

*С.В. ГРИЩЕНКО, О.И. СИНЕЛЬНИКОВА, канд. техн. наук,  
С.О. ЯКУШЕВ, канд. физ.-мат. наук, В.И. ФЕСЕНКО, канд. физ.-мат. наук,  
А.В. ШУЛИКА, канд. физ.-мат. наук, И.А. СУХОИВАНОВ, д-р физ.-мат. наук*

## **ИССЛЕДОВАНИЕ ПЕРЕНОСА ЗАРЯДА В НИЗКОРАЗМЕРНОЙ ДВУМЕРНОЙ ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ СТРУКТУРЕ С УЧЕТОМ НЕМАРКОВСКИХ ЭФФЕКТОВ**

### **Введение**

Значительный прогресс в микро- и наноэлектронике, достигнутый в последние десятилетия, в значительной мере обусловлен широким внедрением низкоразмерных полупроводниковых структур (одномерных и двумерных электронных структур). Современные нанотехнологии позволяют выращивать структуры с характерными размерами порядка нескольких постоянных решетки. Для таких элементов, имеющих размеры порядка единиц нанометров, начинают оказывать существенное влияние квантовые эффекты, и становится важным учет явлений, связанных с дискретностью заряда электрона [1]. В то же время, физика низкоразмерных систем может быть нетривиальна даже на классическом уровне, что значительно усложняет теоретический анализ структур с ограниченными степенями свободы носителей заряда.

Простейший, и в то же время наиболее широко применяемый, способ теоретического исследования транспортных свойств двухмерных (2D) систем основан на использовании кинетического подхода Друде – Больцмана [2, 3]. Следует отметить, что уравнение Больцмана не учитывает квантовые эффекты интерференции [3]. Кроме того, в кинетическом подходе пренебрегают классическими эффектами "памяти", которые обусловлены немарковским характером поведения электронов. Тем не менее, этот подход позволяет адекватно описать многие квантово-размерные эффекты.

В полупроводниковых низкоразмерных структурах, в которых ограничены степени свободы носителей заряда, классические эффекты памяти могут приводить к аномальным транспортным явлениям [4 – 8]. Достаточно подробно такие эффекты были изучены в сильных магнитных полях [7, 8], в то же время явления аномального транспорта в слабых полях еще не исследованы в полной мере. Немаловажным моментом при интерпретации немарковских эффектов является значительное сходство в их проявлении с квантовыми эффектами [9]. Здесь следует отметить, что, в отличие от квантовых явлений, немарковские эффекты не подавляются неупругим рассеянием и могут наблюдаться при достаточно высоких температурах. Таким образом, для дальнейшего развития теории квантоворазмерных полупроводниковых структур и последовательного анализа, имеющих экспериментальных данных представляется необходимым теоретическое исследование влияния немарковских эффектов памяти на перенос заряда.

Цель работы – теоретическое исследование переноса заряда (электронного транспорта) в низкоразмерной (двумерной) полупроводниковой структуре с учетом немарковских эффектов.

### **Теоретическая модель**

В качестве исследуемой системы рассмотрим кремниевую p-i-n структуру с сильно легированными контактами, которая схематически представлена на рис. 1. Отметим, что для быстрой релаксации электронов в контактах достаточно величины легирования  $10^{19} \text{ см}^{-3}$ . В свою очередь, подобные структуры, но с меньшей степенью легирования, лежат в основе и успешно применяются в качестве фотодиодов для широкого ИК диапазона. Они обладают малыми темновыми токами и относительно высокой чувствительностью [10 – 12].

Для наноразмерных квазибаллистических электронных систем под напряжением процесс релаксации в неравновесное устойчивое состояние не может быть отнесен к рассеянию, поскольку эти структуры малы по сравнению с длиной свободного пробега носителей заряда [9, 13]. Активные области наноструктур являются открытыми квантово-механическими системами, которые обмениваются электронами с диссипативными элементами, обычно называемыми контактами [9]. Качественное описание таких систем выполнено в достаточной мере, однако количественное описание необратимой эволюции систем в таком режиме, где диссипация в контакты в сочетании с обменным взаимодействием носителя между активной областью и контактами является релаксирующим механизмом, является сложной задачей.

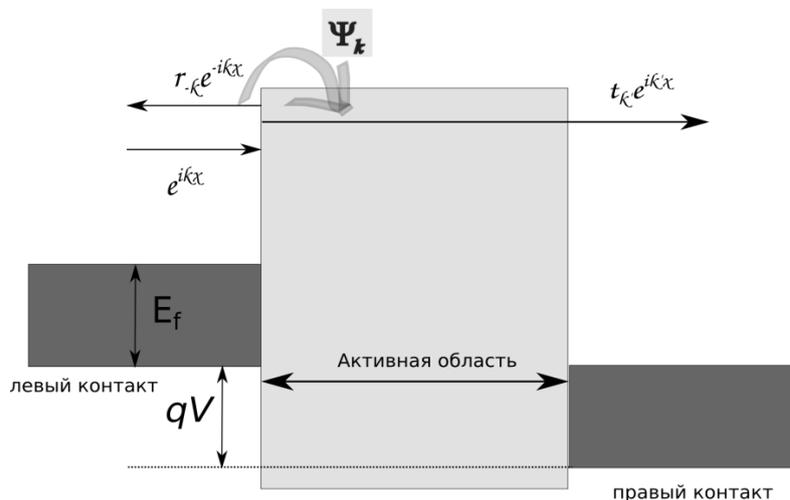


Рис. 1. Схематическое изображение исследуемой структуры. Здесь  $\Psi_k$  – функции перекрытия

В данной работе представлено теоретически рассмотрен переходный режим эволюции электронной системы в контактные слои на примере полупроводниковой диодной структуры. Такой подход базируется на теории открытых систем [14].

Для получения волновых функций электронов решалось одномерное стационарное уравнение Шредингера. Так как для решения поставленной задачи и реализации численного алгоритма необходимо получать потенциал и новые волновые функции для каждого временного интервала, то с этой целью был реализован метод самосогласованного решения уравнений Шредингера и Пуассона.

В закрытой системе гамильтониан, в представлении статистических операторов теории многих тел, для баллистических электронов активной области и диссипативной системы контактов представлен вместе с описанием модели взаимодействия инжекции электронов в активной области. Гамильтониан взаимодействия содержит описание тока в процессе инжекции носителей с/на контакты, и его матричные элементы могут быть легко рассчитаны в одночастичном приближении для структур с и без резонансов. В результате применения модели получено немарковское динамическое описание эволюции оператора активной области. Для адекватного теоретического описания был использован тот факт, что релаксация носителей в контакты наноструктуры обычно происходит моментально (с минимальным временем) во всей системе [9]. Будем считать, что контакты сильно легированны, так что механизм рассеяния является электрон-электронным рассеянием [15 – 17]:

$$H_s = \sum_{k>0} \omega_k (r_k \psi_k \exp(ikx) + r_{-k} \psi_{-k} \exp(-ikx)). \quad (1)$$

В выражении (1) использованы следующие обозначения:  $H_s$  – гамильтониан;  $\omega_k = \varepsilon_k / \hbar$ ;  $\varepsilon_k$  – энергия состояния,  $\psi_k$  – волновая функция,  $r_k$  – амплитуды волны де Бройля,  $k$  – волновое число.

Релаксация импульса происходит практически мгновенно, с точки зрения наноструктуры в целом. Если не рассматривать микроскопических эффектов, происходящих в контактах, но при этом включать их влияние на общую эволюцию наноструктуры, то время релаксации импульса может быть представлено в виде набора кратчайших временных отрезков. Таким образом, представляется возможным рассматривать временную эволюцию на протяжении времени релаксации импульса и получить динамическую карту, которая является кусочно марковской, но в целом является немарковской. Численный алгоритм расчета соответствующих характеристик, таких как плотность заряда, потенциал, и плотность тока на основании представленной модели даны ниже и иллюстрируют подход с расчетом реакции полупроводникового диода.

### Взаимодействие активной области и контактов

Как было указано выше, активная область наноструктуры является открытой квантово-механической системой. Обычно это трактуется с помощью так называемых открытых граничных условий (например, теория матрицы плотности и формализм функций Вигнера [18, 19]). Мейр и Вингрин [20] предложили подход, с помощью которого можно соединить гамильтониан для контактов и для активной области, но вопрос определения самих элементов гамильтониана оставался открытым. Кроме того, эта теория применима только для структур с малым числом дискретных состояний, т. е. она не применима для структур без резонансов.

В представленной работе использован гамильтониан, разработанный Новаковичем и Кnezeвицем [9], который хорошо подходит для решения поставленной задачи. Элементы гамильтониана были выведены из решения одноэлектронной задачи переноса носителей.

Для учета перекрытия в работе введены специальные коэффициенты  $\Delta_k$ , пропорциональные току. С учетом этого имеем

$$H_{int} = \sum_{k>0} \omega_k (\Delta_k r_k \psi_k \exp(ikx) + \Delta_{-k} r_{-k} \psi_{-k} \exp(-ikx)). \quad (2)$$

Динамика квантоворазмерной активной среды не унитарна и немарковские эффекты памяти имеют важное значение. Это означает, что система “помнит” как оказалась в текущем состоянии и дальнейшая ее эволюция зависит от предыдущих событий, которые привели ее в это состояние. Немарковская карта, описывающая поведение активной среды в баллистическом приближении, может быть получена из закрытой системы ”контакт–активная среда–контакт”.

Статистический оператор в таком случае может быть представлен в виде

$$\rho(t) = W(t, 0) \rho(0). \quad (3)$$

В выражении (3)  $W(t, 0)$  является немарковской картой и записывается в виде

$$W(t, 0) = \exp\left(\int_0^t K(t) dt\right), \quad (4)$$

где  $K(t)$  – генератор карты.

Отметим, что в общем случае получить  $W(t, 0)$  невозможно.

В представленной работе используется приближение памяти среды в контактных слоях. Как правило, электрон-электронное рассеяние в сильно легированных контактах сопровождается быстрой динамикой функции Ферми – Дирака со временем релаксации электронов порядка  $\tau = 10-100$  фс [16, 17]. Это очень малое время релаксации по сравнению с обычным временем в диодных структурах.

Чтобы получить немарковское приближение для среды, которая теряет память о предыдущих состояниях по истечении времени  $\tau$ , разобьем временную ось на интервалы  $\tau$ ,  $t = \tau n$

так что система взаимодействует одинаково каждый интервал  $(t_n, t_{n+1})$ . Тогда кинетическое уравнение для статистического оператора будет иметь вид

$$\frac{d\rho(t)}{dt} = -iL_{eff}\rho(t), \quad (5)$$

где  $L_{eff} = H_s + H_{int}$  – Лиуввилян.

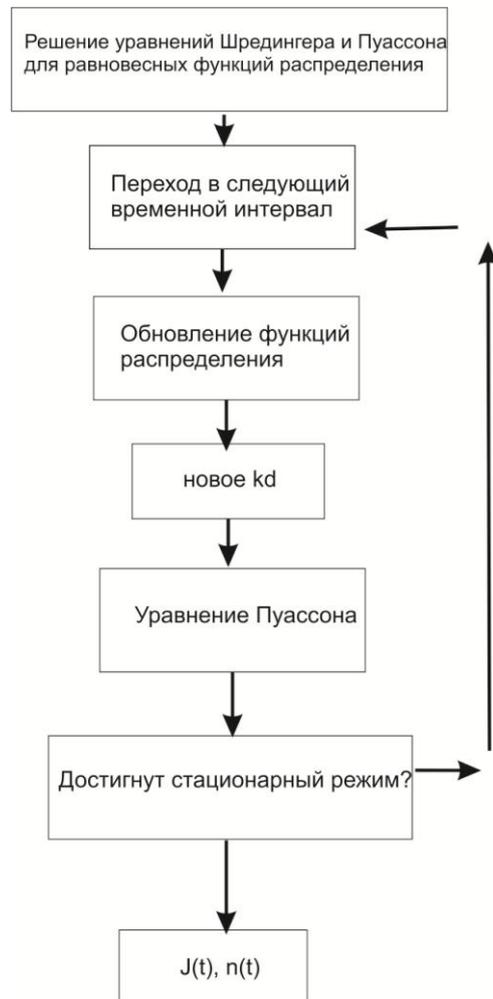


Рис. 2. Алгоритм расчета

### Функции распределения в структуре

Когда в представленной структуре начинает течь ток, функции распределения для контактов принимают определенный вид. Качественно хорошим приближением для приведенного случая является приближение сплошных контактов. В данном случае, функция распределения для левого контакта может быть записана в виде

$$f_k^L(k_d) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar^2(k - k_d)^2}{2mk_B T}\right) + 1}, \quad (6)$$

где  $k_d$  – волновой вектор электронов дрейфа,  $m$  – эффективная масса в направлении тока.

Поскольку  $k_d$  изменяется на выбранном интервале времени  $t = \pi$ , то учет немарковских эффектов представляется в виде следующих зависимостей функций распределения:

$$\frac{df_k}{dt} = -\tau\Delta_k^2 f_k + \tau\Delta_k^2 f_k^L(k_d), \quad (7)$$

$$\frac{df_{-k}}{dt} = -\tau\Delta_k^2 f_{-k} + \tau\Delta_{-k}^2 f_{-k}^R(k_d). \quad (8)$$

Перед тем, как задать напряжение смещения в структуре рассчитывалось уравнение Шредингера и Пуассона для равновесных функций Ферми – Дирака. Таким образом получаем потенциал в структуре. В этот момент тока в структуре нет и  $k_d = 0$  ( $J = 0$ ). Далее алгоритм решения (см. рис. 2) предполагает переход в следующий временной интервал, в котором ток отличен от нуля [9]. Уравнения Шредингера и Пуассона решаются снова, но уже для потенциала из предыдущего временного интервала  $t$ .

При использовании предыдущего значения  $k_d$ , обновляются функции распределения на новом шаге по времени и плотность тока и заряда рассчитываются заново, а затем ищется плотность тока, обусловленная изменением плотности заряда в структуре. Алгоритм повторяется до тех пор, пока не будет достигнуто равновесное состояние, то есть, когда плотность тока в контактах не станет равной сумме плотности тока в устройстве и плотности тока, полученной в связи с изменением электронной плотности.

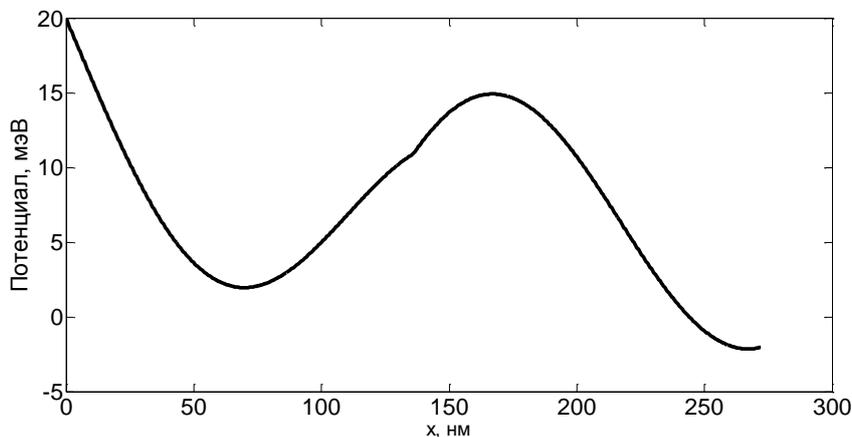


Рис. 3. Потенциал p-i-n структуры

На рис. 3 показано распределение потенциала для p-i-n структуры, рассматриваемой в работе. Структура представляет собой кремниевый p-i-n переход при комнатной температуре. Левый и правый контакты легированы до  $10^{19} \text{ см}^{-3}$ , i-область является обедненным слоем. Время релаксации в контактах принято  $\tau = 120 \text{ фс}$  на основе справочных данных для заданной величины легирования.

Важно отметить, что в представленном моделировании необходимо было корректно учесть населенности уровней, зависящие от близости контактов. В реальных структурах, потенциальная яма слева от центрального пика (отрезок 50 – 100 нм по оси абсцисс) не такая глубокая из-за процессов электрон-электронного и электрон-фононного рассеяния. Населенность граничных уровней вводилась через положение уровня Ферми в контактных слоях.

На рис. 4 представлен результат расчета электронной плотности. В данном случае к структуре было приложено обратное напряжение смещения  $V = -25 \text{ мВ}$ .

Электронная плотность растет ближе к контактам, что согласуется с общей теорией распределения электронов в структурах с сильно легированными контактами. Обедненный слой, как и предполагалось, характеризуется меньшей электронной плотностью.

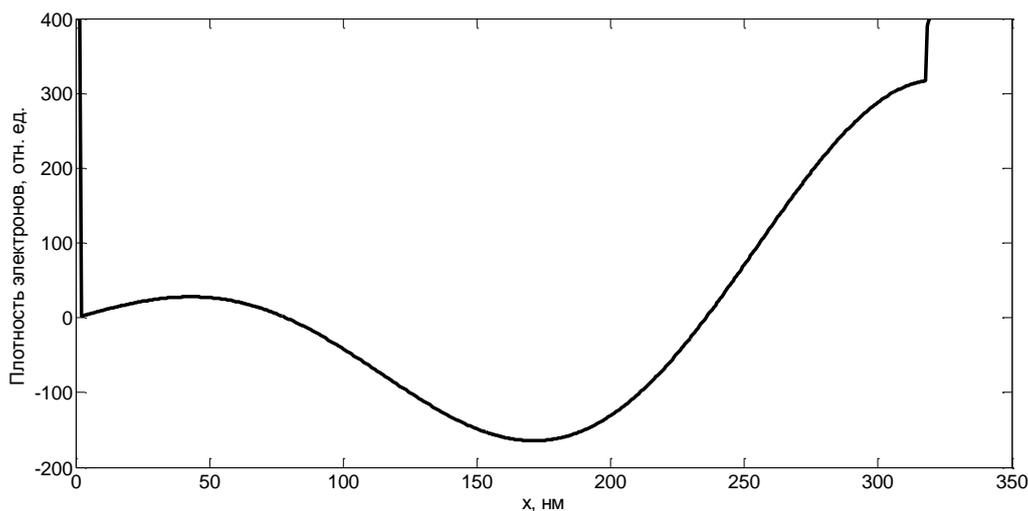


Рис. 4. Электронная плотность в p-i-n структуре

На рис. 5 показана зависимость электронной плотности для разных моментов времени. Эволюция характеристики электронной плотности показывает рост количества электронов в активной области. Увеличивается электронная плотность в обедненном слое и уменьшается вблизи правого контакта. Этот результат можно объяснить изменениями функции Ферми – Дирака в контактах [9, 21, 22]. При низкой электронной плотности в активном обедненном слое практически отсутствуют механизмы рассеяния носителей.

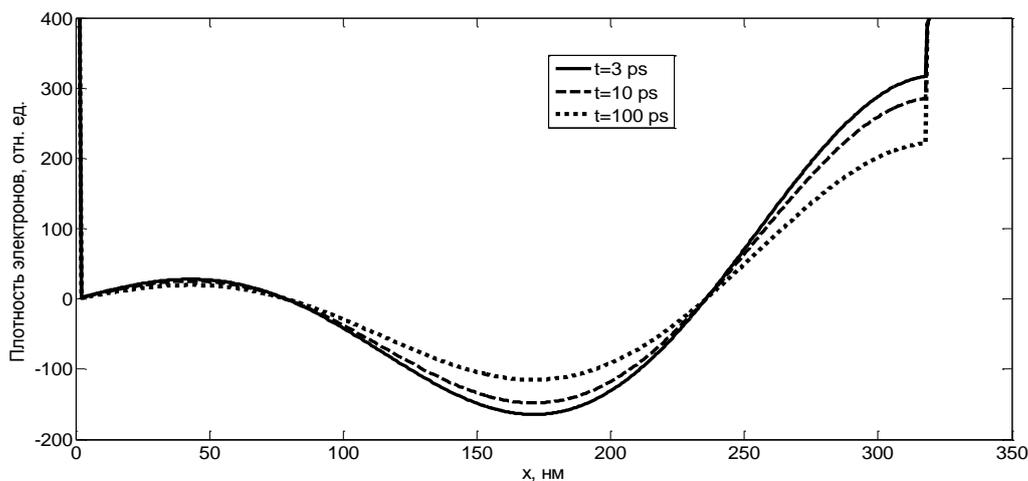


Рис. 5. Электронная плотность в p-i-n структуре

Малое время релаксации электронов в контактных слоях является основной причиной эволюции состояний носителей в активной области, что приводит к увеличению силы тока в структуре и возникновению связи между активной областью и контактами.

На рис. 6 представлен результат расчета плотности тока от времени  $t$ . Увеличение плотности тока объясняется немарковскими эффектами связи состояний электронов активной области и контактов. Время, за которое достигается стационарный режим, составляет нескольких сотен пикосекунд, то есть на несколько порядков меньше времени релаксации. Это время зависит от состояний перекрытия волновых функций. Другими словами, чем лучше связаны активная среда и контакты, тем меньше будет время установления стационарного режима.

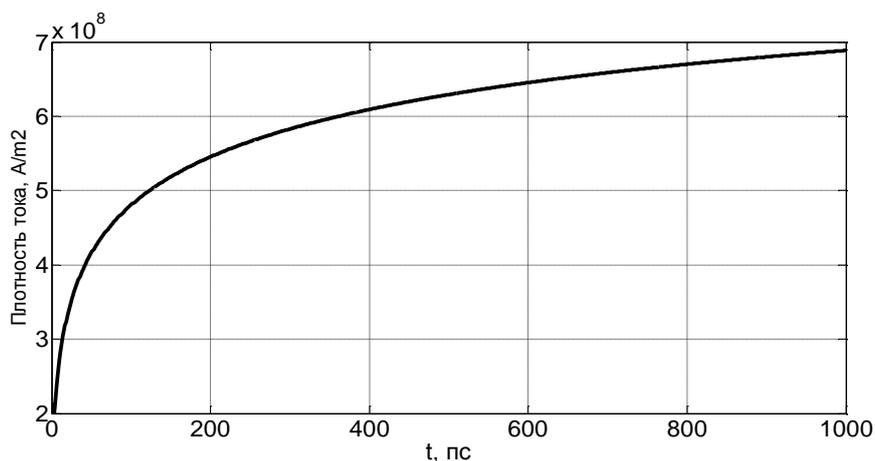


Рис. 6. Плотность тока в p-i-n структуре

## Выводы

Представленная работа посвящена теоретическому исследованию полупроводниковой p-i-n структуры с сильно легированными контактными слоями. В ходе выполнения работы было показано, что при низкой электронной плотности в активном обедненном слое практически отсутствуют механизмы рассеяния носителей. Малое время релаксации электронов в контактных слоях является основной причиной эволюции состояний носителей в активной области, что приводит к увеличению силы тока в структуре и возникновению связи между активной областью и контактами. Динамические уравнения для функции распределения Ферми – Дирака учитывают немарковский характер зависимости распределения электронной плотности в структуре, так как зависят от нестационарного волнового вектора дрейфа  $k_d$ .

**Список литературы:** 1. *M. Lundstrom*. Fundamentals of Carrier Transport, Cambridge: Cambridge University Press, 2000. 2. *D.K. Ferry and S.M. Goodnick*. Transport in Nanostructures. Cambridge: Cambridge University Press, 1997. 3. *M.V. Fischetti*. Theory of electron transport in small semiconductor devices using the Pauli master equation // *J. Appl. Phys.*, 1998, v. 83, pp. 270–291. 4. *M.V. Fischetti*. Master equation approach to the study of electronic transport in small semiconductor devices // *Phys. Rev. B*, 1999, v. 59, pp. 4901–4917. 5. *D.K. Ferry et al.* // *Sci. Technol. B*, 2003, v. 21, pp. 1891–1895. 6. *G. Ferrari et al.* Influence of contacts on the electron transport dynamics inside a mesoscopic system // *Semicond. Sci. Tech.*, 2004, v.19, pp. S254–S256. 7. *R. Gebauer and R. Car*. Current in open quantum systems // *Phys. Rev. Lett.*, 2004, v. 93, p.160404. 8. *R. Alicki and K. Lendi*. Quantum Dynamical Semigroups and Applications, Lecture Notes in Physics, Vol. 286. Germany: Springer-Verlag, 1987. 9. *B. Novakovic and I. Knezevic*. Non-Markovian electron dynamics in nanostructures coupled to dissipative contacts // *Progress of Physics*, 2012, v. 61, pp. 323–331. 10. *Соболева Н.А., Меламид А.Е.* Фотоэлектронные приборы. – М.: Высш. шк., 1974. 376 с. 11. *Шалимова К.В.* Физика полупроводников. – М.: Энергия, 1976. – 416 с. 12. *R. Brunetti, C. Jacoboni, and F. Rossi*. Quantum theory of transient transport in semiconductors: A Monte Carlo approach // *Phys. Rev. B*, 1989, v. 39, p. 10781. 13. *S. Datta and M. P. Anantram*. Steady-state transport in mesoscopic systems illuminated by alternating fields // *Phys. Rev. B*, 1992, v. 45, p. 13761. 14. *I. Knezevic*. Decoherence due to contacts in ballistic nanostructures // *Phys. Rev. B*, 2008, v. 77, p. 125301. 15. *P. Lugli and D.K. Ferry*. Degeneracy in the ensemble Monte Carlo method for high-field transport // *IEEE Trans. Electron Devices*, 1985, v. 32, pp. 2431–2437. 16. *M. A. Osman and D. K. Ferry*. Monte Carlo investigation of the electron-hole-interaction effects on the ultrafast relaxation of hot photoexcited carriers in GaAs // *Phys. Rev. B*, 1987, v. 36, p. 6018. 17. *A. M. Kriman, M. J. Kann, D.K. Ferry, and R. Joshi*. Role of the exchange interaction in the short-time relaxation of a high-density electron-plasma // *Phys. Rev. Lett.*, 1990, v. 65, pp. 1619–1622. 18. *Хансперджер Р.* Интегральная оптика: Теория и технология. М.: Мир, 1985. 384 с. 19. *Фомонпруемники* видимого и ИК диапазона / Под ред. Р.Дж. Кисса. – М.: Радио и связь, 1985. – 328 с. 20. *Y. Meir and N. S. Wingreen*. Landauer formula for the current through an interacting electron region // *Phys. Rev. Lett.*, 1992, v. 68, p. 2512. 21. *X.Q. Li et al.* Quantum master-equation approach to quantum transport through mesoscopic systems // *Phys. Rev. B*, 2005, v. 71, p. 205304. 22. *J. N. Pedersen and A. Wacker*. Tunneling through nanosystems: Combining broadening with many-particle states // *Phys. Rev. B*, 2005, v. 72, p. 195330.

Харьковский национальный  
университет радиоэлектроники  
Радиоастрономический институт НАНУ  
Университет Гуанахуато, Мексика

Поступила в редколлегию 15.11.2013