

**Ковальчук Вадим,**  
здобувач другого (магістерського) рівня вищої освіти  
фізико-математичного факультету  
**Грищук Андрій,**  
кандидат педагогічних наук, доцент,  
доцент кафедри фізики та методики її навчання,  
Житомирський державний університет імені Івана Франка,  
м. Житомир, Україна

### МОДЕЛЮВАННЯ ТРАНСПОРТУ В КОНТАКТАХ Cr-CdHgTe

В теорії термоелектронної емісії, розвиненої Бете, передбачається, що 1) висота бар'єру  $q\varphi_B$  набагато більша  $kT$ ; 2) область, що визначає термоелектронну емісію, знаходиться в термодинамічному балансі; 3) проходження повного струму не порушує цього балансу. Такі припущення дозволяють рахувати, що повний струм – це різниця між струмом з металу в напівпровідник і протилежним йому струмом із напівпровідника в метал, причому метал і напівпровідник характеризуються кожен своїм квазірівнем Фермі. Зрозуміло, що в цьому випадку струм не залежить від форми бар'єру, а залежить лише від його висоти.

Густина струму з напівпровідника в метал  $J_{s \rightarrow m}$  визначається числом електронів, які рухаються до металу (у напрямку  $x$ ) з енергією, достатньою для подолання потенціального бар'єру:

$$J_{s \rightarrow m} = \int_{E_F + q\varphi_B}^{\infty} qv_x dn, \quad (16)$$

(1)

де  $E_F + q\varphi_B$  — мінімальна енергія, необхідна для термоелектронної емісії в металі;  $v_x$  — швидкість носіїв у напрямку переносу. Концентрація електронів з енергією в інтервалі від  $E$  до  $E + dE$  дорівнює

$$dn = N(E) F(E) dE = \frac{4\pi (2m^*)^{3/2}}{h^3} \sqrt{E - E_c} \exp[-(E - E_c + qV_n)/kT] dE, \quad (17)$$

(2)

де  $N(E)$  — густина станів,  $F(E)$  — функція розподілу носіїв енергії,  $m^*$  — ефективна маса в напівпровіднику,  $qV_n \equiv E_c - E_F$ .  $qV_n = E_c - E_F$ .

Якщо припустити, що повна енергія електрона в зоні провідності являє собою тільки кінетичну енергію, то

$$E - E_c = \frac{1}{2} m^* v^2, \quad (18a)$$

$$dE = m^* v dv, \quad (18б)$$

$$\sqrt{E - E_c} = v \sqrt{m^*/2}. \quad (18в) \quad (3)$$

Якщо підставити формули 18а, 18б та 18в у формулу 17, отримаємо

$$dn = 2 \left( \frac{m^*}{h} \right)^3 \exp \left( - \frac{qV_n}{kT} \right) \exp \left( - \frac{m^* v^2}{2kT} \right) (4\pi v^2 dv). \quad (19) \quad (4)$$

Рівняння (4) визначає число електронів в одиниці об'єму зі швидкостями в інтервалі від  $v$  до  $v + dv$ , що рухаються в будь-яких напрямках. Розкладаючи швидкість електронів на компоненти вздовж осей і вибираючи вісь  $x$  паралельно напрямку переносу, отримаємо

$$v^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2. \quad (20) \quad (5)$$

Після перетворення  $4\pi v^2 dv = dv_x dv_y dv_z$  з рівняння 1, 4 та 5 отримуємо

$$\begin{aligned} J_{s \rightarrow m} &= 2q \left( \frac{m^*}{h} \right)^3 \exp \left( - qV_n/kT \right) \times \\ &\times \int_{v_{0x}}^{\infty} v_x \exp \left( - m^* v_x^2 / 2kT \right) dv_x \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left( - m^* v_y^2 / 2kT \right) dv_y \times \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left( - m^* v_z^2 / 2kT \right) dv_z = \\ &= \left( \frac{4\pi q m^* k^2}{h^3} \right) T^2 \exp \left( - qV_n/kT \right) \exp \left( - \frac{m^* v_{0x}^2}{2kT} \right). \quad (21) \quad (6) \end{aligned}$$

Мінімальна швидкість ( $v_{0x}$ ) у напрямку  $x$ , необхідна для подолання бар'єру, визначається співвідношенням

$$\frac{1}{2} m^* v_{0x}^2 = q(V_{bi} - V), \quad (22) \quad (7)$$

Де  $V_{bi}$  – висота потенціального бар'єру за нульового зміщення (мал. 1 а). Якщо підставити вираз 22 у вираз 21, знайдемо

$$\begin{aligned} J_{s \rightarrow m} &= \left( \frac{4\pi q m^* k^2}{h^3} \right) T^2 \exp \left[ - \frac{q(V_n + V_{bi})}{kT} \right] \exp \left( \frac{qV}{kT} \right) = \\ &= A^* T^2 \exp \left( - \frac{q\Phi_B}{kT} \right) \exp \left( \frac{qV}{kT} \right). \quad (23) \quad (8) \end{aligned}$$

$$\text{Тут } \Phi_B \equiv V_n + V_{bi} ;$$

$$A^* = \frac{4\pi q m^* k^2}{h^3} \quad (9)$$

— ефективна постійна Річардсона для термоелектронного випромінювання для нехтування розсіюванням на оптичних фонах і квантовомеханічним відображенням. Для вільних електронів постійна Річардсона  $A$  дорівнює  $120 \text{ A}\cdot\text{см}^{-2}\cdot\text{K}^{-2}$ . Якщо врахувати зниження потенціального бар'єру за рахунок сили зображення, то в рівнянні 9 висоту бар'єру  $\varphi_B$  потрібно зменшити на  $\Delta\varphi$ .

Для напівпровідників з ізотропною ефективною масою в нижньому мінімумі зони провідності, таких, як GaAs  $n$ -типу,  $A^*/A = m^*/m_0$ , де  $m^*$  і  $m_0$  — відповідно ефективна маса і маса вільного електрона. Для багатодольних напівпровідників відповідна постійна Річардсона  $A^*$  для кожного енергетичного мінімуму задається виразом

$$\frac{A_i^*}{A} = \frac{1}{m_0} (l_1^2 m_y^* m_z^* + l_2^2 m_z^* m_x^* + l_3^2 m_x^* m_y^*)^{1/2}, \quad (25) \quad (10)$$

де  $l_1, l_2$  і  $l_3$  — косинуси кутів між нормаллю до площини контакту і основними осями еліпсоїдів,  $m_x^*, m_y^*$  і  $m_z^*$  — компоненти тензора ефективної маси. Мінімуми зони провідності германію розташовані на краю зони Бріллюена в напрямку  $\langle 111 \rangle$ . Ці мінімуми еквівалентні чотирьом еліпсоїдам з поздовжньою масою  $m_i^* = 1,64m_0$  і поперечною  $m_i^* = 0,082 m_0$ . Сумма всіх  $A_i^*$  мінімальна в напрямку  $\langle 111 \rangle$ :

$$\left(\frac{A^*}{A}\right)_{n\text{-Ge}\langle 111 \rangle} = m_i^*/m_0 + [(m_i^*)^2 + 8m_i^* m_i^*]^{1/2}/m_0 = 1,11. \quad (26) \quad (11)$$

Максимальним виявляється значення  $A^*$  в напрямку  $\langle 100 \rangle$

$$\left(\frac{A^*}{A}\right)_{n\text{-Ge}\langle 100 \rangle} = \frac{4}{m_0} \left[ \frac{(m_i^*)^2 + 2m_i^* m_i^*}{3} \right]^{1/2} = 1,19. \quad (27) \quad (12)$$

Мінімуми зони провідності кремнію розташовані в напрямку  $\langle 100 \rangle$ . При цьому  $m_i^* = 0,98m_0$ , а  $m_i^* = 0,19m_0$ . Всі мінімуми надають однаковий внесок у струм в напрямку  $\langle 111 \rangle$ , в якому досягається максимальне значення  $A^*$ :

$$\left(\frac{A^*}{A}\right)_{n\text{-Si}\langle 111 \rangle} = \frac{6}{m_0} \left[ \frac{(m_i^*)^2 + 2m_i^* m_i^*}{3} \right]^{1/2} = 2,2. \quad (28) \quad (13)$$

Мінімальне значення  $A^*$  досягається тут у напрямку  $\langle 100 \rangle$ :

$$\left(\frac{A^*}{A}\right)_{n\text{-Si}\langle 100 \rangle} = 2m_i^*/m_0 + 4(m_i^* m_i^*)^{1/2}/m_0 = 2,1. \quad (29) \quad (14)$$

Валентні зони Ge, Si і GaAs мають два енергетичних мінімуми при  $k = 0$ . Тому струм, створюваний легкими і важкими дірками, практично не залежить від напрямків. Сумуючи вклад цих двох типів носіїв, отримуємо

$$\left(\frac{A^*}{A}\right)_{p\text{-типа}} = (m_{lh}^* + m_{hh}^*)/m_0, \quad (30)$$

Оскільки висота бар'єру для електронів, що рухаються з металу в напівпровідник, залишається незмінною, величина відповідного струму не залежить від прикладеної напруги. За термодинамічної рівноваги (тобто коли  $V = 0$ ) цей струм дорівнює струму, що проходить з напівпровідника в метал. Відповідна густина струму отримується з рівняння 23 підстановкою  $V = 0$ :

$$J_{m \rightarrow s} = -A^*T^2 \exp\left(-\frac{q\Phi_{Bn}}{kT}\right), \quad (31)$$

Сума виразів (23) і (31) показує щільність повного струму:

$$J_n = \left[ A^*T^2 \exp\left(-\frac{q\Phi_{Bn}}{kT}\right) \right] \left[ \exp\left(\frac{qV}{kT}\right) - 1 \right] =$$

$$= J_{ST} \left[ \exp\left(\frac{qV}{kT}\right) - 1 \right], \quad (32) \quad (17)$$

де

$$J_{ST} \equiv A^*T^2 \exp\left(-\frac{q\Phi_{Bn}}{kT}\right). \quad (33) \quad (18)$$

Рівняння 17 має такий же вигляд, що і рівняння для густини струму в  $p$ - $n$ -переході, однак вирази для густини струму насичення відрізняються.

### Список використаних джерел та літератури

1. Shen, Y.C., Mueller, G.O., Watanabe, S., Gardner, N.F., Munkholm, A., Krames, M.R.: Auger recombination in InGaN measured by photoluminescence. *Appl. Phys. Lett.* 91, 141101–141103 (2007)
2. Strite, S., Morkoz, H.: GaN, AlN, and InN: a review. *J. Vac. Sci. Technol. B* 10, 1237–1266 (1992) Svane, A., Christensen, N.E., Gorczyca, I., van Schilfgarde, M., Chantis, A.N., Kotani, T.: Quasiparticle self-consistent GW theory of III–V nitride semiconductors: bands, gap bowing, and effective masses. *Phys. Rev. B.* 82, 115102 (2010)
3. Tackett, A.R., Di Ventra, M.: Targeting specific eigenvectors and eigenvalues of a given Hamiltonian using arbitrary selection criteria. *Phys. Rev. B* 66, 245104 (2002)
4. Zinovchuk, A.V.: Numerical determination of concentration-dependent Auger recombination coefficient in n-InGaN alloys. *Opt. Quant. Electron.* 47, 2399–2406 (2015) *gon Cross // Rom.Journ.Phys.* 2007. Vol. 54. №.1-2. P. 37-47.
5. Zinovchuk, A.V., Gryschnik, A.M. Alloy-assisted Auger recombination in InGaN // *Optical and Quantum Electronics*, 2018, V. 50 455 P.