

# Si NIPI 结构中光伏响应的极性及其与浅杂质有关的光跃迁

罗昌平 江德生 李锋 庄蔚华 李玉璋

(超晶格和微结构国家重点实验室 中国科学院半导体研究所 北京 100083)

**摘要** 我们对不同光照条件下 Si NIPI 结构的光伏效应进行了研究,并在正面光照时作了外加 He-Ne 激光连续照射前后的对比实验。结果表明, Si NIPI 结构中存在 Brum 等预言的因光生载流子空间分离而产生的光伏效应,并且进一步从实验上证实了 NIPI 结构光伏极性是空间固定的。对外加激光连续照射前后结果的分析表明, Si NIPI 结构的光伏效应中,实空间中的间接跃迁如电子空穴子带间跃迁不起主要作用,而主要取决于实空间中与浅杂质有关的直接或准直接跃迁。

**PACC:** 7240, 7340L, 7850

## 1 引言

光伏效应<sup>[1-3]</sup>是一种常见的光电效应,在器件应用中有着重要意义,如作为光电探测器及太阳能电池等,并可用来测试半导体材料的一些物理参数,如少子扩散长度及复合率等。体材料中,光伏效应主要有两种,一种是光扩散效应<sup>[2]</sup>,是光生载流子在光生载流子对浓度梯度场中因扩散不同造成电子空穴的空间分离引起的。另一种称为表面光伏效应<sup>[3]</sup>,是光生载流子在表面电场中的漂移引起电子空穴的空间分离产生的。通常情况下,光扩散效应比表面光伏效应小很多。

近年来,在超晶格材料中也观测到光伏效应存在,并已对其物理特性及器件应用作了一些研究<sup>[4-13]</sup>。Brum 等<sup>[6]</sup>指出,超晶格的光伏效应也来源于光生载流子在实空间中的分离。这种载流子的空间分离通常存在于 II 类超晶格或缺乏反演对称性的 I 类超晶格中<sup>[14-16]</sup>。由于每一超晶格周期内光生载流子在空间上的分离,使得每一超晶格周期相当于一个量子电容器,其正、负极分别为空穴和电子的局域中心。整个超晶格结构则类似于多个量子电容器的串联。因为在 II 类超晶格中,光生载流子到相应的能带极值点的弛豫时间一般小于微微秒量级,所以对其光伏效应仅考虑量子化的基态就足够了<sup>[6]</sup>。如忽略电子和空穴波函数在各自势垒中的衰减部分,可以采用平板电容近似来表示每一超晶格周期的光伏<sup>[6]</sup>。

按照 Brum<sup>[6]</sup> 等的理论,由于超晶格结构相当于一个串联电容,因此在脉冲光照射

下,超晶格的光伏响应将呈现出类似于电容充放电的特征。Brum<sup>[6]</sup> 等的理论的另一个必然结论是:超晶格光伏响应的极性是空间固定的——邻近束缚电子区域的超晶格表面处于低电势,邻近束缚空穴区域的超晶格表面处于高电势。Bleuse 等<sup>[11]</sup>在 InAs/GaSb 超晶格中,观测到的光伏响应极性与理论预期的相反。他们解释为大的表面真空势垒使得表面 InAs 层不约束电子,从而使光伏极性与预期相反。

我们在 Si NIPI 结构的光伏测试中,通过改变光照条件,观测到 Si NIPI 结构光伏响应极性的空间固定性,并通过外加激光连续照射样品前后的对比实验,发现 Si NIPI 结构的光伏效应中,实空间中的间接跃迁如电子空穴子带间的跃迁并不起主要作用,或者说这种跃迁的几率比较小;另一方面, Si NIPI 结构的光伏响应主要取决于实空间中与浅杂质有关的直接或准直接跃迁。

## 2 实验

样品是用 MBE 在弱 n 型体 Si 衬底上生长 20 个周期的 Si NIPI 超晶格<sup>[17]</sup>。衬底电阻率为  $7000\Omega \cdot \text{cm}$ , 相应载流子浓度约为  $6 \times 10^{11} \text{cm}^{-3}$ 。所掺杂质为 B 和 P。每一掺杂层厚度相同,为  $500 \text{\AA}$ ; 每层掺杂浓度也相同,为  $1 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$ ; 在 P 型掺杂层和 n 型掺杂层之间无本征层。衬底厚度约  $500\mu\text{m}$ 。

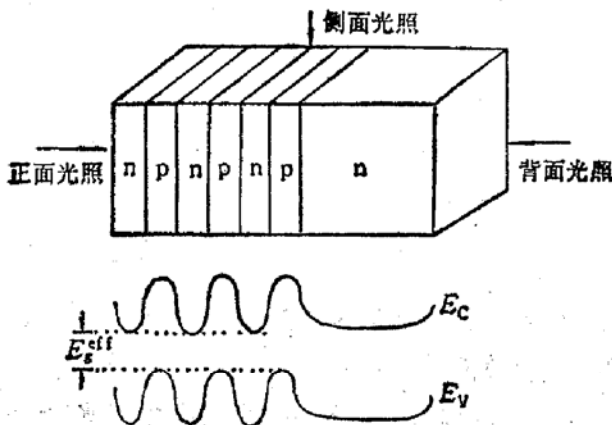


图1 Si NIP 1245<sup>o</sup> 样品能带边分布示意图  
由于局域耗尽, NIPI 超晶格区域  
不存在表面势垒

实验所用测试方法与表面光伏相同:在样品表面和透明电极之间夹以薄云母片,构成电容耦合回路,通过透明电极引出脉冲光照射样品产生的光伏信号,再经锁相放大后输出。分别在正面光照(逆超晶格生长方向)、背面光照(顺超晶格生长方向)及侧面光照(垂直超晶格生长方向)下进行了测试,并作了正面光照下另加  $1\text{mW}$  和  $50\text{mW}$  的 He-

Ne 激光连续照射样品前后的对比实验。

样品的能带示意图如图 1 所示。图 2 (a) 是样品在正面、背面和侧面光照下的结果。当光子能量小于  $1.17\text{eV}$  时,三种光照条件下的光伏响应都随光子能量增大而增大,其中以侧面光照时增加最快;光子能量大于  $1.17\text{eV}$  时,背面光照下的光伏响应仍随光子能量增大而增大,而正面和侧面光照下的光伏响应却随光子能量增大而减小。三种光照条件下的光伏响应中都存在一个明显的阈值,约为  $1.054\text{eV}$ 。另在侧面光照下的光伏响应中还存在一个很不明显的阈值,约为  $1.008\text{eV}$ 。在  $1.008\text{eV}$  到  $1.054\text{eV}$  之间,光伏响应与光子能量近似成指数关系,在  $1.054\text{eV}$  到  $1.10\text{eV}$  间,光伏响应与光子能量近似成线性关系,如图 2 (b) 示。

图 3 是在不同光强下背面照射样品的结果。当背面照射的激发光强增大后,光子能量低于  $1.17\text{eV}$  区域的光伏响应的增加比高于  $1.17\text{eV}$  区域明显得多。图 4 是在不同区

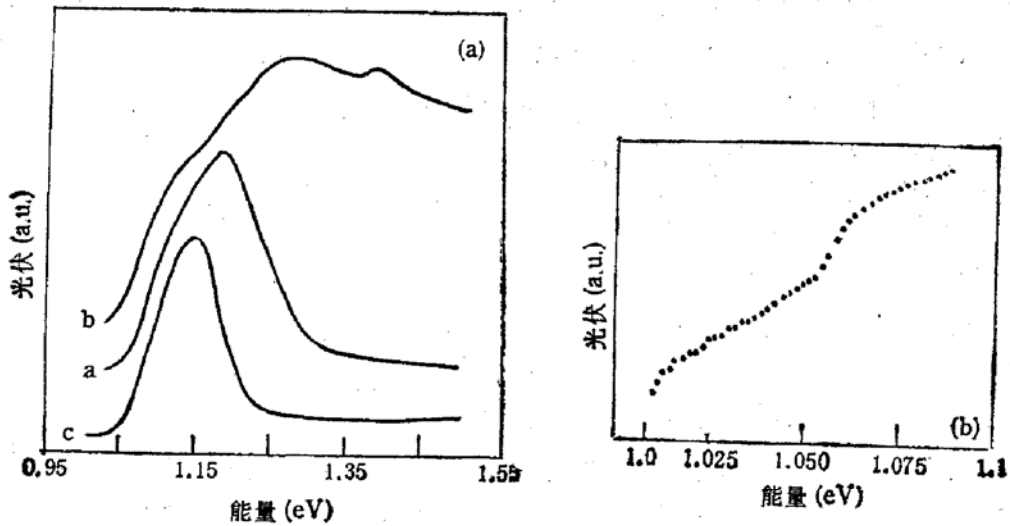


图 2(a) Si NIPi 245# 样品分别在正面 (a), 背面 (b) 及侧面 (c) 光激发下的光伏响应结果 (b) Si NIPi 245# 样品在侧面光激发下光伏响应局部(纵轴为对数坐标)

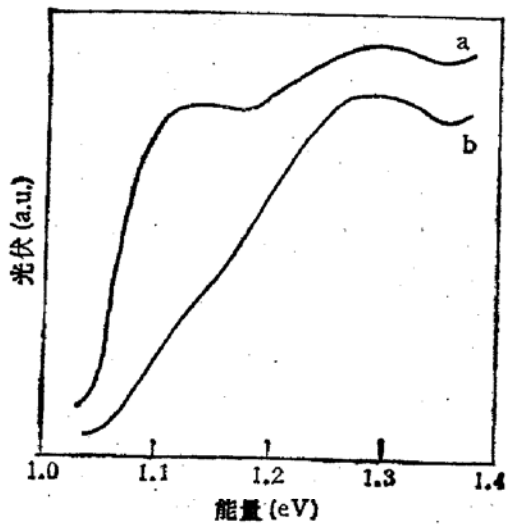


图 3 Si NIPi 245# 样品不同强度背面激发下的结果  
a 强光; b 弱光

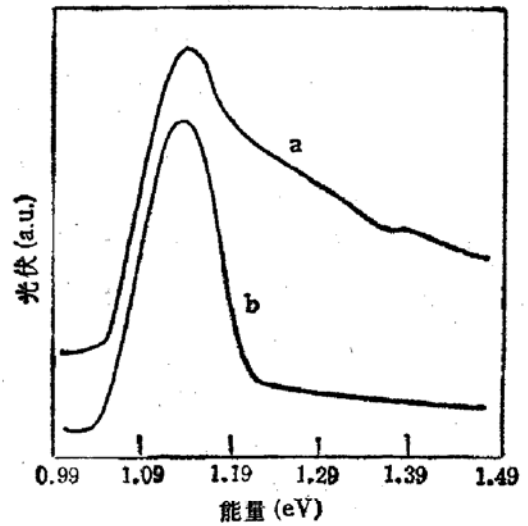


图 4 Si NIPi 245# 样品侧面不同聚焦情况下的结果  
图中 a 情形主要聚焦在 NIPi 超晶格区域即样品表面, 而 b 情形下激发区域稍宽

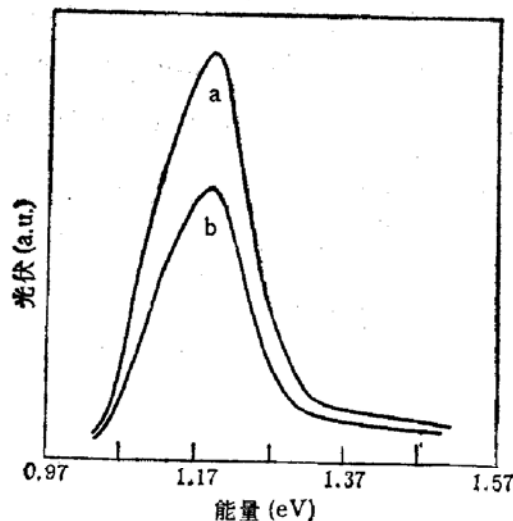


图 5 Si NIPi 245# 样品正面激发外加 He-Ne 激光连续照射下的结果  
光伏阈值和谱形未变, 仅幅度减小。图中 a 是无 cw He-Ne 激光照射情形; b 是有 cw He-Ne 激光照射情形

域侧面照射样品的结果(这时激发光聚成一细线)。当激发光靠近样品表面 NIPI 结构区域一侧时, 1.17eV 以上的光伏响应相对 1.17eV 以下的光伏响应增大。图 5 是正面光照下外加 He-Ne 激光连续照射前后的对比实验结果。在 1 mW 和 50 mW 两种功率的激光连续照射下, 光伏响应的谱形和阈值都不改变, 仅响应幅度减小, 并且在 50 mW 下减小的幅度大于 1 mW 下减小的幅度。

### 3 结果分析

#### 3.1 NIPI 结构和衬底光伏响应的极性

对于电子和空穴的面密度为  $n_i$ ,  $z$  方向(生长方向)上基态的平均位置为  $\langle z_e \rangle$  和  $\langle z_h \rangle$  的第  $i$  个超晶格周期, 如采用平板电容近似, 则其产生的光伏可写为:

$$\delta V_i = \frac{n_i e (\langle z_h \rangle - \langle z_e \rangle)}{\epsilon \epsilon_0}$$

其中  $\epsilon$  为相对介电常数。对  $N$  个周期的超晶格, 如果激发光波矢量平行于  $z$  轴, 考虑到吸收因素, 整个超晶格总的光伏可表示成:

$$\Delta V_{\parallel} = \frac{n_{\parallel} e (\langle z_h \rangle - \langle z_e \rangle)}{\epsilon \epsilon_0} \frac{1 - e^{-N\alpha d}}{1 - e^{-\alpha d}}$$

其中  $n_{\parallel}$  为光照射或透入面第一个周期内电子或空穴的面密度,  $\alpha$  为超晶格的吸收系数, 是光子能量  $E_p$  的函数,  $d$  为超晶格每一周期的厚度。对于激发光波矢量垂直于  $z$  轴的情形, 总的光伏是:

$$\Delta V_{\perp} = N \frac{n_{\perp} e (\langle z_h \rangle - \langle z_e \rangle)}{\epsilon \epsilon_0}$$

其中  $n_{\perp}$  为任一周期内电子或空穴的面密度。这时每周期对光伏的贡献相同。

室温下 NIPI 结构的有效带隙  $E_g^{\text{eff}}$  小于本征体 Si 带隙  $E_g$ 。体 Si 在光子能量大于  $E_g$  如光波长为 0.6195  $\mu\text{m}$  时的吸收系数为  $3.8 \times 10^3 \text{ cm}^{-1}$ <sup>[18]</sup>, 相应的透射深度大于 2.5  $\mu\text{m}$ , 如果忽略 NIPI 结构与体 Si 在此波长下吸收系数的差别, 则由于透射深度大于整个 NIPI 超晶格的厚度 2  $\mu\text{m}$ , 还将有部分光透过 NIPI 超晶格区域, 进入衬底表面区域, 导致表面光伏的产生。背面照射样品时, 衬底背面将产生表面光伏。侧面照射样品时, 衬底的前表面仍将产生表面光伏。衬底产生的表面光伏与 NIPI 超晶格的光伏迭加在一起, 整个样品总的光伏于是可以写成:

$$\Delta V_F = \frac{e K I_0 (\langle z_h \rangle - \langle z_e \rangle)}{\epsilon \epsilon_0} (1 - e^{-N\alpha d}) + e^{-N\alpha d} I_0 \delta V_F,$$

$$\Delta V_B = \frac{e K I_0 (\langle z_h \rangle - \langle z_e \rangle)}{\epsilon \epsilon_0} e^{-\beta D} (1 - e^{-N\alpha d}) + I_0 \delta V_B,$$

$$\Delta V_S = \frac{e K I_0 N (\langle z_h \rangle - \langle z_e \rangle)}{\epsilon \epsilon_0} (1 - e^{-\alpha w}) + I_0 \delta V_F.$$

其中角标  $F, B, S$  分别表示正面、背面和侧面光照,  $\delta V_F$  是衬底表面在单位光强的光照射下产生的表面光伏,  $\delta V_B$  是衬底背面在单位光强的光照射下产生的表面光伏。  $\beta$  和

$D$  分别是衬底的吸收系数和厚度。  $K$  是吸收单位强度的光所产生的电子或空穴的面密度。

从  $\Delta V_F, \Delta V_S$  的表达式可以看出, 由于都包含超晶格和衬底前表面的光伏贡献, 两者的谱形将是基本相似的。 但因侧面光照下超晶格的光伏贡献相对较大, 而衬底前表面的光伏极性又与超晶格的光伏极性相反(见下文分析), 所以样品总光伏的极值点的能量位置将比正面光照下低。 图 2 中的实验结果证实了这两点。

当光子能量低于体 Si 带隙时, 体 Si 是“透明”的, 在衬底区的表面光伏  $\delta V_F, \delta V_B$  为零,  $\Delta V_F, \Delta V_B$  及  $\Delta V_S$  的表达式中只剩下前一项, 即 NIPI 结构的贡献。 如果 NIPI 结构光伏的极性是固定的, 则样品的光伏响应在三种光照条件下都应具有相同的符号, 并且响应的谱形也相同。 图 2 中的结果表明正是这样。 图 3 中结果所表明的大约在 1.17 eV 以下光伏响应与激发光强度之间的非线性特征, 进一步证明 1.17 eV 以下的光伏响应主要来源于 NIPI 结构。 这里的 1.17 eV 只是光伏响应谱形中的明显分界点, 并非是衬底表面光伏的阈值能量即衬底带宽。

对于光子能量高于体 Si 带隙时的光伏响应, 由于这时  $\delta V_F$  及  $\delta V_B$  不再为零, 因此样品的光伏响应中应有衬底表面光伏的贡献。 根据  $\Delta V_F$  及  $\Delta V_S$  的表达式中 NIPI 结构的贡献随光子能量增加将逐渐达到饱和的特点, 以及图 2(a) 的实验结果中  $\Delta V_F$  及  $\Delta V_S$  当光子能量高于 1.17 eV 时随光子能量增加而减小的趋势, 可以断定  $\delta V_F$  的极性与 NIPI 结构光伏的相反, 这要求衬底前表面区域中的能带分布是靠近表面能带向上弯曲。 图 4 中当激发光靠近样品表面 NIPI 结构区域时, 1.17 eV 以上的光伏响应相对增大的实验事实进一步证实了  $\delta V_F$  的极性与 NIPI 结构光伏的相反, 并且所要求的表面能带分布也与图 1 中所示的一致。 背面光照下, 对于体 Si 带隙能量以上的光伏响应来说, 由于  $e^{-\beta D}$  约为零, 因此  $\Delta V_B$  中主要是  $\delta V_B$  的贡献, 再根据图 2(a) 或图 3 中 1.17 eV 以上光伏响应  $\Delta V_B$  仍随光子能量增加而增大的结果, 可以断定  $\delta V_B$  具有与 NIPI 结构光伏响应相同的极性。 这要求衬底后表面区域内能带分布是愈靠近衬底背表面, 能带愈向上弯曲, 与图 1 中所示的一致。

### 3.2 NIPI 结构中产生光伏的光跃迁

NIPI 结构中电子子带与空穴子带间的光跃迁是实空间中的间接跃迁。 这种跃迁如果存在, 其结果将直接产生两个符号相反的、空间上分离的自由载流子, 从而对光伏响应有贡献。 另外, NIPI 结构中的在实空间中是直接或准直接的光跃迁, 如与杂质有关的从受主到导带 (A-C)、从价带到施主 (V-D) 的跃迁, 及受主到相邻的施主 (A-D) 的跃迁, 如图 6 所示, 再经过自由载流子的热弛豫或局域电场下的漂移过程(对 A-C 和 V-D 过程)后, 或者不再经过其它过程(对 p-n 结界面附近的 A-D 过程), 也能产生两个符号相反的、空间上分离的载流子。 例如 A-C

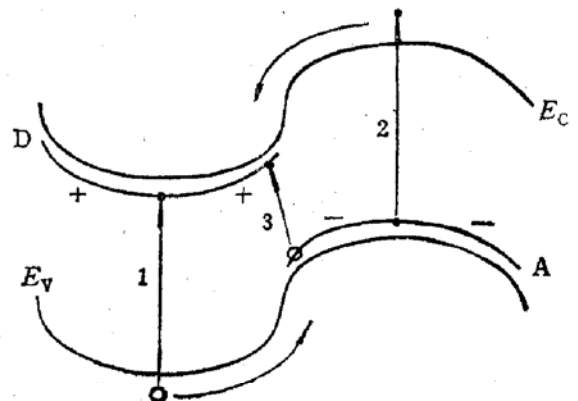


图 6 实空间中与杂质有关的(准)直接跃迁过程  
过程 1(V-D) 及 2(A-C) 产生一个自由载流子, 可与被杂质束缚的、符号相反的载流子在空间上分离开来; 过程 3(A-D) 产生两符号相反、空间分离的束缚载流子

过程产生空间上分离的自由电子和束缚空穴, V-D 过程产生空间上分离的自由空穴和束缚电子;而 A-D 过程本身就产生了空间上分离的束缚电子和束缚空穴,因此都能对光伏响应作出贡献。但不同的是,实空间中的间接光跃迁的能量阈值受 NIPI 结构有效带隙的限制,而实空间中直接或准直接的光跃迁的能量阈值却与 NIPI 结构有效带隙无关。对于与杂质有关的 A-C、V-D 及 A-D 等过程,其能量阈值仅决定于施主、受主在带隙中的能量位置。

He-Ne 激光连续照射 NIPI 结构的实际结果是,由于产生电子空穴对补偿掉部分空间电荷,使得空间电荷势的调制作用减弱,即 NIPI 结构的有效带隙增加<sup>[14-16]</sup>,从而影响实空间中间接光跃迁的能量阈值。实空间中直接或准直接的光跃迁的能量阈值由于与 NIPI 结构的有效带隙无关,因此不受激光连续照射的影响。由于激光连续照射改变了空间电场,光跃迁的几率不变,但载流子的空间分离率减小。

图 5 所示的结果中光伏阈值及光伏谱形状不变,仅幅度变小。根据以上的分析,我们有理由将 1.054eV 及 1.008eV 所分别对应的跃迁过程指认为 A-C、V-D 过程及 A-D 过程。由于 B 和 P 在体 Si 中的离化能相差很小, A-C 及 V-D 过程难以从跃迁能量阈值区分开来。从图 5 的结果还可看出, A-D 过程对光伏的贡献比 A-C 及 V-D 过程弱很多。这是因为 A-D 过程仅限于 pn 结界面附近数十 Å 的区域,参与这一过程的施主、受主数目很少,并且导致的载流子空间分离也很小。图 5 中光伏阈值不变的结果说明 Si NIPI 结构中实空间的间接跃迁在其光伏效应中几乎不起作用,或者说实空间的间接跃迁几率几乎为零。考虑到 Si 是间接带材料,并且在我们的样品中,电子空穴的空间分离大,波函数交迭小,因此电子空穴带间跃迁几率几乎为零的结论是可以接受的。

以上的分析得到了杂质分布影响杂质光跃迁几率大小的理论和实验结果的支持。Leith 等<sup>[9]</sup>研究了组分是有意识周期性变化的 Si NIPI 结构的光伏和光电导的衰减行为,发现 n 层横向持久光电导随时间呈幂指数衰减,而 p 层内却无横向持久光电导存在。对于后一现象, Leith 等<sup>[9]</sup>解释为受主能级和价带之间的跃迁几率较大所致。浅受主和施主能级分别到价带和导带的不同跃迁几率可以补充说明以上提到的 A-C、V-D 及 A-D 过程对光伏的贡献,并且 Si NIPI 结构中 n 层存在横向持久光电导,而 p 层不存在横向持久光电导,也从另一个方面说明了 Si NIPI 结构中电子空穴带间跃迁几率很小。因为如果子带间跃迁几率比较大,则 n 层和 p 层内横向持久光电导的衰减行为应该相同,而实验结果表明并不是这样的。

## 4 结论

对不同光照条件下 Si NIPI 结构的光伏效应的研究表明, Si NIPI 结构中不存在因光生载流子空间分离而产生的光伏效应,并进一步证实光伏响应的极性是空间固定的,与光照条件无关,直接验证了 Brum 等的光伏理论。对正面光照条件下另加 He-Ne 激光连续照射前后的结果的分析表明, Si NIPI 结构中,实空间的间接跃迁如电子空穴带间的跃迁几率几乎为零,在光伏效应中不起作用。Si NIPI 结构的光伏效应主要取决于

与浅杂质有关的实空间中的直接或准直接跃迁: 光伏阈值 1.054 eV 和 1.008 eV 分别对应于受主到导带、价带到施主和受主到邻近施主的跃迁过程。

### 参 考 文 献

- [1] P. Rappaport, J.J. Wysocki, "Photovoltaic Effect", «Photoelectronic Materials and Devices», ed. by S.Larach, D. Van Nerstrand, P.239, 1965.
- [2] H.Dember, *Physik. Zeits.*, 1931, **32**: 554&856; 1932, **33**:209.
- [3] A. Goodman, *J. Appl. Phys.*, 1961 **32**: 2550.
- [4] F. Capasso *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, 1983, **51**:2318.
- [5] F. Capasso *et al.*, *Surf. Sci.*, 1986, **174**:501.
- [6] J. A.Brum *et al.*, *Phys. Rev.*, 1986, **B33**: 1063.
- [7] A. M. Glass *et al.*, *Appl. Phys. Lett.*, 1989, **54**: 2247.
- [8] G.A.Leith *et al.*, *Appl. Phys. Lett.*, 1989, **54**: 1558.
- [9] L.K. Orlov *et al.*, *Sov. Phys. Semicond.*, 1988, **22**: 1262.
- [10] B.Y. Hua *et al.*, *Appl. Phys. Lett.*, 1988, **53**: 1062.
- [11] J.Bleuse *et al.*, Proceeding of 3rd International Conference on Modulated Semiconductor Structures, France, 1987.
- [12] P. Voisin *et al.*, *Surf. Sci.*, 1986, **174**: 255.
- [13] P. Blood, *J. Appl. Phys.*, 1985, **58**: 2288.
- [14] L.L. Chang, K. Ploog, «Molecular Beam Epitaxy and Heterostructures», Martinus Nijhoff Publishers, 1985.
- [15] G.H.Döhler, *Phys. Status Solidi.*, 1972, **B52**: 79.
- [16] K.Ploog, G.H.Döhler, *Adv. Phys.*, 1983, **32**: 285.
- [17] D.Landheer *et al.*, *Appl. Phys. Lett.*, 1989, **52**: 910.
- [18] O. Madelung, Landolt-Börnstein Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology, Group III, Volume 17.

## The Polarity of Photovoltage and the Shallow Impurity-Related Optical Transitions in Si NIPI Structure

Luo Changping, Jiang Desheng, Li Feng  
Zhuang Weihua and Li Yuzhang

*(National Laboratory for Superlattices and Microstructures, Institute of Semiconductors, The Chinese Academy of Sciences, Beijing 100083)*

**Abstract** We have studied the photovoltaic effect under different excitations in Si NIPI structures, and taken the comparison experiments under front surface excitation before and after an additional cw He-Ne laser beam was used to provide an optical bias. The results show that the photovoltage arising from the excess carriers spatial separation predicted by Brum et al exists in Si NIPI, and in addition, its polarity is spatially fixed. The comparison of results with and without cw laser biasing indicates that the indirect transitions in real space between electron and hole subbands do not play important role in photovoltaic effect. The photovoltage mainly depends on the direct or quasi-direct transitions related to shallow impurities in real space.

**PACC:** 7240, 7340L, 7850