

一个可靠和准确的光电产额谱模型及应用

刘昶时

**A reliable and accurate model of photoelectron yield spectrum and its applications**

Liu Chang-Shi

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 70, 103301 (2021) DOI: 10.7498/aps.70.20201729

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201729>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

---

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

AlGaIn/GaN高电子迁移率器件外部边缘电容的物理模型

The physics-based model of AlGaIn/GaN high electron mobility transistor outer fringing capacitances

物理学报. 2020, 69(7): 077302 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191931>

含突发E层的电离层模型建立及其在测高中的应用

Establishment of ionospheric model containing sporadic E and its applications in target height measurement

物理学报. 2018, 67(7): 079401 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172575>

高频激光脉宽对原子光电子发射谱的影响

Pulse duration effect on photoelectron spectrum of atom irradiated by strong high frequency laser

物理学报. 2018, 67(7): 073202 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172440>

沉积态铀薄膜表面氧化的X射线光电子能谱

Surface oxidation of as-deposit uranium film characterized by X-ray photoelectron spectroscopy

物理学报. 2018, 67(2): 027301 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172055>

超强激光与泡沫微结构靶相互作用提高强流电子束产额模拟研究

Enhancement of high-energy electron yield by interaction of ultra-intense laser pulses with micro-structured foam target

物理学报. 2019, 68(9): 094101 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20182291>

飞秒时间分辨质谱和光电子影像对分子激发态动力学的研究

Excited state dynamics of molecules studied with femtosecond time-resolved mass spectrometry and photoelectron imaging

物理学报. 2018, 67(22): 227802 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20181334>

## 一个可靠和准确的光电产额谱模型及应用\*

刘昶时†

(嘉兴学院信息科学与工程学院, 嘉兴 314001)

(2020年10月18日收到; 2020年12月22日收到修改稿)

光电产额谱的实验和理论研究对所有涉及光电的材料和器件都很重要, 其中能够准确地从入射光子能量计算光电产额对最大限度地从光电产额谱获取光电材料和器件的电性能的微观信息至关重要. 本文在建立起光电产额谱满足的微分方程结合光电产额谱的特有实验结果之后找到了这个满足光电产额谱的特有实验结果下微分方程的解. 通过对实验数据进行最小二乘法非线性拟合既验证了这种方法获得的光电产额谱模型的正确性, 也得到了每一条光电产额谱的具体数学表达. 应用此模型不仅能尽可能精确可靠地计算出两种电性能略有不同的物质相互接触形成结的势垒高度, 而且由这个光电产额谱模型能够得到在结中的电子有效占有态的密度能级分布.

**关键词:** 光电产额谱, 光子能量, 模型, 结势垒高度

**PACS:** 33.60.+q, 92.60.Aa, 33.15.Hp

**DOI:** 10.7498/aps.70.20201729

## 1 引言

经过十几年的不断努力和探索, 1887年赫兹(Hertz)<sup>[1]</sup>终于发现了麦克斯韦电磁理论预言的电磁波, 同时他还偶然发现了光电效应(photoelectric effect)现象. 1905年, 在充分理解足够的光电效应实验结果的基础上, 爱因斯坦(Einstein)<sup>[2]</sup>创见性地提出了光子的概念, 通过电子一次性地吸收具有能量为 $h\nu$ 的光子, 从而出现实验所观察到的光电流. 爱因斯坦著名的光电效应方程从数学上表达了这个思想, 这样既定性又定量地回答了为什么有截止电压, 同时定性和定量给出了临界(红限)频率 $\nu_0$ 的来源并因此获得诺贝尔奖. 使得物理学界终于从经典物理理论不能解释光电效应实验规律的困境中解脱出来. 密立根(Millikan)<sup>[3]</sup>在实验验证爱因斯坦的光电效应方程时, 由不同频率的光照射在给定阴极材料上产生的光电流随阴、阳极

间电压变化的电流-电压即  $I-V$  曲线找到截止电压. 从截止电压同入射光频率的关系得到了临界(红限)频率, 即逸出功和普朗克常量. 当然, 密立根也由此获得诺贝尔奖. 爱因斯坦光电效应方程和密立根光电流-电压关系成为常用的测量金属逸出功和普朗克常量的方法. 不过, 正确地从光电流-电压找到截止电压并不简单. 在量子力学中自然地产生了光电产额(发射电子数同入射光子数之比,  $Y$ )的提法, 而这个光电产额是随着入射光能量变化的, 即光电产额谱. 在逸出功处光电产额为零. 这样, 光电产额谱又成为测量金属逸出功的一种方法. 福勒(Fowler)<sup>[4]</sup>从费米-狄拉克统计出发建立了一个光电产额谱的近似公式(福勒级数). 于是, 应用光电产额谱测量了许多金属逸出功<sup>[5]</sup>. 在元素周期表中许多金属逸出功是由光电效应测量的<sup>[6]</sup>. 两种电性能略有不同的物质相互接触就形成了结, 光与结相互作用可以产生一种能量转移的现象, 即光照射到结上, 引起结的电性质发生变化, 也就是光能量

\* 国家自然科学基金(批准号: 61705091)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: [leswl@zjxu.edu.cn](mailto:leswl@zjxu.edu.cn)

转换成电能. 这类在结光致电变的现象被人们称为内光电效应: 内光电效应是光激发产生的载流子(自由电子或空穴)仍在物质内部运动产生光生伏特 (photovoltaic effect). 产生光伏现象最常用的是 n 型和 p 型半导体形成的结, 贝尔 (Bell) 实验室研究人员 Chapin 等<sup>[7]</sup>报道的 4.5% 效率的单晶硅太阳能电池的发现开启了太阳能电池应用之路. 光电产额谱是每一个新研制的太阳能电池必测项目. 固相接触有欧姆接触 (Ohmic contact) 和肖特基 (Schottky) 接触之分, 当 p 型半导体的禁带宽度 ( $E_g$ ) 同其电子亲和势能 ( $\chi$ ) 之和大于金属的逸出功 ( $W$ ) 时, 就是肖特基接触 (结). 而金属的逸出功大于 p 型半导体的禁带宽度同其电子亲和势能之和时, 则为欧姆接触 (结)<sup>[8]</sup>. 内光电效应提供了绝大多数光电器件及系统的基本原理. 由于结是通过金属、半导体、绝缘体中任意两个组成的界面系统, 对此界面而言光电产额谱起到重要的作用. 用光电产额谱能够对结的电结构进行分析<sup>[9]</sup>, 用光电产额谱可以测量结中的狄拉克缺陷及费米能级<sup>[10]</sup>, 应用光电产额谱能研究结中的能带偏移<sup>[11]</sup>, 从光电产额谱能够获取结中的缺陷密度在能级的分布<sup>[12]</sup>, 光电产额谱还能用来探索价带剖面<sup>[13]</sup>. 不同物质形成的结有界面, 由于界面的存在就有了势垒, 因为光电产额在势垒高度处是零, 故确定这个势垒高度的常用方法是光电产额谱<sup>[14,15]</sup>. 由于有了能够精确刻度入射单色光能量和光强 (单位面积上的入射光功率) 的激光和准确测量光电流密度 (单位面积上的电流强度) 的仪器, 现在获得光电产额谱已经相当容易. 可惜在国内刊物上除了太阳能电池很少能看到光电产额谱方面的报道.

由上述可见, 精确地定量描述入射光的能量和光电产额对可靠地使用光电产额谱非常重要. 到目前为止, 所有发表的文献都认可入射光的能量  $h\nu$  和光电产额 ( $Y$ ) 的定量关系是  $Y$  同  $(h\nu - \varphi)^n$  成正比<sup>[14-19]</sup>, 这里  $\varphi$  是结的势垒高度, 而  $n$  为一个正整数. 对于金属-绝缘体异质结,  $n$  规定为 2; 而对于绝缘体-半导体异质结,  $n$  是 3. 由此以光的能量  $h\nu$  为横轴,  $Y^{1/2}$  或者  $Y^{1/3}$  为因变量, 认为  $Y^{1/2}$  或者  $Y^{1/3}$  随光能量  $h\nu$  是直线变化的, 而这条直线在能量  $h\nu$  轴上的交点就是结的势垒高度. 但是, 只有少数的实验结果表明结内光电产额的平方根或者立方根随光的能量线性变化. 于是在光能量和光电产额的平方根或者立方根散点图中取尽可能多的在

一条直线上的实验点, 用这条直线与能量轴的交点决定结的势垒高度. 虽然这种光电产额-入射光能量法给出了不敏感于温度的结本征势垒高度, 但是这样并不能得到可靠性比较高的势垒高度.

为能通过光电产额谱得到更加精确和可靠的势垒高度、结的电结构、结中的能带偏移缺陷密度在能级的分布、价带剖面, 本文通过微分方程的解和光电产额谱的特有实验结果建立了一个可靠和准确的光电产额谱模型. 提出一个利用内电流产额  $Y$  随光子能量变化的实验结果自然确定结势垒高度的方法, 应用此方法不仅能尽可能精确可靠地计算出结势垒高度, 而且由这个光电产额谱模型得到了四个结的电子有效占有态的密度能级分布, 初步展示了这个光电产额谱模型的应用前景.

## 2 模型

测量了光电流密度 ( $J$ ) 和能量为  $h\nu$  的入射单色光的光强 ( $S$ ,  $W/m^2$ ) 后可由下式计算光电产额:

$$Y = \frac{J \cdot h\nu}{e \cdot S}, \quad (1)$$

这里  $e$  是电子的电量. 为了获得清洁金属的光电流同入射单色光的能量的定量关系, 福勒<sup>[4]</sup>从费米-狄拉克统计出发首先得到了光电流的如下准确表达式:

$$I = A \frac{2\pi kT}{m} \sqrt{\frac{2kT}{m}} \left(\frac{m}{h}\right)^3 \int_0^\infty \frac{\lg[1 + e^{(h\nu - e\varphi - y)}]}{\sqrt{y + (e\varphi_0 - h\nu)kT}} dy, \quad (2)$$

式中  $A$  是常数,  $k$  为玻尔兹曼常量,  $T$  是绝对温度,  $m$  为电子的质量,  $h$  为普朗克常量,  $e\varphi$  是金属的逸出功,  $e\varphi_0$  一个非常接近金属的逸出功的量. 到目前也得不到 (2) 式中的积分, 福勒对被积函数应用级数展开得到了 (3) 式的光电流

$$I(\nu, T) = \frac{AT^2}{\sqrt{e\varphi_0 - h\nu}} \left[ \frac{\pi^2}{6} + \frac{1}{2} \left( \frac{h\nu - e\varphi}{kT} \right)^2 - \sum_{j=1}^n \frac{(-1)^{j-1}}{j^2} \exp\left(-j \frac{h\nu - e\varphi}{kT}\right) \right], \quad (3)$$

$$\frac{h\nu - e\varphi}{kT} \geq 0.$$

(3) 式表示的级数称为福勒级数. 完全使用福勒级数对实验数据进行计算以得到逸出功是一个高强度的计算, 另外, 当福勒级数描述半导体 GaN 层

时在相当大的范围无效<sup>[20]</sup>. 福勒及后来的学者研究认为, 如果  $h\nu - e\varphi > 3kT$ , 则光电产额 (3) 式能近似为

$$Y = C(h\nu - e\varphi)^n, \quad (4)$$

式中对于金属-绝缘体异质结  $n$  规定为 2; 而对于绝缘体-半导体异质结,  $n$  是 3.

本文意在建立一个新的比 (4) 式更精确且简洁的光电产额谱模型. 光电产额谱的实验结果表明, 当入射光的能量小于等于结的势垒高度时, 光电产额是零. 由于光生非平衡载流子的输运导致光谱响应的大小与单位面积上的能量流密度和内建电场直接相关, 当入射光的能量高于结的势垒高度时, 入射光的能量越高, 则光电产额越大. 但是由光电产额的定义可知当入射光的能量高到一定程度时, 光电产额将达到等于 1 或者接近 1 的饱和值, 并在更高的光子能量范围内可能保持一定阶段饱和. 已有文献提示我们光电产额 ( $Y$ ) 能够从下述微分方程及其满足上述实验结果为边界条件的解得到<sup>[21]</sup>:

$$\begin{cases} \frac{dY}{d(h\nu)} = \frac{k}{h\nu} \left[ 1 - \frac{Y(h\nu) - \alpha_1}{\alpha_2} \right] [\alpha_1 - Y(h\nu)], \\ Y|_{h\nu \rightarrow 0} = Y_{\min}, \\ Y|_{h\nu \rightarrow \infty} = Y_{\text{sat}} < 1, \end{cases} \quad (5)$$

这里  $Y_{\text{sat}}$  是饱和光电产额, 最大的光电产额为 1,  $Y_{\min}$  则为最小光电产额,  $\alpha_1$  同  $\alpha_2$  与  $Y_{\text{sat}}$  及  $Y_{\min}$  有关. 对 (4) 式进行积分并且考虑到前述实验结果的特征, 产生了 (6) 式描述的光电产额谱模型:

$$Y(h\nu) = Y_{\text{sat}} + \frac{Y_{\min} - Y_{\text{sat}}}{1 + (h\nu/h\nu_1)^k}. \quad (6)$$

模型 (6) 中  $h\nu_1$  是中心能量, 光电产额在  $h\nu_1$  取得平均值,  $h\nu_1$  也是光电产额谱的拐点能量,  $k$  为幂,  $k$  代表了光电产额增长速率.

用模型 (6) 对实验光电产额谱进行最小二乘法曲线拟合的回归分析就能检验模型 (6) 的正确性, 同时也可得到每一条光电产额谱的具体数学表达, 进而用这个具体数学表达获取结的定量电性能信息.

### 3 应用

为检验模型 (6) 是否代表真实的光电产额谱实验结果, 首先使用模型 (6) 拟合光照面积为  $5 \times$

$10^{-2} \text{ cm}^2$  的典型的绝缘体-半导体异质结  $\text{MoS}_2/\text{SiO}_2$  的光电产额谱<sup>[16]</sup>, 及金属-绝缘体异质结  $\text{HfO}_2/\text{ZrCuAlNi}$ (ZCAN) 的光电产额谱<sup>[17]</sup>.  $\text{MoS}_2/\text{SiO}_2$  和  $\text{HfO}_2/\text{ZCAN}$  的光电产额随着入射光子能量变化的实验结果已经发表<sup>[16,17]</sup> 并在图 1 中给出, 通过对  $\text{MoS}_2/\text{SiO}_2$  及  $\text{HfO}_2/\text{ZCAN}$  的光电产额谱实验结果进行模型 (6) 的曲线最小二乘法最佳拟合, 得到了优化参数和理论曲线 (见图 1 和表 1). 作为对比, 图 1 也给出了  $\text{MoS}_2/\text{SiO}_2$  光电产额的立方根和  $\text{HfO}_2/\text{ZCAN}$  的光电产额的平方根随入射光子能量变化的散点图. 由图 1 可见, 只有接近 2/3 的光电产额的立、平方根随入射光子能量成线性变化, 而在相同的范围内, 使用本文提出的模型所有的理论结果同实验点重合. 为了定量地衡量模型和实验值的预测准确度, 本文使用理论结果与实验结果之间的相关系数 ( $R$ ) 和相对误差的平均值 (相对误差平均值 ( $ARE$ ) = (100% 实验数据对数目 ( $n$ ))  $\sum_{i=1}^{i=n} |\text{实验值}_i - \text{理论值}_i| / \text{实验值}_i$ ) 作为定量指标以评价拟合结果, 表 1 列出了  $R$  和  $ARE$ .

按照肖特基势垒高度的物理意义, 在肖特基势垒高度处光电产额应为零, 即:

$$Y(e\varphi) = 0 = Y_{\text{sat}} + \frac{Y_{\min} - Y_{\text{sat}}}{1 + (e\varphi/h\nu_1)^k}. \quad (7)$$

很容易得到方程 (7) 的解为

$$e\varphi = h\nu_1 \sqrt[k]{\frac{-Y_{\min}}{Y_{\text{sat}}}}. \quad (8)$$

表 1 列出了由最佳模拟参数获得的肖特基势垒高度, 显然, 这种理论计算的肖特基势垒高度比光电产额的立、平方根随入射光子能量散点几何外推获得的肖特基势垒高度要可靠和准确.

考察完模型 (6) 在描述由绝缘体同半导体及金属组成异质结的光电产额随光子能量变化的有效性后, 自然应当考察模型 (6) 对由半导体同半导体及半导体和金属组成异质结的光电产额随光子能量变化的有效性. 图 2 分别给出了光在 2.1 eV  $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.3}\text{In}_{0.5}\text{P}$  和 1.7 eV  $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$ <sup>[18]</sup> 组合的光照面积为  $0.1 \text{ cm}^2$  和面积为  $6.4 \times 10^{-7} \text{ cm}^2$  的  $\text{Pt}/\text{GaP}$  产生的光电产额的实验结果<sup>[22]</sup>, 同样对  $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.3}\text{In}_{0.5}\text{P}/\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$  和  $\text{Pt}/\text{GaP}$  的能量及光电产额实验结果进行模型 (6) 的曲线最小二乘法最佳拟合, 得到了表 1 中的优化参数. 同样, 图 2 也给出了  $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.3}\text{In}_{0.5}\text{P}/\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$  和  $\text{Pt}/\text{GaP}$

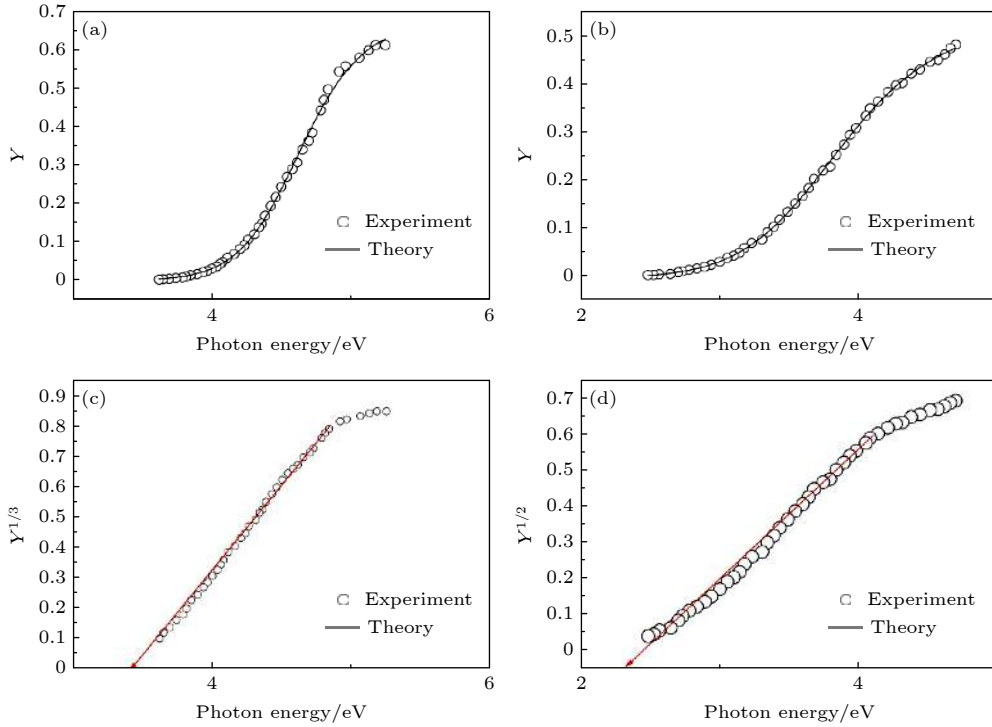


图 1 实验和模型 (6) 模拟的  $\text{MoS}_2/\text{SiO}_2$  (半导体-绝缘体 (a), (c)) 和  $\text{HfO}_2/\text{ZCAN}$  (金属-绝缘体 (b), (d)) 异质结内光电产额 ( $Y$ ) 作为入射光能量函数的结果及  $Y^{1/3}$  或  $Y^{1/2}$  随入射光能量的变化图

Fig. 1.  $\sqrt[3]{Y} - h\nu$  and  $Y - h\nu$  curves comparison between measurement and simulation of  $\text{MoS}_2/\text{SiO}_2$  ((a), (c)) and  $\text{HfO}_2/\text{ZCAN}$  ((b), (d)).

表 1 不同结中的优化参数和评价参数取值以及获得的势垒高度

Table 1. The best parameters and evaluation parameters for different junctions, and calculated barrier height.

结	$Y_{\text{sat}}$	$Y_{\text{min}}$	$h\nu_1$	$k$	$R$	$ARE/\%$	$\varphi/\text{eV}$
$\text{MoS}_2/\text{SiO}_2$	.68	-.0017	4.63	20.58	.999	2.3	3.46
$\text{HfO}_2/\text{ZCAN}$	.53	-.0038	3.86	10.68	.999	1.5	2.43
$\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.3}\text{In}_{0.5}\text{P}/\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$	.90	-4477.06	1.78	55.14	.999	3.4	1.52
单晶Si	.39	-.0094	1.72	9.05	.998	3.8	1.14
P3HT	.14	-.0066	1.94	67.82	.999	1.2	1.85
Graphene/ $\text{SiO}_2$	.22	-.049	4.75	26.94	.999	4.1	4.12
Pt/GaP	.87	-.37	1.43	142.86	.999	3.7	1.41

$R$ : 相关系数,  $ARE$ : 相对误差的平均值.

光电产额的平、立方根随入射光能量变化的散点图, 再一次可以看出, 理论结果同实验点重合的数据对明显多于光电产额的平方、立根同入射光能量在一条直线上的数据对. 应用表 1 中的最佳参数不难得到可靠而又准确的肖特基势垒高度. 这里  $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.3}\text{In}_{0.5}\text{P}/\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$  的肖特基势垒高度既低于  $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.3}\text{In}_{0.5}\text{P}$  的禁带宽度也低于  $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$  的禁带宽度, 这个结果正是  $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.3}\text{In}_{0.5}\text{P}/\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$  成为效率到达 47.1% 的太阳能电池的一部分原因 [18].

最近报道了石墨烯/二氧化硅 (Graphene/ $\text{SiO}_2$ )

的光电产额谱实验数据 [19], 图 3 给出了石墨烯/二氧化硅光电产额谱实验曲线. 通过模型 (6) 对石墨烯/二氧化硅光电产额谱实验数据的曲线最小二乘法最佳拟合获得了表 1 中的数学表达式及结势垒高度, 图 3 也给出了能够最好地描述结 Graphene/ $\text{SiO}_2$  光电产额随入射光子能量变化规律的最佳参数的理论曲线. 由于报道的是石墨烯的逸出功 [23], 图 3 描绘了石墨烯/二氧化硅光电产额立方根随入射光子能量变化的散点图, 可以看出理论结果同实验点重合的数据对明显多于光电产额的立方根同入射光子能量在一条直线上的数据对.

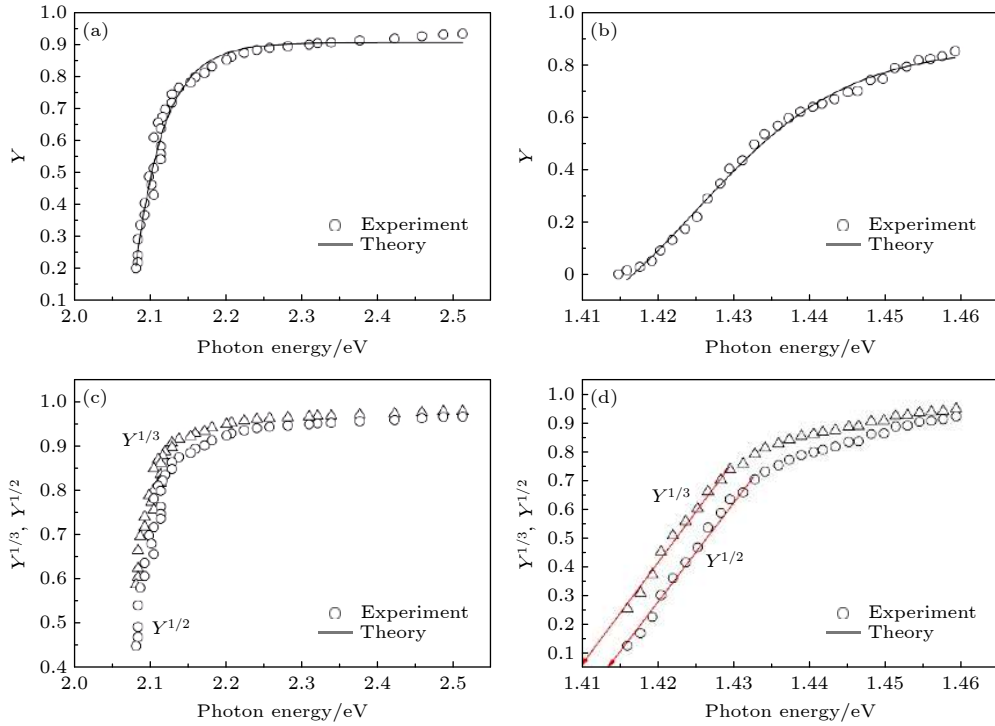


图 2 实验和模型 (6) 模拟的 Al<sub>0.2</sub>Ga<sub>0.3</sub>In<sub>0.5</sub>P/Al<sub>0.2</sub>Ga<sub>0.8</sub>As(半导体-半导体 (a), (c)) 和 Pt/GaP(金属-半导体, (b), (d)) 异质结内光电产额 (Y) 作为入射光能量函数的结果及 Y<sup>1/3</sup> 和 Y<sup>1/2</sup> 随入射光能量变化图

Fig. 2.  $\sqrt[3]{Y}-h\nu$  and  $Y-h\nu$  plots of the experimental data and the theoretical fits in the form of Eq. (6) for both Al<sub>0.2</sub>Ga<sub>0.3</sub>In<sub>0.5</sub>P/Al<sub>0.2</sub>Ga<sub>0.8</sub>As ((a), (c)) and Pt/GaP ((b), (d)) Schottky contacts.

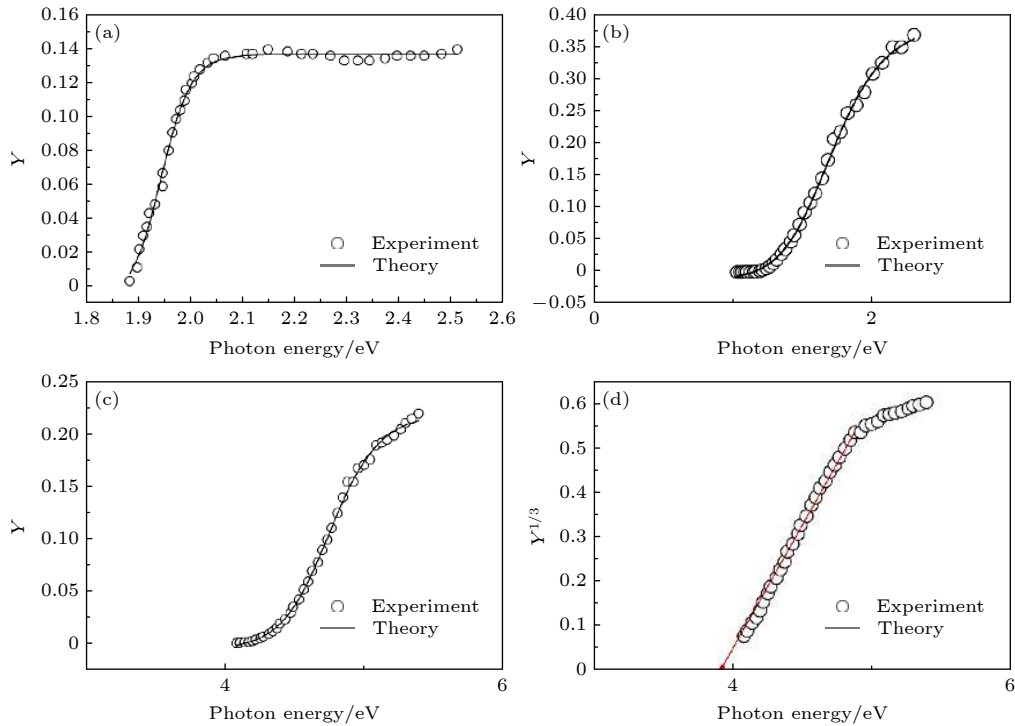


图 3 实验和模型 (6) 模拟的石墨烯/二氧化硅 (Graphene/SiO<sub>2</sub> (c), (d)), p 型单晶硅 (b) 和有机半导体 P3HT(a) 光电产额 (Y) 作为入射光能量函数的结果及 Y<sup>1/3</sup> 随入射光能量变化图

Fig. 3. Experimental and theoretical IPE yield as a function of photon energy for Graphene/SiO<sub>2</sub> ((c), (d)), P3HT (a) and p-type Si (b).

下面考察模型 (6) 在半导体光电产额谱的有效性, 图 3 分别给出了 p 型单晶硅<sup>[24]</sup> 和有机半导体 P3 HT(3-hexylthiophene)<sup>[25]</sup> 的光电产额谱实验曲线. 同样, 模型 (6) 对 p 型单晶硅及有机半导体 P3 HT 的实验数据模拟得到了很好的图 3 中的理论曲线和优化参数 (见表 1). 从表 1 的优化参数计算的硅的禁带宽度同使用硅的吸收光谱获得的最精确的硅的禁带宽度完全一致<sup>[26]</sup>, 而 P3 HT 的光电产额谱函数给出的禁带宽度仅比使用 P3 HT 的吸收光谱获得的最精确的禁带宽度少 0.05 eV<sup>[27]</sup>.

有了结的光电产额谱模型 (6), 就能够从光电产额谱模型的第一导数得到如下的电子有效占有态的密度  $N_{\text{osd}}$ <sup>[28,29]</sup>:

$$N_{\text{osd}} = \frac{1}{A} \frac{dY}{d(h\nu)} = \frac{Y_{\text{sat}} - Y_{\text{min}}}{A \cdot h\nu_1} \cdot k \frac{(h\nu/h\nu_1)^{k-1}}{[1 + (h\nu/h\nu_1)^k]^2}, \quad (9)$$

这里  $A$  为光照射面积. 根据文献照射光的能量减去结势垒高度给出了高于价带顶的能量<sup>[12]</sup>, 图 4 给出了 Pt/GaP, MoS<sub>2</sub>/SiO<sub>2</sub>, Al<sub>0.2</sub>Ga<sub>0.3</sub>In<sub>0.5</sub>P/Al<sub>0.2</sub>Ga<sub>0.8</sub>As 和 P3HT 的电子有效占有态的密度能级分布 (也可以表示成电子有效占有态的密度按照照射光的能量分布<sup>[28]</sup>).

图 4 中 Pt/GaP, MoS<sub>2</sub>/SiO<sub>2</sub> 和 P3HT 电子有效占有态的密度能级分布呈现峰形, 如果对电子有效占有态的密度 (9) 式进行一次导数运算就有:

$$\begin{aligned} & \frac{d}{d(h\nu)} N_{\text{osd}} \Big|_{h\nu_p} = 0 \\ & = \frac{d}{d(h\nu)} \frac{Y_{\text{sat}} - Y_{\text{min}}}{A \cdot h\nu_1} \cdot k \frac{(h\nu/h\nu_1)^{k-1}}{[1 + (h\nu/h\nu_1)^k]^2} \Big|_{h\nu_p} \\ & = \frac{(Y_{\text{sat}} - Y_{\text{min}})}{A \cdot h\nu_1^2} \left( \frac{h\nu}{h\nu_1} \right)^{k-1} \times \\ & \frac{(k-1) \left( \frac{h\nu_1}{h\nu} \right) \left[ 1 + \left( \frac{h\nu}{h\nu_1} \right)^k \right] - 2k \left( \frac{h\nu}{h\nu_1} \right)^{k-1}}{[1 + (h\nu/h\nu_1)^k]^3} \Big|_{h\nu_p}. \end{aligned} \quad (10)$$

除了照射光子能量为零的解以外, 电子有效占有态密度的峰位置是:

$$h\nu_p = h\nu_1 \cdot \sqrt[k]{(k-1)/(k+1)}. \quad (11)$$

可以说电子有效占有态的密度峰位置基本上同  $h\nu_1$  重合. 图 4 表明在禁带范围绝大多数电子占据在价带顶附近, 这符合能带理论中电子分布特征的结论.

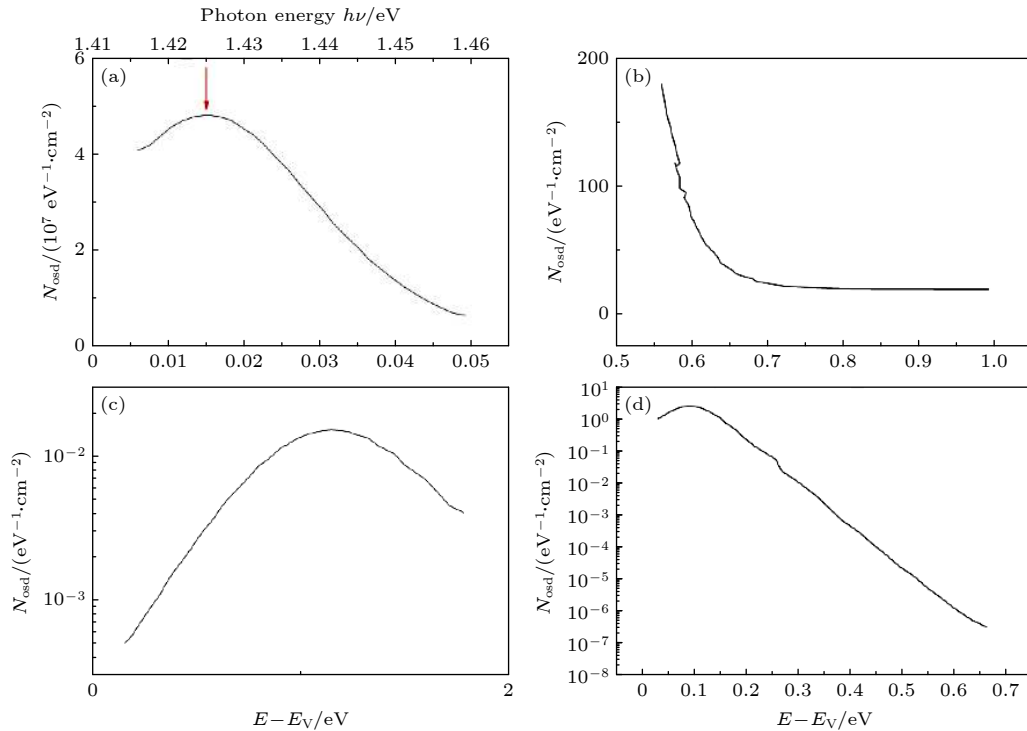


图 4 Pt/GaP (a), Al<sub>0.2</sub>Ga<sub>0.3</sub>In<sub>0.5</sub>P/Al<sub>0.2</sub>Ga<sub>0.8</sub>As (b), MoS<sub>2</sub>/SiO<sub>2</sub> (c) 和 P3HT (d) 电子有效占有态的密度按照能级 (能量) 分布  
Fig. 4. Curves display the spectra of the effective density of the filled electronic states of the Pt/GaP (a), Al<sub>0.2</sub>Ga<sub>0.3</sub>In<sub>0.5</sub>P/Al<sub>0.2</sub>Ga<sub>0.8</sub>As (b), MoS<sub>2</sub>/SiO<sub>2</sub> (c) and P3HT (d), as the first derivative of the recorded.

## 4 结 论

光电产额谱的理论和实验研究是涉及光电器件和材料的重要内容, 而能够准确地从入射光能量计算光电产额对最大限度地从光电产额谱获取光电器件和材料的电性能的微观信息无疑至关重要. 旨在可靠和更精确地建立光电产额谱的理论, 本文在找到光电产额谱满足的微分方程并结合光电产额谱的特有实验结果之后得到了这个满足光电产额谱的特有实验结果下微分方程的解. 应用本文所提供的模型分别用已获得的光电产额-入射光能量实验谱数据进行最小二乘法曲线拟合不仅验证了这种方法获得的光电产额谱模型的正确性, 而且得到了 7 个材料光电产额谱的具体数学表达. 应用此模型不仅能精确可靠地计算出两种电性能略有不同的物质相互接触形成结的势垒高度, 而且应用这个光电产额谱模型能够得到在结中的电子有效占有态密度的能级分布. 由于现代计算机的普及加上科技数据分析处理软件的丰富, 可以认为本文所提供的方法能够非常精确、方便、快速地获取光电产额谱的知识. 人类已经具备了许多界面系统的电性能知识, 随着时间的推移, 将会有更多的新光电器件及材料出现. 相信该方法能在探知新界面材料的电性能知识方面发挥积极的作用.

## 参考文献

- [1] Hertz H 1887 *Ann. Phys.* **31** 983
- [2] Einstein A 1905 *Ann. Phys.* **322** 132
- [3] Millikan R 1916 *Phys. Rev.* **7** 18
- [4] Fowler R H 1931 *Phys. Rev.* **38** 45
- [5] Liu C, Liu W L 2018 *Optik* **154** 726
- [6] Herbert B M 1977 *J. Appl. Phys.* **48** 4729
- [7] Chapin D M, Fuller C S, Pearson G L 1954 *J. Appl. Phys.* **25** 676
- [8] Hanae T, Yousaf H K, Faisal B, Bernabe M S, Mohamed E T 2019 *Sol. Energy* **194** 932
- [9] Daisuke Y, Tsuyoshi Y, So N, Tomoyuki Y 2012 *Phys. B* **407** 4485
- [10] Kun X, Caifu Z, Qin Z, Peide Y, Kang W, Curt A R, David G, Nhan V N 2012 *70th Device Research Conference* DOI: 10.1109/DRC.2012.6256941
- [11] Afanas'ev V V, Chou H Y A, Stesmans C, Merckling X S 2011 *Microelectron. Eng.* **88** 1050
- [12] Akio O, Mitsuhsa I, Katsunori M, Seiichi M 2017 *Microelectron. Eng.* **17825** 85
- [13] Kolomiets N M, Afanas'ev V V, Jayachandran S, Delabie A, Heyns M, Stesmans A 2016 *ECS J. Solid State Sci. Technol.* **5** 3008
- [14] Jenkins M A, McGlone J M, Wager J F, Conley J F J 2019 *J. Appl. Phys.* **125** 055301
- [15] Sang Y L, Jaewan C, Jaehyung C, Younsoo K, HanJin L, Hyeongtag J, Hyungtak S 2017 *Curr. Appl. Phys.* **17** 267
- [16] Shlyakhov J, Chai M, Yang S J, Wang V V, Afanas'ev M, Houssa A Stesmans 2018 *Apl. Materials* **6** 026801
- [17] Melanie A J, Tyler K, Dustin Z A, Wei L, Nhan V N, John F, Conley J 2018 *Phys. Status Solidi RRL* **12** 1700437
- [18] John F G, Myles A S, Nikhil J, Kevin L, Schulte R M F, William E, McMahon E E, Perl D J F 2018 *IEEE J. Photovoltaics* **8** 626
- [19] Vadim T, Inge A, Steven B, Cedric H, Iuliana R, Afanas'ev, V, Michel H, Andre S 2019 *Thin Solid Films* **674** 39
- [20] Shalish L, Kronik G S, Yoram S, Eizenberg M 2000 *Appl. Phys. Lett.* **77** 987
- [21] Seber G A F, Wild J 2003 *Nonlinear Regression* (New Jersey: John Wiley & Sons, Inc.) p355
- [22] Almeida J, Tiziana D, Coluzza C, Margaritondo G, Bergossi O, Spajer M, Courjon D 1996 *Appl. Phys. Lett.* **69** 2361
- [23] Shi J L, Ang L K 2015 *Phys. Rev. Appl.* 3014002
- [24] Isao S, Mitsuyuki Y, Hitoshi K 2009 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **93** 737
- [25] Carsten D, Daniel M, Julien G 2010 *Phys. Rev. B* **81** 085202
- [26] Liu C, Li F 2012 *Opt. Commun.* **285** 2868
- [27] Liu C S 2020 *Polym. Test.* **91** 106686
- [28] Szijsber J 1987 *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **43** 113
- [29] Ammar S, Bogdan J, Kowalski E, Nehme A K 2007 *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **160** 58



# A reliable and accurate model of photoelectron yield spectrum and its applications\*

Liu Chang-Shi<sup>†</sup>

(College of Information Science and Engineering, Jiaxing University, Jiaxing 314001, China)

(Received 18 October 2020; revised manuscript received 22 December 2020)

## Abstract

Experimental and theoretical research on photoelectron yield spectrum play a crucial role in electronic and photo-electronic materials and devices, and the reliable and precise estimation of photoelectron yield via photon energy is very important for detecting microscopic electrical information in photo-electronic materials and devices. Photoelectron yield is defined as the number of electrons emitted by per incident photon. Before this work, the technique was based on the interception of a plot of square root of photoelectron yield versus photon energy for metal-insulator hetero-junction, and that of a plot of cube root of photoelectron yield variation with photon energy for insulator-semiconductor hetero-junction. But, how to intercept the relationship between photoelectron yield and photon energy for semiconductor-semiconductor and metal-semiconductor hetero-junctions has not been known. Besides, many experimental plots of square root and cube root of photoelectron yield against photon energy are available, but none of them is a straight line. In order to obtain a more accurate and reliable barrier height, electrical structure of the junction, the energy level distribution of the energy band offset, defect density in the junction, and the valence band profile through the photoelectric yield spectrum, a reliable and accurate model of photoelectron yield spectrum is established via combining the solution to a differential equation and experimental results. A method is proposed to naturally determine the junction barrier height by using the experimental results of the internal current yield varying with the photon energy. The this method can be used to calculate the junction barrier height as accurately and reliably as possible, and the density and energy level distributions of the effective occupancy states of the electrons in the four junctions are obtained by using this photoelectric yield spectrum model, In addition, based on this model, this paper proves mathematically that the density and energy level distribution of the effective occupancy state of electrons present a peak shape. Therefore, the application prospects of this photoelectric yield spectrum model are demonstrated.

**Keywords:** photoelectron yield spectroscopy, photonic energy, model, junction barrier height

**PACS:** 33.60.+q, 92.60.Aa, 33.15.Hp

**DOI:** [10.7498/aps.70.20201729](https://doi.org/10.7498/aps.70.20201729)

---

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 61705091).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: [lcswl@zjxu.edu.cn](mailto:lcswl@zjxu.edu.cn)