



ЧИСЛЕННЫЙ РАСЧЕТ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ФОТОНОСИТЕЛЕЙ В АМОРФНЫХ МАТЕРИАЛАХ

А.Г.Абдукадиров

Кандидат ф-м. наук, доцент ТАТУ ФФ
<https://doi.org/10.5281/zenodo.6683932>

ARTICLE INFO

Received: 28th May 2022
Accepted: 02nd June 2022
Online: 05th June 2022

KEY WORDS

аморфный кремний,
щель подвижности,
экстраполяция,
фотоноситель,
междупарная
рекомбинация.

ABSTRACT

Построена компьютерная модель корреляционной междупарной излучательной рекомбинации электронов и дырок в аморфном полупроводнике при низкой температуре методом Монте-Карло. Численно рассчитана зависимость функции пространственного распределения электронно-дырочных пар от интенсивности стационарно возбуждающего света

Введение. Аморфный кремний, в этой работе, выступил в качестве более дешевой альтернативы монокристаллическому. Первые солнечные элементы на его основе были созданы в 1975 году. Оптическое поглощение аморфного кремния в 20 раз выше, чем кристаллического. Поэтому для существенного поглощения видимого света достаточно пленки a-Si:H толщиной 0,5–1,0 мкм вместо дорогостоящих кремниевых 300-мкм подложек [9,10]. Кроме того, благодаря существующим технологиям получения тонких пленок аморфного кремния большой площади не требуется операции резки, шлифовки и полировки, необходимых для солнечного элемента на основе монокристаллического кремния. По сравнению с поликристаллическими кремниевыми элементами изделия на

основе a-Si:H производят при более низких температурах (300°C): можно использовать дешевые стеклянные подложки, что сократит расход кремния в 20 раз. Пока максимальный КПД экспериментальных элементов на основе a-Si:H – 12% – несколько ниже КПД кристаллических кремниевых солнечных элементов (~15%). Однако не исключено, что с развитием технологии КПД элементов на основе a-Si:H достигнет теоретического потолка – 16 %.

Актуальность задачи. В отличие от кристаллических веществ, для которых теория электронных состояний глубоко разработана, теоретическое изучение аморфных полупроводников сталкивается с рядом сложных проблем. В кристаллических структурах атомы и молекулы расположены упорядоченно на любом расстоянии по всем трем



измерениям. Аморфными веществами называют такие, у которых, в отличие от кристаллов, на дальних расстояниях упорядоченность структуры отсутствует. Такие материалы получают при быстром охлаждении вещества, находящегося в жидкой или газообразной фазе. Главное их достоинство — низкая стоимость производства. Из-за отсутствия дальнего порядка структура электронных уровней аморфных полупроводников отлична от уровневой структуры кристаллических полупроводников. Различие, однако, не так уж велико:

-аморфные полупроводники имеют почти такие же энергетические зоны, которые отличаются лишь “хвостами”, соответствующими локальным уровням в запрещенной зоне;

-область между порогами подвижности валентной зоны и зоны проводимости называют щелью подвижности. Она является аналогом запрещенной зоны в кристаллических полупроводниках;

Изменяя присадками различных примесей структуру уровней в щели подвижности, можно управлять полупроводниковыми свойствами вещества. Производство структур на основе монокристаллического кремния – процесс технологически сложный и дорогостоящий. Поэтому внимание было обращено на такие материалы, как сплавы на основе аморфного кремния a-Si:H.

Изучение фотолюминесценции является одним из основных методов исследования аморфных полупроводников:

а) форма спектра люминесценции дает информацию об энергии излучательных состояний

б) изучение временной кинетики излучения в нестационарных условиях дает информацию о механизмах рекомбинации [1-6].

В работе [7] рассматривалась задача о формировании спектра фотолюминесценции в условиях низкой температуры, при реализации режима междупарной рекомбинации. Режим междупарной рекомбинации (distant - pair - recombination) имеет место, когда рожденные одним квантом электрон и дырка успевают до рекомбинации разойтись в пространстве и рекомбинируют электроны и дырки рожденные разными квантами света. При численных расчетах распределение фотоносителей одного сорта в пространстве считалось случайным и использовалась пуассоновское распределение частиц концентрации N . Однако численное моделирование, проведенное в [8], показывает что в расположении частиц одного сорта нужно учитывать корреляцию.

Данная работа посвящено анализу изменения функции распределения $P(R)$ частиц одного сорта в пространстве при разных интенсивностях освещения.

Аморфный полупроводник (a-Si:H) освещается стационарно в условиях низкой температуры. Электроны и дырки, рожденные квантами света, захватываются на локализованные состояния.

Фотоносители перемещаются в пространстве посредством туннельных прыжков между локализованными

состояниями с вероятностью, определяемой расстоянием R от одного локализованного состояния до другого локализованного состояния, на которое совершается туннельный прыжок. Времена междупарной рекомбинации и туннельных прыжков определяются соответственно :

$$\tau (R) = \tau_0 \exp (2R/a) \quad (1)$$

$$t (r) = w_0 \exp (2r/a) \quad (2)$$

Здесь r - расстояние между центрами локализации, R - расстояние между электроном и дыркой, a - радиус локализации носителей,

$$\tau_0 = 10^{-8} \text{ с}, w_0 = 10^{12} \text{ с}^{-1}, a = 10 \text{ \AA};$$

Постановка задачи. Целью настоящей работы являлось моделирование на компьютере междупарной рекомбинации при стационарном освещении для построения функции $P(R)$ распределения фотоносителей в пространстве.

Решение задачи компьютерным моделированием. Акт рождения электрона и дырки, при

поглощение твердым телом кванта света, моделировалось на компьютере методом Монте - Карло, в основе которой лежит использование генератора случайных чисел.

В единичный объем вбрасываются частицы двух сортов электроны и дырки. Координаты частиц, определяемые генератором случайных чисел, записываются в память компьютера, только тогда, когда в программе перебираются все возможные вероятности относительно вновь рожденных частиц с учетом формул (1) и (2). Для вновь рожденных фотоносителей существуют две возможности ухода из локализованного состояния, посредством туннельных прыжков и междупарной излучательной рекомбинацией фотоносителя с частицей другого сорта.

Результаты и обсуждение. Распределение частиц в пространстве определяется после достижения стационарной концентрации N фотоносителей, где эквивалентом времени в программе, служит число вбрасываний.

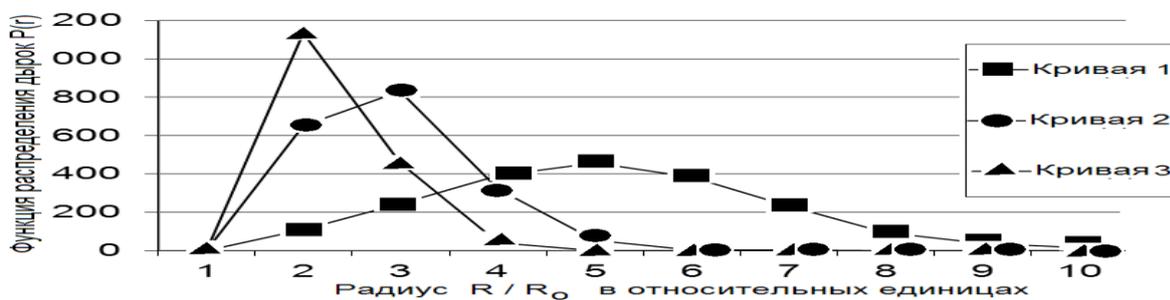


Рис 1. Приведены функции распределения $P(R)$ носителей в пространстве .

Численное моделирование производилось для $N = 2 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ кривая -1,

$N = 2 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ кривая -2 и $N = 2 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$ кривая -3 .

На рисунке приводится зависимость, функции распределения $P(R)$ частиц в

пространстве, от расстояния R между частицами. Для сравнения на рисунке

приведены функции распределения $P(R)$ для разных интенсивностей распределения, для концентрации фотоносителей $N = 2 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ кривая -1, $N = 2 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ кривая -2 и $N = 2 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$ кривая -3. Кривые на рисунке приведены в реальном масштабе без предварительной обработки, количество электронно-дырочных пар в

точках максимума распределения $P(R)$ соответственно $N = 2 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$ кривая -1, $N = 2 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$ кривая -2 и $N = 2 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$ кривая -3.

Функции распределения $P(R)$ частиц в пространстве получены в табличном виде, на следующем рисунке они приводятся с использованием экстраполяции после нормирования.

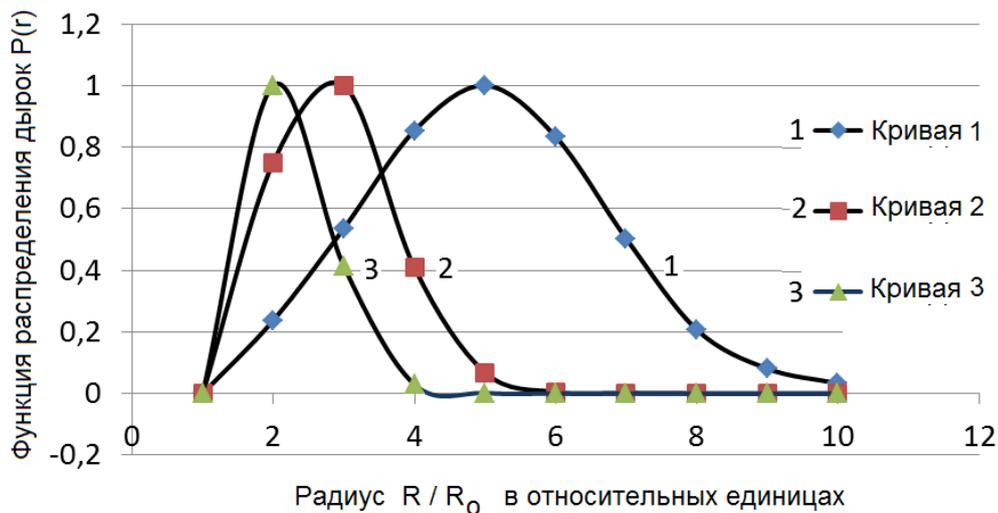


Рис 2. Нормированные функции распределения $P(R)$ носителей в пространстве.

Положение максимума кривых смещены в сторону малых радиусов и полуширина уменьшается 1,9 раз на кривой -2, полуширина уменьшается 3,2 раз на кривой -3 по отношению к кривой -1, рассчитанных для величин интенсивностей возбуждения $N = 2 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ кривая -1, $N = 2 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ кривая -2 и $N = 2 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$ кривая -3.

Положение максимума кривых смещены в сторону малых радиусов и полуширина уменьшается 1,9 раз на кривой -2, полуширина уменьшается 3,2 раз на кривой -3 по отношению к кривой -1, рассчитанных для разных величин интенсивностей возбуждения.

В модели стационарная концентрация N предполагается линейно зависимой от интенсивности освещения I . В работах [7,8] использовалось выражение:

$$N = \tau(R) I \quad (3)$$

где R_N определяется из условия $R_N \sim N^{-1/3}$. Стационарная концентрация фотоносителей N и R_N связаны формулой [7,8]:

$$N = b \cdot R_N \quad (4)$$

В работе [7] распределение фотоносителей в пространстве считалось случайной и при определении стационарной



концентрации фотоносителей N из выражения (3) для b получалось $b = 0,17$.

Расчеты проведенные в [8] показали, что учет пространственной корреляции

в расположение частиц одного сорта приводит к увеличению стационарной концентрации фотоносителей и для b соответственно было получено значение $b = 0,25$.

References:

1. Street R.A. Knights J.C., Biegelsen D.K. «Luminescence studies of plasma-deposited hydrogenated silicon». Phys.Rev.1978. B.18, p.1880-1891
2. Tsang C. And Street R.A. «Recombination in plasma -deposited amorphous Si-H. Luminescence decay.» Phys.Rev.1979 B.19, № 6, p.3027-3040
3. Street R.A. «Luminescence and Recombination in hydrogenated amorphous silicon». Adv.Phys. 1981. 30, №5, p. 593-676.
4. Wilson B.A. HuP. Iedju T.M., Harbison I.P. « Subnanosecond radiative and nonradiative process in a -Si:H ». Phys.Rev.1983 B.28, № 10, p. 5901 -5807.
5. Stearns D.G. «Early photoluminescence decay in a-si;H» Phys.rev.1984 B.30,№10,p.6000-6015.
6. Андреев А.А, Жерздев А. В. Косарев А. И. Шлимак И.С. " Температурное тушение фотолуминесценции в аморфном гидрированном кремнии " ФТП 1986г. в 7, стр. 1292 - 1297.
7. Abdukadyrov, A. G., Baranovsky, S. D., & Ivchenko, E. L. (1990). Низкотемпературные фотолуминесценция и фотопроводимость в нелегированных аморфных полупроводниках. Fizika i Tekhnika Poluprovodnikov, 24(1), 136-143.
8. Барановский С.Д., Ивченко Е.А, Шкловский Б.И " Новый режим тун-нельной рекомбинации фотоносителей в аморфных полупровод-никах." ЖЭТФ 1987г. т.92 Вып 6. стр. 2234 - 2244.
9. Физическая химия вяжущих материалов [Текст] : учеб. / Т. В. Кузнецова, Т. В. Кузнецова, И. В. Кудряшов, В. В. Тимашев. - М. : Высш. шк., 1989. - 383 с. : ил. ; 21 см. - ISBN 5-06-000072-9 : 1.20 p.
10. V.A.Volodin, M.D.Efremov, G.A.Kachurin, S.A.Kochubei, A.G.Cherkov, M.Deutschmann, and N. Baersch. Femtosecond and Nanosecond Laser Pulse Crystallization of Thin a-Si:H Films on Non-Refractory Glass Substrates. Solid State Phenomena, 2008, Vols. 131-133, pp. 479-484.
11. Абдукадыров, А. Г., Сажин, М. И., Селькин, А. В., & Юлдашев, Н. Х. (1990). Поляритонная люминесценция смешанных мод в кристаллах с пространственной дисперсией. Журнал экспериментальной и теоретической физики, 97(2), 644-662.