

**УДК 539.37, 537.222.22**

## **Розподіл електростатичного потенціалу в діоді Шотткі з вбудованим шаром квантових точок**

**Пелешак Р. М., Бачинський І. Я., Дорошенко М. В., Комарницька Л. І.**

slajider@rambler.ru

Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка, кафедра загальної фізики,  
вул. Стрийська 3, м. Дрогобич, 82100

З врахуванням самоузгодженого електрон-деформаційного зв'язку побудовано топологію розподілу електростатичного потенціалу  $\varphi(x,y)$  в бар'єрній структурі Шотткі з вбудованим шаром квантових точок (InAs) у область просторового заряду напівпровідникової матриці n-GaAs. Встановлено, що результатуюче електричне поле в бар'єрній структурі Шотткі з вбудованим шаром КТ визначається суперпозицією двох полів: електричного поля  $E_{BS}$ , створеного на межі контакту метал- n- напівпровідник та електричного поля  $E_{QD}$  утвореного на межі розділу КТ- напівпровідникова матриця. Показано, що потенціал вздовж напрямку розміщення КТ має осциляційний характер з періодом  $h$ , причому, період осциляції визначається кроком розміщення КТ, а в напрямку перпендикулярному до межі контакту метал-легований n-типу напівпровідник, потенціал має спадний експоненційний характер.

### **1. Вступ**

Сучасні нанотехнології дозволяють вирощувати, як окремі квантові точки (КТ), так і цілі масиви когерентно-напружені КТ, на основі яких створюються нано- оптоелектронні прилади (лазери, світлодіоди, діоди Шотткі) [1-6]. Побудова приладів з використанням масивів КТ (*InAs/GaAs, CdTe/ZnTe*) дозволяє ефективно керувати їхніми електричними та оптичними характеристиками, завдяки прогнозованому контролю технологічних параметрів таких як щільність, відстані від масиву КТ до контакту метал-напівпровідник, розміри, форма, спектр станів носіїв заряду. Зокрема, за наявності вбудованих в область просторового заряду КТ бар'єрної структури виду Шотткі за певних технологічних параметрів можливе виникнення S- подібних вольт -амперних характеристик діодів Шотткі, які можуть бути використані в високочастотній електроніці.

Напруження, які виникають при вирощуванні наногетероструктур з квантовими точками впливають на форму і величину потенціальних бар'єрів на межі КТ – матриця, ширину забороненої зони, дискретний спектр енергетичних станів локалізованих в квантовій точці, інжеекцію та емісію заряду з КТ в матрицю.

Більшість задач нанофізики, які пов'язані з визначенням спектру та хвильових функцій носіїв заряду розв'язані з використанням прямокутного квантуючого потенціалу, який не враховує неоднорідності електростатичних та деформаційних полів [7]. У випадку когерентно-напружені КТ за наявності в їх околі полів пружніх неоднорідних напруг глибина і форма квантуючого потенціалу визначається як характеристикою деформаційного та електростатичного потенціалів, так і електрон – деформаційною взаємодією [8,9].

У роботах [1,2] було досліджено для одновимірного випадку, без врахування деформаційних ефектів, розподіл електростатичного потенціалу  $\varphi(x)$

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 дослідженю топології розподілу двовимірного електростатичного потенціалу  $\varphi(x,y)$  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 n-напівпровідник.

### **2. Геометрична модель діода Шотткі з КТ *InAs***

Розглядаємо структуру метал- легований діодною домішкою напівпровідник *GaAs(ZnTe)* з вбудованим шаром КТ (*InAs,CdTe*), який розміщений на відстані  $x = L_d$  від поверхні металу. В шарі (напрямок  $OY$ , 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  $\varphi_{BS}$  на межі метал – напівпровідник. Висоту потенціально-го бар'єру можна змінювати способом введення в напівпровідниковою матрицю (n – *GaAs*) шару КТ *InAs*. Границю збідненого шару при нульовому зміщенні ( $V=0$ ) можна оцінити із такого співвідношення  $W(V=0) \approx \sqrt{(2\varepsilon\varepsilon_0/eN_d)(\varphi_{BS} - kT/e)}$  [1].

Розглянемо енергетичну діаграму контакту метал – напівпровідник n – типу (*n – GaAs*) із вбудованим шаром квантових точок *InAs*(рис. 2). За початок відліку енергії взято рівень електрохімічного потенціалу(EF). Зокрема, при концентрації

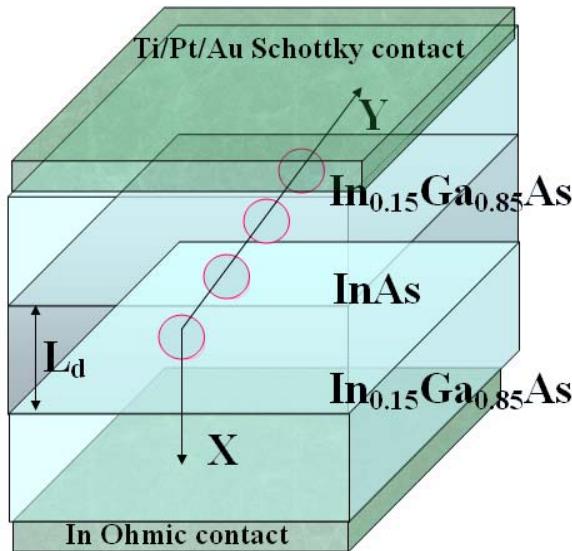


Рис. 1. Геометричне представлення діоду Шотткі - структури метал-напівпровідник з вбудованим шаром квантових точок.

ях домішок  $N_d = 5 * 10^{15} \text{ см}^{-3}$ ;  $10^{18} \text{ см}^{-3}$  ширина області просторового заряду  $W$  відповідно становить 441 нм; 31 нм, яка є більшою за довжину бази діоду. Ключовим моментом для розуміння впливу квантових точок  $InAs$  на електростатичний потенціал в гетероструктурі є можливість приймати квантовими точками електрони із металу і оточуючої матриці ( $n - GaAs$ ). Якщо розміри острівків  $InAs$  настільки малі, що рівні розмірного квантування електронів в  $InAs$  знаходяться вище рівня Фермі  $E_F$ , то шар  $InAs$  є електрично нейтральним і не впливає на величину бар'єру (рис. 2а).

Із збільшенням розміру КТ енергетичний рівень електрона опускається нижче  $E_F$ , тоді цей рівень заповниться електронами і край зони провідності в площині  $x = L_d$  підніметься на величину  $\varphi_{QD}$ . Із рис. 2б видно, що максимальна величина потенціального бар'єру  $\varphi_B$  дорівнює

$$\varphi_B = \begin{cases} \varphi_{BS}, & \varphi_{QD} \leq \varphi_{BS}/2, \\ \varphi_{QD} + \varphi_{BS}/2, & \varphi_{QD} > \varphi_{BS}/2. \end{cases} \quad (1)$$

У свою чергу  $\varphi_{QD} + \varphi_{BS}/2 = E_1 - E_{FD}$ , де  $E_1$  – енергія залягання найнижчого рівня в квантовій точці, який заповнений електронами, відраховано від краю зони провідності  $n - GaAs$ ,  $E_{FD}$  – положення рівня Фермі відносно локалізованого електронного рівня в квантовій точці (рис. 2). Для квантових точок, в яких висота  $H$  набагато менша від її розміру в площині росту  $a_{QD}(H \ll a_{QD})$ ,  $E_{FD} \approx \pi \hbar^2 \langle N \rangle / (m^* a_{QD}^2)$  [10], де  $\langle N \rangle$  – середнє число електронів у кожній квантовій точці,  $m^*$  – ефективна маса електрона. Зокрема, для  $a_{QD}=15$  нм і  $m^*=0,057m_0$  [11],  $E_{FD} \approx 18,5 \langle N \rangle$  меВ.

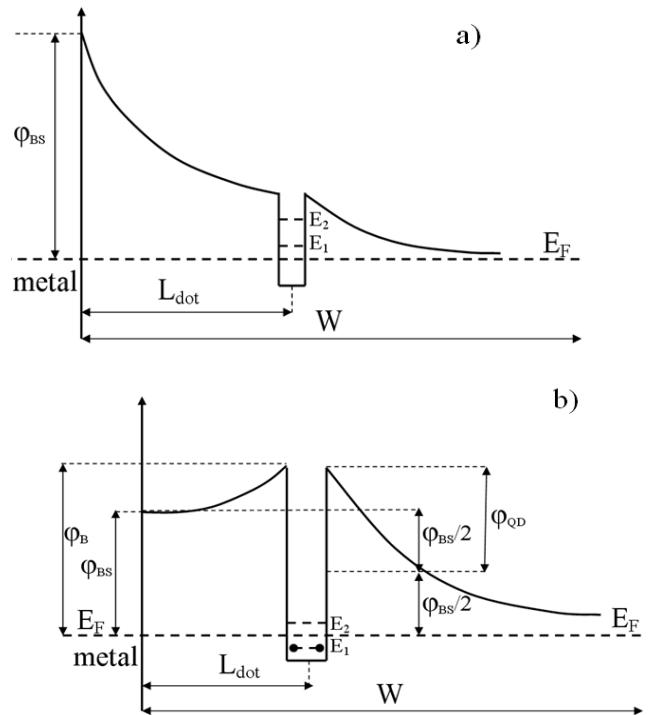


Рис. 2. Енергетична діаграма контакту метал – напівпровідник  $n - GaAs$  із вбудованим шаром КТ ( $InAs$ ).

### 3. Математична модель діода Шотткі з КТ

Топологія розподілу потенціалу  $\varphi(x, y)$  в бар'єрній структурі метал –  $n$ -напівпровідник, який містить шар квантових точок, описується наступною самоузгодженою системою рівнянь: рівняння Пуассона:

$$\frac{\partial^2 \varphi_i}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi_i}{\partial y^2} = -\frac{eN_d}{\varepsilon_d^{(i)} \varepsilon_0} + \frac{en_{dot}}{\varepsilon_d^{(i)} \varepsilon_0 L_d} \delta\left(\frac{x}{L_d} - 1\right) \times \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta\left(\frac{y}{h} - n\right), \quad i = \begin{cases} 1 \equiv InAs \\ 2 \equiv GaAs \end{cases} \quad (2)$$

де

$$n_{dot} = \frac{N_{QD}}{1 + \exp\left(\left(E_n - \mu - a_A^{(i)} \varepsilon_i + e\varphi_i(x, y)\right)/kT\right)},$$

$\varepsilon_d^{(i)}$  – відносна діелектрична проникність  $i$ -того матеріалу наногетеросистеми;  $a_c^{(i)}$  – константа гідростатичного деформаційного потенціалу зони провідності  $i$ -того матеріалу;  $\varepsilon_0$  – діелектрична стала;  $e$  – заряд електрона;  $N_{QD}$  – поверхнева густина квантових точок, яка рівна для наногетероструктури  $InAs/GaAs$  з квантовими точками  $InAs \approx 3 \times 10^{10} \text{ см}^{-2}$  [12];  $N_d$  – концентрація дононів;  $L_d$  – відстань від металу до шару КТ;  $h$  – відстань між квантовими точками в напрямку  $OY$ ;

$E_n$  – енергія електрона локалізованого на  $n$  – тому рівні в квантовій точці, яка визначається з рівняння Шредінгера:

$$\left[ \frac{\hbar^2}{2m_i^*} \Delta_r + V_{def}^{(i)}(\mathbf{r}) - e\varphi_i(\mathbf{r}) \right] \psi_n^{(i)}(\mathbf{r}) = \tilde{E}_n \psi_n^{(i)}(\mathbf{r}) \quad (3)$$

В залежності від положення рівня Фермі  $E_F$ , електрон-деформаційний потенціал  $V_{def}^{(i)}(\mathbf{r})$  аналітично описується співвідношенням, зонна схема якого зображена на рис. 3:

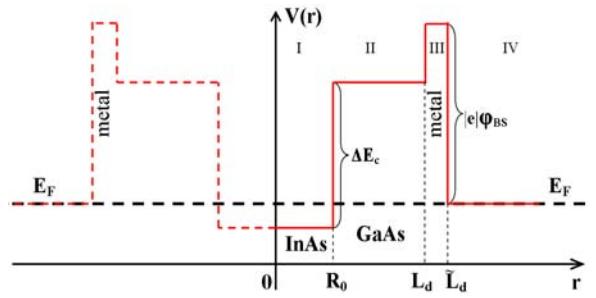


Рис. 3. Геометрична форма представлення деформаційного потенціалу контакту метал – напівпровідник  $n$  – типу ( $n$  – GaAs) із вбудованим шаром КТ (InAs).

$$E_F < E_n : V_{def}^{(i)}(\mathbf{r}) = \begin{cases} (E_F - E_c^{QD}) = -kT \ln \frac{(n_{dot})^{3/2}}{N_c^{QD}} & , 0 \leq r \leq R_0 \\ |\Delta E_c(0)| - |a_c^{(1)}\varepsilon_1| - |a_c^{(2)}\varepsilon_2| - kT \ln \frac{(n_{dot})^{3/2}}{N_c^{QD}} & , R_0 \leq r \leq L_d \\ e\varphi_{BS} & , L_d \leq r \leq \tilde{L}_d \\ 0 & , \tilde{L}_d \leq r < +\infty \end{cases} \quad (4)$$

$$E_F > E_n : V_{def}^{(i)}(\mathbf{r}) = \begin{cases} (E_F - E_c^{QD}) = -kT \ln \frac{(n_{dot})^{3/2}}{N_c^{QD}} & , 0 \leq r \leq R_0 \\ |\Delta E_c(0)| - |a_c^{(1)}\varepsilon_1| - |a_c^{(2)}\varepsilon_2| - kT \ln \frac{(n_{dot})^{3/2}}{N_c^{QD}} & , R_0 \leq r \leq L_d \\ e(\varphi_{QD} + \varphi_{BS}/2) & , L_d \leq r \leq \tilde{L}_d \\ 0 & , \tilde{L}_d \leq r < +\infty \end{cases} \quad (5)$$

де  $N_c^{QD} = \frac{e^{-\frac{E_n}{kT}}}{V_{QD}}$  – ефективна густина станів у випадку невиродженого електронного газу;  $V_{QD}$  – об’єм КТ;  $\tilde{L}_d = L_d + b$ ,  $b$ -товщина металічного контакту;  $\Delta E_c(0)$  – глибина потенціальної ями для електронів в КТ InAs в недеформованій гетероструктурі InAs/GaAs;  $\tilde{E}_n = E_n - \lambda_0$  – власні значення оператора Шредінгера;  $\lambda_0$  – енергія дна не-деформованої дозволеної зони;  $\varepsilon_i = \text{Sp } \tilde{\varepsilon}_i$  – параметр деформації  $i$ -того матеріалу наногетеросистеми, який визначається через зміщення атомів  $\mathbf{u}_i$ , які знаходяться з рівняння рівноваги

$$\nabla \text{div} \mathbf{u}_i = -D^{(i)} \cdot \mathbf{F}^{(i)}(\mathbf{r}), \quad (6)$$

де  $\mathbf{F}^{(i)}(\mathbf{r}) = -e\delta\mathbf{E}^{(i)}$ ,  $D^{(i)} = \frac{(1+\nu_i)(1-2\nu_i)}{(a^{(i)})^3 E_i (1-\nu_i)}$

тут  $\delta\mathbf{E}$  – надлишкове електричне поле, яке виникає в околі напружененої межі квантової точки – матриця, напруженість якого визначається через градієнт електростатичного потенціалу ( $\delta E^{(i)} = -\frac{d\varphi^{(i)}(\mathbf{r})}{dr}$ );  $a^{(i)}$  – параметр гратеги  $i$ -того матеріалу наногетероструктури;  $\nu_i$  – коефіцієнт Пуассона;  $E_i$  – модуль Юнга.

Електрохімічний потенціал наногетеросистеми  $\mu = \mu_i - e\varphi_i + a_c^{(i)}\varepsilon_i + \lambda_0$  визначається з рівняння, яке описує закон збереження заряджених частинок

$$\frac{1}{\Omega_0} \int n(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = n_0, \quad (7)$$

де  $\Omega_0$  – об’єм елементарної комірки,  $n_0$  – середня концентрація електронів провідності в наногетероструктурі з квантовими точками.

Спектр енергій  $E_n$  і хвильові функції електрона в гетеросистемі InAs/GaAs з КТ InAs визначаються з умови неперервності хвильових функцій і густини потоку імовірності на напруженій межі кванто-точка – матриця, разом із умовою регулярності функцій  $R_n^{(i)}(r)$  при  $r \rightarrow 0, r \rightarrow \infty$  і нормуванням:

$$\begin{cases} R_n^{(1)}(r)|_{r=R_0} = R_n^{(2)}(r)|_{r=R_0}, \\ R_n^{(2)}(r)|_{r=L_d} = R_n^{(3)}(r)|_{r=L_d}, \\ R_n^{(3)}(r)|_{r=\tilde{L}_d} = R_n^{(4)}(r)|_{r=\tilde{L}_d}, \\ \frac{1}{m_1^*} \frac{dR_n^{(1)}(r)}{dr}|_{r=R_0} = \frac{1}{m_2^*} \frac{dR_n^{(2)}(r)}{dr}|_{r=R_0} \\ \frac{1}{m_2^*} \frac{dR_n^{(2)}(r)}{dr}|_{r=L_d} = \frac{1}{m_3^*} \frac{dR_n^{(3)}(r)}{dr}|_{r=L_d} \\ \frac{1}{m_3^*} \frac{dR_n^{(3)}(r)}{dr}|_{r=\tilde{L}_d} = \frac{1}{m_4^*} \frac{dR_n^{(4)}(r)}{dr}|_{r=\tilde{L}_d} \end{cases} \quad (8)$$

Розподіл потенціалу  $\varphi(x, y)$  в бар’єрній структурі Шотткі з вбудованим шаром КТ у область просторового заряду (ОПЗ) знаходимо з розв’язку двовимірного рівняння Пуассона, з такими крайовими умовами:

$$\begin{cases} \varphi(0, y) = \varphi_{BS}, \\ \varphi(L_x, y) = 0, \\ \varphi(x, 0) = \varphi_{BS} - \frac{eN_d}{2\varepsilon\varepsilon_0}x^2, \\ \varphi(x, L_y) = \varphi_{BS} - \frac{eN_d}{2\varepsilon\varepsilon_0}x^2, \end{cases} \quad (9)$$

де  $N_d$  — концентрація донорів;  $\varphi_{BS}$  — висота потенціального бар'єру на межі метал-напівпровідника. Зокрема, для арсеніду галію з концентрацією електронів ( $n \leq 10^{18} \text{ см}^{-3}$ ), висота бар'єру Шотткі знаходиться в межах 0,6–1,0 еВ для більш ніж 40 розповсюджених металів [15–17]. У правій частині рівняння (2) 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 виникненню дискретного спектру у квантовій точці. Ці стани локалізовані в просторі, тому густину заряду в квантових точках можна змоделювати за допомогою добутку двох  $\delta$ -функцій.

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

$$\begin{aligned} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(y - nh) &= \frac{1}{|h|} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \delta\left(\frac{y}{h} - z\right) e^{2\pi i k z} dz = \\ &= \frac{1}{|h|} \left( 1 + 2 \sum_{k=1}^{\infty} \cos 2\pi k \frac{y}{h} \right). \end{aligned} \quad (10)$$

Підставивши співвідношення (10) у рівняння (2) отримуємо двовимірне рівняння Пуассона:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \tilde{\varphi}}{\partial \tilde{x}^2} + \frac{\partial^2 \tilde{\varphi}}{\partial \tilde{y}^2} &= -1 + \frac{N_{QD}}{N_d L_d} \delta(\tilde{x} - 1) \times \\ &\times \left( 1 + 2 \sum_{k=1}^{\infty} \cos 2\pi k \frac{\tilde{y} L_d}{h} \right), \end{aligned} \quad (11)$$

з крайовими умовами (9)

де,  $\tilde{x} = \frac{x}{L_d}$ ,  $\tilde{y} = \frac{y}{L_d}$ ,  $\tilde{\varphi} = \frac{\varphi}{\varphi_0}$ ,  $\varphi_0 = \frac{\varepsilon\varepsilon_0}{eN_d} (L_d)^2$ .

Топологія розподілу потенціалу знаходилась чисельно. Для апроксимації двовимірного рівняння Пуассона використовувалась п'ятиточкова різницева схема у вузлах сітки, на яку розбивається прямокутна область ( $0 \leq \tilde{x} \leq \tilde{L}_x$ ,  $0 \leq \tilde{y} \leq \tilde{L}_y$ ), а крайові умови Діріхле представлялися таким чином:

$$\begin{cases} \varphi_{0,j} = \tilde{\varphi}_{BS}, \\ \varphi_{n,j} = 0, \\ \varphi_{i,0} = \tilde{\varphi}_{BS} - \frac{1}{2} \tilde{x}_i^2, \\ \varphi_{i,m} = \tilde{\varphi}_{BS} - \frac{1}{2} \tilde{x}_i^2, \\ i = 1, \dots, n; j = 1, \dots, m. \end{cases} \quad (12)$$

Для знаходження розподілу потенціалу у внутрішніх вузлах сітки використовувався метод послідовних надрелаксацій [18]:

$$\varphi_{i,j}^{k+1} = \varphi_{i,j}^k + \frac{p}{4} (\varphi_{i+1,j}^k + \varphi_{i-1,j}^k + \varphi_{i,j+1}^k + \varphi_{i,j-1}^k)$$

$$- 4\varphi_{i,j}^k - h^2 g_{i,j}) = \varphi_{i,j}^k + p r_{i,j}^k \quad (13)$$

де,  $i = 1, 2, \dots, n - 1$ ;  $j = 1, 2, \dots, m - 1$ ,  $k = 0, 1, \dots$ ;  $R_0$  — радіус КТ;  $g_{i,j} = -1 + \frac{N_{QD}}{N_d} \frac{1}{\sqrt{\pi} R_0} e^{-(Ld/R_0)^2 (\tilde{x}_i - 1)^2} * (1 + 2 \sum_{k=1}^{\infty} \cos 2\pi k \frac{\tilde{y} L_d}{h})$

У методі послідовних надрелаксацій коефіцієнт  $p$  може приймати значення  $1 \leq p < 2$ . Оптимальне значення параметра  $p$  обчислюється за допомогою формули [18]

$$p = \frac{4}{2 + \sqrt{4 - (\cos(\frac{\pi}{n-1}) + \cos(\frac{\pi}{m-1}))^2}} \quad (14)$$

Умовою зупинки ітераційної розрахункової схеми (13) є виконання такої нерівності:

$$\|r\| \leq \varepsilon, \quad \|r\| = \max_{i,j} |r_{i,j}^k| \quad (15)$$

де,  $\varepsilon > 0$ .

#### 4. Результати розрахунків та їх обговорення

Алгоритм (13)–(15) розв'язування рівняння Пуассона (2) з крайовими умовами Діріхле (12) був реалізований в системі комп'ютерної математики (СКМ) Matlab. Розрахунок топології розподілу електростатичного потенціалу  $\varphi(x, y)$  був проведений з врахуванням електронодеформаційного потенціалу  $V_{def}^{(i)}(\mathbf{r})$  (4), (5) в бар'єрній структурі метал ( $Au$ ) –  $n$ –напівпровідник ( $GaAs$ ) з вбудованим шаром КТ ( $InAs$ ) з такими значеннями параметрів:  $a^{(1)} = 6.08 \text{ \AA}$ ;  $a^{(2)} = 5.65 \text{ \AA}$ ;  $C_{11}^{(1)} = 0.833 \text{ Мбар}$ ;  $C_{12}^{(1)} = 0.453 \text{ Мбар}$ ;  $C_{11}^{(2)} = 1.223 \text{ Мбар}$ ;  $C_{12}^{(2)} = 0.571 \text{ Мбар}$ ;  $\Delta E_c(0) = 830 \text{ мeB}$ ;  $a_c^{(1)} = -5.08 \text{ eB}$ ;  $a_c^{(2)} = -7.17 \text{ eB}$ ;  $E_g^{(1)}(0) = 0.36 \text{ eB}$ ;  $E_g^{(2)}(0) = 1.452 \text{ eB}$ ;  $\sigma_{ef} = 10^9 \text{ H/m}^2$ ;  $m_1^{(e)} = 0.057 m_0$ ;  $m_2^{(e)} = 0.065 m_0$ ;  $\alpha = 0.657 \text{ H/m}$ .

На рис. 4а, 5а приведені числові розрахунки розподілу електростатичного потенціалу  $\varphi(x, y)$  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 напівпровідника. Квантові точки розміром  $R_0$  технологічно вбудовані в шар напівпровідника на відстані  $x = L_d$  від металу. Як видно (рис. 3а, 4а) потенціал  $\varphi(y)$  (рис. 4c,  $x = \{50 \text{ \AA}, 100 \text{ \AA}, 150 \text{ \AA}, 200 \text{ \AA}, 250 \text{ \AA}\}$ ) 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 напівпровідника, потенціал  $\varphi(x)$  (рис. 4d,  $y = \{50 \text{ \AA}, 100 \text{ \AA}, 150 \text{ \AA}, 200 \text{ \AA}, 250 \text{ \AA}\}$ ) має немонотонний характер.

Результати дослідження розподілу електронної густини в околі межі поділу КТ ( $InAs$ ) — напівпровідникова матриця ( $GaAs$ ) показали [9], що розподіл поверхневої густини заряду  $\sigma(y)$ , вздовж періодично розміщених квантових точок, можна

представити у вигляді періодичної кусково – постійної функції. В межах цього наближення потенціал  $\varphi(x)$  в напрямку перпендикулярному до межі контакту метал–легований  $n$ –типу напівпровідник ( $OX$ ) описується експоненційною залежністю : $\sim \exp(-\alpha|x|)$ [20].

На рис. 4b,5b приведені числові розрахунки еквіпотенціальних ліній в околі квантових точок при різних значеннях параметрів  $\varphi_{BS}$ ,  $L_d$ ,  $h$ ,  $R_0$ ,  $N_d$ , які реалізуються у експерименті [1,19] (значення цих параметрів приведені у підписах до рисунків). Аналіз розрахунків еквіпотенціальних ліній в бар’єрній структурі Шотткі з вбудованим шаром КТ показує (рис.4b,5b), що крім електричного поля  $\mathbf{E}_{BS}$ , створеного на межі контакту метал –  $n$  – напівпровідник існує ще електричне поле  $\mathbf{E}_{QD}$  утворене на межі розділу КТ- напівпровідникова матриця [9]. Результатуюче електричне поле в бар’єрній структурі Шотткі з вбудованим шаром КТ визначається суперпозицією цих двох полів  $\mathbf{E}_R = \mathbf{E}_{BS} + \mathbf{E}_{QD}$ . Топологія розподілу еквіпотенціальних ліній (рис.4b,5b) показує, що  $x$ - складова напруженості результатуючого 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  $y$ - складова напруженості результатуючого електричного поля  $E_R^y$  має періодичний характер і в площині  $y_n = (2n + 1)\frac{h}{2}$  ( $n=0,1,2\dots$ )  $-E_R^y = 0$ . Зокрема, при значеннях параметрів  $\varphi_{BS} = 0.6V$ ,  $L_d=40\text{\AA}$ ;  $h=100\text{\AA}$ ;  $R_0=30\text{\AA}$ ;  $N_d = 10^{18}\text{cm}^{-3}$   $x$ - компонента результатуючого електричного поля ( $E_R^x$ ) поблизу межі метал –  $n$  – напівпровідник становить  $5.5 \times 10^5 \text{V/cm}$ , а поблизу площини КТ –  $4 \cdot 10^5 \text{ V/cm}$ .

З приведених досліджень розподілу електростатичного потенціалу в бар’єрній структурі Шотткі з вбудованим шаром квантових точок випливає, що наявність періодично розміщених квантових точок в області просторового заряду приводить до виникнення в напівпровіднику, паралельно межі контакту метал-напівпровідник, періодичних  $n-n+$  або  $p-p$  переходів. Крім цього, як показують результати експериментальних досліджень вольт-амперні характеристики діодів Шотткі з вбудованим шаром квантових точок мають S-подібний характер [21] при умові, що шар квантових точок знаходиться на відстанях від межі контакту метал-напівпровідник порядку  $(10 \div 30) a_0$ , де  $a_0$ -період гратки напівпровідника.

Завдяки наявності квантових точок в бар’єрній структурі Шотткі можна підвищити коефіцієнт корисної дії(ККД) елементів сонячних батарей побудованих на основі поверхневих барерних структур з вбудованим шаром КТ [22].

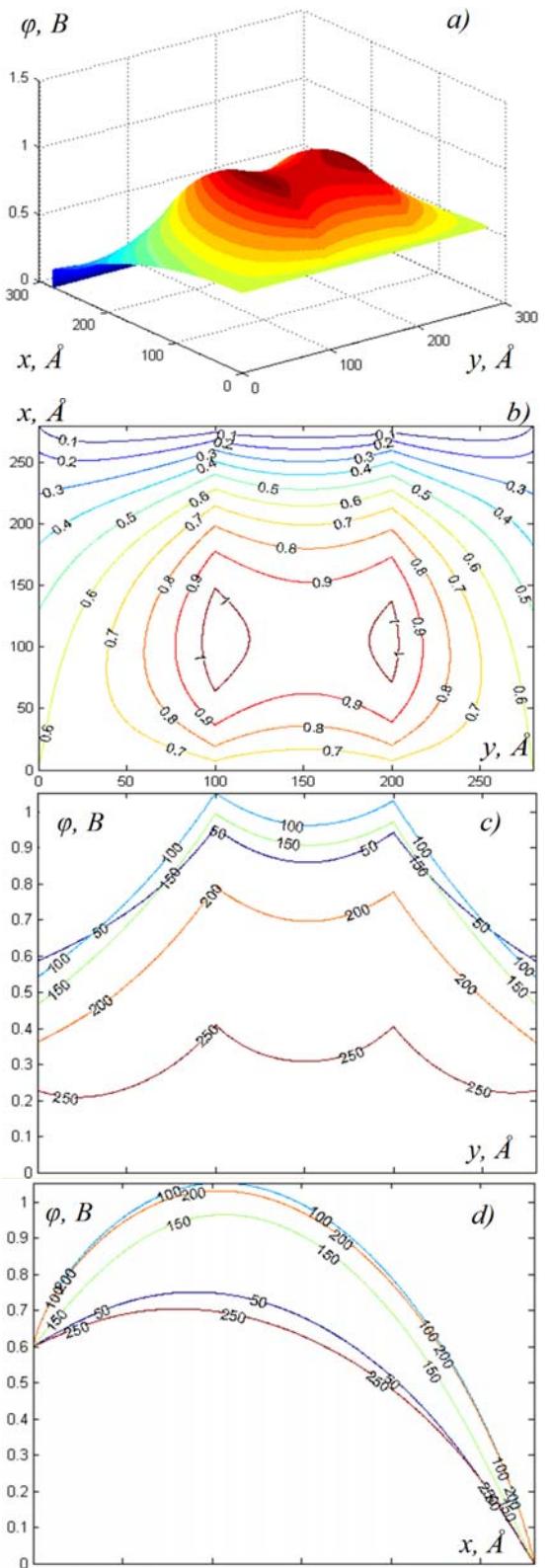


Рис. 4. Топологія розподілу електростатичного потенціалу в бар’єрній структурі Шотткі з вбудованим шаром квантових точок у область просторового заряду (a), еквіпотенціальних ліній в околі квантових точок (b), координатна залежність розподілу електростатичного потенціалу вздовж напрямку розміщення КТ в напрямку OY (c) та в напрямку перпендикулярному до межі контакту метал-легований  $n$ -типу напівпровідник в напрямку OX (d)  $\varphi_{BS}=0.6V$ ,  $L_d=40\text{\AA}$ ,  $h=100\text{\AA}$ ,  $R_0=30\text{\AA}$ ,  $N_d=10^{18}\text{cm}^{-3}$ .

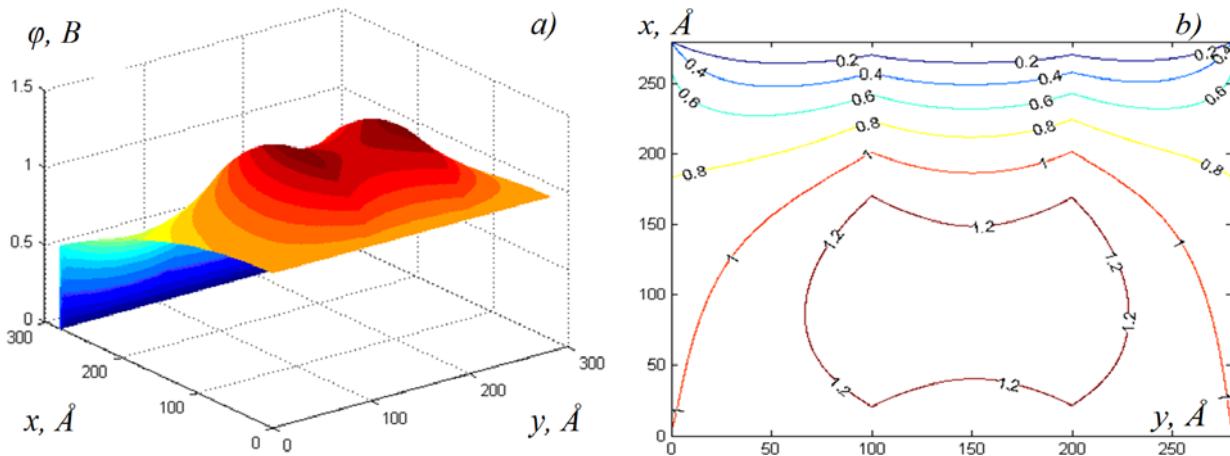


Рис.5. Топологія розподілу електростатичного потенціалу в бар'єрній структурі Шотткі з вбудованим шаром квантових точок у область просторового заряду (а), еквіпотенціальних ліній в околі квантових точок (б).  $\varphi_{BS}=1\text{B}$ ,  $L_d=40\text{\AA}$ ,  $h=100\text{\AA}$ ,  $R_0=30\text{\AA}$ ,  $Nd=10^{18}\text{cm}^{-3}$ .

## Бібліографія

- [1] А.И. Якимов, А.В. Двуреченский, А.И. Никифоров, С.В. Чайковский. Высота барьера и тунNELНЫЙ ток в диодах Шотткі со встроенными слоями квантовых точек // Письма в ЖЭТФ. — 2002. — **75**, № 2. — С. 113–117.
- [2] S.D. Lin, V.V. Ilchenko, V.V. Marin. Observation of the negative differential capacitance in Schottky diodes with InAs quantum dots near room temperature // Appl. Phys. Lett. — 2007. — **90**.
- [3] В.Г. Талалаев, Б.В. Новиков. Исследование структуры рекомбинационного излучения квантовых точек InAs, выращенных на вицинальных поверхностях GaAs // ФТП. — 2000. — **34**, № 4. — С. 467–475.
- [4] L. Jacak, P. Hawrylak, and A. Wojs. *Quantum Dots*. — Berlin: Springer, 1998.
- [5] А.В. Двуреченский, А.И. Якимов. Гетероструктуры Ge/Si с квантовыми точками // УФН. — 2001. — **171**. — Р. 7.
- [6] Леденцов Н.Н., Устинов В.М., Щукин В.А., Копьев П.С., Алфёров Ж.И., Бимберг Д. Гетероструктуры с квантовыми точками: получение, свойства, лазеры // ФТП. — 1998. — **32**, № 4. — С.385–410.
- [7] Ткач М.В., Головацький В.А., Войцехівська О.М., Міхальова М.Я., Фартушинський Р.Б. Спектр електронів і дірок у сферичних наноструктурах // Журн. фіз. досл. — 2000. — **4**, № 3. — С. 342–349.
- [8] I.B. Стасюк, Р.М. Пелещак. Деформаційні і електронні стани напівпровідника поблизу межі поділу областей з різними механічними напруженостями // УФЖ. — 1994. — **39**. — С. 856.
- [9] R.M. Peleshchak, I.Ya. Bachynsky. Electric properties of the interface quantum dot - matrix// Condensed Matter Physics. — 2009. — **12**, № 2. — Р. 215–223.
- [10] V. Ryzhii, I. Khmyrova, V. Pipa et. Al. Device model for quantum dot infrared photodetectors and their dark-current characteristics // Semicond. Sci. Technol. — 2001. — **16**. — Р. 331.
- [11] Абдувахидов Х.М., Волков А.С., Галаванов В.В. Влияние всестороннего сжатия на диэлектрическую постоянную антимонида индия // ФТП. — 1970. — **4**, № 11. — С. 2180–2182.
- [12] P.N. Brounkov, A. Polimeni, S.T. Stoddart, M. Henini, L. Eaves, P.C. Main. Electronic structure of self-assembled InAs quantum dots in GaAs matrix // Appl. Phys. Lett. — 1998. — **73**. — Р. 1092.
- [13] E. Pehlke, N. Moll, and M. Scheffler. The equilibrium shape of InAs quantum dots grown on a GaAs (001) substrate // Mater. Theory. — 1996. — **1**. — Р. 9607012.
- [14] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Теория упругости*. — М.: Наука, 1987. — 248 с.
- [15] Э.Х. Родерик. *Контакты металла-полупроводник*. — М.: Радио и связь, 1982.
- [16] С. Зи. *Физика полупроводниковых приборов. ч. 1*. — М.: Мир, 1984.
- [17] G. Myburg, F.D. Aurct, W.E. Meyer, C.W. Louw, M.J. van Staden. Summary of Schottky barrier height data on epitaxially grown *n*- and *p* – GaAs // Thin Sol. Films. — 1998. — **325**. — Р. 181.
- [18] Мэтьюз Д.Г., Финк К.Д. *Численные методы. Использование Matlab*. — М.-СПб.: Вильямс, 2001. — 713 с.
- [19] В.И. Шашкин, А.В. Мурель, В.М. Данильцев. Управление характером токопереноса в барьере Шотткі с помощью легирования: расчёт и эксперимент для Al/GaAs // ФТП. — 2002. — **36**, № 5. — С. 537–542.
- [20] Л.И. Антонов, Л.Г. Деденко, А.Н. Матвеев. *Методика решения задач по электричеству*. — М.: Изд. Московского университета, 1982. — 168 с.

- [21] K. Yoh, H. Kazama, Y. Kitashou, T. Nekano. Bistability of Resonant Tunnel Diode tructure with *InAs* Quantum Dots // Phys.Stat.Sol.(b). — 1997. — **204**, № 3. — C. 378–381.
- [22] H.W. Li, T.H. Wang. Hysteresis in electronic transport through an ensemble of *InAs* self-assembled quantum dots //Physica B. — 2001. — **301**, № 1. — C. 174–179.