

Kapitel 4

Modellstudien zum Einfluß von Korngrenzen auf den Ladungsträgertransport

Der im vorangehenden Kapitel entwickelte Formalismus wird im folgenden angewendet, um die Abhängigkeit der Transporteigenschaften des Trapping-Modells von den Materialeigenschaften des Korns und der Korngrenze und den Einfluß von Spannung und Beleuchtung (den äußeren Parametern) im Nichtgleichgewicht zu untersuchen. Unterschiede in der Leitfähigkeit zwischen ballistischem und diffusivem Transport werden demonstriert. Der Schwerpunkt liegt dabei in der einheitlichen Darstellung und der Vergleichbarkeit der Resultate verschiedener Modelle. Ein besonderes Anliegen ist es, anhand von Näherungen die qualitativen Parameterabhängigkeiten des Trapping-Modells aufzuzeigen.

Es wird zunächst ein System identischer Körner betrachtet. Der letzte Abschnitt untersucht dann die Auswirkungen von Unterschieden in der Kornlänge auf die Leitfähigkeit.

In den Modellstudien betrachten wir n-dotiertes Silizium mit der Bandlücke $E_g = 1.12$ eV, der relativen Dielektrizitätskonstanten $\epsilon_r = 11.9$ und den effektiven Massen $m_e^* = 0.93 m$ für Elektronen und $m_h^* = 0.56 m$ für Löcher, wobei m die freie Elektronenmasse ist. Die verwendeten Dotierungen $N_d = 10^{16} \dots 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ sind literaturübliche Werte für Silizium [43, 50]. Mit der Wahl der Kornlängen s im Bereich $20 \dots 100$ nm werden sowohl die mittleren Kornlängen in polykristallinen Dünnschicht-Solarzellen als auch die Ausdehnung der Kristallite und der Säulen in $\mu\text{c-Si}$ erfaßt.

Während die elektronischen Volumeneigenschaften von Si durch die eben erwähnten Materialparameter hinreichend gut charakterisiert sind, ist die elektronische Struktur der Korngrenze experimentell schwer zugänglich. Vor allem die Verteilung der Traps wurde in der Literatur im Zusammenhang mit dem Trapping-Modell ausführlich diskutiert [14, 43, 49]. Eine gegenwärtig allgemein akzep-

tierte Trap-Verteilung für Si findet man in [25]. Hier beschränken wir uns auf zwei Typen: ein einzelnes Niveau in der Mitte der Bandlücke ($E_t = 0.56 \text{ eV}$) und eine gleichmäßige Verteilung über die Bandlücke (vgl. Kap. 3.1.2). Für die Flächendichte der Traps verwenden wir typischerweise $N_t = 2 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ und $1 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$.

Alle Modellrechnungen werden bei Raumtemperatur $T = 300 \text{ K}$ ausgeführt. Zur Beschreibung des Effektes der Beleuchtung orientieren sich die Werte der Aufspaltung der Quasi-Fermi-Niveaus $\Delta E_F = 0 \dots 0.6 \text{ eV}$ und der Generationsrate $G = 10^{15} \dots 10^{22} \text{ cm}^{-3}\text{s}^{-1}$ an der standardisierten Einstrahlungsbedingung AM1.5. Wir nehmen an, daß die in Solarzellen auftretenden Potentialunterschiede über die Distanz einer Kornlänge gering sind und betrachten deswegen überwiegend den Nullspannungs-Fall.

Die sowohl im Gleichgewicht als auch mit Beleuchtung betrachtete Meßgröße ist die Leitfähigkeit. Der Zusammenhang mit den Materialparametern kann über die Höhe der Potentialbarriere und die Breite der Verarmungszone qualitativ erklärt werden. Deswegen befassen sich die folgenden Abschnitte zunächst mit der Parameterabhängigkeit der Barrierenhöhe und der Breite der Verarmungszone.

4.1 Bandkantenprofile im Gleichgewicht

Unsere Untersuchungen basieren alle auf dem in Kap. 3 vorgestellten Formalismus. Zum analytischen Verständnis der Ergebnisse ist es jedoch hilfreich, auch einfache Näherungen zu betrachten. Eine häufig benutzte Näherung ist die *Depletion-Näherung* [51, 52], die wir hier kurz erläutern.

4.1.1 Depletion-Näherung

Wir betrachten eine Anordnung aus identischen Körnern ($n = 1$) und den n -dotierten Halbleiter. Die Dotierung sei so hoch, daß im gesamten Korn die Bedingung

$$n(x), N_d \gg p(x) \quad (4.1)$$

gilt. Der Beitrag der Löcher zur Raumladung ist also vernachlässigbar. Man kann nun zwischen zwei Bereichen im Korn unterscheiden: (i) Der an die Korngrenze unmittelbar angrenzenden, an freien Ladungsträgern stark verarmten Zone, und (ii) dem praktisch neutralen mittleren Teil des Korns. In der Depletion-Näherung geht man davon aus, daß beide Zonen scharf gegeneinander abgegrenzt sind, wobei die Verarmungszone vollständig verarmt ist und der Rest des Korns vollständig neutral. Dementsprechend hat die Ladungsdichteverteilung in der Depletion-Näherung die Form

$$\rho(x) = \begin{cases} eN_d, & |x - x_b| < W, \\ 0 & \text{sonst,} \end{cases} \quad (4.2)$$

wobei x_b die Ortskoordinate der Korngrenze ist und W die Breite der Verarmungszone. Die Donatoren werden dabei als vollständig ionisiert angenommen, $N_d^+ = N_d$. Der Vorteil der Depletion-Näherung liegt darin, daß mit ihr die

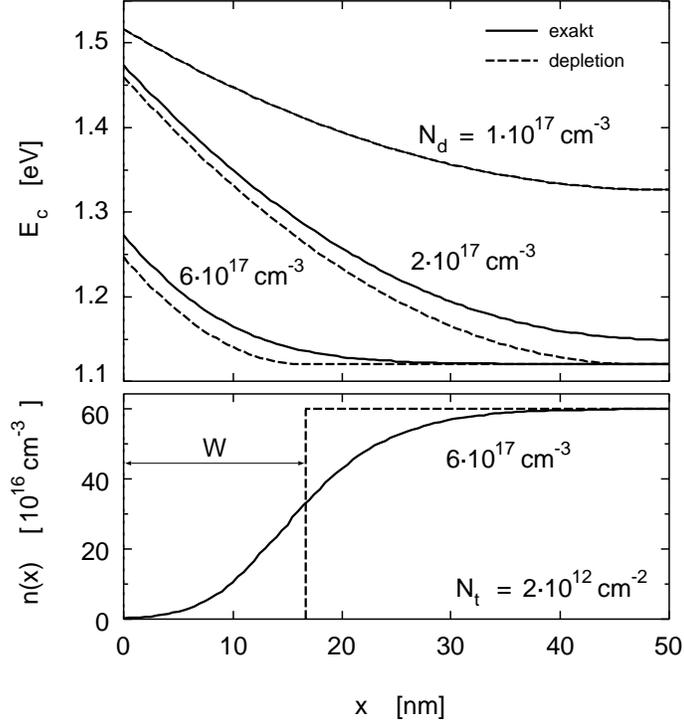


Abbildung 4.1: Vergleich von exakter Lösung und Depletion-Näherung für das Leitungsbandkantenprofil $E_c(x)$ (oberes Bild) und für die Elektronendichte $n(x)$ (unteres Bild). Die Korngrenze liegt bei $x_b = 0$; die Kornlänge s beträgt 100 nm.

Poisson-Gleichung (3.20) analytisch gelöst werden kann.

Wir betrachten den Fall $W \leq s/2$. Da sämtliche freien Ladungsträger der beiden Verarmungszonen links und rechts der Korngrenze in dieser eingefangen sind, gilt für die Flächendichte n_t der in der Korngrenze eingefangenen Ladungsträger

$$n_t = 2WN_d. \quad (4.3)$$

Durch Integration der Poisson-Gleichung (3.20) über den Bereich der Korngrenze ergibt sich

$$\frac{e}{\epsilon} n_t = E'_c(x_b + 0) - E'_c(x_b - 0) \quad (4.4)$$

Im thermischen Gleichgewicht ist wegen der Symmetrie der Anordnung um die Korngrenze

$$E'_c(x_b + 0) = -E'_c(x_b - 0) \quad (4.5)$$

und damit

$$E'_c(x_b + 0) = -\frac{e^2 n_t}{2\epsilon}. \quad (4.6)$$

Durch zweifache Integration der Poisson-Gleichung über die Verarmungszone erhält man den Bandkantenverlauf in Depletion-Näherung zu

$$E_c(x) = \begin{cases} \frac{e^2 N_d}{2\epsilon} (|x - x_b| - W)^2 + E_c, & |x - x_b| \leq W, \\ E_c & \text{sonst} \end{cases} \quad (4.7)$$

(vgl. den oberen Teil der Abb. 4.1).

Die Barrierenhöhe E_b ist die Differenz zwischen der energetischen Lage der Leitungsbandkante an der Korngrenze und in Kornmitte,

$$E_b = E_c(x_b) - E_c(x_b + s/2), \quad (4.8)$$

und in der Depletion-Näherung ergibt sich damit

$$E_b = \frac{e^2 N_d}{2\epsilon} W^2. \quad (4.9)$$

Die Barrierenhöhe hängt also bei festem N_d quadratisch von der Breite der Verarmungszone ab. In Anlehnung an diese Resultate kann man modellunabhängig eine Länge

$$W^* = \frac{n_t}{2 N_d} \quad (4.10)$$

definieren, welche die effektive Breite der Verarmungszone darstellt. In der Depletion-Näherung ist dann $W^* = W$, d.h., gleich der scharf definierten Breite der Verarmungszone.

Den Wert von n_t bzw. W erhält man folgendermaßen: wir gehen von einer räumlich gleichmäßigen Verteilung von Trap-Zuständen mit Flächenkonzentration N_t in der Korngrenze aus, deren energetische Verteilung durch ein einzelnes akzeptorartiges Niveau bei der Energie E_t gegeben ist. Das Fermi-Niveau E_F ist nach Gl. (3.29) durch die Dotierung festgelegt. Mit $n_t = -q_t/e$ sind dann nach Gln. (3.10)–(3.12)

$$n_t = N_t \frac{1}{1 + g e^{\beta(E_t - E_F - e\phi_b)}} \quad (4.11)$$

Ladungsträger in der Korngrenze eingefangen. Das Gleichungssystem (4.3), (4.7) und (4.11) kann nun für $E_c(x_b) = E_c - e\phi_b$ gelöst werden, woraus sich mit Gl. (4.11) der Wert von n_t und damit von W ergibt.

Erhält man bei dieser Rechnung $W > s/2$, so ist die Voraussetzung für die Rechnung nicht erfüllt, es gibt keinen neutralen Bereich; das Korn ist vollständig verarmt. In diesem Fall ist $E_c(x)$ gegeben durch

$$E_c(x) = \frac{e^2 N_d}{2\epsilon} (|x - x_b| - s/2)^2 + E_c(s/2) \quad (4.12)$$

und Gl. (4.3) ist zu ersetzen durch

$$n_t = s N_d \quad (4.13)$$

Aus Gln. (4.11)–(4.13) erhält man dann den Potentialwert $E_c(s/2)$ ($> E_c$) in der Kornmitte.

Der obere Teil von Abb. 4.1 zeigt die Bandverbiegung für die exakte Lösung und in der Depletion-Näherung für $N_t = 2 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ und verschiedene Dotierungen N_d . Ist das Korn vollständig verarmt ($N_d = 2 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$), so stimmt die Depletion-Näherung ausgezeichnet mit der exakten Lösung überein. In diesem Fall sind praktisch alle freien Ladungsträger eingefangen, und die Raumladungsdichte und damit auch der Bandkantenverlauf im Korn sind nahezu identisch. Bei höheren Donator-Konzentrationen tritt in der Depletion-Näherung eine scharfe Grenze zwischen vollständig verarmter und neutraler Zone in der Elektronendichte $n(x)$ auf, die im Falle der exakten Lösung ausgeschmiert ist (vgl. den unteren Teil von Abb. 4.1 für $N_t = 2 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ und $N_d = 6 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$). Hier weicht das Bandkantenprofil $E_c(x)$ in der Depletion-Näherung von dem der exakten Lösung ab, wobei der gemachte Fehler allerdings oft vernachlässigbar ist.

4.1.2 Bandkante an Korngrenze und in Kornmitte: Drei-Bereichs-Bild

Wir betrachten nun den Wert der Bandkante an der Korngrenze und in Kornmitte in Abhängigkeit von der Dotierung N_d , um daraus die Barrierenhöhe berechnen zu können. Wir gelangen dabei zu analytischen Näherungen, anhand derer die Parameterabhängigkeiten der numerischen Ergebnisse gut aufgezeigt werden können.

Bandkante an der Korngrenze

Für die Berechnung der Bandkante an der Korngrenze $E_c(x_b)$ ersetzen wir n_t durch W^* mit Hilfe von Gl. (4.11) und erhalten unter Ausnutzung der Beziehungen

$$e \phi(x_b) = E_c - E_c(x_b), \quad (4.14)$$

$$E_F = E_c - k_B T \ln \frac{N_c}{N_d}, \quad (4.15)$$

und der Gl. (4.11) den Ausdruck

$$\begin{aligned} E_c(x_b) &= 2 E_c - E_t + k_B T \ln \frac{N_t}{N_c s} \\ &+ k_B T \ln \frac{s}{2 W^*} - k_B T \ln g \\ &+ k_B T \ln \left(1 - \frac{g W^* N_d}{N_t} \right). \end{aligned} \quad (4.16)$$

Auf der rechten Seite treten hier bis auf den abgeleiteten Parameter W^* nur vorgegebene Materialparameter auf. In Abb. 4.2 ist der numerisch berechnete Wert von $E_c(x_b)$ als Funktion der Donatorkonzentration aufgetragen. Bemerkenswert ist die geringe Abhängigkeit von $E_c(x_b)$ von der Dotierung bei kleineren Werten von N_d . Der Grund dafür liegt darin, daß das Verhältnis der Korngröße s zur Breite $2W^*$ des verarmten Bereiches nur logarithmisch in Gl. (4.16) eingeht. Für diese Donatorkonzentrationen kann zudem der letzte Term auf der rechten Seite von Gl. (4.16) vernachlässigt werden.

Damit ist bei niedriger Dotierung $E_c(x_b)$ unabhängig von N_d . Andererseits

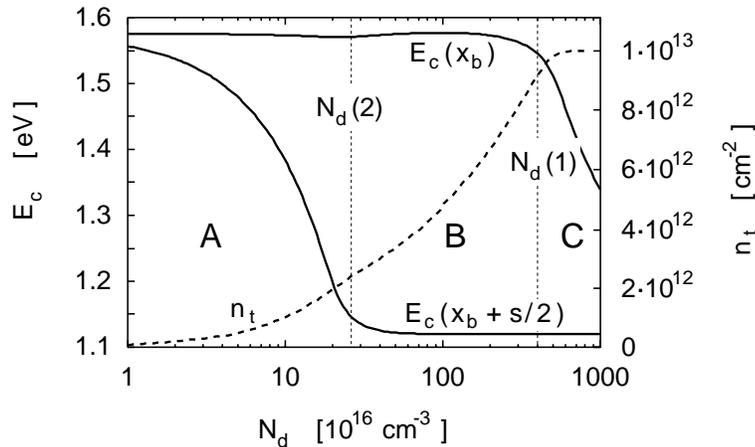


Abbildung 4.2: Abhängigkeit der Bandkantenenergie an der Korngrenze und in Kornmitte von der Dotierung.

sind im Bereich hoher Donatorkonzentrationen alle Trap-Zustände gefüllt, und bei einer Erhöhung von N_d neu hinzukommende Ladungsträger verbleiben daher im Korn. Das führt zu einer erheblichen Dotierungsabhängigkeit von $E_c(x_b)$ in diesem Bereich. Mit der Lösung der Poisson-Gleichung in Depletion-Näherung [vgl. Gl. (4.7)] und unter Berücksichtigung der Vollbesetzung der Trap-Zustände, d.h., $n_t = N_t$, in Gl. (4.10) erhält man

$$E_c(x_b) = \frac{e^2 N_t^2}{8 \epsilon} \frac{1}{N_d} + E_c. \quad (4.17)$$

Die Bereichsgrenze $N_d(1)$ zwischen den Bereichen der vollen und teilweisen Verarmung folgt näherungsweise aus dem Gleichsetzen der rechten Seiten von Gl. (4.17) und Gl. (4.16), wobei die dotierungsabhängigen Terme in Gl. (4.16) vernachlässigt werden. Wir erhalten daraus

$$N_d(1) \approx \frac{e^2 N_t^2}{8 \epsilon} \frac{1}{E_c - E_t - k_B T \ln(N_c s / N_t)}. \quad (4.18)$$

Bandkante in der Kornmitte

Im Bereich kleiner Donator-Konzentrationen sind alle freien Ladungsträger in der Korngrenze eingefangen. Mit Hilfe der Depletion-Näherung kann über Gl. (4.12) die Bandkante $E_c(x_b + s/2)$ in Kornmitte bestimmt werden:

$$E_c(x_b + s/2) = E_c(x_b) - \frac{e^2 s^2}{8 \epsilon} N_d . \quad (4.19)$$

Mit zunehmender Dotierung wird hiernach $E_c(x_b + s/2)$ kleiner, bis ein Bereich erreicht wird, wo dieser Wert auf E_c herabgesunken ist, so daß in der Kornmitte Ladungsträgerneutralität herrscht,

$$E_c(x_b + s/2) = E_c . \quad (4.20)$$

Freie Ladungsträger befinden sich jetzt auch im Korn, aber die Trap-Zustände in der Korngrenze sind noch nicht vollständig gefüllt. Die Lage der Grenze $N_d(2)$ zwischen beiden Bereichen erhält man aus Gl. (4.19) mit der Bedingung $E_c(x_b + s/2) = E_c$:

$$N_d(2) = \frac{8 \epsilon}{e^2 L^2} [E_c(x_b) - E_c] . \quad (4.21)$$

Durch die Grenzwerte $N_d(1)$ und $N_d(2)$ wird die Skala der Donatorkonzentration in drei Bereiche eingeteilt (vgl. Abb. 4.2). Im Bereich *A* variiert nur $E_c(x_b + s/2)$, im Bereich *C* variiert nur $E_c(x_b)$, und im Bereich *B* sind beide Größen konstant. Die sich daraus gemäß Gl. (4.8) ergebende Abhängigkeit der Barrierenhöhe E_b von der Dotierung N_d ist in Abb. 4.3 für verschiedene Trap-Zustandsdichten N_t dargestellt: mit wachsendem N_d steigt diese im Bereich *A* an, bleibt annähernd konstant im Bereich *B* und fällt wieder ab im Bereich *C*.

Konstante Verteilung der Traps

Statt der bisher angenommenen δ -Verteilung (3.12) der Trap-Zustände in der Korngrenze betrachten wir nun eine konstante Zustandsdichte-Verteilung über einen Bereich von E_1 bis E_2 ,

$$D(E) = \begin{cases} \frac{N_t}{E_2 - E_1}, & E_1 \leq E \leq E_2, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (4.22)$$

Man kann nun analog wie im Falle eines einzelnen Niveaus davon ausgehen, daß alle freien Ladungen in einem Bereich der Breite W^* zu beiden Seiten der Korngrenze eingefangen sind. Die Anzahl der eingefangenen Ladungsträger ist nach Gl. (3.11) gegeben durch

$$n_t = \frac{N_t}{E_2 - E_1} \int_{E_1}^{E_2} dE \frac{1}{1 + g e^{\beta [E - E_c + E_c(x_b) - E_F]}} . \quad (4.23)$$

Die Auswertung des Integrals führt dann auf

$$n_t = N_t \frac{k_B T}{E_2 - E_1} \ln \frac{1 + g^{-1} e^{-\beta[E_1 - E_c + E_c(x_b) - E_F]}}{1 + g^{-1} e^{-\beta[E_2 - E_c + E_c(x_b) - E_F]}}. \quad (4.24)$$

In den in unseren Rechnungen verwendeten Parameterbereichen können in Gl. (4.24) für

$$\begin{aligned} E_1 &\leq E_v + \frac{1}{3} E_g, \\ E_2 &\geq E_v + \frac{1}{2} E_g \end{aligned} \quad (4.25)$$

im Zähler die "1" und im Nenner der Exponentialterm vernachlässigt werden

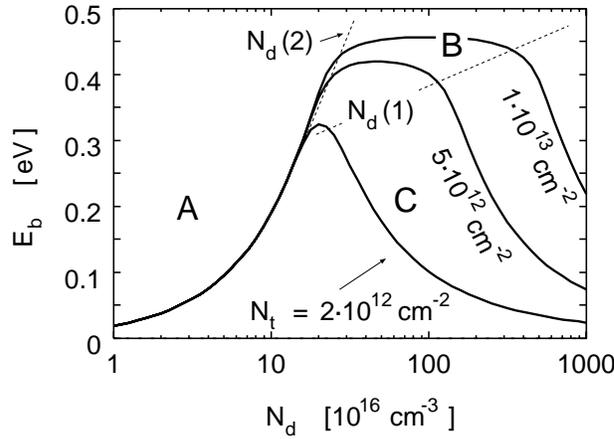


Abbildung 4.3: Barrierenhöhe E_b als Funktion der Dotierung N_d für verschiedene Trap-Zustandsdichten N_t .

und man erhält

$$n_t = \frac{N_t}{E_2 - E_1} [E_c - E_1 - E_c(x_b) + E_F - k_B T \ln g]. \quad (4.26)$$

Analog zum Fall des einzelnen Trap-Niveaus erhält man damit für die Leitungsbandkante an der Korngrenze:

$$E_c(x_b) = 2 E_c - E_1 - \frac{2 W^* N_d}{N_t} (E_2 - E_1) - k_B T \ln \frac{N_c}{N_d} - k_B T \ln g. \quad (4.27)$$

Die Breite der Verarmungszone W^* geht hier allerdings nicht logarithmisch, sondern linear ein. Deswegen kann die Änderung von W^* als Funktion von N_d im Bereich des Maximums der Barrierenhöhe und bei höheren Donator-Konzentrationen nicht mehr vernachlässigt werden. Die Verhältnisse liegen jetzt nicht mehr so einfach wie in Abb. 4.2 dargestellt.

4.2 Einfluß der Materialparameter auf die Barrierenhöhe

4.2.1 Einfluß der Kornparameter

Dotierung

Abbildung 4.3 zeigt die Barrierenhöhe E_b [vgl. Gl. (4.8)] als Funktion der Dotierung N_d für verschiedene Trap-Zustandsdichten N_t . Man sieht, daß die Ausdehnung des Bereiches B stark unterschiedlich sein kann. Für $N_t = 2 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ beispielsweise ist dieser bereits hinreichend klein, so daß die Abhängigkeit der Barrierenhöhe allein durch Bereich A (alle freien Elektronen des Kornes sind in der Korngrenze eingefangen) unterhalb einer kritischen Dotierung N_d^* und durch den Bereich C (alle Traps sind voll besetzt) oberhalb davon beschrieben werden kann. Dieser Fall entspricht dem von *Seto* in Ref. [16] beschriebenen Modell. Hier liegt die maximale Barrierenhöhe bei

$$N_d^* = N_t/s \quad (4.28)$$

und kann mit Hilfe von Gl. (4.17) zu

$$E_b^{\max} = \frac{e^2}{8\epsilon} N_t s \quad (4.29)$$

berechnet werden.

Korngröße

Das Produkt aus Dotierung und Korngröße bestimmt die Zahl der freien Ladungsträger je Flächeneinheit. Bei kleinerer Korngröße sind daher erst bei entsprechend höheren Donator-Konzentrationen genügend Ladungsträger vorhanden, um die Trap-Niveaus zu füllen, und der Bereich B wird zu höheren Dotierungen hin verschoben. Dies kann anhand der Ausdrücke für die Bereichsgrenzen $N_d(1)$ und $N_d(2)$ gezeigt werden: vernachlässigt man diejenigen Terme in Gl. (4.18) und Gl. (4.21), in welche die Korngröße nur logarithmisch eingeht, so ist

$$N_d(2) \propto 1/s^2, \quad N_d(1) \approx \text{const.} \quad (4.30)$$

Der Bereich B wird also enger; bei hinreichend kleinem Bereich B liegt das Barrierenmaximum bei

$$N_d^* = \frac{N_t}{s}. \quad (4.31)$$

Die Trap-Zustände sind annähernd voll besetzt, und man erhält für das Barrierenhöhe-Maximum aus Gl. (4.17)

$$E_b^{\max} \propto \frac{1}{N_d^*}. \quad (4.32)$$

Abbildung 4.4 zeigt die Barrierenhöhe als Funktion der Dotierung für verschiedene Korngrößen s .

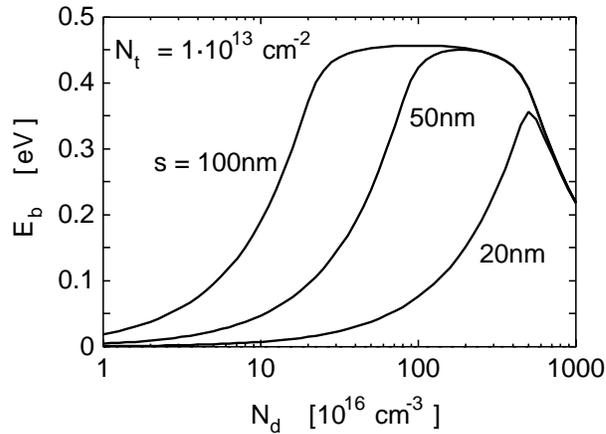


Abbildung 4.4: Barrierenhöhe als Funktion der Dotierung N_d für verschiedene Korngrößen s .

4.2.2 Einfluß der Korngrenzenparameter

Dichte der Trap-Zustände

Bei kleinen Werten der Trap-Dichte N_t sind im Korn genügend freie Ladungsträger vorhanden, um das Trap-Niveau vollständig aufzufüllen, und das System befindet sich im Bereich *C*. Ist andererseits N_t groß, so sind je nach Dotierung N_d die freien Ladungen alle in der Korngrenze eingefangen (Bereich *A*) oder auf Korn und Korngrenze verteilt (Bereich *B*). Abbildung 4.5 zeigt die Abhängigkeit der Barrierenhöhe von N_t für zwei unterschiedliche Dotierungen. Das

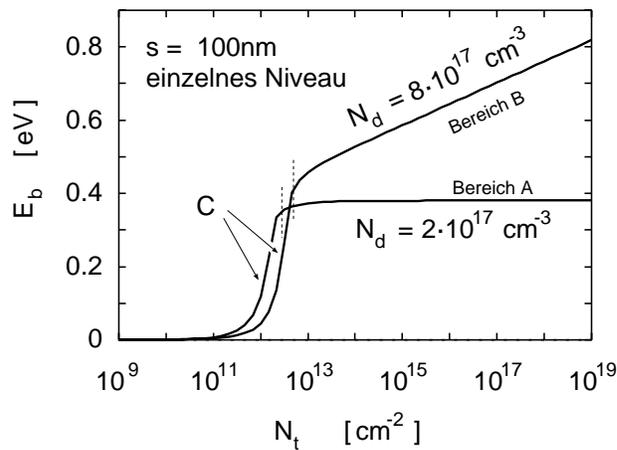


Abbildung 4.5: Barrierenhöhe als Funktion der Trap-Zustandsdichte N_t .

unterschiedliches Verhalten der beiden Kurven bei großem N_t ist dadurch bedingt, daß sich die untere im Bereich *A* und die obere im Bereich *B* befindet. Im Bereich *A* sind unabhängig von N_t alle freien Ladungsträger in der Korngrenze

eingefangen, das Korn ist völlig verarmt und die Krümmung des Bandkantenprofils in der Raumladungszone ändert sich nicht mit wachsendem N_t ; also bleibt auch die Barrierenhöhe E_b konstant. Im Bereich B steigt hingegen nach Gl. (4.16) die Barrierenhöhe logarithmisch mit N_t an,

$$E_b \propto k_B T \ln N_t. \quad (4.33)$$

Im Bereich C hängt die Barrierenhöhe nach Gl. (4.17) quadratisch von N_t ab,

$$E_b = \frac{e^2}{8 \epsilon N_d} N_t^2. \quad (4.34)$$

Man beachte den Einfluß der Dotierung in Gl. (4.34), der für den unterschiedlichen Verlauf von E_b in Abb. 4.5 verantwortlich ist.

Lage des Trap-Niveaus

Wir betrachten zunächst den Fall geringer Ausdehnung von Bereich B (vgl. Abb. 4.6). Verschiebt sich die Lage des Trap-Niveaus zu niedrigeren Energien hin (d.h., in Richtung der Valenzbandkante), so wird der Bereich B zunehmend kleiner und die maximale Barrierenhöhe steigt an. Grenzen die Bereiche A und C unmittelbar aneinander (der Bereich B verschwindet), so bildet sich dort das Barrierenhöhen-Maximum in Form einer Spitze aus. Dieser Grenzfall entspricht dem in Ref. [16] beschriebenen Fall.

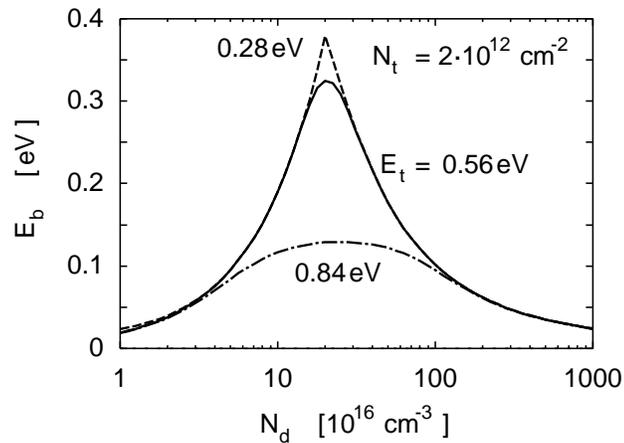


Abbildung 4.6: Barrierenhöhe als Funktion der Donatorkonzentration für verschiedene Lage des Trap-Niveaus.

Allgemein verschiebt sich das Maximum der Barrierenhöhe nur unwesentlich bei Änderung der Lage des Trap-Niveaus E_t . Höhe und Form der Spitze hingegen hängen stark von E_t ab. Im Bereich B ändert sich die Barrierenhöhe proportional zu $E_c(x_b)$. Nach Gl. (4.16) hat daher ein um ΔE_t verschobenes Trap-Niveau eine Änderung der Barrierenhöhe ΔE_b im Bereich B um

$$\Delta E_b = -\Delta E_t \quad (4.35)$$

zur Folge.

Konstante Zustandsdichte-Verteilung

Abbildung 4.7 zeigt den Verlauf der Barrierenhöhe als Funktion der Donator-Konzentration N_d für den Fall einer konstanten Trap-Zustandsdichte-Verteilung über die gesamte Bandlücke ($E_1 = E_v$, $E_2 = E_c$). Im Vergleich zu dem Fall eines einzelnen Trap-Niveaus nach Abb. 4.3 zeigt sich, daß sich hier kein Bereich B mit typisch plateauförmigem Verlauf der Barrierenhöhe ausbildet.

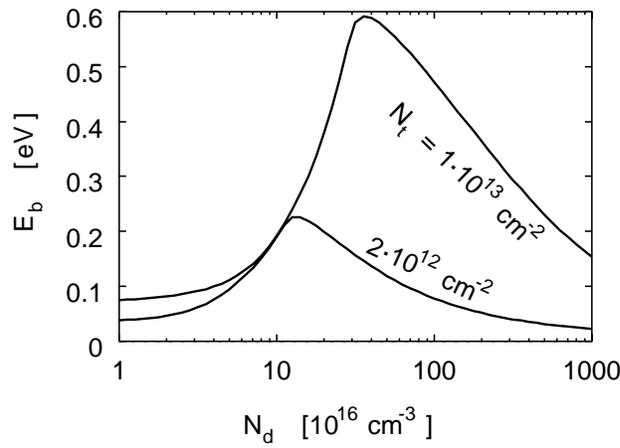


Abbildung 4.7: Barrierenhöhe als Funktion der Dotierung bei konstanter Trap-Zustandsdichte-Verteilung über die gesamte Bandlücke.

Im Gegensatz zum einzelnen Niveau in der Mitte der Bandlücke liegen bei konstanten Trap-Zustandsdichte-Verteilungen ein großer Teil der Energie-Niveaus selbst bei kleinen Werten von N_d unterhalb des Fermi-Niveaus. Gibt es nicht genügend freie Ladungsträger, um diese Niveaus zu besetzen, so muß das Bandkantenprofil $E_c(x_b)$ an der Korngrenze hoch genug sein, damit infolge der Bandverbiegung nur die besetzten Energieniveaus unterhalb des Fermi-Niveaus liegen. Dann ist jedoch der Beitrag der Löcher zur Raumladung nicht mehr zu vernachlässigen und unsere Näherungen sind nicht mehr anwendbar.

4.3 Photogeneration von Ladungsträgern

Durch Beleuchtung werden im Korn Ladungsträgerpaare zusätzlich zu den bereits im Gleichgewicht vorhandenen erzeugt. In den hier betrachteten Modellen rekombinieren diese an der Korngrenze, und es stellt sich ein stationärer Zustand ein, wenn Generations- und Rekombinationsrate gleich groß sind. Der Stromfluß zur Korngrenze führt zu einer Verbiegung der beiden Quasi-Fermi-Niveaus

$E_F^{e,h}(x)$ in der Umgebung der Korngrenze, deren Maximum

$$\delta E_F^{e,h} = |E_F^{e,h}(x_b) - E_F^{e,h}(x_b + s/2)| \quad (4.36)$$

beträgt. Bei hoher Ladungsträger-Konzentration oder kleinem Rekombinationsstrom sind die beiden Quasi-Fermi-Niveaus annähernd flach mit einer konstanten Aufspaltung ΔE_F (Quasi-Gleichgewicht [29]).

Im folgenden Abschnitt geben wir im Quasi-Gleichgewicht Näherungen für den Fall eines einzelnen Trap-Niveaus an, mit deren Hilfe sich einige Eigenschaften des Trapping-Modells unter Beleuchtung gut darstellen lassen. Besonderheiten bei Verwendung einer konstanten Zustandsdichte-Verteilung werden ebenfalls aufgezeigt. Der darauf folgende Abschnitt befaßt sich dann mit der Beschreibung des Nichtgleichgewichts im stationären Zustand unter Benutzung des Drift-Diffusions-Modells.

4.3.1 Quasi-Gleichgewicht

Barrierrhöhe

Wir betrachten den Einfluß der Beleuchtung für ein einzelnes Trap-Niveau E_t mit N_t Trap-Zuständen und gehen dabei von der in Ref. [29] beschriebenen Besetzungsstatistik nach Gl. (3.18) aus. Wir verwenden weiter die Formulierung für das thermische Gleichgewicht (3.10) und ersetzen den statistischen Faktor g durch einen effektiven statistischen Faktor $g_{\text{eff}}(E_t)$ [vgl. Gl. (3.19)],

$$g_{\text{eff}}(E_t) = g \frac{n(x_b) c_e + \tilde{p}(E_t) c_h e^{\beta \Delta E_F}}{n(x_b) c_e + \tilde{p}(E_t) c_h} ; \quad (4.37)$$

hierbei ist nach Gl. (3.1) und Gl. (3.16)

$$n(x_b) = N_d e^{\beta(E_c(x_b) - E_c)} \quad (4.38)$$

und

$$\tilde{p}(E_t) = g^{-1} \frac{n_i^2}{N_c} e^{-\beta(E_t - E_v)}, \quad (4.39)$$

wobei wir die intrinsische Konzentration n_i , definiert durch $n_i^2 = n(x) p(x)$, verwendet haben. Kann der Term $n(x_b) c_e$ im Zähler von Gl. (4.37) vernachlässigt werden, wie dies durch Wahl eines genügend großen Wertes von ΔE_F immer möglich ist, so erhält man

$$g_{\text{eff}}(E_t) \approx g \frac{e^{\beta \Delta E_F}}{1 + n(x_b) c_e / [\tilde{p}(E_t) c_h]} . \quad (4.40)$$

Einsetzen des effektiven statistischen Faktors $g_{\text{eff}}(E_t)$ anstelle von g in Gl. (4.16) ergibt den Wert der Leitungsbandkante an der Korngrenze unter Beleuchtung:

$$E_c^{(\text{ill})}(x_b) = E_c(x_b) + k_B T \ln \left(1 + \frac{n(x_b) c_e}{\tilde{p}(E_t) c_h} \right) - \Delta E_F . \quad (4.41)$$

Bei kleiner Donatorkonzentration und hinreichend hoher Barrierenhöhe ist $n(x_b)$ klein und wir haben

$$\frac{n(x_b) c_e}{\tilde{p}(E_t) c_h} \ll 1 . \quad (4.42)$$

Dann ist $E_c^{(\text{ill})}(x_b)$ von N_d unabhängig und nimmt mit der Aufspaltung des Quasi-Fermi-Niveaus ΔE_F linear ab. Ist hingegen

$$\frac{n(x_b) c_e}{\tilde{p}(E_t) c_h} \gg 1 , \quad (4.43)$$

so erhält man aus Gl. (4.41) mit

$$\frac{n(x_b) c_e}{\tilde{p}(E_t) c_h} = g \frac{c_e}{c_h} \frac{N_d N_c}{n_i^2} e^{-\beta[E_c^{(\text{ill})}(x_b) - E_t]} \gg 1 \quad (4.44)$$

für den Wert der Leitungsbandkante an der Korngrenze

$$\begin{aligned} E_c^{(\text{ill})}(x_b) = E_c &+ \frac{1}{2} k_B T \ln \frac{N_t}{n_i s} + \frac{1}{2} k_B T \ln \frac{N_d}{n_i} \\ &+ \frac{1}{2} k_B T \ln \frac{s}{2 W^*} - \frac{1}{2} k_B T \ln \frac{c_h}{c_e} \\ &- \frac{1}{2} \Delta E_F . \end{aligned} \quad (4.45)$$

Bemerkenswert ist, daß in dieser Näherung die Lage des Trap-Niveaus nicht unmittelbar eingeht, jedoch eine logarithmische Abhängigkeit von der Dotierung vorhanden ist.

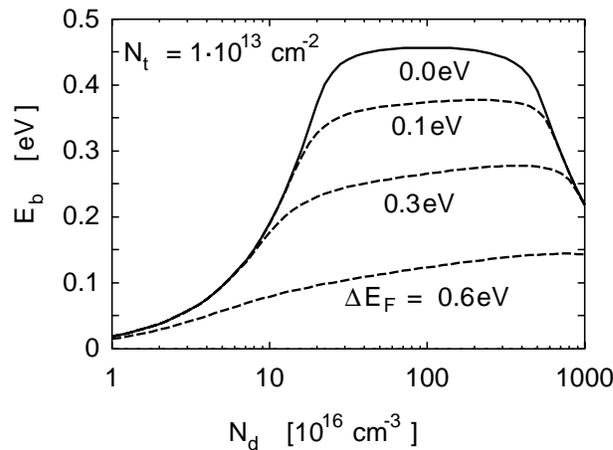


Abbildung 4.8: Barrierenhöhe als Funktion der Donatorkonzentration bei unterschiedlicher Quasi-Fermi-Niveau-Aufspaltung ΔE_F .

Abbildung 4.8 zeigt die Barrierenhöhe als Funktion der Donator-Konzentration bei unterschiedlicher Aufspaltung ΔE_F des Quasi-Fermi-Niveaus. Mit zunehmender Aufspaltung wird der Bereich *B* größer und die Barrierenhöhe nimmt ab. Der plateauartige Verlauf der Barrierenhöhe im Bereich *B* weist bei Beleuchtung einen zusätzlichen Anstieg mit der Dotierung auf. Bei höheren Werten von ΔE_F ist dieser Anstieg nach Gl. (4.45) proportional zu $\ln(N_d/n_i)$.

In den Bereichen *A* und *C* ist die Barrierenhöhe unabhängig von der Beleuchtung. Dies ist auch aus Abb. 4.9 zu entnehmen, wo die Barrierenhöhe als Funktion der Aufspaltung des Quasi-Fermi-Niveaus dargestellt ist.

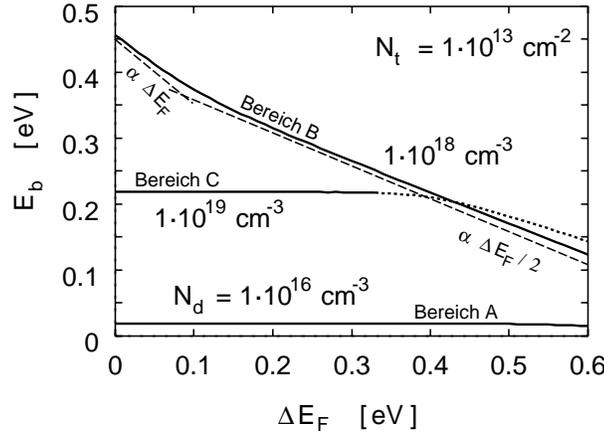


Abbildung 4.9: Barrierenhöhe als Funktion der Aufspaltung des Quasi-Fermi-Niveaus für die drei Bereiche *A*, *B* und *C*.

Im Bereich *A* sind alle freien Ladungen in der Korngrenze eingefangen, die Ladungsdichte $\rho(x)$ in der Raumladungszone ist damit unabhängig von ΔE_F , und damit auch die Barrierenhöhe E_b . Da im Bereich *C* unabhängig von ΔE_F alle Traps gefüllt sind, hat dort ΔE_F ebenfalls keinen Einfluß auf die Barrierenhöhe. Erst wenn der Beitrag der Löcher zur Raumladungszone nicht mehr vernachlässigt werden kann, gibt es in diesen Bereichen eine Abhängigkeit von der Aufspaltung des Quasi-Fermi-Niveaus.

Die Abhängigkeit der Barrierenhöhe von der Quasi-Fermi-Niveau-Aufspaltung ist bei kleinem ΔE_F im Bereich *B* durch Gl. (4.41) und bei großem ΔE_F durch Gl. (4.45) gegeben, entsprechend den asymptotisch an die Kurven in Abb. 4.9 angelegten Tangenten.

Bei den von hier betrachteten Dotierungen verbleibt das Quasi-Fermi-Niveau der Elektronen E_F^e auf dem Wert des Fermi-Niveaus im thermischen Gleichgewicht, während das Quasi-Fermi-Niveau der Löcher sich um ΔE_F ändert:

$$\begin{aligned} E_F^e &= E_F, \\ E_F^h &= E_F - \Delta E_F. \end{aligned} \quad (4.46)$$

Die Löcherkonzentration an der Korngrenze ist gegeben durch

$$p(x_b) = N_v e^{-\beta[E_F^h - E_v(x_b)]}. \quad (4.47)$$

Bei kleiner Aufspaltung ΔE_F verringert sich E_F^h um ΔE_F , während $E_v^{(ill)}(x_b) = E_c^{(ill)}(x_b) - E_g$ nach Gl. 4.41 um denselben Betrag abnimmt. Die Löcherkonzentration an der Korngrenze ist daher bei kleinen Werten von ΔE_F konstant. Dies gilt jedoch nur, wenn die Bedingung Gl. (4.42) erfüllt ist, also bei kleiner Elektronenkonzentration $n(x_b)$ an der Korngrenze. Diese Bedingung ist in Abb. 4.10 für $N_d = 1 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ allerdings nicht mehr gut erfüllt.

Gemäß Abb. 4.10 ist bei kleinen Werten von ΔE_F die Löcherkonzentration $p(x_b)$ annähernd konstant während die Elektronenkonzentration $n(x_b)$ hier exponentiell ansteigt; bei großer Aufspaltung hängt das Verhältnis von Elektronen- und Löcherkonzentration jedoch nur geringfügig von ΔE_F ab [53, 54]:

$$\frac{n(x_b)}{p(x_b)} \approx \text{const.} \quad (4.48)$$

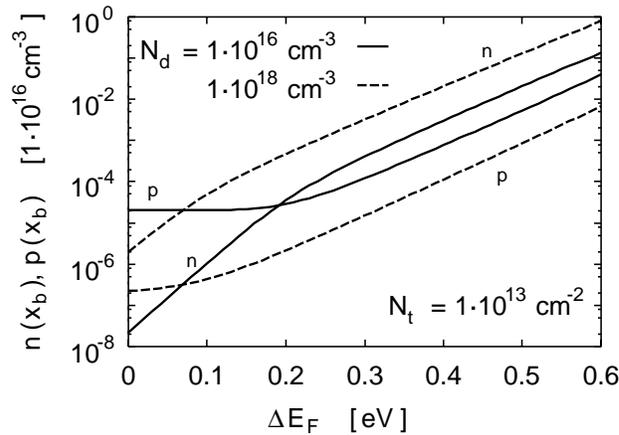


Abbildung 4.10: Elektronen- und Löcherkonzentration an der Korngrenze als Funktion der Aufspaltung des Quasi-Fermi-Niveaus für zwei verschiedene Dotierungen.

Legt man eine konstante Zustandsdichte-Verteilung zugrunde, so ändert sich nach Abb. 4.11 das Barrierenhöhen-Profil signifikant mit der Beleuchtung. Ähnlich wie beim Einzelniveau ist bei niedriger und hoher Dotierung die Barrierenhöhe unabhängig von der Beleuchtung. Die Abnahme der Barrierenhöhe mit

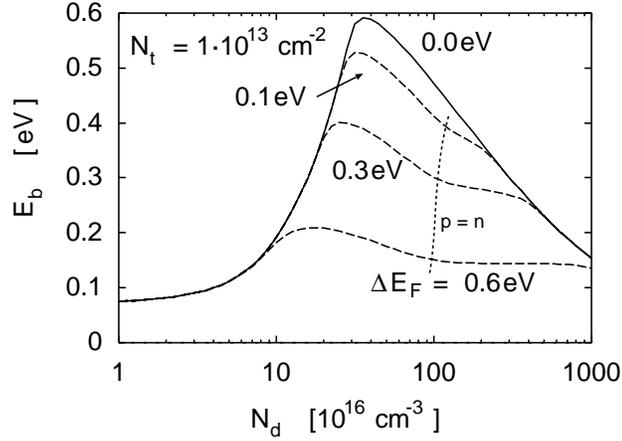


Abbildung 4.11: Barrierenhöhe als Funktion der Dotierung für verschiedene Größe der Quasi-Fermi-Niveau-Aufspaltung.

der Dotierung verringert sich ab dem Punkt $p(x_b) = n(x_b)$ bis zum Ende des beleuchtungsabhängigen Bereichs. Durch das Überangebot von Elektronen ab diesem Punkt erhöht sich die Besetzungswahrscheinlichkeit der Akzeptor-Niveaus vor allem in der Mitte der Bandlücke. Die Erhöhung der Besetzungswahrscheinlichkeit wirkt der Verringerung von $E_c^{(ill)}(x_b)$ mit wachsendem N_d entgegen, daher wird die Abnahme der Barrierenhöhe mit N_d geringer.

Rekombinationsrate

In der Näherung flacher Quasi-Fermi-Niveaus läßt sich die Rekombinationsrate direkt als Funktion der Quasi-Fermi-Niveau-Aufspaltung an der Korngrenze untersuchen. Mit den Beziehungen

$$n_i^2 = \tilde{n}(E) \tilde{p}(E) \quad (4.49)$$

und

$$n(x) p(x) = n_i^2 e^{\beta \Delta E_F} \quad (4.50)$$

kann die SRH-Rekombinationsrate nach Gl. (3.14) in der Form

$$S_{\text{SRH}}(E) = c_e c_h n_i^2 \frac{e^{\beta \Delta E_F} - 1}{[n + \tilde{n}(E)] c_e + [p + \tilde{p}(E)] c_h} \quad (4.51)$$

geschrieben werden. Für große Werte von $E_c(x_b)$ und niedrige Dotierungen gilt $n \ll p$, und im Nenner von Gl. (4.51) kann n vernachlässigt werden. Man sieht unter Berücksichtigung von Gl. (4.50), daß $S_{\text{SRH}}(E)$ mit der Elektronenkonzentration zunimmt. Im Bereich *A* und in Teilen von *B* ist dies gleichbedeutend mit einer Zunahme der Rekombinationsrate $S_{\text{SRH}}(E)$ mit der Dotierung N_d . Im Bereich *C* gilt $p \ll n$, und analog dazu nimmt $S_{\text{SRH}}(E)$ mit N_d ab. Das eben besprochene Verhalten gilt auch für konstante Zustandsdichte-Verteilungen.

Abbildung 4.12 zeigt den Verlauf der Rekombinationsrate für ein einzelnes Trap-Niveau und eine konstante Zustandsdichte-Verteilung als Funktion der Dotierung. Ist die Aufspaltung des Quasi-Fermi-Niveaus wesentlich größer als $k_B T$,

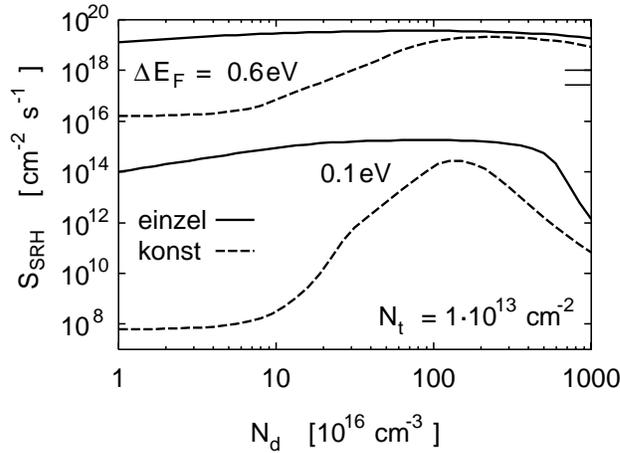


Abbildung 4.12: Rekombinationsrate als Funktion der Dotierung für ein einzelnes Trap-Niveau und eine konstante Zustandsdichte-Verteilung bei unterschiedlicher Aufspaltung der Quasi-Fermi-Niveaus.

so dominiert im Zähler von Gl. (4.51) der Exponentialterm, und die Rekombinationsrate steigt exponentiell mit der Aufspaltung ΔE_F an. Allerdings ändern sich dadurch auch $E_c^{(ill)}(x_b)$ und damit die Ladungsträgerkonzentrationen p und n , so daß die Rekombinationsrate nach Abb. 4.13 nicht allein durch den Exponentialterm bestimmt ist.

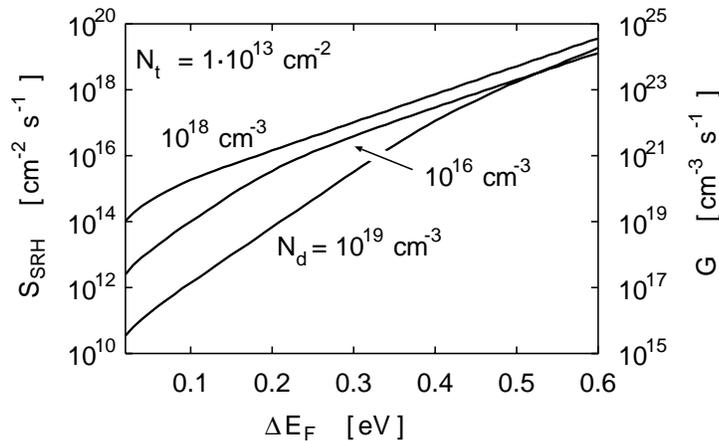


Abbildung 4.13: Abhängigkeit der Rekombinationsrate S_{SRH} (und der Generationsrate G) von der Aufspaltung des Quasi-Fermi-Niveaus an der Korngrenze.

Maximale Verbiegung des Quasi-Fermi-Niveaus

Um die Güte der Näherung flacher Quasi-Fermi-Niveaus abzuschätzen, betrachten wir die maximale Verbiegung $\delta E_F^{e,h}$ [vgl. Gl. (4.36)] in Abhängigkeit von der Rekombinationsrate. Je geringer die maximale Verbiegung im Vergleich zur Aufspaltung ist, desto besser ist die Näherung der flachen Quasi-Fermi-Niveaus gerechtfertigt.

Wir vernachlässigen die Volumenrekombination. Der aus dem Korn in die Korngrenze fließende Rekombinationsstrom der Löcher ist dann gegeben durch

$$j_h = e G s/2. \quad (4.52)$$

Den Stromtransport beschreiben wir im Drift-Diffusions-Modell nach Gl. (3.59):

$$j_h(x) = \mu p(x) \frac{d}{dx} E_F^h(x). \quad (4.53)$$

Der Rekombinationsstrom fließt symmetrisch von der Kornmitte in Richtung Korngrenze und wächst infolge der Generationsrate monoton an. Man erhält eine obere Grenze der Verbiegung der Quasi-Fermi-Niveaus, indem man

$$j_h(x) = j_h = \text{const.} \quad (4.54)$$

setzt. Aus Gl. (4.53) findet man durch einfache Integration

$$\frac{j_h}{\mu} \int_{x_b}^{x_b+s/2} \frac{1}{p(x)} dx = E_F^h(x_b + s/2) - E_F^h(x_b). \quad (4.55)$$

Zusammen mit der in Gl. (4.71) definierten Nullspannungs-Leitfähigkeit für Löcher erhält man somit

$$\delta E_F^h = \frac{e j_h s}{2 \sigma_{dd-h}}. \quad (4.56)$$

Wegen

$$j_h = \frac{1}{2} e S_{SRH} \quad (4.57)$$

ergibt sich schließlich

$$\delta E_F^h = \frac{e^2 s}{4 \sigma_{dd-h}} S_{SRH}. \quad (4.58)$$

Der Faktor 1/2 in Gl. (4.57) berücksichtigt den Umstand, daß wir nur eine Kornhälfte betrachtet haben.

Abbildung 4.14 zeigt die maximale Bandverbiegung des Quasi-Fermi-Niveaus der Löcher als Funktion der Dotierung bei verschiedener Quasi-Fermi-Niveau-Aufspaltung. Im Rahmen der gemachten Näherungen treten für δE_F auch Werte viel größer als E_g auf. Diese Werte sind unphysikalisch und zeigen, daß insbesondere die Annahme flacher Niveaus zu grob ist.

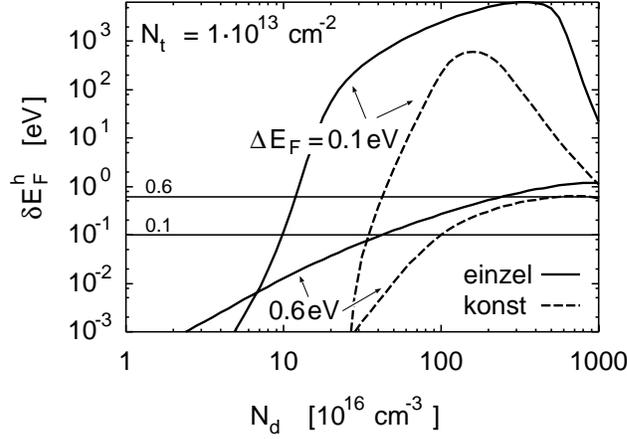


Abbildung 4.14: Maximale Verbiegung des Loch-Quasi-Fermi-Niveaus als Funktion der Dotierung für zwei unterschiedliche Werte von ΔE_F .

Bei niedriger Dotierung (Bereiche *A* und *B* für ein einzelnes Niveau in der Trap-Zustandsdichte-Verteilung) wird der Anstieg von δE_F^h durch die Abnahme der Löcherkonzentration im Korn mit zunehmender Dotierung verursacht. Die Abnahme der Löcherkonzentration bedeutet kleinere Leitfähigkeit σ_{dd-h} und damit größeres δE_F^h . Der Anstieg von δE_F^h bei $N_d \approx 2 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ gibt die Verringerung der Löcher-Leitfähigkeit σ_{dd-h} in diesem Bereich wieder. Die Abnahme von δE_F^h bei hohen Dotierungen wird gemäß Abb. 4.12 durch die kleinere Rekombinationsrate und dem damit verbundenen kleineren Rekombinationsstrom j_h verursacht.

Soll die Näherung flacher Quasi-Fermi-Niveaus anwendbar sein, so muß die Verbiegung der Niveaus wesentlich kleiner als deren Aufspaltung sein,

$$\delta E_F \ll \Delta E_F. \tag{4.59}$$

Das Quasi-Fermi-Niveau der Elektronen kann wegen der erheblich größeren Zahl an freien Ladungsträgern in den hier betrachteten Fällen als flach angenommen werden. Die Anwendbarkeit der Näherung wird demnach in erster Linie durch die Verbiegung des Loch-Quasi-Fermi-Niveaus bestimmt. Diese ist unter folgenden Bedingungen gering: *(i)* vergleichsweise hohe Löcherkonzentration im verarmten Korn; *(ii)* starke Beleuchtung – die damit einhergehende stärkere Aufspaltung des Quasi-Fermi-Niveaus führt ebenfalls zu höheren Löcherkonzentrationen und der damit verbundenen größeren Leitfähigkeit; *(iii)* konstante Trap-Zustandsdichte-Verteilung – die Rekombinationsrate in Trap-Zuständen, die näher an den Bandkanten liegen, ist geringer, und dementsprechend ist der Rekombinationsstrom kleiner als im Fall eines einzelnen Niveaus bei gleicher Zahl an Trap-Zuständen.

4.3.2 Nichtgleichgewicht im stationären Zustand

Wir lassen nun die Annahme des Quasi-Gleichgewichts mit flachen Quasi-Fermi-Niveaus fallen und betrachten das Nichtgleichgewicht im stationären Zustand anhand der Drift-Diffusions-Gleichungen (3.63) und (3.64) aus Kap. 3.

Die durch Photogeneration erzeugten freien Leitungsbandelektronen fließen zur Korngrenze und rekombinieren dort mit den gleichfalls erzeugten Löchern, die im Valenzband ebenfalls zur Korngrenze wandern. Beide Ströme werden durch die Verbiegung der Quasi-Fermi-Niveaus hervorgerufen. Entsprechend dem Stromfluß zur Korngrenze ist der Abstand der Quasi-Fermi-Niveaus von den zugehörigen Bandkanten an der Korngrenze größer als in Kornmitte. Wegen der erheblich größeren Ladungsträger-Konzentration im Leitungsband kann das Quasi-Fermi-Niveau der Elektronen als flach angesehen werden. Wir beschränken uns also auf die Betrachtung des Loch-Quasi-Fermi-Niveaus.

Die Beleuchtung wird durch eine homogene Generationsrate G berücksichtigt. Aus der Ratengleichung

$$G = R(x) \quad (4.60)$$

erhält man durch Integration über die Korngrenze von $x_b - s/2$ bis $x_b + s/2$ die Rekombinationsrate

$$S_{\text{SRH}} = G \cdot s, \quad (4.61)$$

wobei angenommen ist, daß die Rekombination nur in der Korngrenze stattfindet,

$$R(x) = S_{\text{SRH}} \delta(x - x_b). \quad (4.62)$$

In Abwesenheit einer äußeren Spannung fließt in Kornmitte (dem Rand des Integrationsbereiches) aus Symmetriegründen kein Strom, so daß sich die Kontinuitätsgleichung (3.31) auf die Ratengleichung (4.60) reduziert. Die Rekombination ist mit einer Quasi-Fermi-Niveau-Aufspaltung ΔE_F am Ort der Korngrenze verbunden. Aus Abb. 4.13 ist für flache Fermi-Niveaus ersichtlich, daß für eine Generationsrate $G = 10^{15} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$ bei $N_d = 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ die Aufspaltung sehr gering ist. Dies entnimmt man auch dem Verlauf der Quasi-Fermi-Niveaus in Abb. 4.15. Es gibt jedoch eine merkliche Aufspaltung in Kornmitte. Das rechte Bild von Abb. 4.15 zeigt einen typischen Verlauf von E_F^h für eine Aufspaltung des Quasi-Fermi-Niveaus von 0.4 eV an der Korngrenze. Generationsrate und Größe der Aufspaltung sind konsistent mit den in der Näherung flacher Quasi-Fermi-Niveaus erhaltenen Werten (vgl. Abb. 4.13).

Die Verbiegung des Loch-Quasi-Fermi-Niveaus findet überwiegend im Bereich der Raumladungszone statt. Ausgehend vom Rand der Raumladungszone nimmt die Löcherkonzentration in Richtung der Korngrenze zu. Dies erklärt die Abflachung von E_F^h an der Korngrenze. Der starke Anstieg im Randbereich der Raumladungszone folgt der Bandverbiegung der Leitungsbandkante und wirkt so einer höheren Löcherkonzentration entgegen. Für die Höhe der Verbiegung läßt sich aus Abb. 4.14 eine obere Grenze angeben. Insbesondere im Bereich A

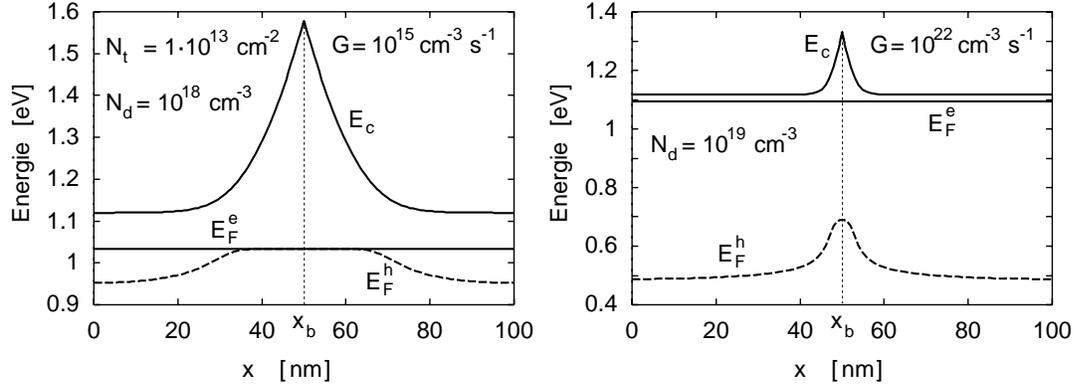


Abbildung 4.15: Verbiegung des Loch-Quasi-Fermi-Niveaus bei kleiner und großer Quasi-Fermi-Niveau-Aufspaltung an der Korngrenze.

ist sie so klein, daß dort die Näherung flacher Quasi-Fermi-Niveaus gut erfüllt ist.

Die zwei betrachteten Fälle haben wir so gewählt, daß sich die Barrierenhöhe nur unwesentlich mit der Aufspaltung ändert (Bereich C) bzw. die Aufspaltung an der Korngrenze zu gering ist, um eine Änderung in der eingefangenen Ladung hervorzurufen. Trotz erheblicher Verbiegung von E_F^h stimmen Barrierenhöhe und Aufspaltung mit den Rechnungen für flache Quasi-Fermi-Niveaus überein. Dies ist dadurch zu erklären, daß die Löcherkonzentrationen zu gering sind, um einen merklichen Beitrag zur Raumladung zu liefern. Die Elektronen-Leitfähigkeit ist daher in der Näherung flacher Quasi-Fermi-Niveaus hinreichend gut beschrieben.

4.4 Leitfähigkeit

Wir definieren die an einer periodischen Anordnung identischer Körner ($n = 1$) anliegende Spannung V als Differenz des Fermi-Niveaus in benachbarten Körnern (aus Symmetriegründen ist der Spannungsabfall an jedem Korn gleich groß):

$$eV = E_F(x + s) - E_F(x). \quad (4.63)$$

Welche Stelle x als Referenzpunkt für die Spannung genommen wird, ist wegen der Periodizität gleichgültig; wir wählen aus praktischen Gründen die Kornmitte. Ebenso ist es unwesentlich, welches der Quasi-Fermi-Niveaus wir heranziehen, falls diese nicht zusammenfallen. Hier beziehen wir uns immer auf das der Elektronen. Besteht unsere Anordnung aus N identischen Körnern, an der eine Gesamtspannung V_{ges} anliegt, so ist der Spannungsabfall an dem einzelnen Korn gegeben durch

$$V = V_{\text{ges}}/N, \quad (4.64)$$

so daß bei polykristallinen Materialien mit geringer Korngröße der Spannungsabfall je Korn im allgemeinen gering ist.

Aufgrund der Differenz im Fermi-Niveau fließen Ladungsträger von Stellen höheren Fermi-Niveaus zu solchen tieferen Fermi-Niveaus. Die resultierende Stromdichte hängt vom Transportmechanismus ab. Wir vergleichen in diesem Abschnitt die Mechanismen der thermionischen Emission (TE), der thermionischen Feldemission (TFE) und der Drift-Diffusion (DD) anhand der Leitfähigkeit im Grenzfall kleiner Spannungen (Nullspannungs-Leitfähigkeit). Unter dem Begriff der Leitfähigkeit verstehen wir hier die über ein Korn gemittelte Leitfähigkeit

$$\sigma = \frac{j s}{V}. \quad (4.65)$$

Die Berechnung der Nullspannungs-Leitfähigkeiten ist einfach, da sie unmittelbar aus dem Bandkantenverlauf im Gleichgewicht bzw. stationären Zustand unter Beleuchtung berechnet werden können. Am Ende dieses Abschnittes folgt dann ein Vergleich mit den bei endlichen Spannungen berechneten Leitfähigkeiten.

In der Praxis ist insbesondere die gesamte Leitfähigkeit

$$\sigma_{\text{ges}} = \sigma_{\text{h}} + \sigma_{\text{e}} \quad (4.66)$$

von Interesse. Erwartungsgemäß dominiert die Leitfähigkeit der Elektronen wegen ihrer großen Dichte als Majoritätsträger. Jedoch können im verarmten Korn auch die Minoritäten die gesamte Leitfähigkeit bestimmen.

4.4.1 Grenzfall kleiner Spannung

Ballistischer Mechanismus

Im ballistischen Grenzfall gehen wir vom Nullspannungs-Leitwert g in Gl. (3.43) aus. Mit Gl. (4.65) erhält man die Nullspannungs-Leitfähigkeit $\sigma_{\text{ball}} = g \cdot s$ der Elektronen zu

$$\sigma_{\text{ball}} = \frac{1}{4} e^2 \beta s v_{\text{th}} n(x_{\text{b}} + s/2) \overline{\mathcal{T}}(x_{\text{b}} + s/2). \quad (4.67)$$

Im klassischen Fall (thermionische Emission, TE) ist die thermisch gemittelte Transmissionswahrscheinlichkeit nach Gl. (3.40) gegeben durch

$$\overline{\mathcal{T}}_{\text{TE-e}}(x_{\text{b}} + s/2) = e^{-\beta E_{\text{b}}}, \quad (4.68)$$

wobei wir Gl. (4.8) verwendet haben. Das Bandkantenprofil ist symmetrisch zur Korngrenze, und die Transmissionswahrscheinlichkeit ist unabhängig von der Stromrichtung. Für die thermionische Feldemission verwenden wir die aus dem Bandkantenprofil im Nullspannungs-Fall berechnete Transmissionswahrscheinlichkeit nach Gl. (3.53).

Es bleibt noch anzumerken, daß das ballistische Transportmodell nur bei Vorhandensein einer Potentialbarriere angewendet werden kann, hier also nur für die Elektronen im Leitungsband.

Drift-Diffusions Mechanismus

Zur Bestimmung der Nullspannungs-Leitfähigkeit im Drift-Diffusions-Modell gehen wir vom Drift-Diffusions-Strom nach Gl. (3.62) aus:

$$j(x) = \mu c(x) \frac{d}{dx} E_F(x). \quad (4.69)$$

Die Stromdichte $j(x)$ darf hier neben einer durch die Spannung V verursachten Stromdichte noch zusätzlich aus einer durch Beleuchtung hervorgerufenen Rekombinationsstromdichte bestehen. Während durch den ersten Anteil die Ladungsträger über die Korngrenze ins benachbarte Korn wandern, kommen die Ladungsträger des zuletzt erwähnten Anteils nur bis zur Korngrenze und rekombinieren dort. Für $V \rightarrow 0$ ist der Verlauf der Rekombinationsstromdichte anti-symmetrisch zur Korngrenze. Integriert man Gl. (4.69) von $x_b - s/2$ bis $x_b + s/2$, so liefert diese folglich keinen Beitrag zum Integral. Da die durch V verursachte Stromdichte konstant ist, kann Gl. (4.69) einfach integriert werden und man erhält unter Berücksichtigung von

$$eV = 2[E_F(x_b + s/2) - E_F(x_b)] \quad (4.70)$$

für die Null-Spannungs-Leitfähigkeit im Drift-Diffusions Mechanismus

$$\sigma_{dd} = \frac{1}{2} e \mu s \left[\int_{x_b}^{x_b+s/2} \frac{dx}{c(x)} \right]^{-1}. \quad (4.71)$$

Hierbei haben wir berücksichtigt, daß aus Symmetriegründen rechts und links der Korngrenze jeweils die halbe Spannung abfällt. Für die Ladungsträgerkonzentration $c(x)$ und Mobilität μ sind in Gl. (4.71) für das Valenz- und Leitungsband die jeweiligen Werte einzusetzen.

Abbildung 4.16 zeigt die Nullspannungs- Leitfähigkeit der Elektronen als Funktion der Dotierung. Man sieht, daß im Drift-Diffusionsmodell die Leitfähigkeit um bis zu zwei Größenordnungen über der des klassischen ballistischen Modells liegt und annähernd parallel dazu verläuft. Bei Drift-Diffusion gehen wegen der endlichen mittleren freien Weglänge die Streuprozesse über die Mobilität μ in die Strom-Spannungscharakteristik mit ein. Insbesondere ist μ stark von der Dotierung abhängig. Diese Abhängigkeit wurde durch experimentell angepaßte Näherungen nach [67] in unseren Rechnungen mit berücksichtigt. Es ist also zu erwarten, daß die Leitfähigkeiten der beiden Modelle voneinander verschieden sind.

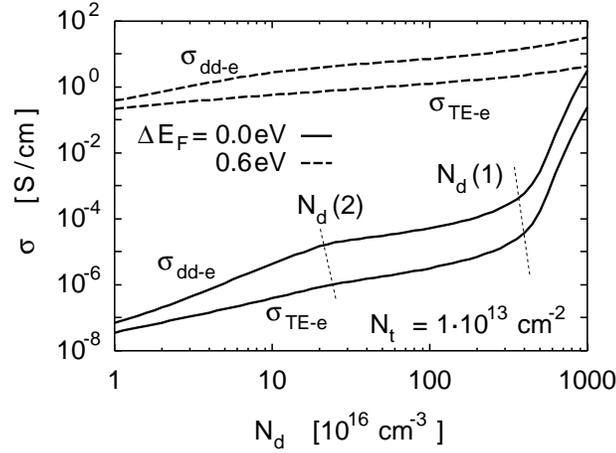


Abbildung 4.16: Vergleich der Nullspannungs-Leitfähigkeiten der Elektronen für Drift-Diffusion und thermionischen Emission bei $\Delta E_F = 0$ (Dunkelleitfähigkeit) und $\Delta E_F = 0.6 \text{ eV}$ (Photoleitfähigkeit).

Die Leitfähigkeit steigt immer monoton mit der Dotierung an. Im Verlauf der Dunkelleitfähigkeit sind die Bereichsgrenzen $N_d(1)$ und $N_d(2)$ deutlich zu erkennen. Für $N_d < N_d(2)$ steigt mit zunehmender Dotierung die Barrierenhöhe nach Abb. 4.3 stark an, die Leitfähigkeit nimmt jedoch trotzdem zu. Aus Abb. 4.2 ist ersichtlich, daß in diesem Bereich $E_c(x_b + s/2)$ stark abnimmt, die Ladungsträger-Konzentration in Kornmitte und damit im gesamten Korn zunimmt. Dieses Verhalten stimmt mit der Zero-Bias Leitfähigkeit nach Gl. (4.67) überein. Der starke Anstieg der Leitfähigkeit für $N_d > N_d(1)$ (Bereich C) wird durch den Rückgang der Barrierenhöhe in diesem Bereich verursacht.

Bei Beleuchtung nimmt die Barrierenhöhe im Bereich B ab (in Abb. 4.16 für $\Delta E_F = 0.6 \text{ eV}$ der gesamte Dotierungsbereich) und damit ändert sich die Barrierenhöhe mit der Dotierung weniger stark. Dies hat eine geringere Abhängigkeit der Leitfähigkeit von der Dotierung unter Beleuchtung zur Folge.

Transmission an der Potentialbarriere

Neben dem ballistischen Transport über die Potentialbarriere können Elektronen mit einer Energie unterhalb des Barrierenmaximums die Barriere durch den Tunneleffekt überwinden. Die thermisch gemittelte Transmissionswahrscheinlichkeit \bar{T} wird dadurch erhöht (thermionische Feldemission, TFE). Nach Abb. 4.17 ist in unserem Parameter-Bereich die Transmissionswahrscheinlichkeit nur etwa um einen Faktor 5 größer als im klassischen Fall. Der Effekt bezüglich der Leitfähigkeit ist gegenüber den Auswirkungen durch Parameter-Variationen gering.

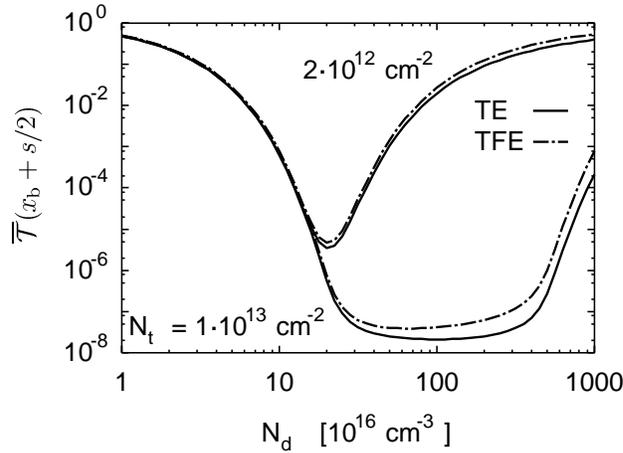


Abbildung 4.17: Transmissionswahrscheinlichkeit der Streuung eines einzelnen Leitungsband-Elektrons an der Potentialbarriere mit (TFE) und ohne (TE) Tunnelanteil.

Gesamtleitfähigkeit

Die Elektronen-Leitfähigkeit in den Bereichen B und C ist infolge der hohen Elektronenkonzentration groß gegenüber der Löcher-Leitfähigkeit. Selbst mit Beleuchtung ist der Einfluß der Löcher auf die Leitfähigkeit gering. Im verarmten Korn hingegen muß der Beitrag der Minoritäten zur Gesamtleitfähigkeit mit berücksichtigt werden. Abb. 4.18 zeigt die Leitfähigkeit in den beiden Bändern für ein einzelnes Niveau und konstante Trap-Zustandsdichte-Verteilung. Da für dieselbe Zahl an Trap-Zuständen im verarmten Korn $E_c(x_b)$ bei konstanter Trap-Zustandsdichte-Verteilung wesentlich höher liegt als beim einzelnen Niveau, sind in diesem Fall auch weniger freie Elektronen und mehr Löcher im Korn vorhanden. Dies zeigt sich an der wesentlich kleineren Elektronen-Leitfähigkeit und der erhöhten Löcher-Leitfähigkeit. Beim verarmten Korn liegt die Löcher-Leitfähigkeit um bis zu zwei Größenordnungen über der des Leitungsbandes.

4.4.2 Endliche Spannung

Wir geben die angelegte Spannung als Potentialdifferenz im Quasi-Fermi-Niveau der Elektronen über eine Weglänge s vor und berücksichtigen den Stromfluß im Rahmen des Drift-Diffusionsmodells. Abb. 4.19 zeigt die Verhältnisse an der Korngrenze bei einer Spannung von $V = 0.1$ V. Wegen der hohen Potentialbarriere und der großen Zahl von Leitungsband-Elektronen ist das Quasi-Fermi-Niveau bis auf den Bereich um die Korngrenze nahezu konstant, wogegen beim Löcher-Quasi-Fermi-Niveau fast die gesamte Spannung außerhalb der Raumladungszone abfällt. Bedingt durch die Bandverbiegung ist die Löcherkonzentration in der Raumladungszone wesentlich größer, sodaß dort das Quasi-Fermi-

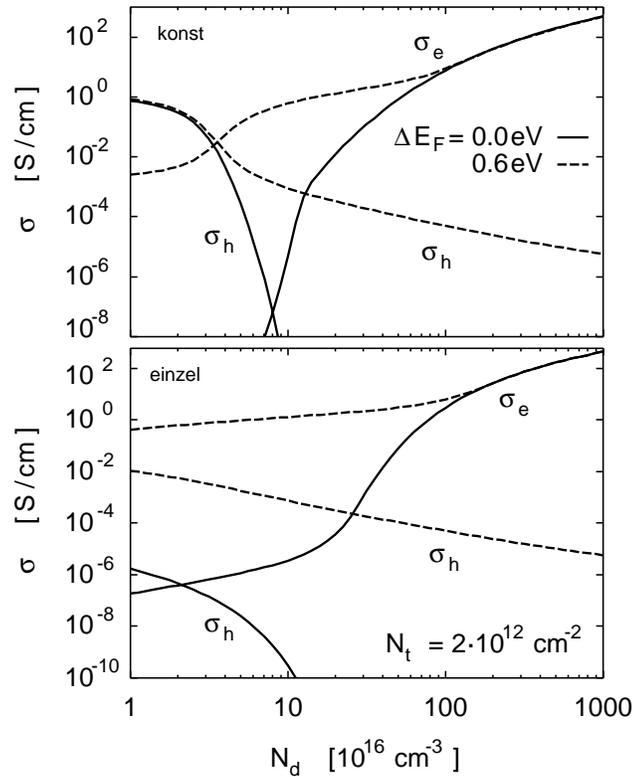


Abbildung 4.18: Vergleich der Dunkel- und Photoleitfähigkeit für konstante Trap-Zustandsdichte-Verteilung und ein einzelnes Niveau.

Niveau nahezu flach verläuft.

Da im Korn voraussetzungsgemäß keine Erzeugung von Elektron-Loch-Paaren stattfindet, erfolgt auch keine Rekombination in der Korngrenze, es muß daher $\Delta E_F(x_b) = 0$ sein und die Stromdichte in beiden Bändern ist konstant. Der Abfall von E_F^h erfolgt asymmetrisch zur Korngrenze, da rechts davon der Abstand des Quasi-Fermi-Niveaus zur Leitungsbandkante infolge des Potentialabfalls größer, die Elektronenkonzentration kleiner und infolgedessen $|dE_F^h/dx|$ wesentlich steiler ausfallen muß. Ein analoges Argument läßt sich im Randbereich der Raumladungszone für das Löcher-Quasi-Fermi-Niveau anführen. Wird der Abfall von E_F^h idealisiert nur auf den Ort der Korngrenze beschränkt, so entspricht dies dem Resultat des ballistischen Transportes über die Korngrenze.

Liegt das Fermi-Niveau der Korngrenze trotz angelegter Spannung weiterhin höher als das Trap-Niveau, so ändert sich die eingefangene Ladung nicht. Die Stromdichte im Leitungsband steigt bei höheren Spannungen exponentiell mit der Spannung an.

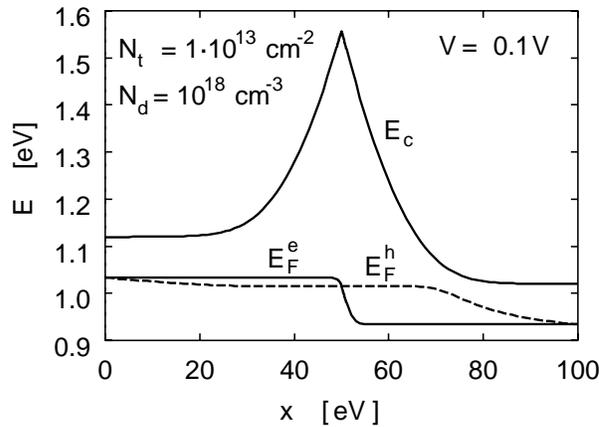


Abbildung 4.19: Bandverbiegung und Profil der Quasi-Fermi-Niveaus bei endlicher Spannung.

4.5 Mehrkorn-Systeme

4.5.1 Bandkantenprofil

Die bisherigen Betrachtungen in diesem Kapitel bezogen sich auf eine periodische Anordnung identischer Körner ($n = 1$). Die Korn- und Korngrenzenparameter können jedoch auch von Korn zu Korn und Korngrenze zu Korngrenze variieren. Wir beschränken uns im folgenden auf Fluktuationen in der Korngröße s .

Als Beispiel betrachten wir eine periodische Anordnung von vier Körnern ($n = 4$) mit einer mittleren Korngröße \bar{s} . Das dritte Korn in jedem dieser periodischen Abschnitte habe die vom Mittel abweichende Größe s_3 , d.h., jedes vierte Korn der Anordnung ist kleiner als die anderen. Die Größe der restlichen dann durch $s_i = (4\bar{s} - s_3)/3$, $i = 1, 2, 4$, gegeben.

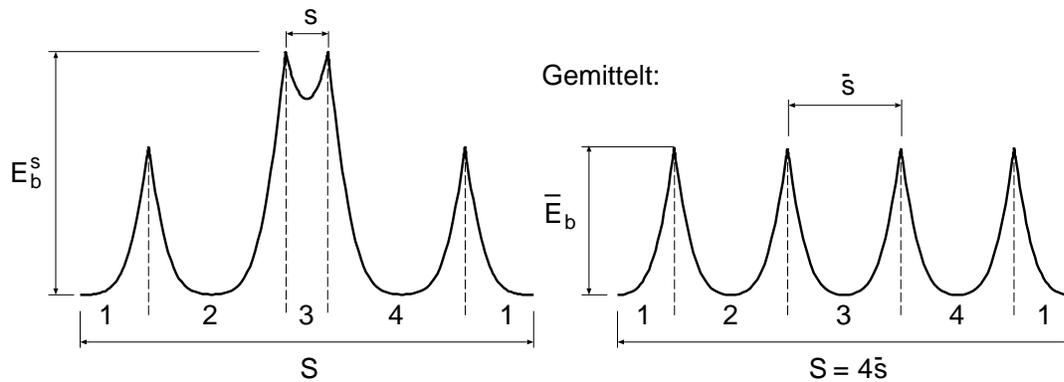


Abbildung 4.20: Leitungsbandkantenprofil von Körnern einer mittleren Größe $\bar{s} = 80$ nm, wobei jedes vierte Korn nur die Größe $s = 30$ nm hat.

Abbildung 4.20 zeigt ein derartiges Leitungsbandkantenprofil. Die Parameter sind so gewählt, daß das kleinere Korn verarmt ist (Bereich A), während die übrigen Körner nur teilweise verarmt sind (Bereich C). Es ist deutlich zu erkennen, daß die an das kleinere Korn angrenzende Potentialbarriere um den Faktor 1.65 überhöht ist. Dies läßt eine drastische Verringerung der Leitfähigkeit gegenüber dem Fall identischer Körner erwarten.

Abschätzung der Barrierenüberhöhung

Wir betrachten ein einzelnes Trap-Niveau in der Korngrenze. Liegt das Fermi-Niveau von Korngrenze 2 und 3 trotz der wesentlich stärkeren Bandverbiegung energetisch höher als das Trap-Niveau, so sind alle Trap-Zustände vollständig gefüllt. Unter den gemachten Voraussetzungen ist die Überhöhung der Potentialbarriere E_b^s/\bar{E}_b im Rahmen der Depletion-Näherung analytisch berechenbar. Nimmt man an, daß alle Körner die gleiche Größe \bar{s} haben, so sei die Breite der Verarmungszone durch \bar{W} gegeben. Da auch in diesem Fall die Trap-Zustände vollständig gefüllt sind, muß aus Gründen der Ladungserhaltung

$$2\bar{W} = W_2 + W_3 \quad (4.72)$$

gelten, wobei W_2 die Depletion-Zone in Korn 2 ausgehend von Korngrenze 2 und W_3 die Depletion-Zone in Korn 3 ausgehend von Korngrenze 2 ist (vgl. die linke Seite der Abb. 4.20). Voraussetzungsgemäß ist Korn 3 vollständig verarmt, so daß $W_3 = s_3/2$ ist. In der Depletion-Näherung ist die Barrierenhöhe proportional dem Quadrat der Verarmungszonen-Breite, so daß gilt

$$\frac{E_b^s}{\bar{E}_b} = \left(\frac{W_2}{\bar{W}}\right)^2. \quad (4.73)$$

Aus Gl. (4.72) und Gl. (4.73) erhält man für die Überhöhung der Potentialbarriere im kleinen Korn

$$\frac{E_b^s}{\bar{E}_b} = 4 - 2\frac{s_3}{\bar{W}} + \frac{1}{4}\left(\frac{s_3}{\bar{W}}\right)^2 = 4 - 2\frac{s_3}{\bar{W}}\left(1 - \frac{s_3}{8\bar{W}}\right). \quad (4.74)$$

Da Korn 3 vollständig und die anderen Körner nur teilweise verarmt sind, muß zusätzlich die Bedingung $s_3 \leq 2\bar{W}$ erfüllt sein. Man sieht daraus, daß eine durch den Korngrößen-Effekt überhöhte Potentialbarriere nicht größer als die vierfache Barrierenhöhe eines gemittelten Kornes werden kann.

Für unser Beispiel in Abb. 4.20 beträgt die mittlere Korngröße $\bar{s} = 80$ nm, Dotierung $N_d = 4 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ und die Trap-Dichte $N_t = 10^{13} \text{ cm}^{-2}$. Für $s_3 = 30$ nm erhält man eine Überhöhung um den Faktor 1.96. Wegen der im Rahmen der Depletion-Näherung gemachten Fehler ist dieser Wert allerdings etwas zu hoch gegenüber dem exakten Wert 1.65.

4.5.2 Nullspannungs-Leitfähigkeit

Abbildung 4.21 zeigt die Null-Spannungs-Leitfähigkeit als Funktion der Größe von Korn 3. Man sieht, daß für ein System von Körnern der mittleren Größe $\bar{s} = 80 \text{ nm}$ mit jedem vierten Korn von der Größe s die Leitfähigkeit für $s < 30 \dots 50 \text{ nm}$ um bis zu zwei Größenordnungen geringer ist als in einem System identischer Körner.

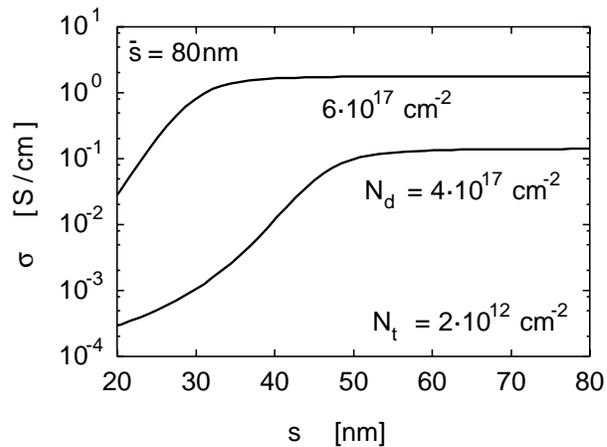


Abbildung 4.21: Änderung der Leitfähigkeit mit der Variation der Korngröße. Jedes vierte Korn hat die Länge s . Die mittlere Korngröße beträgt $\bar{s} = 80 \text{ nm}$.