

excellent detectivity [Текст] // J. Appl. Phys. – 2021. – Т. 129. – № 5. – С. 053105.

5. Wang H., Qiu Z., Xia W., Ming C., Han Y., Cao L., Lu J., Zhang P., Zhang S., Xu H., Sun Y.-Y. Semimetal or Semiconductor: The Nature of High Intrinsic Electrical Conductivity in TiS₂ [Текст] // J. Phys. Chem. Lett. – 2019. – Т. 10. – № 22. – С. 6996-7001.

6. Talib M., Tripathi N., Sharma P., Hasan P. M. Z., Melaibari A. A., Darwesh R., ... & Mishra P. Development of ultra-sensitive broadband photodetector: A detailed study on hidden photodetection-properties of TiS₂ nanosheets [Текст] // J. Mater. Res. Technol. – 2021. – Т. 14. – С. 1243-1254.

Разорвин Антон Дмитриевич, студент гр. 6131-030401D, razorvin.ad@ssau.ru.

Козлова Ирина Николаевна, к.т.н., доцент каф. наноинженерии, kozlova.in@ssau.ru.

Павельев Владимир Сергеевич, д.ф.-м.н., доцент, зав. каф. наноинженерии, nano@ssau.ru.

Трипати Нишант, Ph.D., доцент каф. наноинженерии, tripati.n@ssau.ru.

УДК 530.145.61 621.382

РАСЧЁТ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ УРОВНЕЙ В ГЕТЕРОПЕРЕХОДЕ

Д.М. Федингин, И.Н. Козлова

«Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева», г. Самара

Ключевые слова: гетеропереход, квантовая яма, уравнение Шрёдингера, энергетический уровень.

Исследование гетеропереходов – актуальная задача наноэлектроники ввиду их высокого технического потенциала и широкого спектра применений. Расчёт энергетических уровней в гетеропереходе позволяет создавать устройства с заданными характеристиками, повышать эффективность лазеров, светодиодов, солнечных батарей и управлять квантовыми эффектами на наноуровне.

Цель работы – исследование идеального гетероперехода и расчёт энергетических уровней при различной степени легирования. Объект исследования – гетеропереход AlAs (электронная проводимость)/GaAs (дырочная проводимость) при T=300 К. Рассмотрены четыре степени легирования: $5 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$, 10^{18} см^{-3} , 10^{17} см^{-3} и 10^{16} см^{-3} .

Построение энергетической диаграммы идеального гетероперехода основано на «правиле электронного сродства» [1] и требует следующих данных: E_g (ширина запрещённой зоны), χ (сродство к электрону), A (термодинамическая работа выхода, определяется по формуле:

$$A = \chi + \mu, \quad (1)$$

где μ – расстояние от дна зоны проводимости до уровня Ферми.

Значения перечисленных величин для исследуемого гетероперехода представлены в таблице 1.

При соприкосновении полупроводников образуется разность потенциалов, равная модулю разности работ выхода материалов. Для её

расчёта предварительно определяют положение уровня Ферми: для полупроводников n-типа (3) и p-типа (4) соответственно [1].

$$\mu_1 = -kT \ln \frac{N_c}{N_d}, \quad (2) \quad \mu_2 = kT \ln \frac{N_v}{N_a} - E_{g2}, \quad (3)$$

где N_d и N_a – концентрации доноров и акцепторов,

N_c и N_v – эффективная плотность состояний в зоне проводимости и валентной зоне, которые вычисляются по формулам:

$$N_c = \frac{2(2\pi m_{dn} kT)^{\frac{3}{2}}}{h^3}, \quad (4) \quad N_v = \frac{2(2\pi m_{dp} kT)^{\frac{3}{2}}}{h^3}, \quad (5)$$

где m_{dn} и m_{dp} – эффективные массы электронов и дырок (справочные значения).

Для AlAs $N_c = 1,728 \cdot 10^{25} \text{ м}^{-3}$, а для GaAs $N_v = 0,707 \cdot 10^{25} \text{ м}^{-3}$.

Таблица 1 – Энергетические характеристики материалов

Материал	E_g , эВ	χ , эВ	A , эВ
AlAs	2,15	3,51	$3,51 + \mu_1$
GaAs	1,42	4,07	$4,07 + \mu_2$

Положение уровня Ферми рассчитывают по формулам (3), (4), далее – термодинамическую работу выхода (1) и разность потенциалов. Итоговые данные для разных степеней легирования приведены в таблице 2.

Таблица 2 – Рассчитанные параметры

N_b	$N_a (N_d), \text{м}^{-3}$	$ \mu_1 $, эВ	$ \mu_2 $, эВ	A_1 , эВ	A_2 , эВ	ϕ , эВ
1	$5 \cdot 10^{24}$	0,032	1,411	3,542	5,481	1,939
2	10^{24}	0,074	1,37	3,584	5,44	1,856
3	10^{23}	0,133	1,31	3,643	5,38	1,737
4	10^{22}	0,192	1,25	3,702	5,32	1,618

В гетеропереходе образуется квантовая яма в p-области. Для упрощения расчётов её аппроксимируют прямоугольной квантовой ямой с глубиной ϕ_2 (разность потенциалов в p-области) и шириной d_2 (ширина ОПЗ в p-области). Значения ϕ_2 и d_2 рассчитывают по формулам [1]:

$$\phi_2 = \phi \frac{1}{1 + \frac{\varepsilon_2 N_a}{\varepsilon_1 N_d}}, \quad d_2 = \left(\frac{2\varepsilon_0 \varepsilon_2 \phi_2}{e N_a} \right)^{\frac{1}{2}}$$

В таблице 3 представлены результаты расчётов.

Таблица 3 – Рассчитанные значения глубины и ширины потенциальной ямы при различных степенях легирования материалов

N_b	ϕ_2 , эВ	d_2 , нм
1	0,84	15,7
2	0,8	34,2
3	0,753	104,9
4	0,701	319,9

Теперь необходимо решить уравнение Шредингера [2], взяв в качестве ширины ямы (обозначенной a) и глубины ямы (обозначенной V_0) параметры, приведенные в таблице 3:

$$V(x) = V_0 \text{ при } 0 < x < a.$$

После преобразований уравнения Шредингера получится трансцендентное уравнение:

$$2kk_1 \cos(k_2 a) - (k_1^2 - k^2) \sin(k_1 a) = 0,$$

в котором: $k = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}, k_1 = \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}}.$

Численное решение уравнения выполнено программно (C++). Интервал энергии $[V_0 \cdot 0,995; 0,001]$ дискретизирован на 50000 подынтервалов. Локализация корней проведена по критерию смены знака функции ($f(a) \cdot f(b) < 0$), последующее уточнение координат корней осуществлено методом бисекции.

Количество найденных энергетических уровней для различных уровней легирования представлено в таблице 4.

Таблица 4 – Количество энергетических уровней в зависимости от степени легирования материалов

№	$N_a (N_a), \text{м}^{-3}$	n
1	$5 \cdot 10^{24}$	3
2	10^{24}	7
3	10^{23}	23
4	10^{22}	67

Для степени легирования $5 \cdot 10^{25}$ характерны следующие энергетические уровни: 1) -0,75741, 2) -0,5368, 3) -0,21245

Количество энергетических уровней обусловлено тем, что при более высокой степени легирования ширина ОПЗ уменьшается, а вместе с ней — и квантовая яма в гетеропереходе.

Таким образом, был исследован гетеропереход AlAs/GaAs, рассчитаны его глубина и ширина, а на их основе - энергетические уровни в квантовой яме. Дальнейшее развитие работы предполагает учет реальной формы потенциальной ямы, сформированной данными полупроводниками.

Список использованных источников

1.Шиляев П.А., Павлов Д.А., Полупроводниковые гетероструктуры: гетеропереход: учебно-методическое пособие, «Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского», Нижний Новгород, 2009, С. 3-6

2.Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М., Курс теоретической физики: учеб. пособ.: Для вузов. В 10 т. Т.3. Квантовая механика (нерелятивистская теория), 2004, С. 71-90

Федингин Денис Максимович, студ. гр. 6101-030301, den.fedingin@yandex.ru

Козлова Ирина Николаевна, доцент каф нанотехнологий, inkozlova@mail.ru