

МИНОБРНАУКИ РОССИИ  
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
**«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ  
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ Н.Г.  
ЧЕРНЫШЕВСКОГО»**  
(СГУ)

Кафедра физики полупроводников

**Моделирование влияния поверхностных состояний на оптические и  
электрические свойства квантовых точек InSb, полученных методом  
сверху-вниз**

АВТОРЕФЕРАТ БАКАЛАВРСКОЙ РАБОТЫ

студента 4 курса 412 группы

направления 11.03.04 «Электроника и наноэлектроника»

факультета нано- и биомедицинских технологий

Ветринцева Максима Викторовича

Научный руководитель

доцент, к.ф.-м.н.,

должность, уч. степень, уч. звание

\_\_\_\_\_

подпись, дата

Шишкин М.И.

фамилия, инициалы

Зав. кафедрой

д.ф.-м.н., профессор

должность, уч. степень, уч. звание

\_\_\_\_\_

подпись, дата

Михайлов А.И.

фамилия, инициалы

Саратов 2020

## **ВВЕДЕНИЕ**

Исследования и разработка квантовых точек (КТ) представляет для современных учёных особый интерес, поскольку КТ находят применения в огромном диапазоне сфер жизнедеятельности: начиная от электроники и заканчивая медициной [1]. Однако, свойства КТ до конца не изучены и не объяснены. Рассмотрение поверхностных состояний (ПС) – важная деталь в изучении квантоворазмерных объектов. Учёт влияния ПС на свойства КТ может позволить более точно управлять задаваемыми свойствами КТ и расширить спектр возможных применений таких частиц [2].

**Цель работы** - исследовать влияние поверхностных состояний, обусловленных обрывом кристаллической решётки, на электрические свойства полупроводниковой сферической квантовой точки InSb, в частности, построить физическую модель КТ с поверхностными состояниями, получить распределение носителей заряда в центральном сечении КТ и проанализировать результат.

### **Актуальность темы**

Необходимость рассмотрения поверхностных состояний в КТ очевидна, поскольку поверхность в таких низкоразмерных объектах занимает значительно большую часть, относительно объёма материала. Для светодиодов и лазеров на основе КТ, можно повысить интенсивность излучения за счёт излучательной рекомбинации носителей заряда на ПС, что в свою очередь позволит создавать более чёткие и контрастные дисплеи и экраны, и кроме этого, снизит ошибку, связанную с оптическим рассеянием излучения от КТ в органах и клетках живых организмов. В транзисторах на базе КТ, рассмотрение ПС необходимо для обеспечения наиболее оптимальных условий туннелирования электронов.

На данный момент существует не много работ по исследованию влияния поверхностных состояний на свойства КТ.

### **Исследуемая структура**

На сегодняшний день исследование материалов, размеры которых не превышают хотя бы в одном из трёх существующих измерений 100 нм, принято

относить к области нанотехнологий. С середины прошлого века изучение углеродных материалов, а затем металлических и полупроводниковых, привело к выводам о том, что известные материалы, взятые в микроскопических объемах, меняют свои физические, химические, функциональные свойства [3].

Вариации полупроводниковых квантовых структур сводятся к трем основным группам, отличающимся размером области локализации свободных носителей заряда: структуры, ограниченные собственными размерами в трех измерениях – т.н. квантовые точки или 0D структуры; ограниченные в двух плоскостях – квантовые нити или проволоки или 1D структуры, ограниченные только по одному измерению – квантовые ямы (2D структуры) [4].

Для нанокристаллов энергетический спектр электронов ограничен в трех измерениях, для квантовых ям движение электронов становится двумерным, для проволок – одномерным [5]. Электроны, приобретая дискретные значения энергии, начинают вести себя так, как если бы они принадлежали одиночному атому, а не находятся в объемной толще полупроводника. По этой причине КТ называют искусственными атомами, т.к. их энергетический спектр подобно атомам представляет собой набор расщепленных состояний (уровней), отделенных друг от друга зонами запрещенных состояний [6].

Метод механического измельчения, или метод «сверху-вниз», является одним из наиболее бюджетных. Однако, помимо дешевизны метода получения и универсальности в применении полупроводниковых структур группы  $A_3B_5$ , для этого метода имеют место явления, связанные с дефектами в объеме и на поверхности материала.

В данной работе рассмотрены влияния поверхностных дефектов, которые в технической литературе принято называть - «поверхностные состояния» (ПС). Такие состояния могут возникать по разным причинам, например, в результате механических нарушений структуры после процедуры измельчения, или, из-за остатков травителя на поверхности кристалла.

Важно отметить, что даже в случае, когда на поверхности образца нет дефектов влияние оказывают поверхностные состояния типа Тамма и ПС типа

Шокли. Эти состояния вызваны нарушением периодичности кристаллической структуры, возникающим на границе материала.

Поверхностные состояния оказывают влияние на ход потенциала в материале и, если в крупных полупроводниковых образцах ими можно пренебречь, в квантоворазмерных объектах, когда размеры частицы сравнимы с величиной постоянной решетки, воздействие поверхностных уровней на электрические свойства кристалла становятся более существенными и требуют отдельного рассмотрения. С точки зрения энергетической зонной диаграммы, поверхностные состояния могут рассматриваться как разрешенные состояния в запрещенной зоне.

По зарядовому состоянию ПС, так же, как и объемные состояния в запрещенной зоне полупроводника, бывают двух типов – донорные и акцепторные. Состояния донорного типа положительно заряжены, если расположены выше уровня Ферми, и нейтральны, если расположены ниже уровня Ферми. Состояния акцепторного типа нейтральны, если расположены выше уровня Ферми, и отрицательно заряжены, если расположены ниже уровня Ферми. Многочисленные эксперименты показали, что обычно на поверхности полупроводников в верхней половине запрещенной зоны расположены ПС акцепторного типа, а в нижней половине – ПС донорного типа.

ПС амфотерны по своей природе и могут захватывать как электроны, так и дырки

Поверхностные состояния, возникающие на чистой не окислившейся поверхности полупроводника (состояния Тамма, а также состояния, определяемые абсорбцией и различными нарушениями поверхности), электрически хорошо контактируют с объёмом. Это означает, что время перехода электронов из объёма на поверхностные уровни, т. е. время установления равновесия таких поверхностных состояний с объёмом, оказываются весьма небольшим – порядка  $10^{-4} - 10^{-7}$  с. Поэтому такие состояния называют быстрыми.

Реальная поверхность полупроводника всегда взаимодействует с внешней средой, поэтому она практически всегда покрыта слоем окисной плёнки, на поверхности которой также возникают поверхностные состояния. Однако равновесие этих состояний с объёмом полупроводника устанавливается в течение сравнительно продолжительного времени – от  $10^{-2}$  с до нескольких часов и даже суток. Это объясняется тем, что для прохождения электронов сквозь окисный слой, являющийся изолятором, требуется значительное время. Такие поверхностные состояния называются медленными. Энергия и концентрация медленных состояний изменяются в широких пределах при изменении окружающей газовой среды, обычно их концентрация более  $10^{13}$  см<sup>-2</sup>

От состояния поверхности зависят многие важные характеристики полупроводниковых приборов, например, обратный ток диодов, напряжение пробоя p–n-переходов, работа выхода и т. д.

Для определения влияния поверхностных состояний на электрические свойства антимида индия, построена модель КТ, в которой решалось уравнение Шрёдингера, с учётом хода потенциала в объёме, и на поверхности образца. В качестве модели рассмотрена сферическая квантовая точка антимида индия, полученная методом «сверху-вниз» диаметром 40 нм. Для учёта хода потенциала решалось уравнение Пуассона для выбранной модели. Для точности и простоты расчётов использована двумерная модель, представляющая собой центральное сечение сферической КТ, с выделенными поверхностными состояниями и, взаимодействующими с ними, приповерхностными областями (ПО).

Для простоты расчетов будем считать, что все ПС являются акцепторными и температура такова, что все ПС ионизованы, т.е. все неуплотненные пары скомпенсированы электронами из ПО.

Обрыв периодичности решетки происходит на крайнем атоме материала. Поэтому, для построения модели ПС, удобно выделить в КТ участок толщиной в 1 атом. Размеры атомов сурьмы и индия с точки зрения потенциала определяются постоянной решетки 0,648 нм. Вместе с поверхностными

состояниями необходимо выделить приповерхностные области (ПО), чтобы определить, как изменится ход потенциала в КТ с учётом ПС.

### **Методика решения поставленных задач**

В работе описан процесс моделирования поверхностных состояний в КТ InSb с помощью программного пакета «Comsol Multiphysics».

Произведён расчёт силы взаимодействия между вакансиями на поверхности и электронами приповерхностных областей, и энергии ионизации атомов сурьмы и индия из приповерхностных областей. Результаты расчёта были использованы для нахождения коэффициентов уравнения Пуассона.

Решение уравнения Пуассона, как и решение уравнения Шрёдингера в Comsol производилось методом конечных элементов. Краевая задача для уравнения Пуассона представляет собой само уравнение в совокупности с внешним и с внутренним граничным условием. Внешнее граничное условие задаётся условием Дирихле, а внутреннее граничное условие – с помощью обобщённого условия Неймана.

Произведён оптимальный выбор сетки для модели центрального сечения сферической КТ с ПС. Размер конечных элементов, в которых решаются уравнения, соответствует постоянной решётки антимонида индия 0,648 нм.

Уравнение Шрёдингера реализовано с использованием стандартного уравнения в частных производных в форме коэффициентов из, встроенной в Comsol, библиотеки PDE.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исследовано влияние поверхностных состояний, обусловленных обрывом кристаллической решётки, на электрические свойства полупроводниковой сферической квантовой точки InSb. Построена физическая модель КТ с поверхностными состояниями. Получены распределения носителей заряда в центральном сечении КТ. Анализ результатов решения уравнения Пуассона показал, что поверхностные состояния в квантовых точках могут считаться потенциальными ямами шириной, сравнимой с постоянной решётки, что резко увеличивает вероятность нахождения носителей заряда на поверхности КТ. Влияние ПС на свойства КТ более выражено в КТ с носителями заряда, возбуждёнными до энергий первого квантового дискретного уровня, чем в КТ с носителями заряда, возбуждёнными до энергии второго квантового дискретного уровня.

Сравнительный анализ полученных графиков показал, что при увеличении собственной энергии носителей заряда, которая зависит от внешнего воздействия на КТ, увеличивается вероятность преодоления потенциального барьера, обусловленного ПС, однако вероятность перекрытия носителей заряда в приповерхностных областях уменьшается.

Полученные в результате численного моделирования распределения дают основание полагать, что ПС могут создавать в КТ центры на которых велика вероятность рекомбинации носителей заряда. Это свойство может быть использовано в прямозонных полупроводниках для создания КТ с высоким коэффициентом усиления, за счёт излучательной рекомбинации носителей заряда в центрах, создаваемых поверхностными состояниями.

## СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

- 1 Махаринец А. В. Модель сенсора тяжелых металлов, выполненная на основе квантовых точек // Прикаспийский журнал: управление и высокие технологии физика твёрдого тела, наносистем и материалов. – 2013. - № 2. – 160 с.
- 2 Л. Карвер Моделирование поверхностных плазмонов // IEEE Spectrum/ - 2016. – 24 с.
- 3 Konopsky V.N., Alieva E.V.: Optical biosensors based on photonic crystal surface waves / Methods Mol. Biol. 503. – 2009. – 49 – 64 с.
- 4 Мусихин С. Ф. Сенсоры на основе металлических и полупроводниковых коллоидных наночастиц для биомедицины и экологии// Биотехносфера. – 2013. - № 2. – 2 с.
- 5 Zandi O. Impacts of Surface Depletion on the Plasmonic Properties of Doped Semiconductor Nanocrystals // The University of Texas at Austin. – 2016. – 12 с.
- 6 Alivisatos A. P. Semiconductor Clusters, Nanocrystals, and Quantum Dots // Science. – 1996. – V. 271, № 5251. – P. 933-937.
- 7 de Mello Donega C. Synthesis and properties of colloidal heteronanocrystals // Chem Soc Rev. – 2011. – V. 40, № 3. – P. 1512-46.
- 8 Shenderova O. A., Zhirnov V. V., Brenner D. W. Carbon Nanostructures // Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences. – 2002. – V. 27, № 3-4. – P. 227-356.
- 9 Пека Г.П. Физические явления на поверхности полупроводников/ Г. П. Пека П. – М.: Изд-во Высшая школа, 1984. - 214 с.
- 10 Maack, J. R. Size-dependent nonlocal effects in plasmonic semiconductor particles/ J. R. Maack, N. A. Mortensen, M. Wubs// 2018. – 6 с.
- 11 Гуртов, В. А. Твердотельная электроника: Учеб. пособие / В. А. Гуртов. – Москва, 2005. – 492 с.
- 12 Дюбуа А.Б. Электрон–электронные взаимодействия в умеренно легированном гетеропереходе  $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ / А.Б. Дюбуа. – Москва, 2010. – 4



с.

13 Sudiarta I. W. The finite difference time domain (FDTD) method to determine energies and wave functions of two-electron quantum dot/ I. W. Sudiarta, L. M. Angraini// 2018. – 11 с.

14 Ткач Н.В. Электроны, дырки и экситоны в сверхрешетке цилиндрических квантовых точек с предельно слабой связью квазичастиц между слоями квантовых точек/ Н.В. Ткач, А.М. Маханец, Г.Г. Зегря// Физика и техника полупроводников, 2002, том 36, вып. 5. – 231 с.

15 Осинский В.И. Исследование излучения экситонов как элементов для квантовых вычислений/ ElectronComm 2015, Vol. 20, №3(86). – 135 с.

16 Зубков В.И. Моделирование вольт-фарадных характеристик гетероструктур с квантовыми ямами с помощью самосогласованного решения уравнений Шредингера и Пуассона/ Физика и техника полупроводников, 2006, том 40, вып. 10. – 56 с.

17 Быстрые и медленные поверхностные состояния [Электронный ресурс] – URL: <https://helpiks.org/5-45726.html> (дата обращения 05.06.2020). -Загл. с экрана. - Яз. рус.

18 Li J. Study on Scattering and Absorption Properties of Quantum-Dot-Converted Elements for Light-Emitting Diodes Using Finite-Difference Time-Domain Method/ J. Li, Y. Tang ,Z. Li ,X. Ding,D. Yuan,B. Yu// Materials, 2017. – 3 с.

19 Comsol Multiphysics [Электронный ресурс] Программные продукты COMSOL. – URL: [https://www.comsol.ru/events/webinars?utm\\_source=google&utm\\_medium=cpc&utm\\_term=%2Bcomsol%20%2Bmultiphysics&utm\\_campaign=search&utm\\_content=&gclid=CjwKCAjw5Ij2BRBdEiwA0Frc9eM4LPixiZZfj1KYuXBMAwwl1G--0tVXylmteg30gkfSSOkTrzKHZBoC26YQAvD\\_BwE](https://www.comsol.ru/events/webinars?utm_source=google&utm_medium=cpc&utm_term=%2Bcomsol%20%2Bmultiphysics&utm_campaign=search&utm_content=&gclid=CjwKCAjw5Ij2BRBdEiwA0Frc9eM4LPixiZZfj1KYuXBMAwwl1G--0tVXylmteg30gkfSSOkTrzKHZBoC26YQAvD_BwE) (дата обращения: 10.04.2020). -Загл. с экрана. - Яз. рус.

20 Курушин А.А. Решение мультифизических СВЧ задач с помощью САПР COMSOL– М.,/ А.А. Курушин// «One-Book», 2016, - 41 с.

