

## 2 Physikalisches Modell

In diesem Kapitel werden die physikalischen Grundlagen der inneren Photoemission an Metall - Halbleiter Heterostrukturen dargestellt. Zunächst wird der Potentialverlauf im Metall - Halbleiter System als Überlagerung von Raumladungs - und Bildkraftpotential (Schottky - Modell) beschrieben. Zur inneren Photoemission werden drei Modelle vorgestellt, mit denen die spektrale Abhängigkeit der inneren Quantenausbeute  $Y(h\nu)$  von wenigen Materialeigenschaften ausgehend, näherungsweise berechnet werden kann.

Die innere Photoemission wird in der Regel im „Fowler plot“ (s.u.) ausgewertet, um die Barrierenenergie  $E_B$ , der Heterostruktur zu bestimmen [Chi95], [Roc96]. Die Methode geht auf das Fowler Modell (1931) zurück, bei dem die Streuprozesse der heißen Ladungsträger im Metall vernachlässigt werden [Fow31]. Der Einfluß dieser Streuprozesse auf die innere Quantenausbeute wird sowohl in einer analytischen Näherung von Kane und Dalal (1971) berücksichtigt [Dal71], als auch mit Hilfe eines Monte - Carlo Programms, das den Weg eines angeregten Ladungsträgers simuliert. Die drei theoretischen Modelle werden in Kap. 6 zusammen mit den experimentellen Ergebnissen an Au/Si und CoSi/Si diskutiert.

### 2.1 Metall - Halbleiter Kontakt (Schottky-Barriere)

Der Potentialverlauf  $V_S$ , der sich in einer Metall - Halbleiter Heterostruktur ausbildet, wird nach dem Schottky - Modell als Überlagerung von Raumladungs  $V_R$  - und Bildkraftpotential  $V_B$  beschrieben [Sch40],[Sze81],[Rho88]. Damit sich beim Kontakt zwischen zwei Festkörpern ein gemeinsames Fermi-Niveaus  $E_F$  ausbildet, wandern Ladungen von einem Material ins andere und bauen ein elektrisches Feld im Bereich der Grenzfläche auf. Im Fall des Metall - Halbleiter Kontakts treten in der Regel Majoritätsladungsträger aus dem dotierten Halbleiter ins Metall über [Rho88]. Die fehlenden Ladungen hinterlassen im Halbleiter eine Zone, die an freien Ladungsträgern verarmt ist, wobei die geladenen Atomrümpfe der Dotieratome die entsprechende Gegenladung bilden. Die Weite der Raumladungszone  $w$  hängt hauptsächlich von der Dotierkonzentration  $N_d$  des Halbleiters ab [Sze81]. Im Metall ist die Ladungsschicht an der Grenzfläche, wegen der hohen Konzentration an Leitungselektronen, bereits nach wenigen Atomlagen abgeschirmt. Im Si hingegen beträgt sie, bei einer typischen

Dotierungskonzentration  $N_d = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ , etwa  $w = 270 \text{ nm}$  ( $E_B = 0.8 \text{ eV}$ ,  $T = 300 \text{ K}$ ) und kann bis in den Mikrometerbereich reichen ( $N_d < 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ ).

Mit  $\rho_q(x)$  ist das Raumladungspotential  $V_R(x)$  über die Poisson Gleichung verknüpft.

$$\frac{d^2 V_R(x)}{dx^2} = - \frac{\rho_q(x)}{\epsilon_0 \cdot \epsilon_S} \quad (2.1)$$

$\epsilon_S$  ist die statische Dielektrizitätskonstante des Halbleiters,  $\epsilon_0$  die elektrische Feldkonstante und  $x$  der Abstand zur Metallgrenzfläche. Die Ladungsdichte  $\rho_q$  kann innerhalb der Raumladungszone als konstant angenommen werden  $\rho_q = q \cdot N_d$  (Boltzmannnäherung).

Außerhalb, d.h. im Volumen (bulk), ist der Halbleiter neutral  $\rho_q = 0$ . Im Folgenden werden alle Energien und Potentiale auf das Fermi - Niveau  $E_F$  bzw.  $E_F/e$  bezogen. Als Randbedingung muß  $V_R$  außerhalb der Raumladungszone den Volumenwert der Bandkante annehmen

$|V_R(x > w)| = \xi$ .  $\xi$  ist die Potentialdifferenz zwischen Fermi - Niveau  $E_F/e$  und Leitungs  $\frac{E_C}{|q|}$  -

bzw. Valenzbandkante  $\frac{E_V}{|q|}$  bei n - bzw. p - Dotierung.  $\xi$  ist durch die Energielücke  $E_G$ , die

Dotierkonzentration  $N_d$ , die Probentemperatur  $T$  und die effektiven Zustandsdichten  $N_C$ ,  $N_V$  des Halbleiters bestimmt [Sze81]. Innerhalb der Raumladungszone ( $0 \leq x < w$ ) ist

$$q \cdot V_R(x, \epsilon_S, V_D, N_d, T, U_F) = |q| \cdot \left( \sqrt{V_D - \frac{k_B T}{|q|}} - U_F - \sqrt{\frac{|q| \cdot N_d}{2\epsilon_0 \cdot \epsilon_S}} \cdot x \right)^2 + k_B T + |q| \cdot \xi \quad (2.2)$$

$U_F$  ist die angelegte Spannung in Durchlaßrichtung. Die Boltzmannnäherung ist gültig, solange die Potentialdifferenz zur Bandkante im bulk größer als etwa  $\frac{2k_B T}{q}$  ist. Der Betrag von  $V_R$

steigt zur Metall - Halbleiter Grenzfläche quadratisch an. Die Potentialdifferenz zwischen bulk und Grenzfläche ist die Diffusionsspannung  $V_D$ . Ein Elektron bzw. Loch aus dem Metall „sieht“ somit an der Grenzfläche die statische Barrierenenergie

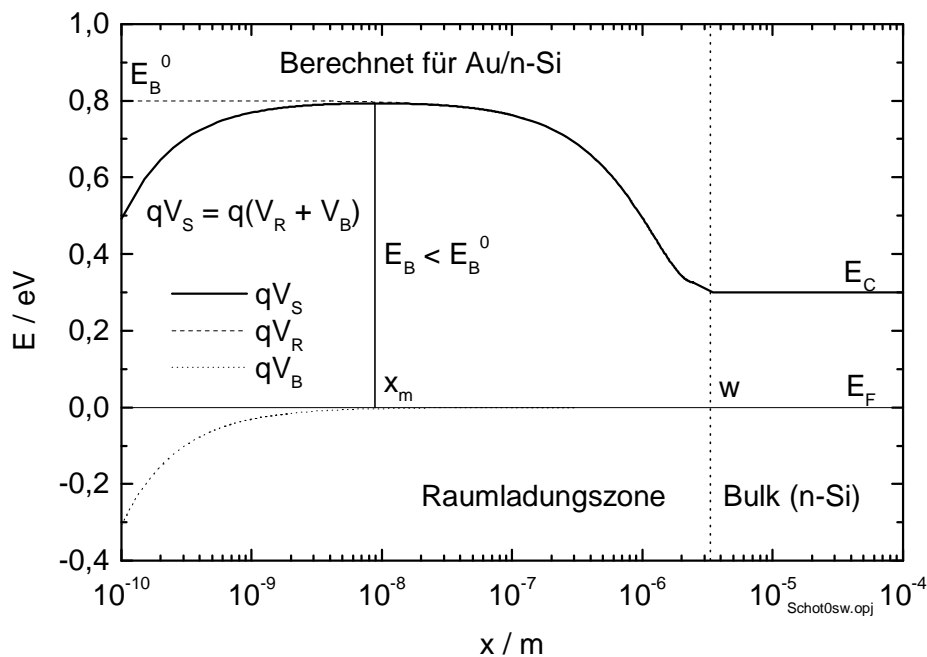
$$E_B^0 = |q| \cdot (V_D + \xi). \quad (2.3)$$

Wenn das Elektron in den Halbleiter eindringt, induziert es im Metall eine entsprechende Bildladung. Deshalb muß beim Ladungstransport zwischen Metall und Halbleiter neben dem Raumladungspotential  $V_R$  auch das Bildkraftpotential

$$V_B(x, \epsilon_S) = -\frac{q}{16\epsilon_0 \cdot \epsilon_S \cdot \pi \cdot x} \quad (2.4)$$

berücksichtigt werden. Das Gesamtpotential (Schottky - Potential)  $V_S$ , das beim Ladungstransfer wirksam wird, ergibt sich aus der Summe des Potentials der Raumladungszone  $V_R$  (Gl 2.2) und dem Potential der Bildkraft im Metall  $V_B$  (Gl 2.4).

$$V_S = V_R + V_B \quad (2.5)$$



**Abb. 2.1:** Potentielle Energie eines Elektrons im Halbleiter  $E = qV$  als Funktion des Abstands zur Metallgrenzfläche  $x$ , nach dem Schottky - Modell für Au/n-Si berechnet ( $E_B = 0.8$  eV,  $N_d = 10^{14}$  cm $^{-3}$ ,  $T = 300$  K,  $U = 0$  V), mit dem Schottky - Potential  $V_S$ , Raumladungspotential  $V_R$  und Bildkraftpotential  $V_B$ .  $x$  ist logarithmisch dargestellt, um den flachen Energieverlauf im Bereich des Barrierenmaximums bei  $x_m$  hervorzuheben.

In Abb.2.1 ist  $V_s$  gegen  $x$  für das System Au/n-Si graphisch dargestellt, mit  $T = 300$  K und  $N_d = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ . Die Diffusionsspannung  $V_D = 0.5$  V wurde aus der experimentell bestimmten Barrierenenergie  $E_B$  von etwa 0.8 eV abgeleitet.

Durch die Überlagerung von Raumladungs - und Bildladungspotential ergibt sich ein Barrierenmaximum  $E_B$ , das bei den angegebenen Parametern 7 mV niedriger ist, als die statische Barrierenenergie  $E_B^0$  an der Grenzfläche, und das  $x_m = 9.1$  nm tief im Halbleiter liegt. Für den Ladungstransfer vom Metall in den Halbleiter bedeutet dies, daß Ladungsträger, die bereits in den Halbleiter eingedrungen sind, erst dann durch das innere Feld erfaßt werden, wenn sie das Maximum des Schottky - Potentials überwunden haben, d.h. wenn  $x > x_m$  ist. Die Lage des Maximums  $x_m(N_d, U)$  kann sowohl durch die Dotierungskonzentration  $N_d$ , als auch durch eine angelegte Sperrspannung  $U$  beeinflusst werden.

Es gibt verschiedene Methoden zur Bestimmung der Barrierenenergie eines Metall-Halbleiter Kontakts. Bei der  $I(U)$  Messung wird die thermionische Emission genutzt, wobei die Stromdichte

$$J = \left( \frac{4\pi \cdot q \cdot m^* k_B^2}{h^3} \right) T^2 \cdot e^{\frac{-E_B}{k_B T}} \cdot e^{\frac{qU}{k_B T}} \quad (2.6)$$

exponentiell von  $E_B$  abhängt.  $m^*$  ist die effektive Masse der Ladungsträger im Halbleiter. Bei den rein elektrischen Meßmethoden,  $I/U$  - Kennlinie oder auch Kapazitätsmessung  $C(U)$  fließen zusätzliche elektronischen Eigenschaften der Probe (z.B. Grenzflächenzustände, Raumladungen im Si, Barriereninhomogenitäten, Rekombinationsmechanismen, Serien - und Parallelwiderstand), unter einer angelegten Spannung  $U$  als Störgrößen in die Bestimmung von  $E_B$  ein [Lah95],[Che93]. Bei der inneren Photoemission kann der Einfluß dieser Größen dagegen vernachlässigt werden, da die Barrierenenergie aus dem Einsatz des Photostroms  $I_{ph}(h\nu)$  als Funktion der Photonenenergie abgeleitet wird.

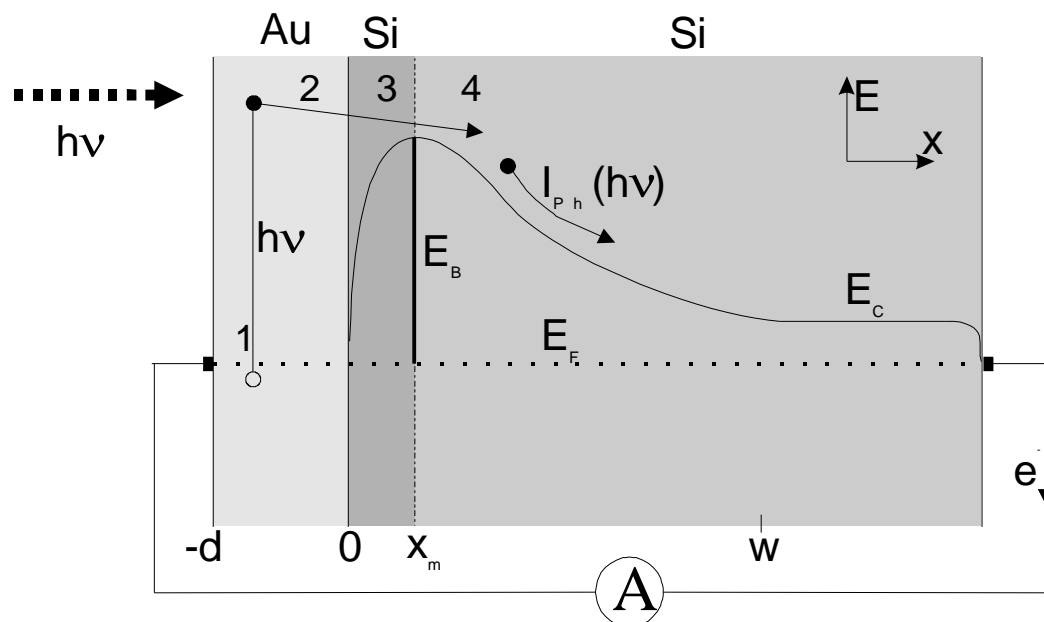
## 2.2 Innere Photoemission

Im Gegensatz zur äußeren Photoemission, bei der Ladungen aus einem Festkörper durch den Photoeffekt ins Vakuum emittiert werden, bezieht sich die innere Photoemission in einer Metall - Halbleiter Heterostruktur auf optisch angeregte Ladungen in der Metallschicht, die über die

trennende Energiebarriere in den Halbleiter gelangen. Der generierte Photostrom kann bei als Kurzschlußstrom  $I_{Ph}(U=0V)$  gemessen werden.

Im Folgenden wird ein theoretisches Modell vorgestellt, das von grundlegenden Materialeigenschaften ausgehend die quantitative Beschreibung der inneren Photoemission am Metall/Halbleiter System ermöglicht. Die innere Photoemission läßt sich in 4 Teilschritte zerlegen:

- 1) Absorption eines Photons in der Metallschicht
- 2) Transport des angeregten Ladungsträgers in der Metallschicht
- 3) Transport durch den Bildkraftbereich im Halbleiter und
- 4) quantenmechanische Transmission an der Schottky - Barriere (siehe Abb. 2.2).



**Abb. 2.2:** Schematische Darstellung der inneren Photoemission in einer Metall - Halbleiter Heterostruktur. Die Teilschritte 1 - 4 sind im Text erklärt.

Licht mit der Photonenenergie  $h\nu$  wird aus dem Vakuum auf die Probe eingestrahlt. Es kann entweder reflektiert, transmittiert oder absorbiert werden. Der absorbierte Teil des Lichts  $A$  kann experimentell bestimmt werden, indem Reflexions -  $R$  und Transmissionsvermögen  $Tr$  der Probe gemessen wird

$$A(h\nu) = 1 - R(h\nu) - Tr(h\nu), \quad (2.7)$$

und es läßt sich berechnen, wenn die optischen Konstanten der Probe bekannt sind. Eine weiterführende theoretische Behandlung der optischen Eigenschaften dünner Metallschichten wird in Kap. 4 und 6.1 gegeben.

Photonen, die in der Probe absorbiert werden, übertragen die Energie  $h\nu$  auf ein Elektron (1). Dies kann das Photon nur dann absorbieren, wenn es nach der Anregung einen freien Zustand besetzt. Für ein freies Elektronengas ist die Anregungswahrscheinlichkeit

$$W_A(E) = Z(E) \cdot f(E) \cdot M_{if} \cdot Z(E + h\nu) \cdot (1 - f(E + h\nu)), \quad (2.8 a)$$

mit der Fermi Funktion 
$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{k_B \cdot T}} + 1} \quad (2.8 b)$$

und der Zustandsdichte 
$$Z(E) = \frac{V}{2\pi^2} \cdot \left( \frac{2m^*}{\eta^2} \right)^{3/2} \cdot \sqrt{E}. \quad (2.8 c)$$

$M_{if}$  ist das Matrixelement für den Übergang zwischen Anfangs (i) - und Endzustand (f),  $V$  ist das Metallvolumen und  $m^*$  die effektive Masse. Bei Metallen sind die Zustände unterhalb der Fermi - Energie  $E_F$  vollständig besetzt und oberhalb unbesetzt ( $T=0$  Näherung). Deshalb stehen im Metall für alle Photonenenergien Elektronen aus dem Energiebereich zwischen  $E_F - h\nu$  und  $E_F$  für die Absorption zur Verfügung. Ein Elektron, das aus der Nähe der Fermikante angeregt wird, hat die maximale Energie  $E_F + h\nu$ . Entsprechend hinterläßt ein Elektron aus der Nähe von  $E_F - h\nu$  einen freien Zustand, der als angeregtes Loch im Metall behandelt werden kann. In Halbleitern können nur Photonen absorbiert werden, die eine höhere Energie haben, als die Energielücke  $E_G$ . **Der Photostrom bei Photonenenergien  $E_B < h\nu < E_G$  ist daher ausschließlich auf die innere Photoemission aus dem Metallfilm zurückzuführen.**

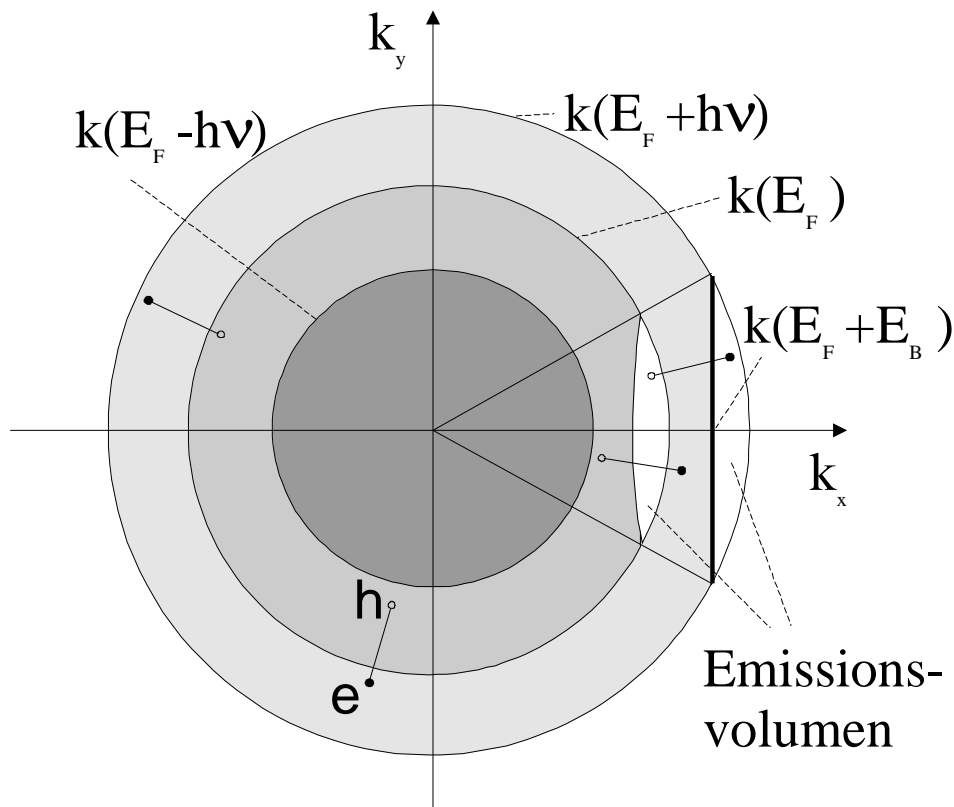
Wenn ein Ladungsträger nach der Anregung genügend Energie besitzt, um die Barriere überwinden zu können ( $E_A > E_B$ ), wirken sich Streuprozesse in der Metallschicht (2) und im Bildkraftbereich im Halbleiter (3) auf die Emissionswahrscheinlichkeit aus. Zusätzlich hat die quantenmechanische Reflexion/Transmission an der Schottky - Barriere einen Einfluß auf die innere Quantenausbeute  $Y$ . Diese Prozesse werden in den folgenden Abschnitten 2.2.1-3 genauer behandelt.

### 2.2.1 Fowler Modell

Bei bekanntem Absorptionsvermögen  $A$  der Metallschicht, kann die innere photoelektrische Quantenausbeute  $Y_{\text{exp}}(h\nu)$  aus dem gemessenen Kurzschlußstrom  $I_{\text{ph}}(h\nu, U=0V)$  und dem eingestrahlten Photonenfluß  $\Phi_{\text{ph}}(h\nu)$  (Zahl der Photonen / s) experimentell bestimmt werden.

$$Y_{\text{exp}}(h\nu) = \frac{I_{\text{ph}}(h\nu)_{U=0V}}{e \cdot A(h\nu) \cdot \Phi_{\text{ph}}(h\nu)} \quad (2.9)$$

Ein theoretischer Ansatz zur Beschreibung der inneren Quantenausbeute geht auf Fowler zurück [Fow31]. Er findet auch derzeit noch Verwendung bei der Bestimmung von Barrierenenergien  $E_B$  im sogenannten „Fowler plot“. Das Fowler Modell behandelt die innere Photoemission analog zur äußeren Photoemission eines freien Elektronengases ins Vakuum, wobei anstelle der Austrittsarbeit  $E_0$  des Metalls die Höhe der Schottky - Barriere  $E_B$  des Metall/Halbleiter Systems gesetzt wird. Streuprozesse im Metall werden vernachlässigt.



**Abb. 2.2:** Impulsraum ( $k$ ) eines freien Elektronengases bei optischer Anregung mit der Photonenenergie  $h\nu$ .

Beim freien Elektronengas sind die Zustände im Impulsraum  $\rho(E) = \eta k(E)$  im Inneren der Fermikugel  $k(E_F)$  mit Elektronen besetzt (siehe Abb. 2.2). Es werden nur Elektronen aus der Fermi - Kugel optisch angeregt, die sich in Energiezuständen  $E_F - h\nu < E_0 < E_F$  befinden (mittelgraue Kugelschale in Abb. 2.2). Die Impulse der heißen Ladungsträger  $\eta k(E_F) \leq \eta k \leq \eta k(E_F + h\nu)$  (hellgraue Kugelschale) sind bezüglich der Richtung gleichverteilt. Der Betrag des Impulses hängt davon ab, in welcher energetischen Tiefe des Fermi - Sees sich das Elektron unmittelbar vor der Absorption des Photons der Energie  $h\nu$  befindet. Unter der Annahme, daß sich das Potential beim Übergang in den Halbleiter nur senkrecht zur Grenzfläche ändert, bleibt die Parallelkomponente des Impulses der angeregten Ladungsträger bei der Emission erhalten. Demnach entscheidet allein die Senkrechtkomponente des Impulses  $p_\perp$ , ob die Barriere überwunden wird. Dies geschieht für

$$p_\perp \geq \sqrt{2m^*(E_F + E_B)}. \quad (2.10)$$

$m^*$  ist dabei die effektive Masse der Elektronen bzw. Löcher im Metall, d.h.  $\rho_{k_x} \geq \rho_{k_x}(E_F + E_B)$ . Das Emissionsvolumen (weiße Kugelkappe in Abb. 2.2), in dem sich diejenigen Elektronen befinden, die unmittelbar nach der optischen Anregung in den Halbleiter emittiert werden können, ist im Fowler Modell durch die Ungleichung (2.10) bestimmt. Der entsprechende homogen besetzte Raum im Inneren der Fermi Kugel, in dem sich die emissionsfähigen Elektronen vor der Anregung befanden, ist in Abb. 2.2 ebenfalls weiß dargestellt.

Als Näherungsausdruck für die innere Quantenausbeute  $Y_F$  berechnet Fowler das Verhältnis des Volumens des Emissionsraums in der Fermi Kugel zum Gesamtvolumen der Impulsschale anregbarer Ladungsträger (siehe mittelgrauer Bereich in Abb. 2.2).



$$Y_F(h\nu, E_B, E_F, T) = \frac{k_B T}{4} \cdot \frac{\int_{E_F + E_B - h\nu}^{\infty} \frac{\ln(1 + e^{\frac{E_F - E}{k_B T}})}{\sqrt{E}} dE}{\int_{E_F - h\nu}^{\infty} \frac{\sqrt{E} dE}{1 + e^{\frac{E - E_F}{k_B T}}}} \quad [\text{Cha80}] \quad (2.11)$$

Gl. (2.11) läßt sich nach Mooney et. al. [Moo85] für  $h\nu > E_B + 3k_B T$  vereinfachen zu dem Ausdruck

$$Y_{Fp} = C_S \cdot \frac{1}{h\nu} \cdot (h\nu - E_{FB})^2. \quad (2.12)$$

$C_S$  ist der Schottkykoeffizient. Für ein freies Elektronengas ist  $C_S = \frac{1}{8E_F}$ . Mit Hilfe dieses

Audrucks werden Experimente zur inneren Photoemission in der Regel ausgewertet. Dazu wird  $\sqrt{Y \cdot h\nu}$  gegen  $h\nu$  (Fowler plot) dargestellt, sodaß sich Eine Näherung für die Barrierenenergie  $E_B$  aus dem Achsenabschnitt  $E_{FB}$  (Fowlerbarriere) ergibt. Die Energieabhängigkeit der gemessenen inneren Quantenausbeute wird durch Gl. (2.12) in der Regel gut wiedergegeben. Wenn es lediglich auf die Bestimmung der Barrierenenergie ankommt, ist  $C_S$  nur ein Proportionalitätsfaktor, der nicht quantitativ bekannt sein muß. Allerdings fließen in  $C_S$  über die Besetzungsfunktion hinaus sämtliche Materialeigenschaften ein, die den Transport der heißen Ladungsträger über die Schottky - Barriere beeinflussen. Dies sind insbesondere die Streuprozesse im Metall und im Bildkraftbereich des Halbleiters.

Die Auftrennung beider Einflüsse ist möglich: Im Bildkraftbereich im Halbleiter verringert sich die innere Quantenausbeute  $Y$ , bzw. der Schottkykoeffizient  $C_S$  exponentiell mit dem Abstand des Barrierenmaximums  $x_m$  von der metallurgischen Grenzfläche [Moo89]. Dies wird auf Stöße mit optischen Phononen im Si zurückgeführt, die die emissionsfähigen Ladungsträger wieder aus dem Emissionsvolumen herausstreuen [Lee91]. Der Schottkykoeffizient  $C_S(x_m)$  kann dadurch in zwei Faktoren zerlegt werden (Gl. 2.13), einen der die Dämpfung im Bildkraftbereich im Halbleiter beschreibt, und einen der die Emissionscharakteristik des Metallfilms beinhaltet.

$$C_S(x_m) = C_0 \cdot e^{-\frac{x_m}{l_s}} \quad (2.13)$$

Die effektive Dämpfungslänge im Halbleiter  $l_s$  kann über die Vorspannungsabhängigkeit der Lage des Barrierenmaximums  $x_m(U)$  experimentell bestimmt werden. Der Emissionskoeffizient  $C_0$  wird nicht mehr vom Halbleiter beeinflusst und hängt nur noch von dem Transport heißer Ladungsträger im Metall ab.  $C_S$  gibt die Besetzungsdichte des Emissionsvolumens im Impulsraum (siehe Abb. 2.2) am Ort des Barrierenmaximums  $x_m$  im Halbleiter an und  $C_0$  die Besetzungsdichte an der Metal - Halbleiter Grenzfläche. Der Emissionskoeffizient  $C_0$  enthält deshalb die volle Information über die Wirkung von Streuprozessen heißer Ladungsträger in der Metallschicht.

### 2.2.2 Streuprozesse im Metallfilm

Die mittlere freie Weglänge  $l$  für einen Streuprozess heißer Ladungsträger im Metallfilm ist mit der entsprechenden Relaxationszeit  $\tau$  über die Fermigeschwindigkeit der Träger  $v_F$  verknüpft.

$$l = \tau \cdot v_F \quad (2.14)$$

In der Metallschicht werden 3 Streuprozesse unterschieden: Stöße mit Phononen, Elektronen und neutralen Störstellen. Hinzu kommen die Reflexion an der Metalloberfläche, an der Schottky - Barriere und gegebenenfalls an der Metal - Halbleiter Grenzfläche.

An der Metall - Vakuum Grenzfläche wird das angeregte Elektron in die Metallschicht zurückgestreut, wenn die Energie kleiner als die Austrittsarbeit  $E_\phi$  des Metalls ist. Dieser Streuprozess wird als elastisch (ohne Energieverlust) und diffus (beliebige Streurichtung zurück in den Halbraum) angenommen. An der Schottky - Barriere wird das Elektron ebenfalls wieder elastisch und diffus zurück gestreut, wenn die Impulskomponente senkrecht zur Barriere zu gering ist, um diese zu überwinden (siehe Ungleichung 2.10).

Unter welchen Bedingungen heiße Ladungsträger auch an der metallurgischen Grenze Metall - Halbleiter (elastisch und isotrop) streuen ist noch ungeklärt. Als neutrale Störstellen kommen Fremdatome, Gitterfehler und Korngrenzen in Frage. Die Störstellenstreuung wird elastisch und isotrop angenommen, mit einer charakteristischen mittleren freien Weglänge  $l$  [Ans64].

$$l_{St} = \frac{e^2 \cdot v_F \cdot m^{*2}}{20 \cdot \eta^3 \cdot \epsilon_0 \cdot \epsilon \cdot n_{St}}$$

(2.15)

Dabei ist  $n_{St}$  die Konzentration der neutralen Störstellen im Metall,  $\epsilon$  die Dielektrizitätskonstante und  $m^*$  die effektive Masse des Elektrons.

Die Elektron - Elektron Streuung (e-e) erfolgt inelastisch (siehe Abb. 2.3). Bei dem Stoß überträgt das angeregte Elektron im Mittel die Hälfte der Anregungsenergie auf ein thermalisiertes Elektron. Wenn die Anregungsenergie kleiner war, als die doppelte Barrierenenergie  $h\nu < 2 E_B$ , hat keiner der beiden Stoßpartner mehr genügend Energie, um die Schottky - Barriere zu überwinden. Dieser Prozeß ist ein Verlustmechanismus für die innere Photoemission. Die mittlere freie Weglänge für Elektron - Elektron Stöße  $l_e$  hängt für Metalle nach Quinn [Qui62] nur von der Elektronenkonzentration und der momentanen Energie  $E$  des heißen Elektrons ab. Gl. (2.16) ist bis auf einen Faktor 2 die Quinn'sche Formel, die an gemessenen mittleren freien Weglängen von Au [Sze64] skaliert wurde.

$$l_e(E) = \frac{50 \cdot \sqrt{\frac{b \cdot r_s}{\pi}} \cdot a_0 \cdot E_F \cdot \left( \frac{3 \cdot E_F}{E^2} + \frac{2}{E} \right)}{\arctan \sqrt{\frac{\pi}{b \cdot r_s}} + \frac{\sqrt{\frac{b \cdot r_s}{\pi}}}{1 + \frac{b \cdot r_s}{\pi}}}; \quad b = \left( \frac{4}{9} \pi \right)^{\frac{1}{3}}. \quad (2.16)$$

$r_s$  ist der Radius einer Kugel mit dem Volumen der Elementarzelle des Metalls pro Anzahl der Leitungselektronen in der Elementarzelle.  $r_s$  wird in Einheiten des Bohr'schen Atomradius  $a_0$  angegeben.

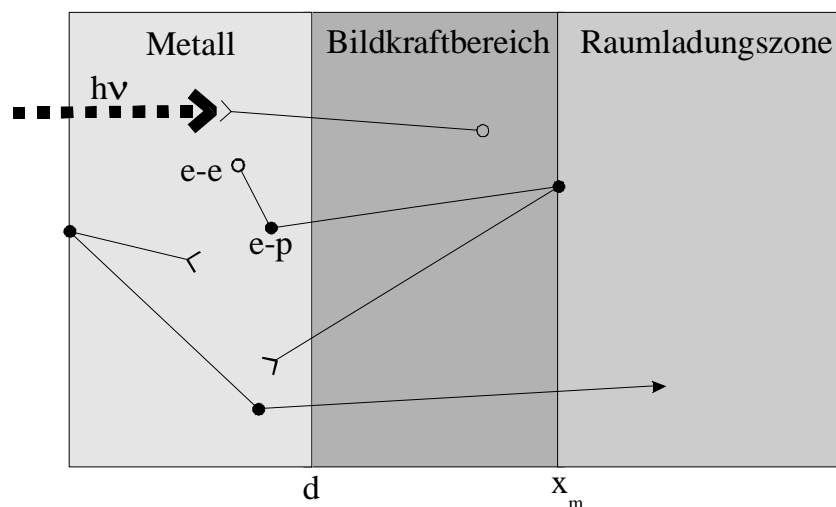
Bei Stößen zwischen heißen Elektronen und akustischen Phononen (e-p) spricht man von quasielastischer isotroper Streuung. Da die Impulse von Elektronen und akustischen Phononen vergleichbar sind  $|k_{El}| \approx |k_{Pn}|$ , kann sich die Impulsrichtung des Elektrons beim Stoß beliebig ändern (isotrop). Die Anregungsenergie der Elektronen ist jedoch viel größer als die Energie der Phononen  $E_{El} \gg h\nu_{Pn}$ , so daß die Energieänderung der Elektronen bei Phononenabsorption oder - emission gering ist. Im Mittel werden mehr Phononen emittiert als

absorbiert, so daß die Elektron - Phonon Streuung zunächst als ein weiterer Verlustmechanismus für die innere Photoemission erscheint. Das Elektron gibt seine Überschußenergie allerdings in einer Vielzahl von Streuprozessen an das Gitter ab. Die mittlere freie Weglänge für Elektron - Phonon Streuung ist

$$l_p(T) = \frac{\pi \cdot \eta^4 \cdot \gamma \cdot u_l^2}{D_{ac}^2 \cdot m^{*2} \cdot k_B \cdot T} \quad (2.17)$$

[Jac83].  $D_{ac}$  ist die Deformationspotentialkonstante für die Wechselwirkung zwischen Elektronen und akustischen Phononen,  $\gamma$  die Dichte des Metalls und  $u_l$  die longitudinale Schallgeschwindigkeit. Die  $1/T$  - Abhängigkeit von  $l_p$  folgt aus der Bose - Statistik für Phononen.

Ausgehend vom klassischen Fowler Modell, haben Kane [Kan66] und Dalal [Dal71] ein Modell entwickelt, das auch den Einfluß der Ladungsstreuung in einer Metallschicht der Dicke  $d$  näherungsweise berücksichtigt.



**Abb. 2.3** : Schematische Darstellung der Streuprozesse heißer Ladungsträger im Metallfilm und im Bildkraftbereich des Halbleiters. Quasielastische Elektron - Phonon Stöße • (e-p) ändern die Bewegungsrichtung der Träger, inelastische Elektron - Elektron Streuung o (e-e) führen zur Ausscheidung aus dem Emissionsprozeß.

Es wird dabei zwischen inelastischen Elektron - Elektron (e-e) und elastischen Stößen unterschieden, d.h. der Energieverlust bei der Elektron - Phonon (e-p) Streuung wird

vernachlässigt. Dabei wird die Summe von  $n = 0, 1, \dots, \infty$  der Wahrscheinlichkeiten  $p_n$  ausgerechnet, daß ein heißer Ladungsträger nach  $n$  elastischen Stößen über die Barriere gelangt. Auf dem Weg zwischen zwei elastischen Stößen kann das Elektron an der Oberfläche und an der Barriere diffus reflektieren. An der Barriere geschieht die Emission in den Halbleiter mit der Wahrscheinlichkeit, die der Quantenausbeute nach Fowler  $Y_F$  Gl. (2.11) entspricht. Mit wenigen Umformungen ergibt sich aus dem Kane - Dalal Modell der analytische Ausdruck für die innere Quantenausbeute  $Y_{KD}$  [Sch96]

$$Y_{KD}(h\nu, E_B, E_F, l_e, l_p, T, d) = \frac{2c \cdot Y_F \cdot e^{-f \cdot d}}{c \cdot Y_F (1 + e^{-2f \cdot d}) + f (1 - Y_F)(1 - e^{-2f \cdot d})} \quad (2.18)$$

mit

$$f = \sqrt{c^2 - ac}, \quad c = a + b, \quad a = l_p^{-1}, \quad b = l_e^{-1}.$$

Die mittleren freien Weglängen  $l_e$  und  $l_p$  sind durch Gl. (2.16) bzw. (2.17) gegeben. Die optische Anregung wird als homogen im Volumen des Metallfilms angenommen. Die innere Quantenausbeute  $Y_{KD}(d)$  Gl. (2.18) hängt nach Kane - Dalal, unter Berücksichtigung elastischer und inelastischer Streuprozesse im Film, empfindlich von der Schichtdicke  $d$  ab, wenn  $d < l_e$  ist. Und zwar steigt  $Y_{KD}(d)$ , und dementsprechend auch der Emissions - Koeffizient  $C_0(d)$  (siehe Gl. 2.12 und 2.13), dann mit abnehmender Schichtdicke  $d$  stärker als exponentiell an (vgl. Abb. 6.1).

Anschaulich läßt sich die verstärkte Emission durch elastische Streuprozesse so verstehen, daß heiße Ladungsträger dann die Chance haben, öfter als nur einmal an die Barriere zu kommen, und weil das unterbesetzte Emissionsvolumen im Impulsraum (siehe weißer Bereich in Abb. 2.2) durch isotrope bzw. diffuse Streuung nachgefüllt wird (es werden mehr Ladungsträger pro Zeiteinheit in die Emissionskappe hinein als herausgestreut). Die starke Abhängigkeit der inneren Quantenausbeute von der Schichtdicke  $Y_{KD}(d)$  nach dem Kane - Dalal Modell, stellt einen klaren Unterschied zum Ergebnis des Fowler Ansatzes dar, wonach  $Y_F$  nicht von  $d$  abhängen sollte (siehe Gl. 2.11). Die experimentelle Untersuchung der Schichtdickenabhängigkeit der inneren Quantenausbeute  $Y_{exp}(d)$  eines Metall/Halbleiter Systems kann somit Aufschluß über den Einfluß der Streuprozesse heißer Ladungsträger im Metallfilm liefern.

### 2.2.3 Monte - Carlo - Methode

Eine andere Möglichkeit zur Berechnung der inneren Quantenausbeute, als die analytische nach Kane - Dalal, bietet die Monte - Carlo - Methode [Sob91]. Hierbei wird der Weg eines einzelnen angeregten Ladungsträgers simuliert und verfolgt, bis er entweder die Barriere überwindet also emittiert wird, oder zuviel Energie durch quasielastische oder inelastische Stöße verliert, um noch über die Barriere zu kommen. Die verschiedenen Streuprozesse, denen der Ladungsträger auf diesem Weg unterliegt, werden durch die entsprechenden physikalisch bekannten Wahrscheinlichkeitsverteilungen berücksichtigt, die einer Zufallszahl zwischen 0 und 1 als Gewichtungsfaktoren aufgeprägt werden [Sob91]. Die Zufallszahlen werden mit einem getesteten Zufallszahlengenerator [Pre92] erzeugt. Dies sind Zahlen zwischen 0 und 1, deren Abfolge nicht periodisch ist und möglichst keine Häufung in einem Teilbereich des Intervalls zeigen.

Ein solcher Durchlauf, der den Weg eines einzelnen heißen Ladungsträgers simuliert, wird  $N_0$  mal unabhängig voneinander wiederholt. Die innere Quantenausbeute  $Y$  ist dann das Verhältnis der Durchläufe die mit Emission endeten  $N_E$  zur Gesamtzahl der Durchläufe  $N_0$ .

$$Y = \frac{N_E}{N_0}$$

(2.19)

Die Häufung voneinander unabhängiger (statistischer) Einzelereignisse ist gaußverteilt um den Erwartungswert. Die Abweichung des Mittelwerts aus  $N_0$  Durchläufen vom Erwartungswert ist dann  $Y(N_0) - \langle Y \rangle \propto N_0^{-1/2}$ . Bezüglich der Statistik läßt sich somit die Genauigkeit des Monte - Carlo Ergebnisses über der Anzahl der Durchläufe  $N_0$  beliebig vergrößern. Der Vorteil der Monte - Carlo - Methode ist, daß die verschiedenen Prozesse voneinander entkoppelt sind. Im Vergleich zum analytischen Ansatz, wo man relativ schnell auf Näherungen angewiesen ist, können mit einem Monte - Carlo Programm auch komplexere Zusammenhänge berücksichtigt werden.

Ein solches Monte - Carlo Programm zur Simulation der inneren Quantenausbeute  $Y(h\nu)$  wurde in Zusammenarbeit mit Dr. Brauer entwickelt. Über den Kane Dalal Ansatz hinaus wird

im Monte - Carlo Programm auch der Energieübertrag  $\eta \cdot \omega_q$  bei einem quasielastischen Stoß mit einem Phonon der Wellenzahl  $q$  und der entsprechenden Frequenz  $\omega_q$  berücksichtigt. Für Temperaturen  $T$  höher als die Debye - Temperatur ( $T > \theta_D$ ) wird angenommen, daß der heiße Ladungsträger mit einem Phonon der Energie  $\eta \cdot \omega_q = k_B \theta_D$  in Wechselwirkung tritt, während bei  $T < \theta_D$  nur die Energie  $k_B T$  bei dem Stoß mit einem Phonon übertragen wird. Das Verhältnis der Absorptionsrate  $W^+$  zur gesamten Elektron - Phonon Streurrate  $W^+ + W^-$  (Absorptions - und Emissionsrate  $W$  wird nach der Bose - Statistik berechnet

$$\frac{W^+}{W^+ + W^-} = \frac{N_q}{N_q + (N_q + 1)} = \left( e^{\frac{\eta \omega_q}{k_B T}} + 1 \right)^{-1} \quad (2.20)$$

wobei  $N_q$  die Boseverteilungsfunktion ist.

Die quantenmechanische Reflexion an der Schottky - Barriere für Elektronenenergien oberhalb der Barrierenenergie  $E > E_B$  wird ebenfalls in dem Monte Carlo Programm berücksichtigt. Die Schottky - Barriere (Gl 2.5) wird durch den folgenden Energieverlauf

$$E(x) = \frac{E_B}{1 + e^{-a \cdot x}} \quad (2.21)$$

angenähert, wobei  $x$  der Abstand zur metallurgischen Grenzfläche ist und  $a$  den Parameter für die Steilheit der Barriere darstellt. Die Schottky - Barriere verläuft in einem weiten Bereich (etwa  $1 \text{ nm} < x < 100 \text{ nm}$ ) um das Barrierenmaximum  $x_m \approx 10 \text{ nm}$  sehr flach (vgl. Abb 2.1). Dadurch wird einerseits die Tunnelwahrscheinlichkeit für Ladungsträger mit Energien  $E < E_B$  vernachlässigbar, und andererseits stellt der asymptotische Energieverlauf  $E(x \rightarrow \infty) \rightarrow E_B$  in Gl (2.21) noch eine relativ gute Näherung dar. Die quantenmechanische Transmissionswahrscheinlichkeit  $P_{QM}$  für Ladungsträger mit  $E > E_B$  ergibt für  $V(x)$  nach der Schrödinger Gleichung den analytischen Ausdruck

$$P_{QM} = 1 - \left( \frac{\sinh \left[ \frac{\pi}{a} \cdot (m_2^* k_1 - m_1^* \cdot k_2) \right]}{\sinh \left[ \frac{\pi}{a} \cdot (m_2^* \cdot k_1 + m_1^* \cdot k_2) \right]} \right)^2 \quad (2.22)$$

mit

$$k_1 = \frac{\sqrt{2m_1^* \cdot E \cdot \cos^2 \theta}}{\eta} \quad \text{und} \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m_2^* (E \cdot \cos^2 \theta - E_B)}}{\eta}$$

[Bra97].  $m_1^*$  und  $m_2^*$  sind die effektiven Massen im Metall bzw. im Halbleiter, und  $\theta$  ist der Winkel unter dem der heiße Ladungsträger auf die Barriere trifft, bezogen auf das Einfallslot. Die Streuung an Korngrenzen in polykristallinen Filmen wird dadurch berücksichtigt, daß der Ladungsträger, im Falle daß sein Weg durch eine Korngrenze führt, an der Korngrenze elastisch und isotrop streut, wie an einer neutralen Störstelle. Ebenso wird gegebenenfalls auch die Streuung an der Grenzfläche zwischen Metall und Halbleiter behandelt. Demnach wird ein Ladungsträger, der an der Schottky - Barriere diffus reflektiert wurde, zu 50 % Wahrscheinlichkeit gleich wieder an der Grenzfläche in Richtung Barriere zurückgestreut. Die Dämpfung im Bildkraftbereich muß in dem Modell nicht mehr berücksichtigt werden, weil sie experimentell bestimmt werden kann und die Emissionskoeffizienten  $C_0$  miteinander verglichen werden.

Der Einfluß der verschiedenen Streuprozesse kann mit dem Monte - Carlo Programm durch Variation der entsprechenden Parameter (mittlere freie Weglängen, Schichtdicke) im Einzelnen untersucht werden. Ähnlich wie bei Kane - Dalal Modell, ergibt auch die Monte - Carlo Rechnung eine starke Erhöhung der inneren Quantenausbeute  $Y(d)$  mit abnehmender Schichtdicke  $d$ .

Wenn  $d$  kleiner wird als die mittlere freie Weglänge für Elektron - Elektron Stöße  $l_e$ , sind Vielfachreflexionen der Elektronen zwischen den Grenzflächen möglich. Je öfter ein angeregtes Elektron an der Metall - Halbleiter Grenzfläche streut, desto größer ist die Emissionswahrscheinlichkeit. Stöße mit Störstellen und Phononen erhöhen die Quantenausbeute zusätzlich, wenn die Schichten dünner werden als die entsprechenden mittleren freien Weglängen  $d \leq l_{st}$  bzw.  $l_p$ . Hier kommt zum Tragen, daß Elektronen die sich parallel zu den Grenzflächen bewegen, durch einen elastischen oder quasielastischen Stoß zu einer der Grenzflächen hin abgelenkt werden können, bevor sie durch einen inelastischen Elektron - Elektron Stoß ihre Anregungsenergie verlieren. Wird die Schichtdicke hingegen größer als  $l_{st}$  bzw.  $l_p$ , werden zunehmend mehr Elektronen gestreut, die sich in Richtung auf eine Grenzfläche zubewegen. Die Quantenausbeute nimmt dann wieder ab, weil der Weg, den



ein Elektron bis zur Metall - Halbleitergrenzfläche zurücklegen muß, länger wird und die Wahrscheinlichkeit für einen energieverzehrenden Elektron - Elektron Stoß entsprechend steigt.