

# Kapitel 3

## Theoretische Beschreibung des Ladungsträgertransports über Korngrenzen

In diesem Kapitel wird die theoretische Beschreibung des Ladungsträgertransports über Korngrenzen im Rahmen des eindimensionalen Trapping-Modells dargestellt. Dabei wird eine möglichst allgemeine Formulierung angestrebt, die alle wesentlichen Parameterabhängigkeiten umfaßt und die damit auch die systematische Untersuchung von Transporteigenschaften unter Bedingungen gestattet, wie sie für photovoltaische Anwendungen typisch sind. Insbesondere werden Ladungsträgergeneration im Volumen und Rekombination in den Korngrenzen berücksichtigt. Wir betrachten Systeme (“Mehrkorn-Systeme”), die aus mehreren Körnern zusammengesetzt sind, wobei die Eigenschaften der einzelnen Körner genauso wie die der sie trennenden Korngrenzen verschieden sein können. Als Transportmechanismen werden sowohl der ballistische Mechanismus für rein klassische Bewegung (“thermionische Emission”) und unter Berücksichtigung von quantenmechanischen Effekten (“thermionische Feldemission”) als auch der Drift-Diffusions-Mechanismus betrachtet. In dem in Kap. 5 behandelten einheitlichen Transportmodell treten diese beiden Mechanismen als Grenzfälle auf.

### 3.1 Trapping-Modell für Mehrkorn-Systeme

Polykristallines Material besteht aus unterschiedlich großen, unregelmäßig geformten Kristalliten (“Körnern”), die an den Grenzflächen, den Korngrenzen, aneinandergesetzt sind. Das einfachste Modell für solch ein Material besteht aus regelmäßig angeordneten Quadern mit ebenen Grenzflächen. Wir nehmen an, daß der Ladungsträgertransport längs einer Richtung ( $x$ -Achse) erfolgt, die senkrecht zu einer der Grenzflächen ist. Ferner seien die Körner in den zur  $x$ -Achse senkrechten Richtungen hinreichend weit ausgedehnt, so daß Randeffekte keine wesentliche Rolle spielen. Unter diesen Voraussetzungen ist die eindimen-

sionale Beschreibung des Transports gerechtfertigt (vgl. Kap. 2.3.2). Für unsere Zwecke, d.h., für die vergleichende Untersuchung verschiedener Modelle und Mechanismen, ist der Rückgriff auf die eindimensionale Beschreibung allerdings auch notwendig. Eine zwei- oder dreidimensionale Beschreibung ist nur in isolierten Einzelfällen vorstellbar.

### 3.1.1 Volumeneigenschaften der Körner

Wir nehmen an, daß die Volumeneigenschaften der einzelnen Körner im Rahmen des in Kap. 2.2.1 dargestellten Zweiband-Modells des Halbleiters adäquat beschrieben werden. Zudem beschränken wir uns auf den nichtentarteten Fall, so daß die Besetzungsstatistik der Bänder durch die Boltzmann-Statistik gegeben ist. Unter Berücksichtigung eines ortsabhängigen elektrostatischen Potentials  $\phi(x)$  im semiklassischen Modell [vgl. Gln. (2.8), (2.9) und (2.10)] sind dann die Dichte der Leitungsbandelektronen,  $n(x)$ , und die Dichte der Valenzbandelektronen,  $p(x)$ , im allgemeinen stationären Fall gegeben durch [20]

$$n(x) = N_c e^{-\beta[E_c(x)-E_F^e(x)]} = N_c e^{-\beta[E_c - e\phi(x) - E_F^e(x)]}, \quad (3.1)$$

$$p(x) = N_v e^{-\beta[E_F^h(x) - E_v(x)]} = N_v e^{-\beta[E_F^h(x) - [E_c - e\phi(x) - E_g]]}, \quad (3.2)$$

$$(3.3)$$

wobei

$$E_g = E_c(x) - E_v(x) = E_c - E_v \quad (3.4)$$

die (ortsunabhängige) Energielücke ist;  $E_{c,v}$  ist die Leitungs- bzw. Valenzbandkante des Volumenhalbleiters. Die effektiven Zustandsdichten  $N_{c,v}$  sind definiert in Gl. (2.6). Die in Gl. (3.1) bzw. (3.2) eingeführten Quasi-Fermi-Niveaus  $E_F^e(x)$  bzw.  $E_F^h(x)$  beschreiben das *lokale* Gleichgewicht des Elektronen- bzw. Löchersystems am Ort  $x$ . Im thermischen Gleichgewicht der Teilsysteme reduzieren sich die Quasi-Fermi-Niveaus auf ortsunabhängige Niveaus  $E_F^e$  und  $E_F^h$ , im Gleichgewicht des Gesamtsystems auf ein einziges Fermi-Niveau  $E_F = E_F^e = E_F^h$ .

Bei unseren numerischen Rechnungen kann in einzelnen Iterationschritten des Lösungsverfahrens das Quasi-Fermi-Niveau  $E_F^e(x)$  oder  $E_F^h(x)$  Werte oberhalb von  $E_c(x)$  bzw. unterhalb von  $E_v(x)$  annehmen. Dann kann bei Benutzung der Boltzmann-Form (3.1) und (3.2) für die Ladungsträgerdichten die Konvergenz des Verfahrens verlangsamt oder gar nicht erreicht werden. Deswegen verwenden wir in den konkreten Rechnungen die Näherung von Ehrenberg [28] für  $n(x)$  und  $p(x)$ ,

$$n(x) = N_c \frac{4 e^{-\beta[E_c(x) - E_F^e(x)]}}{4 + e^{-\beta[E_c(x) - E_F^e(x)]}}, \quad (3.5)$$

$$p(x) = N_v \frac{4 e^{-\beta[E_F^h(x) - E_v(x)]}}{4 + e^{-\beta[E_F^h(x) - E_v(x)]}}, \quad (3.6)$$

bei der die Konvergenzprobleme nicht auftreten und die zudem in den Bereichen  $E_c(x) - k_B T < E_F^e(x) < E_c(x)$  bzw.  $E_v(x) < E_F^h(x) < E_v(x) + k_B T$  eine bessere Näherung als die Boltzmann-Statistik darstellt.

Unsere Modellrechnungen werden durchweg für n-dotiertes Material mit räumlich konstanter Donatordichte  $N_d$  ausgeführt. Die Niveaus  $E_d$  der Donatoratome liegen dicht an der Leitungsbandkante, so daß man

$$E_d = E_c \quad (3.7)$$

setzen kann. Ein einzelnes Donatoratom ist entweder elektrisch neutral (d.h., das Donatorniveau ist besetzt mit einem Elektron) oder positiv geladen (d.h., das Donatorniveau ist unbesetzt). Nach der Fermi-Dirac-Statistik ist dann die Dichte der ionisierten Atome gegeben durch

$$N_d^+(x) = \frac{N_d}{1 + 2 e^{-\beta[E_d - E_F^e - e\phi(x)]}} \quad (3.8)$$

Vergleichsrechnungen haben gezeigt, daß in dem Parameterbereich, der in unseren Rechnungen überdeckt wird, die Donatoratome fast vollzählig ionisiert sind; wir verwenden daher die Näherung

$$N_d^+ \equiv N_d \quad (3.9)$$

### 3.1.2 Korngrenzen

In dem hier benutzten Modell werden die Korngrenzen (Index  $i$ ) als infinitesimal dünne Schichten (Grenzflächen) an den Stellen  $x_i$  angenommen, in denen lokalisierte Grenzflächenzustände als Zentren für Ladungsträgereinfang und -rekombination wirken. Die Flächendichte dieser Zustände ("Traps") wird als konstant angenommen. Da wir nur den Fall n-dotierten Materials betrachten, ist die Beschränkung auf *akzeptorartige* Grenzflächenniveaus ausreichend. Die Niveaus seien mit einer Verteilung  $D_t(E)$  über die Energielücke des Volumenhalbleiters verteilt.

Ein einzelnes Trap-Niveau bei der Energie  $E$  ist in unbesetztem Zustand elektrisch neutral und bei Besetzung mit einem Elektron einfach negativ geladen. Im thermischen Gleichgewicht ist die Besetzungswahrscheinlichkeit für ein Niveau in der Korngrenze  $i$  nach der Fermi-Dirac-Statistik gegeben durch

$$f^{(i)}(E) = \frac{1}{1 + g e^{\beta[E - E_F - e\phi_i]}} \quad (3.10)$$

mit  $\phi_i = \phi(x_i)$ . Der Faktor  $g = 1/2$  ist ein statistischer Faktor [30]. Damit ergibt sich die gesamte Ladung, die in der Korngrenze  $i$  eingefangen ist, zu

$$q_t^{(i)} = -e \int_{E_v}^{E_c} dE D_t(E) f^{(i)}(E) \quad (3.11)$$

Für die Verteilungsfunktion  $D_t(E)$  betrachten wir zwei verschiedene Formen: zum einen die Verteilung, die einem einzelnen, bei  $E = E_t$  in der Bandlücke liegenden Niveau entspricht,

$$D_t(E) = N_t \delta(E - E_t) \quad (3.12)$$

und zum anderen die über die Bandlücke konstante Verteilung

$$D_t(E) = N_t/E_g, \quad (3.13)$$

wobei  $N_t$  die gesamte Flächendichte der Trap-Niveaus ist.

Die Form der Verteilungsfunktion hat einen erheblichen Einfluß auf die gesamte in einer Korngrenze eingefangene Ladung. Bei der Verteilung (3.12) ist im wesentlichen keine Ladung eingefangen,  $q_t^{(i)} \approx 0$ , wenn das Fermi-Niveau  $E_F$  unter der Schwellenenergie  $E_t - e \phi_i$  liegt; steigt  $E_F$  über diese Energie an, springt  $q_t^{(i)}$  abrupt auf den Maximalwert, und eine weitere Erhöhung von  $E_F$  bewirkt keine Vergrößerung der eingefangenen Ladung. Im Gegensatz dazu steht die konstante Verteilung (3.13), bei der die eingefangene Ladung ungefähr linear mit  $E_F$  anwächst.

Die energetische Verteilung der Korngrenzenzustände ist experimentell schwer zugänglich, und die Resultate sind oft von dem Transportmodell abhängig, das bei der Analyse der Experimente benutzt wird. Experimentelle Daten sind daher selten und besitzen eher qualitativen Charakter [25]. Bei Silizium allerdings hat es sich gezeigt, daß die Eigenschaften der Korngrenzen nahe dem thermischen Gleichgewicht durch ein einzelnes (effektives) Niveau, das in der Nähe der Mitte der Bandlücke liegt, gut beschrieben werden können [43].

Im stationären Zustand werden die Rekombinationseigenschaften der Korngrenzen beschrieben durch die Flächen-Rekombinationsraten der Shockley-Read-Hall-Statistik (vgl. Kap. 2.2.3). Für ein Rekombinationsniveau bei der Energie  $E$  in der Bandlücke lautet die Rate für die Korngrenze  $i$  [27]

$$S_{\text{SRH}}^{(i)}(E) = c_e c_h \frac{n^{(i)} p^{(i)} - \tilde{n}(E) \tilde{p}(E)}{[n^{(i)} + \tilde{n}(E)] c_e + [p^{(i)} + \tilde{p}(E)] c_h}, \quad (3.14)$$

wobei die Einfang-Koeffizienten  $c_e$  und  $c_h$  als unabhängig von  $E$  angenommen werden. Die Koeffizienten  $\tilde{n}(E)$  und  $\tilde{p}(E)$  sind im nichtentarteten Fall für akzeptorartiges Niveau gegeben durch

$$\tilde{n}(E) = \frac{1}{2} N_c e^{-\beta(E_c - E)} \quad (3.15)$$

und

$$\tilde{p}(E) = 2 N_v e^{-\beta(E - E_v)} \quad (3.16)$$

und die Trägerdichten  $n^{(i)} \equiv n(x_i)$  bzw.  $p^{(i)} \equiv p(x_i)$  durch Gl. (3.1) bzw. (3.2). Die gesamte Rekombinationsrate  $S_{\text{SRH}}^{(i)}$  für die Korngrenze  $i$  lautet

$$S_{\text{SRH}}^{(i)} = \int_{E_v}^{E_c} dE D_t(E) S_{\text{SRH}}^{(i)}(E). \quad (3.17)$$

Die Besetzungswahrscheinlichkeit des Rekombinationsniveaus in der Korngrenze  $i$  ist, in Verallgemeinerung von Gl. (3.10) [30], gegeben durch

$$\begin{aligned} f^{(i)}(E) &= \frac{n^{(i)} c_e + \tilde{p}(E) c_h}{[n^{(i)} + \tilde{n}(E)] c_e + [p^{(i)} + \tilde{p}(E)] c_h} \\ &= \frac{1}{1 + g_{\text{eff}}^{(i)}(E) e^{\beta[E - E_F^e(x_i)]}}, \end{aligned} \quad (3.18)$$

wobei wir den effektiven statistischen Faktor

$$g_{\text{eff}}^{(i)}(E) = g \frac{n^{(i)}c_e + \tilde{p}(E)c_h e^{\beta\Delta E_F(x_i)}}{n^{(i)}c_e + \tilde{p}(E)c_h} \quad (3.19)$$

mit der Fermi-Niveau-Differenz (2.12) eingeführt haben [vgl. Gl. (2.13)]. Hieraus ergibt sich mit Hilfe von Gl. (3.10) die gesamte Ladung in der Korngrenze  $i$ ,  $q_t^{(i)}$ .

### 3.1.3 Thermisches Gleichgewicht: elektrostatisches Potential

Wir betrachten nun Systeme, die aus einer eindimensionalen Anordnung von  $n$  Körnern mit den dazwischen liegenden Korngrenzen bestehen (vgl. Abb. 3.1). Die Eigenschaften der einzelnen Körner in diesen Systemen können sich (für ein gegebenes Halbleitermaterial) unterscheiden in der Kornlänge  $s$  und in der Donatordichte  $N_d$ , die der Korngrenzen in der Verteilung  $D_t(E)$  der Trap-Niveaus und deren Flächendichte  $N_t$  sowie in den Rekombinationskoeffizienten  $c_e$  und  $c_h$ . Um die Fluktuationen in den Eigenschaften von Körnern und Korngrenzen, die in einem realen polykristallinen Material auftreten, in gewissem Maße zu simulieren, behandeln wir Anordnungen, die durch periodische Wiederholung eines *Mehrkorn-Systems* gebildet sind. In der Literatur sind bisher nur einzelne Korngrenzen oder periodische Wiederholungen identischer Körner betrachtet worden.

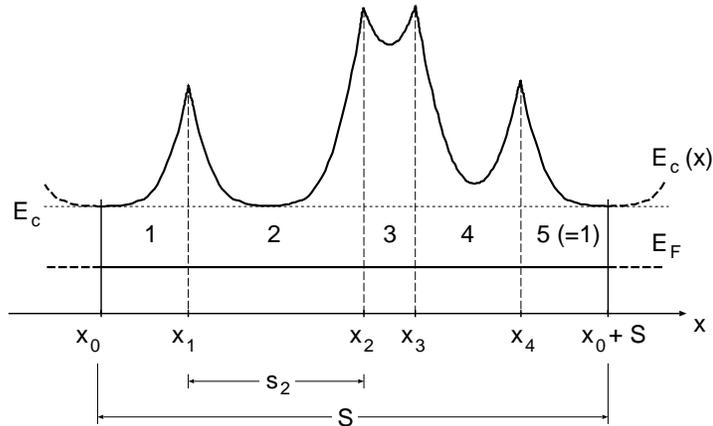


Abbildung 3.1: Periodische Anordnung von Körnern mit  $n = 4$

Zur Beschreibung eines Mehrkorn-Systems, gebildet aus Körnern der Länge  $s_i$  und mit Gesamtlänge  $S = \sum_{i=1}^n s_i$ , legen wir die Anfangskoordinate  $x_0$  in die Mitte des Kornes 1 und die Endkoordinate  $x_0 + S$  in die Mitte des Kornes  $n + 1$  (d.h., des periodisch fortgesetzten Kornes 1; vgl. den in Abb. 3.1 skizzierten Fall  $n = 4$ ).

Wir wenden uns jetzt der Berechnung des elektrostatischen Potentials  $\phi(x)$  in einem Mehrkorn-System im Falle thermischen Gleichgewichtes zu. Wir betrachten dabei nur das Potential, das sich infolge der Ladungsträgerverarmung im Volumen der Körner durch den Einfang von Ladung in den Korngrenzen ergibt. Neben diesem Potential können in einer realen polykristallinen Probe grundsätzlich weitere Potentiale auftreten, etwa dann, wenn die Probe sich in der Verarmungszone eines pn-Übergangs befindet (vgl. Kap. 2.3.2).

Der Zusammenhang zwischen dem Potential  $\phi(x)$  und der gesamten Ladungsdichte  $\rho(x)$  ist durch die Poisson-Gleichung

$$\phi''(x) = -\rho(x)/\epsilon \quad (3.20)$$

mit

$$\rho(x) = e [N_d + p(x) - n(x)] + \sum_{i=1}^n q_t^{(i)} \delta(x - x_i) \quad (3.21)$$

gegeben. Dabei ist die Dichte der ionisierten Donatoratome gemäß Gl. (3.9) gleich der Donatordichte  $N_d$  gesetzt worden, und die Trägerdichten  $n(x)$  und  $p(x)$  sind gegeben durch Gl. (3.1) bzw. (3.2) mit einem gemeinsamen ortsunabhängigen Quasi-Fermi-Niveau  $E_F = E_F^e = E_F^h$ . Die Dichten  $n(x)$  und  $p(x)$  hängen in nichtlinearer Weise von  $\phi(x)$  ab, so daß Gl. (3.20) eine nichtlineare Gleichung zur Bestimmung des elektrostatischen Potentials ist (“nichtlineare Poisson-Gleichung”).

Die in Gl. (3.21) eingehende, *eingefangene* Grenzflächenladung  $q_t^{(i)}$  ist im allgemeinen dem Betrage nach kleiner als die durch Gl. (3.11) gegebene Ladung, da zu letzterer auch Elektronen beitragen, die von Atomen abgelöst worden sind, die in der Korngrenze liegen. Andererseits wird die Ladung dieser Elektronen von der Ladung der zugehörigen ionisierten Atomrümpfe kompensiert, so daß sie keinen Beitrag zu  $\phi(x)$  liefert. Die eingefangene Ladung  $q_t^{(i)}$  wird üblicherweise bestimmt [49] als Differenz des Ausdrucks (3.11) mit dem Fermi-Niveau  $E_F$  des Gesamtsystems und mit einem “Neutralitäts-Niveau”  $E_{F,n}^{(i)}$ , das das thermische Gleichgewicht in der isolierten Korngrenze  $i$  beschreibt,

$$q_t^{(i)} = q_t^{(i)}(E_F) - q_t^{(i)}(E_{F,n}^{(i)}) . \quad (3.22)$$

Für die Zwecke dieser Arbeit erscheint es gerechtfertigt,  $q_t^{(i)}(E_{F,n}^{(i)}) = 0$  zu setzen. Aus Gl. (3.20) ergibt sich mit Hilfe von Gl. (2.8) die nichtlineare Gleichung für das Bandkantenprofil  $E_c(x)$ :

$$E_c''(x) = \frac{e}{\epsilon} \rho(x) \quad (3.23)$$

(das Valenzbandkantenprofil  $E_v(x)$  ist bei gegebenem  $E_c(x)$  durch die Bedingung (3.4) festgelegt). Gesucht werden Lösungen dieser Gleichung, die der Periodizitätsbedingung

$$E_c(x + S) = E_c(x) \quad (3.24)$$

genügen. Insbesondere muß dann gelten

$$E_c(x_0 + S) = E_c(x_0) \quad (3.25)$$

und

$$E'_c(x_0 + S) = E'_c(x_0) . \quad (3.26)$$

Durch Integration von Gl. (3.23) ergibt sich, daß die Bedingung (3.26) genau dann erfüllt ist, wenn die gesamte Ladung in der Probe verschwindet:

$$\begin{aligned} E'_c(x_0 + S) - E'_c(x_0) &= \frac{e}{\epsilon} \int_{x_0}^{x_0+S} dx \rho(x) \\ &= \frac{e}{\epsilon} \left\{ e \int_{x_0}^{x_0+S} dx [N_d + p(x) - n(x)] + \sum_{i=1}^n q_t^{(i)} \right\} = 0 . \end{aligned} \quad (3.27)$$

Wir haben es mit einem Dirichlet-Problem für die Gl. (3.23) mit dem gleichen Randwert  $E_c(x_0)$  an den Randpunkten  $x_0$  und  $x_0 + S$  zu tun, wobei Gl. (3.26) eine zusätzliche Bedingung (Verschwinden der Gesamtladung) darstellt. Die Größe  $E_c(x_0)$  wird folgendermaßen festgelegt: Unter Benutzung des Ausdrucks für die Ladungsdichte am Ort  $x$  außerhalb der Korngrenzen,

$$\rho(x)/e = N_d + N_v e^{-\beta(E_F - E_c(x) + E_g)} - N_c e^{-\beta(E_c(x) - E_F)} \quad x \neq x_i , \quad (3.28)$$

wird zunächst das Fermi-Niveau willkürlich festgelegt durch die Bedingung, daß es zu Neutralität am Ort  $x_0$  führt [ $\rho(x_0) = 0$ ], wenn dort  $\phi(x_0) = 0$ , d.h.,  $E_c(x_0) = E_c$  gesetzt wird:

$$N_d + N_v e^{-\beta(E_F - E_c + E_g)} - N_c e^{-\beta(E_c - E_F)} = 0 . \quad (3.29)$$

Im intrinsischen Fall ( $N_d = 0$ ) reduziert sich diese Bedingung auf die übliche Formel für Volumenhalbleiter [20], bei der für  $T = 0$  das Fermi-Niveau in der Mitte der Bandlücke liegt.

Wenn die Kornmitte in Korn 1 neutral ist, haben wir  $E_c(x_0) = E_c$ . Wenn andererseits  $\rho(x_0) \neq 0$ , dann bestimmt sich  $E_c(x_0)$  als Lösung von Gl. (3.28) für  $x = x_0$  unter Benutzung des Wertes von  $E_F$ , der sich aus Gl. (3.29) ergibt. Auf diese Weise erkennt man aus der Lösung  $E_c(x)$  des Dirichlet-Problems, daß das System an den Stellen neutral ist, wo  $E_c(x) = E_c$ .

### 3.1.4 Nichtgleichgewicht: stationärer Zustand

Ein stationärer Nichtgleichgewichtszustand liegt vor, wenn eine zeitlich konstante äußere Spannung an der Probe abfällt und/oder wenn Ladungsträgererzeugung durch Lichtabsorption mit zeitlich konstanter Rate stattfindet.

Die Standardbeschreibung des stationären Nichtgleichgewichts [20] basiert auf der Annahme, daß Elektronen und Löcher *getrennt* am Ort  $x$  in Zuständen lokalen Gleichgewichts sind (vgl. auch Kap. 2.3.1). Diese Annahme führt zu der Einführung von ortsabhängigen Quasi-Fermi-Niveaus  $E_F^e(x)$  bzw.  $E_F^h(x)$  für das

Elektronen- bzw. Löchersystem und zur “Quasigleichgewichtsform” (3.1) bzw. (3.2) für die Trägerdichten  $n(x)$  bzw.  $p(x)$ .

Zur Bestimmung der Quasi-Fermi-Niveaus  $E_F^e(x)$  und  $E_F^h(x)$  muß die Poisson-Gleichung für das elektrostatische Potential  $\phi(x)$  bzw. für das Bandkantenprofil  $E_c(x)$  [mit der allgemeinen Form (3.1) bzw. (3.2) für die Dichten  $n(x)$  bzw.  $p(x)$ ] zusammen mit zwei weiteren Gleichungen gelöst werden, die aus den Kontinuitätsgleichungen für die Elektronen bzw. Löcher abgeleitet werden. Letztere Gleichungen lauten

$$\frac{d}{dx}j_e(x) - G_e(x) + R_e(x) = 0, \quad (3.30)$$

$$\frac{d}{dx}j_h(x) - G_h(x) + R_h(x) = 0, \quad (3.31)$$

wobei  $j_{e,h}(x)$  die Ladungsströme,  $G_{e,h}$  die Generationsraten und  $R_{e,h}$  die Rekombinationsraten für Elektronen bzw. Löcher sind. Der gesamte Ladungsstrom,

$$j = j_e(x) + j_h(x), \quad (3.32)$$

ist im stationären Zustand konstant. Um zu einem expliziten Gleichungssystem zur Bestimmung von  $E_c(x)$ ,  $E_F^e(x)$  und  $E_F^h(x)$  zu gelangen, müssen die Ströme  $j_{e,h}(x)$  mit Hilfe eines Modellansatzes durch diese Größen ausgedrückt werden. In Kap. 3.3 wird im Detail das Drift-Diffusions-Modell dargestellt, in dem die Ströme geschrieben werden als Summe aus einem Drift-Anteil, der die Bewegung der Träger auf Grund des elektrischen Feldes (d.h., des Gradienten des elektrostatischen Potentials) beschreibt, und einem Diffusionsanteil, der der (klassischen) Diffusion der Träger auf Grund des Dichtegradienten Rechnung trägt. Im nichtentarteten Fall lassen sich die Ströme in einer Form schreiben, in der statt der Gradienten von Potential und Dichte nur der Gradient des jeweiligen Quasi-Fermi-Niveaus auftritt.

Im Drift-Diffusions-Modell lassen sich Effekte des Zusammenwirkens von verschiedenen Körnern und Korngrenzen auf den Ladungsträgertransport in Mehrkorn-Systemen explizit untersuchen. Unsere konkreten Rechnungen im Rahmen des Drift-Diffusions-Modells basieren auf den Annahmen, die in Kap. 3.1.1 und 3.1.2 für die Beschreibung von Körnern und Korngrenzen in polykristallinen Materialien gemacht wurden.

Die Gültigkeit des Drift-Diffusions-Modell setzt voraus, daß die mittlere freie Weglänge der Ladungsträger klein gegen die charakteristischen Dimensionen der betrachteten Probe ist. Im entgegengesetzten Fall großer freier Weglänge kann der Transport über eine einzelne Potentialbarriere (d.h., über eine einzelne Korngrenze oder über eine periodische Anordnung identischer Körner und Korngrenzen) im ballistischen Modell beschrieben werden. In diesem Modell wird rechts und links des Maximums der Barriere thermisches Gleichgewicht, beschrieben durch konstante Quasi-Fermi-Niveaus, und eine unstetige Änderung dieser Niveaus am Maximum angenommen. Die Anwendung des ballistischen Modells auf allgemeine Mehrkorn-Systeme stößt auf gewisse Probleme, auf die wir in Kap. 5 in Zusammenhang mit der einheitlichen Beschreibung des ballistischen und diffusiven Transports zurückkommen werden.

Im folgenden geben wir zunächst eine Darstellung des ballistischen Modells und gehen dann zur Diskussion des Drift-Diffusions-Modells über.

## 3.2 Ladungsträger-Transport: ballistischer Mechanismus

Wir beschränken uns hier auf die Betrachtung von *Elektronen* mit Quasi-Fermi-Niveau  $E_F(x)$ .

Der ballistische Transport über eine Potentialbarriere wird durch Ströme von Elektronen beschrieben, die an Gleichgewichtspunkten  $x_{l,r}$  beiderseits der Barriere in Richtung derselben injiziert werden (vgl. Abb. 3.2). Der Nettostrom ist gleich der algebraischen Summe der transmittierten Anteile  $j_{l,r}$  dieser beiden Ströme. Die Elektronen bewegen sich im Potentialfeld der Barriere.

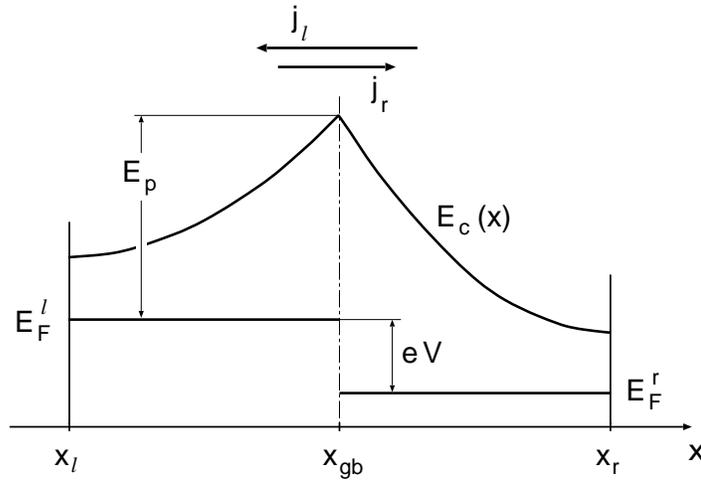


Abbildung 3.2: Reflexion und Transmission an einer Potentialbarriere bei angelegter äußerer Spannung  $V$

Im nichtentarteten Fall ist die Phasenraum-Verteilung der Elektronen an den Punkten  $x_{l,r}$  gegeben durch

$$f(x_{l,r}; k) = \frac{2m^*}{\beta\hbar^2} e^{-\beta[\epsilon + E_c(x_{l,r}) - E_F^{l,r}]}, \quad (3.33)$$

wobei  $\epsilon = \hbar^2 k^2 / 2m^*$  ist. Das Quasi-Fermi-Niveau  $E_F^{l,r} \equiv E_F(x_{l,r})$  am Ort  $x_{l,r}$  bestimmt die Phasenraum-Verteilung der Elektronen im ganzen Bereich von  $x_{l,r}$  bis hin zur Korngrenze bei  $x_b$ . Es kann also in diesem Bereich als konstant angesehen werden, wobei es sich dann an der Korngrenze selbst unstetig ändert. Der transmittierte Strom  $j_{l,r}$  ist

$$j_{l,r} = \mp e \int_0^\infty dk \frac{\hbar k}{m^*} \mathcal{T}(x_{l,r}; \epsilon) f(x_{l,r}; k), \quad (3.34)$$

wobei  $\mathcal{T}(x_{1,r}; \epsilon)$  die Transmissionswahrscheinlichkeit angibt, mit der die von  $x_{1,r}$  kommenden Elektronen der kinetischen Energie  $\epsilon$  die Barriere überwinden können. Somit ergibt sich

$$j_{l,r} = \mp v_e n_{l,r}(x_{1,r}) \overline{\mathcal{T}}(x_{1,r}) \quad (3.35)$$

mit der Elektronendichte

$$n_{l,r}(x_{1,r}) = N_c e^{-\beta[E_c(x_{1,r}) - E_F^{l,r}]} \quad (3.36)$$

und der thermisch gemittelten Transmissionswahrscheinlichkeit

$$\overline{\mathcal{T}}(x_{1,r}) = \beta \int_0^\infty d\epsilon \mathcal{T}(x_{1,r}; \epsilon) e^{-\beta\epsilon} ; \quad (3.37)$$

$v_e = (2\pi m^* \beta)^{-1/2}$  ist die ‐Emissionsgeschwindigkeit‐. Die Nettodichte  $j$  des Elektronenstroms über die Barriere ist schließlich

$$j = j_l + j_r . \quad (3.38)$$

### 3.2.1 Klassischer Transport: thermionische Emission

Im klassischen Fall können nur Elektronen mit einer kinetischen Energie  $\epsilon \geq E_c(x_b) - E_c(x_{1,r})$  die Barriere überwinden, deren Maximum an der Korngrenze bei  $x_b$  liegt. Man erhält daher für die klassische Transmissionswahrscheinlichkeit

$$\mathcal{T}(x_{1,r}; \epsilon) = \Theta(\epsilon - E_c(x_b) + E_c(x_{1,r})) \quad (3.39)$$

und damit aus Gl. (3.37) für die thermisch gemittelte Transmissionswahrscheinlichkeit

$$\overline{\mathcal{T}}(x_{1,r}) = e^{-\beta[E_c(x_b) - E_c(x_{1,r})]} . \quad (3.40)$$

Aus Gl. (3.35) ergibt sich sodann

$$j_{l,r} = \mp v_e N_c e^{-\beta[E_c(x_b) - E_F^{l,r}]} . \quad (3.41)$$

Der transmittierte Strom  $j_{l,r}$  ist unabhängig vom Ort  $x_{1,r}$ , gemäß dem Gesetz der Stromerhaltung. Der Spannungsabfall über den Bereich  $(x_l, x_r)$  ist gegeben durch  $eV = E_F^l - E_F^r$ , und wir erhalten aus Gln. (3.38) und (3.41) die Strom-Spannungs-Charakteristik

$$j = -e v_e N_c e^{-\beta E_p} (1 - e^{-\beta eV}) , \quad (3.42)$$

wobei  $E_p = E_c(x_b) - E_F^l$  die Barrierenhöhe, bezogen auf das Fermi-Niveau links der Korngrenze, bezeichnet. Der Nullspannungs-Leitwert pro Flächeneinheit,  $g = (|j|/V)_{V \rightarrow 0}$ , ergibt sich aus Gl. (3.42) zu

$$g = \frac{4\pi e^2 m^*}{\beta h^3} e^{-\beta E_p} . \quad (3.43)$$

Mit dem Fermi-Niveau der Elektronen ändert sich auch die Elektronendichte an der Korngrenze unstetig. Es stellt sich daher die Frage, was der Wert der Dichte  $n(x_b)$  ist, den man in Gl. (3.14) [neben dem der Löcherdichte  $p(x_b)$ ] für den SRH-Rekombinationsmechanismus einzusetzen hat. Wegen ihrer Unabhängigkeit von  $x_{l,r}$  [vgl. Gl. (3.41)] kann man die Ströme  $j_{l,r}$  in Gl. (3.35) unmittelbar am Maximum der Barriere,  $x_{l,r} = x_b \mp 0$ , auswerten. Hier ist  $\overline{T}(x_{l,r}) = 1$ , und die gesamte Elektronendichte ist die Summe der von den beiden Strömen getragenen Dichten. Diese sind aber wegen der Geschwindigkeitsausrichtung gleich der halben Gleichgewichtsdichte links bzw. rechts vom Maximum. Dementsprechend ist die Elektronendichte in der Korngrenze anzusetzen als

$$n(x_b) = \frac{1}{2} [n(x_b - 0) + n(x_b + 0)] . \quad (3.44)$$

Es sei bemerkt, daß infolge des Stromtransportes die in der Korngrenze getrappte Ladung von der im thermodynamischen Gleichgewicht getrappten Ladung verschieden. Dies hat Auswirkungen auf die Barrierenhöhe im stationären Nichtgleichgewicht.

### 3.2.2 Quantenmechanische Effekte

In der quantenmechanischen Beschreibung des ballistischen Transports (“thermionische Feldemission”) können selbst Elektronen mit einer Energie unterhalb des Barrierenmaximums die Barriere auf Grund des Tunneleffektes überwinden [44, 45]. Wir bemerken, daß es daneben noch die Möglichkeit des direkten Tunnelns in lokalisierte Niveaus der Korngrenze gibt, was in dieser Arbeit jedoch nicht näher betrachtet werden soll [46, 47].

Wir formulieren den ballistischen Elektronentransport als eindimensionales quantenmechanisches Streuproblem. Die Schrödinger-Gleichung für die Streuung eines Elektrons mit der effektiven Masse  $m^*$  an einer Potentialbarriere  $U(x)$  lautet

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) \right) \psi(x) = \epsilon \psi(x) , \quad (3.45)$$

wobei  $U(x)$  gegeben ist durch

$$U(x) = E_c(x) - E_c(x_r) . \quad (3.46)$$

Wir nehmen an, daß in einiger Entfernung von der Barriere das Potential konstant ist, d.h.,  $U(x) = 0$  für  $x > x_r$  und  $U(x) = U \equiv E_c(x_l) - E_c(x_r)$  für  $x < x_l$ , so daß die Wellenfunktionen der ein- bzw. auslaufenden Elektronen dort ebene Wellen sind (vgl. Abb. 3.3). Dies bedeutet praktisch, daß es zu beiden Seiten der Barriere ein (neutrales) Gebiet konstanten Potentials im Korn geben muß. Nach Abb. 3.3 betrachten wir zunächst eine von rechts einlaufende, normierte ebene Welle  $\exp(-ikx)$ , die zum Teil an der Barriere reflektiert wird und zum Teil in den Bereich links von der Barriere transmittiert wird. Wir haben dann

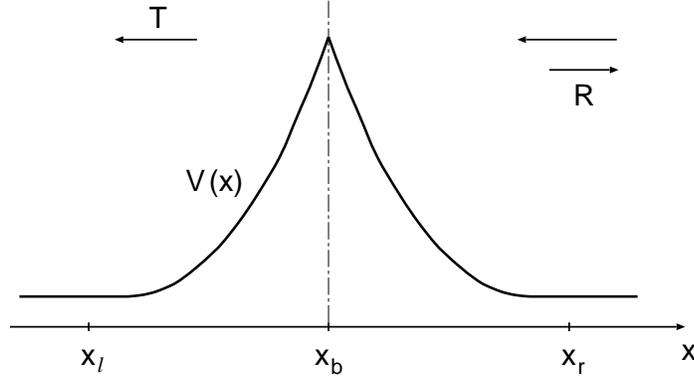


Abbildung 3.3: Reflexion und Transmission an einer Potentialbarriere

in den potentialfreien Bereichen die Streulösung

$$\tilde{\psi}(x; k) = \begin{cases} T(k)e^{-i\bar{k}x}, & x < x_l^n, \\ e^{-ikx} + R(k)e^{+ikx}, & x > x_r^n, \end{cases} \quad (3.47)$$

wobei wir den Transmissionskoeffizienten  $T(k)$  und den Reflexionskoeffizienten  $R(k)$  eingeführt haben. In Gl. (3.47) ist  $k = \sqrt{2m^*\epsilon/\hbar^2}$  und  $\bar{k} = \sqrt{2m^*(\epsilon - U)/\hbar^2}$ . Mit der Definition

$$\psi(x) = \tilde{\psi}(x; k) e^{i\bar{k}x_l} / T(k) \quad (3.48)$$

und den Anfangsbedingungen an der linken Grenze  $x_l$ ,

$$\psi(x_l) = 1, \quad \psi'(x_l) = -i\bar{k} \quad (3.49)$$

erhalten wir ein Anfangswertproblem für die Schrödinger-Gleichung Gl. (3.45). Aus der Lösung an der rechten Grenze  $x_r$  ergibt sich der Transmissionskoeffizient  $T(x_r; k)$  für die von rechts einlaufende Welle zu

$$T(x_r; k) = \frac{2ik e^{-i(kx_r - \bar{k}x_l)}}{ik\psi(x_r) - \psi'(x_r)}. \quad (3.50)$$

Die quantenmechanische Transmissionswahrscheinlichkeit  $\mathcal{T}(x_r; \epsilon)$ , die in Gl. (3.37) eingeht, ist dann gegeben durch

$$\mathcal{T}(x_r; \epsilon) = |T(x_r; \epsilon)|^2 \Theta(\epsilon - U). \quad (3.51)$$

Analog erhält man die Transmissionswahrscheinlichkeit  $\mathcal{T}(x_l; \epsilon)$  für eine von links einlaufende ebene Welle.

Wegen Zeitumkehrinvarianz gilt

$$\mathcal{T}(x_l; \epsilon) = \mathcal{T}(x_r; \epsilon + U). \quad (3.52)$$

Damit ergibt sich für die thermisch gemittelten Transmissionswahrscheinlichkeiten [vgl. Gl. (3.37)]

$$\bar{\mathcal{T}}(x_l) = \beta \int_0^\infty d\epsilon \mathcal{T}(x_l; \epsilon) e^{-\beta\epsilon}, \quad (3.53)$$

$$\overline{\mathcal{T}}(x_r) = e^{-\beta U} \overline{\mathcal{T}}(x_l) . \quad (3.54)$$

Die Strom-Spannungs-Charakteristik erhält man dann mit Hilfe von Gln. (3.35), (3.36) und (3.38),

$$\begin{aligned} j &= -e v_e n(x_l) \overline{\mathcal{T}}(x_l) (1 - e^{-\beta eV}) \\ &= -e v_e N_c e^{-\beta[E_c(x_l) - E_F^l]} \overline{\mathcal{T}}(x_l) (1 - e^{-\beta eV}) \end{aligned} \quad (3.55)$$

( $eV = E_F^l - E_F^r$ ), und damit den Nullspannungs-Leitwert

$$g = \frac{4\pi e^2 m^*}{\beta h^3} e^{-\beta[E_c(x_l) - E_F^l]} \overline{\mathcal{T}}(x_l) . \quad (3.56)$$

Der Vergleich von Gln. (3.55) und (3.56) mit Gln. (3.42) und (3.43) zeigt, daß beim Übergang von der klassischen zur quantenmechanischen Beschreibung des ballistischen Transports der “Barrierefaktor”  $e^{-\beta E_p}$  durch den allgemeineren Faktor  $e^{-\beta[E_c(x_l) - E_F^l]} \overline{\mathcal{T}}(x_l)$  ersetzt wird.

### 3.3 Ladungsträgertransport: Drift-Diffusions-Mechanismus

Wenn die mittlere freie Weglänge hinreichend klein ist, liefert die Boltzmann-Gleichung für die Phasenraum-Verteilungsfunktion  $f(\vec{r}, \vec{k}; t)$ ,

$$\frac{\partial}{\partial t} f(\vec{r}, \vec{k}; t) + \vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} f(\vec{r}, \vec{k}; t) + \frac{q}{\hbar} \vec{F} \cdot \nabla_{\vec{k}} f(\vec{r}, \vec{k}; t) = \left( \frac{\partial}{\partial t} f(\vec{r}, \vec{k}; t) \right)_{\text{coll}} , \quad (3.57)$$

den allgemeinen Rahmen für die semiklassische Beschreibung des Ladungsträgertransports in Halbleitern [20, 22, 48]. In Gl. (3.57) ist  $\vec{v} = \nabla_{\vec{k}} \epsilon(\vec{k})$  die Gruppengeschwindigkeit der Träger mit Energie-Dispersion  $\epsilon(\vec{k})$ ;  $q = \pm e$  bezeichnet die Trägerladung und  $\vec{F}$  die elektrische Feldstärke. Der dem Gradienten  $\nabla_{\vec{r}} f$  proportionale Term auf der linken Seite wird als Diffusionsterm, der zum Feld  $\vec{F}$  proportionale Term als Driftterm bezeichnet. Der “Stoßterm” auf der rechten Seite beschreibt den Effekt aller elastischen und inelastischen Streuprozesse. Er läßt sich durch die quantenmechanischen Übergangswahrscheinlichkeiten für diese Prozesse und die Verteilungsfunktion selbst ausdrücken.

Zur Vereinfachung der Boltzmann-Gleichung kann der Stoßterm näherungsweise in der Form

$$\left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{coll}} = -\frac{f - f_0}{\tau(\vec{k})} \quad (3.58)$$

geschrieben werden, wobei  $f_0$  die Verteilungsfunktion im Gleichgewicht ist; die “Relaxationszeit”  $\tau(\vec{k})$  ist die mittlere Zeit zwischen zwei Streuprozessen (Relaxationszeit-Näherung). Selbst in dieser Näherung ist die Boltzmann-Gleichung im allgemeinen zu kompliziert, um für Anwendungen der hier betrachteten Art geeignet zu sein.

### 3.3.1 Drift-Diffusions-Ströme und Kontinuitätsgleichungen

Im *stationären* Fall läßt sich, wenn die Verteilungsfunktion  $f$  nur wenig von der Gleichgewichtsverteilung  $f_0$  abweicht und der Gradient  $\nabla_{\vec{r}}f$  hinreichend klein ist, aus der Boltzmann-Gleichung im Rahmen der Relaxationszeit-Näherung ein Ausdruck für  $f$  ableiten [22, 48], aus dem sich der “Drift-Diffusions-Strom”  $\vec{j}(\vec{r})$  als erstes Moment von  $f$  bezüglich der Gruppengeschwindigkeit  $\vec{v}$  ergibt. Im eindimensionalen Fall erhält man

$$j(x) = -|q| \mu c(x) \frac{d}{dx} \phi(x) - q D \frac{d}{dx} c(x) , \quad (3.59)$$

wobei die Trägermobilität  $\mu$  durch die thermisch gemittelte Relaxationszeit  $\langle \tau \rangle$  ausgedrückt werden kann [22] als

$$\mu = \frac{|q| \langle \tau \rangle}{m^*} . \quad (3.60)$$

Die Größe  $D$  ist der Diffusionskoeffizient,  $c(x)$  ist die Trägerdichte und  $\phi(x)$  das elektrostatische Potential,  $F = -d\phi/dx$ . Mit der Einstein-Relation

$$D = \frac{\mu \beta}{|q|} \quad (3.61)$$

und der Boltzmann-Form (3.1) oder (3.2) für die Trägerdichte läßt sich der Ausdruck (3.59) zusammenfassen zu

$$j(x) = \mu c(x) \frac{d}{dx} E_F(x) \quad (3.62)$$

mit dem Quasi-Fermi-Niveau  $E_F(x)$ , welches das lokale Gleichgewicht an der Stelle  $x$  beschreibt.

Wir betrachten nun getrennt die Drift-Diffusions-Ströme  $j_{e,h}$  für Elektronen ( $q = -e$ ) und Löcher ( $q = +e$ ),

$$j_e(x) = \mu_e n(x) \frac{d}{dx} E_F^e(x) , \quad (3.63)$$

$$j_h(x) = \mu_h p(x) \frac{d}{dx} E_F^h(x) . \quad (3.64)$$

Unter Berücksichtigung von Ladungsträgererzeugung und -rekombination genügen diese Ströme den Kontinuitätsgleichungen [vgl. Gln. (3.30) und (3.31)]

$$\frac{d}{dx} j_e(x) - G_e(x) + R_e(x) = 0 , \quad (3.65)$$

$$\frac{d}{dx} j_h(x) - G_h(x) + R_h(x) = 0 , \quad (3.66)$$

mit Generationsraten  $G_{e,h}$  und Rekombinationsraten  $R_{e,h}$ . Wir nehmen eine räumlich konstante Generation  $G$  von Elektron-Loch-Paaren an, so daß

$$G_e(x) = -G_h(x) = -eG, \quad (3.67)$$

und vernachlässigen Rekombination im Volumen. Die Raten für Shockley-Read-Hall-Rekombination in den Korngrenzen bei  $x = x_i$  lassen sich schreiben als

$$R_{e,h}(x) = \sum_{i=1}^n S_{e,h}^{(i)} \delta(x - x_i) \quad (3.68)$$

mit den Rekombinationsströmen

$$S_e^{(i)} = -e S_{\text{SRH}}^{(i)}, \quad (3.69)$$

$$S_h^{(i)} = +e S_{\text{SRH}}^{(i)}, \quad (3.70)$$

wobei die Größen  $S_{\text{SRH}}^{(i)}$  in Gl. (3.14) definiert sind.

Die Kontinuitätsgleichungen (3.65) und (3.66) nehmen damit die konkrete Form

$$\frac{d}{dx} j_e(x) + eG - e \sum_{i=1}^n S_{\text{SRH}}^{(i)} \delta(x - x_i) = 0, \quad (3.71)$$

$$\frac{d}{dx} j_h(x) - eG + e \sum_{i=1}^n S_{\text{SRH}}^{(i)} \delta(x - x_i) = 0 \quad (3.72)$$

an.

### 3.3.2 Die gekoppelten Differentialgleichungen

Wir fassen nun das System von nichtlinearen gekoppelten Differentialgleichungen zusammen, die das Drift-Diffusions-Modell definieren.

Wenn wir in der Löcherdichte  $p(x)$  die Valenzbandkante  $E_v(x)$  durch  $E_c(x)$  und  $E_g$  ausdrücken [vgl. Gln. (3.2) und (3.4)], so sind die Trägerdichten  $n(x)$  und  $p(x)$  sowie die Drift-Diffusions-Ströme  $j_e(x)$  und  $j_h(x)$  durch die drei unabhängigen Funktionen  $E_c(x)$ ,  $E_F^e(x)$  und  $E_F^h(x)$  vollständig bestimmt. Die expliziten Gleichungen zur Berechnung dieser Funktionen ergeben sich aus der Poisson-Gleichung (3.20) sowie den Kontinuitätsgleichungen (3.71) und (3.72) zusammen mit Gln. (3.63) und (3.64):

$$E_c''(x) = \frac{e}{\epsilon} \left\{ -e [n(x) - p(x) - N_d] + \sum_{i=1}^n q_t^{(i)} \delta(x - x_i) \right\}, \quad (3.73)$$

$$E_F^{e''}(x) = -\frac{1}{n(x)} \times \left\{ n'(x) E_F^e(x) + \frac{1}{\mu_e} \left[ eG - e \sum_{i=1}^n S_{\text{SRH}}^{(i)} \delta(x - x_i) \right] \right\}, \quad (3.74)$$

$$E_{\text{F}}^{\text{h}''}(x) = -\frac{1}{p(x)} \times \left\{ p'(x) E_{\text{F}}^{\text{h}'}(x) + \frac{1}{\mu_{\text{h}}} \left[ -eG + e \sum_{i=1}^n S_{\text{SRH}}^{(i)} \delta(x - x_i) \right] \right\} . \quad (3.75)$$

Es sei noch einmal darauf hingewiesen, daß diesen Gleichungen die Trägerdichten in der Boltzmann-Form (3.1) und (3.2) zugrundeliegen; in unseren numerischen Rechnungen benutzen wir für  $n(x)$  und  $p(x)$  die Ehrenberg-Form (3.5) und (3.6).

Aus den Lösungen der Gln. (3.73)–(3.75) erhält man vermittels der Gln. (3.1) und (3.2) sowie (3.63), (3.64), und (3.32) den Strom  $j$  als Funktion der angelegten Spannung  $V$ , also die Strom-Spannungs-Charakteristik  $j(V)$ .

### 3.3.3 Rand- und Anschlußbedingungen

Zur Lösung des Gleichungssystems (3.73)–(3.75) sind Randbedingungen an den Rändern des Korns bzw. der aus mehreren Körnern bestehenden Probe zu stellen. Die  $\delta$ -Funktions-Singularitäten bei  $x = x_i$ , die durch die Grenzflächenladungen bzw. durch die Rekombinationsströme an den Korngrenzen bedingt sind, lassen sich in Form von Anschlußbedingungen berücksichtigen, die die Unstetigkeiten im elektrischen Feld bzw. in den Drift-Diffusions-Strömen widerspiegeln. Wenn im stationären Fall eine Spannung  $V$  zwischen  $x_0$  und  $x_0 + S$  abfällt, können allgemeine Periodizitätsforderungen an die Lösungen von Gln. (3.73)–(3.75) [analog zu Gl. (3.25) im Fall thermischen Gleichgewichts] nicht gestellt werden. Stattdessen fordern wir Periodizität der Trägerdichten:

$$n(x_0 + S) = n(x_0) , \quad (3.76)$$

$$p(x_0 + S) = p(x_0) , \quad (3.77)$$

so daß

$$E_{\text{c}}(x_0 + S) - E_{\text{F}}^{\text{e}}(x_0 + S) = E_{\text{c}}(x_0) - E_{\text{F}}^{\text{e}}(x_0) , \quad (3.78)$$

$$E_{\text{c}}(x_0 + S) - E_{\text{F}}^{\text{h}}(x_0 + S) = E_{\text{c}}(x_0) - E_{\text{F}}^{\text{h}}(x_0) . \quad (3.79)$$

Die Differenzen der Quasi-Fermi-Energien an den Stellen  $x_0 + S$  und  $x_0$  sind durch die äußere Spannung  $V$  bestimmt, und wir erhalten damit die Bedingungen

$$E_{\text{c}}(x_0 + S) = E_{\text{c}}(x_0) - eV , \quad (3.80)$$

$$E_{\text{F}}^{\text{e}}(x_0 + S) = E_{\text{F}}^{\text{e}}(x_0) - eV , \quad (3.81)$$

$$E_{\text{F}}^{\text{h}}(x_0 + S) = E_{\text{F}}^{\text{h}}(x_0) - eV . \quad (3.82)$$

Wir haben wieder ein Dirichlet-Problem für die drei Gln. (3.73)–(3.75) vor uns. Dem Fall des thermischen Gleichgewichts (vgl. Kap. 3.1.3) folgend, setzen wir zunächst das Quasi-Fermi-Niveau  $E_{\text{F}}^{\text{e}}(x_0)$  gleich dem Fermi-Niveau  $E_{\text{F}}^{\text{vol}}$  des Volumenhalbleiters im thermischen Gleichgewicht,

$$E_{\text{F}}^{\text{e}}(x_0) = E_{\text{F}}^{\text{vol}} . \quad (3.83)$$

Diese Wahl ist plausibel für einen n-dotierten Halbleiter. Das Quasi-Fermi-Niveau  $E_F^h(x_0)$  wird sodann aus der Forderung nach lokaler Ladungsneutralität an der Stelle  $x_0$  bestimmt (vgl. Kap. 3.1.3):

$$N_d + N_v e^{-\beta[E_F^h(x_0) - E_c + E_g]} - N_c e^{-\beta[E_c - E_F^e(x_0)]} = 0 . \quad (3.84)$$

Die Größe  $E_c(x_0)$  erhält man schließlich aus der Bedingung

$$\rho(x_0) = N_d + N_v e^{-\beta[E_F^h(x_0) - E_c(x_0) + E_g]} - N_c e^{-\beta[E_c(x_0) - E_F^e(x_0)]} . \quad (3.85)$$

Durch die Bedingungen (3.83)–(3.85) sind die Werte der zu bestimmenden Funktionen  $E_c(x)$ ,  $E_F^e(x)$  und  $E_F^h(x)$  am linken Rand der Probe fixiert. Die Werte am rechten Rand sind dann über die Bedingungen (3.80)–(3.82) festgelegt.

Insgesamt liegen also sechs Randbedingungen [Gln. (3.83)–(3.85) und (3.80)–(3.82)] für das System (3.73)–(3.75) vor. Ob diese Bedingungen zu genau einer Lösung des nichtlinearen Systems führen, läßt sich nicht allgemein entscheiden. Es ist in jedem Fall von neuem zu untersuchen, ob das numerische Verfahren gegen eine eindeutige Lösung konvergiert.

Mit der Forderung, daß die Funktionen  $E_c(x)$ ,  $E_F^e(x)$  und  $E_F^h(x)$  [und damit die Trägerdichten  $n(x)$  und  $p(x)$ ] an den Stellen  $x = x_i$  stetig sind, ergeben sich durch Integration von Gl. (3.73) jeweils über eine infinitesimale Umgebung von  $x = x_i$  Anschlußbedingungen für die Ableitung  $E_c'(x)$ , d.h., für das elektrische Feld, an den Korngrenzen:

$$E_c'(x_i + 0) - E_c'(x_i - 0) = \frac{e}{\epsilon} q_t^{(i)} . \quad (3.86)$$

In derselben Weise erhält man durch Integration von Gln. (3.71) und (3.72) Anschlußbedingungen für die Drift-Diffusions-Ströme  $j_e$  und  $j_h$  und damit, unter Verwendung von Gln. (3.63) und (3.64), für die Ableitungen  $E_F^{e'}(x)$  und  $E_F^{h'}(x)$ :

$$E_F^{e'}(x_i + 0) - E_F^{e'}(x_i - 0) = \frac{-e}{\mu_e n(x_i)} S_{\text{SRH}}^{(i)} , \quad (3.87)$$

$$E_F^{h'}(x_i + 0) - E_F^{h'}(x_i - 0) = \frac{e}{\mu_h p(x_i)} S_{\text{SRH}}^{(i)} . \quad (3.88)$$

### 3.3.4 Numerische Lösung

Für die numerische Lösung des hier gestellten Randwertproblems sind Standardmethoden zur Integration von Differentialgleichungen, wie etwa die Runge-Kutta-Methode, wenig geeignet. Die Berücksichtigung der Rand- und Anschlußbedingungen kann bei diesen Methoden nur mittels eines komplizierten Iterationsverfahrens erfolgen. Angemessen für unsere Zwecke sind diskrete Methoden, wie die Finite-Differenzen-Methode [48], die wir hier benutzen. Dabei werden die Differentialgleichungen durch Diskretisierung der unabhängigen Variablen näherungsweise in Form eines Systems von nichtlinearen algebraischen Gleichungen dargestellt.

Bei der Finite-Differenzen-Methode kann man die Anschlußbedingungen (3.86)–(3.88) völlig umgehen. Vielmehr werden bei der Diskretisierung der Gln. (3.73)–(3.75) die zu  $\delta(x - x_i)$  proportionalen Grenzflächenterme explizit berücksichtigt. In die algebraischen Gleichungen, die sich aus der Diskretisierung ergeben, gehen sie in Form von Zusatztermen bei den Gitterintervallen ein, die die Stellen  $x = x_i$  einschließen. Konkret spiegelt sich der Effekt der  $\delta$ -Funktion in diesen Termen wider in einem Faktor  $1/h$  relativ zu den von Volumenladungen und -strömen herrührenden Termen, wobei  $h$  die Länge der Gitterintervalle ist. Im Grenzfall  $h \rightarrow 0$  dominieren in der Umgebung der Korngrenze also die Grenzflächenterme. Bei der Lösung der algebraischen Gleichungen treten durch die Berücksichtigung der Grenzflächenterme keine zusätzlichen Schwierigkeiten auf.

Zur Steigerung der Flexibilität des numerischen Verfahrens benutzen wir ein Finite-Differenzen-Schema mit variabler Länge der Gitterintervalle. Einzelheiten zur Anwendung dieses Schemas bei der Lösung des Systems (3.73)–(3.75) sind im Anhang zu dieser Arbeit zusammengestellt.