

# Эффект поля в тонких пленках полупроводников с кейновским законом дисперсии носителей заряда

© И.С. Дубицкий<sup>¶</sup>, А.М. Яфясов<sup>¶¶</sup>

Санкт-Петербургский государственный университет  
(физический факультет, кафедра электроники твердого тела),  
199034 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 20 мая 2013 г. Принята к печати 20 июня 2013 г.)

Предложена методика расчета параметров области пространственного заряда тонких пленок полупроводников с кейновским законом дисперсии носителей заряда при комнатных температурах. Реализована процедура самосогласованного решения уравнений Пуассона, Клейна–Гордона–Фока и Шредингера для соединения кадмий–ртуть–теллур. Получены точные подзонные законы дисперсии. Обнаружены явления линейаризации хода потенциала в тонких пленках и установлены границы применимости приближения треугольной ямы. Проведено сравнение хода потенциала в пленке, плотности заряда и вольт-фарадных характеристик, вычисленных в рамках приближения эффективной массы и феноменологической теории. Установлены границы применимости феноменологического описания области пространственного заряда. Выявлено влияние подсистемы тяжелых дырок на основные характеристики области пространственного заряда.

## 1. Введение

В настоящее время в связи с быстрым развитием нанoeлектроники сохраняет свою актуальность задача построения модели области пространственного заряда (ОПЗ) тонких пленок с учетом размерного квантования. Особый интерес представляют так называемые узкощелевые полупроводники.

Использование квазиклассического (ВКБ) приближения в сочетании с некими модельными потенциалами [6] для моделирования ОПЗ узкощелевых полупроводников дает только качественные результаты, так как вид модельного потенциала, как правило, сильно отличается от истинного хода потенциала в кристалле.

В общем случае для моделирования ОПЗ при наличии размерного квантования необходимо решить систему уравнений Пуассона и Клейна–Гордона–Фока (для материалов с кейновским законом дисперсии) или Шредингера (для материалов с параболическим законом дисперсии). Распространенным численным методом решения задач такого рода является метод самосогласования [7].

В данной работе предложена схема организации самосогласованного расчета ОПЗ тонких пленок, выполненных из материалов с кейновским законом дисперсии, с учетом легких дырок, электронов и зоны тяжелых дырок при комнатных температурах. Рассчитаны вольт-фарадные характеристики (ВФХ) тонких пленок Cd–Hg–Te (КРТ), а также ход потенциала в кристалле полупроводника, концентрации носителей и подзонные законы дисперсии. Показана зависимость этих величин от толщины пленки и проведено сравнение с результатами, полученными при „классическом“ (феноменологическом) рассмотрении. При выполнении расчетов не учитывалась инверсия зон в КРТ. Поэтому стехиометри-

ческий состав КРТ и температура были выбраны таким образом, чтобы ширина запрещенной зоны была мала, но положительна.

## 2. Постановка задачи

В дальнейшем в данной работе мы будем исходить из одноэлектронного приближения, задачу будем полагать одномерной. Кроме того, далее мы предполагаем отсутствие поверхностных состояний и сохранение зонной структуры полупроводника вплоть до его поверхности. Внешнее поле будем считать плавно изменяющимся в пространстве (на расстояниях порядка периода кристаллической решетки) и несильным ( $e_0 \mathcal{E} a \ll E_g$ , где  $e_0$  — модуль заряда электрона,  $a$  — постоянная решетки,  $\mathcal{E}$  — напряженность внешнего электрического поля,  $E_g$  — ширина запрещенной зоны). Тогда можно ввести представление о „загибе“ энергетических зон [14].

Примеси будем полагать полностью ионизованными, легирование кристалла однородным. На тыльной стороне пленки предполагается наличие омического контакта (нулевой потенциал на тыльной стороне пленки).

### 2.1. Феноменологическое приближение

В данной работе рассматриваются узкощелевые полупроводники, электроны и легкие дырки в которых обладают кейновским законом дисперсии при выполнении условий:

$$\left\{ \begin{array}{l} E(p) - E_C \ll E_g + (2/3)\Delta \\ (2/3)\Delta \gg E_g \end{array} \right\}, \quad (1)$$

где  $\Delta$  — величина спин-орбитального отщепления, т.е. энергетическое расстояние от потолка валентной зоны до потолка спин-орбитально отщепленной зоны,  $E_g$  — ширина запрещенной зоны.

<sup>¶</sup> E-mail: ilya.dubitskiy@mail.ru

<sup>¶¶</sup> E-mail: yafyasov@bk.ru

Для электронов кейновское дисперсионное соотношение можно записать следующим образом:

$$E_e(p) = E_C - ms^2 + \sqrt{s^2 p^2 + m^2 s^4}, \quad (2)$$

где  $m$  — эффективная масса электрона,  $p$  — модуль квазиимпульса,  $s \approx \sqrt{E_g/(2m)}$ ,  $E_C$  — дно зоны проводимости. Величину  $s$  можно трактовать как „эффективную“ скорость света в материале полупроводника. Значение величины  $s$  практически одинаково для всех узкощелевых полупроводников и составляет 1/300 часть скорости света в вакууме. Отметим также, что равенство  $s \approx \sqrt{E_g/(2m)}$ , строго говоря, должно выполняться только при малых значениях квазиимпульса, однако реальная область его справедливости шире [15]. Практически можно считать, что данное соотношение верно при выполнении условий (1).

Закон дисперсии для легких дырок записывается аналогичным образом:

$$E_{lh}(p) = E_V + ms^2 - \sqrt{s^2 p^2 + m^2 s^4}, \quad (3)$$

где  $E_V$  — потолок валентной зоны. Отметим, что оба закона дисперсии (2) и (3) изотропны, причем эффективные массы легких дырок и электронов равны. Такое поведение спектров дырок и электронов связано с внутренней симметрией узкозонных полупроводников [16].

В дальнейших расчетах мы не будем принимать во внимание спин-орбитально отщепленную зону, так как величина спин-орбитального отщепления велика ( $(2/3)\Delta \gg E_g$ ) и, следовательно, данная зона не оказывает сколько-нибудь существенного влияния на поведение электронов в кристалле.

Зона тяжелых дырок в КРТ не взаимодействует с остальными зонами, поэтому тяжелые дырки имеют параболический закон дисперсии. Их масса составляет  $m_{hh} = 0.45m_0$  [11].

Нелинейное уравнение Пуассона для КРТ в рамках феноменологического приближения записывается как

$$\begin{cases} \partial_{x_3}^2 V = -\frac{1}{\epsilon_0} \rho(V), & V(0) = V_S, & V(L) = 0, \\ \rho(V) = e_0 [n_d - n_a + n_{lh}(V) - n_e(V) + n_{hh}(V)], \\ n_e(V) = n_C F_K \left( \frac{1}{k_0 T} [E_F - E_C + e_0 V], \frac{1}{k_0 T} E_g \right), \\ n_{lh}(V) = n_V^{lh} F_K \left( \frac{1}{k_0 T} [E_V - E_F - e_0 V], \frac{1}{k_0 T} E_g \right), \\ n_{hh}(V) = n_V^{hh} F_{1/2} \left( \frac{1}{k_0 T} [E_V - E_F - e_0 V] \right), \\ n_C = 2 \left( \frac{m_e k_0 T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2}, & n_V^{lh} = 2 \left( \frac{m_{lh} k_0 T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2}, \\ n_V^{hh} = 2 \left( \frac{m_{hh} k_0 T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2}, \end{cases} \quad (4)$$

где  $x_3$  — координата в направлении, перпендикулярном поверхности пленки,  $V$  — электростатический потенциал,  $V_S$  — значение электростатического потенциала на лицевой стороне пленки,  $L$  — толщина пленки,  $\epsilon$  — диэлектрическая проницаемость,  $\epsilon_0$  — электрическая постоянная,  $n_d$  — концентрация донорной примеси,  $n_a$  — концентрация акцепторной примеси;  $n_{lh}(V)$ ,  $n_e(V)$ ,  $n_{hh}(V)$  — концентрации легких дырок (масса  $m_{lh}$ ), электронов (масса  $m_e$ ) и тяжелых дырок (масса  $m_{hh}$ ) соответственно,  $e_0$  — заряд электрона,  $E_F$  —

уровень Ферми,  $k_0$  — постоянная Больцмана,  $T$  — температура в градусах Кельвина (далее  $T = 300$  К).

Функция  $F_K(\eta, \lambda)$  представляет собой так называемый кейновский интеграл [17]:

$$F_K(\eta, \lambda) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} dx \frac{\sqrt{x} \sqrt{1+x/\lambda} (1+2x/\lambda)}{\exp(x-\eta) + 1}. \quad (5)$$

Функция  $F_{1/2}(\eta)$  есть интеграл Ферми–Дирака с индексом 1.2 [18]:

$$F_{1/2}(\eta) = \frac{1}{\Gamma(3/2)} \int_0^{+\infty} dx \frac{\sqrt{x}}{\exp(x-\eta) + 1}. \quad (6)$$

## 2.2. Квантовый самосогласованный расчет

Далее под тонкой пленкой мы будем понимать образец, размер которого в направлении приложенного к нему внешнего поля сопоставим с длиной волны Де Бройля в материале образца. Следовательно, в тонкой пленке всегда имеет место размерное квантование, и феноменологическое приближение уже не может быть применимо для описания таких систем.

Сформулируем систему уравнений, которую необходимо решить для определения свойств ОПЗ тонких пленок, выполненных из КРТ. Воспользуемся  $\mathbf{k}\mathbf{p}$  методом для огибающих волновых функций [5]. В этом случае огибающая волновой функции может быть найдена из уравнения Клейна–Гордона–Фока:

$$\begin{cases} \left[ -\partial_{x_3}^2 - \frac{(E_i^\pm(k_{\parallel}))^2 - m^2 s^4 - s^2 \hbar^2 k_{\parallel}^2}{s^2 \hbar^2} + \frac{2UE_i^\pm(k_{\parallel}) - U^2}{s^2 \hbar^2} \right] \varphi^\pm = 0, \\ \varphi^\pm(0) = \varphi^\pm(L) = 0, \end{cases} \quad (7)$$

где  $k_{\parallel}^2 = k_{x_1}^2 + k_{x_2}^2$  — двумерный квазиволновой вектор вдоль поверхности пленки,  $U = \pm e_0 V$ ,  $\varphi^\pm(x_3)$  — огибающая волновой функции в направлении, перпендикулярном поверхности для электронов (знак „–“) и легких дырок (знак „+“);  $E_i^\pm(k_{\parallel})$  — уровни размерного квантования для дырок и электронов соответственно. Из уравнения (7) видно, что величины  $E_i^\pm(k_{\parallel})$  зависят не только от номера уровня размерного квантования  $i$ , но и от двумерного волнового вектора  $k_{\parallel}$ , поэтому далее мы будем называть их подзонами закона дисперсии. В уравнении (7) энергия отсчитывается от середины запрещенной зоны.

На огибающую волновой функции были наложены нулевые граничные условия.

Следует отметить, что спектр уравнения (7) не ограничен ни сверху, ни снизу в отличие от спектра собственных значений „обычного“ уравнения Шредингера, который, как известно, ограничен снизу. Неограниченность спектра (7) связана с тем, что эффективная потенциальная энергия  $2UE - U^2$  зависит от собственной энергии. Такая нелинейность приводит к эффективному увеличению глубины потенциальной ямы при

уменьшении энергии, что влечет за собой появление более глубоких уровней в яме, которые в свою очередь приводят к увеличению ее глубины. В действительности такой эффект, разумеется, отсутствует. Ясно, что с физической точки зрения для релятивистских носителей заряда должно выполняться условие  $E_i^\pm(k_{\parallel}) \geq U_{\min}$ , где  $U_{\min}$  — минимальное значение потенциальной энергии. Поэтому при дальнейшем изучении уравнения (7) все уровни энергии, для которых не выполнялось данное неравенство, отбрасывались как не имеющие физического смысла.

Физическая причина наличия неограниченного дискретного спектра уравнения (7) состоит в том, что по существу это уравнение описывает безспиновую частицу. При получении (7) мы пренебрегли всеми эффектами, связанными со спином. Однако при достаточно высоких (комнатных) температурах такое пренебрежение допустимо.

Помимо легких дырок и электронов в КРТ присутствуют также тяжелые дырки. В тонких пленках их спектр также становится дискретным, однако уровни размерного квантования уже не зависят от  $k_{\parallel}$ . Для нахождения огибающей волновой функции тяжелых дырок достаточно воспользоваться обычным методом эффективной массы, который приводит к уравнению Шредингера (тяжелые дырки обладают параболическим законом дисперсии):

$$\begin{cases} \left(-\frac{\hbar^2}{2m_{\perp}^{hh}} \partial_{x_3}^2 + e_0\right) \varphi_i^{hh}(x_3) = E_i^{hh} \varphi_i^{hh}(x_3), \\ \varphi_i^{hh}(0) = 0, \quad \varphi_i^{hh}(L) = 0, \end{cases} \quad (8)$$

где  $E_i^{hh}$  — уровни энергии размерного квантования,  $\varphi_i^{hh}$  — огибающая волновой функции тяжелых дырок,  $m_{\perp}^{hh}$  — эффективная масса тяжелых дырок в направлении, перпендикулярном поверхности

Систему уравнений Клейна–Гордона–Фока, Шредингера и Пуассона можно записать следующим образом:

$$\begin{cases} \partial_3^2 V = -\frac{1}{\epsilon_0} \rho(x_3), \quad V(0) = V_S, \quad V(L) = 0, \\ \rho(x_3) = e_0(n_d - n_a + n_{lh}(x_3) - n_e(x_3) + n_{hh}(x_3)), \\ \begin{cases} \left(-\frac{\hbar^2}{2m_{\perp}^{hh}} \partial_{x_3}^2 + e_0 V\right) \varphi_i^{hh}(x_3) = E_i^{hh} \varphi_i^{hh}(x_3), \\ \varphi_i^{hh}(0) = 0, \quad \varphi_i^{hh}(L) = 0, \end{cases} \\ \left[-\partial_{x_3}^2 - \frac{(E_i^\pm(k_{\parallel}))^2 - m^2 s^4 - s^2 \hbar^2 k_{\parallel}^2}{s^2 \hbar^2} + \frac{2UE_i^\pm(k_{\parallel}) - U^2}{s^2 \hbar^2}\right] \varphi^\pm = 0, \\ \varphi^\pm(0) = \varphi^\pm(L) = 0, \end{cases} \quad (9)$$

где

$$\begin{cases} n_e(x_3) = \frac{1}{\pi} \int_0^{+\infty} \sum_{i=1}^{\infty} \frac{k_{\parallel} |\varphi^-(x_3)|^2 dk_{\parallel}}{1 + \exp((E_i^-(k_{\parallel}) - E_F)/(k_0 T))}, \\ n_{lh}(x_3) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{i=1}^{\infty} \frac{k_{\parallel} |\varphi^+(x_3)|^2 dk_{\parallel}}{1 + \exp((E_i^+(k_{\parallel}) + E_g + E_F)/(k_0 T))}, \\ n_{hh}(x_3) = \frac{m_{\perp}^{hh} k_0 T}{\pi \hbar^2} \sum_{i=1}^{\infty} |\varphi_i^{hh}(x_3)|^2 \ln\left(1 + \exp\left(\frac{E_V - E_F - E_i^{hh}}{k_0 T}\right)\right). \end{cases} \quad (10)$$

### 3. Методы решения

#### 3.1. Феноменологическое приближение

Для решения уравнения (4) в среде Matlab был разработан пакет программ, взаимодействующих с конечно-элементным программным комплексом Comsol. В результате оказалось возможным определить зависимость  $V(x_3)$ , т.е. решение (4), для всех интересующих нас толщин пленок (от долей до десятков  $L_e$ , где  $L_e$  — тепловая длина волны носителей заряда). Отметим, что вычислительная схема продемонстрировала устойчивость к начальным значениям и быструю сходимость. Типичное время решения уравнения (4) составляет единицы секунд.

#### 3.2. Квантовый самосогласованный расчет

Правая часть уравнения Пуассона системы (9) зависит от огибающих волновых функций и подзонных законов дисперсии, в то время как потенциал в уравнениях Клейна–Гордона–Фока и Шредингера должен быть найден из уравнения Пуассона. Таким образом, уравнения в системе (9) не могут быть „расцеплены“.

Правая часть уравнения Пуассона, входящего в систему (9), зависит от положения уровня Ферми  $E_F$ . Как известно, его можно найти с помощью уравнения электронейтральности:

$$Q = \int_0^L dx_3 \rho(x_3) = 0. \quad (11)$$

В данном случае интегралы по  $x_3$  легко берутся, и мы приходим к уравнению

$$\begin{aligned} & e(n_d - n_a)L \\ & - \frac{2}{(2\pi)} \int_0^{+\infty} \sum_{i=1}^{\infty} \frac{k_{\parallel} dk_{\parallel}}{1 + \exp((E_i^-(k_{\parallel}) - E_F)/(k_0 T))} \\ & + \frac{2}{(2\pi)} \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{i=1}^{\infty} \frac{k_{\parallel} dk_{\parallel}}{1 + \exp((E_i^+(k_{\parallel}) + E_g + E_F)/(k_0 T))} \\ & + \frac{m_{\perp}^{hh} k_0 T}{\pi \hbar^2} \sum_{i=1}^{\infty} \ln\left(1 + \exp\left(\frac{E_V - E_F - E_i^{hh}}{k_0 T}\right)\right) = 0. \end{aligned} \quad (12)$$

В уравнение (12) входят подзонные законы дисперсии электронов и легких дырок, а также уровни размерного квантования тяжелых дырок, поэтому для нахождения положения уровня Ферми необходимо совместное решение уравнений электронейтральности, Клейна–Гордона–Фока и Шредингера. Однако, как показали расчеты, подзонные законы дисперсии  $E_i^\pm(k_{\parallel})$  и уровни размерного квантования  $E_i^{hh}$  можно искать, полагая потенциал в пленке равным нулю  $V = 0$ . В этом случае легко найти

решение уравнений Клейна–Гордона–Фока и Шредингера:

$$\begin{cases} \frac{(E_i^\pm(k_{\parallel}))^2 - m^2 s^4 - s^2 \hbar^2 k_{\parallel}^2}{s^2 \hbar^2} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} i^2, \\ E_i^{hh} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_{hh}^* L^2} i^2. \end{cases}$$

Отметим, что для тонких пленок уровень Ферми является функцией толщины пленки.

Для организации самосогласованного процесса поиска решения необходимо построить итерационную процедуру нахождения потенциала. Использовалась следующая схема [7]:

$$V_{in}^{n+1} = V_{in}^n + a(V_{out}^n - V_{in}^n), \quad (13)$$

где  $V_{in}^n$  — потенциал, подставляемый в уравнение Шредингера на  $n$ -й итерации;  $V_{out}^n$  — решение уравнения Пуассона на  $n$ -й итерации;  $a$  — коэффициент, регулирующий скорость и устойчивость сходимости. Выход из итерационной процедуры осуществлялся при

$$\|V_{out}^n - V_{in}^n\|_{C[0,L]} < \delta, \quad (14)$$

где

$$\|V_{out}^n - V_{in}^n\|_{C[0,L]} = \max_{x_3 \in [0,L]} |V_{out}^n - V_{in}^n|,$$

$\delta$  — абсолютная погрешность определения потенциала. В данных расчетах  $\delta = 0.01 \frac{k_0 T}{e_0}$ . Многочисленные численные эксперименты показали, что при меньших значениях  $\delta$  результаты практически не изменяются, а при больших, но разумных значениях  $\delta$  скорость расчета существенно не увеличивается.

Как известно, периоды решетки ( $a$ ) CdTe и HgTe при комнатной температуре ( $T = 300$  К) равны соответственно 0.648 и 0.646 нм [13]. Тогда линейный размер зоны Бриллюэна составляет порядка  $2\pi/a \approx 10^{-10} \text{ м}^{-1}$ . С другой стороны, **кп** метод применим только в некоторой окрестности точки  $\Gamma$  [3]. В связи с этим можно рассматривать такие значения квазиволнового вектора  $k_{\parallel}$ , при которых **кп** приближение еще имеет смысл. В данной работе  $k_{\parallel}$  изменяется в пределах  $[0; 10^9] \text{ м}^{-1}$ , что составляет около одной десятой от линейного размера зоны Бриллюэна. Расчеты показали, что максимальное значение энергии при таком выборе диапазона изменения  $k_{\parallel}$  значительно превосходит максимальные энергии  $E_{\max}$ , выбранные в других работах. В то же время при уменьшении пределов изменения  $k_{\parallel}$  наблюдается зависимость результатов расчета от самих пределов. При увеличении диапазона изменения  $k_{\parallel}$  результаты работы программы не зависят от самого диапазона. Таким образом, выбранные пределы изменения  $k_{\parallel}$ , на наш взгляд, являются оптимальными для данного материала.

## 4. Результаты расчета

Приведем результаты расчета в рамках квантовой самосогласованной процедуры и феноменологического приближения.

Для расчета был выбран стехиометрический состав  $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ , содержащий 11% кадмия ( $x = 0.11$ ). В этом случае ширина запрещенной зоны КРТ составляет величину порядка  $k_0 T$  при  $T = 300$  К. Релятивистские эффекты должны проявляться особенно ярко при такой малой ширине щели. В то же время рассматривать материалы с меньшей шириной запрещенной зоны не имеет смысла, так как тепловое размытие погасит все эффекты, которые можно было бы наблюдать в таких веществах. Параметры КРТ при  $x = 0.11$  ( $T = 300$  К) [21–23]:  $E_g = 0.027$  эВ,  $m_*/m_0 = 0.0002$  ( $m_* = m_e, m_h$ ),  $\epsilon = 18.7$ ,  $m_{hh}/m_0 = 0.45$ ,  $m_0$  — масса свободного электрона. Тепловая длина волны Де Бройля для релятивистских электронов и дырок в КРТ при комнатной температуре равна  $L_e = 8.4 \cdot 10^{-8}$  м.

### 4.1. Ход потенциала

Важной особенностью тонких пленок является линейаризация хода потенциала в них с уменьшением их толщины и величины поверхностного потенциала. Это явление имеет место и при феноменологическом, и при квантовом описании ОПЗ.

На рис. 1, 2 и 3 представлена зависимость потенциала внешнего поля в кристалле от координаты для разных толщин образца, вычисленная в рамках самосогласо-

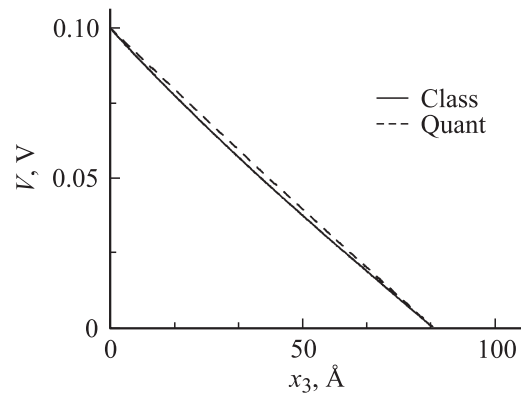


Рис. 1. Потенциал внешнего поля ( $n_t = 0 \text{ м}^{-3}$ ,  $L = 0.1L_e$ ).

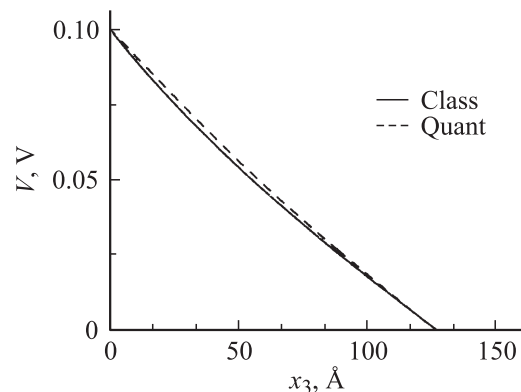


Рис. 2. Потенциал внешнего поля ( $n_t = 0 \text{ м}^{-3}$ ,  $L = 0.15L_e$ ).

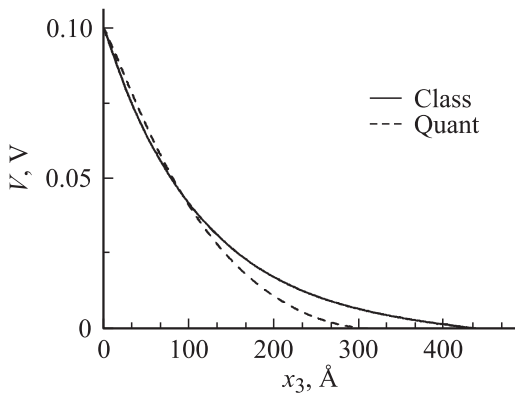


Рис. 3. Потенциал внешнего поля ( $n_t = 0 \text{ м}^{-3}$ ,  $L = 0.52L_e$ ).

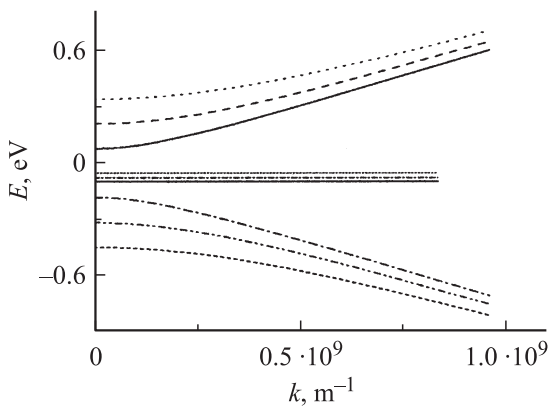


Рис. 4. Двумерный спектр электронов, легких и тяжелых дырок  $V_S = 0.1 \text{ В}$ ,  $L = 0.2L_e$ ,  $E_C = 0$ .

ванного расчета (quant) и феноменологической теории (class).

Мы видим, что при толщинах пленки, составляющих порядка 13 нанометров, и значениях поверхностного потенциала около 0.1 вольта ход потенциала линеен и, следовательно, при таких толщинах можно использовать приближение треугольной ямы.

Действительно, если провести сравнение хода подзонных законов дисперсии  $E_i(k_{||})$ , вычисленных посредством самосогласованной процедуры и приближения треугольной ямы, то окажется, что даже при толщинах пленки  $L = 0.2L_e$  (17 нанометров) погрешность определения первого уровня (при  $k_{||} = 0$ ) составляет всего лишь 14%.

На рис. 4 представлен типичный вид подзонных законов дисперсии для КРТ ( $k_s \equiv k_{||}$ ). Три верхние кривые — законы дисперсии электронов для трех первых подзон, горизонтальные прямые — уровни энергии тяжелых дырок (очевидно, они бездисперсионны), три нижние кривые — законы дисперсии легких дырок для трех первых подзон. Отметим, что кривые на рис. 4 не могут быть аппроксимированы параболическим или релятивистским двумерными законами дисперсии.

Следует подчеркнуть, что, хотя потенциалы, вычисленные в рамках феноменологического приближения и

самосогласованного расчета, близки при малых толщинах пленки и малых значениях поверхностного потенциала, но, тем не менее, концентрации носителей и вольт-фарадные характеристики (ВФХ) значительно отличаются друг от друга. Поэтому феноменологическое приближение неприменимо для пленок малой толщины.

#### 4.2. Концентрация носителей заряда

Из-за наличия узлов у огибающей волновой функции на поверхности образца плотности заряда, вычисленные в рамках самосогласованного расчета и феноменологической теории ОПЗ, должны иметь качественные отличия. В самом деле, так как огибающая волновой функции принимает нулевые значения на тыльной и лицевой сторонах пленки (граничные условия), то плотность заряда как функция координаты должна иметь по крайней мере один экстремум. В то же время ожидается, что плотность заряда, рассчитанная с помощью феноменологической теории ОПЗ, должна быть монотонной функцией координаты.

На рис. 5, 6 и 7 приведены зависимости плотности заряда от координаты для собственного КРТ. Сразу отметим, что легирование кристалла КРТ фактически не влияет на распределение плотности заряда в нем из-за большой собственной концентрации носителей заряда.

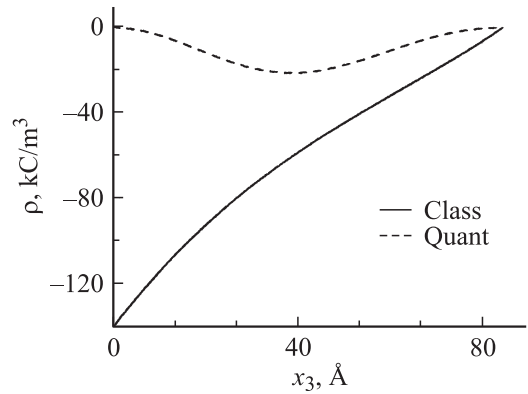


Рис. 5. Плотность заряда  $n_t = 0 \text{ м}^{-3}$ ,  $L = 0.1L_e$ ,  $V_S = 0.1 \text{ В}$ .

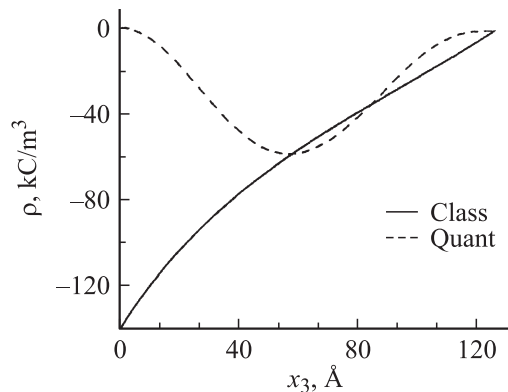


Рис. 6. Плотность заряда  $n_t = 0 \text{ м}^{-3}$ ,  $L = 0.15L_e$ ,  $V_S = 0.1 \text{ В}$ .

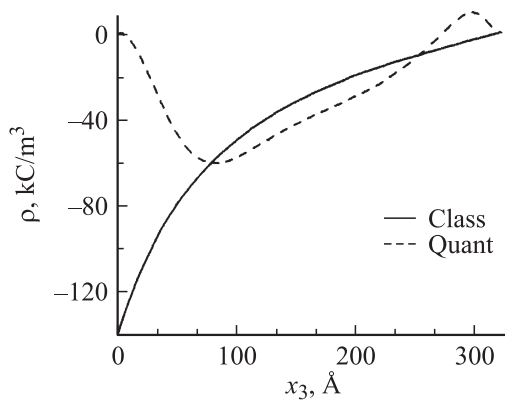


Рис. 7. Плотность заряда  $n_t = 0 \text{ м}^{-3}$ ,  $L = 0.38L_e$ ,  $V_S = 0.1 \text{ В}$ .

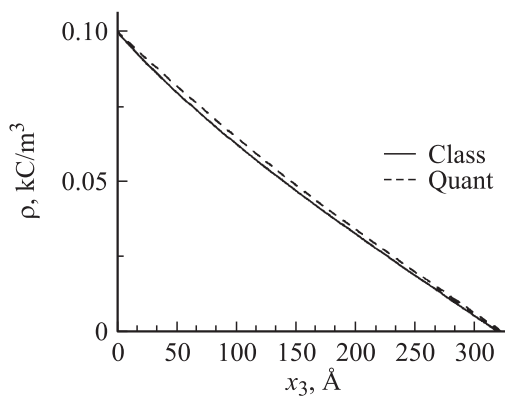


Рис. 8. Потенциал внешнего поля (КРТ без учета тяжелых дырок)  $n_t = 0 \text{ м}^{-3}$ ,  $L = 0.38L_e$ .

Мы видим, что с ростом толщины образца „квантовая“ плотность заряда (вычисленная посредством самосогласованного расчета) возрастает. При толщинах  $L \gg L_e$  „квантовая“ плотность заряда должна совпасть с „классической“. Кроме того, „классическая“ плотность заряда (вычисленная в рамках феноменологической теории) значительно превосходит „квантовую“. Это явление есть непосредственное следствие малой плотности состояний двумерного газа.

Отметим, что плотность заряда, вычисленная посредством самосогласованного расчета, принимает положительные значения у тыльной стороны пленки при достаточно большой толщине образца. Такое поведение плотности заряда связано со скапливанием тяжелых дырок у тыльной стороны пленки. Вследствие большой плотности состояний тяжелые дырки оказывают определяющее влияние на поведение полупроводниковой пленки во внешнем поле. В самом деле, на рис. 8 приведены соответственно зависимости хода потенциала в кристалле и плотности заряда от координаты, вычисленные без учета подсистемы тяжелых дырок. Мы видим, что и „квантовый“, и „классический“ потенциалы имеют меньшую кривизну, чем потенциалы, вычисленные при учете тяжелых дырок. Кроме того, плотность заряда уменьшается и у „квантовой“ плотности пропа-

дает характерный максимум вблизи тыльной стороны пленки. Уменьшение плотностей заряда и линеаризация хода потенциалов в кристалле непосредственно связаны с уменьшением концентрации собственных носителей заряда в кристалле

### 4.3. Вольт-фарадные характеристики

Вольт-фарадные характеристики (ВФХ) тонких пленок могут быть измерены экспериментально. В связи с этим большой интерес представляет моделирование данных зависимостей. Как известно, ВФХ представляет собой зависимость поверхностной дифференциальной емкости образца от потенциала на его поверхности.

$$Q = \int_0^L dx_3 \rho(V(x_3), x_3),$$

$$C = -dQ/dV_S, \quad (15)$$

где  $Q$  — поверхностный заряд,  $C$  — поверхностная дифференциальная емкость.

На рис. 9 и 10 приведены ВФХ тонких пленок КРТ, вычисленные в рамках феноменологического приближения (class) и посредством самосогласованного расчета (quant).

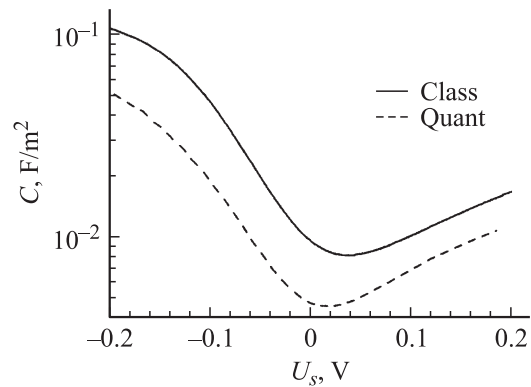


Рис. 9. ВФХ собственного КРТ  $L = 0.2L_e$ .

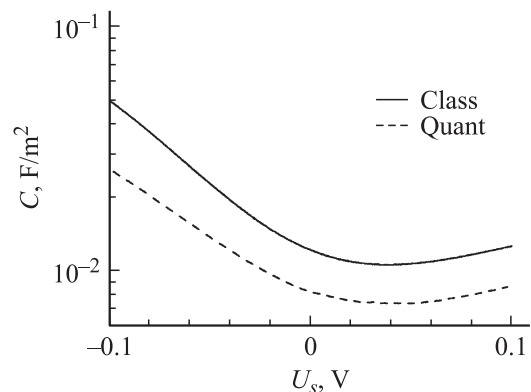


Рис. 10. ВФХ собственного КРТ  $L = 0.3L_e$ .

И „классические“, и „квантовые“ ВФХ несимметричны вследствие большой плотности состояний подсистемы тяжелых дырок. Кроме того, ВФХ проваливаются с уменьшением толщины пленки. Такое поведение ВФХ достаточно типично и имеет место и в случае материалов с параболическим законом дисперсии носителей заряда. Отметим, что „квантовая“ емкость меньше „классической“, таким образом, применение феноменологической теории к тонким пленкам неизбежно приводит к завышенным значениям поверхностной дифференциальной емкости.

## 5. Заключение

Таким образом, в данной работе предложен и реализован метод решения системы уравнений Клейна–Гордона–Фока, Шредингера и Пуассона. Данная система уравнений наиболее полно описывает тонкие пленки полупроводников, свободные носители заряда в которых имеют кейновский закон дисперсии, при комнатных температурах. Отметим, что в ходе решения искомой системы не вводились какие-либо дополнительные упрощающие приближения.

Было проведено сравнение полученных результатов с результатами решения нелинейного уравнения Пуассона, описывающего ОПЗ в рамках феноменологической теории. Показано, что феноменологическая теория не может быть применима для моделирования ОПЗ тонких пленок.

Обнаружено, что для моделирования ОПЗ тонких полупроводниковых пленок возможно использование приближения треугольной ямы, установлены границы применимости данного приближения.

Обнаружено наличие дополнительных экстремумов в зависимости плотности заряда от координаты, связанных с большой плотностью состояний подсистемы тяжелых дырок.

Проведено вычисление ВФХ тонких пленок КРТ, которое может быть сопоставлено с экспериментом. Показано, что феноменологическая теория предсказывает завышенные значения дифференциальной емкости тонких образцов.

Авторы благодарят проф. В.Ф. Раданцева за полезные комментарии и обсуждение статьи.

Авторы выражают благодарность гранту МНТЦ-3963.

## Список литературы

- [1] E. Kane. *J. Phys. Chem. Sol.*, **1**, 82 (1956).
- [2] P. Löwdin. *J. Chem. Phys.*, **19**, 1396 (1951).
- [3] И.М. Цидильковский. *Электроны и дырки в полупроводниках* (М., Наука, 1972).
- [4] R. Winkler. *Spin-orbit coupling effects in two-dimensional electron and hole systems* (Springer Verlag, Berlin–Heidelberg–N.Y., 2003).
- [5] Ivo S. Nachev. *Physica Scripta*, **37**, 825 (1988).
- [6] V.F. Radantsev, T.I. Deryabina, G.I. Kulaev, E.L. Rummyantsev. *Phys. Rev. B*, **53** (23), 15 756 (1996).
- [7] А. Фаулер, Ф. Стерн. *Электронные свойства двумерных систем* (М., Мир, 1985).
- [8] A. Ziegler, U. Rossler. *Europhys. Lett.*, **8** (6), 543 (1989).
- [9] V.F. Radantsev. *Semicond. Sci. Technol.*, **8**, 394 (1993).
- [10] A.M. Yafyasov, I.M. Ivankiv, V.B. Bogevolnov. *The book of abstracts ICSES-9* (Copenhagen, Denmark, 1998).
- [11] J. Chu, A. Sher. *Physics and properties of narrow gap semiconductors* (Springer Sci., ISBN: 978-0-387-74743-9, 2008).
- [12] J. Chu, A. Sher. *Device physics of narrow gap semiconductors*. Springer Sci., ISBN: 978-1-4419-1039-4, 2010.
- [13] P. Capper. *Properties of narrow gap cadmium based compounds*. Short run press ltd., England, ISBN 0-85296-880-9, 1994.
- [14] В.Л. Бонч-Бруевич, С.Г. Калашников. *Физика полупроводников* (М., Наука, 1977).
- [15] В.Ф. Раданцев. *Электронные свойства полупроводниковых наноструктур* (Екатеринбург, 2008).
- [16] A. Abrikosov. *Sov. Phys. JETP*, v. 39, N 4, p. 709 (1974).
- [17] S. Noor Mohammad. *J. Phys. C: Sol. St. Phys.*, **13**, 2685 (1980).
- [18] Б.М. Аскеров. *Электронные явления переноса в полупроводниках* (М., Наука, 1965).
- [19] *Таблицы физических величин*. Справочник, под ред. А.М. Кикоина (М., Атомиздат, 1976).
- [20] A.M. Yafyasov, I.M. Ivankiv. *Phys. Status Solidi B*, **208**, 41 (1996).
- [21] G. Hansen, J. Schmidt, T. Casselman. *J. Appl. Phys.*, **53** (5), 7099 (1982).
- [22] M. Malachowski, J. Piotrowski, A. Rogalski. *Infr. Phys.*, **28**, 279 (1988).
- [23] И.М. Цидильковский. *Зонная структура полупроводников* (М., Наука, 1978).

Редактор Т.А. Полянская

## Field effect in thin semiconductor films with Kane dispersion law

I.S. Dubitskiy, A.M. Yafyasov

St. Petersburg State University,  
199034 St. Petersburg, Russia

**Abstract** A new treatment is proposed to calculate space charge region properties of thin semiconductor films with Kane dispersion law at room temperatures. Self-consistent calculation scheme was developed in order to solve system of Poisson, Schrödinger and Klein–Gordon–Fock equations for cadmium mercury telluride. Accurate subband dispersion relations were obtained. It was found out that electrostatic potential coordinate dependence is close to linear for thin samples and relatively small applied surface potential. Limits of applicability of triangular well potential approximation were estimated. Comparison of potential coordinate dependence, charge density and capacity voltage characteristics calculated by means of phenomenological theory and the effective mass approximation was carried out and limits of applicability of phenomenological theory were determined. Investigation of heavy holes influence on space charge region properties was carried out.