

## ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ СПЕКТРАЛЬНОЙ ФОТОПРОВОДИМОСТИ ВАРИЗОННОЙ СТРУКТУРЫ

*Иван АНДРИЕШ, Олег КОРШАК\*, Аркадий КИРИЦА\*, Севастьян НЯМЦУ\**

*Центр информационных технологий,*

*\*НИЛ фототермопластической записи*

A fost dezvoltat un model matematic semifenomenologic al fotoconductivității în straturile subțiri  $(As_2Se_3)_c(As_2S_3)_{1-c}$  cu structură varizonică. Pe baza modelului a fost realizată analiza numerică a dependenței spectrale a fotoconductivității în funcție de caracteristicile de absorbție și de grosimea straturilor.

A mathematic semi-phenomenologic model of photoconductivity in  $(As_2Se_3)_c(As_2S_3)_{1-c}$  thin layers with varizonic structure was developed. In base of it the numeric analysis of spectral photoconductivity shape in dependence on absorption characteristics and layers thickness was performed.

### 1. Введение

Полупроводниковые варизонные структуры на основе таких систем, как  $As_2S_3 - As_2Se_3$ ,  $As_2S_3 - Sb_2S_3$  и других, обладают рядом уникальных свойств. Композиции  $(As_2Se_3)_c(As_2S_3)_{1-c}$  с различной объемной концентрацией  $c$  исходных компонентов имеют одинаковую атомную структуру и с этой точки зрения являются твердыми растворами. Это подтверждается линейной зависимостью ширины запрещенной зоны системы от концентрации  $c$ , а также линейным по  $c$  смещением кривой края поглощения как целого без изменения структуры. Согласно соотношению Шимакавы [1], ширина запрещенной зоны раствора  $E_g$  выражается через ширину запрещенных зон  $E_{g1}$  и  $E_{g2}$  исходных компонентов в виде

$$E_g(c) = E_{g1} \cdot c + E_{g2} \cdot (1-c) = E_{g2} + (E_{g1} - E_{g2}) \cdot c, \quad (1)$$

где индексы 1 и 2, для определенности, относятся, соответственно, к компонентам  $As_2Se_3$  и  $As_2S_3$ . В соответствии с (1), ширина запрещенной зоны смеси является функцией объемной концентрации  $c$  и с изменением  $c$  от 0 до 1 она изменяется от значения 1,76 eV (ширина зоны для  $As_2Se_3$ ) до значения 2,4 eV (ширина зоны для  $As_2S_3$ ). Это приводит к появлению в слое варизонного материала внутренних квазиэлектрических полей и к координатной зависимости коэффициента поглощения света.

Таким образом, существует принципиальная возможность управлять шириной запрещенной зоны по толщине варизонного слоя, задавая закон изменения концентрации  $c$ , т.е. управлять, следовательно, всем набором характеристик, зависящих от характера изменения ширины запрещенной зоны.

Халькогенидные стеклообразные полупроводники (ХСП) с варизонной структурой широко применяются в устройствах фототермопластической записи информации в присутствии коронного разряда. Ввиду такого их применения, нас в первую очередь интересуют возможности управления формой спектральной зависимости фотопроводимости варизонных структур.

### 2. Модель фотопроводимости варизонной структуры и исходные соотношения

Математическое моделирование и численный анализ фотопроводимости тонких слоев халькогенидных материалов с варизонной структурой имеет целью оптимизацию характеристик фототермопластической записи методами компьютерного моделирования. При этом под математическим моделированием мы будем понимать здесь не моделирование на основе первых принципов, а развитие полуфеноменологической модели фотопроводимости.

Наиболее простая модель фотопроводимости может быть получена на основе широко проверенной экспериментально для халькогенидных стекол степенной зависимости фотопроводимости  $\sigma_f$  от интенсивности освещенности  $I$  [1,2]:

$$\sigma_f \approx A \cdot I^\gamma, \quad (2)$$

где  $A$  – слабозависящая от температуры константа; показатель степени  $\gamma$  в случае слабых освещенностей принимает значения в интервале  $0,5 < \gamma < 1,0$ .

Преимущество использования такого полуфеноменологического подхода состоит в том, что модель не содержит в явном виде информацию о детальном распределении генерируемых светом неравновесных носителей зарядов. Это эквивалентно пренебрежению диффузным и дрейфовым (во внешнем электрическом поле) смещениями носителей по глубине. Допустимость такого пренебрежения оправдана тем, что рассматриваются тонкие (1-3 мкм) слои.

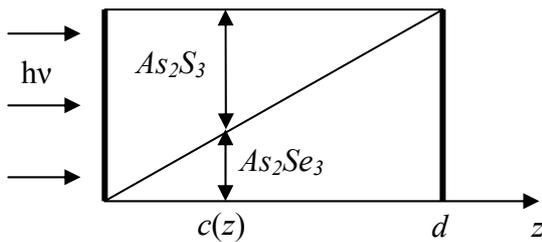
Явная зависимость показателя степени  $\gamma$  от температуры может быть уточнена [1] на основе модели Роуза, согласно которой в запрещенной полосе ХСП имеется квазинепрерывное экспоненциальное по энергии распределение локализованных состояний (хвосты распределения):

$$N(E) = N_0 \exp(-E / kT^*), \quad (3)$$

где  $T^*$  – формальный параметр, характеризующий скорость роста плотности состояний  $N$  как функции энергии  $E$ . Такое уточнение приводит к следующей зависимости  $\gamma$  от температуры [1]:

$$\gamma = \frac{2T^* - T}{T^* + T}. \quad (4)$$

Для соединения  $As_2S_3$  экспериментальное значение  $T^*$  составляет 600 К и при температуре  $T = 293$  К теоретическое значение  $\gamma$  составляет 1,01, что близко к его экспериментальному значению 1,0 при этой температуре.



**Рис.1.** Схематическое изображение изменения концентрации  $c(z)$  по толщине варизонной структуры  $(As_2Se_3)_c(As_2S_3)_{1-c}$ :  $d$  – толщина слоя.

Определим величину возникающего фототока при освещении варизонной структуры, показанной на рис.1, светом частоты  $\nu$ . Примем, что концентрация  $c(z)$  компонент в системе  $(As_2Se_3)_c(As_2S_3)_{1-c}$  меняется по линейному закону:  $c(z) = z/d$ , где  $d$  – толщина слоя. Коэффициент поглощения света является функцией концентрации  $\alpha = \alpha(c)$  и также будет меняться по толщине. Естественно ожидать, что он меняется по тому же линейному по концентрации закону (1), что и ширина запрещенной зоны:

$$\alpha(z) = \alpha_2 + (\alpha_1 - \alpha_2) \cdot \frac{z}{d}. \quad (5)$$

На основании этого соотношения можно получить выражение для зависимости  $I(z)$  – интенсивности падающего света от координаты  $z$ . Для этого запишем уравнение для поглощения света в среде в виде:

$$\frac{dI(z)}{dz} = -I(z) \cdot \alpha(z), \quad I(z)|_{z=0} = I(0)(1 - R), \quad (6)$$

где в отличие от случая однородной среды коэффициент поглощения зависит от  $z$ . Решая это уравнение для зависимости (5), получим:

$$I(z) = I(0)(1 - R) \exp\left[-\left(\alpha_2 + \frac{\alpha_1 - \alpha_2}{2d} \cdot z\right)z\right]. \quad (7)$$

Здесь  $R$  – коэффициент отражения от передней поверхности  $z = 0$ .

Для уточнения спектральной зависимости коэффициента  $A$  в соотношении (2) примем, что скорость  $G$  генерации неравновесных носителей в единице объема за единицу времени равна [4]

$$G = \frac{\alpha(z) \cdot I(z)}{h\nu} \cdot \eta, \quad (8)$$

где  $\eta$  – квантовый выход внутреннего фотоэффекта. Считая дырочный характер фотопроводимости основным, имеем в стационарном режиме

$$\Delta p = G \cdot \tau_h = \frac{\alpha(z) \cdot I(z)}{h\nu} \cdot \eta \cdot \tau_h, \quad (9)$$

где  $\tau_h$  – время жизни дырок. Комбинируя формулы (2), (5), (7)-(9), получим для фотопроводимости  $\sigma_f = e \cdot \Delta p \cdot \mu_p$  следующее выражение:

$$\sigma_f(z) = B \cdot \frac{\alpha(z)}{h\nu} \cdot \exp\left[-\left(\alpha_2 + (\alpha_1 - \alpha_2) \frac{z}{2d}\right) \cdot \gamma z\right], \quad (10)$$

где коэффициент  $B$ , выраженный через основные характеристики материала в виде  $B = e \cdot \eta \cdot \tau_h \cdot \mu_p \cdot I^\gamma(0) \cdot (1 - R)^\gamma$ , не зависит от частоты света. Здесь,  $\mu_p$  – подвижность дырок. Спектральная зависимость проводимости (10) выражена, таким образом, через спектральные зависимости коэффициентов поглощения.

Выражение для темновой проводимости  $\sigma_0$  мы получим, если положим, что линейная зависимость от концентрации  $s$  ширины запрещенной зоны (1) и коэффициента поглощения (5) имеет место и для темновой удельной проводимости. Таким образом,

$$\sigma_0(z) = \sigma_{02} + (\sigma_{01} - \sigma_{02}) \cdot \frac{z}{d}, \quad (11)$$

где  $\sigma_{01}$  и  $\sigma_{02}$  – темновые удельные проводимости компонент 1 и 2 соответственно.

Зная темновую и световую удельные проводимости как функции  $z$ , мы можем определить, соответственно, темновое  $R_0$ , световое  $R_f$  и результирующее  $R$  сопротивление на единицу поверхности варизонного слоя толщиной  $d$  по формулам:

$$R_0 = \frac{1}{\Delta S} \int_0^d \frac{dz}{\sigma_0(z)}, \quad R_f = \frac{1}{\Delta S} \int_0^d \frac{dz}{\sigma_f(z)}, \quad R = \frac{1}{\Delta S} \int_0^d \frac{dz}{\sigma_0(z) + \sigma_f(z)}. \quad (12)$$

Здесь  $\Delta S$  – площадь контакта.

Первые два интеграла могут быть взяты и представлены в аналитической форме:

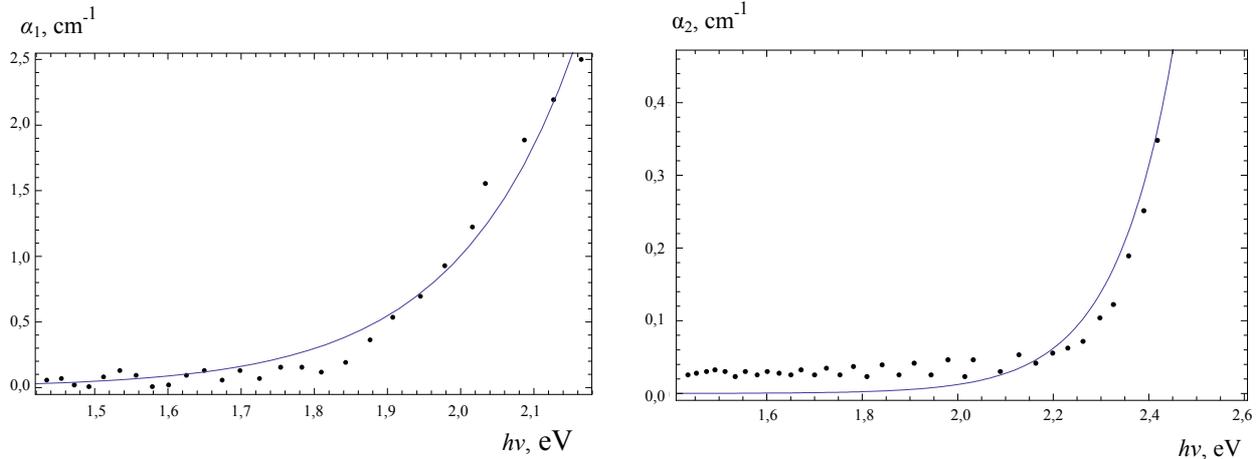
$$R_0 = \frac{1}{\Delta S} \cdot \frac{d}{(\sigma_{01} - \sigma_{02})} \cdot \ln \left| 1 + \frac{(\sigma_{01} - \sigma_{02})}{\sigma_{02}} \right|, \quad (13)$$

$$R_f(h\nu) = \frac{d^2}{B \cdot \Delta S} \cdot \frac{h\nu \cdot \exp\left[-\frac{\alpha_2^2 \cdot \gamma}{2(\alpha_1 - \alpha_2)}\right]}{2(\alpha_1 - \alpha_2)} \cdot \left[ Ei\left(\frac{\alpha_1^2 \cdot \gamma}{2(\alpha_1 - \alpha_2)}\right) - Ei\left(\frac{\alpha_2^2 \cdot \gamma}{2(\alpha_1 - \alpha_2)}\right) \right], \quad (14)$$

где  $Ei(x)$  – интегральная показательная функция [5]. Третий интеграл в (12) может быть установлен численно.

### 3. Численный анализ спектральной зависимости фотопроводимости

Численный анализ выполним в предположении, что световая проводимость в (12) значительно превосходит темновую, так что  $R \approx R_f$  и основные закономерности спектральной зависимости фотопроводимости могут быть получены на основе выражения (14) для сопротивления  $R_f(h\nu)$ . Анализ проведем на основе экспериментально полученных спектральных зависимостей для коэффициентов поглощения отдельных компонентов варизонной структуры, представленных на рис. 2.

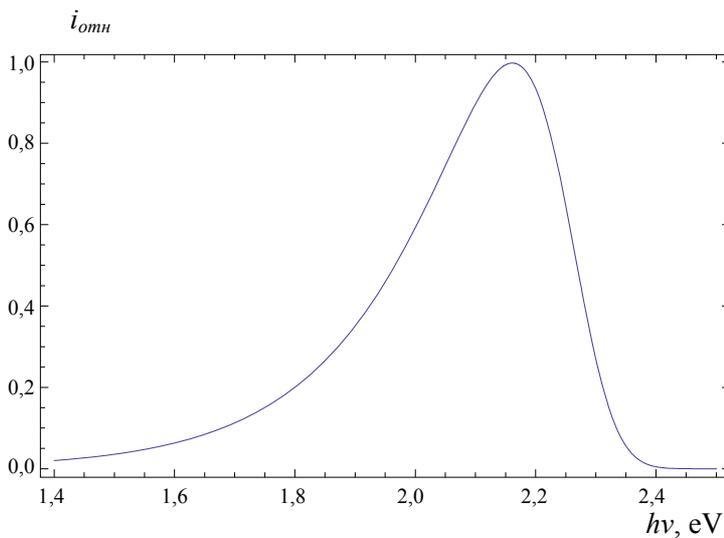


**Рис.2.** Спектральная зависимость коэффициентов поглощения  $\alpha_1$  и  $\alpha_2$  в  $\text{As}_2\text{Se}_3$  и  $\text{As}_2\text{S}_3$  соответственно. Точками отмечены экспериментальные данные, сплошные кривые – результат экспоненциальной аппроксимации.

Экспериментальные данные были аппроксимированы в соответствии с правилом Урбаха экспоненциальными зависимостями вида  $\alpha(h\nu) = \alpha_0 \exp[(h\nu - E_g)/\Delta E]$ , где  $E_g$  – ширина запрещенной зоны,  $\Delta E$  – параметр, определяющий протяженность и крутизну “хвостов” распределения состояний в запрещенной зоне. В результате аппроксимации по методу наименьших квадратов получены следующие зависимости:

$$\left. \begin{aligned} \alpha_1(h\nu) &= 0.23 \cdot \exp[(h\nu - 1.76)/0.16], \\ \alpha_2(h\nu) &= 0.31 \cdot \exp[(h\nu - 2.40)/0.12]. \end{aligned} \right\} \quad (15)$$

На рис. 3 представлена в относительных единицах спектральная зависимость фототока  $i = U/R_f$ , рассчитанная по формуле (14) с использованием зависимостей (15). Здесь  $U$  – приложенное к структуре напряжение. Рассчитанная теоретически зависимость имеет типично наблюдаемый в эксперименте вид.



**Рис.3.** Типичная спектральная зависимость относительного фототока для варизонной структуры.

Из нее видно, что примерно до значений энергии фотонов  $h\nu = 2,1$  эВ кривая фототока повторяет по форме кривую коэффициента поглощения в  $\text{As}_2\text{Se}_3$  (рис. 2). Это следствие значительно более высокой фоточувствительности этой компоненты системы, которая и доминирует в этой области частот. Далее кривая достигает максимума и затем резко падает. Резкий спад и относительно узкая полуширина кривой фототока объясняется тем, что кривые коэффициентов поглощения (15) неограниченно возрастают, не выходя на насыщение. Следовательно, детали спектральной формы поглощения отдельных компонент играют определяющую роль в формировании спектральной зависимости фототока.

Таким образом, выражение (14) может быть использовано, например, для численного анализа зависимости положения спектрального максимума фототока от толщины  $d$  варизонной структуры. Такая зависимость приведена на рис. 4. Из нее видно, что с увеличением толщины структуры спектральный максимум сдвигается в сторону уменьшения энергии  $h\nu$ . Смещение максимума можно объяснить тем, что с ростом толщины все большая часть излучения оказывается поглощенной более фоточувствительной компонентой  $\text{As}_2\text{Se}_3$ .

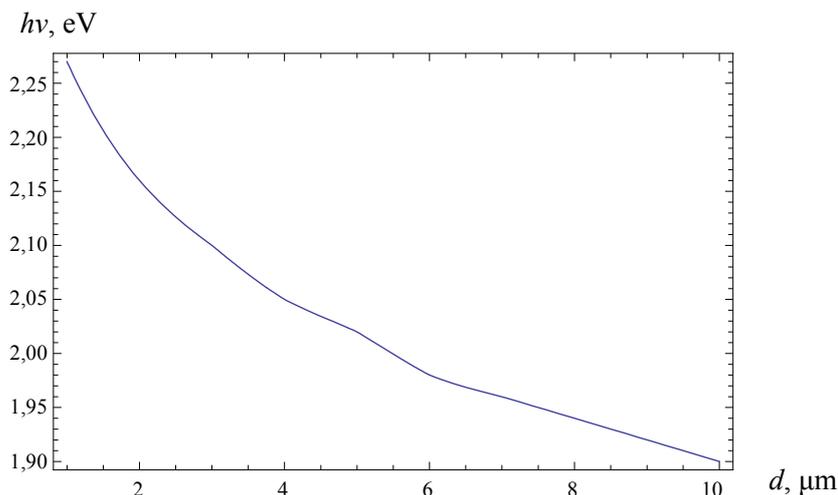


Рис.4. Зависимость положения спектрального максимума фототока от толщины  $d$  варизонной структуры.

#### 4. Заключение

Развитый выше полуфеноменологический подход численного анализа спектральной зависимости фототока варизонной структуры может служить основой для применения компьютерного моделирования с целью получения полупроводниковых материалов с заданными спектральными характеристиками. Метод чувствителен к детальной форме спектральной зависимости коэффициентов поглощения отдельных компонент твердого раствора и требует их более тщательного экспериментального измерения. В работе использован практически относительно легко реализуемый линейный закон изменения концентрации компонент варизонной структуры с глубиной слоя  $c(z) = z/d$ . Представляет интерес рассмотрение более сложной формы концентрационной зависимости  $c(z)$ , варьирование которой вместе с варьированием толщины слоя  $d$  позволит в более широких пределах управлять спектральной характеристикой фототока, в первую очередь – положением максимума и полушириной формы.

#### Литература:

1. Popescu M., Andrieș A., Ciumaș V., Iovu M., Șutov S., Țiuleanu D. Fizica sticlelor calcogenice. - București, Chișinău: Editura Științifică I.E.P. Știința, 1996. - 486 p.
2. Ишимов В., Сенокосов Э., Дементьев И., Гоглидзе Т. Технологические условия оптимизации оптоэлектронных параметров пленок стеклообразных полупроводников  $(\text{As}_2\text{S}_3)_x(\text{As}_2\text{Se}_3)_{1-x}$ , получаемых на рулонной основе. // Письма в ЖТФ. - 2002. - Том 28. - Вып.16. - С.79-84.
3. Программный пакет МАТЕМАТИКА.
4. Блатт Ф. Физика электронной проводимости в твердых телах. - Москва: Мир, 1971.
5. Градштейн И.С., Рыжик И.М. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. - Москва: Наука, 1971.

Prezentat la 18.02.2008