

ЧИСЛЕННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ПЕРЕНОСА НОСИТЕЛЕЙ В ФОТОПРЕОБРАЗОВАТЕЛЯХ НА ГЕТЕРОПЕРЕХОДАХ a-Si:H - c-Si

Предлагается модель расчета в кинетическом приближении характеристик фотопреобразователей на основе переходов аморфный - кристаллический кремний. Проводится расчет зависимости фотопроводимости пленок a-Si:H, полученных магнетронным методом, от температуры.

Введение

На сегодняшний день большое внимание уделяется способам получения voltaической энергии путем фотопреобразования энергии, поступающей от Солнца. Существенным фактором, ограничивающим возможности получения энергии данного типа, является высокая стоимость преобразователей и их малая эффективность. Определенные надежды в решении данной проблемы возлагаются, в частности, на развитие технологии получения тонкопленочных фотопреобразующих элементов на основе гетеропереходов, в частности аморфный – кристаллический или поликристаллический кремний.

В [1-3] проведены исследования зависимости фотопроводимости a-Si:H p-типа от уровня легирования и концентрации дефектов. Исследования проводились как с использованием численной модели, так и на экспериментальных образцах. Предложена энергетическая модель фотопроводимости аморфного кремния. В [2] проводились исследования свойств и структуры пленок a-Si:H, полученных методом разложения силана в высокочастотном тлеющем разряде от внешних воздействий, в том числе от температуры отжига. В работах [4, 5] предложен более простой и экономически выгодный магнетронный метод напыления тонких пленок аморфного гидрогенизированного кремния, обладающего схожими характеристиками.

Эффективность фотопреобразования в равной степени зависит от характеристики пленки и от геометрии преобразователей.

Целью данного исследования является разработка основных положений численной модели для изучения зависимости фотопроводимости гетеропереходов a-Si:H – c-Si и ее апробация.

1. Модель переноса носителей

Решение поставленной задачи наиболее целесообразно проводить в кинетическом приближении. При описании процессов переноса носителей в кремнии можно использовать модель, предложенную в [6, 7], дополнив ее представлениями из [1, 2].

Процесс переноса носителей в аморфном кремнии описывается в терминах прыжковой проводимости для неупорядоченной системы с наличием случайного поля хаотически расположенных заряженных точечных центров. Проводимость описывается переходами носителей между различными локализованными состояниями.

Корреляционная функция случайного поля представляется в виде [8]:

$$\varphi(r) = \frac{2\pi n_t e^4}{\varepsilon^2} r_0 \exp\left(-\frac{r}{r_0}\right), \quad (1)$$

где $r_0 = \frac{4\pi n_0 e^2}{\varepsilon T} = \alpha^{-1}$ – радиус экранирования; n_t – концентрация центров; e – заряд электрона; ε – диэлектрическая проницаемость образца, а $r = r_1 - r_2$ – расстояние между двумя точками в образце.

Кинетическое уравнение для аморфного кремния в стационарном состоянии можно записать в виде, предложенном в [8], переписав правую часть с учетом всех основных процессов генерации и рекомбинации носителей тока:

$$\frac{\partial f_{\lambda}}{\partial t} = -\sum_{\lambda'} \{W_{\lambda\lambda'} f_{\lambda} (1 - f_{\lambda'}) - W_{\lambda'\lambda} f_{\lambda'} (1 - f_{\lambda})\},$$

где f_{λ} – неравновесный диагональный элемент одночастичной матрицы плотности; $W_{\lambda\lambda'}$ – вероятность перехода между состояниями λ и λ' . Вероятность рассеяний, соответствующих различным типам переходов, определяется через сечения рассеяния.

Данное уравнение описывает эволюцию диагональной части матрицы плотности, а в области локализованных состояний оно описывает баланс электронных переходов между различными состояниями. Вероятности перескоков между различными парами центров меняются случайным образом и в широком интервале. В результате изменения заселенности состояний наиболее легкие направления перескоков могут быть блокированными.

Генерация носителей тока характеризуется темпом оптической генерации G . Для интерпретации фотопроводимости используются следующие модели рекомбинации:

1) рекомбинация «зона – хвост» происходит при захвате неравновесного носителя из свободной зоны на состояние хвоста противоположной зоны, захватившее перед этим носитель другого знака и действующее как рекомбинационный центр. Количество состояний хвоста увеличиваются по мере уменьшения температуры;

2) рекомбинация «хвост – оборванная связь» происходит при туннелировании захваченных носителей из состояния хвостов зон на состояния оборванных связей;

3) рекомбинация «хвост – хвост» – это туннельная рекомбинация между электронами, захваченными на состояния хвоста зоны проводимости, и дырками, захваченными на состояния хвоста валентной зоны.

В [3] показано, что в действительности нужно учитывать все возможные механизмы рекомбинации и выделять из них основной в зависимости от спектра состояний носителей, типа и концентрации дефектов, внешних условий (температура, интенсивность света и т.д.).

При описании процессов рекомбинации носителей и их захвата на соответствующие ловушки можно воспользоваться моделью, предложенной в [2, 3], дополнив ее представлениями, описанными в [8].

Плотность состояний в неупорядоченном полупроводнике при $|E| \gg \sqrt{\psi_1}$ [8]:

$$\rho(E) = \frac{\psi_1 \exp(-\frac{E^2}{2\psi_1})}{2\pi^2 |E|^{3/2}} + \frac{\alpha \cdot \exp(-\frac{E^2}{2\psi_1})}{8\sqrt{2}\pi^{3/2} \sqrt{\psi_1}} (E - \frac{\alpha |E|^{3/2}}{\sqrt{2\pi\psi_1}}), \quad (2)$$

где $\psi_1 = 2\pi n_t e^4 r_0 / \varepsilon^2$; E – энергия состояния; $\alpha^{-1} = r_0$ – характерная длина, роль которой играет радиус экранирования.

Расчеты проводятся для упрощенной модели плотности состояний в щели подвижности, состоящей из четырех дискретных уровней (рис. 1). Уровни E_{tp} и E_{tn} с плотностью состояний N_{tp} и N_{tn} – эффективные уровни хвоста валентной зоны и зоны проводимости соответственно. Уровни E_D и $E_D + U$ – энергетические уровни состояний оборванных связей. Рассмотрим состояния хвостов зон в качестве мелких ловушек, находящихся в термодинамическом равновесии с ближайшей зоной, т.е. ”ловушки для дырок” и ”ловушки для электронов”. Такое упрощенное представление плотности состояний в щели подвижности, как показано в работе [2], не приводит к качественным изменениям результатов численного расчета.

На рис. 1 показаны вероятные переходы, которые учитывались при расчетах. Как и в модели [2, 3], в данной работе рассмотрены два возможных канала рекомбинации: прямой захват свободных электронов и дырок на D -центры (потoki U_1 , U_2 , U_5 и U_6) и туннельная рекомбинация между электронами, захваченными на состояния хвоста зоны проводимости, и дырками, захваченными на состояния хвоста валентной зоны (U_{13}).

Определим вероятности нахождения D-центра в состоянии D^+ , D^0 и D^- как f^+ , f^0 и f^- соответственно. Поскольку D-центр может находиться только в трех состояниях, $f^+ + f^0 + f^- = 1$. Можно записать на основе формализма Шокли-Рида [8]:

$$U_1 = nN_D f^+ c_n^+, \quad U_2 = nN_D f^0 c_n^0,$$

$$U_3 = N_D f^0 e_n^0, \quad U_4 = N_D f^- e_n^-,$$

$$U_5 = pN_D f^0 c_p^0, \quad U_6 = pN_D f^- c_p^-,$$

$$U_7 = N_D f^+ e_p^+, \quad U_8 = N_D f^0 e_p^0,$$

$$U_9 = nN_{tn} (1 - f_{tn}) c_{tn},$$

$$U_{10} = N_{tn} f_{tn} e_{tn}, \quad U_{11} = pN_{tp} f_{tp} c_{tp},$$

$$U_{12} = N_{tp} (1 - f_{tp}) e_{tp}, \quad U_{13} = N_{tp} f_{tp} N_{tn} f_{tn} T_{nr}, \quad (3)$$

где c_n^0 и c_n^+ – коэффициенты захвата электрона на D^0 - и D^+ -состояния; c_p^0 и c_p^- – коэффициенты захвата дырок на D^0 - и D^- -состояния; e_n^0 , e_n^- , e_p^0 и e_p^+ – коэффициенты теплового выброса электронов из D^0 - и D^- -состояний и дырок из D^0 - и D^+ -состояний; f_{tn} , f_{tp} – вероятности заполнения ловушек для электронов и дырок; c_{tn} , c_{tp} и e_{tn} , e_{tp} – коэффициенты захвата электронов и дырок на соответствующие ловушки и теплового выброса из них; N_D – концентрация D-центров; T_{nr} – коэффициент туннельной рекомбинации «хвост - хвост».

Увеличение плотности электронов в зоне проводимости обусловлено оптической генерацией G и переходами U_3 , U_4 , U_{10} . Уменьшение плотности обусловлено переходами U_1 , U_2 и U_9 . Можно записать, что изменение концентрации электронов проводимости:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = G - U_1 - U_2 + U_3 + U_4 - U_9 + U_{10}. \quad (4)$$

Аналогично, можно записать для плотности дырок в валентной зоне и плотности заполнения уровней E_{tn} , E_{tp} и D :

$$\frac{\partial p}{\partial t} = G - U_5 - U_6 + U_7 + U_8 - U_{11} + U_{12},$$

$$\frac{\partial [N_{tn} f_{tn}]}{\partial t} = U_9 - U_{10} - U_{13},$$

$$\frac{\partial [N_{tp} f_{tp}]}{\partial t} = U_{11} - U_{12} - U_{13},$$

$$\frac{\partial [N_D f^+]}{\partial t} = U_3 + U_5 - U_1 - U_7. \quad (5)$$

Данные соотношения позволяют определить вероятности генерации и рекомбинации носителей, входящие в правую часть кинетического уравнения.

Кинетическое уравнение в нестационарном состоянии можно записать для функции распределения носителей f в следующем виде:

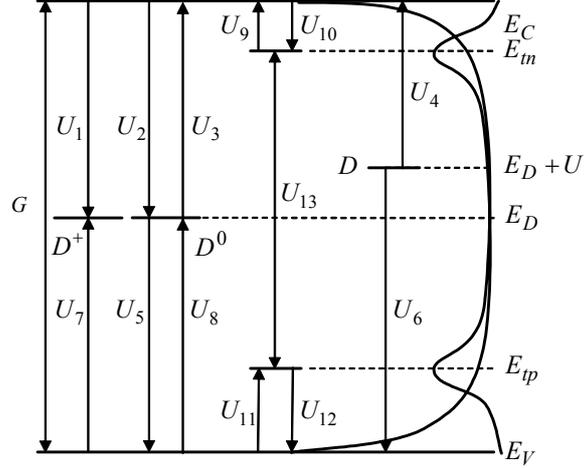


Рис. 1. Схематическое представление электронных переходов для упрощенной модели плотности состояний и вид плотности состояний в щели подвижности из (1)

$$\frac{\partial f_{\lambda}}{\partial t} + (\vec{v}\vec{\nabla}_r f_{\lambda}) + \frac{1}{\hbar}(\vec{F}_i\vec{\nabla}_k f_{\lambda}) =$$

$$= \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_i - \sum_{\lambda'} \{W_{\lambda\lambda'} f_{\lambda}(1-f_{\lambda'}) - W_{\lambda\lambda'} f_{\lambda'}(1-f_{\lambda})\},$$

где \vec{v}_i – скорость носителей заряда e_i ; \vec{F}_i – сила, действующая на заряд со стороны внешнего электромагнитного поля и остальных носителей заряда; $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_i$ – интеграл столкновений; ρ – плотность объемного заряда ионов в образце; $\sum_i e_i \int f_i d\vec{v}_i$ – плотность объемного заряда, создаваемого свободными носителями тока.

Сила \vec{F}_i является электрической и может быть определена как градиент поля, которое находится решением уравнения Пуассона:

$$\Delta\varphi = -\frac{1}{\varepsilon}(\rho(\vec{r}) - \sum_i e_i \int f_i d\vec{v}_i)$$

с учетом добавки в виде случайного поля (1).

Методика решения рассмотренной выше системы уравнений подробно изложена в работах [6, 7].

2. Результаты численных расчетов

Параметры модели были выбраны в соответствии с известными из литературы данными и данными, полученными из экспериментальных исследований [4, 5]. Расчет проводился для аморфного кремния с различной степенью гидрирования. Ширина щели подвижности принималась равной 1,8 эВ. Положение уровня Ферми относительно потолка валентной зоны задавалось равным 1,05 эВ. Для параметров оборванных связей принимались следующие значения: $E_D = 0.9$ эВ, $U = 0.3$ эВ. Темп фотогенерации принимался равным $G = 10^{19} \text{ см}^{-3} \text{ с}^{-1}$, $c_n^0 = c_p^0 = 3 \cdot 10^{-15} \text{ см}^{-2}$ и $c_n^+ = c_p^- = 1.5 \cdot 10^{-13} \text{ см}^{-2}$.

Расчет проводился для проводимости в области низких напряженностей внешнего поля до 3 кВ/см.

На рис.2 представлены результаты численного моделирования тепловой удельной проводимости для различных значений концентрации водорода.

Полученные в результате моделирования зависимости удельной проводимости хорошо согласуются с экспериментальными данными.

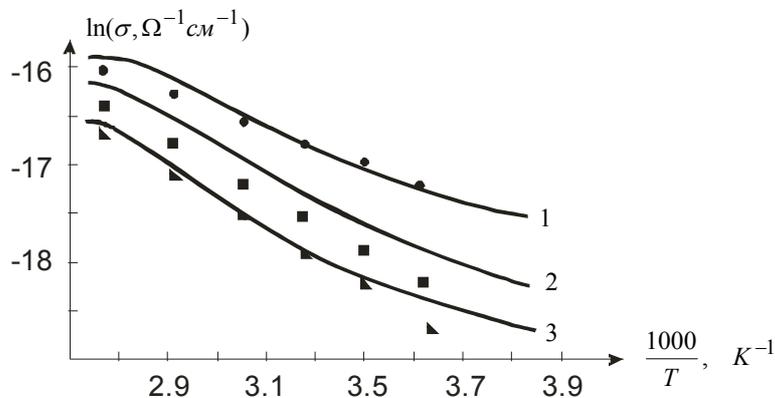


Рис.2. Тепловая зависимость расчетной (сплошные линии) и экспериментальной (точки) удельной проводимости a-Si пленок, полученных магнетронным методом при концентрации водорода: 1 - 10%; 2 - 30%; 3 - 40%

Выводы

Таким образом, разработаны основные положения модели для исследования зависимости фотопроводимости гетеропереходов a-Si:H – c-Si в кинетическом приближении. Обосновано использование упрощенной модели плотности состояний в щели подвижности гидрогенизированного аморфного кремния. Данная модель позволяет проводить исследования влияния температуры, степени легирования и геометрических размеров на характеристики фотопреобразователей. Для апробации модели проведен расчет зависимости удельной проводимости пленки a-Si:H, полученной магнетронным методом, от температуры. Сравнение полученных результатов с экспериментальными данными показало работоспособность данного подхода при моделировании.

Список литературы: 1. Кузнецов С.В., Теруков Е.И. Влияние хвостов зон a-Si:H на заполнение оборванных связей и величину фотопроводимости // ФТП. 2001. Т.35. Вып.6. С.684-686. 2. Кузнецов С.В. Эффект Стеблера-Вронского и температурные зависимости фотопроводимости a-Si:H p-типа // ФТП. 2000. Т.34. Вып.6. С.748-752. 3. Кузнецов С.В. Численный расчет температурных зависимостей фотопроводимости a-Si:H p-типа // ФТП. 2001. Т.35. Вып.10. С.1244-1249. 4. М.А.Буков, А.С.Мазин *Optical spectral characteristics of thin-film constructions on the basis of hydrogenated amorphous silicon* // Proc. of SPIE - Vol. 6023. P.60230Q1-60230Q9. 5. Быков М.А. Исследование влияния концентрации водорода на свойства пленок аморфного гидрогенизированного кремния, полученных магнетронным методом // Восточно-европейский журнал передовых технологий. 2006. 4/3(22). С.36-38. 6. Зуев С.А., Старостенко В.В., Терещенко В.Ю., Чурюмов Г.И., Шадрин А.А. Модель ПТШ субмикронных размеров на кремнии. Ч.1 / Радиоэлектроника и информатика. 2004. №3. С.47–53. 7. Гордиенко Ю.Е., Зуев С.А., Старостенко В.В., Терещенко В.Ю., Шадрин А.А. Особенности лавинного пробоя в кремниевых ПТШ по результатам численного моделирования // Радиотехника. 2006. Вып.121. С.146-152. 8. Бонч-Бруевич В.Л., Звягин И.П., Кайпер Р., Миронов А.Г., Эндерлайн Р., Эсер Б. Электронная теория неупорядоченных полупроводников. М.: Наука, 1981. 384 с.

Поступила в редколлегию 12.06.2007

Слипченко Николай Иванович, проф., проректор по научной работе, ХНУРЭ. Научные интересы: микроэлектроника. Адрес: Украина, 61166, Харьков, пр. Ленина, 14, тел. 70-21-020.

Быков Михаил Александрович, младший научный сотрудник каф. МЭПУ ХНУРЭ. Научные интересы: аморфные тонкопленочные фотопреобразователи. Адрес: Украина, 95050, Симферополь, ул.Киевская, 130, кв.47.

Зуев Сергей Александрович, канд. техн. наук, старший преподаватель каф. радиофизики и электроники ТНУ. Научные интересы: моделирование полупроводниковых приборов. Адрес: Украина, 95004, Симферополь, ул.Киевская, 127, кв.35.

Мазин Алим Сейт-Аметович, канд. техн. наук, доцент каф. радиофизики и электроники ТНУ. Научные интересы: тонкопленочные структуры, наноразмерная электроника. Адрес: Украина, 95053, Симферополь, ул. Мате Залки, 1, кв.19.