

Фотоэлектроника: элементная база и технология

УДК 621.315.592

Расчет фоточувствительности пористого кремния с цилиндрической геометрией пор

Л. С. Монастырский, Б. С. Соколовский, В. С. Васылышин

Представлена и теоретически исследована модель фоточувствительности пористого кремния с цилиндрическими порами в условиях однородной генерации фотоносителей. Проанализирована зависимость фотопроводимости пористого полупроводника от скорости рекомбинации неравновесных носителей на поверхностях пор, радиуса пор и среднего расстояния между ними. Показано, что при больших скоростях поверхностной рекомбинации фотопроводимость пористого полупроводника линейно уменьшается с ростом радиуса пор.

PACS: 85.60.-q

Ключевые слова: фоточувствительность, пористый кремний, поверхностная рекомбинация, расчет.

Введение

Одним из наиболее быстро развивающихся направлений современной физики является исследование электрических и фотоэлектрических свойств полупроводниковых низкоразмерных систем. Изучение кремниевых нанокристаллов и квантовых точек, в том числе пористого кремния, представляет значительный интерес, поскольку данные объекты занимают все более важное место в полупроводниковой электронике.

Пористый кремний [1, 2], который получают электрохимическим травлением пластин монокристаллического кремния (с-Si) в растворах плавиковой кислоты, представляет собой ансамбли связанных между собой кремниевых нанокристаллов.

В зависимости от размера пор пористый кремний подразделяют на микропористый (≤ 2 нм), мезопористый (2—50 нм), макропористый (> 50 нм). Слои мезопористого кремния, которые содержат нанокристаллы (nc-Si), имеют разветвленную поверхность, превышающую $200 \text{ м}^2/\text{см}^3$. При этом

адсорбция химически активных молекул может приводить к существенному изменению концентрации носителей заряда, электропроводности, фотопроводности, люминесценции в слоях мезопористого кремния. Изучение влияния степени пористости, соотношения размеров пор и толщины стенок между ними, а также адсорбции газов на свойства нанокристаллов связано с возможностью использования пористого кремния в роли газовых сенсоров. Использование эффекта поля в приповерхностной области полупроводника при действии внешних факторов, например адсорбционных процессов, лежит в основе создания "электронного носа" или "электронного языка" [3].

Под воздействием внешних факторов, например различных газовых сред, может изменяться фотопроводимость пористого кремния и вследствие этого такие структуры могут быть использованы как эффективные газовые сенсоры [5, 6]. Оценка параметров таких сенсоров возможна при изучении зависимости фотопроводимости пористого кремния от состояния поверхности, формы, размеров пор и расстояний между ними.

В работе предложена феноменологическая модель фотопроводимости пористого кремния, в которой учитывается рекомбинация фотоносителей на разветвленной внутренней поверхности пористого кремния с макроскопическими порами цилиндрической симметрии.

Модель и исходные уравнения

Будем рассматривать мезопористый кремний с параллельно расположенными цилиндрическими

Монастырский Любомир Степанович, доцент.
Соколовский Богдан Степанович, вед. научный сотрудник.
Васылышин Владимир Степанович, студент.
Львовский национальный университет им. Ив. Франко.
Украина, 79005, Львов, ул. Драгоманова, 50.
Тел. (380 322) 239-46-23.
E-mail: monastyr@electronics.wups.lviv.ua

Статья поступила в редакцию 27 сентября 2009 г.

© Монастырский Л. С., Соколовский Б. С.,
Васылышин В. С., 2010

порами радиуса r_0 , которые равномерно распределены в объеме полупроводника при среднем расстоянии между центрами пор $2R$. Данный полупроводник, для конкретности p -типа проводимости, освещается светом из области фундаментального поглощения, причем реализовано такое соотношение между толщиной полупроводника и коэффициентом поглощения, что функцию генерации фотоносителей G (т. е. количество фотоносителей, которые генерируются в единичном объеме) можно принять не зависящей от координаты.

Генерированные фотоносители рекомбинируют как в объеме полупроводника, так и на поверхностях пор, причем при стационарном освещении устанавливается такое неоднородное пространственное распределение концентрации фотоносителей, при котором обеспечивается баланс между процессами генерации и рекомбинации неравновесных носителей заряда. Предполагая, что задача имеет цилиндрическую симметрию (ошибка, которую вносит такое предположение, уменьшается с ростом среднего расстояния между порами), пространственное распределение концентрации фотоносителей Δn удовлетворяет следующему дифференциальному уравнению:

$$\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{d\Delta n}{dr} \right) - \frac{\Delta n}{L_n^2} = -\frac{G\tau_n}{L_n^2}, \quad (1)$$

где L_n — диффузионная длина электронов;

τ_n — время их жизни.

Уравнение (1) следует дополнить граничным условием

$$\left. \frac{d\Delta n}{dr} \right|_{r=r_0} = \frac{S\tau_n}{L_n^2} \Delta n(r_0), \quad (2)$$

где S — скорость поверхностной рекомбинации фотоносителей, которая зависит от состояния поверхности пор, в частности, от вида и концентрации адсорбированных молекул газа.

Из симметрии задачи следует второе граничное условие

$$\left. \frac{d\Delta n}{dr} \right|_{r=R} = 0, \quad (3)$$

выражающее тот факт, что посередине между порами концентрация фотоносителей принимает максимальное значение.

Результаты расчетов и их обсуждение

Используя безразмерные величины

$$\bar{r} = \frac{r}{L_n}, \quad \bar{r}_0 = \frac{r_0}{L_n}, \quad \bar{R} = \frac{R}{L_n}, \quad \bar{S} = \frac{S\tau_n}{L_n}, \quad (4)$$

решение уравнения (1) с граничными условиями (2), (3) можно представить в следующем виде:

$$\Delta n(\bar{r}) = [A + \bar{A}(\bar{r})] I_0(\bar{r}) + [B + \bar{B}(\bar{r})] K_0(\bar{r}), \quad (5)$$

где I_n, K_n — функции Бесселя мнимого аргумента порядка n ,

$$A = \frac{[K_1(\bar{r}_0) + \bar{S}K_0(\bar{r}_0)][\bar{B}(\bar{R})K_1(\bar{R}) - \bar{A}(\bar{R})I_1(\bar{R})]}{I_1(\bar{R})[K_1(\bar{r}_0) + \bar{S}K_0(\bar{r}_0)] - K_1(\bar{R})[I_1(\bar{r}_0) - \bar{S}I_0(\bar{r}_0)]};$$

$$B = \frac{[I_1(\bar{r}_0) - \bar{S}I_0(\bar{r}_0)][\bar{B}(\bar{R})K_1(\bar{R}) - \bar{A}(\bar{R})I_1(\bar{R})]}{I_1(\bar{R})[K_1(\bar{r}_0) + \bar{S}K_0(\bar{r}_0)] - K_1(\bar{R})[I_1(\bar{r}_0) - \bar{S}I_0(\bar{r}_0)]};$$

$$\bar{A}(z) = -G\tau_n \int_{\bar{r}_0}^z \frac{K_0(\zeta)d\zeta}{I_0(\zeta)K_1(\zeta) + I_1(\zeta)K_0(\zeta)};$$

$$\bar{B}(z) = G\tau_n \int_{\bar{r}_0}^z \frac{I_0(\zeta)d\zeta}{I_0(\zeta)K_1(\zeta) + I_1(\zeta)K_0(\zeta)}.$$

Выражение (5) с учетом известных дифференциальных соотношений для функций Бесселя I_n, K_n [7] после громоздких преобразований принимает вид:

$$\Delta n(\bar{r}) = G\tau_n \times \left[1 - \frac{\bar{S}[I_1(\bar{R})K_0(\bar{r}) + K_1(\bar{R})I_0(\bar{r})]}{I_1(\bar{R})[K_1(\bar{r}_0) + \bar{S}K_0(\bar{r}_0)] - K_1(\bar{R})[I_1(\bar{r}_0) - \bar{S}I_0(\bar{r}_0)]} \right]. \quad (6)$$

Из (6) следует, что при отсутствии поверхностной рекомбинации концентрация фотоносителей во всем полупроводнике постоянна ($\Delta n = G\tau_n$), в то время как при $\bar{S} > 0$ в полупроводнике устанавливается неоднородное распределение фотоносителей, причем в случае бесконечно большой скорости поверхностной рекомбинации концентрация фотоносителей на поверхности пор тождественно равна нулю. Пространственные профили концентрации фотоносителей, рассчитанные с помощью формулы (6) для нескольких значений скорости поверхностной рекомбинации и расстояний между порами, показаны на рис. 1 и 2.

Для расчета средней концентрации фотоносителей $\langle \Delta n \rangle$, определяющей фотопроводимость пористого кремния, выделим в полупроводнике "элементарную ячейку" в виде параллелепипеда единичной высоты и с квадратным основанием со стороной $2R^*$, причем значение R^* связано с R отношением

$$R^* = \frac{2R}{1 + \sqrt{2}} = 0,83R. \quad (7)$$

Принимая, что в "элементарной ячейке" за пределами цилиндра радиуса R^* концентрация фото-

носителей постоянна и равна $\Delta n(R)$, $\langle \Delta n \rangle$ рассчитаем по формуле

$$\langle \Delta n \rangle = \frac{2\pi \int_{\bar{r}_0}^{R^*} \bar{r} \Delta n(\bar{r}) d\bar{r} + \bar{R}^{*2} (4 - \pi) \Delta n(\bar{R})}{G\tau_n (4\bar{R}^{*2} - \pi\bar{r}_0^2)}, \quad (8)$$

где $\bar{R}^* = R^* / L_n$.

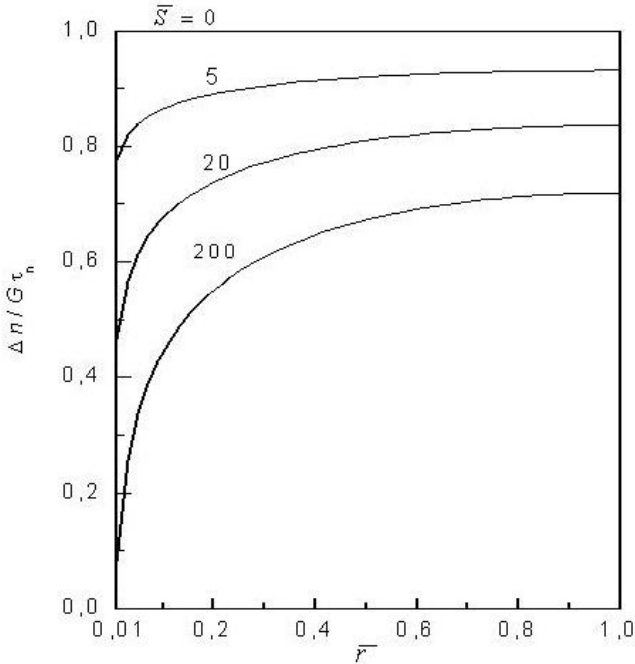


Рис. 1. Координатные зависимости концентрации фотоносителей при $\bar{r}_0 = 0,01$ и разных значениях скорости поверхностной рекомбинации. $\bar{R} = 1$

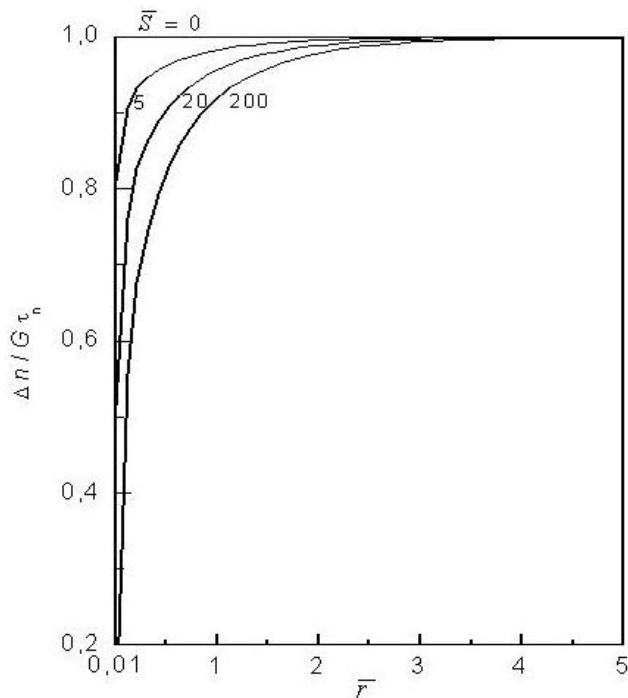


Рис. 2. Координатные зависимости концентрации фотоносителей при $\bar{r}_0 = 0,01$ и разных значениях скорости поверхностной рекомбинации. $\bar{R} = 5$

Интеграл, фигурирующий в (8), на основании теоремы Остроградского—Гаусса равен

$$2\pi \int_{\bar{r}_0}^{R^*} \bar{r} \Delta n(\bar{r}) d\bar{r} = \pi(\bar{R}^{*2} - \bar{r}_0^2) G\tau_n - 2\pi\bar{r}_0 \bar{S} \Delta n(\bar{r}_0). \quad (9)$$

С учетом (9) формула (8) сводится к следующему виду:

$$\frac{\langle \Delta n \rangle}{G\tau_n} = 1 - \frac{1}{4\bar{R}^{*2} - \pi\bar{r}_0^2} \times \left\{ \frac{2\pi\bar{r}_0 \bar{S} \Delta n(\bar{r}_0)}{G\tau_n} + \bar{R}^{*2} (4 - \pi) \left[1 - \frac{\Delta n(\bar{R})}{G\tau_n} \right] \right\}. \quad (10)$$

Анализ формулы (10) показывает, что средняя концентрация фотоносителей при фиксированном ненулевом значении \bar{S} уменьшается при увеличении \bar{r}_0 и увеличивается с ростом \bar{R} . Увеличение \bar{S} при фиксированных значениях \bar{r}_0 и \bar{R} приводит к монотонному уменьшению величины $\langle \Delta n \rangle$ и ее насыщению при $\bar{S} \rightarrow \infty$, причем минимальное значение $\langle \Delta n \rangle$ равно

$$\frac{\langle \Delta n \rangle^{\min}}{G\tau_n} = 1 - \frac{1}{4\bar{R}^{*2} - \pi\bar{r}_0^2} \times \left\{ \bar{R}^{*2} (4 - \pi) \frac{I_1(\bar{R})K_0(\bar{R}) + K_1(\bar{R})I_0(\bar{R})}{I_1(\bar{R})K_0(\bar{r}_0) + K_1(\bar{R})I_0(\bar{r}_0)} + 2\pi\bar{r}_0 \frac{I_1(\bar{R})K_1(\bar{r}_0) - K_1(\bar{R})I_1(\bar{r}_0)}{I_1(\bar{R})K_0(\bar{r}_0) + K_1(\bar{R})I_0(\bar{r}_0)} \right\}. \quad (11)$$

Когда радиус пор и среднее расстояние между ними существенно превышают диффузионную длину неосновных носителей заряда, из (11) с использованием асимптотических свойств бесселевых функций [7] получаем

$$\frac{\langle \Delta n \rangle^{\min}}{G\tau_n} = 1 - \frac{1}{4\bar{R}^{*2} - \pi\bar{r}_0^2} \times \left[\bar{R}^{*2} (4 - \pi) \frac{\sqrt{\bar{r}_0}}{\sqrt{\bar{R}} \cosh(\bar{R} - \bar{r}_0)} + 2\pi\bar{r}_0 \tanh(\bar{R} - \bar{r}_0) \right]. \quad (12)$$

При $\bar{S} \rightarrow \infty$, $\bar{R}, \bar{r}_0, \bar{R} - \bar{r}_0 \gg 1$ средняя концентрация фотоносителей стремится к значению

$$\frac{\langle \Delta n \rangle^{\min}}{G\tau_n} \approx 1 - 0,73\pi \frac{\bar{r}_0}{\bar{R}^2}, \quad (13)$$

т. е. линейно уменьшается с ростом радиуса пор.

Рассчитанные по формуле (10) зависимости средней концентрации фотоносителей от радиуса пор и отношения расстояния между порами к их

радиусу для различных значений скорости поверхности рекомбинации приведены на рис. 3 и 4.

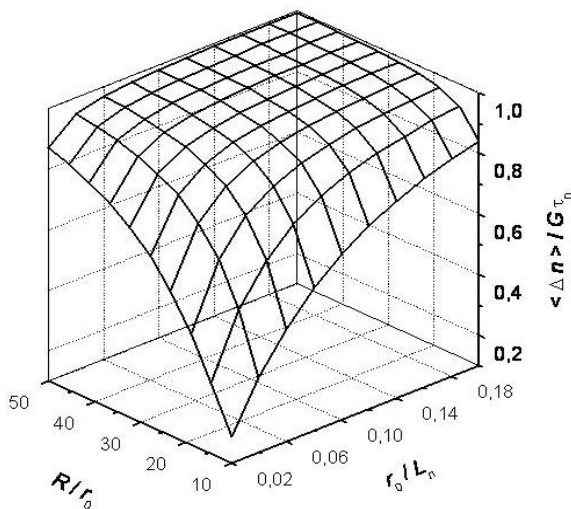


Рис. 3. Зависимости средней концентрации фотоносителей от r_0/L_n и R/r_0 , $\bar{S} = 5$

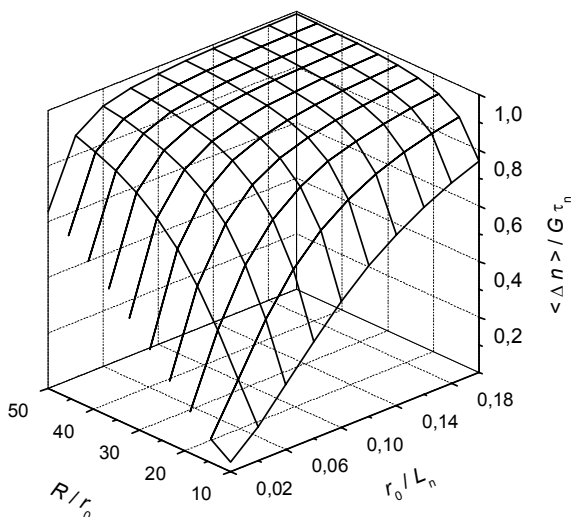


Рис. 4. Зависимости средней концентрации фотоносителей от r_0/L_n и R/r_0 , $\bar{S} = 200$

Заключение

В работе выполнен аналитический расчет фоточувствительности (фотопроводимости) полупроводника с равномерно распределенными цилиндрическими порами для случая однородной генерации фотоносителей. Показано, что фотопроводимость пористого полупроводника при фиксированном ненулевом значении скорости поверхностной рекомбинации уменьшается при увеличении радиуса пор и увеличивается с ростом среднего расстояния между ними. Увеличение скорости поверхностной рекомбинации при заданных значениях радиуса пор и среднего расстояния между ними сопровождается монотонным уменьшением фотопроводимости, которая насыщается при очень большой скорости поверхностной рекомбинации. Минимальное значение фотопроводимости, наблюдающееся при больших значениях скорости поверхностной рекомбинации, линейно уменьшается с ростом радиуса пор.

Литература

1. Canham L. T. // Appl. Phys. Lett. 1990. V. 57. P. 1046.
2. Monastyrskii L. S., Lesiv T. I., Olenych I. B. // Thin Solid Films. 1999. V. 343, 344. P. 335.
3. Baratto C. et al. // Sensors. 2002. V. 2. P. 121.
4. Seong-Jeen Kim et al. // J. Phys. D: Appl. Phys. 2000. V. 33. P. 1781.
5. Ваипанов Ю. А., Смытнына В. А. Адсорбционная чувствительность полупроводников. — г. Одесса: Астропринт, 2005.
6. Монастырский Л. С., Соколовский Б. С. // Прикладная физика. 2007. № 6. С. 127.
7. Ватсон Д. Теория бесселевых функций. — М.: Изд-во иностр. лит-ры. 1949.

Calculation of photosensitivity of porous silicon with the cylindrical geometry of pores

L. S. Monastyrskii, B. S. Sokolovskii, V. S. Vasylyshyn

Ivan Franko National University of Lviv, 50 Dragomanov str., Lviv, 79005, Ukraine

E-mail: monastyr@electronics.wups.lviv.ua

The paper theoretically investigates a model of the photosensitivity of porous silicon with cylindrical pores in the condition of homogeneous generation of photocarriers. Dependences of the photoconductivity of a porous semiconductor on the velocity of recombination of nonequilibrium carriers at the surfaces of pores, radius of pores and average distance between them are analyzed. At large velocities of surface recombination the photoconductivity of porous semiconductor is shown to linearly decrease with increasing the pore's radius.

PACS: 85.60.-q

Keywords: photosensitivity, porous silicon, pores, calculation.

Bibliography — 7 references.

Received September 27, 2009