала  $V_S$  индивидуальный расчет для электронов и дырок только тех уровней энергии, которые существенно влияют на заряд в ОПЗ (21);

- выход из самосогласованной процедуры при достижении заданной точности расчета поверхностной плотности заряда в ОПЗ (24);

- расчет уровней энергии на основе метода стрельбы для задачи Коши (40) с учетом правила формального смещения границы пленки (38), с применением алгоритма Верле в скоростной форме (43), (44) на сетке с постоянным шагом;

- локализация уровней энергии на основе параболической экстраполяции (47).

Предложенный подход проиллюстрирован расчетом поверхностной дифференциальной емкости германиевой пленки. В работе проведен сравнительный анализ результатов с расчетами в рамках феноменологической модели ОПЗ. Он показал, что провал ВФХ с уменьшением толщины пленки — существенно классический эффект вплоть до толщин порядка длины волны де Бройля носителей заряда. Квантовый самосогласованный расчет выявил дальнейший провал емкости, в том числе асимметричный провал, в области больших напряжений и смещение минимума ВФХ легированных полупроводников в область двумеризации неосновных носителей заряда.

Наличие этих эффектов в результатах эксперимента может говорить о размерном квантовании носителей заряда в полупроводнике. Асимметричный провал по краям ВФХ следует учитывать для корректного определения толщины диэлектрика при измерениях поверхностной дифференциальной емкости МДП структур.

Работа выполнена при поддержке МНТЦ, грант № 3963.

## Список литературы

- [1] О.В. Константинов, А.Я. Шик. ЖЭТФ, **58**, 1662 (1970).
- [2] F. Stern. J. Comput. Phys., **6**, 56 (1970).
- [3] F. Stern. Phys. Rev. B, **5**, 4891 (1972).
- [4] F. Stern. Crit. Rev. Sol. St. Sci., **4**, 499 (1974).
- [5] I.A. Pals. Phil. Res. Rep. Suppl., **7**, 84 (1972).
- [6] Т. Андо, Ф. Фаулер, Ф. Стерн. *Электронные свойства двумерных систем* (М., Мир, 1985).
- [7] В.Н. Овсяк. *Электронные процессы в полупроводниках с областями пространственного заряда* (Новосибирск, Наука, 1984).
- [8] A. Yafyasov, I. Ivankiv. Phys. Status Solidi B, **208** (1), 41 (1998).
- [9] A.M. Yafyasov, I.M. Ivankiv, V.B. Bogevolnov. Appl. Surf. Sci., **142**, 629 (1999).
- [10] L. Wang, P.M. Asbeck, Y. Taur. Sol. St. Electron., **54** (11), 1257 (2010).
- [11] M.T. Edmonds, C.I. Pakes, L. Ley. Phys. Rev. B, **81** (8), 085 314 (2010).
- [12] H. Garret, W.H. Brattain. Phys. Rev., **99** (2), 376 (1955).
- [13] J.H. Davies. *The physics of low-dimensional semiconductors* (Cambridge, Cambridge University Press, 1998).
- [14] Р. Кингстон, Э. Нейштадтер. В кн.: *Проблемы физики полупроводников*, под ред. В.Л. Бонч-Бруевича (М., ИЛ, 1957).
- [15] Д.Е. Цуриков, А.М. Яфясов. ФТП, **44** (10), 1336 (2010).
- [16] Н.Н. Калиткин. *Численные методы* (М., Наука, 1978).
- [17] А.С. Давыдов. *Квантовая механика* (М., Наука, 1973).
- [18] G. Masini, L. Colace, G. Assanto. Mater. Sci. Eng. B, **89**, 2 (2002).
- [19] L. Palesi. J. Phys. Condens. Matter, **15**, 1169 (2003).
- [20] M. Levinshtein, S. Rumyantsev, M. Shur. *Handbook Series on Semiconductor Parameters* (Word Scientific, 1996) v. 1.

Редактор Л.В. Шаронова

## Quantum self-consistent calculation of the differential capacitance of a semiconductor film

D.E. Tsurikov, A.M. Yafyasov

Saint-Petersburg State University,  
198504 St. Petersburg, Russia

**Abstract** A fast scheme for calculating the surface differential capacitance of a semiconductor film with an ohmic contact on the back side is proposed within self-consistent solving Schrödinger's and Poisson's equations. The method is considered by the example of a germanium. A comparison with phenomenological calculation results has disclosed the specific character of a quantum-confinement effects influence on the capacitance-voltage characteristic of the film.