

**МОДЕЛЮВАННЯ ВОЛЬТ-АМПЕРНИХ  
ХАРАКТЕРИСТИК СТРУКТУРИ  
МЕТАЛ –  $i - n^+$  ІЗ САМООРГАНІЗОВАНИМИ  
НАНОКЛАСТЕРАМИ**

*Роман ПЕЛЕЩАК, Олеся ДАНЬКІВ, Олег КУЗИК*

Дрогобицький державний педагогічний університет  
імені Івана Франка  
вул. Івана Франка 24, Дрогобич 82100  
e-mail: peleshchak@rambler.ru

Редакція отримала статтю 10 травня 2010 р.

Розвинуто метод обчислень вольт-амперних характеристик структури метал – нелегований напівпровідник ( $i$ ) – легована напівпровідникова підкладка ( $n^+$ ), що містить кластери дефектів. Запропонований метод дає змогу враховувати як пружні деформації, що виникають в околі дефектно-деформаційних структур, так і деформації, спричинені неузгодженням кристалічних ґраток контактуючих напівпровідникових матеріалів.

## 1. ВСТУП

Простіша технологія виготовлення та краща сумісність з інтегральними схемами є причиною того, що контакти Шотткі все більше витісняють  $p-n$  переходи у цифровій та комп'ютерній техніці, оптоелектроніці, особливо як фотоприймачі у волоконно-оптичних лініях зв'язку. На відміну від електронно-діркового переходу, діоди Шотткі працюють на більш високих частотах як випрямляючі, лавинно-пробійні діоди, швидкодіючі перемикачі [1-5]. Для виготовлення діодів Шотткі, зокрема, для виготовлення сонячних елементів, перспективним матеріалом є телурид кадмію [2]. Останнім часом при побудові напівпровідникових приладів широкого використання набули контакти металу з напівпровідником з використанням проміжного нелегованого  $i$ -шару [3], зокрема, для детектування височастотних сигналів [4], виготовлення імпульсних високовольтних  $p-i-n$  діодів [5].

У роботі [4] запропоновано підхід, який, враховуючи самоузгодженням чином як об'ємні ефекти, що пов'язані з обмеженням струму просторовим зарядом, так і контактні явища на межах напівпровідникового нелегованого  $i$ -шару, дає змогу отримати аналітичний розв'язок

задачі про інжекцію носіїв струму в ізолюючий і-шар скінченної товщини для структур метал – напівпровідник – сильно легована напівпровідникова підкладка.

Однак під впливом зовнішніх факторів: нагрівання, деформації, опромінення  $\gamma$ -квантами та ін. у напівпровідниковому матеріалі утворюються значні концентрації ( $N_d > 10^{17} \text{см}^{-3}$ ) точкових дефектів (міжвузлових атомів та вакансій). При перевищенні деякого критичного значення концентрації дефектів їх взаємодія із самоузгодженим полем деформації призводить до утворення впорядкованих дефектно-деформаційних структур – кластерів і періодичних структур [7–10]. У результаті самоузгодженого дифузійно-деформаційного перерозподілу дефектів у кристалі виникає неоднорідна деформація. Крім цього, пружні напруження у таких структурах можуть бути спричинені невідповідністю параметрів ґраток контактуючих напівпровідникових матеріалів. Наявність неоднорідної деформації в структурах метал – напівпровідник – легований напівпровідник внаслідок самоузгодженого електрон-деформаційного зв'язку призводить до суттєвої зміни просторових розподілів концентрації носіїв струму, електростатичного потенціалу  $\varphi(x)$ , що відображається, зокрема, на вольт-амперних характеристиках (ВАХ) таких структур. У цьому випадку задачу про інжекцію носіїв струму необхідно розв'язувати самоузгодженим чином з врахуванням деформаційних ефектів.

У цій статті обчислено ВАХ структури метал – нелегований напівпровідник  $\text{Zn}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Te}$  – напівпровідникова підкладка  $n\text{-CdTe}$  (метал–і– $n^+$ ), що містить кластер міжвузлового  $\text{Cd}_i$ . Запропонована модель враховує невідповідність параметрів ґраток контактуючих напівпровідникових матеріалів та пружні деформації в околі кластера у підкладці  $n\text{-CdTe}$ .

## 2. МОДЕЛЬ

Розглянемо тришарову структуру метал – нелегований шар  $\text{Zn}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Te}$  товщиною  $L$  – легована напівпровідникова підкладка  $n^+\text{-CdTe}$ . Координата  $x$  відраховується від межі метал – напівпровідник у напрямку напівпровідника, який збігається з напрямом прикладання електричного поля.

1. Нехай напівпровідникова підкладка ( $x \geq L$ ) містить точкові дефекти з середньою концентрацією  $N_{d0}$ . Дефекти взаємодіють як з електричним полем  $E = -\frac{d\varphi(x)}{dx}$ , так і з полем деформації  $U(x) = \frac{\partial u_x}{\partial x}$ , де  $u_x$  – компонента вектора зміщення середовища. Оскільки товщина підкладки є набагато більшою за товщину нелегованого і-шару, то деформацією підкладки, зумовленою невідповідністю параметрів ґраток контактуючих напівпровідникових матеріалів, можна знехтувати. До уваги братимемо пружні напруження, що створюються точковими дефектами, а саме, у матеріалі  $\text{CdTe}$  – іонізованим міжвузловинним кадмієм. Вираз для густини вільної енергії напівпровідникового кристалу має вигляд [10]:

$$F = \frac{1}{2}\rho c_l^2 U^2(x) + \frac{1}{3}\rho c_l^2 \alpha U^3(x) + \frac{1}{4}\rho c_l^2 \beta U^4(x) + \rho c_l^2 l_0^2 \frac{\partial^2 U(x)}{\partial x^2} U(x) \quad (1)$$

$$- \theta_d l_d^2 N_d(x) \frac{\partial^2 U(x)}{\partial x^2} - \theta_d N_d(x) U(x) + Ze\varphi(x) N_d(x) - TS,$$

де  $\rho$  – густина середовища;  $c_l$  – поздовжня швидкість звуку;  $\theta_d = K_A \Delta\Omega$  – потенціал деформації;  $\Delta\Omega$  – зміна об'єму кристалу одним дефектом;  $K_A$  – всебічна стала пружності;  $l_d$  та  $l_0$  – характеристична довжина взаємодії дефектів з атомами кристалу та атомів один з одним, відповідно;  $\alpha, \beta$  – сталі пружного ангармонізму [8];  $T$  – температура;  $S$  – ентропія. Тут взята до уваги пружна енергія дефектного кристалу з урахуванням ангармонічних членів (перший, другий, третій доданки), взаємодія атомів ґратки один з одним (четвертий доданок) та з дефектами (п'ятий доданок), потенціальна енергія взаємодії дефектів з деформацією ґратки (шостий доданок) та енергія електростатичної взаємодії дефектів з електричним полем. Надалі будемо розглядати дефекти як однократно іонізовані донори, тобто  $Z = 1$ .

Враховуючи, що

$$\sigma(x) = \frac{\partial F}{\partial U(x)}, \quad (2)$$

знаходимо вираз для напруження  $\sigma(x)$  дефектної структури з урахуванням ангармонічних доданків [8]:

$$\sigma(x) = \rho c_l^2 U(x) - \rho c_l^2 |\alpha| U^2(x) + \rho c_l^2 \beta U^3(x) + \rho c_l^2 l_0^2 \frac{\partial^2 U(x)}{\partial x^2} - \theta_d N_d(x). \quad (3)$$

Рівняння для деформації  $\rho \frac{\partial^2 U(x)}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 \sigma(x)}{\partial x^2}$  з врахуванням (3) у стаціонарному випадку запишемо у вигляді:

$$\begin{aligned} c_l^2 \frac{\partial^2 U(x)}{\partial x^2} + c_l^2 l_0^2 \frac{\partial^4 U(x)}{\partial x^4} - c_l^2 |\alpha| \frac{\partial^2 (U^2(x))}{\partial x^2} + \\ + c_l^2 \beta \frac{\partial^2 (U^3(x))}{\partial x^2} - \frac{\theta_d}{\rho} \frac{\partial^2 N_d(x)}{\partial x^2} = 0. \end{aligned} \quad (4)$$

Під дією деформаційного та електричного полів, окрім звичайного дифузійного потоку дефектів, виникає додатковий потік  $j_d = v N_d$ , де

$$v = \frac{D\theta_d}{kT} \left( \frac{\partial U(x)}{\partial x} + l_d^2 \frac{\partial^3 U(x)}{\partial x^3} \right) - \mu \frac{\partial \varphi(x)}{\partial x}.$$

Перший доданок – це швидкість дефектів, що виникає за рахунок градієнта деформації у напівпровіднику ( $D$  – коефіцієнт дифузії дефектів,  $k$  – стала Больцмана), другий доданок – дрейфова швидкість заряджених дефектів у електричному полі ( $\mu$  – рухливість дефектів). З врахуванням додаткового потоку рівняння для дифузії набуває вигляду:

$$\begin{aligned} D \frac{\partial^2 N_d}{\partial x^2} - \frac{D\theta_d}{kT} \frac{\partial}{\partial x} \left( N_d(x) \left( \frac{\partial U(x)}{\partial x} + l_d^2 \frac{\partial^3 U(x)}{\partial x^3} \right) \right) + \\ + \frac{\partial}{\partial x} \left( N_d(x) \mu \frac{\partial \varphi(x)}{\partial x} \right) = 0. \end{aligned} \quad (5)$$

Представимо деформацію і концентрацію дефектів у вигляді:

$$U(x) = U_0 + U_l(x); \quad N_d(x) = N_{d0} + N_{dl}(x); \quad (6)$$

де  $U_l(x)$  та  $N_{dl}(x)$  – відповідно просторово неоднорідні складові деформації та концентрації дефектів;  $U_0 = \frac{\theta_d}{K_A} N_{d0}$  – просторово усереднена деформація.

Проінтегрувавши рівняння (5), отримаємо просторовий розподіл концентрації точкових дефектів:

$$\begin{aligned} N_d(x) &= N_{d0} \exp \left( \frac{\theta_d}{kT} \left( U_l(x) + l_d^2 \frac{\partial^2 U_l(x)}{\partial x^2} \right) - \frac{\mu}{D} \varphi(x) \right) \approx \\ &\approx N_{d0} \left( 1 + \frac{\theta_d}{kT} \left( U_l(x) + l_d^2 \frac{\partial^2 U_l(x)}{\partial x^2} \right) - \frac{\mu}{D} \varphi(x) \right). \end{aligned} \quad (7)$$

Підставивши вираз для просторового розподілу концентрації точкових дефектів (7) у рівняння (4), отримаємо неоднорідне нелінійне диференціальне рівняння для деформації середовища:

$$\frac{\partial^2 U_l(x)}{\partial x^2} - a U_l(x) + f U_l^2(x) - c U_l^3(x) = \frac{\frac{N_{d0}}{N_{dc}}}{l_d^2 \frac{N_{d0}}{N_{dc}} - l_0^2} \frac{e\varphi(x)}{\theta_d}, \quad (8)$$

де

$$a = \frac{1 - \frac{N_{d0}}{N_{dc}}}{l_d^2 \frac{N_{d0}}{N_{dc}} - l_0^2}; \quad f = \frac{|\alpha|}{l_d^2 \frac{N_{d0}}{N_{dc}} - l_0^2}; \quad c = \frac{\beta}{l_d^2 \frac{N_{d0}}{N_{dc}} - l_0^2}; \quad N_{dc} = \frac{\rho c_l^2 kT}{\theta_d^2}.$$

Для сильно легованої  $n^+$ -підкладки можна скористатись наближенням Томаса-Фермі [6]. Тоді з урахуванням деформаційних ефектів електрохімічний потенціал набуває вигляду:

$$\chi_s(x) = \frac{\hbar^2}{2m_s} (3\pi^2 n(x))^{2/3} - e\varphi_s(x) + a_c^s U(x), \quad (9)$$

де  $m_s$  – ефективна маса електрона легованого напівпровідникового матеріалу;  $n(x)$  – концентрація електронів;  $a_c^s$  – стала гідростатичного деформаційного потенціалу зони провідності.

Розглядатимемо  $n^+$ -шар як трикомпонентну систему, що містить електрони з концентрацією  $n(x)$ , йонізовані нерухомі  $N^+$  та рухомі донори з концентрацією  $N_d(x)$ .

Очевидно, що задовольняється умова

$$n_0 = N^+ + N_{d0}, \quad (10)$$

де  $n_0$  – просторово однорідне значення концентрації електронів провідності. З формули (9) можна визначити концентрацію носіїв струму:

$$n(x) = \left( \frac{2m_s}{\hbar^2} \right)^{3/2} \cdot \frac{(\chi_s(x) + e\varphi_s(x) - a_c^s U(x))^{3/2}}{3\pi^2}. \quad (11)$$

Густина струму:

$$j = \frac{\sigma}{e} \frac{d\chi_s}{dx}, \quad (12)$$

де  $\sigma$  – провідність  $n^+$ -шару. Уважаючи провідність легованої підкладки достатньо великою, щоб виконувалася умова  $\frac{j}{\sigma} e L_s \ll \chi_0$  ( $L_s$  – товщина підкладки,  $\chi_0 = \chi(\infty) = \frac{\hbar^2}{2m_s} (3\pi^2 n_0)^{2/3} + a_c^s U_0$ ), у лінійному наближенні ( $e\varphi_s(x) - a_c^s U_l(x) \ll \chi_0$ ) концентрацію електронів провідності можна представити у вигляді:

$$n(x) = n_0 + R (e\varphi_s(x) - a_c^s U_l(x)), \quad (13)$$

де  $R = \left( \frac{2m_s}{\hbar^2} \right)^{3/2} \frac{\sqrt{\chi_0}}{2\pi^2}$ .

Електростатичний потенціал  $\varphi_s(x)$  знаходимо з рівняння Пуассона

$$\nabla^2 \varphi_s(x) = -\frac{e}{\varepsilon_s \varepsilon_0} (N_d(x) + N^+ - n(x)), \quad (14)$$

де  $\varepsilon_s$  – діелектрична проникність матеріалу напівпровідникової підкладки.

Таким чином, розв'язавши систему рівнянь (8) та (14) з урахуванням (7) та (13), можна отримати просторовий розподіл електростатичного потенціалу  $\varphi_s(x)$ , деформації кристалічної ґратки  $U_l(x)$ , концентрації електронів провідності  $n(x)$  та дефектів  $N_d(x)$  у легованій напівпровідниковій підкладці.

Розв'яжемо дану систему методом послідовних наближень. У першому наближенні знайдемо розв'язок рівняння (8) без врахування взаємодії дефектів з електростатичним полем ( $\varphi_s(x) = 0$ ). Таке рівняння має просторово однорідний розв'язок, який при перевищенні концентрацією дефектів певного критичного значення стає нестійким і виникає новий просторово неоднорідний стаціонарний стан [8]. Залежно від величини середньої концентрації точкових дефектів розв'язок рівняння (8) має вигляд:

$$U_l(x) = 0, \quad N_{d0} < N_{dc1}, \quad (15)$$

$$U_l(x) = \text{sign}\theta_d \frac{A}{B + sh(-\sqrt{a}(x-x_0))}, \quad N_{dc1} < N_{d0} < N_{dc2}, \quad (16)$$

$$U_l(x) = \text{sign}\theta_d \frac{A}{B + ch(\sqrt{a}(x-x_0))}, \quad N_{dc2} < N_{d0} < N_{dc}, \quad (17)$$

$$U_l(x) = \text{sign}\theta_d \frac{A}{B + \sin(\sqrt{|a|}(x-x_0))}, \quad N_{d0} > N_{dc}, \quad (18)$$

де  $x_0$  визначає положення кластера в легованій напівпровідниковій підкладці,

$$A = 3\sqrt{2}|a|(|9ca - 2f^2|)^{-\frac{1}{2}}, \quad B = \sqrt{2}f(|9ca - 2f^2|)^{-\frac{1}{2}}, \quad N_{dc1} = N_{dc} \left(\frac{l_0}{l_d}\right)^2,$$

$$N_{dc2} = N_{dc} \left(1 - \frac{2\alpha^2}{9\beta}\right), \quad \frac{2\alpha^2}{9\beta} = \frac{4}{9} \quad [8].$$

Залежно від величини перевищення концентрації дефектів  $N_{d0}$  порогового значення утворюються або локалізовані дефектно-деформаційні структури (симетричні і антисиметричні кластери), або періодичні дефектно-деформаційні структури. При концентрації дефектів  $N_{d0} < N_{dc1}$  у напівпровідниковому матеріалі нелінійні ефекти є незначними і не відбувається процесу самоорганізації дефектів. У діапазонах концентрацій точкових дефектів  $N_{dc1} < N_{d0} < N_{dc2}$  та  $N_{dc2} < N_{d0} < N_{dc}$  зростає роль нелінійної взаємодії дефектів через поле пружної деформації, внаслідок чого утворюється антисиметричний (формула (16)) та симетричний відносно площини  $x = x_0$  (формула (17)) кластер. При подальшому зростанні концентрації точкових дефектів ( $N_{d0} > N_{dc}$ ) утворюються сильно ангармонічні періодичні дефектно-деформаційні структури. Зазвичай кластери дефектів є тривимірними структурами. Однак спрощений математичний опис даної структури як одновимірної якісно не змінює результати.

Надалі обмежимося випадком існування симетричного кластера дефектів, що відповідає формулі (17). Підставивши (7) та (13) з урахуванням (10) у рівняння Пуассона (14), отримаємо просторовий розподіл електростатичного потенціалу у легованій напівпровідниковій підкладці:

$$\varphi_s(x) = C_1 e^{-gx} - \frac{1}{2g} e^{gx} \int f(x) \cdot e^{-gx} dx + \frac{1}{2g} e^{-gx} \int f(x) \cdot e^{gx} dx, \quad (19)$$

де

$$f(x) = W U_l(x) + \left(W - \frac{g_0^2 a_c}{e}\right) l_d^2 \frac{\partial^2 U_l(x)}{\partial x^2}; \quad W = \frac{g_0^2 a_c}{e} + \frac{e N_{d0} \theta_d}{\varepsilon_s \varepsilon_0 kT};$$

$$g_0 = \sqrt{\frac{e^2 R}{\varepsilon_s \varepsilon_0}}; \quad g = \sqrt{\frac{e^2 \left(R + \frac{N_{d0}}{kT}\right)}{\varepsilon_s \varepsilon_0}}; \quad C_1 - \text{стала інтегрування.}$$

2. Залишимо вирази для електрохімічного потенціалу, густини електричного струму та рівняння Пуассона для нелегованого і-шару з врахуванням деформації кристалічної ґратки [6]:

$$\chi(x) = kT \ln \frac{n(x)}{N_i} + \Delta_i - e\varphi(x) + a_c U(x), \quad (20)$$

$$j = n\mu_n \frac{d\chi}{dx}, \quad (21)$$

$$\nabla^2 \varphi(x) = \frac{e}{\varepsilon \varepsilon_0} n(x), \quad (22)$$

де  $N_i = 2 \left( \frac{2\pi m k T}{h^2} \right)^{3/2}$  – ефективна густина станів;  $\Delta_i$  – розрив зони провідності на межі напівпровідників;  $\mu_n$  – рухливість електронів;  $\varepsilon$  – відносна діелектрична проникність середовища. Врахувавши, що  $E = -\frac{d\varphi(x)}{dx}$ , з (20)–(22) отримуємо нелінійне рівняння для електричного поля:

$$\frac{kT}{e} \frac{d^2 E}{dx^2} + E \frac{dE}{dx} + \frac{a_c}{e} \frac{dE}{dx} \frac{dU}{dx} = -\frac{j}{\mu_n \varepsilon \varepsilon_0}. \quad (23)$$

Розглянемо випадок, коли відстань від межі напівпровідникових матеріалів до центру кластера дефектів, що містяться у підкладці, є набагато більшою за розмір кластера ( $x_0 \gg \frac{1}{\sqrt{a}}$ ). У цьому випадку в  $i$ -шарі можна знехтувати деформацією, що виникає в околі дефектно-деформаційних структур. Проте суттєвою може бути деформація нелегованого шару, спричинена невідповідністю параметрів ґраток контактуючих матеріалів. Для дослідження впливу невідповідності ґраток контактуючих матеріалів на інжекцію електронів у нелегований шар обмежимося лінійною апроксимацією деформації:

$$\begin{aligned} U(x) &= U_0 \frac{x}{L}, \\ U_0 &= U_{xx} + U_{yy} + U_{zz}, \\ U_{yy} &= U_{zz} = \frac{a_s - \tilde{a}_0}{a_s}, \quad U_{xx} = -\frac{2C_{12}}{C_{11}} U_{yy}, \end{aligned} \quad (24)$$

де  $U_{xx}, U_{yy}, U_{zz}$  – компоненти тензора деформації;  $C_{11}, C_{12}$  – пружні сталі матеріалу  $i$ -шару;  $a_s, \tilde{a}_0$  – параметри ґраток матеріалів підкладки (CdTe) та  $i$ -шару ( $\text{Zn}_x \text{Cd}_{1-x} \text{Te}$ ), відповідно.

У межах правила Вегарда [11] з урахуванням (24) деформація матеріалу  $\text{Zn}_x \text{Cd}_{1-x} \text{Te}$  ( $0 \leq x \leq 1$ ) на межі напівпровідників має вигляд:

$$U_0(x) = \frac{2 \cdot (1 - \frac{C_{12}}{C_{11}})}{a_s} [a_s - x a_0 - a_s(1 - x)], \quad (25)$$

де  $a_0$  – параметр ґратки матеріалу ZnTe.

Перейшовши до безрозмірних величин та проінтегрувавши рівняння (23), його можна переписати у вигляді:

$$\frac{d\tilde{E}}{dz} + \frac{\tilde{E}^2}{2} + \tilde{j}z = A, \quad (26)$$

де  $A$  – стала інтегрування;  $\tilde{E} = \frac{e}{kT g_0} \left( E + \frac{a_c U_0}{eL} \right)$ ;  $\tilde{j} = \frac{e^2 j}{\varepsilon \varepsilon_0 \mu_n (kT)^2 g_0^3}$ ;  $z = g_0 x$ .

Розв'язок рівняння (26) виражається через функції Ейрі і має вигляд [6]:

$$\tilde{E}(z) = -2 \left( \frac{\tilde{j}}{2} \right)^{1/3} \frac{Ai'(y) + C_2 \cdot Bi'(y)}{Ai(y) + C_2 \cdot Bi(y)}, \quad (27)$$

$$\text{де } y(z) = \left( \frac{\tilde{j}}{2} \right)^{1/3} \left( \frac{A}{\tilde{j}} - z \right).$$

Для обчислення електричного поля, електростатичного потенціалу та густини струму скористаємось методикою, запропонованою у роботі [6].

На межі напівпровідникових матеріалів повинні задовольнятися умови, які дають можливість визначити сталі інтегрування як функції густини струму:

$$\begin{cases} \varphi(L-0) = \varphi_s(L+0); \\ \varepsilon \frac{d\varphi}{dx} \Big|_{x=L-0} = \varepsilon_s \frac{d\varphi_s}{dx} \Big|_{x=L+0}; \\ \chi(L-0) = \chi_s(L+0). \end{cases} \quad (28)$$

Прирівнюючи електрохімічний потенціал напівпровідника на межі з металом до  $\chi(0)$ , отримаємо ще одну граничну умову:

$$n(0) = N_i e^{-\frac{\Delta}{kT}}, \quad (29)$$

де  $\Delta = \Delta_i - e\varphi(0) - \chi(0)$  – висота потенціального бар'єру на границі з металом.

З урахуванням (22) рівність (29) перепишемо у вигляді

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} \Big|_{x=0} = \frac{eN_i}{\varepsilon\varepsilon_0} e^{-\frac{\Delta}{kT}}. \quad (30)$$

Урахувавши, що  $\chi(0) = \chi_0 - eV$  [6], де  $V$  – прикладена напруга, отримуємо вираз:

$$eV = e\varphi(0) + \chi_0 + \Delta - \Delta_i. \quad (31)$$

Розв'язавши систему рівнянь (28) та (30), можна визначити  $\varphi(0)$  як функцію густини струму. Підставивши його у (31), отримуємо трансцендентне рівняння, що дає змогу визначити ВАХ досліджуваної структури.

### 3. РЕЗУЛЬТАТИ ОБЧИСЛЕНЬ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

На рис. 1 подано результати обчислень ВАХ структури метал – і (CdTe) –  $n^+$  (CdTe) у випадку, коли  $\Delta_i = 0$  (бар'єр на межі напівпровідників відсутній), для різних розмірів кластера  $d_{cluster}$  при таких значеннях параметрів:  $T = 300$  К,  $D = 3 \cdot 10^{-9}$  см<sup>2</sup>/с [12],  $\varepsilon = \varepsilon_s = 9.7$ ,  $\mu_n = 10^3$  см<sup>2</sup>/В·с [13],  $\theta_d = 10$  еВ,  $l_0 = 0.5$  нм,  $l_d = 2.9$  нм [8],  $\rho_s^2 = 0.79$  Мбар,  $K_A = 450$  еВ/нм<sup>3</sup> [14],  $a_c^{CdTe} = -3.38$  еВ,  $a_c^{ZnTe} =$



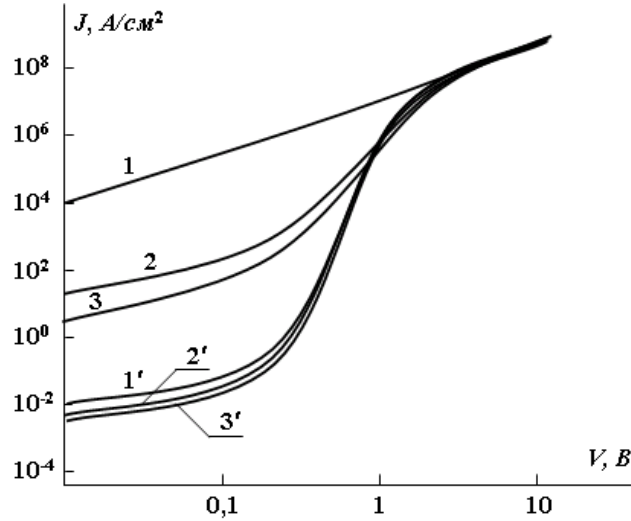


Рис. 1. Вольт-амперна характеристика структури метал- $i$ - $n^+$  для різних значень розміру кластера ( $\Delta_i = 0$ ): 1, 1' -  $d_{cluster} = 0$ ; 2, 2' -  $d_{cluster} = 2$  нм; 3, 3' -  $d_{cluster} = 5$  нм; 1, 2, 3 -  $\Delta = 0$ ; 1', 2', 3' -  $\Delta = 0.5$  еВ.

-4.829 еВ,  $a_s = a_{CdTe} = 0.648$  нм,  $a_0 = a_{ZnTe} = 0.6104$  нм [15],  $x_0 = 20$  нм,  $L = 10$  нм,  $N_{d0} = 2 \cdot 10^{18}$  см $^{-3}$ ,  $n_0 = 3 \cdot 10^{18}$  см $^{-3}$ .

Розглянемо випадок, коли в напівпровідниковій підкладці CdTe існує симетричний кластер, утворений міжвузловинним кадмієм Cd $_i$  з центром у точці  $x_0$  (формула (17)). Розмір кластера за відсутності електричного поля визначається формулою [10]:

$$d_{cluster} = \frac{1}{\sqrt{a}} = l_d \sqrt{\frac{\frac{N_{d0}}{N_{dc}} - \frac{l_0^2}{l_d^2}}{1 - \frac{N_{d0}}{N_{dc}}}}$$

Наявність кластера у підкладці призводить до суттєвого зменшення електричного струму при незначних напругах зміщення. Збільшення прикладеної напруги призводить до зменшення розміру кластера [10]. Тому при високих напругах ( $V > 1$  В) значення густини струму практично не відрізняється від відповідного значення у бездефектній структурі. При збільшенні розміру кластера (рис. 1) густина струму зменшується. Це пояснюється тим, що зростає деформація розтягу в околі кластера і, відповідно, дно зони провідності енергетично знижується на величину  $a_c U(x)$  ( $a_c < 0$ ). Тобто в  $i$ -шарі відносно легованої підкладки виникає потенціальний бар'єр для електронів. Розрахунки проводились за наявності бар'єру на межі з металом ( $\Delta =$

0.5 eV) та за його відсутності ( $\Delta = 0$ ). Зменшення висоти бар'єру  $\Delta$  на границі з металом (навіть до нуля) можна досягнути  $\delta$ -легуванням  $i$ -шару безпосередньо біля металу [4, 6]. Як впливає з рис. 1, наявність бар'єру на межі метал – напівпровідник зменшує вплив дефектно-деформаційної структури на інжекцію носіїв струму. А саме, збільшення розміру кластера (збільшення концентрації дефектів) призводить до незначного зменшення струму порівняно з випадком, коли  $\Delta = 0$ .

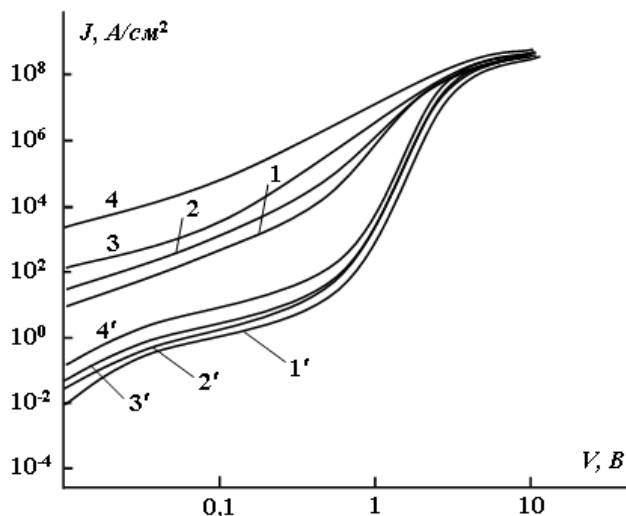


Рис. 2. Вольт-амперна характеристика структури метал- $i$ - $n^+$  при різних значеннях  $\Delta_i$  ( $\Delta = 0.3$  eV): 1, 2, 3, 4 –  $\Delta_i = 0,2$  eV ( $x = 0.25$ ); 1', 2', 3', 4' –  $\Delta_i = 0,4$  eV ( $x = 0.5$ ); 1,1' –  $d_{cluster} = 5$  нм (без урахування невідповідності параметрів ґраток); 2,2' –  $d_{cluster} = 5$  нм (з урахуванням невідповідності параметрів ґраток); 3,3' –  $d_{cluster} = 0$  (без урахування невідповідності параметрів ґраток); 4,4' –  $d_{cluster} = 0$  (з урахуванням невідповідності параметрів ґраток).

На рис. 2 подано ВАХ структури метал –  $Zn_x Cd_{1-x} Te$  –  $n$ -CdTe для різних значень величини бар'єру  $\Delta_i$  на межі напівпровідників, який виникає за рахунок розриву зон провідності контактуючих матеріалів. Деформаційні потенціали, пружні сталі, параметри кристалічних ґраток для бінарних сполук CdTe та ZnTe добре відомі [15]. Для шару  $Zn_x Cd_{1-x} Te$  значення відповідних параметрів були отримані лінійною інтерполяцією значень для CdTe та ZnTe [15].

Шар  $Zn_x Cd_{1-x} Te$  зазнає деформації розтягу ( $a^{ZnTe} < a^{CdTe}$ ), зумовленої невідповідністю параметрів ґраток контактуючих напівпровідників ( $\sim 6\%$ ), а деформацією матеріалу підкладки можна знехтувати, оскільки її товщина набагато більша від товщини  $i$ -шару. Як впливає з рис. 2, пружні деформації у  $i$ -шарі, зумовлені невідповідністю

параметрів ґраток контактуючих матеріалів, є причиною збільшення струму. Це пояснюється тим, що деформація розтягу призводить до зменшення величини розриву зон провідності ( $a_c U(x) < 0$ ), тобто зменшення ефективної величини бар'єру  $\Delta_i$ . Крім цього, невідповідність параметрів ґраток

контактуючих напівпровідників призводить до виникнення неоднорідної деформації розтягу у  $i$ -шарі та відповідно додаткового потоку електронів у напрямі від металевого контакту до межі  $i$ -шар – легований напівпровідник. Наявність бар'єру  $\Delta_i$  на межі напівпровідників (рис. 2), як і бар'єру  $\Delta$  на межі метал – напівпровідник, зменшує вплив кластера дефектів на ВАХ досліджуваної структури.

## ЛІТЕРАТУРА

- [1] *Король А.Н., Косенко И.В.* Физ. техн. полупроводников. 2010. **44**. 497.
- [2] *Косяченко Л.А., Раренко И.М., Захарук З.И., Кабанова И.С., Склярчук В.М., Склярчук Е.Ф., Солончук И.В.* Физ. техн. полупроводников. 2003. **37**. 238.
- [3] *Зи С.* Физика полупроводниковых приборов, Т.1. М.: Мир, 1984.
- [4] *Шашкин В.И., Мурель А.В.* Физ. твердого тела. 2008. **50**. 519.
- [5] *Солдатенков Ф.Ю., Данильченко В.Г., Корольков В.И.* Физ. техн. полупроводников. 2007. **41**. 217.
- [6] *Шашкин В.И., Востоков Н.В.* Физ. техн. полупроводников. 2008. **42**. 1339.
- [7] *Винценц С.В., Зайцева А.В., Плотников Г.С.* Физ. техн. полупроводников. 2002. **37**. 134.
- [8] *Емельянов В.И., Панин И.М.* Физ. твердого тела. 1997. **39**. 2029.
- [9] *Емельянов В.И.* Физ. твердого тела. 2001. **43**. 637.
- [10] *Пелещак Р.М., Кузик О.В.* Укр. фіз. журнал. 2009. **54**. 703.
- [11] *Ормонт Б.Ф.* Введение в физическую химию и кристаллохимию полупроводников. М.: Высшая школа, 1982.
- [12] *Каширина Н.И., Кислюк В.В., Шейнжман М.К.* Укр. фіз. журнал. 1999. **44**. 856.
- [13] *Корбутяк Д.В., Мельничук С.В., Корбут Є.В., Борисик М.М.* Телурид кадмію: домішково-дефектні стани та детекторні властивості. К.: Іван Федоров, 2000.
- [14] *Chris G. Van de Walle.* Phys. Rev.B. 1989. **39**. 1871.
- [15] *Козловский В.И., Литвинов В.Г., Садофьев Ю.Г.* Физ. техн. полупроводников. 2000. **34**. 998.

**MODELLING OF CURRENT-VOLTAGE CHARACTERISTICS  
OF STRUCTURE METAL – i – n<sup>+</sup>  
WITH THE SELF-ORGANIZED NANOCCLUSERS**

*Roman PELESHCHAK, Olesya DAN'KIV, Oleg KUZYK*

Ivan Franco Drohobych State Pedagogical University,  
24 Ivan Franco Str., Drohobych 82100  
e-mail: peleshchak@rambler.ru

The computational method of current-voltage characteristics of metal – undoped semiconductor (*i*) – doped semiconductor substrate (*n<sup>+</sup>*) structure with clusters of defects is described. The offered method permits to take into account the elastic deformations near the defect-deformation structures, and the deformations caused by a mismatch of crystal lattices of contacting semiconductor materials.