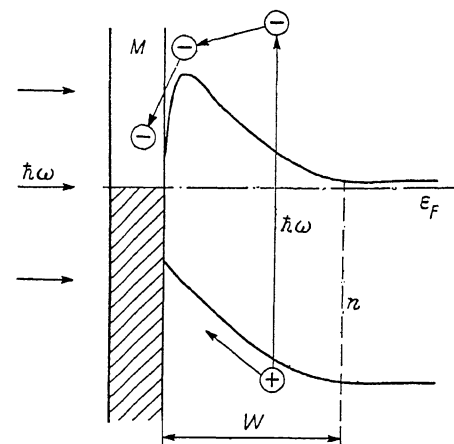


ДИФФУЗИЯ ГОРЯЧИХ ФОТОЭЛЕКТРОНОВ В МЕТАЛЛ — ЭФФЕКТИВНЫЙ МЕХАНИЗМ ПОТЕРЬ В ФОТОЭЛЕМЕНТАХ С БАРЬЕРОМ ШОТТКИ

Мезрин О. А., Трошков С. И.

Фотодиоды с барьером Шоттки используются в качестве высокоэффективных фотодетекторов и солнечных элементов в видимой и коротковолновой областях спектра. Обычно используемые методы расчета их спектральных характеристик основаны на решении уравнения диффузии для неосновных носителей и подробно описаны в литературе [1]. При этом предполагается, что основным механизмом потерь, приводящим к ухудшению коэффициента сбора фотоэлемента, является рекомбинация неосновных носителей (для полупроводника n -типа — дырок) во время их движения к металлу. При этом генерированные фотоэлектроны, являясь основными носителями, остаются в полупроводнике [1]. Однако реальные спектральные характеристики таких структур на основе соединений $A^{III}B^V$ имеют более низкую чувствительность в коротковолновой области спектра, чем это следует из таких расчетов. Такое поведение спектральных



характеристик в работах [2-5] пытались объяснить диффузией термализованных электронов в металл из прилегающего к металлу тонкого слоя области объемного заряда. Как следует из решения уравнения непрерывности, его толщина порядка полевой длины $l_E = kT/eE$, где E — максимальное поле в об-

Рис. 1. Зонная диаграмма структуры металл-полупроводник n -типа с учетом сил зеркального изображения.

Стрелками показан возможный путь «захвата» горячих фотоэлектронов в металл.

ласти объемного заряда. Физически это означает, что за счет диффузии термализованные электроны могут эффективно преодолевать барьер высотой только kT . Величина l_E очень мала и равна, например, 300 и 30 Å в GaAs для концентраций мелких ионизированных доноров соответственно 10^{15} и 10^{17} см³.

Так как в коротковолновой области спектра с $\lambda < 0.6$ мкм рождающийся фотоэлектрон имеет очень большую энергию в зоне ($\epsilon \sim 0.4 \div 2$ эВ), то, по нашему мнению, основным недостатком таких расчетов является допущение, что процесс термализации горячих электронов несуществен, т. е. мгновенен, как это предполагалось в [2-5], и рассматривается только диффузия термализованных электронов. Следует также отметить, что длина свободного пробега в соединениях $A^{III}B^V$ даже термализованных носителей, как правило, превышает полевую длину l_E , поэтому применение диффузионного уравнения для расчета потока электронов на границу с металлом является некорректным.

В настоящей работе показано, что в процессе термализации горячих фотоэлектронов возникает дополнительный механизм их потерь, связанный с транспортом горячих фотоэлектронов в металл и последующим их там остыванием, причем область, из которой они могут эффективно диффундировать в металл, равна длине остывания электронов l_s , составляющей несколько тысяч ангстрем, и существенно превышает полевую длину l_E . Необходимость учета кинетики термализации горячих фотоэлектронов связана с тем, что в соединениях $A^{III}B^V$ длина остывания электронов с энергиями $0.4 \div 2$ эВ сравнима также с глубиной поглощения фотонов ($2000 \div 300$ Å). Это приводит к тому, что фото-

электроны в основном рождаются вблизи металла в области объемного заряда и барьер, отделяющий их от металла, вследствие этого оказывается меньше, чем контактный потенциал. Поэтому потери фотоэлектронов, связанные с их диффузией в металл, будут максимальны в барьерных структурах на основе слабо легированных полупроводников. Уходу электронов в металл способствует также наличие сил зеркального изображения. Этот механизм потерь схематически изображен на рис. 1.

Коэффициент собирания фотоэлемента с барьером Шоттки на основе n -полупроводника без учета поглощения света в металле имеет вид $Q=1-q_s-q_h$, где $q_h=e^{-\alpha l}/(1+\alpha L_h)$ — известное выражение для доли рекомбинировавших в полупроводнике дырок, α — коэффициент поглощения света, W — толщина области объемного заряда, L_h — диффузионная длина дырок. Для расчета доли диффундировавших в металл горячих электронов q_s необходимо решить уравнение Больцмана. Так как все характерные длины в задаче одного порядка и длина остывания электрона сравнима с характерной длиной изменения потенциала, получить аналитическое решение уравнения Больцмана очень сложно, поэтому мы решили его численно методом Монте-Карло [6] с учетом всех основных механизмов рассеяния электронов: на акустических фононах, на полярных и неполярных оптических фононах, ионизированных примесях. Были учтены также междолинные переходы электронов, в связи с тем что энергия рожденного фотоэлектрона оказывается больше, чем зазор между дном Γ и X , L -долин.

Потенциал, действующий на электроны, с учетом сил изображения и контактного потенциала был выбран в виде

$$\psi = \frac{2\pi e^2 N_D}{z_0} (W-x)^2 - \frac{e}{4z_0 \infty x}, \quad W = \sqrt{\frac{z_0 \Psi_k}{2\pi e^2 N_D}}, \quad (1)$$

где N_D — концентрация мелких ионизированных доноров, W — толщина слоя объемного заряда, Ψ_k — контактный потенциал, z_0 — статическая диэлектрическая проницаемость полупроводника; начало координат $x=0$ выбрано на границе металл—полупроводник. Так как горячий электрон приближается к металлу со скоростью $\sim 10^8$ см/с, то не будет происходить полной поляризации полупроводника под действием его электрического поля и, согласно [7], во втором слагаемом (1), описывающем потенциал сил изображения, следует использовать высокочастотную диэлектрическую проницаемость ∞ , а не статическую z_0 . Координатная зависимость интенсивности света в полупроводнике описывалась обычным выражением

$$I(\hbar\omega) = T(\hbar\omega) I_0(\hbar\omega) e^{-\alpha x},$$

где $I_0(\hbar\omega)$ — спектральная интенсивность падающих на фотоэлемент фотонов, $T(\hbar\omega)$ — коэффициент пропускания света в полупроводник, учитывающий отражение и поглощение света в тонком металлическом электроде. Зависимость коэффициента поглощения $\alpha(\hbar\omega)$ от $\hbar\omega$ известна и приведена, например, в [1], а зависимость $T(\hbar\omega)$ от $\hbar\omega$ и толщины металлической пленки — в [8].

Для подобных расчетов необходимо использовать, вообще говоря, метод Монте-Карло с учетом реального зонного спектра полупроводника. В настоящей работе мы провели оценочные расчеты в трехдолинной модели с учетом непараболичности Γ -долины для разной концентрации легирующей примеси. При этом мы ограничились энергией кванта 4.1 эВ, когда рождающийся фотоэлектрон имеет энергию в зоне, не превышающую 2 эВ. Согласно [9], при этом можно не учитывать ударную ионизацию как механизм потерь энергии и механизм умножения фотоносителей. Как известно, трехдолинная модель, используемая в основном для расчета дрейфовой скорости с учетом перехода в X - и L -долины, применима до энергий в зоне порядка 0.7 эВ (отсчитанной от Γ -минимума). Поэтому расчет в ее рамках дает заниженную величину коэффициента собирания Q , так как эффективная масса электрона с энергией, большей 0.7 эВ, в реальном k -пространстве оказывается тяжелее, чем это следует из трехдолинной модели. На рис. 2, а такой расчет спектральной зависимости «идеализированного» коэффициента собирания $Q_e=1-q_s$ без учета потерь дырок, а также

отражения и поглощения света в металле приведен сплошными кривыми для трех значений концентрации легирующей примеси. Видно существенное уменьшение коэффициента собирания в коротковолновой области спектра, вызванное диффузией горячих электронов в металлический электрод.

Для оценки погрешности расчета коэффициента собирания была использована следующая процедура: предполагалось, что электрон, заброшенный в зону с энергией $\epsilon_{GEN} > 0.8$ эВ, мгновенно остывает до энергии 0.8 эВ и далее начинает диффундировать в пространстве в рамках трехдолинной модели. В результате такой процедуры мы как бы не учитываем уход фотоэлектронов в металл в процессе их термализации в интервале энергий $\epsilon_{GEN} - 0.8$ эВ и,

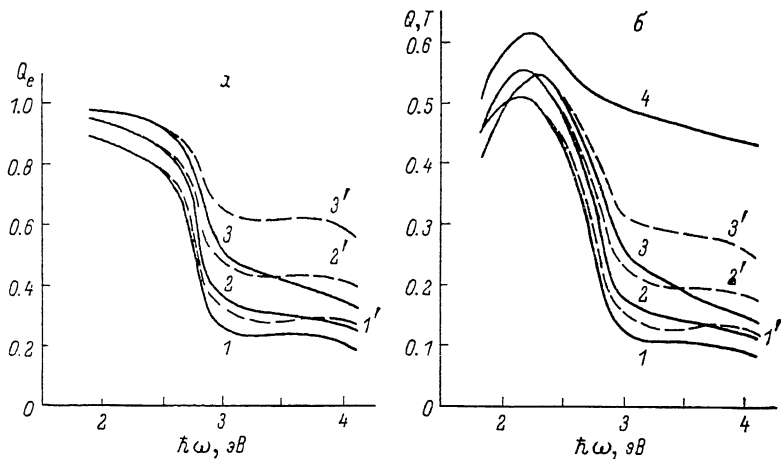


Рис. 2. Спектральная зависимость коэффициента собирания Q структуры с барьером Шоттки на основе Au—*n*-GaAs.

Контактный потенциал $\Psi_b = 0.8$ В, $x_0 = 13.1$, $x_\infty = 10.92$. 1—3— расчет в трехдолинной модели; 1'—3' — расчет в этой же модели, но в приближении «мгновенного» остывания фотоэлектронов до энергии 0.8 эВ. N_D , см⁻³: 1, 1'— 10^{18} ; 2, 2'— 10^{18} ; 3, 3'— 10^{17} ; L_n , мкм: 1, 1'—3; 2, 2'—2; 3, 3'—1. а — идеализированный коэффициент собирания $Q_e = 1 - q_e$ с учетом только «захвата» электронов в металл; б — полный коэффициент собирания $Q = (1 - q_e - q_h) T(h\omega)$ с учетом коэффициента прохождения света $T(h\omega)$ (д) через пленку золота толщиной 105 Å [8].

следовательно, очень сильно завышаем коэффициент собирания фотоэлемента. Кривые для величины Q_e , рассчитанные в рамках такой процедуры, приведены на рис. 2, а штриховыми кривыми. Очевидно, что коэффициент собирания, рассчитанный в рамках реально зонного спектра, должен лежать между соответствующими сплошной и штриховой кривыми. На рис. 2, б приведены эти же зависимости, но с учетом отражения и поглощения света в металле, а также с учетом потерь дырок на рекомбинацию в полупроводнике.

Из рис. 2 видно, что спектральная характеристика таких фотоприемников имеет максимум, связанный с тем, что в длинноволновой области спектра имеют место потери в собирании носителей, связанные с рекомбинацией дырок, а в коротковолновой области — с диффузией горячих электронов в металл. Из этих зависимостей можно сделать вывод, что для улучшения спектральных характеристик в коротковолновой области спектра необходимо создавать барьеры Шоттки на сильно легированном полупроводнике.

Л и т е р а т у р а

- [1] Зи С. Физика полупроводниковых приборов, т. 2. М., 1984. 455 с.
- [2] Caywood J. M., Mead C. A. — Appl. Phys. Lett., 1969, v. 15, N 1, p. 14—16.
- [3] Васильев А. М., Головнер Т. М., Захарчук О. В., Федосеев О. П. Спектральная характеристика поверхности-барьерных детекторов радиации. — ФТП, 1969, т. 3, в. 3, с. 1276.
- [4] Li S. S., Lindholm F. A., Wang C. T. — J. Appl. Phys., 1972, v. 43, N 10, p. 4123—4129.
- [5] Гуткин А. А., Седов В. Е. Спектры fotocувствительности барьеров Шоттки Au—GaAs при высоких коэффициентах поглощения света в полупроводнике. — ФТП, 1975, т. 9, в. 9, с. 1761—1765.
- [6] Матуленис А., Пожела Ю., Реклайтис А. Динамика разогрева электронов. — В кн.: Многодолинные полупроводники / Под ред. Ю. Пожелы. Вильнюс, 1978, с. 7—58.

- [7] Sze S. M., Growell C. R., Kahing D. — J. Appl. Phys., 1964, v. 35, N 8, p. 2534—2536.
 [8] Philip R. — J. Phys. Rad., 1959, v. 20, N 5, p. 535—540.
 [9] Shichijo H., Hess K. — Phys. Rev., 1981, v. B23, N 8, p. 4197—4207.

Физико-технический институт
 им. А. Ф. Иоффе АН СССР
 Ленинград

Получено 27.01.1987
 Принято к печати 20.07.1987

ФТП, том 22, вып. 1, 1988

ЭЛЕКТРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ ОДИНОЧНЫХ ВАКАНСИЙ В ZnSe И CdTe

Баженов В. К., Кардашев Д. Л., Нахабин А. В.

Свойства одиночных вакансий в полупроводниках определяются электронными состояниями оборванных связей [1]. Связанные и резонансные электронные состояния одиночных вакансий в полупроводниках $A^{II}B^V$ уже вычислялись методом функций Грина в модели удаленных орбиталей [2]. Эта модель здесь впервые использована для расчета энергий электронных состояний катионных и анионных вакансий в кубических полупроводниках $A^{II}B^V$ — ZnSe и CdTe.

Используем полную ортонормированную систему локализованных орбиталей $|mk\rangle$, где $m=s, p, \dots$ указывает тип симметрии орбитали, а k нумерует все атомы идеального кристалла [3]. Матричные элементы $G_{mm'}^{kk'}(\epsilon)$ гриновского оператора кристалла с одиночной вакансией удовлетворяют системе уравнений Дайсона

$$G_{mm'}^{kk'}(\epsilon) = g_{mm'}^{kk'}(\epsilon) + \sum_{m'', k'', m'''} g_{mm''}^{kk''}(\epsilon) U_{m''m'''}^{k''k'''} G_{m''m'''}^{k''k'''}(\epsilon), \quad (1)$$

где $g_{mm'}^{kk'}(\epsilon)$ — матричные элементы гриновского оператора идеального полупроводника, $U_{mm'}^{kk'}$ — матричные элементы потенциала одиночной вакансии, $\epsilon = E + 0^+$, а E — энергия электрона. Пусть вакансия в кристалле образуется удалением атома $k=r$. Тогда матрица потенциала одиночной вакансии может быть составлена из элементов

$$U_{mm'}^{kk'} = \delta_{kr} (\delta_{k'r} - 1) h_{mm'}^{rk'} + (\delta_{kr} - 1) \delta_{k'r} h_{mm'}^{kr} + W_{mm'}^{kk'}, \quad (2)$$

где $h_{mm'}^{kk'}$ — матричные элементы одноэлектронного гамильтониана идеального полупроводника. Модель удаленных орбиталей для электронных состояний одиночной вакансии получается, если в (2) пренебречь влиянием составляющей $W_{mm'}^{kk'}$.

Используя (2), можно (1) переписать в виде

$$G_{mm'}^{kk'}(\epsilon) = \tilde{G}_{mm'}^{kk'}(\epsilon) + \sum_{m'', k'', m'''} \tilde{G}_{mm''}^{kk''}(\epsilon) W_{m''m'''}^{k''k'''} G_{m''m'''}^{k''k'''}(\epsilon), \quad (3)$$

где $\tilde{G}_{mm'}^{kk'}(\epsilon)$ — матричные элементы гриновского оператора кристалла с одиночной вакансией в модели удаленных орбиталей:

$$\tilde{G}_{mm'}^{kk'}(\epsilon) = g_{mm'}^{kk'}(\epsilon) + \delta_{mm'} \frac{\delta_{kr} \delta_{k'r}}{\epsilon - \epsilon_m^r} - \sum_{m''} \frac{g_{mm''}^{kr}(\epsilon) g_{m''m'}^{k'r}(\epsilon)}{g_{m''}^r(\epsilon)}. \quad (4)$$

Здесь $g_{mm''}^{kr}(\epsilon) = g_m^r(\epsilon) \delta_{mm''}$. Мы видим, что в модели удаленных орбиталей спектр связанных и резонансных электронных состояний оборванных связей одиночной вакансии в кристалле определяется нулями функции $\text{Re } g_{mm'}^r(E)$, которая легко вычисляется по заданным матричным элементам $h_{mm'}^{kr}$ [2]. Уровни с энергиями $h_{mm'}^{kr} = \epsilon_m^r \delta_{mm'}$ принадлежат орбиталям удаленного атома.