

УДК 621.31:535.215

## Оптимизация ростовых условий для улучшения параметров фотоприемников и солнечных элементов с квантовыми точками

А. В. Войцеховский, А. П. Коханенко, К. А. Лозовой

*Анализируются возможности создания фоточувствительных структур с квантовыми точками Ge/Si для оптоэлектроники. Даются рекомендации по условиям роста, необходимым для получения максимальных обнаружительной способности фотоприемников и КПД солнечных элементов на квантовых точках. Показано, что для достижения оптимальных характеристик фотоприемников следует выращивать квантовые точки при достаточно высоких температурах, а для увеличения коэффициента преобразования солнечных элементов при относительно низких температурах роста.*

PACS: 85.60.Gz; 68.65.Hb; 81.10.Aj

*Ключевые слова:* инфракрасные фотодетекторы, солнечные элементы, наногетероструктуры, молекулярно-лучевая эпитаксия.

### Введение

В последние годы исследователи проявляют очень большой интерес к созданию различных оптоэлектронных устройств на основе материала с квантовыми точками германия в кремнии [1—7]. Такими приборами могут быть фотоприемники инфракрасного диапазона и солнечные элементы. К преимуществам данной материальной системы можно отнести продление спектрального отклика в инфракрасную область по сравнению с чистым кремнием, относительную дешевизну, безвредность для здоровья человека, работу в широком температурном интервале и совместимость с высоко развитой технологией кремниевых интегральных микросхем.

Столь высокий интерес к наногетероструктурам с квантовыми точками германия на кремнии обусловлен рядом уникальных свойств, характеризующих подобного рода структуры. К этим свойствам можно отнести увеличение времени жизни носителей из-за уменьшения рассеяния на фоновых, снижение скорости тепловой генерации, по-

явление так называемой промежуточной зоны, чувствительность к нормально падающему излучению, возможность узкополосного детектирования и др. Все перечисленные особенности позволяют приборам на основе кремния и германия на равных конкурировать с уже ставшими традиционными оптоэлектронными приборами на основе соединений  $A^{III}B^V$  и  $A^{II}B^{VI}$ .

Инфракрасные фотодетекторы применяются в целом ряде областей: от военной промышленности до гражданских нужд. Основными требованиями при выборе фотоприемников являются хорошие рабочие характеристики, работа при как можно более высоких температурах, низкая стоимость изготовления. На сегодняшний день основным материалом для изготовления фотоприемников инфракрасного диапазона является HgCdTe (КРТ). Однако, существуют сложности, связанные с его эпитаксиальным выращиванием, что выливается в очень высокую стоимость данного материала. Альтернативой фотоприемникам на основе КРТ могут стать инфракрасные фотодетекторы с квантовыми точками [8].

Солнечные элементы также с каждым годом привлекают к себе все большее внимание исследователей, особенно в связи с колоссальными темпами роста энергопотребления, ограниченностью традиционных ископаемых источников энергии и осознанием необходимости перехода к альтернативным энергетическим ресурсам. На сегодняшний день на рынке преобладают кремниевые солнечные элементы, коэффициент полезного

Войцеховский Александр Васильевич, профессор, зав. кафедрой.

Коханенко Андрей Павлович, профессор.

Лозовой Кирилл Александрович, студент.

Томский государственный университет.

Россия, 634050, г. Томск, пр. Ленина, 36.

Тел. (3822) 41-35-17.

E-mail: vav43@mail.tsu.ru

Статья поступила в редакцию 18 августа 2014 г.

© Войцеховский А. В., Коханенко А. П., Лозовой К. А., 2014

действия лучших образцов которых составляет величину порядка 20 %. В более дорогих многокаскадных солнечных элементах на основе соединений  $A^{III}B^V$  удается достичь значения эффективности в 34 %. Теоретические же оценки показывают, что предельная эффективность преобразования излучения в электричество для фотопреобразователей на основе материала с квантовыми точками германия в кремнии может достигать 53 % [9, 10].

Характеристики оптоэлектронных устройств на основе наногетероструктур с квантовыми точками (обнаружительная способность для фотоприемников и коэффициент полезного действия) напрямую зависят от параметров квантовых точек: поверхностной плотности, среднего размера в плоскости основания и разброса по размерам. В то же время основным методом получения массивов квантовых точек на сегодняшний день является их самоорганизация в процессе молекулярно-лучевой эпитаксии. В связи с этим, управлять параметрами формирующихся таким образом островков можно лишь косвенно, контролируя условия роста: температуру подложки и скорость осаждения германия.

Поэтому цель данной работы — теоретически определить оптимальные с точки зрения дальнейшего приборного применения ростовые условия для создания фотоприемников с как можно более высокой обнаружительной способностью и солнечных элементов с максимальным коэффициентом полезного действия.

### Оптимизация параметров квантовых точек для их применения в оптоэлектронике

Известно, что обнаружительная способность  $D^*$  инфракрасных фотодетекторов с квантовыми точками, работающих в режиме ограничения темновым током, определяется выражением [8]:

$$D^* = \frac{\eta}{qh\nu\sqrt{2G}}. \quad (1)$$

Здесь  $\eta$  — внешняя квантовая эффективность детектора,  $q$  — заряд электрона,  $h$  — постоянная Планка,  $\nu$  — частота падающего излучения,  $G$  — скорость термической генерации носителей заряда, определяемая выражением:

$$G = \frac{n_{th}}{\alpha\tau}, \quad (2)$$

где  $n_{th}$  — концентрация термически генерированных носителей заряда,  $\alpha$  — коэффициент поглощения материала фотоприемника,  $\tau$  — время жизни носителей заряда.

Если полосу поглощения одной квантовой точки в случае оптического перехода между основным и возбужденным связанными состояниями можно описать гауссовым распределением с полушириной  $\sigma_{QD}$ , то для реального ансамбля квантовых точек, вследствие неизбежной дисперсии по размерам, происходит неоднородное уширение спектра поглощения, и полуширина полосы поглощения  $\sigma_{ens}$  становится значительно большей,  $\sigma_{ens} > \sigma_{QD}$ . Коэффициент поглощения в таком случае можно описать формулой:

$$\alpha(h\nu) = A \frac{n_1 \sigma_{QD}}{N \sigma_{ens}} \exp \left[ -\frac{(h\nu - E_G)^2}{\sigma_{ens}^2} \right], \quad (3)$$

где  $A$  — максимум коэффициента поглощения,  $n_1$  — поверхностная концентрация электронов в основном состоянии квантовой точки,  $N$  — поверхностная плотность квантовых точек,  $E_G = E_2 - E_1$  — энергия оптического перехода между основным и возбужденным состояниями квантовой точки. Отношение  $\sigma_{ens} / \sigma_{QD}$  в (3) определяет уменьшение максимального значения коэффициента поглощения из-за неоднородного уширения энергетических уровней ансамбля квантовых точек [8].

Зависимость энергии основного состояния квантовой точки от ее размера довольно хорошо описывается прямой линией [11], поэтому в дальнейшем будем считать, что полуширина полосы поглощения  $\sigma_{ens}$  пропорциональна разбросу квантовых точек по размерам  $\delta L$ .

Объединяя выражения (1)—(3) и оставляя только те параметры, которые определяются условиями выращивания квантовых точек, получим

$$D^* \propto \frac{1}{\sqrt{G}} \propto \sqrt{\frac{\sqrt{N}}{\delta L}}. \quad (4)$$

На основе выражения (4) можно оценить ростовые условия, благоприятные для создания фотоприемников инфракрасного диапазона на основе наноструктур кремния с квантовыми точками германия.

При численном моделировании зависимостей  $\delta L$  и  $N$  от условий роста использовалась разработанная в [12—14] кинетическая модель расчета параметров квантовых точек германия на кремнии, которая основана на обобщении классической теории зародышеобразования и позволяет определить температурные зависимости поверхностной плотности квантовых точек и функции плотности распределения островков по размерам для различных скоростей роста. Для расчета кинетики формирования квантовых точек сначала определялись термодинамические параметры систе-

мы, такие как свободная энергия образования островка и равновесная толщина смачивающего слоя. Затем вычислялись скорость зарождения кластеров, поверхностная плотность квантовых точек, скорость поступления атомов в островок и функция распределения квантовых точек по размерам, позволяющая определить средний размер и разброс островков по размерам.

Длина волны, соответствующая максимуму поглощения фотодетектора, определяется средним размером квантовых точек в плоскости основания. Поэтому увеличения обнаружительной способности фотоприемников на основе массивов квантовых точек с заданным средним размером можно добиться только уменьшением разброса островков по размерам  $\delta L$ . Разброс по размерам оценивался как среднеквадратичное отклонение и вычислялся из функции распределения островков по размерам по формуле:

$$\delta L = \sqrt{\frac{1}{N} \int_{L_{\min}}^{L_{\max}} (L - L_{av})^2 f(L) dL}, \quad (5)$$

где  $f(L)$  — функция распределения квантовых точек по размерам  $L$ ,  $L_{av}$  — средний размер квантовых точек в плоскости основания,  $L_{\min}$  и  $L_{\max}$  — минимальный и максимальный размеры островков, наблюдаемые в ансамбле. При этом функция распределения квантовых точек по размерам удовлетворяет следующему условию нормировки:

$$\frac{1}{N} \int_{L_{\min}}^{L_{\max}} f(L) dL = 1. \quad (6)$$

Расчет проводился для массивов квантовых точек со средними размерами 10, 15 и 20 нм. Температура и скорость роста выбирались такими, чтобы обеспечить постоянство среднего размера. На рис. 1 и 2 приводятся полученные зависимости дисперсии по размерам  $\delta L$  и обнаружительной способности фотодетекторов с квантовыми точками от температуры роста.

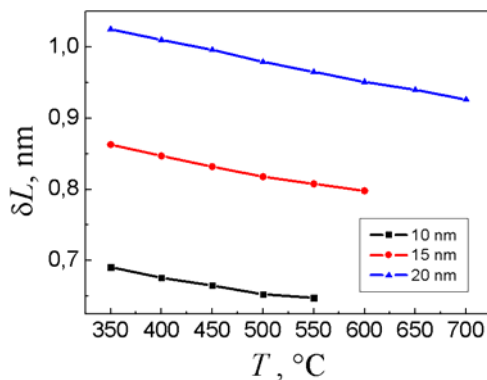


Рис. 1. Зависимость разброса по размерам квантовых точек от температуры для трех средних размеров: 10, 15 и 20 нм

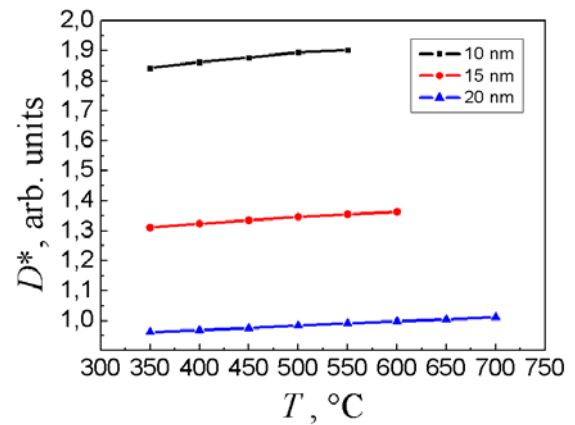


Рис. 2. Зависимость обнаружительной способности фотодетекторов от температуры роста квантовых точек для трех средних размеров: 10, 15 и 20 нм

Из графиков видно, что с ростом температуры осаждения разброс по размерам уменьшается. Поэтому можно сделать вывод, что более высокие значения обнаружительной способности могут быть достигнуты в фотоприемниках на основе квантовых точек, выращенных при температуре 500 °C и выше и при соответствующих высоких скоростях осаждения германия.

Для применения же в солнечных элементах необходимы массивы с как можно большей плотностью квантовых точек (для увеличения коэффициента поглощения) и по возможности более широким распределением квантовых точек по размерам, так как это обеспечит более полное использование солнечного спектра [15].

На рис. 3 приводятся температурные зависимости поверхностной плотности и относительного разброса по размерам островков при постоянной скорости осаждения германия  $V = 0,1$  МС/с (достаточно традиционная для технологических процессов выращивания скорость), полученные с использованием указанной выше модели. Из анализа рис. 3 можно сделать вывод о том, что для выращивания наногетероструктур с квантовыми точками германия в кремнии, ориентированных на создание солнечных элементов, подходят условия роста, характеризующиеся как можно более низкой температурой подложки. Так, например, для температуры  $T = 350$  °C и скорости роста  $V = 0,1$  МС/с теоретические оценки дают для параметров массива наноструктур следующие значения: поверхностная плотность  $N \approx 5 \cdot 10^{11}$  см<sup>-2</sup>, средний размер  $L_{av} \approx 11$  нм, относительный разброс по размерам  $\delta L/L_{av} \approx 6,5$  %.

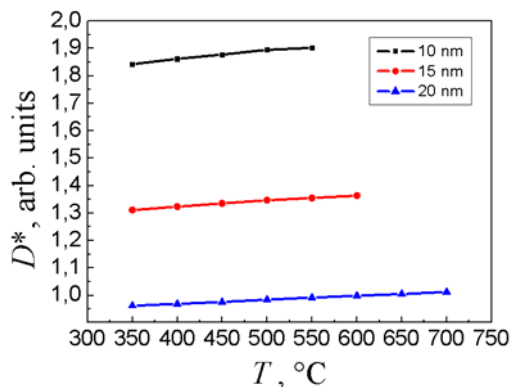


Рис. 3. Зависимость относительного разброса по размерам (1) и поверхностной плотности (2) квантовых точек от температуры

### Заключение

В представленной работе на основе теоретической модели, позволяющей рассчитывать параметры квантовых точек, полученных методом МЛЭ, даются рекомендации по условиям роста, необходимым для получения максимальных обнаружительной способности и коэффициента полезного действия фотоприемников и солнечных элементов на квантовых точках соответственно. Показано, что для достижения оптимальных характеристик фотоприемников следует выращивать квантовые точки при достаточно высоких температурах, а для увеличения коэффициента преобразования солнечных элементов, наоборот, при низких температурах.

Исследование выполнено при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках базовой части Госзадания Томского государственного университета.

### Литература

1. Пчеляков О. П., Болховитянов Ю. Б., Двуреченский А. В. и др. // ФТП. 2000. Т. 34. № 11. С. 1281.
2. Brunner K. // Rep. Prog. Phys. 2002. V. 65. No. 27. P. 27.
3. Wang K. L., Cha D., Liu J., Chen C. // Proc. of the IEEE. 2007. V. 95. No. 9. P. 1866.
4. Шкляев А. А., Ичикава М. // Успехи физических наук. 2008. Т. 178. № 2. С. 139.
5. Lozovoy K. A., Voitsekhovskiy A. V., Kokhanenko A. P., et al. // Opto-Electronics Review. 2014. V. 22. No. 3. P. 171.
6. Войцеховский А. В., Коханенко А. П., Лозовой К. А. и др. // Успехи прикладной физики. 2013. Т. 1. № 3. С. 338.
7. Aqua J.-N., Berbezier I., Favre L. // Physics Reports. 2013. V. 522. P. 59.
8. Phillips J. // J. Appl. Phys. 2002. V. 91. No. 7. P. 4590.
9. Luque A., Marti A. // Phys. Rev. Lett. 1997. V. 78. No. 26. P. 5014.
10. Pchelyakov O. P., Dvurechenskii A. V., Nikiforov A. I., et al. // Russian Physics Journal. 2011. V. 53. P. 943.
11. Dvurechenskii A. V., Nenashv A. V., Yakimov A. I. // Nanotechnology. 2002. V. 13. P. 75.
12. Дубровский В. Г. // ФТП. 2006. Т. 40. № 10. С. 1153.
13. Лозовой К. А., Войцеховский А. В., Коханенко А. П. // Изв. вузов. Физика. 2013. № 9/2. С. 17.
14. Lozovoy K. A., Voitsekhovskiy A. V., Kokhanenko A. P., et al. // Surface Science. 2014. V. 619. P. 1.
15. Войцеховский А. В., Григорьев Д. В., Пчеляков О. П. и др. // Прикладная физика. 2010. № 2. С. 96.

## Optimization of growth conditions for improvement of parameters of photoreceivers and solar cells with quantum dots

A. V. Voytsekhovskiy, A. P. Kokhanenko, and K. A. Lozovoy

Tomsk State University  
36 Lenin Avenue, Tomsk, 634050, Russia  
E-mail: vav43@mail.tsu.ru

Received August 18, 2014

*In this work, opportunities for photosensitive structures based on Ge/Si quantum dots for optoelectronics are analyzed. Recommendations on growth conditions necessary for achieving maximum detectivity of infrared photodetectors with quantum dots and efficiency of quantum dot solar cells are given. It is also shown, that for optimization of photodetectors characteristics quantum dots should be grown at rather high temperatures, and, on the contrary, at relatively low temperatures for maximization of solar cells efficiency.*

PACS: 85.60.Gz; 68.65.Hb; 81.10.Aj

Keywords: infra-red photodetectors, solar cells, nanoheterostructures, molecular beam epitaxy.

**References**

1. O. P. Pchelyakov, Yu. B. Bolkhovityanov, A. V. Dvurechensky, et al., *Semiconductors* **34**, 1281 (2000).
2. K. Brunner, *Rep. Prog. Phys.* **65** (27), 27 (2002).
3. K. L. Wang, D. Cha, J. Liu, et al., *Proc. of the IEEE* **95**, 1866 (2007).
4. A. A. Shklyayev and M. Ichikava, *Usp. Phys.* **178**, 139 (2008).
5. K. A. Lozovoy, A. P. Kokhanenko, et al., *Opto-Electronics Review* **22** (3), 171 (2014).
6. A. V. Voitsekhovskiy, A. P. Kokhanenko, K. A. Lozovoy, et al., *Uspekhi Prikladnoi Fiziki* **1**, 338 (2013).
7. J.-N. Aqua, I. Berbezier, and L. Favre, *Physics Reports* **522**, 59 (2013).
8. J. Phillips, *J. Appl. Phys.* **91**, 4590 (2002).
9. A. Luque and A. Marti, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 5014. (1997)
10. O. P. Pchelyakov, A. V. Dvurechenskii, A. I. Nikiforov, et al., *Russian Physics Journal* **53**, 943 (2011).
11. A. V. Dvurechenskii, A. V. Nenashev, and A. I. Yakimov, *Nanotechnology* **13**. 75 (2002).
12. V. G. Dubrovsky, *Semiconductors* **40**, 1153 (2006).
13. K. A. Lozovoy, A. V. Voitsekhovskiy, and A. P. Kokhanenko, *Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Fizika* No. 9/2, 17 (2013).
14. K. A. Lozovoy, A. V. Voitsekhovskiy, and A. P. Kokhanenko, et al, *Surface Science* **619**, 1 (2014).
15. A. V. Voitsekhovskiy, D. V. Grigor'ev, O. P. Pchelyakov, et al., *Prikladnaya Fizika*, No. 2, 96 (2010).