

Зависимость проводимости освещенного неидеального гетероперехода от внешнего смещения

© В.А. Борщак, В.А. Смытына, Е.В. Бритацкий[¶], А.П. Балабан, Н.П. Затовская

Одесский национальный университет им. И.И. Мечникова,
65082 Одесса, Украина

(Получена 28 декабря 2010 г. Принята к печати 31 декабря 2010 г.)

Показана возможность применения туннельно-прыжковой модели токопереноса для расчета проводимости в барьерной области освещенного неидеального гетероперехода. Проведен расчет вольт-амперной характеристики гетероперехода с учетом преобладания туннельно-прыжкового механизма переноса в барьерной области и с учетом изменения формы потенциального барьера при освещении. Показано, что рассчитанные при разных уровнях освещения вольт-амперные характеристики такого гетероперехода хорошо совпадают с наблюдаемыми экспериментально.

1. Введение

В [1,2] показано, что проводимость неидеальных гетеропереходов определяется в значительной степени туннельно-прыжковым механизмом токопереноса, причем в [1] подробно рассмотрена возможность вычисления вольт-амперных характеристик (ВАХ) таких переходов с учетом описанного в рамках теории Мотта [3] движения носителей по локализованным состояниям в области пространственного заряда (ОПЗ).

В то же время известно [4,5], что в условиях освещения форма потенциального барьера неидеального гетероперехода существенно меняется из-за захвата фотовозбужденных носителей на глубокие ловушечные центры в ОПЗ такой структуры. Это должно оказывать существенное влияние на туннельно-прыжковую проводимость ОПЗ. Поскольку некоторые неидеальные гетеропереходы могут использоваться в качестве различных фотоэлектрических приборов [6], то исследование такого влияния при наличии внешнего смещения (т.е. зависимости проводимости неидеального гетероперехода от хода потенциала в ОПЗ в условиях фотовозбуждения при наличии внешнего смещения) представляется актуальным.

Однако, как было показано в [1], значение туннельно-рекомбинационного тока в неидеальном гетеропереходе зависит не только от прыжковой проводимости ОПЗ, но и от условий протекания процессов рекомбинации на гетерогранице, которые определяют ее эффективную проводимость G_r . Очевидно, что при определении проводимости освещенного гетероперехода эту зависимость в общем случае также необходимо учитывать. Рассмотрим для определенности какой-либо типичный неидеальный гетеропереход, например CdS–Cu₂S. Именно его характерные параметры будут использованы при дальнейших расчетах и вычислениях.

2. Модель фотопроводимости неидеального гетероперехода

При вычислении вольт-амперной характеристики освещенного гетероперехода рассмотрим вначале пре-

дельный случай, когда ток определяется только сопротивлением ОПЗ, т.е. скорость рекомбинации на границе раздела настолько велика, что протекающий через гетеропереход туннельно-рекомбинационный ток ею не ограничивается. В этом случае все приложенное внешнее смещение U будет падать в пределах ОПЗ ($U_\sigma = U$), а падение напряжения на гетерогранице $U_r = 0$. В этом случае плотность тока через освещенный гетеропереход будет определяться только проводимостью ОПЗ (G_σ):

$$j_L = G_\sigma U. \quad (1)$$

Как отмечалось в [1], эффективная проводимость гетерограницы G_r , ограничивающая туннельно-рекомбинационный ток, от освещенности гетероперехода непосредственно не зависит, поэтому ток тем сильнее будет зависеть от условий освещения, чем сильнее ток, текущий через гетеропереход, будет контролироваться проводимостью ОПЗ G_σ . Очевидно, что в рассматриваемом предельном случае воздействие освещения на величину протекающего тока будет максимальным.

Для вычисления ВАХ необходимо для каждого значения U определить G_σ . Согласно [1,3], полная туннельно-прыжковая проводимость области пространственного заряда (рассмотренная в терминах модели Мотта с переменной длиной прыжка) определяется выражением

$$G_\sigma = \left[\int_0^\omega \frac{dx}{2e^2 R'^2 (E_F) N(E_F) f^2 v_{ph} \exp(2\alpha R')} \right]^{-1}. \quad (2)$$

Здесь $f^2 v_{ph}$ — предэкспоненциальный множитель, определяющий взаимосвязь туннельного перехода электрона между локализованными состояниями с фононами, граничная частота которых v_{ph} ; E_F — энергетическое расстояние от дна зоны проводимости до уровня Ферми в ОПЗ; $N(E_F)$ — энергетическое распределение плотности состояний на уровне Ферми, по которому плотность осуществляется токоперенос; коэффициент α характеризует степень локализации состояния и определяется, как и N , энергетической глубиной залегания центра E_c ; R' — наиболее вероятная длина прыжка при определяющей роли токопереноса с переменной длиной прыжка.

[¶] E-mail: brytav@ukr.net

Согласно [1,3]:

$$N(E_{ct}) = N_0 \exp \left[- \left(\frac{E_{ct}}{E_0} \right)^{\frac{11}{6}} \right], \quad (3)$$

$$\alpha(E_{ct}) = \alpha \hbar^{-1} \sqrt{2m^* E_{ct}}, \quad (4)$$

$$R' = [6\pi\alpha(E_{ct})N(E_{ct})kT]^{\frac{1}{2}}. \quad (5)$$

Здесь N_0 , E_0 и α — константы, \hbar — постоянная Планка, m^* — эффективная масса электрона. E_{ct} представляет собой энергетическое расстояние центра от дна зоны проводимости и выражается следующим образом: $E_{ct} = \varphi_0 + \Delta F_0 - E$, где φ_0 — высота барьера гетероперехода, ΔF_0 — энергетическая глубина залегания уровня Ферми в квазилинейной области, E — энергетическая координата, направление и точка отсчета которой показаны на рис. 1.

Следует отметить, что туннельно-прыжковый токоперенос с переменной длиной прыжка осуществляется преимущественно носителями, локализованными вблизи уровня Ферми [3], поэтому определяющие его величины, входящие в выражения (2)–(5), следует вычислять для $E = E_F$, где E_F представляет собой энергетическое расстояние от дна зоны проводимости до уровня Ферми:

$$E_F(x) = \varphi(x) - F(x). \quad (6)$$

Здесь $\varphi(x)$ — ход потенциального барьера рассматриваемого неидеального гетероперехода в ОПЗ, а $F(x)$ — положение уровня Ферми в ОПЗ гетероперехода в зависимости от пространственной координаты x .

Согласно [1], при вычислении функции $F(x)$ следует учитывать, что она пропорциональна полному сопротивлению части ОПЗ от 0 до x или обратно пропорциональна полной проводимости $G_\sigma(x)$ того же участка ОПЗ. Предположим, что падения напряжения на гетерогранице не будет и все приложенное внешнее смещение падает на участке, равном ширине ОПЗ ω . В этом случае $F(0) = 0$, а $F(\omega) = eU = EU_\sigma$ и тогда

$$F(x) = eU_\sigma \left(1 - \frac{G_\sigma(\omega)}{G_\sigma(x)} \right). \quad (7)$$

Из (6) в этом случае следует

$$E_F(x) = \varphi(x) + eU_\sigma \left(1 - \frac{G_\sigma(\omega)}{G_\sigma(x)} \right). \quad (8)$$

Нетрудно видеть, что в этом случае $E_F(x)$, входящая под знаком интеграла в (2), и $G_\sigma(x)$ самосогласованы. Таким образом, для определения $G_\sigma(\omega)$ необходимо решить интегральное уравнение (2), общий вид которого

$$\left[G(\omega) \right]^{-1} = \int_0^\omega f \left(x, \omega, \frac{G_\sigma(\omega)}{G_\sigma(x)} \right) dx. \quad (9)$$

При вычислениях необходимо учитывать, что в отличие от [1] в данном случае функция $\varphi(x)$ существенно

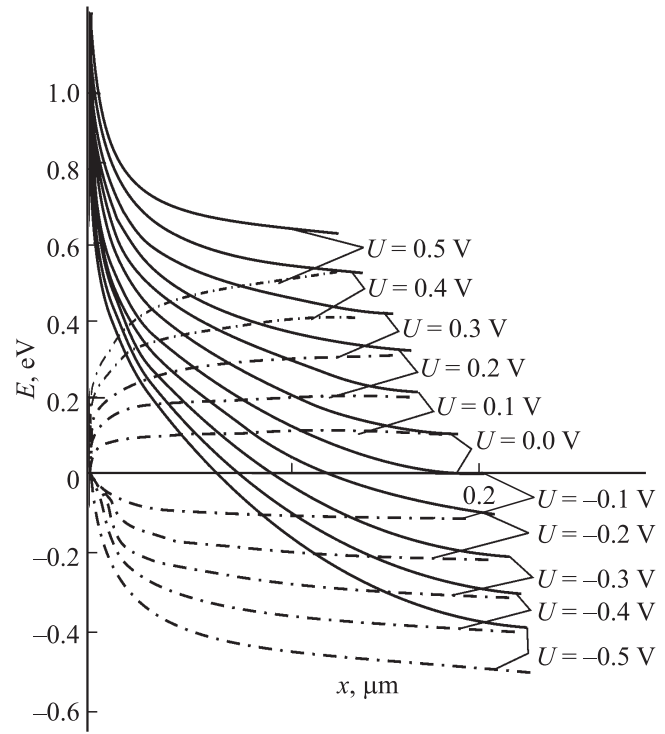


Рис. 1. Ход уровня Ферми (штрихпунктирные линии) и профиль барьера (сплошные линии) для разных смещений U , рассчитанные при значении фотоемкости 40 нФ. Скорость рекомбинации на гетерогранице считается бесконечно большой.

зависит от условий освещения и, согласно [4,5], определяется выражением

$$\varphi(x) = \frac{\varphi_0 - eU}{1 + \frac{\Delta p_0}{\alpha N_D} (e^\alpha - 1 - \alpha)} \left[1 + \frac{x^2}{\omega^2} + \left(\frac{2\Delta p_0}{\alpha N_D} - 2 \right) \frac{x}{\omega} + \frac{2\Delta p_0}{\alpha^2 N_D} \left(e^\alpha e^{-\alpha \frac{x}{\omega}} - 1 - \alpha \right) \right] + \Delta F_0, \quad (10)$$

где $\alpha = (\varphi_0 - eU)/kT$. Здесь k — постоянная Больцмана, T — температура, N_D — концентрация донорных центров, определяющих ход потенциального барьера в отсутствие его освещения. Входящий в (10) параметр Δp_0 имеет смысл концентрации дырок, захваченных в квазинейтральной области (при $x > \omega$), причем ее можно определить, зная характер распределения этой концентрации [5],

$$p(x) = \Delta p_0 \exp \left[\frac{\varphi_0}{kT} \left(\frac{\omega - x}{\omega} \right) \right], \quad (11)$$

и среднее значение неравновесного заряда p' , захваченного на ловушки в пределах ОПЗ, которое может быть определено по значению фотоемкости (C_L). Измерив темновую емкость гетероперехода (C_D) и его фотоемкость (C_L) при различных интенсивностях возбуждающего света, можно определить соответствующую каждой из этих емкостей ширину барьерной области $\omega(C_D, C_L)$,

а значит, и величины N_D и $p_i(C_D, C_L)$, поскольку величина среднего захваченного в ОПЗ неравновесного заряда связана с $p(x)$ соотношением

$$p'_i = \frac{1}{\omega} \int_0^{\omega} p(x) dx. \quad (12)$$

Определив $p_i(C_D, C_L)$ из (12) с учетом (11) для каждого значения фотоемкости C_L , а значит, и для каждой величины интенсивности возбуждающего света, можно вычислить соответствующее значение входящего в (10) параметра Δp_0 .

Из уравнения (10) видно, что при отсутствии фотовозбуждения широкозонного материала, т.е. при $\Delta p_0 = 0$, выражение (10) переходит в квадратичную форму. Однако уже при небольших значениях Δp_0 происходит существенное отклонение $\varphi(x)$ от квадратичного хода, особенно вблизи от гетерограницы, где захваченный неравновесный заряд — максимален и $\varphi(x)$ приобретает характер, близкий к экспоненциальному. При значениях Δp_0 , соответствующих большим емкостям, изменение формы $\varphi(x)$ также наиболее существенно в приграничной области, которая имеет минимальную туннельно-прыжковую проводимость, так как в этой области $E_F(x)$ имеет максимальное значение. Таким образом, функция $\varphi(x)$, а также $E_F(x)$ существенно зависят от интенсивности освещения, а следовательно, и от фотоемкости, легко измеряемой экспериментально. Согласно (3)–(5), R' определяется значением E_{ct} . Как показано выше, значения параметров, которые определяются формулами (3)–(5) (R' , N , α), следует вычислять при $E_{ct} = E_F$. Отсюда следует, что проводимость ОПЗ G_{σ} существенно зависит от вида функции $\varphi(x)$, а значит, от интенсивности возбуждающего света. Это значит, что при освещении влияние на токоперенос оказывает не только уменьшение ширины барьера, но и в значительной мере изменение его формы.

Поэтому ВАХ, определяемая $G_{\sigma L}$, будет определяться, помимо других параметров, также величиной фотоемкости $G_{\sigma L} = G_{\sigma L}(U, C_L)$.

3. Результаты расчетов

3.1. Случай бесконечной скорости рекомбинации на гетерогранице

На рис. 1 приведены зависимости $\varphi(x)$ и ход уровня Ферми $F(x)$, рассчитанные для фотоемкости $C_L = 40$ нФ при различных как положительных, так и отрицательных смещениях. Поскольку все приложенное напряжение падает в области пространственного заряда, уровень Ферми, вдоль которого происходит токоперенос, проходит в ней все энергетическое расстояние от 0 до eU . Однако по сравнению с темновым случаем [1] вблизи гетерограницы $\varphi(x)$ убывает гораздо более резко (по экспоненте, определяемой (10)), что обуславливает существенно отличный от темнового ход уровня Ферми и, следовательно, токоперенос в ОПЗ.

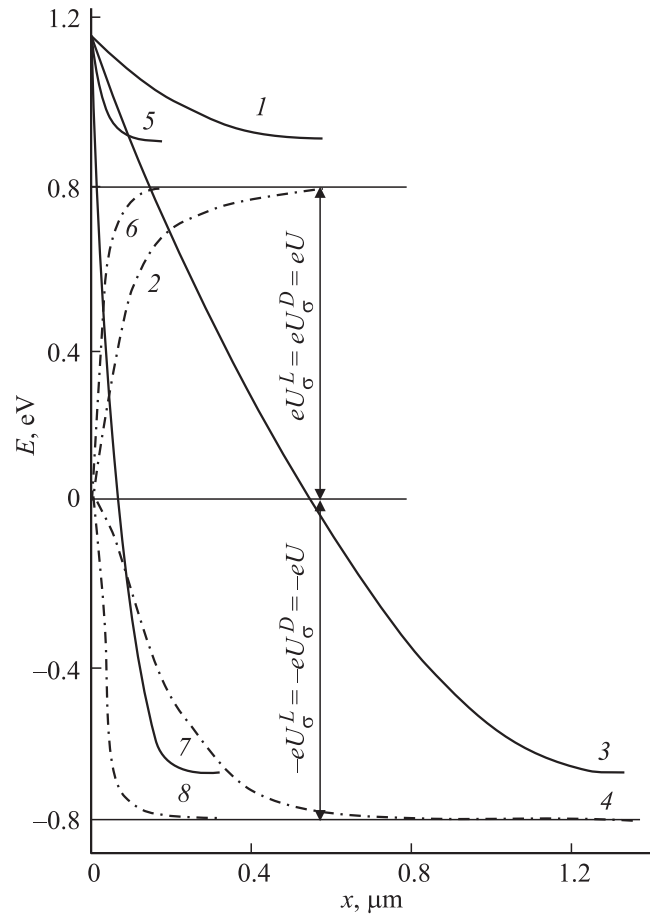


Рис. 2. Расчетные зависимости хода потенциального барьера (сплошные линии) и уровня Ферми (штрихпунктирные линии) для темнового состояния ($C_D = 7.6$ нФ) — кривые 1–4 и светового состояния ($C_L = 40$ нФ) — кривые 5–8 при двух полярностях приложенного к гетеропереходу смещения U (U_{σ}^D , U_{σ}^L — падения напряжения в ОПЗ в темноте и при освещении). Случай бесконечной скорости рекомбинации на гетерогранице.

Зависимости $\varphi(x)$ и $F(x)$, рассчитанные как для темнового ($C_D = 7.6$ нФ), так и для светового ($C_L = 40$ нФ) состояний при двух полярностях приложенного смещения и построенные в одном масштабе, приведены на рис. 2. Хорошо видно, что при освещении наряду с изменением формы сильно уменьшается ширина барьера (емкость гетероперехода увеличивается). Это приводит к увеличению проводимости гетероструктуры при любых значениях приложенного смещения.

На рис. 3 приведены темновая ВАХ и вольт-амперная характеристики гетероперехода, рассчитанные при различных значениях фотоемкости гетероперехода, что соответствует различным уровням его освещенности. При численном решении задачи параметры принимались равными $T = 300$ К, $\varphi_0 = 1$ эВ, $\Delta F_0 = 0.1$ эВ, $N_D = 10^{15}$ см $^{-3}$ (соответствует $C_D = 7.6$ нФ или $\omega_D = 1$ мкм). Отметим, что на рис. 3 показаны только токи, связанные с проводимостью гетероперехода. Для удобства сравнения темновой ВАХ с ВАХ, измеряемыми при освещении, фототок и фото-

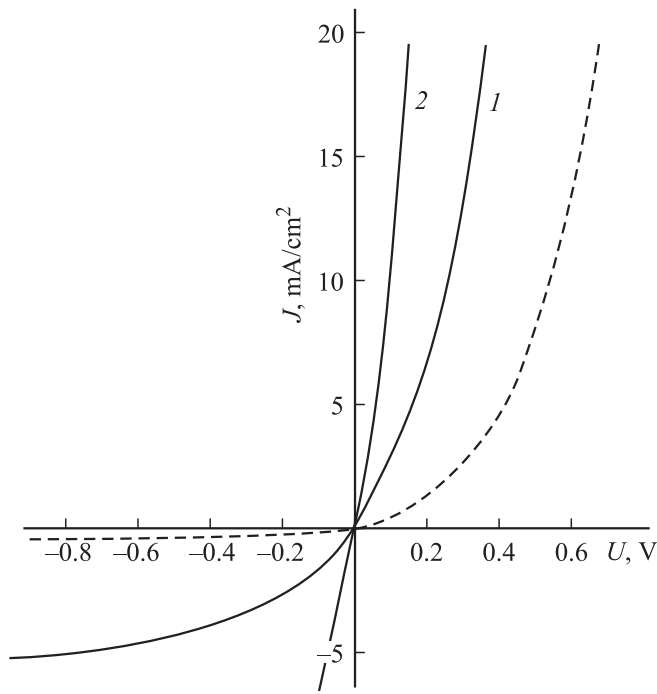


Рис. 3. ВАХ неидеального гетероперехода для случая реального хода уровня Ферми и бесконечной скорости рекомбинации на гетерогранице, рассчитанные при значении фотоемкости $C_L, \text{нФ}$: 1 — 15, 2 — 40. Пунктиром показана темновая ВАХ.

эда, генерируемые гетеропереходом, не вводились в расчетную модель и, следовательно, все кривые проходят через точку $U = 0, j = 0$.

Как видно из рис. 3, при большой скорости поверхностной рекомбинации, когда ток определяется только проводимостью ОПЗ, для ВАХ характерны сильная зависимость от фотоемкости дифференциального сопротивления (особенно при $U = 0$), коэффициента выпрямления и коэффициента неидеальности. При росте освещенности небольшие по величине коэффициент выпрямления и дифференциальное сопротивление становятся еще меньшими, а высокий (~ 4.4) для темновой ВАХ коэффициент неидеальности увеличивается до значения ~ 10 .

Измеряемые при освещении вольт-амперные характеристики такого типа наблюдались авторами экспериментально у многих тонкопленочных гетерофотоэлементов CdS—Cu₂S. Малое эквивалентное шунтирующее сопротивление перехода обусловлено значительной прыжковой проводимостью ОПЗ, ширина и форма которой сильно зависят от фотоемкости, а значит, и от освещения. При достаточно большой скорости поверхностной рекомбинации ОПЗ полностью контролирует ток через гетеропереход. Так как в освещенном гетеропереходе эквивалентное шунтирующее сопротивление мало, для любых смещений это может приводить к весьма низким значениям напряжения холостого хода у таких гетерофотоэлементов.

3.2. Случай конечной скорости рекомбинации на гетерогранице

Если скорость поверхностной рекомбинации на гетерогранице конечна, то процесс рекомбинации на гетерогранице вносит ограничение в ток, протекающий через гетеропереход. В этом случае как в области пространственного заряда, так и на границе раздела, будет падать только часть (U_σ и U_r соответственно) приложенного к гетеропереходу внешнего смещения U , причем всегда будет выполняться следующее условие

$$U = U_r + U_\sigma. \tag{13}$$

В силу непрерывности тока $j_r = j_\sigma$ токоперенос будет определяться системой уравнений

$$\begin{cases} j = G_r U_r = G_\sigma U_\sigma \\ U = U_r + U_\sigma \end{cases}, \tag{14}$$

в которой G_σ определяется из (2), а G_r , согласно [1], определяется выражением

$$G_r = e\sigma_r N_r f^2 v_{ph} (\varphi_0 + \Delta F_0)^{-2} \times \int_0^{eU_r} R'(E) N(E) \exp[-2\alpha(E)R'(E)] dE. \tag{15}$$

Вычисления проводились методом, описанным в [1], с учетом влияния освещения на форму потенциального барьера $\varphi(x)$.

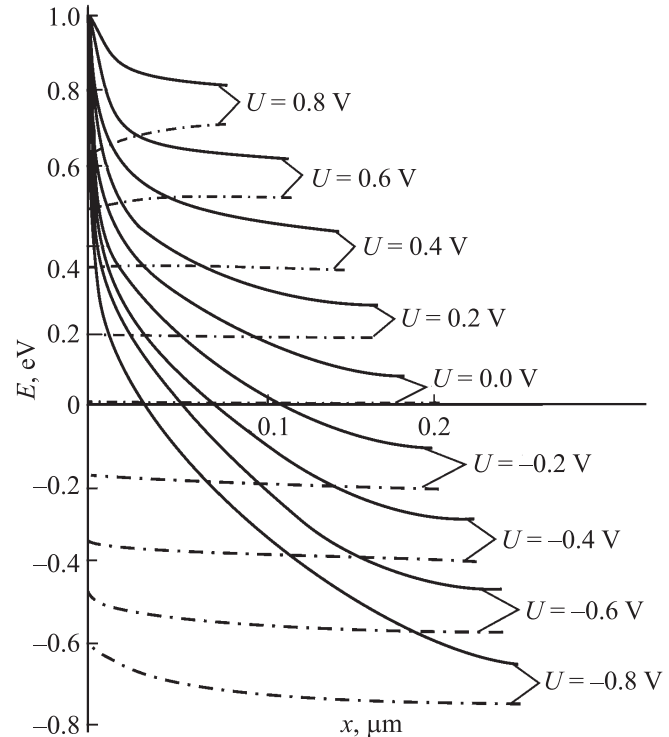


Рис. 4. Ход уровня Ферми (штрихпунктирные линии) и профиль барьера (сплошные линии) для разных смещений U , рассчитанные при значениях фотоемкости 40 нФ. Случай конечной скорости рекомбинации на гетерогранице.

Как показывают расчеты (рис. 4), при росте смещения приложенное напряжение перераспределяется в пользу ОПЗ. Однако при освещении барьер сужается, что ведет к увеличению проводимости области пространственного заряда. Поэтому по сравнению с темновым случаем в [1] доля напряжения, падающего на границе раздела, растет и рекомбинация по-прежнему сильно ограничивает ток. Темновые и световые зависимости $\varphi(x)$ и $F(x)$, построенные в одном масштабе для случая конечной скорости рекомбинации на гетерогранице, приведены на рис. 5. Видна существенная доля падения напряжения U_r на границе раздела как при прямой, так и при обратной полярностях приложенного смещения.

Это связано с тем, что для малых смещений ($U < 0.3$ В) при различных значениях фотоемкости ток контролируется в основном процессом рекомбинации на гетерогранице, скорость которой от профиля барьера, а следовательно, и от фотоемкости непосредственно не зависит.

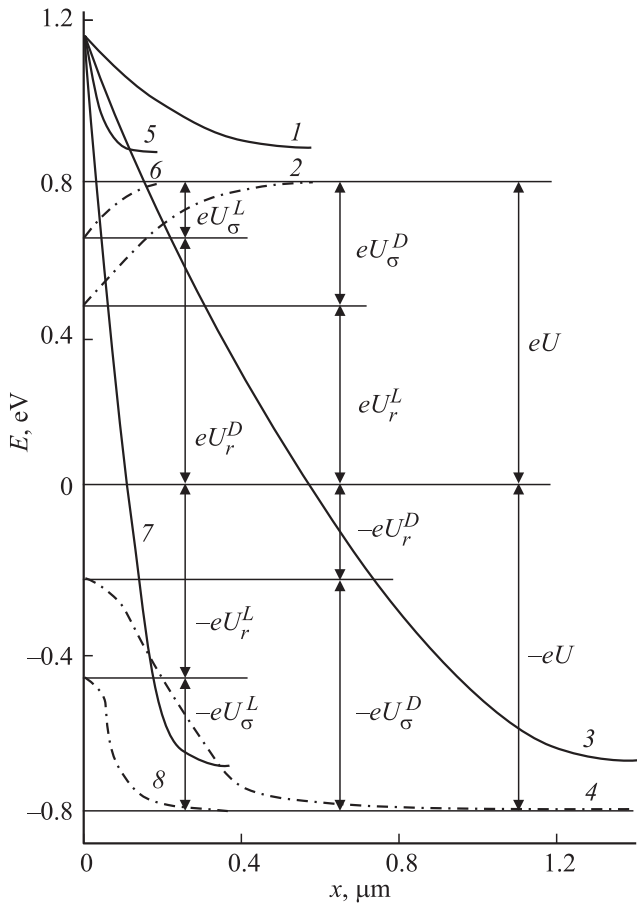


Рис. 5. Расчетные зависимости профиля потенциального барьера (сплошные линии) и хода уровня Ферми (штрихпунктирные линии) для темнового состояния (кривые 1–4) и светового состояния при $C_L = 40$ нФ (кривые 5–8) при двух полярностях приложенного к гетеропереходу смещения U (U_σ^D , U_σ^L — падения напряжения в ОПЗ в темноте и при освещении; U_r^D , U_r^L — падения напряжения на гетерогранице в темноте и при освещении). Случай конечной скорости рекомбинации на гетерогранице.

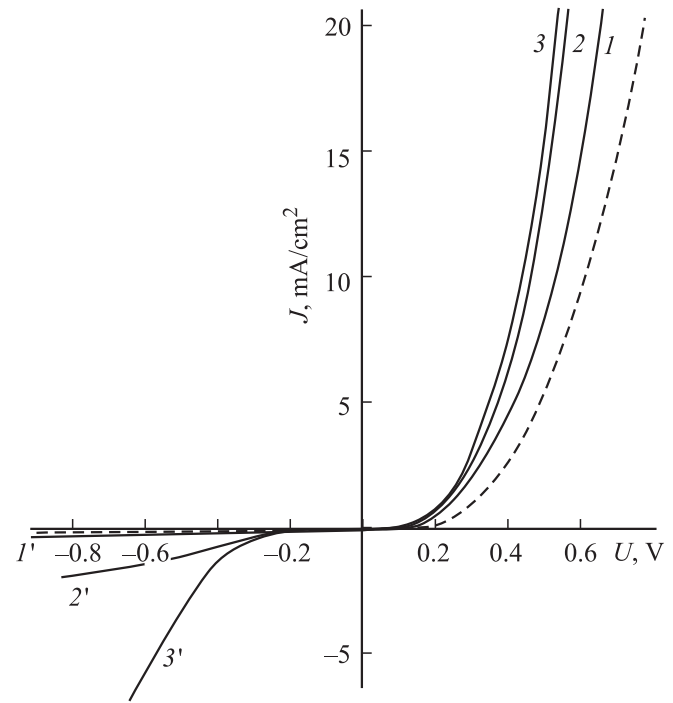


Рис. 6. ВАХ неидеального гетероперехода для случая реального хода уровня Ферми и конечной скорости рекомбинации на гетерогранице, рассчитанные при значениях фотоемкости C_L , нФ: 1 — 15, 2 — 30, 3 — 60 ($1'$ – $3'$ — обратные ветви соответственно). Пунктиром показана темновая ВАХ.

4. Анализ и обсуждение результатов

Указанные выше особенности токопереноса в элементах с конечной скоростью рекомбинации на гетерогранице позволяют предположить, что у них будут наблюдаться большие значения напряжения холостого хода, чем у элементов с проводимостью, определяемой только переносом в ОПЗ. Так, например, из-за большого шунтирующего сопротивления, не зависящего от интенсивности освещения при $U < 0.3$ В, для таких элементов значение напряжения холостого хода $U_{oc} \sim 300$ мВ, очевидно, может быть достигнуто уже при небольших освещенностях. При дальнейшем росте U_{oc} , т.е. смещении гетероперехода, эквивалентное шунтирующее сопротивление начинает сильно уменьшаться, что должно приводить к большим потерям фотоэдс.

Вольт-амперные характеристики, рассчитанные при $N_r = 2 \cdot 10^{16}$ см⁻², $\sigma_r = 10^{-15}$ см² в темноте и при освещении, показаны на рис. 6. Для них характерны более высокое дифференциальное сопротивление при малых смещениях ($U < 0.3$ В), его слабая зависимость от фотоемкости и относительно малый коэффициент неидеальности (~ 2.5), гораздо слабее зависящий от U . Коэффициент выпрямления здесь значительно выше, чем для случая $U_r \sigma_r \rightarrow \infty$, и слабо зависит от фотоемкости.

Таким образом, ограничение тока процессами рекомбинации на границе раздела может сильно умень-

шить влияние освещения на вид ВАХ и существенно снизить потери в фотоэлектрических преобразователях. При экспериментальных исследованиях тонкопленочных неидеальных гетеропереходов CdS—Cu₂S наблюдались как ВАХ, характерные для случая бесконечной скорости рекомбинации на гетерогранице (рис. 3), так и ВАХ, характерные для случая конечной скорости рекомбинации (рис. 6). Детальное описание процессов токопереноса в освещенном неидеальном гетеропереходе позволяет рассчитать нагрузочную характеристику фотовольтаического элемента. Существенно, что форма этой характеристики и, следовательно, ее коэффициент заполнения будут находиться в сильной зависимости от спектрального состава и интенсивности фотовозбуждения, изменяющего форму барьера (а значит, и туннельно-прыжковую проводимость ОПЗ) в широкозонном CdS.

5. Заключение

Освещение неидеального гетероперехода приводит к захвату неравновесного заряда на присутствующие в ОПЗ локальные центры, что вызывает существенное сокращение ширины ОПЗ и изменение формы потенциального барьера.

Предложена модель, позволяющая применить описанный Моттом туннельно-прыжковый механизм токопереноса для расчета проводимости в ОПЗ освещенного неидеального гетероперехода. Также разработана модель процесса рекомбинации на гетерогранице носителей, движущихся по локализованным центрам. Такие модели позволяют рассчитывать туннельно-прыжковую проводимость с переменной длиной прыжка ОПЗ неидеального гетероперехода в условиях освещения как для случая отсутствия ограничения тока процессами рекомбинации на гетерогранице, так и без учета такого ограничения.

Рассчитаны ВАХ освещенного гетероперехода с учетом изменения ширины и формы потенциального барьера при освещении фотоэлемента. Предложенные механизмы токопереноса через ОПЗ освещенного неидеального гетероперехода хорошо объясняют наблюдаемые экспериментально особенности вольт-амперных характеристик такого гетероперехода.

Список литературы

- [1] В.А. Боршак, Д.Л. Василевский. ФТП, **23**, 2076 (1989).
- [2] V.A. Smyntyna, V.A. Borschak, M.I. Kutalova, N.P. Zatovskaya, A.P. Balaban. In: *Photoelectronics* (Odessa, Ukraine, 2005) v. **14**, p. 5.
- [3] Н. Мотт, Э. Дэвис. *Электронные процессы в некристаллических веществах* (М., Мир, 1982) т. **1**, с. 42. [Пер. с англ.: N.F. Mott, E.A. Davis. *Electronic Processes in Non-Crystalline Materials* (Oxford, Clarendon Press, 1971) v. 1].
- [4] D.L. Vasilevski, M.S. Vinogradov, V.A. Borschak. Appl. Surf. Sci., **103**, 383 (1996).
- [5] D.L. Vasilevski. Sensors Actuators, A **55**, 167 (1996).

- [6] D.L. Vasilevski, V.A. Borschak, P.A. Victor, M.S. Vinogradov, N.P. Zatovskaya. Sensors Actuators, A **45**, 191 (1994).

Редактор Л.В. Беляков

Illuminated nonideal heterojunction conductivity dependence on external bias

V.A. Borschak, V.A. Smyntyna, Ie.V. Brytavskiy, A.P. Balaban, N.P. Zatovskaya

Mechnikov National University of Odessa, 65082 Odessa, Ukraine

Abstract The opportunity of tunnel-jumping current transport model application for conductivity calculation in the barrier region of illuminated nonideal heterojunction is shown. Heterojunction current-voltage characteristics calculation is carried out in view of prevalence of tunnel-jumping mechanism of transport in the barrier region and in view of potential barrier form changing at illumination. It is shown, that current-voltage characteristics of heterojunction, calculated at different illumination levels coincide well with the observed experimentally.