

Experimente und numerische Modellierung zum Ladungsträgertransport in a-Si:H/c-Si Heterodioden

Von der Fakultät für Mathematik und Naturwissenschaften der
Carl von Ossietzky Universität Oldenburg
zur Erlangung des Grades eines
Doktors der Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.)
angenommene Dissertation

von

Maximilian Rösch

geboren am 13.12.1968

in Markt Indersdorf

Erstgutachter: Prof. Dr. Gottfried Heinrich Bauer

Zweitgutachter : Prof. Dr. Jürgen Parisi

Tag der Disputation : 21.05.2003

**Experimente und numerische
Modellierung zum
Ladungsträgertransport in a-Si:H/c-Si
Heterodioden**

von

Maximilian Rösch

Oldenburg 2003

**Experimente und numerische
Modellierung zum
Ladungsträgertransport in a-Si:H/c-Si
Heterodioden**

Von der Fakultät für Mathematik und Naturwissenschaften der
Carl von Ossietzky Universität Oldenburg
zur Erlangung des Grades eines
Doktors der Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.)
angenommene Dissertation

von

Maximilian Rösch

geboren am 13.12.1968

in Markt Indersdorf

Erstgutachter: Prof. Dr. Gottfried Heinrich Bauer

Zweitgutachter : Prof. Dr. Jürgen Parisi

Tag der Disputation : 21.05.2003

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Heterodioden aus amorphem und kristallinem Silizium	4
2.1	Amorphes und kristallines Silizium.....	4
2.2	Bandverbiegung und Banddiskontinuitäten.....	7
2.3	a-Si:H/c-Si Proben	10
3	Numerische Simulation	13
3.1	Poissongleichung	13
3.2	Zustandsdichte und Ladungsträgerdichten	14
3.3	Kontinuitätsgleichungen	17
3.4	Transportgleichungen	17
3.5	Rekombination und Generation von Ladungsträgern durch Defekte	21
3.5.1	Übergangsraten freier Ladungsträger in Bandausläufer	22
3.5.2	Übergangsraten freier Ladungsträger in Dangling Bond Zustände	23
3.6	Generation freier Ladungsträger durch Beleuchtung.....	24
3.7	Randbedingungen	25
3.7.1	Ohmscher Kontakt	25
3.7.2	Schottkykontakt	25
4	Ladungsträgertransport.....	27
4.1	Ladungsträgertransportmodelle	27
4.1.1	I-U Dunkelkennlinien	27
4.1.2	Diffusionsstrom.....	29
4.1.3	Rekombinationsstrom	32
4.1.4	Thermionische Emission.....	33
4.1.5	Tunnelströme	35

4.1.6	Temperaturabhängigkeit der verschiedenen Ladungsträgertransportmodelle	37
4.2	Experimentelle Strom-Spannungskennlinien	38
4.2.1	Analyse der Diodenparameter A(T) und B(T) durch ein 2-Diodenmodell .	40
4.2.2	Temperaturabhängigkeit der Diodenparameter	42
4.2.3	Strom-Spannung in Sperrichtung.....	46
4.2.4	Probe mit Wasserstoff-Plasma Behandlung	49
4.2.5	Heterodiode ohne intrinsische Zwischenschicht.....	52
4.2.6	Vergleich der Ergebnisse mit anderen Arbeiten	53
4.3	Strom-Spannung unter Beleuchtung.....	55
4.4	Einfluß von Barrieren auf die Strom-Spannungs-Hellkennlinie	58
4.4.1	Einfluß von Schottkybarrieren auf die Strom-Spannungs-Hellkennlinie	59
4.4.2	Simulation von Strom-Spannungs-Hellkennlinien in Abhängigkeit des Leitungsbandsprungs ΔE_c	61
4.5	Simulation von pn- und np-Heterodioden mit Grenzflächendefekten.....	65
4.6	Ergebnisse der Untersuchungen zum Ladungsträgertransport	69
5	Kapazitätsmessungen und -Simulationen.....	70
5.1	Theoretische Grundlagen.....	70
5.1.1	Kapazität der Raumladungszone	70
5.1.2	Einfluß von Defekten auf die Raumladungskapazität	73
5.2	Simulation der Kapazität durch Laplace-Transformationen von Stromdichtetransienten	77
5.3	Meßaufbau und Meßtechnik der Admittanzmessungen	79
5.4	Kapazitäts-Spannungs Messung	84
5.5	Erhöhte Niederfrequenz-Kapazität durch Defekte	89
5.6	Numerische Simulation der Kapazität mit Grenzflächen- und Volumendefekten ..	94
5.6.1	Simulation der Kapazität einer (ni)-a-Si:H/(p)-c-Si Diode mit Grenzflächendefekten	94
5.6.2	Simulation der Kapazität einer ni-a-Si:H/p-c-Si Diode mit Volumendefekten im kristallinen Silizium	98
5.7	Heterodioden mit unterschiedlicher Plasmabehandlung	103
5.8	Ergebnisse der Kapazitätsmessungen/-Simulationen	106

6 Zusammenfassung	107
Anhang A Präparation der Heterostrukturen	110
A.1 Präparationsschritte.....	110
A.2 Abätzen des Oxids	111
A.3 Deposition von amorphem Silizium	113
Anhang B Numerische Lösung.....	115
B.1 Skalierung.....	115
B.2 Räumliche Diskretisierung	116
B.3 Numerische Lösung im thermischen Gleichgewicht.....	120
B.4 Transiente Lösung	121
B.5 Stationäre Lösung	123
Anhang C Simulationsparameter	125
Literaturverzeichnis.....	128

1 Einleitung

Silizium ist das am meisten verwendete Element in der Photovoltaik. Zum einen werden hocheffiziente Solarzellen aus kristallinem Silizium (c-Si) hergestellt, die im Labormaßstab mit 24.7% [Green02] dem theoretisch mit diesem Material möglichen Wirkungsgrad von 29% [Würfel00] schon sehr nahe kommen. Der technische und finanzielle Aufwand für die Produktion der hocheffizienten kristallinen Solarzellen ist jedoch sehr hoch. Zum anderen wird amorphes, mit Wasserstoff versetztes Silizium (a-Si:H), das wesentlich einfacher und auch großflächig hergestellt werden kann, für Anwendungen benutzt, bei denen der Wirkungsgrad nicht die entscheidende Rolle spielt, wie z.B. Armbanduhren oder Taschenrechner. Die Beschichtung von a-Si:H erfolgt meist durch Glimmentladung (+abgekürzt mit CVD, Chemical Vapour Deposition oder PECVD, Plasma Enhanced Chemical Vapour Deposition) bei typischen Temperaturen von ca. 250 °C [Street91], weshalb die Deposition auf vielen Substraten wie Glas oder sogar Kunststofffolien (bei $T < 100^\circ\text{C}$) möglich ist. Die erzielten Wirkungsgrade mit Dünnschicht-Solarzellen aus a-Si:H und a-SiGe:H liegen im Bereich bis 14% [Yang97], sinken jedoch bei längerer Bestrahlung wegen des Staebler-Wronski-Effekts [Staebler77] meist deutlich ab.

Um die Akzeptanz von effizienten Solarmodulen zur Energieerzeugung zu verbessern und deren Herstellungskosten zu senken, liegt heute das Augenmerk in großem Maße auf der Vereinfachung der Produktionsverfahren. Ein aufwendiger Schritt ist die Eindiffusion von Phosphor in den Bor-dotierten kristallinen Wafer, wodurch eine Diode entsteht. Diese Eindiffusion findet bei Temperaturen über 800 °C statt [Goetzberger97] und dauert bis zu 1 Stunde.

Ein neues Konzept wurde von der Fa. Sanyo [Tanaka92] vorgestellt, bei der eine Diode nicht mehr durch Eindiffusion, sondern durch Beschichtung des Wafers mit einer dünnen Schicht aus dotiertem amorphem Silizium entsteht. Diese Heterodioden aus amorphem und kristallinem Silizium wurden wegen einer zusätzlich vor dem dotierten a-Si:H auf den kristallinen Wafer aufgetragenen dünnen intrinsischen a-Si:H-Schicht „HIT-Solarzellen“ genannt (HeteroJunction with Intrinsic Thin Layer). Daß mit diesem Heteroübergang auch hocheffi-

ziente Solarzellen mit einem Wirkungsgrad über 20 % möglich sind, wurde inzwischen gezeigt [Sawada94].

Wie der Heteroübergang nun die Solarzelleneigenschaften beeinflusst wurde seitdem von einigen Forschungsgruppen untersucht, wobei der Schwerpunkt oft auf technologischem Gebiet lag und Parameter wie z.B. Schichtdicke und Dotierung der amorphen Schicht variiert wurden. Andererseits ergaben sich bei prinzipiellen Fragestellungen wie der Aufteilung des Bandlückenunterschieds zwischen amorphem (etwa 1.75 eV) und kristallinem Silizium (1.12 eV) auf das Valenz- und Leitungsband gravierende Unterschiede in den Ergebnissen der unterschiedlichen Gruppen. Auch die Frage nach dem Ladungsträgertransport über den Heteroübergang konnte bisher nicht eindeutig geklärt werden. Diese grundlegenden Themen sind nicht nur für Solarzellen, sondern grundsätzlich für alle Halbleiterbauelemente auf Basis von amorphen/kristallinen Halbleitern wichtig. Daß die Materialkombination amorphes/kristallines Silizium auf Interesse stößt zeigt sich auch an der Anzahl von unterschiedlichen Bauelementen, die mit dieser Materialkomposition vorgestellt wurden, wie Photodetektoren [Laih97], Röntgen- und Gammastrahlungsdetektoren [Wei96, Walton97] aber auch Thyristor-Schaltelemente [Chen90, Chen97] und Hochfrequenz-Hetero-Bipolar-Transistoren [Kondo96].

Zur Klärung der fundamentalen Fragen des Ladungsträgertransports und der energetischen Verhältnisse beim a-Si:H/c-Si Heteroübergang soll mit dieser Arbeit beigetragen werden. Dies geschieht experimentell durch Strom-Spannungsmessungen und frequenzabhängige Kapazitätsmessungen bei unterschiedlichen Temperaturen und wird durch numerische Berechnungen mit einem dafür entwickelten Halbleitersimulationsprogramm unterstützt.

Zunächst werden im 2. Kapitel grundlegende Eigenschaften des amorphen und kristallinen Siliziums und der a-Si:H/c-Si-Heterodiode erläutert. Die Parameter der für Messungen verwendeten Proben wird dort aufgelistet.

Ein großer Teil der Arbeit beschäftigt sich mit der eindimensionalen Halbleitersimulation, die auch speziell an die besonderen Defekteigenschaften des amorphen Siliziums angepaßt ist und die im Rahmen dieser Arbeit weiterentwickelt wurde. Das physikalische Modell der Simulation wird im 3. Kapitel beschrieben. Weitergehende numerische Details dazu sind im Anhang B erläutert. Die Simulationsrechnung wird hier als Mittel verwendet, um den Einfluß der Heterobarriere sowie von Defekten auf den Ladungsträgertransport deutlich zu machen.

Eine Untersuchung des Ladungsträgertransports über den Heteroübergang im 4. Kapitel wurde durch Strom-Spannungskennlinien von a-Si:H/c-Si Heterodioden im Temperaturbe-

reich zwischen 90 und 350 K experimentell durchgeführt. Die gemessenen a-Si/c-Si Heterodioden wurden dafür in Oldenburg präpariert, was im Anhang A kurz vorgestellt wird.

Die im 5. Kapitel vorgestellten Admittanz- bzw. Kapazitätsmessungen in Abhängigkeit der Temperatur dienen einerseits als Beitrag zur Bestimmung der Energiebarriere im Leitungs- bzw. Valenzband. Des weiteren können durch frequenz- und temperaturabhängige Kapazitätsmessungen auch Aussagen über Defekte im Bereich der Raumladungszone gemacht werden.

Zur Unterstützung der Interpretation der Kapazitätsmessungen, vor allem der räumlichen Defektverteilung, wurden die Simulationsrechnungen transient durchgeführt und die daraus erhaltene zeitabhängige Stromdichte anschließend einer Laplace-Transformation unterzogen um sie mit den frequenzabhängigen Admittanzmessungen vergleichen zu können. Während die Simulation von stationären Strom-Spannungsmessungen zum Standard-Repertoire von Halbleitersimulationen gehört, ist die Simulation frequenzabhängiger Kapazität mit dieser Methode bisher kaum durchgeführt worden. Die Ergebnisse werden schließlich diskutiert und mit Ergebnissen unterschiedlicher Forschergruppen verglichen.

2 Heterodioden aus amorphem und kristallinem Silizium

In diesem Kapitel werden die Grundlagen von Heterodioden vorgestellt, um einen Überblick über die in dieser Arbeit untersuchte Halbleiterstruktur zu geben. Ein grundlegendes Modell für Heteroübergänge und insbesondere das Bändermodell der Heterodioden wird erläutert. Vorher wird kurz auf besondere Eigenschaften von amorphem Silizium im Vergleich zum kristallinen Silizium eingegangen, die für das Verständnis im weiteren wichtig sind und die auch als Basis für die numerische Modellierung der elektronischen Eigenschaften von amorphem Silizium dienen.

2.1 Amorphes und kristallines Silizium

Kristallines Silizium (c-Si) zeichnet sich durch seine hohe Reinheit und seine Perfektion des Kristallgitters aus. Seine Herstellung ist jedoch sehr teuer und erfordert einen hohen Energieaufwand. Kristallines Silizium wird aus Siliziumschmelzen bei hohen Temperaturen über 1400 °C durch das Czochralskiverfahren und das Zonenschmelzverfahren [Sze85] gewonnen. Auch ist die Größe der herstellbaren Scheiben in der Größe aus technischen Gründen derzeit auf 30 cm Durchmesser beschränkt.

Amorphes hydrogenisiertes Silizium (a-Si:H) ist dagegen wesentlich einfacher durch chemische Abscheidung aus der Gasphase (CVD, Chemical Vapour Deposition, z.B. in [Luft93]) bei vergleichsweise niedrigen Temperaturen um 250°C herzustellen. Die Abscheidung von a-Si:H ist auch auf großflächigen Substraten von 1m² möglich. Während kristallines Silizium wegen seiner hohen Perfektion in kleinsten Strukturen der Mikroelektronik verwendet wird, dient amorphes Silizium deshalb als Material für großflächige Anwendungen wie zur Ansteuerung von Röntgensensoren in der Medizin, Flachbildschirmen [Suzuki91] sowie CCD-Detektoren (Charge Coupled Device) durch a-Si:H Dünnschichttransistoren (TFT's) [Matsumuura91].

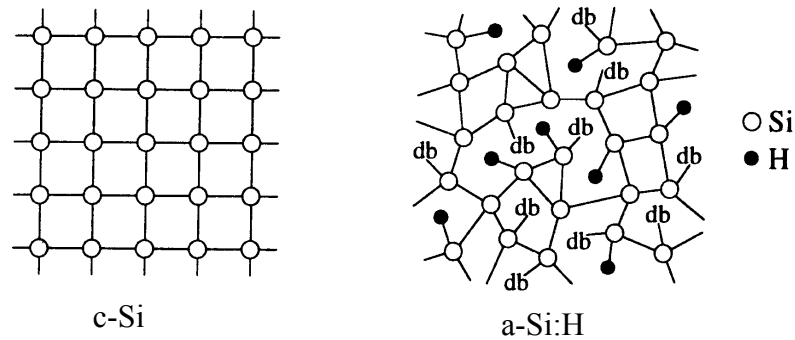


Abb. 2.1 Zweidimensionale schematische Darstellung von kristallinem (c-Si) und amorphem hydrogenisiertem Silizium (a-Si:H). „db“ sind „Dangling Bonds“, Valenzelektronen, die nicht mit einem Nachbaratom gebunden sind (Die Häufigkeit der Dangling Bonds ist in der Darstellung übertrieben)

Amorphes hydrogenisiertes Silizium (a-Si:H) unterscheidet sich in seiner Struktur von kristallinem Silizium (c-Si), das idealerweise eine perfekte Kristallsymmetrie aufweist, durch seine Abweichungen von Bindungslängen und -winkeln zwischen den Siliziumatomen. Dies führt zu einer fehlenden Fernordnung der Struktur und auch zu Defekten, die durch das Fehlen eines Bindungspartners für ein Siliziumatom zustande kommen, den sogenannten Dangling Bonds, die amphoterer Charakter haben, d.h., sie können neutral, positiv oder negativ geladen sein. Wasserstoffatome sättigen einen großen Anteil der Dangling Bonds ab und führen zu einer deutlichen Verringerung der elektronisch wirksamen Defekte. Zugleich wird die Bandlücke durch das Einbringen von Wasserstoff erhöht. Die Bindungsstruktur ist schematisch in Abbildung 2.1 dargestellt.

Während die Kristallstruktur beim c-Si zu einer verbotenen Zone in der Zustandsdichte, einer Energielücke führt, hat das amorphe Silizium eine davon deutlich abweichende Zustandsdichte. Eine scharf definierte Bandlücke, in der es keine Zustände gibt, existiert nicht. Ein Wert für eine Bandlücke wird aus der spektralen Absorption mit einer speziellen Auftragung nach Tauc [Tauc74] definiert, bei der die Bandlücke mit Hilfe von Annahmen für die Zustandsdichte aus der Absorption extrapoliert wird. Eine weitere übliche Festlegung einer optisch definierten Bandlücke ist die Photonenenergie, bei der die Absorption den Wert 10^4 cm^{-1} hat. Ein typischer Wert für die Bandlücke nach Tauc ist für intrinsisches (i) a-Si:H 1.75 eV. Anstatt von einer Bandlücke spricht man beim amorphen Silizium auch oft von einer Beweglichkeitslücke. Diese trennt lokalisierte Zustände innerhalb der Beweglichkeitslücke von ausgedehnten Zuständen außerhalb. Ladungsträger in den ausgedehnten Zuständen sind frei beweglich und tragen hauptsächlich zur Leitfähigkeit bei. Ladungsträger in lokali-

sierten Zuständen können zum Stromtransport nur durch „Hüpfen“ von einem Zustand zum nächsten beitragen, dem sogenannten Transport durch Hopping [Mott68]. Dieser Hoppingtransport dominiert bei tiefen Temperaturen, wenn die freien Zustände kaum mit Ladungsträgern besetzt sind.

Am Leitungs- und Valenzband schließt sich jeweils eine etwa exponentiell abfallende Zustandsdichte an, die sogenannten Bandausläufer („Bandtails“). Vor allem der Valenzbandtail, der für intrinsisches a-Si:H eine charakteristische exponentielle Abklingkonstante von etwa 50 meV zeigt, gegenüber ca. 30 meV am Leitungsbandtail, bestimmt die „sub-Bandlücken“ Absorption mit der sogenannten Urbachenergie.[Tauc74].

Die Absorption zeigt demzufolge nahe der Bandlücke eine exponentielle Abnahme, die die Zustandsdichte der Bandausläufer widerspiegelt. Die Urbachsteigung nimmt dabei mit der Dotierung stark zu. Die in Abbildung 2.3 gezeigten Absorptionskoeffizienten für kristallines, sowie intrinsisches und n⁺-dotiertes amorphes Silizium werden auch in der Simulation

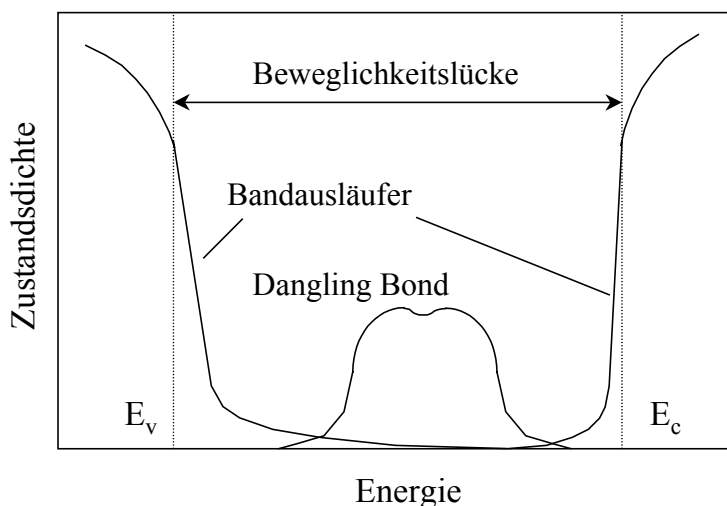


Abb. 2.2 Schematische Zustandsdichte in amorphem Silizium

verwendet.

Offene Bindungen führen zu tiefen Zuständen etwa in der Mitte der Bandlücke. Um die Dichte dieser Defektzustände, die als Rekombinationszentren wirken, zu verringern, werden die offenen Bindungen soweit wie möglich mit Wasserstoff abgesättigt. Dennoch hat intrinsisches a-Si:H eine Defektdichte von ca. 10^{16} cm^{-3} , die allerdings mit hoher Dotierung noch wesentlich zunimmt. Street et al. fanden aus Lumineszenz, optischer Absorption und Elektron-Spin-Resonanz Messungen Werte für Defektdichten von stark n-dotiertem a-Si:H um ca. 10^{19} cm^{-3} [Street85, Street85b]. Auch die charakteristischen Energien für die Tailsteigungen

(charakteristische exponentielle Abklingkonstanten) sind deutlich höher. Aus CPM-Messungen (Constant Photocurrent Method) [Vanecek83] an eigenen (n^+)-a-Si:H Filmen werden Defektdichten von 10^{19} cm^{-3} und Urbachenergien im Bereich von 200meV gefunden. Die Defektdichte wird dabei proportional zum Absorptionskoeffizienten angenommen. Die Kalibrierung der Proportionalitätskonstanten erfolgte durch Vergleich mit ESR-Messungen (Elektron-Spin-Resonanz) [Fuhs92]. Diese Werte für die Defektdichten werden auch in der eigenen numerischen Simulation benutzt. Hohe Zustandsdichten in der Bandlücke beeinflussen die Absorption im infraroten Wellenlängenbereich, was dazu führt, daß hoch dotiertes a-Si:H auch für Photonenenergien kleiner als 1.75 eV einen höheren Absorptionskoeffizient aufweist als im kristallinen Silizium, was für (i)-a-Si:H nicht der Fall ist.

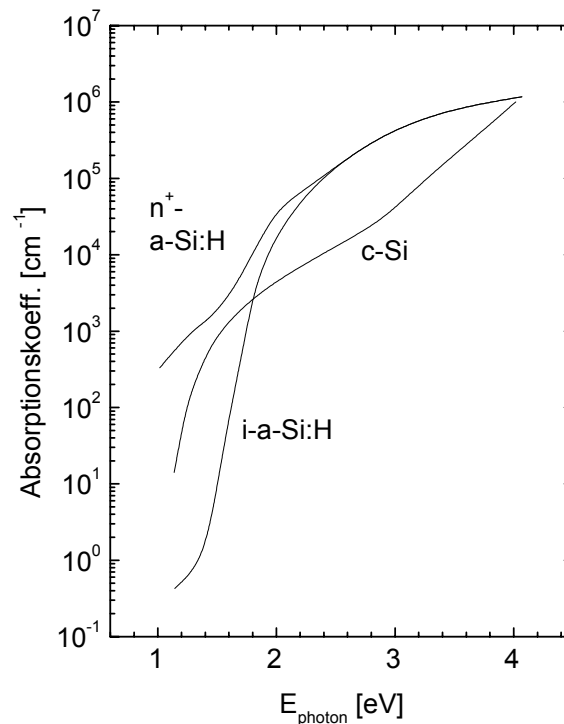


Abb. 2.3 Absorptionskoeffizienten von kristallinem Silizium(c-Si) [Melchior72], intrinsischem (a-Si:H) (aus [Cody80]) und n^+ -dotiertem amorphem Silizium (n^+ -a-Si:H, eigene Transmissions- und CPM-Messungen)

2.2 Bandverbiegung und Banddiskontinuitäten

Bringt man zwei verschiedene Halbleiter zusammen, so bilden diese einen Heteroübergang. Dabei unterscheidet man isotype Übergänge, wenn die Dotierung der beiden Halbleiter gleich ist, und anisotype Heteroübergänge mit unterschiedlicher Dotierung. Die Halbleiterstrukturen dieser Arbeit bestehen im wesentlichen aus n-typ dotiertem amorphem Silizium und p-typ

dotiertem kristallinem Silizium (im folgenden werden mit Donatoratomen dotierte n-type Halbleiter nur noch mit „n-dotiert“ und mit Akzeptoratómen dotierte Halbleiter als „p-dotiert“ bezeichnet). Schematisch ist das Bändermodell für einen anisotypen Heteroübergang in Abbildung 2.4 gezeigt.

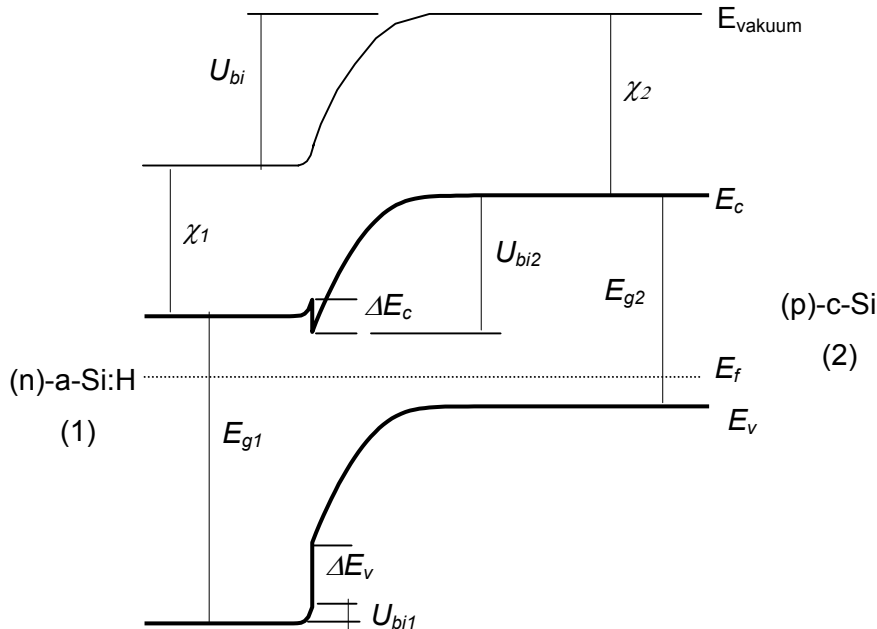


Abb. 2.4 Energiebändermodell eines (n)-a-Si:H/(p)-c-Si Heteroübergangs. Aufteilung der „built-in“ Spannung $U_{bi} = U_{bi1} + U_{bi2}$ ist stark unsymmetrisch wegen der schwächeren Dotierung im c-Si

Nach einem thermodynamisch begründeten Modell von Anderson [Anderson62] entsteht beim Zusammenfügen zweier Halbleiter mit unterschiedlichen Elektronenaffinitäten χ ein Sprung ΔE_c im Leitungsband. Dieser Sprung ist gegeben durch

$$\Delta E_c = \chi_2 - \chi_1 \quad (2.1)$$

Ein möglicher Sprung im Valenzband ergibt sich aus dem Sprung im Leitungsband und der Differenz der Bandlücken.

$$\Delta E_v = E_{g1} - E_{g2} + \chi_2 - \chi_1 \quad (2.2)$$

(Tiefgründigere thermodynamische Betrachtungen von Nussbaum zeigen allerdings Korrekturen dieses einfachen Modells [Nussbaum81].)

Diese Sprünge der Bandkanten am Heteroübergang beeinflussen auch direkt die Bandverbiegung im thermischen Gleichgewicht. Die Diffusionsspannung U_{bi} („bi“ für „built-in“ Voltage) läßt sich durch die beiden Fermi-niveaus und Leitungs- oder Valenzbandsprung ausdrü-

cken.

$$\begin{aligned} eU_{bi} &= (E_f - E_v)_2 - (E_f - E_v)_1 + \Delta E_v \\ &= (E_c - E_f)_1 - (E_c - E_f)_2 + \Delta E_c \end{aligned} \quad (2.3)$$

Die Aufteilung der Bandverbiegung am Übergang auf die beiden Halbleiter hängt dabei wie im Homoübergang von der Ladungsdichte, die durch die Dotierung und Defektladung gegeben ist, ab. Je höher die Ladungsdichte eines Materials im Vergleich zum anderen ist, um so geringer ist die Bandverbiegung und um so kürzer ist die Raumladungszone. Die Bandverbiegung kann auch dazu dienen, die Banddiskontinuitäten ΔE_c und ΔE_v nach Gleichung 2.3 zu bestimmen, wenn die Fermi-niveaus bekannt sind. Dies kann z.B. durch die Messung der Kapazität in Abhängigkeit der Spannung erfolgen. Die Barrieren im Leitungs- und Valenzband von a-Si:H/c-Si Heterostrukturen wurden bisher experimentell mit weiteren verschiedenen Methoden ermittelt. Dabei ergaben sich unterschiedliche Resultate für den Leitungsbandsprung ΔE_c und den Valenzbandsprung ΔE_v . Die untersuchten Proben waren jedoch zum Teil auch von unterschiedlichem Typ (n,p) dotiert, wodurch sich möglicherweise auch unterschiedliche Eigenschaften ergeben.

Matsuura et al. bestimmten den Leitungsbandsprung ΔE_c an (i)-a-Si:H/(p)-c-Si Strukturen zu etwa 0.2 eV (0.13 ... 0.33 eV) aus Kapazitäts-Spannungskurven [Matsuura84, Matsuura89].

Aus innerer Photoemission ergaben sich bei Mimura und Hatanaka an (i)-a-Si:H auf (n)- und (p)-c-Si Heterostrukturen $\Delta E_c=0.09$ und $\Delta E_v=0.71$ eV [Mimura87]. Dabei werden Ladungsträger optisch über die Barriere angeregt, wodurch der Photostrom steigt.

Cuniot und Marfaing fanden an (p)-a-Si:H/(n)-c-Si Heterodioden, die durch Sputtern der amorphen Schicht hergestellt wurden, mit der Methode der internen Photoemission eine große Barriere im Leitungsband und eine kleinere Barriere im Valenzband [Cuniot88].

Essick und Cohen fanden an Schottkystrukturen aus Metall/(i)-a-Si:H/(n)-c-Si kleine Leitungsbandsprünge ΔE_c von 0.05 ± 0.05 eV aus temperatur- und frequenzabhängigen Kapazitätsmessungen [Essick89] sowie eine Valenzbanddiskontinuität $\Delta E_v=0.58 \pm 0.02$ eV durch lichtinduzierte Emission von Löchern über die Barriere im Valenzband. Mit der gleichen Methode ermittelten sie auch Banddiskontinuitäten von Heterostrukturen aus a-SiC:H/c-Si $\Delta E_c=0.01$ und $\Delta E_v=0.67$ eV [Essick96].

Eschrich et al. [Eschrich93] bestimmten den Sprung im Leitungsband an (n)-a-Si:H/(p)-c-Si Solarzellen zu etwa $\Delta E_c=0.16$ eV durch Vergleich von gemessenen und

simulierten Hellkennlinien. Mit der gleichen Methode ergab sich bei Kolter et al. [Kolter95] ein Wert von etwa $\Delta E_c = 0.16$ eV.

Gall et al. ermittelten aus Admittanzmessungen [Gall95, Gall96] und aus spektralen Photostrome [Gall97] an Metall/(i)-a-Si:H/(p)-c-Si Schottkystrukturen kleine Leitungsbandsprünge $\Delta E_c = 0.06$ eV.

Mit der Methode der Yield-Spektroskopie erhielten Sebastiani et al. Werte für die Valenzbanddiskontinuität von $\Delta E_v = 0.44$ eV [Sebastiani95].

In fast allen Fällen wurden kleine Diskontinuitäten im Leitungsband und große im Valenzband gefunden. Das einzige dem widersprechende Ergebnis von Cuniot und Marfaing wurde an Heterostrukturen aus gesputtertem amorphem Silizium bestimmt. Alle anderen amorphen Schichten wurden durch chemische Gasphasenabscheidung bei Radiofrequenzen (RF) hergestellt. Allerdings ergaben sich die etwas größeren Leitungsbandsprünge bei Proben, bei der an der Grenzfläche zum kristallinen Silizium das amorphe Material dotiert war. Bei den anderen Proben war auch deswegen undotiertes a-Si:H verwendet worden, um Tunnelströme durch eine sonst sehr dünne und spitze Barriere zu verringern, wodurch man effektiv eine zu kleine Barriere erhalten würde. Es ist eine interessante Fragestellung, ob das abweichende Ergebnis von der unterschiedlichen Herstellung herrührt oder ob eher die Dotierung dafür verantwortlich ist.

Auch an Heterostrukturen aus amorphem und mikrokristallinem Silizium wurden Unterschiede in den Bandkanten ermittelt. Dies führt jedoch mit der gleichen Methode der internen Photoemission zu unterschiedlichen Ergebnissen z.B. einer Barriere von 0.23 eV einmal im Valenz- und einmal im Leitungsband [Xu1995].

2.3 a-Si:H/c-Si Proben

Die in dieser Arbeit hergestellten und untersuchten Proben haben einen ähnlichen Aufbau wie Solarzellenstrukturen. Details zur Herstellung werden im Anhang A vorgestellt. Hier wird kurz die Struktur mit ihren Parametern erklärt. Die meisten Messungen wurden an (n)-a-Si:H/(p)-c-Si Proben durchgeführt, die schematisch in Abb. 2.5 dargestellt sind.

Es wurden jedoch auch Dunkelströme an der invers dotierten Struktur gemessen. Die untersuchten (n)-a-Si:H/(p)-c-Si Proben wurden aus Bor-dotierten kristallinen Siliziumscheiben mit einer spezifischen Leitfähigkeiten von $0.5 \Omega\text{cm}$, die durch Zonenschmelzen (besonders defektarme „float zone wafer“) hergestellt wurden, präpariert. Die p-dotierten Wafer sind 200

μm dick. An der Rückseite besitzen sie ein Back-Surface-Field, d.h. eine erhöhte Dotierung, um im Betrieb als Solarzelle Elektronen vom Rückkontakt fernzuhalten. Der Rückkontakt besteht aus gesintertem Aluminium. Auf diesen Wafer folgt eine amorphe, mit Wasserstoff versetzte Siliziumschicht, die durch plasmaunterstützte Gleichstrom-Glimmentladung (DC-PECVD) aufgebracht wurde. Vor der Beschichtung mit hoch dotiertem amorphem Silizium wurde bei den meisten Proben zuerst eine etwa 5 nm dünne, undotierte amorphe Schicht abgeschieden. Die Schichtdicke des amorphen Siliziums lag im Bereich 30-100 nm. Dies ist etwas dicker, als optimierte Solarzellen mit 10-20 nm [Kuwano92, Borchert97] aufweisen. Dadurch findet eine erhöhte Absorption in der amorphen Schicht statt, wo der Großteil der Ladungsträger wieder rekombiniert. Die leicht erhöhte Schichtdicke wurde gewählt, um Kurzschlüsse zu vermeiden, die den Stromtransport über den Heteroübergang überlagern. Als Frontkontakte für die Messung der Strom-Spannungskennlinien und Kapazitätsmessungen wurden ZnO:Al (kreisförmig, 3-4 mm \varnothing) und Aluminium (1-4 mm \varnothing) verwendet, das zum Teil halbtransparent (Transmissionen etwa 10 bis 30 % im sichtbaren und im nahen infraroten Bereich) ist (ZnO:Al, mit Aluminium dotiertes Zinkoxid, ist ein „TCO“ (Transparent Conducting Oxide), das als transparentes leitendes Oxid als Kontaktmaterial in der Optoelektronik verbreitet ist).

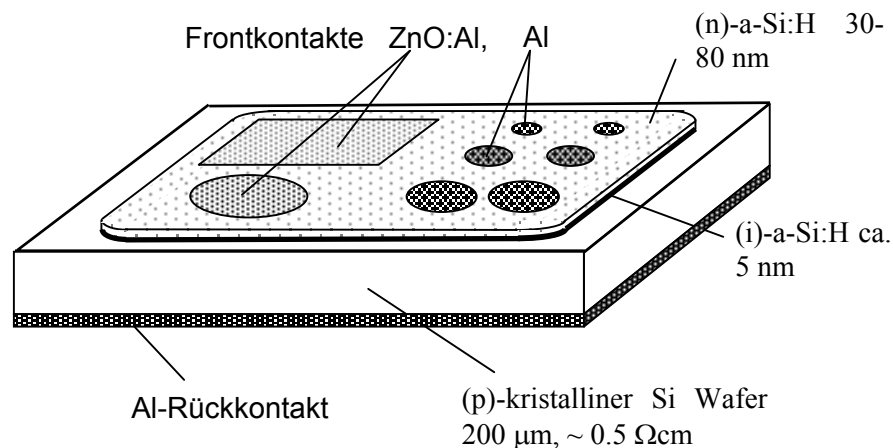


Abb. 2.5 Aufbau der (n)-a-Si:H/(p)-c-Si -Heterodioden

Um den Einfluß der Oberflächenpräparation des Wafers auf die Diodeneigenschaften zu untersuchen, wurden eine Serie von 4 Proben hergestellt, bei denen jeweils die Oberflächen von 2 Proben einem Wasserstoffplasma ausgesetzt wurden und bei jeweils 2 eine intrinsische amorphe Schicht vor der dotierten auf den Wafer deponiert wurde.

Die Schichtdicken, Dotierungen und Kontakte der verschiedenen Proben sind in Tabelle 2.1 zusammengestellt.

Tabelle 2.1: Dotierung und Schichtprofile der verwendeten a-Si:H/c-Si Heterostrukturen

Probe	Frontkontakt	a-Si:H dotiert	(i)-a- Si:H	H- Plasma	c-Si Wafer	Rückkontakt
MW50	Aluminium (Al), 4 mm Ø	n ⁺ , ~55 nm	-	-	p-typ, 0.5 Ωcm, 200µm	Al (mit Back- Surface-Field)
MW60	ZnO:Al, Al 4 mm Ø	n ⁺ , ~30 nm	~5 nm	5 min	„	Al (mit Back- Surface-Field)
MW65	Al, 2.5 mm Ø für Kapazität, 4 mm Ø für Strom	n ⁺ , ~55 nm	~5 nm	-	„	Al (mit Back- Surface-Field)
MW71	Al halbtranspa- rent, 4 mm Ø Strom 2.5 mm Ø Kapa- zität	p ⁺ , ~65 nm	~5 nm	-	n-typ, 3-6 Ωcm, 375µm	Al
MW77	„	p ⁺ , ~65 nm	-	-	„	Al
MW78	„	p ⁺ , ~65 nm	~5 nm	3 min	„	Al
MW79	„	p ⁺ , ~65 nm	-	3 min	„	Al

3 Numerische Simulation

Um eine Halbleiterstruktur numerisch unter bestimmten Bedingungen wie angelegte Spannung und Beleuchtung zu simulieren, muß man einen Satz von physikalischen Gleichungen lösen. In diesem Kapitel werden die dafür verwendeten Gleichungen vorgestellt. Dies sind im wesentlichen grundlegende Beziehungen wie Maxwellgleichungen und halbleiterspezifische Gleichungen, die Transport, Zustandsdichte und Besetzungsstatistik, sowie Rekombination und Emission von Ladungsträgern beschreiben. Zusätzlich werden noch Gleichungen für die Absorption von Strahlung im Halbleiter hinzugefügt. Da die Simulation eindimensional ist, werden auch die folgenden Formeln in diesem Kapitel eindimensional vorgestellt. Diese Gleichungen werden räumlich diskretisiert und man erhält ein nichtlineares Gleichungssystem. Dieses Gleichungssystem kann stationär oder transient gelöst werden. Die numerischen Lösungsmethoden werden im Anhang B näher erläutert.

Die hier verwendete eindimensionale numerische Simulation basiert auf Simulationsprogrammen von Brüggemann [Brüggemann93] und Cordes [Cordes97], die für die Untersuchung zeitabhängiger Phänomene in Filmen und pin-Dioden aus amorphem Silizium entwickelt wurden. Dort wurde speziell der Einfluß von Defektzuständen auf transiente Vorgänge im amorphen Silizium untersucht [Brüggemann98]. Zusätzlich wurde im hier beschriebenen Programm die Möglichkeit zur Simulation von Heterostrukturen mit beliebiger Schichtreihenfolge eingeführt, was vor allem den Ladungsträgertransport an Heteroübergängen betrifft. Weiterhin wurde ein numerisches Verfahren zur stationären Lösung der zeitabhängigen Gleichungen hinzugefügt.

3.1 Poissongleichung

Die Poissongleichung läßt sich aus den Maxwellgleichungen herleiten. Zusätzlich wird in Kontinuitätsgleichungen eine Rate für Rekombination und eine für die Generation von freien Ladungsträgern eingeführt. Die Poissongleichung in einem Medium mit einer isotropen Die-

lektrizitätskonstante $\epsilon_r \epsilon_0$ setzt die Krümmung des elektrostatischen Potentials $\Psi(x)$ proportional zur Ladungsdichte $\rho(x)$:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x) = -\frac{\rho(x)}{\epsilon_r \epsilon_0} \quad (3.1)$$

Die Ladungsdichte am Ort x setzt sich dabei zusammen aus der Dotierladung Q_{dot} , die positiv geladenen Donatoratomen oder negativ geladenen Akzeptoratomen entspricht, den freien Elektronen- und Löcherdichten n und p , negativ und positiv geladenen Zuständen in Bandausläufern n_t und p_t , sowie geladenen Defektzuständen D^+ und D^-

$$\rho(x) = -e \left[p(x) - n(x) + p_t(x) - n_t(x) + D^+(x) - D^-(x) + Q_{dot}(x) \right] \quad (3.2)$$

Zusätzlich wird berücksichtigt, daß die relative Dielektrizitätskonstante ϵ_r in verschiedenen Halbleitern unterschiedlich ist. An einer Grenzfläche mit verschiedenen Dielektrizitätskonstanten gilt, daß die zur Grenzfläche senkrechte Komponente der dielektrischen Verschiebung $D = \epsilon E$ konstant ist. Das elektrische Feld E erhält man aus der negativen Ableitung des dielektrischen Potentials. Für dieses gilt an der Grenzfläche damit:

$$\epsilon_{r1} \left(\frac{\partial \Psi}{\partial x} \right)_1 = \epsilon_{r2} \left(\frac{\partial \Psi}{\partial x} \right)_2 \quad (3.3)$$

3.2 Zustandsdichte und Ladungsträgerdichten

Ladungsträger können sich in der Simulation in folgenden Zuständen befinden: dem Valenzband, dem Leitungsband, Bandausläufern des Valenz- und des Leitungsbands und in tiefen Defektzuständen, die amphoterer Charakter haben, d.h. positiv, neutral und negativ geladen sein können und den die sogenannten Dangling Bonds zugeordnet werden. Für Leitungs- und Valenzband werden effektive Zustandsdichten N_c und N_v angenommen, in denen implizit die Boltzmann Besetzungsstatistik und eine Zustandsdichte für freie Elektronen enthalten ist. Die Elektronen- und Löcherdichten n und p im Leitungs- bzw. Valenzband erhält man damit als

$$n = N_c \exp \left(-\frac{E_c - E_{fp}}{kT} \right) \quad (3.4)$$

$$p = N_v \exp \left(-\frac{E_{fp} - E_v}{kT} \right) \quad (3.5)$$

Die Bandausläufer wurden exponentiell über der Energie abfallend (mit den charakteristischen Steigungen T_c und T_v) angesetzt und mit der Zustandsdichte an das jeweilige Band angeschlossen:

$$N_{ic}(E) = \frac{N_c}{kT} \exp\left(\frac{E - E_c}{kT_c}\right) \quad (3.6)$$

$$N_{iv}(E) = \frac{N_v}{kT} \exp\left(\frac{E_v - E}{kT_c}\right) \quad (3.7)$$

Die Besetzung der Bandausläuferzustände für Valenz- und Leitungsband im thermischen Gleichgewicht wird nach der Fermiverteilung für Löcher bzw. Elektronen berechnet. Ein Zustand im Leitungsbandausläufer ist negativ geladen, wenn er mit einem Elektron besetzt ist, sonst neutral. Ein Zustand im Valenzbandausläufer ist positiv geladen, wenn er mit einem Loch besetzt ist, sonst neutral. Die Dichten von Elektronen n_t und Löchern p_t in einem Zustand eines Bandausläufers der Energie E und der Dichte N_t ist im thermischen Gleichgewicht gegeben durch

$$n_t = \frac{N_t(E)}{1 + \exp\left(\frac{E - E_f}{kT}\right)} \quad (3.8) \quad p_t = N_t(E) \left[1 - \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_f}{kT}\right)} \right] \quad (3.9)$$

Die Zustandsdichte für die tiefen Defekte, die Dangling Bonds, wird durch eine gaußförmige Verteilung der Zustände über der Energie mit der Peak-Energie E_{DB} und der Gaußbreite σ_E angenähert:

$$N_{DB}(E) = \frac{N_{DB}}{\sigma_E \sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{E - E_{DB}}{\sigma_E}\right)^2\right] \quad (3.10)$$

Ein positiver Dangling Bond entspricht einem Silizium-Atom, das sein ungepaartes, nicht zur Bindung beitragendes Valenzelektron abgegeben hat, während ein neutraler Dangling Bond bedeutet, daß das ungepaarte Valenzelektron am Siliziumatom verbleibt. Weiter kann sich ein zusätzliches Elektron an das ungepaarte Valenzelektron anlagern, was durch einen negativ geladenen Dangling Bond beschrieben wird. Dieser Zustand ist im amorphen Silizium jedoch energetisch ungünstiger, die Energie des Zustands nimmt zu. Dies wird durch Einführung einer sogenannten Korrelationsenergie U_{corr} beschrieben, um die die Energie des negativen Dangling Bonds gegenüber dem neutralen bzw. positiven Zustand verschiebt:

$$E_{DB}^- = E_{DB}^{0,+} + U_{corr} \quad (3.11)$$

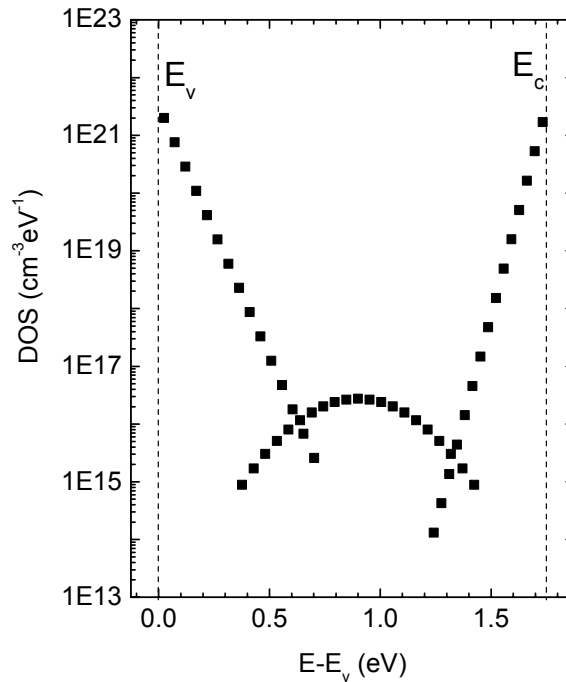


Abb 3.1 Typische diskretisierte a-Si:H-Zustandsdichte (DOS) innerhalb der Bandlücke durch Bandausläufer („Tails“, rechts Leitungsbandausläufer, links Valenzbandausläufer) und Dangling Bonds (mittig)

Die Besetzungsfunktion der Dangling Bond Zustände im thermischen Gleichgewicht kann wegen der Korrelationsenergie nicht durch die Fermiverteilung dargestellt werden, sondern man erhält die Quantenstatistik aus der Zustandssumme unter Berücksichtigung, daß der neutrale Zustand wegen zwei möglichen Spinzuständen doppelt gewichtet wird [Adler76],[Okamoto75]. Aufgrund des Pauli-Prinzips müssen die Spins beim negativ geladenen Defekt unterschiedlich sein. Die Besetzungswahrscheinlichkeiten für negative, neutrale oder positive Defekte f_-, f_0, f_+ ist dann gegeben durch

$$f_+ = \frac{1}{Z} \quad (3.12) \quad f_0 = \frac{2}{Z} \exp\left(\frac{E_f - E_{DB}}{kT}\right) \quad (3.13)$$

$$f_- = \frac{1}{Z} \exp\left(\frac{2E_f - 2E_{DB} - U_{corr}}{kT}\right) \quad (3.14)$$

wobei die Zustandssumme Z gegeben ist durch die Summe über die nicht normierten Wahrscheinlichkeiten der möglichen Zustände mal der Besetzungsmöglichkeit der einzelnen Zustände.

$$Z = 1 + 2 \exp\left(\frac{E_f - E_{DB}}{kT}\right) + \exp\left(\frac{2E_f - 2E_{DB} - U_{corr}}{kT}\right) \quad (3.15)$$

$DB_+ \quad DB_0 \quad DB_-$

Mit den bisher zusammengefaßten physikalischen Formeln kann nun eine Halbleiterstruktur im thermischen Gleichgewicht berechnet werden. Dafür genügt es, vorauszusetzen, daß das Fermi-niveau über die ganze Struktur konstant ist. Die Potentialverteilung über räumlich diskrete Gitterpunkte muß dann die Poisson-Gleichung an allen Gitterpunkten erfüllen.

3.3 Kontinuitätsgleichungen

Zur Berechnung von Vorgängen außerhalb des thermischen Gleichgewichts benötigt man Information über die zeitlichen Änderungen von Ladungsträgerdichten. Zusätzlich zur Divergenz der Stromdichte wird in den Kontinuitätsgleichungen eine Rate für Rekombination und eine für die Generation von freien Ladungsträgern eingeführt. Die Kontinuitätsgleichung beschreibt die zeitliche Änderung einer Dichte von freien Teilchen am Ort x durch einen Nettofluß durch einen Teilchenstrom und einer Generations- g und Rekombinationsrate r dieser Teilchen. Dies kann für die freien Elektronendichten n und Löcherdichten p dargestellt werden durch:

$$\frac{dn}{dt} = \frac{1}{e} \frac{d}{dx} j_n + g_n - r_n \quad (3.16)$$

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{1}{e} \frac{d}{dx} j_p + g_p - r_p \quad (3.17)$$

3.4 Transportgleichungen

Der Ladungsträgertransport wird in diesem Modell ausschließlich durch freie Ladungsträger in ausgedehnten Zuständen in Valenz- und Leitungsband bestimmt. Für amorphes Silizium heißt das, der Transport soll nur in Zuständen außerhalb der Beweglichkeitslücke stattfinden. Ladungsträgertransport in lokalisierten Zuständen wie Bandausläufern und Defekten, das sogenannte Hopping, wird nicht berücksichtigt. Die Stromdichten innerhalb homogener Materialien werden durch Diffusion und Drift beschrieben:

$$j_n = eD_n \frac{dn}{dx} - e\mu_n n \frac{d\Psi}{dx} \quad (3.18)$$

$$j_p = -eD_p \frac{dp}{dx} - e\mu_p p \frac{d\Psi}{dx} \quad (3.19)$$

Für die Diffusionskonstanten D_i und Driftbeweglichkeiten μ_i gelten die Einsteinbeziehungen.

$$D_p = \frac{kT}{e} \mu_p \quad (3.20)$$

$$D_n = \frac{kT}{e} \mu_n \quad (3.21)$$

Dabei wird vernachlässigt, daß die Geschwindigkeit der Ladungsträger bei hohen elektrischen Feldern nicht mehr linear von diesem abhängt. Dies wird ein merklicher Effekt bei elektrischen Feldstärken > 30 kV/cm [Sze85c]. Bei höheren Feldstärken geht im kristallinen

Silizium die Elektronengeschwindigkeit allmählich in Sättigung und wird konstant. Solche Feldstärken können an unterschiedlich dotierten Halbleitergrenzflächen durchaus auftreten. Vor allem bei Rückwärtsspannungen erhöht sich an solchen Übergängen die Feldstärke. Daß der Driftstrom durch eine konstante Beweglichkeit ausgedrückt wird, ist in diesem Fall nur noch eine Näherung.

An der Grenzfläche eines Heteroübergangs können die Formeln für Drift- und Diffusionsstrom nicht mehr verwendet werden, da die Ladungsträgerdichten dort nicht stetig sind. Hier wird ein Modell ähnlich der Thermionischen Emission verwendet, wie das in [Wu79] vorgestellt wurde.

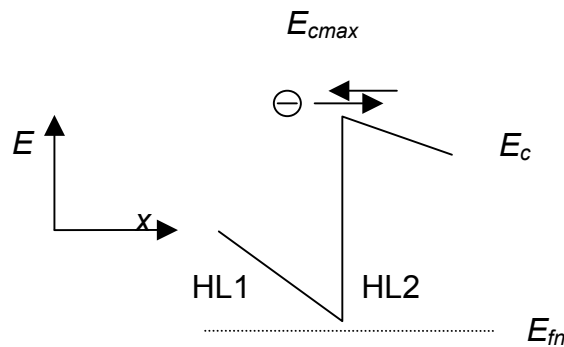


Abb 3.2 Schematische Skizze des thermionischen Elektronentransports über eine Barriere im Leitungsband E_c zwischen 2 Halbleitern (HL1,HL2)

Die Stromdichte von einer Seite zur anderen erhält man durch Integration über das Produkt aus der Zustandsdichte, der Besetzungswahrscheinlichkeit $f(E(k))$, der Geschwindigkeit der Elektronen bzw. Löcher und der Transmissionswahrscheinlichkeit $T(E(k))$. Die gesamte Stromdichte ergibt sich durch Überlagerung der Ströme in beide Richtungen. Daraus erhält man mit der Zustandsdichte freier Elektronen

$$J = J_{1 \rightarrow 2} - J_{2 \rightarrow 1} = \frac{2e}{(2\pi)^3} \iiint d^3k \frac{1}{\hbar} \left(\frac{\partial E}{\partial k_x} \right) \left[f_2(E)(1 - f_1(E)) - f_1(E)(1 - f_2(E)) \right] T(E) \quad (3.22)$$

$$= J_1 - J_2 = \frac{2e}{(2\pi)^3} \iiint d^3k \frac{1}{\hbar} \left(\frac{\partial E}{\partial k_x} \right) \left[-f_1(E) + f_2(E) \right] T(E) \quad (3.23)$$

Die Umwandlung der Integration über den Impuls k in eine Integration über die Energie E führt für den Teilstrom J_1 auf

$$J_1 = -A^* T^2 \int_0^\infty d\tilde{E}_s \int_0^\infty d\tilde{E}_p f_1(\tilde{E}) T(\tilde{E}_s, \tilde{E}_p) \quad (3.24)$$

mit der effektiven Richardsonkonstante A^* und auf kT normierter Energie \tilde{E} :

$$A^* = \frac{m^* ek}{2\pi^2 \hbar^3} \quad (3.25) \quad \tilde{E} = E / kT \quad (3.26)$$

mit der effektiven Masse m^* . Dabei wird angenommen, daß die Ladungsträger am Heteroübergang quasifermiverteilt sind. Etwas realistischer ist vermutlich die Annahme von Maxwell-Boltzmann verteilten Elektronen, die eine gegenüber der thermischen Verteilung erhöhte Geschwindigkeit der Ladungsträger berücksichtigt, wie das in der Herleitung des Ladungsträgertransports für thermionische Emission angenommen wird [Rhoderick88]. Das Ergebnis für die Stromdichte wird dadurch etwas modifiziert. Die Transmissionswahrscheinlichkeit wird in diesem einfachen klassischen Modell Eins für Ladungsträger mit einer Energie größer als die Barriere und Null für Ladungsträger mit kleineren Energien gesetzt. Daß diese Annahme bei Schottkybarrieren zu einer guten Näherung der Stromdichten führt wurde in Monte Carlo Simulationen und analytischen Rechnungen gezeigt [Baccarani76], [Berz85]. Es ergeben sich jedoch z.B. durch Änderungen der Ladungsträgerdichte am Heteroübergang um einen Faktor 0.5 gegenüber dem analytischen Modell der thermionischen Emission aus [Rhoderick88] auch in der Stromdichte eine Änderung in dieser Größenordnung.

An dieser Stelle sind anstatt thermionischen Strömen auch Tunnelströme leicht einzuführen, wenn eine quantenmechanische Rechnung der Transmissionswahrscheinlichkeit in Abhängigkeit der Energie vorgenommen wird. Dies wird z.B. in [Yang93] näher erläutert. Die Tunnelwahrscheinlichkeit kann z.B. für eine dreiecksförmige Barriere analytisch gelöst werden, oder über die WKB-Näherung („Wentzel-Kramers-Brillouin“) [Schwabl80] bestimmt werden, zur Berechnung der Stromdichte muß in beiden Fällen jedoch das Integral über der Energie aus Gleichung 3.24 numerisch ausgeführt werden. Dies ist detailliert in [Bauer93] beschrieben.

Führt man das Integral für J_1 und J_2 mit der Boltzmannnäherung für die Verteilungsfunktion und der Transmissionswahrscheinlichkeit Eins für Energien größer als die Barriere aus, so erhält man für die Elektronenstromdichte und Löcherstromdichte:

$$J_n = J_1 - J_2 = -A^* T^2 \exp\left(-\frac{E_{c\max} - E_{fn1}}{kT}\right) + A^* T^2 \exp\left(-\frac{E_{c\max} - E_{fn2}}{kT}\right) \quad (3.27)$$

$$J_p = A^* T^2 \exp\left(\frac{E_{v\min} - E_{fp1}}{kT}\right) - A^* T^2 \exp\left(\frac{E_{v\min} - E_{fp2}}{kT}\right) \quad (3.28)$$

In dieser Form wird die thermionische Stromdichte in der Simulation verwendet. Die Stromdichte hängt also nur von den Quasiferminiveaus links und rechts von der Barriere und vom

Maximum des Leitungsbands bzw. Minimum des Valenzbands ab. Ist der Heteroübergang im thermischen Gleichgewicht, so sind die Ferminiveaus auf beiden Seiten gleich und die Nettostromdichte verschwindet. Dieser Ausdruck ist analog zur Relation, mit der üblicherweise die Abhängigkeit der Stromdichte von der angelegten Spannung für thermionische Emission an Halbleiter-Metall-Kontakten ausgedrückt wird. [Rhoderick88, Sze81]. Die exponentielle Abhängigkeit von der Barrierenhöhe $\Delta\Phi$, die durch den Unterschied des Ferminiveaus im Metall zum Leitungsbandmaximum (bzw. Valenzbandminimum) gegeben ist, enthält auch die hier benutzte Beziehung. Wird das Ferminiveau im Metall durch E_{fn1} gegeben, und die am Schottkyübergang anliegende Spannung durch den Unterschied der Quasiferminiveaus $(E_{fn1} - E_{fn2})/e$ ausgedrückt, so läßt sich Gleichung 3.27 umformen in

$$J_n = A^* T^2 \exp\left(-\frac{\Delta\Phi}{kT}\right) \left[\exp\left(-\frac{eU}{kT}\right) - 1 \right] \quad (3.29)$$

und man erhält den üblichen Ausdruck.

In dieser Herleitung sind zwei Konzepte enthalten, die für amorphes Silizium nicht exakt zutreffen. Das erste ist die Zustandsdichte für freie Elektronen, die mit der Quadratwurzel von der Energiedifferenz zur Bandlücke abhängt. Dies ist im amorphen Silizium mit seiner Beweglichkeitslücke nicht gegeben. Die Form der Zustandsdichte im amorphen Silizium ist mit diesem Modell nicht sehr gut beschrieben. Zum zweiten ist in dem vorgestellten Modell eine effektive Masse m^* angenommen, die aus der Energie-Impuls Dispersionsrelation für Kristalle stammt. Eine solche Dispersionsrelation ist im amorphen Silizium nicht gültig. Es wird deshalb in der Simulation zur Vereinfachung mit der freien Elektronenmasse gerechnet. Zusammen mit der Annahme der Quasiferminiverteilung führt dies dazu, daß der Ladungsträgertransport über den Heteroübergang damit prinzipiell beschrieben ist, der Wert der Stromdichte jedoch nicht ganz exakt ist. Zusätzlich zur Stromdichte durch Ladungsträger kommt noch die Verschiebungsstromdichte

$$J_v = \varepsilon_r \varepsilon_0 \frac{\partial E}{\partial t} = -\varepsilon_r \varepsilon_0 \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) \quad (3.30),$$

der nur für die transiente Lösung wichtig ist. Die Gesamtstromdichte J setzt sich zusammen aus der Elektronenstromdichte, der Löcherstromdichte und der Verschiebungsstromdichte

$$J_v = J_n + J_p + J_v \quad (3.31).$$

3.5 Rekombination und Generation von Ladungsträgern durch Defekte

Die Rekombination von Ladungsträgern findet in dieser Simulation nur über Defekte innerhalb der Bandlücke statt. Das ist für das defektreiche amorphe Silizium keine wesentliche Einschränkung, da die Rekombination über Defekte dominiert. Auch im kristallinen Silizium, das ein indirekter Halbleiter ist, sind die direkten Band-Band Übergänge stark unterdrückt, weshalb dieses Modell zur Beschreibung der Rekombination geeignet ist. Für direkte Halbleiter wie GaAs, sollte jedoch zusätzlich Band-Band-Rekombination hinzugefügt werden. Übergänge von Ladungsträgern sind in diesem Modell nur von den Bändern in die Zustände innerhalb der Bandlücke möglich. Auch können Ladungsträgern nur am gleichen Ort aus Defektzuständen emittiert oder in Defektzustände eingefangen werden. Dies spielt am Heteroübergang eine Rolle, der abrupt sein soll, d.h. räumlich nicht ausgedehnt. In der Simulation wird am Heteroübergang jeweils ein Gitterpunkt rechts und links von der Grenzfläche definiert, der die Eigenschaften (z.B. Defektdichte) der jeweiligen Schicht hat. Ladungsträger am Grenzübergang haben in der Simulation daher nicht die Möglichkeit, mit Defekten aus beiden angrenzenden Materialien zu wechselwirken.

Für die verschiedenen Übergänge von Ladungsträgern muß man die Ratengleichungen aufstellen. Da in der Simulation die Zustandsdichten in diskrete Zustände aufgeteilt werden, sind die Ratengleichungen schon in der diskretisierten Form dargestellt. Anstatt einer Integration über die Zustandsdichte werden die Raten der einzelnen Zustände addiert. Die möglichen Übergänge mit ihren jeweiligen Übergangskoeffizienten sind in Abbildung 3.3 dargestellt.

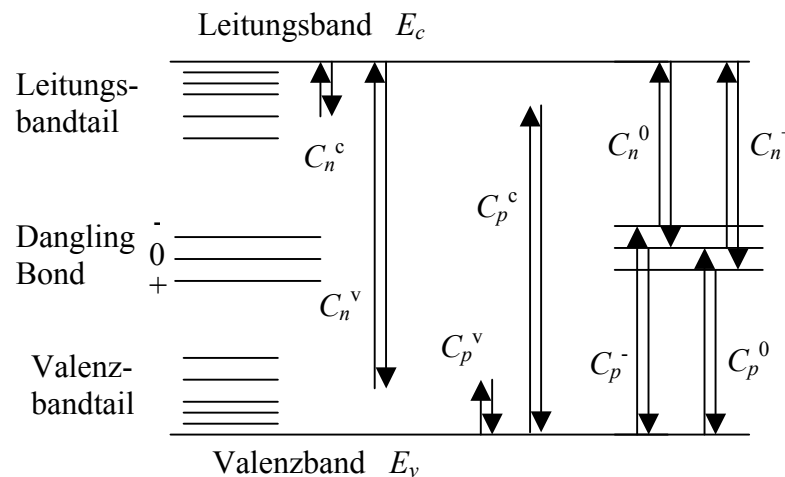


Abb. 3.3: Übergangskoeffizienten von freien Ladungsträgern in/aus Defektzustände(n) (Tails und Dangling Bonds)

3.5.1 Übergangsraten freier Ladungsträger in Bandausläufer

Die Einfangrate freier Ladungsträger in einen Zustand i eines Bandausläufers mit der Energie E_i ist proportional zur Dichte der freien Ladungsträger n und p und zur Dichte der freien Zustände:

$$R_{nt}^i = C_n^i n (N_{ti} - n_{ti}) \quad (3.32) \quad R_{pt}^i = C_p^i p (N_{ti} - p_{ti}) \quad (3.33)$$

N_{ti} ist die Dichte der Zustände der Energie E_i . Die Gesamtrekombinationsrate für Elektronen und Löcher erhält man aus der Summation über die Einfangraten aller Tailzustände. Dabei wird angenommen, daß die Proportionalitätsfaktoren C energieunabhängig sind. Jedoch können sie durchaus unterschiedlich für Elektronen und Löcher sowie für Valenz- und Leitungsbandausläufer sein.

$$R_{nt} = \sum_{i, \text{Valenzbandtail}} C_n^v n (N_{ti} - n_{ti}) + \sum_{i, \text{Leitungsbandtail}} C_n^c n (N_{ti} - n_{ti}) \quad (3.34)$$

$$R_{pt} = \sum_{i, \text{Valenzbandtail}} C_p^v p (N_{ti} - p_{ti}) + \sum_{i, \text{Leitungsbandtail}} C_p^c p (N_{ti} - p_{ti}) \quad (3.35)$$

Die Emissionsrate von Löchern und Elektronen aus einem Bandausläuferzustand ist proportional zur Emissionswahrscheinlichkeit eines Teilchens multipliziert mit der Dichte der Teilchen $N_i \times f_i$ in diesem Zustand.

$$G_{nt}^i = C_n^i n_1^i n_{ti} \quad (3.36) \quad G_{pt}^i = C_p^i p_1^i p_{ti} \quad (3.37)$$

Die gesamte Emissionsrate für Elektronen G_n und für Löcher G_p ergibt sich aus der Summe über die Emission aus allen Bandausläuferzuständen i des Valenz- und des Leitungsbandes:

$$G_{nt} = \sum_{i, \text{Valenzbandtail}} C_n^v n_1^v(E_i) n_{ti} + \sum_{i, \text{Leitungsbandtail}} C_n^c n_1^c(E_i) n_{ti} \quad (3.38)$$

$$G_{pt} = \sum_{i, \text{Valenzbandtail}} C_p^v p_1^v(E_i) p_{ti} + \sum_{i, \text{Leitungsbandtail}} C_p^c p_1^c(E_i) p_{ti} \quad (3.39)$$

Die energieabhängigen Terme n_1^i und p_1^i erhält man aus den Dichten der freien Ladungsträger, die durch die Fermistatistik nach dem Prinzip des detaillierten Gleichgewichts bestimmt sind. Das heißt, im thermischen Gleichgewicht sind die Einfangs- und Emissionsraten von den Bändern zu jedem Zustand gleich.

$$n_1^c(E_i) = n_1^v(E_i) = N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_i}{kT}\right) \quad (3.40)$$

$$p_1^v(E_i) = p_1^c(E_i) = N_v \exp\left(\frac{E_v - E_i}{kT}\right) \quad (3.41)$$

Die Unterscheidung der Emissionsterme in n_1^c und n_1^v ist hier willkürlich, da beide durch die

mathematisch gleichen Ausdrücke nur aus Zuständen unterschiedlicher energetischer Lage beschrieben werden. Sie wird jedoch aus Gründen der Programmierung gemacht.

3.5.2 Übergangsraten freier Ladungsträger in Dangling Bond Zustände

Die Ratengleichungen der Dangling Bond Zustände erfolgen analog zu den Übergangsraten bei den Bandausläufern. Die Raten aller möglichen Übergänge zwischen den Bändern und den Defektzuständen i müssen dabei aufsummiert werden. Freie Elektronen werden von neutralen oder positiv geladenen Defekten eingefangen und von negativen oder neutralen Defekten emittiert, während freie Löcher von negativen oder neutralen Defekten eingefangen und von positiven oder neutralen emittiert werden.

$$R_{n,DB} = \sum_{i,DB^+} C_n^+ n N_{DB^+i} + \sum_{i,DB^0} C_n^0 n N_{DB^0i} \quad (3.42)$$

$$R_{p,DB} = \sum_{i,DB^-} C_p^- p N_{DB^-i} + \sum_{i,DB^0} C_p^0 p N_{DB^0i} \quad (3.43)$$

$$G_{n,DB} = \sum_{i,DB^-} C_n^0 n_1^0 N_{DB^-i} + \sum_{i,DB^0} C_n^+ n_1^+ N_{DB^0i} \quad (3.44)$$

$$G_{p,DB} = \sum_{i,DB^+} C_p^0 p_1^0 N_{DB^+i} + \sum_{i,DB^0} C_p^- p_1^- N_{DB^0i} \quad (3.45)$$

Die energieabhängigen Emissionsterme n_1^i und p_1^i werden wieder nach der „detailed balance“ bestimmt. Da die Besetzungsstatistik der Dangling Bonds nicht durch die Fermistatistik beschrieben wird, sind auch diese Terme von den Emissionstermen bei den Bandausläuferzuständen verschieden. Für einen Defektzustand der Energie E_i erhält man

$$n_1^+(E_i) = \frac{1}{2} N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_i}{kT}\right) \quad (3.46)$$

$$n_1^0(E_i) = 2 N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_i - U_{corr}}{kT}\right) \quad (3.47)$$

$$p_1^0(E_i) = 2 N_v \exp\left(\frac{E_v - E_i}{kT}\right) \quad (3.48)$$

$$p_1^-(E_i) = \frac{1}{2} N_v \exp\left(\frac{E_v - E_i - U_{corr}}{kT}\right) \quad (3.49)$$

3.6 Generation freier Ladungsträger durch Beleuchtung

Im Simulationsprogramm ist die Möglichkeit gegeben, freie Elektronen und Löcher durch Beleuchtung zu generieren. Dies kann mittels monochromatischer Strahlung erfolgen oder durch eine spektrale Verteilung der Photonenflußdichte, die in 50 nm Schritten in der Wellenlänge dem AM1.5 Spektrum angenähert ist. Zusätzlich wird eine spektral unabhängige Reflexion an der Vorderseite der Halbleiterstruktur und am Rückkontakt berücksichtigt. Es wird weiter angenommen, daß jedes absorbierte Photon zur Generation eines Elektron-Loch Paares führt. Konkurrierende Absorptionsprozesse sind nicht in der Rechnung enthalten. Bei der Berechnung des räumlichen Profils der Photonenflußdichte werden weiter auch die unterschiedlichen Absorptionskoeffizienten der einzelnen Halbleiterschichten einbezogen. Für eine Anzahl von Schichten mit verschiedenen Absorptionskoeffizienten $\alpha_\lambda(l)$ und verschiedenen Schichtdicken $d(l)$ erhält man die Ortsabhängigkeit der Photonenflußdichte $\Phi_\lambda(x)$ für den Ort x_1 in der l -ten Schicht innerhalb der Halbleiterschichten bei einer Wellenlänge λ . Dies kann rekursiv von einer Schicht zur nächsten mit dem Lambert-Beer'schen Gesetz berechnet werden.

$$\Phi_\lambda(l) = \Phi_\lambda(l-1) \exp(-\alpha_{l,\lambda} d_l) \quad (3.50)$$

$$\Phi_\lambda(x) = \Phi_\lambda(l-1) \exp(-\alpha_{l,\lambda} x_l) \quad (3.51)$$

Zusätzlich wird dann noch die Photonenflußdichte des rücklaufenden Strahls addiert. Die Generationsrate $G_\lambda(x)$ erhält man aus der Ableitung der Photonenflußdichte über den Ort:

$$G_\lambda(x) = -\frac{d\Phi_\lambda(x)}{dx} \quad (3.52)$$

Zur gesamten Generationsrate von Elektron-Lochpaaren G durch Licht tragen für eine diskrete spektrale Verteilung der Photonenflußdichte alle Generationsraten der einzelnen Wellenlängen additiv bei:

$$G_n(x) = G_p(x) = \sum_\lambda G_\lambda(x) \quad (3.53)$$

Weitere Möglichkeiten der Rekombination oder Generation von Ladungsträgern wie z.B. durch Lawinenmultiplikation [Sze66] wird nicht berücksichtigt. Damit sind die Gleichungen zur Beschreibung des Halbleitervolumens im thermischen Gleichgewicht und unter äußeren Störungen komplett. Es fehlen jedoch noch die physikalischen Vorgänge am Kontakt des Halbleiters mit dem äußeren Stromkreis. Außerdem muß noch die Möglichkeit gegeben werden, eine Spannung von außen an den Halbleiter anzulegen.

3.7 Randbedingungen

Die Randbedingungen am linken und rechten Rand der Halbleiterstruktur werden durch die außen angelegte Spannung U_{ext} und die Art der Metall-Halbleiterkontakte festgelegt. Daraus ergeben sich Bedingungen für das elektrostatische Potential und die Ladungsträgerdichten bzw. Stromdichten. Für die Metall-Halbleiterkontakte wurden zwei Möglichkeiten realisiert. In einem Fall wird ein ohmscher Kontakt, im anderen ein Schottkykontakt durch ein einfaches Modell beschrieben. In beiden Fällen wird ein Potentialabfall im äußeren Stromkreis vernachlässigt, d.h. das elektrische Feld im Metall wird zu Null gesetzt.

3.7.1 Ohmscher Kontakt

Für den ohmschen Kontakt wird angenommen, daß der Halbleiter am Übergang ungeladen, und daß das Fermi-niveau am Übergang stetig ist. Die Differenz des elektrostatischen Potentials zwischen rechtem ($x=L$) und linkem Rand ($x=0$) ist in diesem Fall gegeben durch das eingebaute Potential im thermischen Gleichgewicht U_{bi} und die außen angelegte Spannung U_{ext}

$$\Psi(0) - \Psi(L) = U_{bi} + U_{ext} \quad (3.54)$$

Die Ladungsträgerdichten an den Rändern sind dann durch das Fermi-niveau festgelegt auf den gleichen Wert wie im neutralen Halbleiter im thermischen Gleichgewicht auf n_0 und p_0 .

$$n_0 = N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_{f0}}{kT}\right) \quad (3.55)$$

$$p_0 = N_v \exp\left(-\frac{E_{f0} - E_v}{kT}\right) \quad (3.56)$$

3.7.2 Schottkykontakt

Das Verhalten von Schottkykontakten wird hier in einer sehr vereinfachten Art simuliert. Es werden Barrierenhöhen Φ_s an den Rändern ($x=0$) und ($x=L$) eingeführt, wodurch sich die Potentialdifferenz im Halbleiter verändert.

$$\Psi(0) - \Psi(L) = U_{bi} + U_{ext} + \Phi_{s0} - \Phi_{sL} \quad (3.57)$$

Die Ladungsträgerdichten werden nicht wie beim ohmschen Kontakt festgehalten, sondern werden über die Stromdichten mit Hilfe der Kontinuitätsgleichungen festgelegt. Die Stromdichten am Rand werden proportional zur Überschußladungsträgerdichte, d.h. der Differenz

zwischen der vorhandenen Ladungsträgerdichte und der Ladungsträgerdichte im thermischen Gleichgewicht, gesetzt. Die Proportionalitätskonstante heißt Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeit.

$$J_n = -eS_n(n - n_0) \quad (3.58)$$

$$J_p = eS_p(p - p_0) \quad (3.59)$$

4 Ladungsträgertransport

In diesem Kapitel wird der Ladungsträgertransport in einer Heterodiode beschrieben. Es wird zuerst auf grundlegende Mechanismen des Transports eingegangen und verschiedene Modelle werden vorgestellt: Ströme, die durch Diffusion, Rekombination, thermionische Emission oder Tunneln von Ladungsträgern bestimmt werden. In Abhängigkeit der Temperatur werden gemessene Strom-Spannungskurven gezeigt und diese mit den theoretischen Modellen verglichen, um Aufschluß über den dominierenden Transportmechanismus zu erhalten. Der Einfluß von Barrieren auf Strom-Spannungskurven unter Bestrahlung wird durch numerische Simulationsrechnungen gezeigt. Schließlich werden die Ergebnisse diskutiert und mit anderen Arbeiten an gleichen oder ähnlichen Halbleiterstrukturen verglichen.

4.1 Ladungsträgertransportmodelle

4.1.1 I-U Dunkelkennlinien

Zur Beschreibung der Strom-Spannungskennlinien von Dioden gibt es verschiedene Modelle. Diese wurden entwickelt, um verschiedene Typen von Dioden möglichst gut zu beschreiben z.B. das Shockley-Modell [Shockley49] für einfache p-n Dioden oder Interbandtunneln [Hall60] für extrem stark dotierte p-n Tunneldioden. Schottkydioden mit einer ausgeprägten Barriere in einem Band (Valenz- oder Leitungsband) werden mit thermionischer Emission [Bethe42, Crowell65] und Tunneln durch eine Spitze [Padovani66] beschrieben. Alle Modelle zeigen im wesentlichen eine exponentielle Zunahme des Stroms mit der Spannung in Durchlaßrichtung und einen fast konstanten Sättigungstrom in Sperrichtung.

Um Abweichungen von den einfachen exponentiellen Kennlinien zu erklären, z.B. den sogenannten Excess Current [Chynoweth61] bei niedriger Spannung in Durchlaßrichtung (Strom ist höher als dem exponentiellen Verhalten entspricht), wurden zusätzliche Mechanismen eingeführt, bei denen Ladungsträger von den Bändern in Defekte in der Bandlücke über den p-n Übergang tunneln mit anschließendem Einfang bzw. Emission von Ladungsträ-

gern.

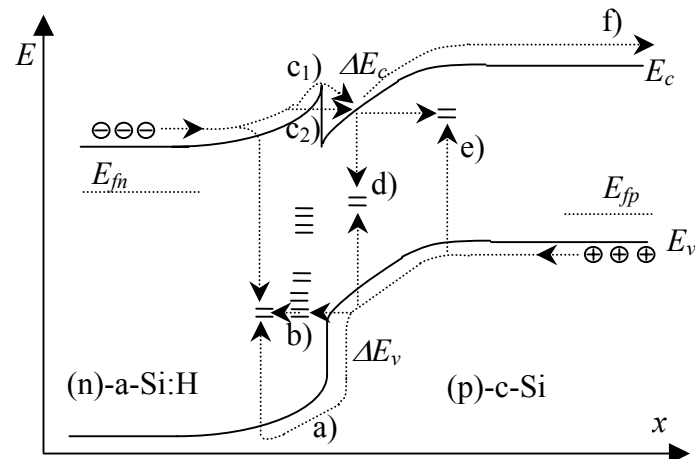


Abb 4.1 Mögliche Ladungsträgerpfade bei Spannung in Flußrichtung:

- a) Löcher überwinden Valenzbandsprung ΔE_v und rekombinieren mit Elektronen im a-Si:H
- b) Multi-Tunnel-Capture-Emission Modell: Löcher tunneln in Defekte im a-Si:H Leitungsband + Elektroneneinfang im a-Si:H
- c) Elektronen tunneln durch (c₁) bzw. überqueren mit thermionischer Emission (c₂) die Leitungsbandspitze ΔE_c ,
- d) Rekombination in der RLZ über Defekte im c-Si
- e) (Multi-)Tunnel-Capture-Modell im c-Si („excess-current“) Elektronen tunneln in Defekte mit anschließendem Löchereinfang
- f) Elektronen diffundieren bis zum Rückkontakt

Andere Nichtidealitäten wie eine stärkere Zunahme des Stroms in Sperrichtung kann man mit einer Generation von Ladungsträgern aus Defekten in der Raumladungszone erklären, die mit steigender Sperrspannung größer wird. Zu starken Abweichungen vom exponentiellen Verhalten führt schließlich der Lawineneffekt [Sze66], die Multiplikation von freien Ladungsträgern durch Stöße in hohen elektrischen Feldern, wodurch ab einer Grenzspannung in Sperrichtung der Strom sehr stark ansteigt. Welche der Strommodelle nun die jeweilige Diode am besten beschreiben hängt von Parametern wie Banddiskontinuitäten, Dotierung, Defektdichten oder auch der resultierenden Bandverbiegung ab.

Bei den hier verwendeten Heterodioden sind die Voraussetzungen für verschiedene Mechanismen gegeben. Die Bandlücken im a-Si:H mit ca. 1.7 eV und c-Si mit 1.12 eV sind unterschiedlich. Es gibt also einen Sprung an mindestens einer der Bandkanten von Valenz- oder Leitungsband, weshalb man Tunnelströme bzw. thermionischen Strom über den Heteroübergang erwartet. Die Aufteilung dieser Bandlückendiskontinuität spielt ebenfalls eine wichtige Rolle und kann zu deutlich unterschiedlichem Verhalten von (n)-a-Si/(p)-c-Si und invers dotierten (p)-a-Si/(n)-c-Si Dioden führen.

Auch ist das hoch dotierte a-Si:H sehr defektreich mit Defektdichten von ca. 10^{19} cm^{-3} . Sowohl die Ladung in den Defekten, die die Bandverbiegung bzw. den Potentialabfall beeinflusst, als auch Einfang/Emission von Ladungsträgern können den Strom stark beeinflussen. Bei tiefen Temperaturen kann der Strom auch durch Hopping [Mott68] stattfinden, bei dem sich Ladungsträger nicht in ausgedehnten Zuständen in den Bändern bewegen, sondern von einem lokalisierten Zustand in der Bandlücke zum nächsten „hüpfen“.

Es werden im folgenden einige Ladungsträgertransportmodelle und deren Strom-Spannungskennlinien vorgestellt. Besonders wird dabei auf die unterschiedliche Temperaturabhängigkeit des Stroms für die verschiedenen Modelle eingegangen, die zum Teil charakteristisch für den jeweiligen Transportprozeß ist. Aus dem Vergleich mit temperaturabhängigen Messungen der Strom-Spannungskennlinien kann man in bestimmten Spannungs- und Temperaturbereichen Aussagen über den hier dominierenden Transportmechanismus machen.

4.1.2 Diffusionsstrom

Bringt man einen p-dotierten und einen n-dotierten Halbleiter in Kontakt miteinander so erhält man ein Konzentrationsgefälle an freien Ladungsträgern am Übergang. Dort diffundieren Elektronen aus dem n-dotierten Halbleiter ins p-dotierte Gebiet sowie die Löcher in umgekehrter Richtung. Im Gleichgewicht erhält man nahe am Kontakt im n-Halbleiter ein Gebiet, in dem ortsfeste positiv geladene Donatoratome vorhanden sind. Im p-Halbleiter erhält man am Kontakt eine negativ geladene Schicht aus Akzeptoratomen. In dieser Raumladungs- oder Verarmungszone sind kaum freie Elektronen und Löcher vorhanden. Legt man eine negative Spannung am p-Halbleiter an (Sperrichtung), so werden weitere freie Ladungsträger aus der Raumladungszone abgezogen und diese vergrößert sich. Bei Anlegen einer positiven Spannung werden Ladungsträger in die Raumladungszone diffundieren und diese wird dadurch verkleinert. In der Verarmungszone fällt bei Sperrspannungen und kleinen Durchlaßspannungen fast die gesamte außen angelegte Spannung ab. Der Widerstand der neutralen n- und p-dotierten Bereiche Gebiete ist bei kleinen Strömen meist vernachlässigbar. Die neutralen Zonen sind deshalb nahezu feldfrei.

Der wesentliche Strombeitrag kommt durch Diffusion der Minoritätsladungsträger (Elektronen im p-Halbleiter und Löcher im n-Halbleiter) zustande. Als Zusammenhang zwischen Stromdichte und angelegter Spannung erhält man die Diodengleichung (z.B. in [Sze81]):

$$j = j_d \left[\exp\left(\frac{eU}{kT}\right) - 1 \right] \quad (4.1)$$

mit der Sättigungsstromdichte:

$$j_d = \frac{eD_p p_{n0}}{L_p} + \frac{eD_n n_{p0}}{L_n} \quad (4.2)$$

Die Temperaturabhängigkeit der Sättigungsstromdichte ist im wesentlichen bestimmt durch die Ladungsträgerdichte

$$n_{p0} \cong \frac{n_i^2}{N_A} \propto T^3 \exp\left(-\frac{E_g}{kT}\right) \quad (4.3)$$

sowie eine schwächere Temperaturabhängigkeit der Diffusionskonstanten und Lebensdauer, bzw. Diffusionslänge.

$$\frac{D_p}{L_p} \propto T^{\gamma/2} \quad (4.4)$$

Damit ergibt sich die Temperaturabhängigkeit der Sättigungsstromdichte zu:

$$j_d \propto T^{3+\gamma/2} \exp\left(-\frac{E_g}{kT}\right) \quad (4.5)$$

Dieser Diffusionsstrom wird modifiziert, wenn zusätzlich Barrieren am Heteroübergang vorhanden sind. Zum einen verändert sich das eingebaute Potential U_{bi} durch Sprünge in Valenz- und Leitungsband (siehe Gleichung 2.3). Zum anderen können Ladungsträger, die zum Heteroübergang diffundieren, eine dort vorhandene Barriere nur dann überwinden, wenn sie genügend Energie besitzen. Anderson [Anderson62] nahm als einfaches Modell an, daß nur der Anteil $\exp(-\Delta E/kT)$ der Ladungsträger am Heteroübergang diese passieren kann. Dabei ist ΔE ein Sprung im Valenz- oder Leitungsband. Die Dichte der Löcher und Elektronen am Heteroübergang hängt von der Bandverbiegung in den beiden Materialien ab. Die Aufteilung der Bandverbiegung U_{bi} auf die beiden Seiten U_{bi1} und U_{bi2} wird durch die Ladungsdichten N_1 und N_2 in der Raumladungszone bestimmt. Dies ist im kristallinen Silizium die Dichte der ionisierten Akzeptoratome, im amorphen die Donatordichte plus mögliche zusätzliche Ladungen aus geladenen Defekten. Die mögliche Umladung tiefer Defekte wird hier nicht berücksichtigt. Die Aufteilung der Bandverbiegung erhält man aus der Poissongleichung mit der Randbedingung, daß die dielektrische Verschiebung am Übergang konstant ist. Auch eine außen angelegte Spannung U teilt sich entsprechend auf beide Seiten auf (Die amorphe Seite wird Abbildung 2.4 entsprechend mit dem Index 1 auf der linken Seite des Heteroübergangs

angenommen, c-Si mit dem Index 2). U_1 und U_2 sind die in der amorphen und kristallinen Seite abfallenden Spannungen.

$$a = \frac{U_{bi2} - U_2}{U_{bi1} - U_1} = \frac{N_1 \epsilon_1}{N_2 \epsilon_2} \quad (4.6)$$

Die Vorzeichen für U sind dabei so gewählt, daß für $U > 0$ die Diode in Durchlaßrichtung gespannt ist, und U_{bi} in Abbildung 2.4 positive Werte hat (Dies kann z.B. durch die Wahl der Richtung der Ortsachse festgelegt werden). Das bedeutet, daß die Bandverbiegung und auch die Weite der Raumladungszone dort groß sind, wo die Dotierung niedrig ist. Für (n⁺)-a-Si:H/(p)-c-Si Heteroübergänge ist wegen der stark unterschiedlichen Dotierung $N_1 \gg N_2$ fast der ganze Spannungsabfall im kristallinen Silizium zu erwarten. Die Stromdichte in Durchlaßrichtung ergibt sich nun aus der Diffusion der Elektronen, die über Spitze im Leitungsband vom (n)-amorphen ins kristalline Silizium und dort noch über einen Teil der Raumladungszone diffundieren. Die Löcher müssen aus dem neutralen (p)-c-Si zuerst die große Bandverbiegung im c-Si und dann zusätzlich den Sprung im Valenzband ΔE_v überwinden. Die gesamte Diffusionsbarriere ist damit $eU_{bi} + \Delta E_v$ für die Löcher und $eU_{bi} - \Delta E_c$ für die Elektronen. Der Löcherstrom wird bei dieser Struktur deshalb vernachlässigbar. Bei umgekehrter Dotierung sind die Verhältnisse für den Löcherdiffusionsstrom günstiger.

Die Elektronenstromdichte vom (n)-a-Si:H ins (p)-c-Si ist proportional zu $\exp\{e(U_{bi1} - U_1)/(kT)\}$, falls die Spitze des Leitungsbandes energetisch höher liegt, als das Leitungsband im neutralen (p)-c-Si, d.h. $\Delta E_c > e(U_{bi2} - U_2)$, ansonsten bei genügend hoher Durchlaßspannung proportional zu $\exp\{-[\Delta E_c - e(U_{bi} - U)]/(kT)\}$. Für Sperrichtung ist der Elektronenstrom proportional zu $\exp\{-[\Delta E_c - e(U_{bi2} - U_2)]/(kT)\}$.

Falls die Elektronen nur die Barriere $U_{bi1} - U_1$ überwinden müssen ($U_2 > e(U_{bi2}) - \Delta E_c$) ist die Stromdichte

$$j = j_d \left\{ \exp\left[\frac{eU}{(1+a)kT}\right] - \exp\left[-\frac{aeU}{(1+a)kT}\right] \right\} \quad (4.7)$$

Der erste Term beschreibt den Strom in Durchlaßrichtung, der zweite den Strom in Sperrichtung. Man erhält also in Durchlaßrichtung eine Diodengleichung mit dem Idealitätsfaktor $1+a=1+N_1/N_2$. Der Vorfaktor des Diffusionsstroms j_d der Elektronenstromdichte ist

$$j_d = \frac{eD_n n_{n0}}{L_n} \exp\left[\frac{eV_{bi}}{(1+a)kT}\right] \quad (4.8)$$

Für $e(V_2 - U_2) > \Delta E_c$ erhält man eine Stromdichte von

$$j = j_d \left[\exp\left(-\frac{eU}{kT}\right) - 1 \right] \quad (4.9)$$

$$j_d = \frac{eD_n n_{n0}}{L_n} \exp\left(-\frac{eV_{bi} - \Delta E_c}{kT}\right) \quad (4.10)$$

Für hohe Durchlaßspannungen sinkt die Bandverbiegung im kristallinen Silizium wieder unter den Wert ΔE_c ab und der Strom läßt sich wieder durch Gleichung (4.7) beschreiben. Die I - U Kennlinien weisen für diesen Fall zwei unterschiedliche exponentielle Steigungen und Temperaturabhängigkeiten des Vorfaktors auf.

4.1.3 Rekombinationsstrom

Ist die Lebensdauer der Ladungsträger so gering, daß die Ladungsträger nicht durch die ganze Diode diffundieren können, so spielt die Rekombination eine wichtige Rolle. Rekombination kann entweder direkt stattfinden, bei der ein freies Elektron und ein freies Loch rekombinieren oder durch Emission und Einfang von Elektronen und Löchern über Zustände in der Bandlücke. Die direkte Band-Band Rekombination ist bei indirekten Halbleitern wie Silizium wegen der Impulserhaltung unwahrscheinlicher als die Rekombination über Störstellen. Bei Durchlaßspannung ist das Produkt der Ladungsträgerdichten np in der Raumladungszone größer als das Quadrat der intrinsischen Ladungsträgerdichte n_i^2 . In diesem Bereich ergibt sich der Hauptanteil der Rekombination. Für die Rekombination über eine Störstelle in der Bandmitte erhält man eine Rekombinationsstromdichte für Spannungen in Durchlaßrichtung $U \gg kT/e$ [Sah57]:

$$j = j_r \exp\left(\frac{eU}{2kT}\right) \quad (4.11)$$

Der Vorfaktor j_r ergibt sich aus der Weite der Raumladungszone W , dem Einfangquerschnitt σ , der thermischen Geschwindigkeit der Ladungsträger v_{th} , der Störstellendichte N_t und der intrinsischen Ladungsträgerdichte n_i , die auch die wesentliche Temperaturabhängigkeit beinhaltet:

$$j_r = \frac{eW}{2} \sigma v_{th} N_t n_i \quad (4.12)$$

Bei Sperrspannung sind die Ladungsträgerdichten in der Raumladungszone niedriger als im thermischen Gleichgewicht. Es ergibt sich eine Nettogeneration von Ladungsträgern. Wenn die Störstellendichte räumlich homogen über die Raumladungszone verteilt ist, erhält man einen Generationsstrom der proportional zur Weite der Raumladungszone ist (siehe Gl. 5.6).

$$j_{gen} = \frac{eWn_i}{\tau_e} \propto (U_{bi} - U)^{1/2} \quad (4.13)$$

Die Temperaturabhängigkeit ist auch hier im wesentlichen gegeben durch die intrinsische Ladungsträgerdichte n_i :

$$n_i \propto T^{3/2} \exp\left(-\frac{E_g}{2kT}\right) \quad (4.14)$$

Der gesamte Strom in Durchlaßrichtung setzt sich aus dem Diffusionsstrom und dem Rekombinationsstrom zusammen, die einen unterschiedlichen exponentiellen Zusammenhang mit der Spannung haben. Es wird für die Stromdichte oft ein empirischer Ausdruck verwendet, der eine Mischung aus beiden Prozessen darstellt. Dafür wird ein Idealitätsfaktor n eingeführt, der je nachdem, ob der Diffusionsstrom oder der Rekombinationsstrom dominiert, zwischen 1 und 2 liegt:

$$j \propto \exp\left(-\frac{eU}{nkT}\right) \quad (4.15)$$

4.1.4 Thermionische Emission

Zur Beschreibung des Ladungsträgertransports über Potentialbarrieren wird die thermionische Emission verwendet. Dieses Strommodell wird vor allem für Schottkydioden angewendet. Zur Berechnung der Stromdichten werden nur die Ladungsträger berücksichtigt, deren Energie groß genug ist, um die Barriere zu überwinden. Als einfachstes klassisches Modell läßt sich die Barriere genau dann überwinden, wenn die Energie größer als die Barriere ist. Die Stromdichte vom einer zur anderen Seite wird berechnet durch die Zustandsdichte $D(E)$, der Fermiverteilung oder näherungsweise der Boltzmannverteilung $F(E)$, der Geschwindigkeit der Ladungsträger $v(E)$ und der Transmissionswahrscheinlichkeit $P(E)$:

$$j_{1 \rightarrow 2} = e \int_{E_c}^{\infty} dE D(E) F_1(E) [1 - F_2(E)] P(E) v(E) \quad (4.16)$$

Der Nettostrom ergibt sich aus der Differenz der Stromdichten in die eine und in die andere Richtung. Liegt keine Spannung an, sind die Ferminiveaus auf beiden Seiten gleich hoch und die beiden Ströme heben sich auf. Bei Anlegen einer Spannung erhält man unterschiedliche Ferminiveaus auf beiden Seiten und wegen des exponentiellen Charakters der Besetzungsfunktion für hohe Energien eine exponentielle Abhängigkeit der Stromdichte von der Spannung. Für die thermionische Emission wird $T(E)=0$ für $E < E_{barriere}$ und $T(E)=1$ für $E > E_{barriere}$ angenommen. Mit der Boltzmannbesetzungsfunktion läßt sich das Integral berechnen. Man

erhält als resultierende Stromdichte für Metall-Halbleiterübergänge [Sze81, Rhoderick88]:

$$j_{thermion} = A^* T^2 \exp\left(-\frac{e\Phi_B}{kT}\right) \left[\exp\left(\frac{eU}{kT}\right) - 1 \right] \quad (4.17)$$

mit der effektiven Richardsonkonstante:
$$A^* = \frac{m^* e k}{2\pi^2 \hbar^3} \quad (4.18)$$

und der Barrierenhöhe Φ_B .

Dieses Modell läßt sich auch auf einseitig stark dotierte pn-Dioden anwenden. Der Potentialabfall auf der stark dotierten Seite ist sehr viel kleiner als an der schwach dotierten Seite und bei sehr unterschiedlicher Dotierung vernachlässigbar. Die Potentialverteilung ist in diesem Fall der an Schottkydioden sehr ähnlich. Bei den hier verwendeten Proben liegen die Dotierung des amorphen Siliziums in der Größenordnung von 10^{19} cm^{-3} und die Dotierung des kristallinen Siliziums bei ca. 10^{16} cm^{-3} . Es sind also bei $(n^+)a\text{-Si:H}/(p)c\text{-Si}$ ähnliche Potentialverhältnisse wie bei Schottkydioden gegeben. Das Einfügen einer dünnen intrinsischen amorphen Schicht wird die Aufteilung des Potentials jedoch etwas verändern. In diesem Fall wird auch in dieser Schicht ein Teil des Potentials abfallen. Wegen der geringen Schichtdicken von weniger als 5 nm wird dies jedoch nur eine kleine Änderung der Potentialverhältnisse bewirken.

Für den Fall einer ähnlich hohen Dotierung auf beiden Seiten modifiziert sich die Strom-Spannungskennlinie. Während beim Schottkyübergang der thermionische Strom vom Metall in den Halbleiter aufgrund konstanten energetischen Abstands vom Fermi-niveau des Metalls zur Barrierspitze unabhängig von der Spannung ist (unter Vernachlässigung des Schottkyeffekts, bei der Bildladungen die Barriere absenken), ändert sich die Stromdichte bei Halbleiter-Halbleiter Übergängen in beiden Richtungen mit der Spannung. Auch beim thermionischen Transport von Elektronen aus dem Halbleiter mit der niederenergetischeren Leitungsbandkante (hier c-Si) in den anderen verringert sich der Abstand vom Fermi-niveau zur Leitungsbandspitze. Das bedeutet, daß auch in Sperrichtung der Strom nicht sättigt, sondern mit zunehmender Sperrspannung ansteigen kann. Chang [Chang65] hat für diesen Fall eine Stromdichte der folgenden Form angegeben.

$$j_{thermion} = A^* \frac{eTU_{bi}}{k} \exp\left(-\frac{eU_{bi}}{kT}\right) \left[\exp\left(\frac{eU}{kT}\right) - 1 \right] \quad (4.19)$$

Die Temperaturabhängigkeit des Vorfaktors ist im wesentlichen durch die Diffusionsspannung U_{bi} gegeben.

4.1.5 Tunnelströme

Es gibt für Ladungsträger Tunnelmechanismen unterschiedlicher Art, die zum Strom beitragen oder diesen dominieren. Tunneln vom Valenz- ins Leitungsband (bzw. umgekehrt) tritt auf, wenn am pn-Übergang eine sehr hohe Feldstärke herrscht. Dies ist bei hoher Sperrspannung der Fall, was zum Durchbruch der Diode führt, oder auch bei extrem hoher Dotierung der Diode, was bei Tunnelndioden ausgenützt wird.

Eine weitere Möglichkeit ist das Tunneln durch Leitungs- oder Valenzbandspitzen (Abb. 4.1c₂), das bei ähnlichen Situationen wie die thermionische Emission stattfindet (Abb. 4.1c₁).

Schließlich wurde ein Modell eines durch Defektniveaus assistierten Tunnelmechanismus eingeführt, um einen „überhöhten Strom“ (engl. „excess current“) an stark dotierten Silizium pn-Dioden bei kleinen Durchlaßspannungen zu erklären (Abb. 4.1, d) [Chynoweth61]. Dieses Modell wurde von Matsuura [Matsuura84] auf ein Multi-Tunneling-Capture-Emission Modell erweitert, um Strom-Spannungskennlinien von a-Si:H/c-Si Dioden im Temperaturbereich von 300-370 K zu erklären.

Das Tunneln durch eine Barriere im Leitungs- oder Valenzband wird genauso formuliert wie bei der thermionischen Emission, d.h. der Strom ergibt sich aus der Integration der Elektronendichte mal der Transmissionswahrscheinlichkeit über die Energie. Allerdings ist die Transmissionswahrscheinlichkeit auch für Energien kleiner als die Barriere größer als Null. Ein solcher Ansatz wurde von Wu [Wu79] durchgeführt. Die Transmissionswahrscheinlichkeit läßt sich quantenmechanisch z.B. für eine dreiecksförmige Barriere analytisch berechnen. Man erhält als analytische Lösung Potenzreihen, die sogenannten Airyfunktionen [Schwabl80], die numerisch leicht auszuwerten sind. Diese Näherung einer dreiecksförmigen Barriere ist anwendbar für intrinsische Halbleiter, die eine geringe Bandverbiegung bzw. ein konstantes elektrisches Feld haben. Eine zweite Möglichkeit ist eine näherungsweise Berechnung der Transmissionswahrscheinlichkeit mit der WKB Methode (Wentzel-Kramers-Brillouin) [Schwabl80]. Hier erhält man für parabolische Bänder einen analytischen Ausdruck für die Tunnelwahrscheinlichkeit, die von der Barrierenhöhe Φ_B und der Dotierung N_D abhängt, da mit zunehmender Dotierung die Barriere schmaler wird.

Der Tunnelstrom für Elektronen einer Schottkybarriere in Durchlaßrichtung wurde von Padovani und Stratton [Padovani65] berechnet. Für die Tunnelwahrscheinlichkeit ergibt sich

$$T(E_c) = \exp\left(-\frac{e\Phi_B}{E_{00}}\right) \quad (4.20)$$

mit
$$E_{00} = \frac{e\hbar}{2} \sqrt{\frac{N_D}{\varepsilon m^*}} \quad (4.21)$$

Sie erhalten eine Stromdichte in Durchlaßrichtung von

$$J = J_{stf} \exp\left(\frac{eU}{E_0}\right) \quad (4.22)$$

wobei die Konstante E_0 durch die dotierungsabhängige Konstante E_{00} und die thermische Energie kT gegeben ist.

$$E_0 = E_{00} \coth\left(\frac{E_{00}}{kT}\right) \quad (4.23)$$

Der Vorfaktor der Stromdichte J_{stf} wurde von Crowell und Rideout berechnet [Crowell69]

$$J_{stf} = \frac{A^* T \sqrt{\pi E_{00}} e^{(\Phi_B - U - \xi)} \exp\left(-\frac{e\xi}{kT} - \frac{e}{E_0}(\Phi_B - \xi)\right)}{k \cosh\left(\frac{E_{00}}{kT}\right)} \quad (4.24)$$

mit dem energetischen Abstand des Leitungsbands zum Ferminiveau $\xi = E_c - E_{fn}$ und der effektiven Richardsonkonstante A^* . Der Vorfaktor hängt nun von der Spannung ab, da die Weite der Barriere, die durchtunnelt werden muß, mit zunehmender Durchlaßspannung zunimmt. Im Vergleich zur exponentiellen Abhängigkeit ist diese Spannungsabhängigkeit des Vorfaktors j_{stf} jedoch sehr gering. Die wesentliche Temperaturabhängigkeit des Tunnelstroms ist durch den exponentiellen Term $\exp(-e\xi/kT)$ bestimmt. Der Term $\cosh(E_{00}/kT)$ weicht nur im Fall sehr hoher Dotierung für $E_{00} > kT$ merklich von 1 ab. Für Dotierungen von 10^{19} cm^{-3} , $m_e^*/m_e=1$ und $\varepsilon=11,9$ ist $E_{00}=17 \text{ meV}$. Der \cosh -Term liegt in diesem Fall etwa bei 1 und hat nur eine schwache Temperaturabhängigkeit. Auch die exponentielle Steigung, die durch $1/E_0$ bestimmt ist, hängt bei sehr hoher Dotierung nur schwach von der Temperatur ab.

Das Multi-Tunnel-Einfang/Emissions-Modell von Matsuura [Matsuura84] beschreibt die Möglichkeit, daß Ladungsträger am Übergang (in Abb. 4.1 Löcher) von den Bändern in lokalisierte Zustände in der Bandlücke tunneln. Nach Riben und Feucht [Riben66, Riben66b] ist dabei die Tunnelwahrscheinlichkeit über mehrere Tunnelschritte wesentlich höher als die Tunnelwahrscheinlichkeit in nur einem Schritt. Da das amorphe Silizium im Vergleich zum kristallinen Silizium eine hohe Defektdichte hat, kann man davon ausgehen, daß in Durchlaßrichtung die Löcher vom Valenzband des kristallinen Materials in Defektzustände des amorphen Siliziums tunneln können (siehe Abb. 4.1, b). Diese Löcher werden dann entweder aus den Defekten ins Valenzband des amorphen Siliziums emittiert oder fangen Elektronen aus dem Leitungsband ein. Die Temperaturabhängigkeit des Ladungsträgertransports wird dabei

durch den Emissions- oder Einfangprozeß bestimmt. Die Tunnelwahrscheinlichkeit wird in diesem Modell unabhängig von der Temperatur angenommen. Die Stromdichte hat damit folgende Form

$$J = C_1 \left[\sigma_p v_{th} N_v \exp\left(-\frac{E_r - E_v}{kT}\right) - \sigma n v_{th} N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_f}{kT}\right) \right] \exp(BU) \quad (4.25)$$

Die Tunnelwahrscheinlichkeit ist in der Konstanten C_1 enthalten. Der erste Term in der Klammer beschreibt die Emission von Löchern ins Valenzband dessen Aktivierungsenergie der Abstand des Defektniveaus zum Valenzband ist, der zweite den Einfang eines Elektrons. Die Wahrscheinlichkeit für den Elektroneneinfang hängt von der Elektronendichte ab, weshalb die Aktivierungsenergie durch den Abstand des Fermi-niveaus zum Leitungsband gegeben ist.

Bei genügend hoher Defektdichte im kristallinen Silizium können auch Elektronen Löcher in Defekte dort tunneln (Abb. 4.1 e). Dort kann ebenfalls ein Einfang oder Emission erfolgen. Für Elektronen-Tunneln in c-Si Defekte ergibt analog:

$$J = C_1 \left[\sigma_n v_{th} N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_r}{kT}\right) - \sigma p v_{th} N_v \exp\left(-\frac{E_f - E_v}{kT}\right) \right] \exp(BU) \quad (4.26b)$$

4.1.6 Temperaturabhängigkeit der verschiedenen Ladungsträgertransportmodelle

Alle vorgestellten Transportmodelle haben eine exponentielle Strom-Spannungs-Charakteristik und lassen sich in der Form

$$J(U) = A(T) \left\{ \exp\left[(B(T)U) - 1 \right] \right\} \quad (4.27)$$

darstellen. Unterschiedlich sind jedoch die Temperaturabhängigkeiten des Vorfaktors $A(T)$ und der exponentiellen Steigung $B(T)$. Aus der Temperaturabhängigkeit der gemessenen Strom-Spannungskennlinien lassen sich damit Aussagen über den vorherrschenden Transportmechanismus ableiten. In Tabelle 4.1 wird die Temperaturabhängigkeit der verschiedenen Modelle, die in den vorangegangenen Abschnitten vorgestellt wurden, zusammengefaßt.

Tabelle 4.1: Temperaturabhängigkeit der Kennlinienparameter $A(T)$ und $B(T)$ verschiedener Strommodelle (nach Gleichung 4.26)

Theorie	Modell	Vorfaktor $A(T)$	$B(T)$	Idealität n
Diffusion pn Homoüber- gang		$T^{3+\gamma/2} \exp\left(-\frac{E_g}{kT}\right)$	e/kT	1
Anderson- Diffusion	Anderson	$T^{3+\gamma/2} \exp\left(\frac{eV_{bi}}{nkT}\right)$	e/nkT	$1+N_D/N_A$
		$T^{3+\gamma/2} \exp\left(-\frac{eV_{bi} - \Delta E_c}{kT}\right)$	e/kT	1
Rekombination- Generation	Shockley	$T^{3/2} \exp\left(-\frac{E_g}{2kT}\right)$	$e/2kT$	2
Thermionische Emission:		$T^2 \exp\left(-\frac{e\Phi_B}{kT}\right)$	e/kT	1
Tunneln durch Spitze :	Padovani Stratton	$T \exp\left(-\frac{e\xi}{kT}\right)$	\sim konst.	-
Multi Tunneln + Einfang / Emis- sion	Matsuura	$\exp\left(-\frac{E_T - E_V}{kT}\right) - \exp\left(-\frac{E_C - E_F}{kT}\right)$ $\exp\left(-\frac{E_C - E_T}{kT}\right) - \exp\left(-\frac{E_F - E_V}{kT}\right)$	konst.	-

So zeichnen sich die Tunnelmodelle durch eine temperaturunabhängige exponentielle Steigung aus, während die anderen Modelle ein Verhalten nach $\exp(eU/(nkT))$ mit verschiedenen Idealitätsfaktoren n zeigen.

Die experimentellen I-U Kennlinien werden hinsichtlich der Temperaturabhängigkeit der exponentiellen Steigung $B(T)$ und des Vorfaktors $A(T)$ ausgewertet und mit diesen Modellen verglichen.

4.2 Experimentelle Strom-Spannungskennlinien

Die Messung der Strom-Spannungskennlinien von (n)a-Si/(p)-c-Si Heterodioden wurde bei Temperaturen von 90 K bis 340 K an verschiedenen Proben durchgeführt. Für die tempera-

turabhängigen Messungen wurden die Proben auf einem mit Metall bedampften Glassubstrat befestigt, so daß die Kontaktierung des Front- und des Rückkontakts von der gleichen Seite durch einen gefederten Kontaktstift erfolgen kann. Neben der Probe wurde auch der Temperaturfühler auf dem Glassubstrat befestigt. Dieses Glassubstrat wird an einem Kupferblock befestigt, der mit flüssigem Stickstoff durchspült, und durch einen elektrischen Heizdraht erwärmt werden kann. Die gesamte Messung wird in einer Vakuumkammer durchgeführt. Als Spannungsversorgung und Strommeßgerät dient eine Keithley 230 Spannungsquelle und ein Keithley 617 Elektrometer.

Die Charakteristik der I - U Kennlinien hängt dabei merklich von der Präparation der Proben ab. In diesem Kapitel werden die Kennlinien von ausgewählten Proben gezeigt, die typische Merkmale enthalten und die gute Diodeneigenschaften bei Raumtemperatur aufweisen. Als Vergleich dazu wird die Kennlinie einer Diode mit geringerem Verhältnis der Stromdichten bei Sperr-/Flußrichtung vorgestellt.

In Abbildung 4.2 sind die I - U Kennlinien der Probe MW65 mit Al-Frontkontakten dargestellt.

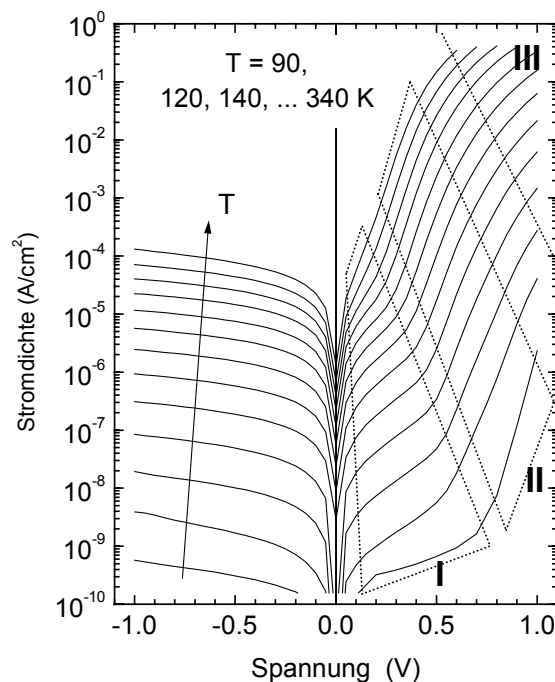


Abb 4.2 Temperaturabhängige I - U -Kennlinien einer (n/i)-a-Si:H/(p)-c-Si Diode (logarithmische Darstellung). In Flußrichtung sind drei Bereiche (I,II,III) mit unterschiedlichem Verhalten markiert

In Durchlaßrichtung gibt es im wesentlichen drei Bereiche (gestrichelt). Bei tiefen Temperaturen und geringen Spannungen erkennt man einen Bereich I mit einer flachen exponentiel-

len Steigung. Bei höherer Spannung ist die Steigung größer (Bereich II). Der Übergang zwischen diesen beiden Bereichen ist bei tiefen Temperaturen zu erkennen. Die Kennlinien weisen in logarithmischer Darstellung einen deutlichen Knick auf. Mit zunehmender Temperatur verschiebt sich der Knick zu kleineren Spannungen. Der Übergang zwischen den beiden Steigungen nimmt auch in der Deutlichkeit ab. Für $T > 300$ K ist kein Übergang mehr zu erkennen. Es existiert nur noch der steile Ast (Bereich II) der Strom-Spannungskennlinien. Werden diese zwei Bereiche unterschiedlicher exponentieller Steigung von zwei unterschiedlichen Transportmechanismen verursacht, so läßt sich angeben, in welchem Spannungs- und Temperaturbereich welcher Mechanismus dominiert. Bei hohen Temperaturen ist allein der Transportmechanismus II dominierend. Bei tiefen Temperaturen hängt der vorherrschende Ladungsträgertransport von der angelegten Spannung ab. Bei niedrigen Spannungen bestimmt der Transportmechanismus I die Kennlinien, bei hohen Spannungen wird dieser vom Transportmechanismus II überlagert.

Bei höheren Spannungen in Durchlaßrichtung ist schließlich kein exponentieller Zusammenhang mehr gegeben. Der Einfluß von Serienwiderständen wird merklich (Bereich III) In Sperrrichtung wird keine Sättigung der Stromdichte mit der Spannung beobachtet. Die Stromdichte nimmt fast linear mit der Spannung zu. Die Temperaturabhängigkeit der Stromdichten wurde für Sperrspannungen und die Bereiche I und II ausgewertet. Dies soll durch Vergleich mit den Temperaturabhängigkeiten der theoretischen Modelle Aufschluß über den Transportmechanismus der Ladungsträger in diesen Dioden geben.

4.2.1 Analyse der Diodenparameter $A(T)$ und $B(T)$ durch ein 2-Diodenmodell

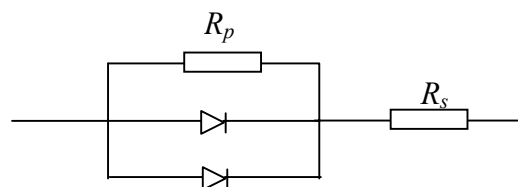


Abb. 4.3 Ersatzschaltbild für das 2-Dioden-Modell mit Parallel- und Serienwiderstand

Ob sich die gemessenen Dunkelkennlinien durch theoretische Diodenmodelle beschreiben lassen, wurde durch Anpassen einer Diodengleichung getestet. Da der Strom bei niedrigen

Durchlaßspannungen im Bereich I höher liegt als man beim Verlauf nach einer einfachen Diodengleichung erwartet, liegt es nahe, daß ein zusätzlicher möglicher Strompfad parallel zur bestimmenden Diode gegeben ist. Als zusätzlicher Transportpfad wird ein Parallelwiderstand angenommen, da auch in Sperrichtung der Strom fast linear von der Spannung abhängt. Durch nur eine Diode läßt sich die Kennlinie nur ungenügend für die beiden Bereiche I und II beschreiben (gestrichelte Linie in Abb. 4.4). Deshalb wurde noch zusätzlich eine zweite Diode im Ersatzschaltbild eingeführt, die parallel zur ersten Diode angeordnet ist. Um auch die Begrenzung des exponentiellen Verhaltens bei hohen Durchlaßspannungen und hohen Strömen zu beschreiben wird noch ein Serienwiderstand eingeführt. Das verwendete Ersatzschaltbild ist in Abbildung 4.3 gezeigt. Aus diesem Modell erhält man eine implizite Gleichung für die Strom-Spannungskennlinien, die numerisch durch das Newtonverfahren gelöst wird.

$$I = A_1 \left\{ \exp \left[\left(B_1 (U - IR_s) \right) - 1 \right] \right\} + A_2 \left\{ \exp \left[B_2 (U - IR_s) \right] - 1 \right\} + \frac{(U - IR_s)}{R_p} \quad (4.28)$$

Für 300 und 160 K ist exemplarisch die mit dem Modell berechnete (durch Anpassen der Parameter in Gleichung 4.f.16) und die gemessene I - U Kurve in Abbildung 4.4 aufgetragen.

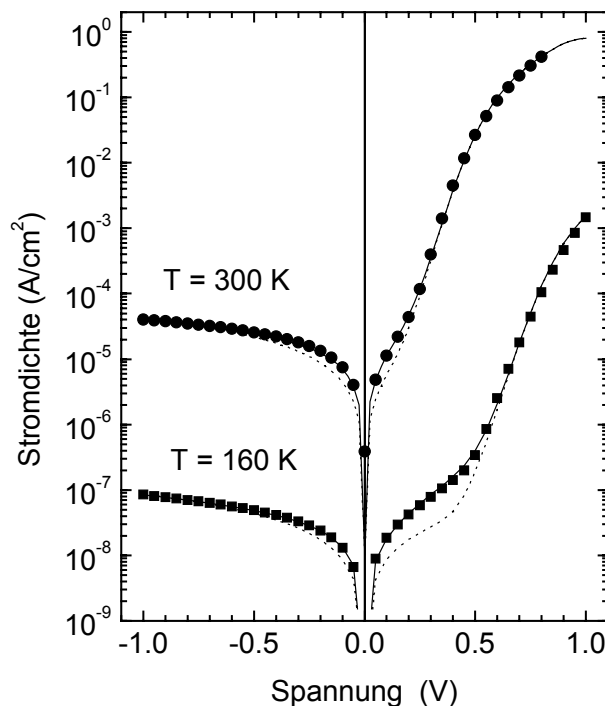


Abb. 4.4 I - U Kennlinien, Meßwerte (\bullet), und nach 1-Diodenmodell (---) und 2-Diodenmodell (—) angefitzt (nach Gl. 4.27). Bei kleinen Spannungen gibt es einen Beitrag von der zweiten Diode

Man erkennt bei kleinen Spannungen in Durchlaß- und Sperrichtung die zu geringen Ströme, die sich unter Annahme von nur einer Diode ergeben (gestrichelte Linie). Diese Abweichung ist bei tiefen Temperaturen deutlich stärker ausgeprägt als bei 300 K, da hier der Bereich I nicht so stark vom Bereich II überlagert wird. Insgesamt lassen sich die gemessenen Kennlinien dieser Probe gut mit dem 2-Dioden-Modell annähern. Die Interpretation der Beiträge der zwei Dioden wird aus der Temperaturabhängigkeit der Diodenparameter ermittelt. Oft wird aus einer Diodenkennlinie bei nur einer Temperatur unter Annahme einer Spannungsabhängigkeit des Stroms der Form $[\exp(U/nkT)-1]$ in Durchlaßrichtung aus der Steigung der Kennlinie der sogenannte Diodenqualitätsfaktor n ermittelt. Eine solche Auswertung würde hier bei 300 K bei einer exponentiellen Steigung $B=27 \text{ V}^{-1}$ einen Qualitätsfaktor von 1.43 ergeben. Daß diese Annahme in diesem Fall jedoch nicht gerechtfertigt ist, wird bei der Temperaturabhängigkeit der Diodenparameter deutlich.

4.2.2 Temperaturabhängigkeit der Diodenparameter

Zur Charakterisierung des Stroms in Durchlaßrichtung wird die exponentielle Steigung $B(T)$ und der Vorfaktor $A(T)$ nach Gleichung 4.26 für beide exponentiellen Bereiche I und II gesondert ausgewertet. Beim Ladungsträgertransport in Durchlaßrichtung werden Elektronen vom n-dotierten amorphen Silizium in Richtung des Heteroübergangs transportiert (In der Situation in Bild 4.1 fließen Elektronen von links nach rechts zum c-Si). Von der linken Seite wird der Heteroübergang mit einem Löcherüberschuß versorgt. Es soll nun geklärt werden, welcher Mechanismus den Strom am Heteroübergang dominiert.

In den Abbildungen 4.5 und 4.6 sind die exponentielle Steigung $B(T)$ und der Vorfaktor $A(T)$ (nach Gl. 4.26) für die Bereiche I und II gegen $1/T$ aufgetragen. Man erkennt für beide Bereiche eine deutlich unterschiedliche exponentielle Steigung, die jedoch in beiden Fällen schwach mit der Temperatur ansteigt. Der Strom im Bereich I wird vom Bereich II bei hohen Temperaturen überlagert. Deshalb geht die exponentielle Steigung dort von den niedrigen Steigungen des Bereich I in die hohen Steigungen des Bereich II über. Die Werte der Steigungen dort resultieren aus einer Mischung der beiden Transportmechanismen. Als Vergleich dazu sind die Temperaturabhängigkeiten der exponentiellen Steigung aufgetragen (gestrichelte Linie), die sich aus dem Modell des Rekombinationsstrom von Shockley mit der Steigung $1/2kT$, dem Diffusionsstrommodell mit $1/kT$ und dem Tunneln durch die Spitze von Padovani und Stratton [Padovani65], das bei hoher Dotierung nur schwach temperaturabhängig ist. Um Steigungen in der Größe der gemessenen Werte zu erhalten, wurde der Parameter E_{00} zu

43 meV gewählt, was einer Dotierung von $6 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ entspricht.

Die Steigung nimmt für den Fall eines Rekombinations- oder Diffusionsstroms deutlich mit höherer Temperatur ab. Im Vergleich dazu sind die aus der Messungen erhaltenen Werte nahezu konstant. Die Transportmodelle für Diffusionsstrom, Rekombinationsstrom und thermionische Emission kommen deshalb nicht in Frage. Beide Steigungen deuten auf Tunnelmechanismen hin.

Abb. 4.5 Vorfaktor der Stromdichte $A(T)$ (nach Gl. 4.26) einer (n)/(i)-a-Si:H/(p)-c-Si Diode in Vorwärtsspannung für die Bereiche I und II

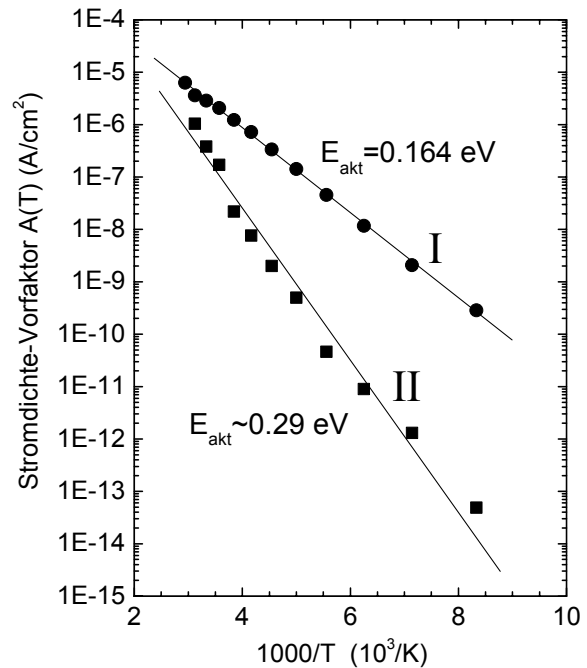
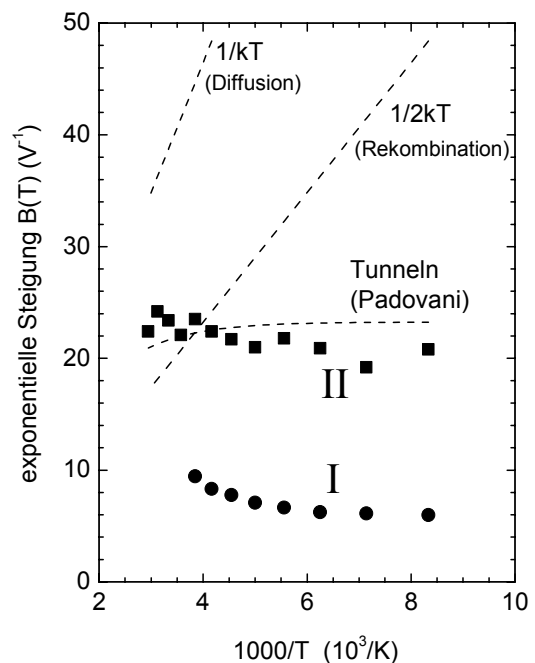


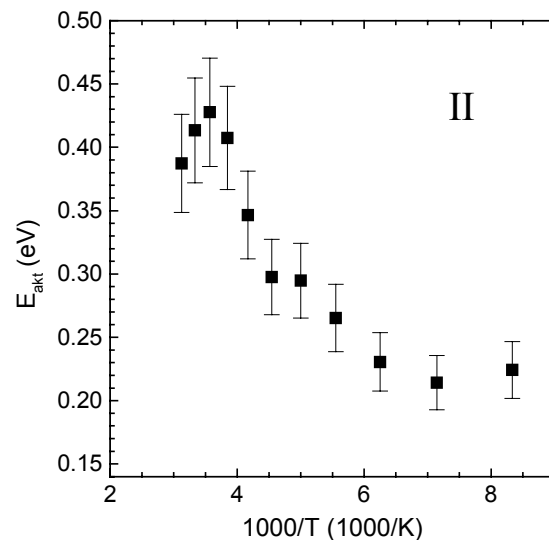
Abb. 4.6 exponentielle Steigung $B(T)$ (nach Gl. 4.26) einer (n)/(i)-a-Si:H/(p)-c-Si Diode in Vorwärtsspannung im Vergleich zu Diffusions- Rekombination und Tunnelstrom [Padovani65]



Zur Klärung, ob es sich um Tunneln durch Spitzen im Leitungs- oder Valenzband handelt, oder ob Ladungsträger in Defekte tunneln, wird die Temperaturabhängigkeit des Vorfaktors $A(T)$ herangezogen. In Abbildung 4.5 ist der Vorfaktor der Stromdichten in einem Arrheniusplot aufgetragen. Im Bereich I handelt es sich hier deutlich um einen thermisch aktivierten Prozeß. Man erhält aus der konstanten Steigung der Kurve eine Aktivierungsenergie von 0.16 eV.

Im Bereich II erhält man keine Gerade. Aus einer Regressionsgerade, die den Anstieg nur grob beschreibt, ergibt sich eine mittlere Aktivierungsenergie von 0.29 eV. Die Kurve zeigt jedoch eine zunehmende Steigung zu höherer Temperatur. Es wurde auch getestet, ob sich aus einem modifizierten Richardsonplot eine Gerade ergibt, bei der der Vorfaktor zuerst durch das Quadrat der absoluten Temperatur geteilt wird und dann erst logarithmiert wird. Dies wird bei thermionischem Strom angewendet, um die Aktivierungsenergie zu erhalten, da in diesem Modell der Vorfaktor eine Temperaturabhängigkeit der Form $A^* T^2 \exp(E_{akt}/kT)$ besitzt. Im Fall eines Tunnelstroms durch eine Spitze ist der Vorfaktor von der Form $A^* T \exp(E_{akt}/kT)$. Deshalb wurde in diesem Plot nicht durch das Quadrat der Temperatur, sondern durch die Temperatur selbst geteilt. Aber auch in diesem modifizierten und im eigentlichen Richardsonplot ergibt sich jedoch keine Gerade. Aus diesem Grund wird für den Bereich II eine scheinbare, temperaturabhängige Aktivierungsenergie aus der temperaturabhängigen Steigung der Kurve ermittelt.

Abb. 4.7: Temperaturabhängige Aktivierungsenergie des Vorfaktors $A(T)$ im Bereich II (aus der Ableitung des Vorfaktors nach $1/T$), das entspricht einem für Tunneln modifiziertem Richardsonplot



Diese Aktivierungsenergie im Bereich II ist in Abbildung 4.7 aufgetragen. Sie liegt bei tiefen Temperaturen unter 160 K etwa bei 0.22 eV und steigt dann bei hohen Temperaturen auf

Werte von etwa 0.40 eV. Eine solche Verschiebung der Aktivierungsenergie könnte durch die starke Temperaturabhängigkeit des Fermi-niveaus im amorphen Silizium verursacht werden, womit sich auch die Barrieren verformen können. Für hoch n-dotiertes amorphes Silizium, dessen Fermi-niveau E_c-E_f bei Raumtemperatur etwa bei 0.25-0.3 eV unter dem Leitungsband liegt, verschiebt sich dieses bei tiefen Temperaturen von ca. 140 K um etwa 0.15 eV näher zum Leitungsband [Ley84]. Eine Sättigung des Fermi-niveaus zu noch tieferen Temperaturen läßt sich nicht erkennen.

Nach dem Vorfaktor des Tunnelmodells von Crowell und Rideout [Crowell69] geht der Abstand des Fermi-niveaus von der Leitungsbandkante direkt in die Aktivierungsenergie ein (Gl. 4.24). Eine so starke Verschiebung des Fermi-niveaus muß dann auch zur Erhöhung der Aktivierungsenergie zu hohen Temperaturen führen. Die exponentielle Steigung wird von diesem Tunnelmodell mit $1/E_0$ vorhergesagt. Diese liegt bei einer Dotierung von $6 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ bei Werten von ca. 22 V^{-1} , wie in Abb. 4.8 zu sehen ist. Dies paßt gut zu der in der Simulation erhaltenen Dotierdichte von $6.8 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, die benötigt wird, um für stark n^+ -dotiertes a-Si:H mit gemessenen Defektdichte von ca. 10^{19} cm^{-3} (aus CPM) und flachen Bandausläufern mit angenommenen charakteristischen Energien von 0.12 eV ein Fermi-niveau von 0.25 eV unter dem Leitungsband zu erhalten. Dies wurde aus Leitfähigkeitsmessungen bestimmt. Mit dem Tunneln von Elektronen durch eine Spitze im Leitungsband läßt sich also der Strom im Bereich II bei hohen Temperaturen sowie bei niedrigen Temperaturen und hohen Durchlaßspannungen erklären (Eine Spitze im Valenzband existiert bei der (n)a-Si/(p)c-Si Struktur nicht).

Bei tiefen Temperaturen und geringen Durchlaßspannungen findet ein anderer Ladungsträgertransport über den Heteroübergang statt. Ein Tunneln von Löchern aus dem kristallinen Silizium in Defekte im amorphen Silizium und anschließendem Elektroneneinfang nach dem Modell des Multi-Tunneln-Einfang/Emission (MTCE) müßte die Aktivierungsenergien des n^+ -dotierten a-Si:H ergeben. Dies sind bei niedrigen Temperaturen ($<120 \text{ K}$) ca. 0.08 eV und ca. 0.17-0.20 eV für $T > 160 \text{ K}$. Dies entspricht jedoch nicht der konstanten Aktivierungsenergie von 0.164 eV.

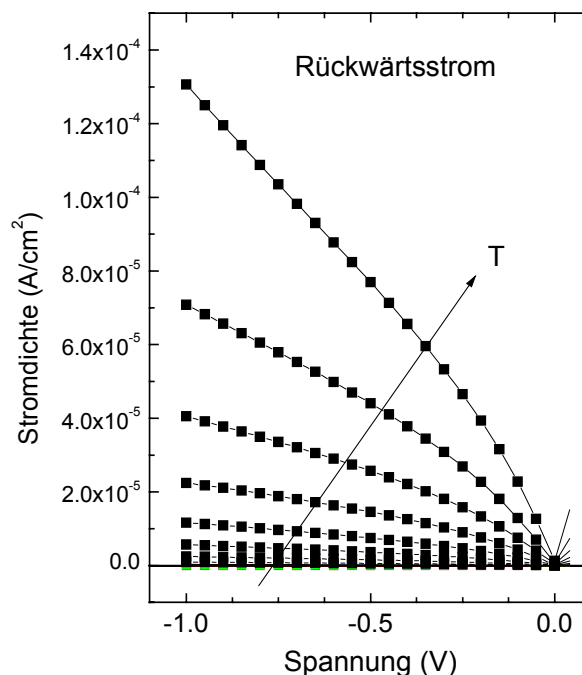
Dieser Wert stimmt jedoch mit dem erwarteten Fermi-niveau (E_f-E_v) im kristallinen Silizium von 0.17 eV sehr gut überein. Deshalb kann man den Ladungsträgertransport im Bereich I mit einem (Multi-)Tunneln von Elektronen in Defekte im kristallinen Silizium und anschließendem Löchereinfang erklären (Transportpfad e) in Abb. 4.1). Dies ist einerseits vorstellbar, da durch eine Leitungsbanddiskontinuität am Heteroübergang eine Inversionschicht vorhanden sein kann, d.h. auch im p-dotierten kristallinen Silizium dominieren die

Elektronen nahe am Heteroübergang. Andererseits erwartet man im qualitativen hochwertigen kristallinen Silizium (float zone Wafer!) keine hohe Defektdichte, die diesen Transportprozeß ermöglicht. Im nächsten Kapitel wird jedoch durch Kapazitätsmessungen gezeigt werden, daß bei der a-Si:H-Beschichtung des Wafers Defekte erzeugt werden. Dadurch wird dieser Transportprozeß plausibel. Bei erhöhter Defektdichte im kristallinen Silizium sollte die Stromdichte im Bereich I ansteigen. Dies zeigt sich bei den Kennlinien einer (n)-a-Si/(p)-c-Si Diode ohne intrinsische a-Si:H Zwischenschicht, die in Kapitel 4.2.5 gezeigt wird. Daß dieser Transportprozeß nur bei kleinen Spannungen in Flußrichtung erscheint, paßt auch gut zu der Tatsache, daß die Tunnelwahrscheinlichkeit mit zunehmender Spannung und damit abnehmendem elektrischen Feld kleiner wird und dieser Transport dadurch verhindert wird.

4.2.3 Strom-Spannung in Sperrichtung

In Sperrichtung sättigt der Strom mit zunehmender Spannung nicht, sondern zeigt bei höheren Spannungen (-1V) einen fast linearen Zusammenhang zwischen Spannung und Strom (Abb. 4.8). Bei niedrigeren Sperrspannungen kann das nichtlineare Verhalten durch Generation von Ladungsträgern aus Defekten in der Raumladungszone erklärt werden, was dem umgekehrten Prozeß des Bereich I in Flußrichtung entspricht. Wenn die Defektdichte in der Raumladungszone nicht homogen ist, wird die Stromdichte nicht proportional zur Weite der Raumladungszone sein.

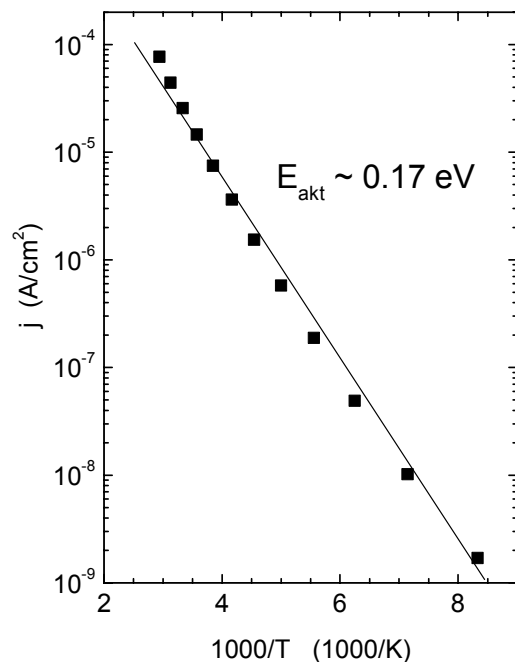
Abb. 4.8 Temperaturabhängigkeit der Stromdichte einer (n,i)-a-Si:H/(p)-c-Si Diode in Sperrichtung bei $-0.5V$ Rückwärtsspannung.



Der lineare Zusammenhang bei höheren Sperrspannungen läßt sich durch ein Ersatzschaltbild mit einem parallel zur Diode geschaltetem Widerstand erklären. Der dadurch erhöhte Strom überlagert nun den eigentlichen Diodenstrom. Dies macht sich auch in Durchlaßrichtung bei kleinen angelegten Spannungen störend bemerkbar.

Zur Auswertung der Bereiche, die einen exponentiellen Anstieg des Stroms mit der Spannung zeigen, wurde deshalb der Sperrstrom vom Durchlaßstrom abgezogen. Dadurch läßt sich der Einfluß eines Parallelwiderstands eliminieren, vorausgesetzt, daß der Strom in Sperrrichtung hauptsächlich durch den Parallelstrom gegeben ist.

Abb. 4.9 Temperaturabhängigkeit der Stromdichte bei -0.5 V (Sperrrichtung)



Aus der Temperaturabhängigkeit des Sperrstroms bei -0.5 V erhält man aus einem Arrheniusplot, der in Abb. 4.9 gezeigt wird, eine Aktivierungsenergie von 0.167 eV. Diese Aktivierungsenergie entspricht der Leitfähigkeit des Parallelwiderstands und ist damit so hoch wie das Fermi-niveau des p-dotierten kristallinen Siliziums, das mit einem spezifischen Widerstand von $0.5 \Omega\text{cm}$ eine Dotierung von etwa $3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ und ein Fermi-niveau von ca. 0.17 eV unterhalb der Leitungsbandkante hat.

Wie kann man sich einen solchen Parallelwiderstand vorstellen, der eine thermische Aktivierung der Leitfähigkeit wie das kristalline Silizium zeigt? Dazu muß der Frontkontakt aus Aluminium kleine Kontakte mit dem kristallinen Silizium besitzen. Dies kann geschehen, wenn die amorphe Siliziumschicht Löcher aufweist. Daß vor allem bei dünnen amorphem Silizium, das mit Gleichstrom-Glimmentladung (DC-PECVD) hergestellt wurde, ein deutliches Inselwachstum auftritt, wurde von Wanka [Wanka97] durch in-situ Ellipsometrie und

Rasterkraftmikroskopie festgestellt. Eine andere Möglichkeit sind Spitzen aus dem kristallinen Wafer, die vom dünnen (<100 nm) amorphen Silizium nicht komplett zugedeckt sind, wodurch das Aluminium den Wafer an den Spitzen kontaktiert. Daß der Wafer nach dem Abätzen der Oxidschicht Spitzen aufweist ist vor allem bei (100) Orientierung möglich, wie sie hier verwendet wurde. Beim Ätzen mit gepufferter Flußsäure HF:NH₄F werden (111) Flächen bis auf eine Atomlage glatt geätzt [Higashi91]. Dies führt jedoch bei (100) Wafern dazu, daß kleine (111) Flächen ausgeätzt werden. Es entsteht also eine gezackte Oberfläche, die jedoch keine steilen Flanken aufweist. Nach Profilometer-Messungen und AFM-Messungen der Waferoberfläche nach dem Ätzen konnten jedoch nur Rauigkeiten der Oberfläche im Bereich bis 10 Nanometer festgestellt werden. Daß diese Spitzen eine Größenordnung von 30 nm erreichen, die nicht von a-Si:H bedeckt werden, ist damit unwahrscheinlich. Werden AFM-Messungen nach der a-Si:H Beschichtung durchgeführt, zeigt sich eine verringerte Rauigkeit von weniger als 4 nm.

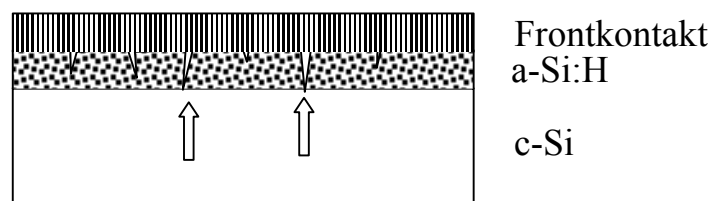


Abb. 4.10 Mögliche Leckströme in Sperrichtung durch Löcher in der amorphen Schicht

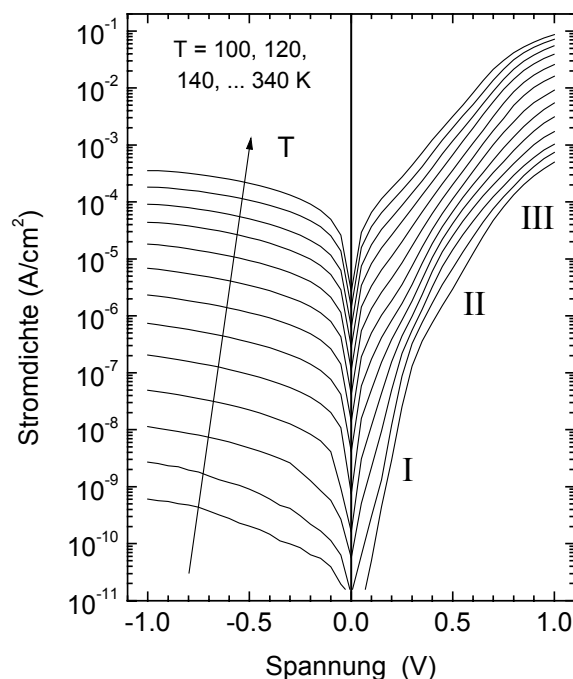
Daß die amorphe Schicht eine leitende Verbindung zum Kontakt auf der Waferrückseite über seitliche Kanten hat, was ebenfalls zu Strömen parallel zur Diode führen würde, läßt sich ausschließen, weil das amorphe Silizium nicht die ganze Oberfläche des Wafers bedeckt. Solche erhöhten Leckströme zeigen sich tatsächlich bei großflächigen Frontkontakten (aus TCO) und anschließendem Brechen des Wafers in kleine Stücke

Für den Parallelwiderstand könnten also feine Löcher in der amorphen Schicht verantwortlich sein. Daß mit dünner werdender amorpher Schicht der Parallelwiderstand abnimmt, der lineare Sperrstrom damit zunimmt, spricht ebenfalls für einen derartigen Zustandekommen des Parallelstroms. Dies führt bei zu geringen Schichtdicken zum Verlust der Diodeneigenschaft. Die Aktivierungsenergie von 0.167 eV des Sperrstroms entspricht genau der Aktivierungsenergien der Leitfähigkeit des (p)-c-Si. Daraus wird ersichtlich, daß die Oberflächenbehandlung für die Qualität der Dioden eine wichtige Rolle spielt.

4.2.4 Probe mit Wasserstoff-Plasma Behandlung

Ein Beispiel, wie die Charakteristik der I-U Kennlinien von der Präparation der Proben abhängt, wird anhand einer (n,i)a-Si:H/(p)c-Si (Probe MW60, gleiche Struktur wie bei der vorherigen Probe) deutlich, die vor der Beschichtung mit a-Si:H 5 Minuten einem Wasserstoffplasma ausgesetzt wurde. Diese Probe zeigt einen Wirkungsgrad als Solarzelle von ca. 9 % bei 100 mW/cm^2 Beleuchtung mit Weißlicht. Eine qualitativ sehr ähnliche Strom-Spannungscharakteristik wurde auch an einer (n/i)a-Si/(p)c-Si Probe gemessen, die von M. Kolter vom Forschungszentrum Jülich zur Verfügung gestellt wurde.

Abb. 4.11 Temperaturabhängige Stromdichte-Spannungs-Kennlinien einer (n/i)-a-Si:H/(p)-c-Si Diode mit Wasserstoffplasma-Behandlung



Ebenso wie bei der vorher gezeigten, existiert kein einfacher exponentieller Zusammenhang zwischen Strom und Spannung in Durchlaßrichtung, sondern es sind wieder zwei Bereiche mit unterschiedlichem exponentiellem Verhalten vorhanden. Jedoch sind bei kleinen Durchlaßspannungen (Bereich I) die Kennlinien hier sehr steil. Bei höheren Spannungen gehen sie in einen Bereich II mit einer niedrigeren exponentiellen Steigung über. Es ist am Übergang deutlich ein Knick bei ca. $+0.3\text{V}$ in den Kurven zu erkennen. Bei hohen Temperaturen ist nur noch der exponentiell ansteigender Bereich II zu erkennen. Bei allen Temperaturen nehmen die Stromdichten für hohe Durchlaßspannungen nahe $+1\text{V}$ wiederum nicht mehr exponentiell mit der Spannung zu. Die Stromdichte hängt hier mit einem Potenzgesetz von der Spannung ab (Bereich III).

Dieses Verhalten der zwei Bereiche kann nicht mehr durch die Möglichkeit zweier Trans-

portprozesse für die Ladungsträger durch eine Parallelschaltung erklärt werden, da der Bereich II mit den hohen Stromdichten den Bereich I überlagern müßte. Hier findet eine Limitierung der Stromdichte durch den Transportmechanismus des Bereich II statt.

Um für die Bereiche I und II eine Aussage über den Transportmechanismus zu erfahren, wurden wieder jeweils für die beiden exponentielle Steigung $B(T)$ und der Vorfaktor $A(T)$ bestimmt. In Abbildung 4.12 ist die exponentielle Steigung der Bereiche gegen die reziproke Temperatur aufgetragen. Zum Vergleich werden die Kurven $1/2kT$, die sich aus der Steigung für das Rekombinationsmodell von Shockley ergibt, sowie die fast konstante exponentielle Steigung des Tunnelmodells von Padovani und Stratton gezeigt. Die $1/kT$ Kurve, die dem Modell für Diffusion und für thermionische Emission entspricht, wäre in dieser Abbildung doppelt so hoch und liegt von den Meßwerten noch weiter entfernt.

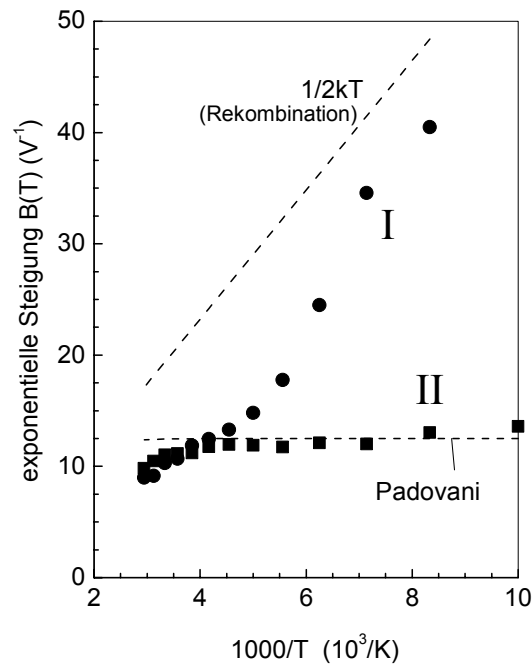


Abb. 4.12 Exponentielle Steigung $B(T)$ (nach Gl. 4.26) einer (n)/(i)-a-Si:H/(p)-c-Si Diode mit H-Plasma-Behandlung in Vorwärtsspannung im Vergleich mit theoretischen Modellen für die Bereiche I und II

Im Bereich II ist die exponentielle Steigung $B(T)$ mit Werten von $12-13 \text{ V}^{-1}$ nahezu konstant, und nimmt nur für Temperaturen oberhalb 250 K leicht auf etwa 10 V^{-1} ab, was auf ein Tunnelmodell schließen läßt. Im Bereich I nimmt die exponentielle Steigung bei tiefen Temperaturen deutlich mit der Temperatur ab. Es ergibt sich ein Verlauf, der einem $1/nkT$ Gesetz ähnlich ist. Bei tiefen Temperaturen nähert sich die exponentielle Steigung der $1/2kT$ Kurve.

Wieder wird bei tiefen Temperaturen wird der Strom in Durchlaßrichtung also von 2 verschiedenen Transportmechanismen bei verschiedenen Spannungen bestimmt, während bei

hohen Temperaturen ($T > 260\text{K}$) ein Transport dominiert.

Im Bereich II ist bei tiefen Temperaturen wieder ein Tunnelprozeß für den Strom maßgeblich, da die Steigung $B(T)$ etwa konstant ist. Die sehr geringe Aktivierungsenergie des Vorfaktors $A(T)$ von 70 meV stimmt in diesem Bereich etwa mit der Aktivierungsenergie der Leitfähigkeit des (n)a-Si:H, und damit mit der Aktivierungsenergie der fast freien Elektronen überein, was für den Bereich II auf Multi-Tunneln mit Elektroneneinfang deutet.

Bei kleinen Durchlaßspannungen zeigt der Parameter $B(T)$ für den Bereich I eine deutliche Temperaturabhängigkeit. Die Werte liegen etwas unter denen für das Rekombinationsmodell, kommen diesen jedoch nahe.

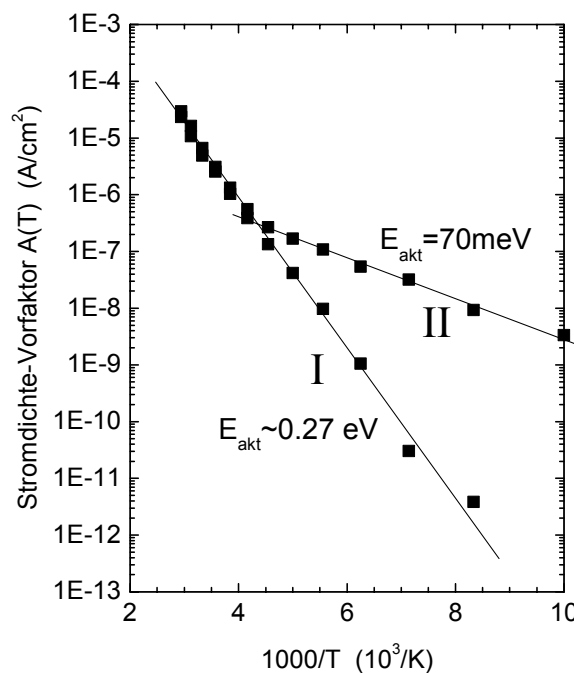


Abb. 4.13 Vorfaktor der Stromdichte $A(T)$ (nach Gl. 4.26) einer (n)/(i)-a-Si:H/(p)-c-Si Diode mit H-Plasma-Behandlung in Vorwärtsspannung für die Bereiche I und II

Die Aktivierungsenergie von etwa 0.27 eV in Abbildung 4.13 (Bei einer Auswertung der Steigung bei 300K liegt sie etwa bei 0.30 eV) stimmt mit der des Modells des Rekombinationsstrom von $E_g/2$ jedoch nicht überein. Ebenfalls deutlich kleinere Aktivierungsenergien als die halbe Bandlücke wurden auch von VanCleaf [vanCleaf97] mit 0.45 eV und von Rahman [Rahman84] festgestellt. VanCleaf bietet als Erklärungsmöglichkeit dafür die mangelnde Versorgung des Gebiets der Raumladungszone mit Elektronen (in der hier verwendeten Dotation) an, die zuerst die Barriere am Interface überwinden müssen, wodurch die Aktivierung des Prozesses geändert wird. Es ist jedoch schwierig, die Auswirkungen solcher Mischungen von Transportprozessen abzuschätzen.

4.2.5 Heterodiode ohne intrinsische Zwischenschicht

In Abbildung 4.14 sind zum Vergleich dazu Dunkelkennlinien einer (n)-a-Si:H/(p)-c-Si Diode (Probe MW50) ohne intrinsische a-Si-Zwischenschicht gezeigt. Diese Probe zeigt in Durchlaßrichtung zwei unterschiedliche Bereiche mit unterschiedlicher Steigung. Im Gegensatz zu den zuvor gezeigten Kennlinien sind diese zwei verschiedenen Bereiche jedoch auch bei hohen Temperaturen über 300 K noch zu sehen.

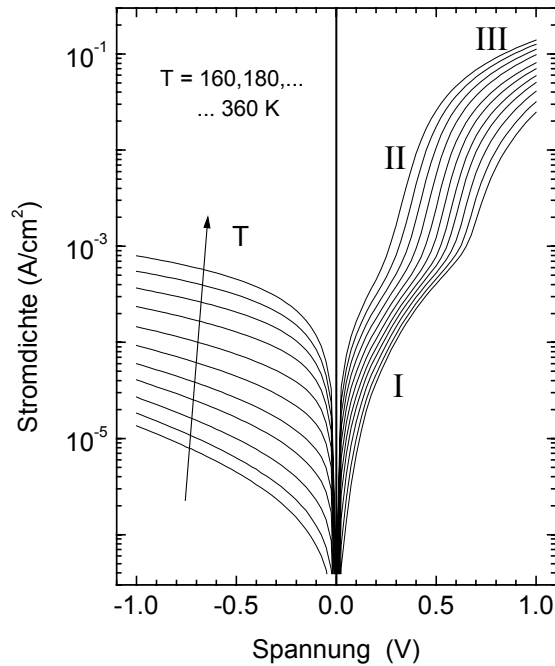


Abb. 4.14: Temperaturabhängige I - U Kennlinien einer (n)-a-Si:H(p)-c-Si Diode ohne i-a-Si:H Zwischenschicht

In Sperrichtung ist die Stromdichte mit ca. $5 \times 10^{-4} \text{ A/cm}^2$ deutlich höher als bei den bisher gezeigten Dioden. Die Gleichrichtungseigenschaft dieser Probe ist mit einem Durchlaß/Sperrverhältnis von ca. 300 bei $\pm 1 \text{ V}$ deutlich schlechter. Die Eignung dieser Probe als Solarzelle ist dadurch geringer. Der hohe Sperrstrom reduziert den Füllfaktor der Solarzellenkennlinie und damit den erzielbaren Wirkungsgrad. An der Grenzfläche ist nun statt intrinsischem hoch dotiertes und defektreiches a-Si:H vorhanden. Dies deutet auf den schon erwähnten Einfluß von grenzflächennahen Defekten auf den Ladungsträgertransport des Bereich I bei kleinen Spannungen in Durchlaß- und Sperrrichtungen hin. Je defektreicher die Schicht nahe der Grenzfläche ist, desto höher ist die Stromdichte.

4.2.6 Vergleich der Ergebnisse mit anderen Arbeiten

Im der folgenden Tabelle werden als Vergleich mit den hier präsentierten Untersuchungen die wichtigsten Ergebnisse anderer Gruppen aus Strom-Spannungsmessungen an verschiedenen a-Si:H/c-Si (und einer a-Si:H/c-GaAs) Heterodioden zusammengestellt:

Tabelle 4.2: Literaturvergleich Strom-Spannungskennlinien

Literaturverweis	Struktur, Temperatur-Bereich	Experimentelle Ergebnisse	Vorgeschlagenes Transportmodell	Auswertungen
[Matsuura84, Matsuura89]	(i)a-Si:H/(p)c-Si 290-360 K	Konstante (temperaturunabhängige) Steigung In Sperrichtung Potenzgesetz der Form $I \sim U^{0.5}$	Tunnelmodell von Riben und Feucht [Riben66, Riben66b] wird erweitert zum MTCE Modell (Multi-Tunneling-Capture-Emission), das in Kapitel 4.1.5 vorgestellt wurde Generation von Ladungsträgern in der Raumladungszone	Aktivierungsenergie des Stromvorfaktors bei 0.63-0.80 eV, was etwa der Aktivierungsenergie der Leitfähigkeit des a-Si:H entspricht. Multi-Tunneln von Löchern ins a-Si:H und folgender Löcheremission (3proben) bzw. Elektroneneinfang (1Probe)
[Mimura92], [Mimura85]	(p,i)a-Si:H/(n)c-Si bzw. (p,i)a-Si:H/(n)-GaAs T>290 K	Konstante (temperaturunabhängige) Steigung für kleine Durchlaßspannung. höhere Durchlaßspannung: $I \sim U^m$	MTCE Raumladungsbegrenzte Ströme	Zusammenhang zwischen hohem Sperrstrom und Interfacedefektdichte $m \sim 8$

[dellaSala95]	(n)/(i)a-Si:H/(p)c-Si T>300 K	Konstante Steigung Bei längerer HF-Ätzzeit zusätzlich erhöhter Strom bei kleiner Durchlaßspannung	MTCE	Interfacedefekte (sieht man auch bei Kapazitätsmessung)
[Marsal96, Marsal96b, Marsal97]	(n)a-Si:H/(p)c-Si T>290 K	Keine temperaturunabhängige Steigung sondern $I \sim \exp(eV/nkT)$ höhere Durchlaßspannung: $I \sim U^m$	Rekombinationsströme Raumladungsbegrenzte Ströme	$n=1.1, \dots 1.3$ Aktivierungsenergie Vorfaktor ~ 0.86 eV ($\sim E_{gap}/2$)
[Kolter95, Kolter97]	(n)a-Si/(p)c-Si 300 K	Fit mit 2-Diodenmodell (parallel) Durch Stickstoffplasma vor a-Si:H-Beschichtung Erniedrigung des Stroms bei kleinen Spannungen		Zusammenhang zwischen erhöhtem Sperrstrom und Strom bei kleinen Durchlaßspannungen
[vanCleef96, vanCleef98]	(p)a-SiC:H/(n)c-Si 100-400 K	Für T>300 K temperaturunabhängige Steigung 200<T<300 K $I \sim \exp(eV/nkT)$	Entweder MTCE oder Tunneln durch Valenzbandspitze Rekombinationsstrom	Aktivierungsenergie 0.55 eV Aktivierungsenergie 0.45 eV, $n \sim 2$

[Jagannathan96, Jagannathan97]	(n)a-Si/(p)c-Si Dioden unterschiedliche Herstellung (a-Si:H PECVD und Sputtern) 100-400 K	Für T>280 konstante Steigung Für T<280 erhöhter Strom für kleine Spannungen (vor allem bei gesputtertem a-Si:H)	MTCE	Starke Streuung der Werte für unterschiedliche Proben Vermutung : Ionenbeschuß des Wafers
--------------------------------	--	--	------	--

Zusammenfassend kann man feststellen, daß bei tiefen Temperaturen alle Dioden zwei unterschiedliche exponentielle Steigungen bei verschiedenen hohen Durchlaßspannungen aufweisen. Dieses Verhalten, das oft durch ein 2-Diodenmodell beschrieben wird, tritt bei schlechteren Dioden, die einen höheren Sperrstrom zeigen, auch noch bei Temperaturen > 300 K auf, während gute Dioden mit einem kleinem Sperrstrom bei hohen Temperaturen nur noch eine exponentielle Steigung über den Spannungsbereich besitzen. Diese teils unterschiedlichen Ergebnisse der Dunkel-Strom-Spannungsmessungen rühren sicherlich von der unterschiedlichen Präparation der Dioden her. Der wichtige Einfluß der Oberflächenbehandlung wie Ätzen mit HF-Lösungen oder Plasmabehandlungen vor dem Beschichten des Wafers mit a-Si:H wird dabei deutlich.

4.3 Strom-Spannung unter Beleuchtung

Im folgenden wird das Verhalten der Heterodioden unter Beleuchtung betrachtet. Zum Vergleich mit den gemessenen Hellkennlinien und zur Veranschaulichung der auftretenden Effekte werden Simulationsrechnungen präsentiert.

Unter Beleuchtung durch die amorphe Seite werden Ladungsträger vor allem im kristallinen Silizium generiert. Wegen der geringen Dicke der amorphen Schicht von 30-60 nm wird nur kurzwelliges Licht (<500nm) dort stark absorbiert. Für größere Wellenlängen wird der größte Teil der Ladungsträger im 200 µm dicken kristallinen Wafer erzeugt. Falls keine zu hohe Durchlaßspannung anliegt, diffundieren die dort erzeugten Elektronen über die a-Si/c-Si Grenzfläche zur (n) a-Si:H Seite und zum Frontkontakt. Dabei müssen sie eine an der Grenzfläche zum Frontkontakt vorhandene Barriere im Leitungsband überwinden. Die Löcher dif-

fundieren zum Rückseitenkontakt im c-Si. Dies ist in Abb. 4.15 schematisch dargestellt.

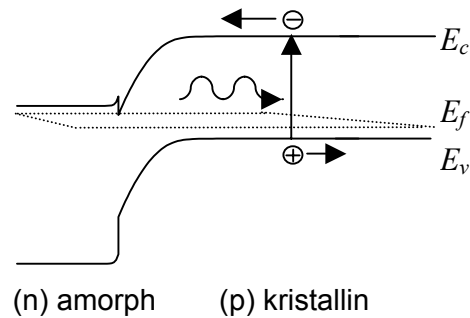


Abb 4.15 (n)-a-Si:H/(p)-c-Si Heterodiode unter Beleuchtung, Schematisches Banddiagramm. Wegen der geringen a-Si:H-Schichtdicke findet Absorption überwiegend im c-Si statt

Der gesamte Strom kann unter einigen Vereinfachungen durch

$$J(U) = A(T) \{ \exp[B(T)U] - 1 \} - J_L \quad (4.29)$$

ausgedrückt werden [z.B. Wagemann94], wobei der erste Term die übliche Diodengleichung, der zweite den durch Licht erzeugten Strom darstellt.

Für die Beleuchtung der Proben wurde eine Halogenlampe verwendet. Mit Hilfe einer Kondensorlinse und einer Konzentratorklinse wurde das Licht so gebündelt, daß die Beleuchtungsstärke 100 mW/cm^2 erreicht. Dies entspricht der Leistungsdichte der AM 1.5 Strahlung. Im Vergleich zu einem AM 1.5 Spektrum ist der Anteil der Strahlung im roten und infraroten Bereich beim verwendeten Aufbau jedoch zu hoch. Die Bestimmung eines Solarzellenwirkungsgrades ist deshalb nicht präzise. Um die Erwärmung der Proben durch Infrarotstrahlung, die vor allem bei tiefen Temperaturen sehr störend sein kann, zu verringern, wurde ein ca. 1 cm dicker Wasserfilter in den Strahlengang gebracht. Die Beleuchtungsstärke konnte durch zusätzliches Einbringen von Graufiltern variiert werden. Bei der Messung der Strom-Spannungskennlinien unter Beleuchtung wurde auf die Probe eine Maske aufgelegt, um die Sammlung von Ladungsträgern auf einer definierten Fläche zu erhalten [Brüggemann99].

In Abbildung 4.16 sind die I - U Kennlinien unter Beleuchtung mit 100 mW/cm^2 Weißlicht bei Temperaturen zwischen 90 und 340 K dargestellt. Bei hohen Temperaturen über 180 K erhält man die für Solarzellen typischen Kennlinien. Die Leerlaufspannung U_{oc} (Index „oc“ von **O**pen **C**ircuit **V**oltage) nimmt wie erwartet mit tieferen Temperaturen zu. Unter 160 K erkennt man bei Spannungen in Durchlaßrichtung eine mit tieferen Temperaturen immer deutlicher ausgeprägte S-Form der Kennlinie.

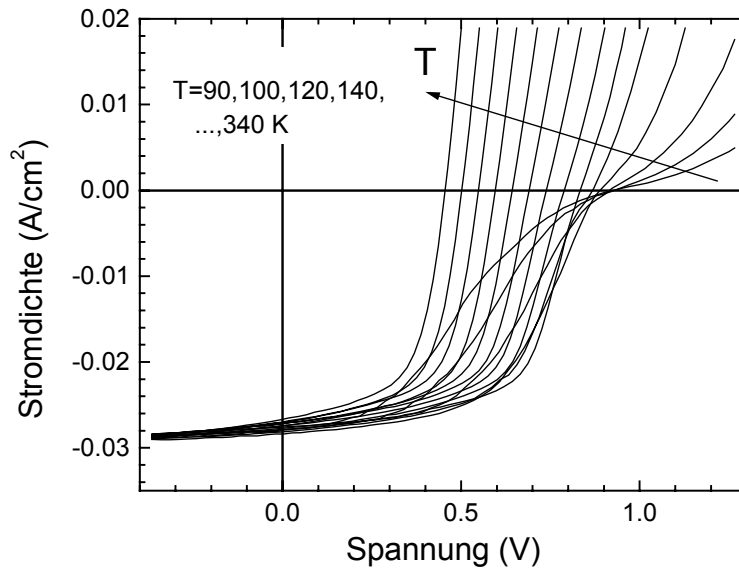


Abb. 4.16: Hellkennlinie einer (n)/(i)-a-Si:H/(p)-c-Si Heterodiode unter Beleuchtung mit Weißlicht (100 mW/cm²) bei Temperaturen von 90-340 K

Um diesen Sachverhalt einschätzen zu können, ist in Abb. 4.17 eine ideale Solarzellenkennlinie unter Beleuchtung sowie eine Kennlinie unter Einfluß eines Serien- (R_s) und eines Parallelwiderstands (R_p) aufgetragen. Die Strom-Spannungskennlinie läßt sich in diesem Fall beschreiben durch:

$$I = A \left\{ \exp \left[B(U - IR_s) \right] - 1 \right\} + \frac{(U - IR_s)}{R_p} - I_L \quad (4.30)$$

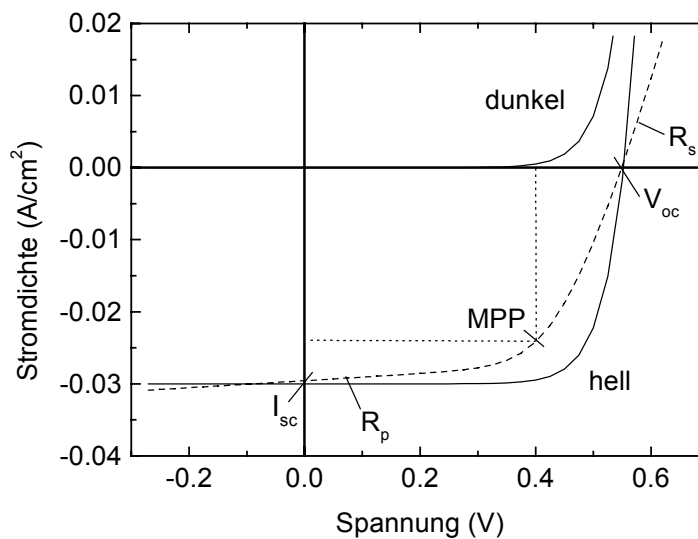


Abb. 4.17 Ideale und nichtideale I-U-Kennlinie einer Solarzelle im Dunklen und unter Beleuchtung (—). Einfluß eines Serien- und Parallelwiderstands auf die Hellkennlinie (- -). (U_{oc} : Leerlaufspannung, I_{sc} : Kurzschlußstromdichte, MPP: Maximum Power Point)

Der Parallelwiderstand führt im Bereich kleiner Ströme zu einer Drehung der Kennlinie um den Schnittpunkt der Kennlinie mit der Stromdichte-Achse ($U=0$), da bei kleinen Spannungen (in beiden Richtungen) die Diode vom Parallelwiderstand überbrückt wird und der Strom somit hauptsächlich über den Parallelwiderstand geleitet wird. Der Serienwiderstand führt im Bereich hoher Stromdichten zu einer Drehung um den Schnittpunkt mit der Spannungs-Achse ($j=0$) da zusätzlich zur Diode noch Spannung am Serienwiderstand abfällt und das Vorzeichen des Spannungsabfalls identisch mit dem Vorzeichen der Stromdichte ist. Aus der Hell- I - U -Kennlinie lassen sich R_p bei Sperrspannungen und für hohe Spannungen in Flußrichtung R_s (auch aus der Dunkelkennlinie) aus der Steigung dU/dI ermitteln.

Bei einer Halbleiterdiode kann ein Parallelwiderstands zustande kommen, indem die Beschichtung mit n-dotiertem a-Si:H auf dem Wafer kleine Löcher aufweist und der Frontkontakt direkt mit dem p-dotiertem Wafer in Kontakt kommt. Auch an Bruchkanten kann eine direkte Berührung sogar mit dem metallischen Rückkontakt erfolgen. (Die Beschichtung mit a-Si:H und dem Frontkontakt ist bei den hier vorliegenden Proben jedoch nicht über die ganze Waferoberfläche ausgedehnt, weshalb eine Kontaktierung über Kanten auszuschließen ist). Ein erhöhter Serienwiderstand kann von Metall-Halbleiterkontakten herrühren oder auch von zu geringer Leitfähigkeit einer Halbleiterschicht.

Der Einfluß von linearen Termen, wie Widerständen in Serie oder parallel zur Diode, führt jedoch in keinem Fall zur Ausprägung einer S-Form sondern zu einer Abflachung der Kurve. Die S-Form stammt folglich entweder vom a-Si:H/c-Si-Übergang selbst oder von anderen nichtlinearen Effekten des Bauelements.

4.4 Einfluß von Barrieren auf die Strom-Spannungs-Hellkennlinie

In diesem Abschnitt werden numerische Strom-Spannungskennlinien von Heterodioden berechnet. Dabei werden zuerst Effekte, die von Schottkybarrieren an Front- und Rückkontakt verursacht werden, untersucht. Danach wird der Einfluß des Sprungs im Leitungsband ΔE_c auf I - U -Hellkennlinien gezeigt.

4.4.1 Einfluß von Schottkybarrieren auf die Strom-Spannungs-Hellkennlinie

Für solche nichtohmschen Kontakte sowie Barrieren am Heteroübergang wurden deshalb Rechnungen mit dem im nächsten Kapitel vorgestellten Halbleitersimulationsprogramm durchgeführt. Dazu wurden zum einen Schottkybarrieren unterschiedlicher Barrierenhöhen an den äußeren Metall-Halbleiter-Kontakten angenommen und die Auswirkungen auf die I - U -Kennlinien berechnet. Zum anderen wurde die Barriere am Heteroübergang durch eine unterschiedliche Aufteilung der Bandlückendifferenz zwischen amorphem und kristallinem Silizium variiert.

Man muß sich dabei folgende Wirkung der Barrieren auf die Ladungsträger vorstellen: Durch Strahlung werden Elektron-Loch-Paare zum allergrößten Teil im kristallinen Silizium (wegen sehr dünner a-Si:H Schichten kleiner als 60 nm) generiert. Die Elektronen bewegen sich in Richtung Heteroübergang und a-Si:H/Metall bzw. (TCO) Frontkontakt und haben dabei 2 mögliche Barrieren zu überwinden. Die Löcher bewegen sich innerhalb des Wafers zum c-Si/Metall Rückkontakt und haben nur dort eine potentielle (wenn auch unwahrscheinliche) Barriere. Damit an diesen Barrieren ein genügend hoher Stromfluß stattfinden kann (I_{sc}) muß eine zu hohe Barriere durch einen Spannungsabfall an dieser Stelle erniedrigt werden.

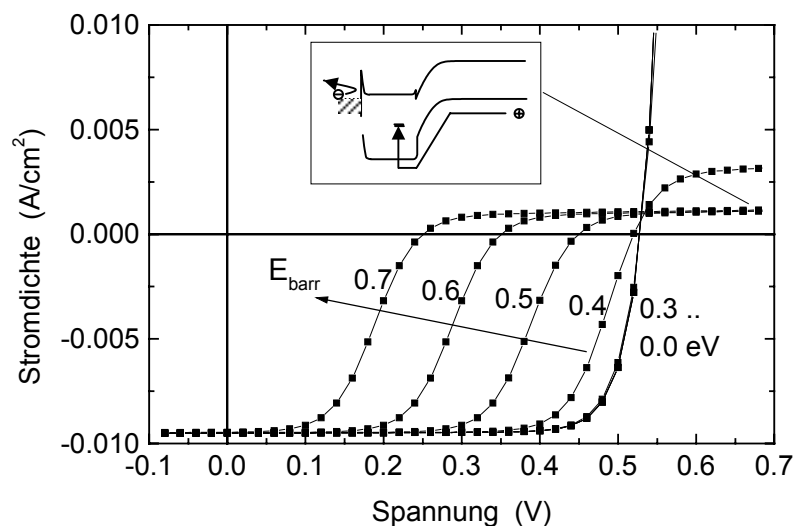


Abb. 4.18 Sperrung des Stroms einer (n)-a-Si:H/(p)-c-Si Heterodiode unter AM1.5-Bestrahlung in Durchlaßrichtung (der np-Diode) durch eine Schottkybarriere an der a-Si:H-Seite. Parameter: Schottkybarrierenhöhe von 0-0.7 eV. Kleines Bild: hohe Barrieren (≥ 0.4 eV) sperren den Elektronenstrom vom Kontakt ins a-Si:H, während die Löcher im (n)-a-Si:H rekombinieren \Rightarrow kein hoher Strom in Flußrichtung möglich

Die Ergebnisse der Simulation für Schottkybarrieren zwischen Metall und amorphem Silizium von 0.0 bis 0.7 eV Barrierenhöhen unter AM1.5-Bestrahlung sind in Abb. 4.18 gezeigt (Die Rechnungen wurden für Heterostrukturen mit 10 μ m dickem c-Si bei 300 K durchgeführt. Die Verhältnisse bei tiefen Temperaturen sind prinzipiell die gleichen jedoch wirken schon geringere Barrieren als Hindernis). Zum einen nimmt die Leerlaufspannung mit zunehmender Barrierenhöhe ab. Die Abnahme der Leerlaufspannung (in V) ist dabei genauso groß wie der Unterschied in der Barrierenhöhe (in eV). Dies gilt jedoch nur für Schottkybarrieren größer als etwa 0.4 eV. Für diese Barrieren steigt der Strom in Vorwärtsrichtung auch nicht mehr steil an, sondern sättigt. Die Abnahme der Leerlaufspannung liegt daran, daß die vom (n)a-Si:H kommenden Elektronen diese hohen Schottkybarrieren am Metall/(n)a-Si:H Kontakt nur noch überwinden können, wenn diese Barriere um exakt den Betrag ihrer Höhe (in eV) durch einen Spannungsabfall des gleichen Betrags (in V) an der Barriere abfällt (Für die vom a-Si:H in Richtung Kontakt kommenden Elektronen ist die Schottkybarriere in Flußrichtung gepolt).

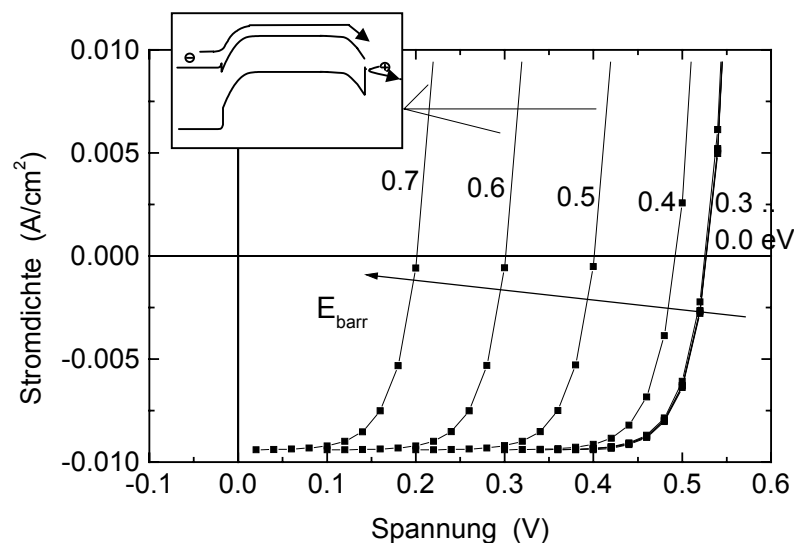


Abb. 4.19 Verringerung der Leerlaufspannung U_{oc} einer (n)-a-Si:H/(p)-c-Si Heterodiode in Durchlaßrichtung (der np-Diode) durch eine Schottkybarriere am c-Si-Rückkontakt. Parameter: Schottkybarrierenhöhe von 0-0.7 eV. Es findet für $I > 0$ Elektronenstrom durch das ganze Bauelement statt. Im kleinen Bild sind Elektronen- und Löcherstrom (bei $U > 0$ und $I > 0$) dargestellt.

Etwas anders sind die Verhältnisse in Flußrichtung für eine Schottkybarriere am (p)-c-Si/Metall Rückkontakt (Abb. 4.19). Hier sperrt zwar auch ab einer bestimmten Barriere-

renhöhe die Schottkybarriere die Löcher vom Metall, aber die Elektronen haben eine genügend hohe Diffusionslänge im (p)-c-Si, um den ganzen Wafer zu durchqueren. Für positive Spannungen und Ströme herrscht also ein reiner Elektronenstrom in der ganzen Diode. Es gibt keinen Bereich, in dem der Strom gesperrt wird. Auch hier sinkt jedoch U_{oc} mit höher werdender Barriere ab. Die Schottkybarriere am Rückkontakt wird ebenfalls durch einen Spannungsabfall abgesenkt, um den Löchertransport über den Rückkontakt zu ermöglichen, wodurch zum Sammeln der strahlungsgenerierten Ladungsträger die Potentialverhältnisse um den gleichen Spannungsbetrag ungünstiger werden.

Eine Schottkybarriere am Wafer-Rückkontakt führt jedoch nicht zu einer S-Form der Strom-Spannungskennlinie unter Beleuchtung.

4.4.2 Simulation von Strom-Spannungs-Hellkennlinien in Abhängigkeit des Leitungsbandsprungs ΔE_c

Eine weitere Barriere, die zu einer Abweichung der I - U -Kennlinien im Vergleich zu idealen Homodioden führen kann, ist ein Sprung in der Bandlücke ΔE_c am a-Si:H/c-Si Übergang. Da wegen der geringen a-Si:H-Schichtdicke die Generation der Ladungsträger überwiegend im kristallinen Silizium stattfindet, müssen fast alle Elektronen diese Barriere überwinden. Die überwiegend im kristallinen Silizium erzeugten Löcher fließen zum Rückkontakt des Wafers. Der geringe Anteil der Löcher, der im a-Si:H generiert wird, rekombiniert dort auch wieder. Die Löcher müssen deshalb die Grenzfläche nicht überwinden.

Es wurden numerische Simulationsrechnungen von (n,i)-a-Si:H/(p)-c-Si Heterodioden mit n-a-Si:H Schichtdicken von 57 nm, i-a-Si:H von 3 nm und einem 200 μ m dicken Wafer durchgeführt.

Als Bandlücke wurde 1.12 eV im c-Si und 1.7 eV im a-Si:H angesetzt. Die Aufteilung der Bandlückendifferenz von 0.63 eV auf einen Leitungsbandsprung ΔE_c und einen Valenzbandsprung ΔE_v wurde dabei variiert (Die Höhe des Valenzbandsprungs spielt für die (n,i)-a-Si:H/(p)-c-Si Struktur kaum eine Rolle).

In Abbildung 4.20 sind simulierte Stromdichte-Spannungskennlinien von (n,i)-a-Si:H/(p)-c-Si-Dioden bei $T=150$ K und $T=300$ K gezeigt, wobei ΔE_c zwischen 0.1 bis 0.4 eV variiert wurde. Dabei wurde die Diode mit einem AM1.5 Spektrum von auf die a-Si:H Seite bestrahlt.

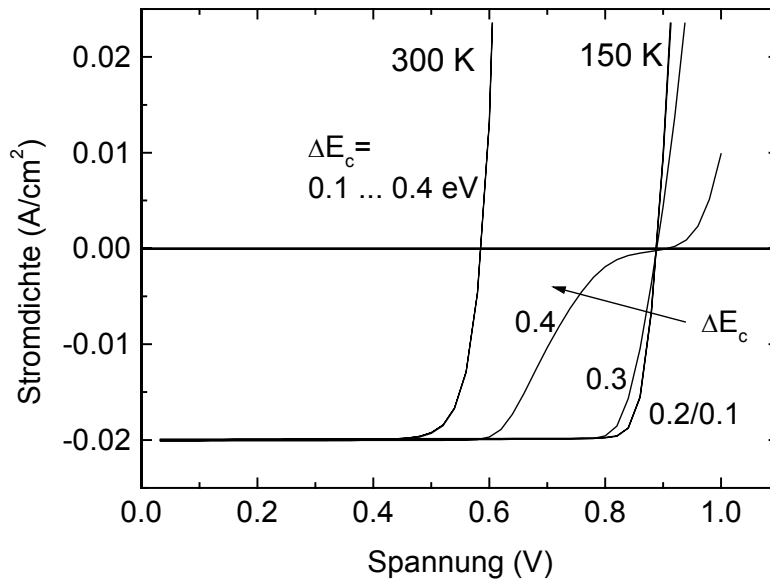


Abb. 4.20 Simulierte I - U Hellkennlinien für Bandoffsets ΔE_c von 0,1/0,2/0,3/0,4 eV bei 300 und 150 K. Ab Barrieren $\Delta E_c > 0,3$ eV ist bei 150 K eine S-Form erkennbar.

Bei 300 K erhält man typische Solarzellenkennlinien, die unabhängig von einer Barriere im Leitungsband ΔE_c ist. Bei 150 K sind die Solarzellenkennlinien für Leitungsbandsprünge von 0,1 und 0,2 eV identisch. Für 0,3 eV ergibt sich eine kleinere Steigung der Kennlinie für Spannungen in der Nähe der Leerlaufspannung von 0,9 V, was dem Einfluß eines Serienwiderstands ähnlich ist. Für $\Delta E_c = 0,4$ V ergibt sich eine S-Form wie bei den experimentellen Hellkennlinien, d.h. der (Absolut-)Wert der Stromdichte ist in der Nähe von U_{oc} verringert.

Die beste Übereinstimmung der Hell- I - U -Kennlinien ergab sich bei $\Delta E_c = 0,36$ V. Bei diesem Wert kommt die Ausprägung der „S-Form“ bei der jeweiligen Temperatur dem Experiment am nächsten.

Für eine solche Diode sind simulierte Hellkennlinien in Abhängigkeit der Temperatur in Abbildung 4.21 dargestellt.

Die Übereinstimmung bezieht sich dabei im wesentlichen auf die Ausprägung der S-Form der Hell- I - U -Kennlinien. Bei den experimentellen I - U -Kurven sind weitere Einflüsse, z.B. von Serien- und Parallelwiderständen vorhanden. Die Übereinstimmung von Simulation und Experiment ist auch deshalb nicht perfekt.

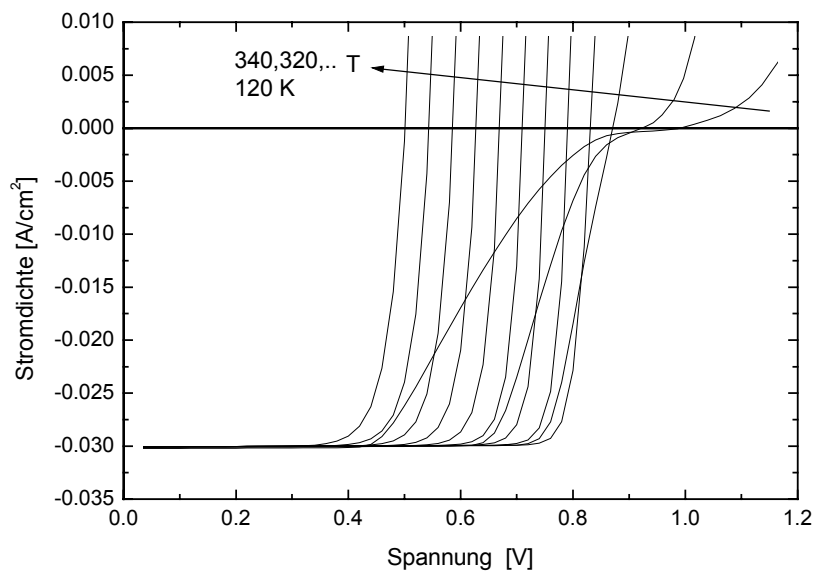


Abb. 4.21 Simulierte I - U Kennlinien einer (n,i)a-Si:H/(p)c-Si Solarzelle mit einem Leitungsbandsprung $\Delta E_c = 0.36$ eV unter AM1.5-Bestrahlung bei Temperaturen von 120 bis 340 K.

Die S-Form bei tiefen Temperaturen wird durch eine lokale Bandverbiegung am Grenzübergang verursacht. Nur mit einer großen Differenz des Quasiferminiveaus für die Elektronen ist die hohe Stromdichte möglich. Durch diesen lokalen Spannungsabfall am Heteroübergang verkleinert sich die Bandverbiegung der restlichen Raumladungszone. Ist die Spannung nahe bei U_{oc} , so werden die Verhältnisse zur Sammlung der Ladungsträger durch die verringerte Bandverbiegung der Raumladungszone ungünstiger. Die Stromdichte sinkt.

In Abbildung 4.22 wird dieser lokale Spannungsabfall am Heteroübergang dargestellt. Dazu wird das Leitungsband und das Elektronen-Quasiferminiveau einer (n,i)a-Si:H/(p)c-Si Diode bei 150 (durchgezogen) und 300 K (gestrichelt) gezeigt. Für beide Fälle wurde eine äußere Spannung so gewählt, daß die Stromdichte mit 29 mA/cm^2 fast noch die Kurzschlußstromdichte von 30 mA/cm^2 erreicht. Dies ist bei 150 K bei 0.68 V und bei 300 K bei 0.45 V der Fall. Die Bandverbiegung der Leitungsbandkante E_c ist bei 150 K (durchgezogene Linie) um ca. 0.13 eV höher als bei 300 K. Während bei 300 K das Quasiferminiveau (fein gestrichelt) eine Gerade ist, erhält man bei 150 K eine Stufe von 0.13 eV. Dies entspricht einem Spannungsabfall von 0.13 V. Ein solcher Spannungsabfall am Grenzübergang findet auch bei positiven Stromdichten statt. Dadurch ergibt sich die S-Form.

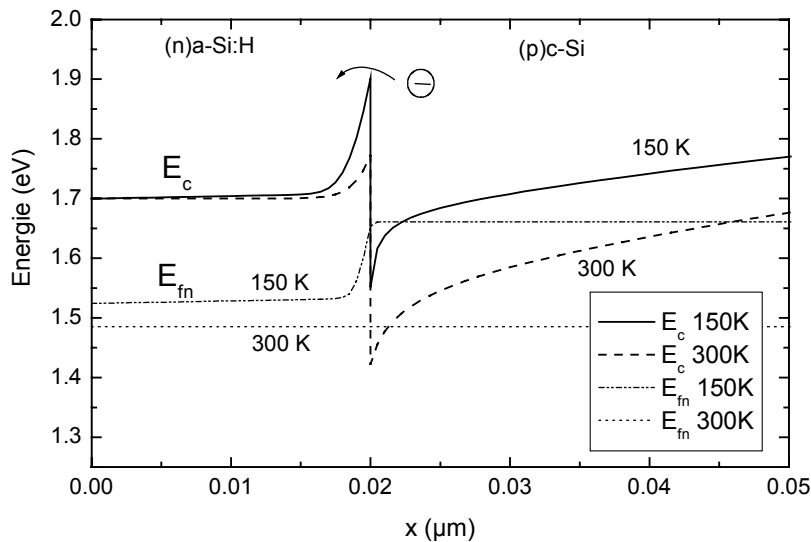


Abb. 4.22 Simulierte Bandverbiegung einer (n,i)a-Si:H/(p)c-Si Heterosolarzelle mit $\Delta E_c = 0.36$ eV bei AM 1,5 Beleuchtung bei 150 und 300 K. (bei 150 K $U = 0.66$ V, bei 300 K $U = 0.45$ V). Bei 150 K fällt merklich Potential an der Heterobarriere ab (ΔE_{fn} und Absenkung der Leitungsbandspitze = 0.13 eV).

Mit einer Barriere $\Delta E_c \sim 0.36$ eV im Leitungsband läßt sich die Temperaturabhängigkeit der Stromdichte-Spannungskennlinien unter Bestrahlung erklären. Allerdings basieren die simulierten Stromdichten auf dem Modell der thermionischen Emission, bei dem die Elektronen die Barriere überwinden müssen. Bei der Leitungsbandspitze mit einer Dicke im Bereich von 5 nm ist jedoch auch mit Tunnelströmen zu rechnen, bei der die Ladungsträger mit einer geringeren Energie als die Barrierspitze den Heteroübergang überwinden. Eine Barriere mit Tunneln, die der thermischen Emission einer Barriere von 0.36 eV entspricht, muß deshalb sogar größer als 0.36 eV sein.

Einen Valenzbandsprung kann man aus der Bandlücke des amorphen (ca. 1.7 eV) und des kristallinen (1.12 eV) Siliziums und dem Leitungsbandsprung (>0.36 eV) ableiten. Man erhält $\Delta E_v < 0.22$ eV.

Dies steht im Widerspruch zu den meisten in der Literatur veröffentlichten Werten für ΔE_c und ΔE_v , für die meist kleinere Werte ΔE_c als ΔE_v gefunden wurden (siehe 2. Kapitel). Dabei fällt auf, daß die größten Werte für ΔE_c immer an Heterostrukturen mit p-typ c-Si gefunden wurden (und an einer Struktur mit gesputtertem a-Si:H), die kleinen ΔE_c an Strukturen mit n-typ c-Si. Dies würde auf einen systematischen Einfluß des Dotierungstyps auf die Aufteilung der Bandlückendifferenz hindeuten. Es ist allerdings auch ein kombinierter Einfluß der Barriere am Heteroübergang und am Frontkontakt nicht auszuschließen.

4.5 Simulation von pn- und np-Heterodioden mit Grenzflächendefekten

Eine wichtige Fragestellung bei der Herstellung von Solarzellen auf Basis von a-Si:H/c-Si Heterodioden ist die Wahl des Dotierungstyps. Haben np- oder pn-Heterosolarzellen ein höheres Potential für die Verwendung als Solarzellen ?

In diesem Zusammenhang wird auf die Bedeutung der Bandoffsets ΔE_c und ΔE_v für die Rekombination an der Grenzfläche eingegangen, was auf die erreichbare Leerlaufspannung U_{oc} Einfluß hat.

Das wesentliche Argument für die Verwendung von p-typ Wafern für kristalline Solarzellen ist die höhere Diffusionslänge der Elektronen als Minoritätsladungsträger im Vergleich zur Diffusionslänge der Löcher in n-typ c-Si.

Hier wird gezeigt, daß für Heterosolarzellen, bei denen Grenzflächenzustände am Heteroübergang vorhanden sein können, auch die Aufteilung des Unterschieds der a-Si:H und c-Si Bandlücken auf Leitungs- und Valenzband eine wichtige Rolle spielt (siehe auch [Rösch98]).

Dafür wurden die Hell- I - U -Kennlinien einer (n)-a-Si:H/(p)-c-Si und einer (p)-a-Si:H/(n)-c-Si Diode miteinander verglichen. Dabei wurde ein deutlicher Unterschied zwischen $\Delta E_c=0.1$ eV und $\Delta E_c=0.48$ eV angenommen (mit $E_{g,a-Si:H}=1.7$ eV, $E_{g,c-Si}=1.12$ eV). Die Fermienergien und Diffusionsspannungen der invers dotierten Strukturen sind:

$$\begin{aligned} \text{(n)-a-Si:H/(p)-c-Si: } & (E_c-E_F)_{a-Si:H} = 0.25 \text{ eV} \quad (E_F-E_V)_{c-Si} = 0.15 \text{ eV} \quad eU_{bi}=0.82 \text{ eV} \\ \text{(p)-a-Si:H/(n)-c-Si: } & (E_F-E_V)_{a-Si:H} = 0.30 \text{ eV} \quad (E_c-E_F)_{c-Si} = 0.16 \text{ eV} \quad eU_{bi}=1.14 \text{ eV} \end{aligned}$$

Das „eingebaute“ Potential U_{bi} ist dabei wegen der $\Delta E_c < \Delta E_v$ bei der zweiten Struktur deutlich größer.

Zum Vergleich der Stromdichte-Spannungs-Kennlinien von Strukturen mit Interfacedefekten wurde eine 2 nm dicke c-Si-Schicht mit energetisch breit verteilten Defekten (bandmittig bei 0.56 eV) und einer Defektdichte $2.5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ am Grenzübergang hinzugefügt, was einer Grenzflächendichte von $5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ entspricht. Diese Defekte haben amphoteren Charakter, d.h. sie können positiv, neutral und auch negativ geladen sein.

In Abbildung 4.23 sind berechnete $I(V)$ -Kurven von (n)-a-Si:H/(p)-c-Si (■, □) und inverser (p)-a-Si:H/(n)-c-Si Diode (○, ●) jeweils ohne (■, ●) und mit (○, □) Defektschicht.

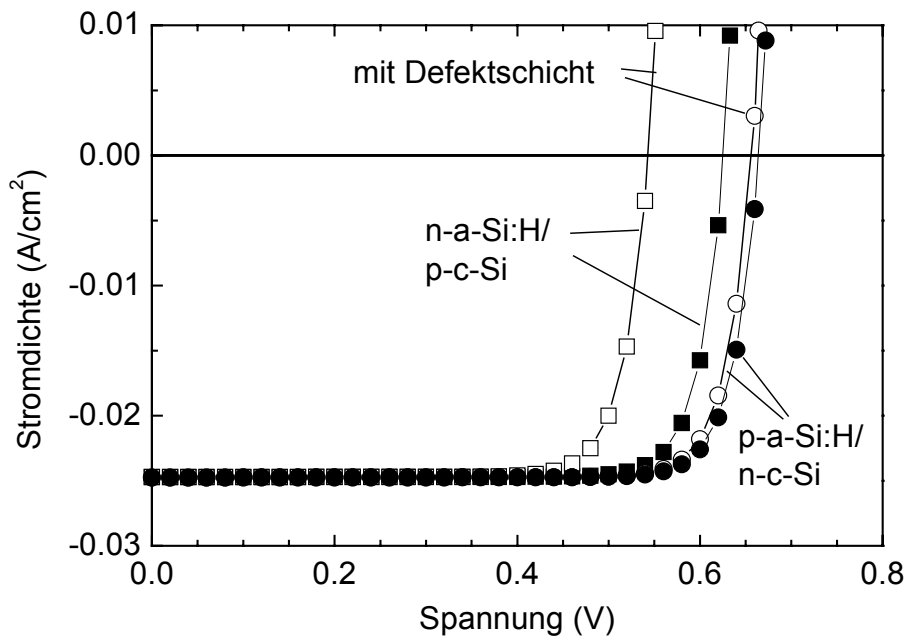


Abb 4.23 Simulierte I - U Kurven einer (n)-a-Si:H/(p)-c-Si und der umgekehrt dotierten Solarzellenstruktur (mit $\Delta E_c=0.1$ eV und $\Delta E_v=0.48$ eV) jeweils mit und ohne Interfacedefekte ($5 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$) unter Bestrahlung (AM1.5)

Bei den Hellkennlinien der Dioden ohne Defektschicht (■,●) hat die (n)-a-Si:H/(p)-c-Si Diode mit $U_{oc}=0.63$ V eine etwas kleinere Leerlaufspannung als die invers dotierte Struktur mit $U_{oc}=0.67$ V. Dies liegt an der niedrigeren Bandverbiegung (und damit an $U_{bi}=0.82$ V) der (n)-a-Si:H/(p)-c-Si-Heterostruktur. Nähert sich die Spannung dem Wert U_{bi} so wird die Rekombination in der Raumladungszone sehr hoch und der Strom sinkt ab. Dies ist bei der (n)-a-Si:H/(p)-c-Si Diode mit kleinerem U_{bi} bei kleineren Spannungen eher der Fall als bei der invers dotierten Struktur. (Die maximale Leerlaufspannung ist eigentlich für hinreichend niedrige Bestrahlung nur durch die Aufspaltung der Quasiferminiveaus $E_{fn}-E_{fp}$ für Elektronen und Löcher bestimmt. Die Diffusionsspannung U_{bi} ist jedoch ein Limit für U_{oc} . Diese Limitierung wird merklich sobald $E_{fn}-E_{fp}$ annähernd so groß wie U_{bi} wird)

Noch deutlicher wird der Unterschied in U_{oc} jedoch unter Einfluß von Grenzflächendefekten (○,□). Während bei der (p)-a-Si:H/(n)-c-Si, die auch schon ohne Defekte ein höheres $U_{oc}=0.67$ V hatte, dieser Wert nur um ca 10 mV absinkt, verringert sich die Leerlaufspannung bei der (n)-a-Si:H/(p)-c-Si Struktur von 0.63 auf 0.54 V. Um den unterschiedlichen starken Einfluß der Defektdichten zu erklären, sind in Abbildung 4.24 für die beiden invers dotierten Heterostrukturen die Ladungsträgerdichten und die Dichten der geladenen Defekte in der Nähe der Raumladungszone bei einer angelegten Spannung von +0.55 V gezeigt.

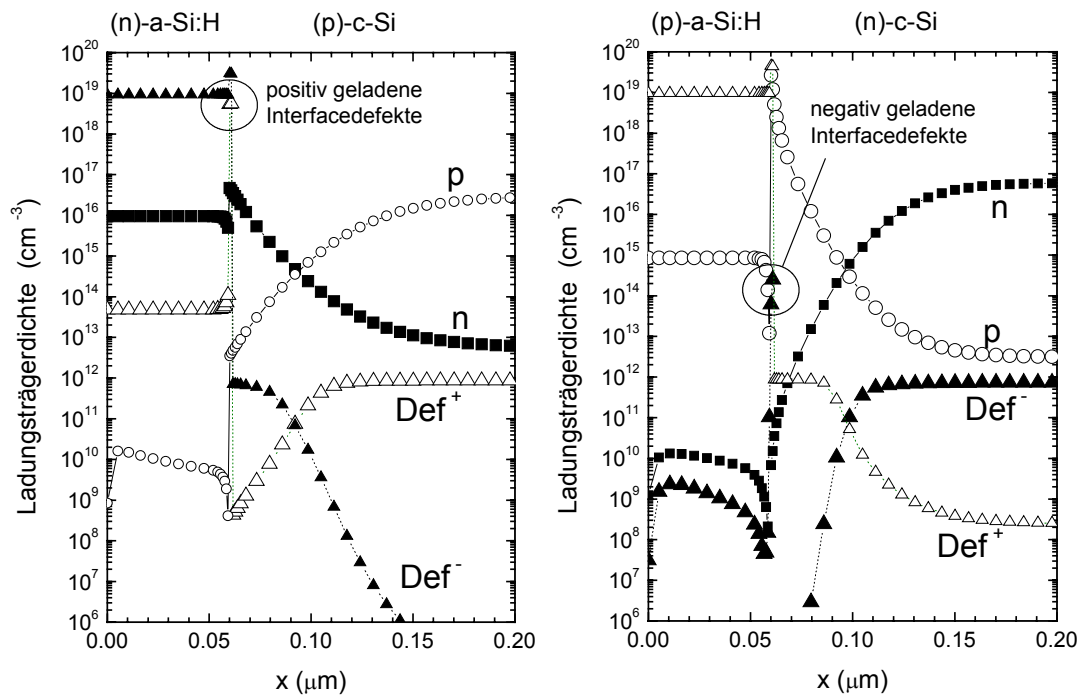


Abb. 4.24 Ladungsträgerdichten und geladene Defektdichten einer (n)-a-Si:H/(p)-c-Si Diode (a) und der invers dotierten Struktur (b), beide mit Grenzflächendefekten am Heteroübergang bei $U=+0.55$ V

Entscheidend für die Stromdichte der Solarzelle sind jeweils die Minoritätsladungsträger im kristallinen Silizium, da dort der größte Teil der Ladungsträger generiert wird. Dies sind für (n)-a-Si:H/(p)-c-Si, in Abb. 4.24 (a) links, die Elektronen. Am Grenzübergang vom amorphen zum kristallinen Silizium erkennt man eine Unstetigkeit der Elektronendichte. Dies wird durch den Sprung der Leitungsbandkante ΔE_c verursacht. Es kommt zu einer Inversionsladung, d.h. ein Überschuss an Minoritätsladungsträgern, also Elektronen im c-Si nahe dem Heteroübergang. Die Elektronen können an der Grenzfläche mit positiv geladenen Defekten rekombinieren. Die Dichte der positiv geladenen Defekte liegt dort im Bereich 10^{19} cm^{-3} .

Bei der umgekehrt dotierten Struktur (p)-a-Si:H/(n)-c-Si ist die Inversion und damit der Sprung der Löcherdichte am Heteroübergang wegen des großen Bandkantensprungs ΔE_v sehr groß. Ebenfalls wegen der starken Inversion ist die Dichte der negativ geladenen Defekte mit ca. 10^{14} cm^{-3} deutlich geringer als im ersten Fall. Die Rekombination ist deutlich geringer.

In Abbildung 4.25 sind die Rekombinationsraten der beiden Strukturen jeweils mit und ohne Interfacedefekte dargestellt.

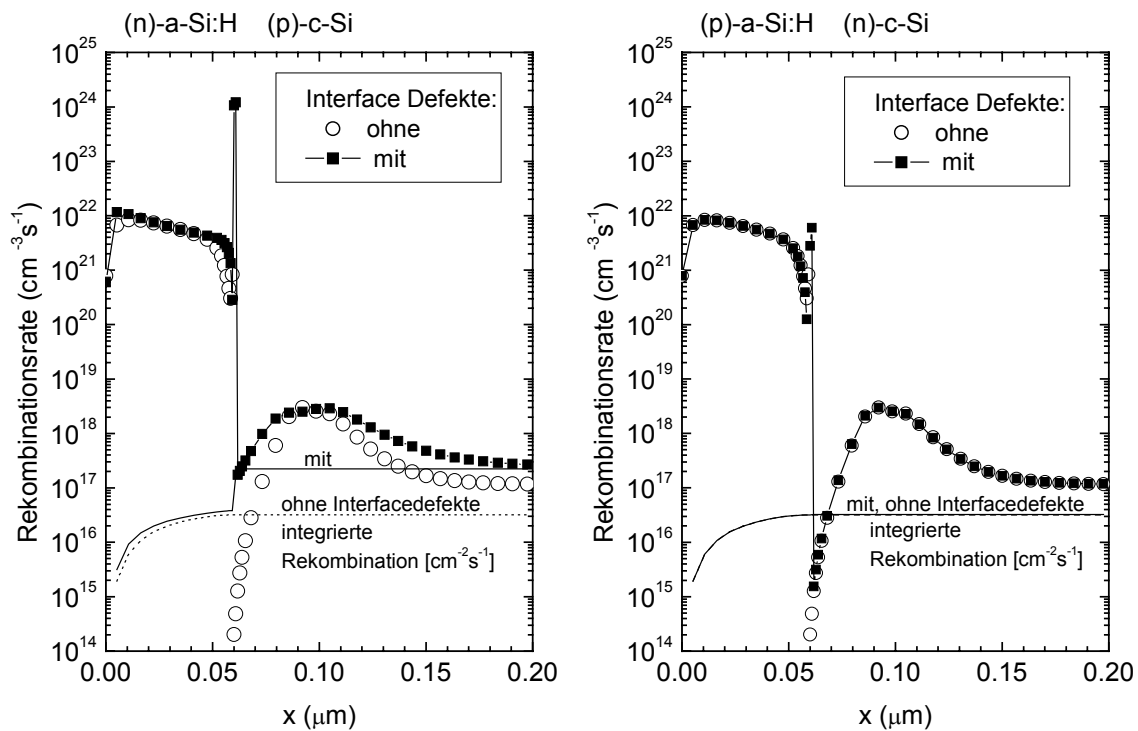


Abb. 4.25 Rekombinationsrate und räumlich integrierte Rekombinationsrate (gestrichelt) der (n)-a-Si:H/(p)-c-Si Diode (a) und der invers dotierten Struktur (b), mit/ohne Grenzflächendefekten am Heteroübergang bei $U=+0.55$ V

Bei der (n)-a-Si:H/(p)-c-Si Struktur (links) liegt ein deutlicher Peak der Rekombination bei der Grenzfläche und hier findet der größte Teil der gesamten Rekombination statt, was man am starken Anstieg der integrierten Rekombination am Heteroübergang sieht. Hier ist die Stromdichtung schon in Flußrichtung der Diode, man erhält keine Leistung mehr aus der Solarzelle.

Die invers dotierten (p)-a-Si:H/(n)-c-Si Diode hat zwar ebenfalls einen Peak in der Rekombination am Heteroübergang, der jedoch nicht höher als im defektreichen amorphen Silizium ist, und zur Gesamtrekombination der Diode nur einen kleinen Beitrag leistet. Diese Diode liefert als Solarzelle bei +0.55 V noch Leistung.

Dieses Beispiel mit Interfacedefekten kann auch auf räumlich wenige Zehn nm ausgehende Defektschichten am Interface übertragen werden, da sich die Inversionsschicht ebenfalls räumlich in den kristallinen Wafer erstreckt.

Allgemein ist ein großer Bandkantensprung für die Minoritätsladungsträger im kristallinen Silizium wegen der hohen Inversion für gute Solarzelleneigenschaften hilfreich. Dies ist besonders wichtig, wenn Grenzflächendefekte technologisch nicht vermieden werden können.

Mit den im vorigen Abschnitt abgeschätzten Werten von $\Delta E_c > 0.36$ eV und $\Delta E_v < 0.22$ eV spricht dieses Argument zusätzlich zur besseren Elektronendifusionslänge für Solarzellen

der Struktur (n)-a-Si:H/(p)-c-Si.

4.6 Ergebnisse der Untersuchungen zum Ladungsträgertransport

Aus $I-U$ Dunkelkennlinien wurden die dominierenden Transportprozesse von (n,i)-a-Si:H/(p)-c-Si Heterodioden bestimmt. Bei höheren Spannungen in Flußrichtung sieht man einen Tunnelprozeß von Elektronen durch eine Spitze im Leitungsband am Heteroübergang. Bei tiefen Temperaturen und geringen Spannungen in Flußrichtung wird der Ladungsträgertransport durch Tunneln von Elektronen in Defekte im c-Si mit anschließendem Löchereinfang dominiert. Für Heterodioden mit einer H-Plasmabehandlung ergibt sich in diesem Bereich ein Transport durch Rekombinationsströme.

Bei $I-U$ Hellkennlinien zeigt sich bei tiefen Temperaturen bei Spannungen nahe der Leerlaufspannung eine S-Form. Diese läßt sich durch Vergleich mit numerischen Simulationsrechnungen mit einer Leitungsbanddiskontinuität am Heteroübergang von mindestens 0.36 eV erklären. Der Einfluß von weiteren Barrieren für die Elektronen am Frontkontakt auf die S-Form kann jedoch nicht ausgeschlossen werden.

Durch numerische Simulation wurde ein positiver Einfluß von Barrieren am Heteroübergang und der damit einhergehenden Ladungsträgerinversion nahe des Heteroübergangs auf die Solarzelleneigenschaften gezeigt. Insbesondere sind dadurch Grenzflächendefekte weniger störend.

5 Kapazitätsmessungen und -Simulationen

In diesem Abschnitt werden zuerst Grundlagen über Kapazitäts- bzw. Admittanzmessungen bei Dioden vorgestellt. Eine dafür entwickelte numerische Simulation von Admittanz bzw. Kapazität durch Berechnung von Stromdichtetransienten und anschließender Laplace-Transformation wird anschließend beschrieben. Dann werden Meßergebnisse präsentiert und vor allem hinsichtlich des Einflusses von Defektzuständen interpretiert und ausgewertet. Zur Unterstützung dieser Interpretationen werden Simulationsrechnungen gezeigt.

5.1 Theoretische Grundlagen

5.1.1 Kapazität der Raumladungszone

Die Kapazität einer Probe spiegelt die Änderung einer Ladungsverteilung durch Änderung eines angelegten Potentials wieder. Für eine ideale np-Halbleiterdiode mit konstanter n- bzw. p-Dotierung in den beiden Bereichen ist die Ladungsträgerverteilung durch die Donatordichte im n-Halbleiter N_d und die Akzeptordichte im p-Halbleiter N_a bestimmt, solange eine Raumladungszone existiert, die nicht durch zu hohe Spannung in Flußrichtung durch Ladungsträger überschwemmt wird. Für Sperrspannungen und geringe Polung in Flußrichtung ist die Raumladungszone durch die Majoritätsladungsträgerdichte festgelegt. Bei starker Polung in Flußrichtung wird die Raumladungszone mit Minoritätsladungsträger überschwemmt. In diesem Fall wird die Kapazität der Diode um die sogenannte Diffusionskapazität erweitert, die hier jedoch nicht weiter betrachtet wird.

Randbedingung für die Verteilung der Ladungsdichte ist die Ladungsneutralität der Diode. In Abbildung 5.1 ist die räumliche Verteilung der Ladungsdichte, des elektrischen Felds und des elektrostatischen Potentials für eine np-Diode dargestellt.

Die in Abbildung 5.1 a) gezeigte, abrupte Ladungsträgerverteilung ist nicht exakt. Die genaue Verteilung der Ladungsdichte z.B. am rechten Rand der Raumladungszone bei x_w ist

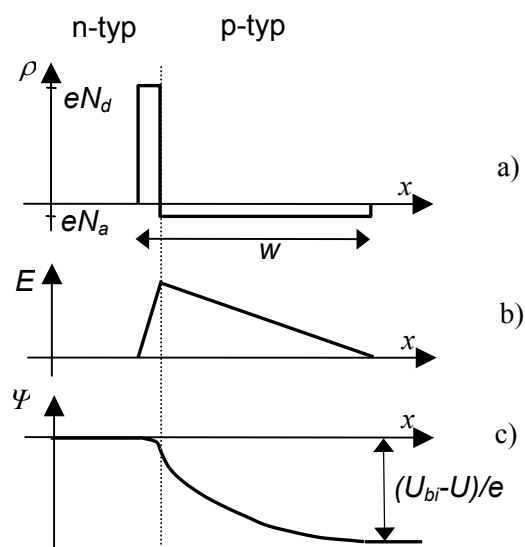
[Blood92a]:

$$\rho(x) = eN_d \left\{ 1 - \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{x_w - x}{L_d} \right)^2 \right] \right\} \quad (5.1)$$

mit der Debye-Abschirmlänge

$$L_d = \sqrt{\frac{\varepsilon kT}{e^2 N_d}} \quad (5.2)$$

Die abrupte, „rechteckige“ Form der Ladungsverteilung ist gerechtfertigt, wenn die Weiten der Raumladungszone w deutlich größer als die Debye-Länge sind, bzw. das anliegende Potential $(U_{bi}-U) \gg kT/e$ ist. In diesem Fall sinkt die Ladungsträgerdichte am Rand der Raumladungszone steil genug ab. Für $kT=0.026$ eV (Raumtemperatur) und typische Werte für $U_{bi}>0.5$ eV Spannungen in Sperrichtung ist dies unproblematisch. Ansonsten muß die Ladungsdichteverteilung, die exponentiell vom Potential abhängt, genauer berücksichtigt werden.



Durch Integration der Ladungsverteilung erhält man das elektrische Feld der Diode. Durch Anwendung der Poisson-Gleichung bzw. zweifache Integration erhält man das elektrostatische Potential Ψ im 1-dimensionalen Fall

$$\frac{d^2 \Psi}{dx^2} = \frac{-dE}{dx} = \frac{-\rho}{\varepsilon} \quad (5.3)$$

wobei die dielektrische Suszeptibilität ε im Halbleiter das Produkt aus relativer Dielektrizitätskonstante ε_r (11.7 für Silizium) und der Dielektrizitätskonstante im Vakuum ε_0 ist.

$$\varepsilon = \varepsilon_r \varepsilon_0 \quad (5.4)$$

Die Kapazität ist definiert durch das Verhältnis der Ladungsänderung bei Änderung einer angelegten Spannung $U \rightarrow U + dU$. Wegen der Poissongleichung ist $dE = d\rho/\varepsilon = dQ/(A\varepsilon)$ und $dU = w dE$. Damit ist die Kapazität einer Diode mit der Fläche A :

$$C = \frac{dQ}{dU} = \frac{dQ}{w \frac{dQ}{\varepsilon A}} = A \frac{\varepsilon}{w} \quad (5.5)$$

Damit ist die Kapazität einer Diode mit der Raumladungszone w analog zu einem Plattenkondensator mit dem Plattenabstand w . Führt man die Integrationen durch, wie dies in fast allen Halbleiterstandardwerken, wie z.B. bei Sze [Sze81] detaillierter vorgerechnet ist, so erhält man die Weite der Raumladungszone in Abhängigkeit der außen angelegten Spannung U als

$$w = \sqrt{\frac{2\varepsilon(N_1 + N_2)}{eN_1N_2}}(U_{bi} - U) \quad (5.6)$$

wobei N_1 und N_2 für die Donator- und Akzeptordichten N_d und N_a stehen. Die dielektrische Suszeptibilität wird dabei in beiden Materialien als gleich angenommen, was für a-Si/c-Si Heteroübergänge sehr gut erfüllt ist. Für die Kapazität einer np- oder pn-Diode ergibt sich damit

$$C/A = \sqrt{\frac{e\varepsilon N_1 N_2}{2(N_1 + N_2)(U_{bi} - U)}} \quad (5.7)$$

Für den Fall einer einseitig stark dotierten Diode mit $N_1 \gg N_2$ kann man N_1 im Nenner vernachlässigen und die hohe Dotierung N_1 läßt sich kürzen und entfällt.

$$\frac{C}{A} \approx \sqrt{\frac{eN_2\varepsilon}{2(U_{bi} - U)}} \quad (5.8)$$

Das bedeutet, daß die Kapazität nur von der Dotierung des schwach dotierten Materials abhängt. Man hat hier ähnliche Verhältnisse wie bei einer Schottky-Diode (Metall-Halbleiter-Diode). Dies spiegelt sich auch im Potentialabfall in den jeweiligen Materialien wieder, wie es in Abb. 5.1 schon angedeutet wurde. Im stark dotierten Material ist der Potentialabfall sehr klein, im schwach dotierten ist er sehr hoch. Aus Kapazitätsdaten lassen sich in einem solchen Fall also nur Rückschlüsse über die Ladungsdichten im schwach dotierten Material erzielen.

Mißt man nun die Kapazität einer Diode in Abhängigkeit der Spannung und trägt man $1/C^2$ gegen U auf, so erhält man bei räumlich konstanter Dotierung eine Gerade mit der Steigung $2(N_1+N_2)/(e\epsilon N_1 N_2)$ und dem Schnittpunkt mit der Spannungs-Achse U_{bi} . Im Fall einer stark einseitig dotierten Diode erhält man die Ladungsdichte und damit die Dotierung des schwächer dotierten Halbleiters, wie es im Fall (n^+) -a-Si:H mit einer Donatordichte von ca. 10^{19} cm^{-3} und (p)-c-Si mit einem $0.5 \text{ } \Omega\text{cm}$ Wafer, der damit etwa im Bereich 10^{16} cm^{-3} dotiert ist, zu erwarten ist.

Sind die Dotierungen der Diode ortsabhängig, so erhält man keine Gerade mehr, aber es ist ebenfalls möglich, das Dotier- bzw. Ladungsprofil aus der lokalen Steigung der C - U -Kurve zu bestimmen. Man erhält [Miller72]:

$$N(x_w) = \frac{-C^3}{e\epsilon A^2} \left(\frac{\Delta C}{\Delta U} \right)^{-1} = \frac{-2}{e\epsilon A^2} \left(\frac{\Delta C^{-2}}{\Delta U} \right)^{-1} \quad (5.9)$$

wobei die Ladungsträgerdichte als Nettoladungsdichte zu verstehen ist, die sich aus der Summe von Donator-, Akzeptor- oder auch Defektdichten ergibt.

5.1.2 Einfluß von Defekten auf die Raumladungskapazität

Defekte im Halbleiter können zusätzlich zur Ladungsdichte in der Raumladungszone beitragen und damit die Kapazität beeinflussen. Zum einen kann die gesamte Bandverbiegung und damit der Gesamtwert der Kapazität verändert sein, zum anderen kann sich die durch eine Spannungsänderung dU verursachte Ladungsänderung dQ verändern. Ob Ladungsträger aus Defektzuständen zur Ladungsänderung beitragen, hängt jedoch von ihrer Energie und der Geschwindigkeit ab, mit der die Spannung geändert wird.

Die Emissionsrate, mit der Ladungsträger aus Defekten emittiert werden ist gegeben durch den Einfangsquerschnitt σ_i , die thermische Geschwindigkeit v_{th} , der effektiven Zustandsdichte im Leitungs- bzw. Valenzband N_c bzw. N_v und dem energetischen Abstand des Defektniveaus E_i zum Valenz- bzw. Leitungsband:

$$e_i = \frac{1}{\tau} = \sigma_i \langle v_{th} \rangle N_i \exp\left(-\frac{|E_i - E_i|}{kT}\right) \quad (5.10)$$

wobei der Index i für Elektronen und Löcher steht. Die Temperaturabhängigkeit der Emissionsrate erhält man, wenn man den Einfangsquerschnitt als temperaturunabhängig annimmt [Lang82], aus $N_i \sim T^{3/2}$ und $v_{th} \sim T^{1/2}$ als

$$e_i = \Gamma \exp\left(-\frac{E_{akt}}{kT}\right) = \Gamma_0 T^2 \exp\left(-\frac{E_{akt}}{kT}\right) \quad (5.11)$$

wobei die Aktivierungsenergie der Abstand zwischen Band und Defektenergie ist

Bei Anlegen einer Wechselspannung können Defekte phasenkorreliert nur be- und entladen werden, wenn die Kreisfrequenz der Wechselspannung ω kleiner ist als die Emissionsrate der Ladungsträger aus dem Defekt. Man erhält also eine frequenzabhängige Ladungsänderung dQ . Die Be-/Entladung eines Defekts findet dann statt, wenn durch eine Spannungsänderung dU das Fermi-niveau bei der Defektenergie liegt. Dies wird wegen der Bandverbiegung nur an bestimmten Orten stattfinden, die jedoch durch Variation der zeitlich konstanten Biasspannung U_0 verändert werden können. Durch Messung der Kapazität in Abhängigkeit der Frequenz kann diese unterschiedliche Ladungsänderung detektiert werden und es können Rückschlüsse auf Defektenergie nach Gleichung (5.11) und Defektdichte gezogen werden.

In Abbildung 5.2 ist das Energieband mit Defektzuständen, die Ladungsverteilung und die Änderung der Ladungsdichte unter Änderung der Spannung für eine Schottkydiode bzw. die schwächer dotierte Seite einer einseitig stark dotierte pn-Diode dargestellt.

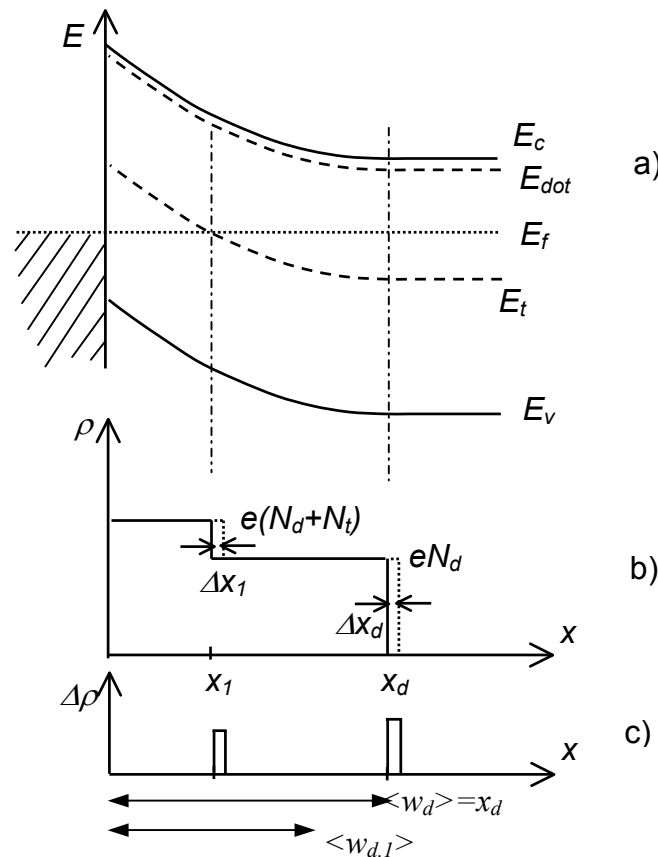


Abb. 5.2 Bandverbiegung, Ladungsverteilung und -änderung einer Schottkydiode (bzw. die schwach dotierte Seite einer einseitig stark dotierten pn-Diode) unter Einfluß von Defekten. Die Ladungsänderung der Defekte liegt beim Schnittpunkt des Fermi-niveaus E_f mit der Defektenergie E_t . Dieser Anteil der Ladungsänderung ist zeit- bzw. frequenzabhängig. $\langle w \rangle$ ist der mittlere Ort der Ladungsdichteänderung $d\rho$ (Für hohe Frequenzen erhält man $\langle w_d \rangle$, für niedrige Frequenz $\langle w_{d,l} \rangle$)

In der hier vorliegenden Arbeit wurde die Kapazität frequenzabhängig bei konstanter Biasspannung U_0 und einem zeitabhängigen Wechselanteil $\Delta U \ll U_0$ gemessen, die Ladungsänderung entspricht damit einem Kleinsignalfall. Die gesamte Ladungsverteilung (und damit die Bandverbiegung) bleibt nahezu konstant.

$$U(t) = U_0 + \Delta U e^{i\omega t} \quad (5.12)$$

Alternativ dazu kann man die Biasspannung und dadurch auch die Bandverbiegung zeitlich variieren. Für diese Variation der Bandverbiegung bzw. Ladungsverteilung müssen die Defekte umgeladen werden, wodurch die zeitliche Dynamik wiederum von der Defektverteilung und der Defektenergie abhängt. Dies wird zur Bestimmung von Defektenergien und -dichten in der DLTS-Methode (Deep Level Transient Spectroscopy) ausgenutzt [Lang74]. Eine weitere kapazitive Detektionsmethode ist TSCAP (Thermally Stimulated CAPacitance), bei der Defekte bei tiefer Temperatur durch Beleuchtung mit Ladungsträgern gefüllt werden, die dann bei allmählicher Erwärmung wieder emittiert werden, wodurch sich die Kapazität ändert [Carballes68].

Wie sich die zusätzliche Ladungsänderung durch Defekte auf die Kapazität auswirkt, wird im folgenden dargestellt. Dies wird ausführlich von Blood und Orton diskutiert [Blood92b].

Ausgehend von der Ableitung der Größe $x(d\psi/dx)$ mit Einsetzen der Poissongleichung

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = -\frac{\rho(x)}{\varepsilon} \quad (5.13)$$

erhält man die Identität

$$\frac{d}{dx} \left(x \frac{d\Psi}{dx} \right) = \frac{d\Psi}{dx} - x \frac{\rho(x)}{\varepsilon} \quad (5.14)$$

Definiert man $\psi = 0$ für $x > x_d$ außerhalb der Raumladungszone (nach Abbildung 5.2) und integriert man diese Gleichung vom Barrierenübergang ($x=0$) bis zu genügend großer Entfernung (es genügt $x > x_d$), wo ψ und $d\psi/dx$ gleich Null sind, so verschwindet die linke Seite. Daraus erhält man das gesamte Potential

$$\Psi(x=0) = \int_0^{x(\Psi=0)} x \frac{\rho(x)}{\varepsilon} dx \quad (5.15)$$

Für eine Änderung des Potentials $\delta\psi$ um $\psi = \psi_0 + \delta\psi$, die zu einer Ladungsdichteänderung $\rho = \rho_0 + \delta\rho$ führt, ergibt sich damit

$$d\Psi = \int_0^{x(\Psi=0)} x \frac{\delta\rho(x)}{\varepsilon} dx \quad (5.16)$$

Die Ladungsänderung dQ ist die Integration über die Ladungsdichteänderung multipliziert

mit der Diodenfläche A :

$$dQ = A \int_0^{x(\Psi=0)} \delta\rho(x) dx \quad (5.17)$$

Die Kapazität der Raumladungszone ist damit gegeben durch

$$C = \frac{dQ}{d\Psi} = \frac{\varepsilon A \int_0^{x(\Psi=0)} \delta\rho(x) dx}{\int_0^{x(\Psi=0)} x \delta\rho(x) dx} = \frac{\varepsilon A}{\langle w \rangle} \quad (5.18)$$

Man kann also die Kapazität wieder in Analogie zu einem Plattenkondensator darstellen, wobei $\langle w \rangle$ einen mit der Ladungsdichteänderung gewichteten mittleren Ort der Ladungsänderung darstellt:

$$\langle w \rangle = \frac{\int_0^{x(\Psi=0)} x \delta\rho(x) dx}{\int_0^{x(\Psi=0)} \delta\rho(x) dx} \quad (5.19)$$

Die zusätzliche Ladungsänderung durch Defekte bei x_1 zusätzlich zur Ladungsänderung der Dotierladung bei x_d bedeutet damit, daß sich der Schwerpunkt $\langle w \rangle$ von x_d zu kleineren Werten hin verschiebt. Die Kapazität erhöht sich damit nach Gleichung (5.15). Diese Erhöhung findet jedoch nur statt wenn die Wechselfrequenz der angelegten Spannung kleiner als die Emissionsrate der Defekte ist.

Man erhält somit bei hohen Frequenzen eine kleinere Kapazität, die durch die Umladung von Ladungsträgern vom Dotierniveau zum Leitungs- bzw. Valenzband verursacht wird und bei niedrigen Frequenzen eine erhöhte Kapazität durch die Verringerung der Weite der effektiven Ladungsänderung $\langle w \rangle$ durch Defekte.

Die Kapazität erhält man aus dQ und dU , wobei die Funktion $u(\omega)$ definiert wird, die den Beitrag der Defekte in Abhängigkeit der Emissionsrate e_i angibt:

$$\begin{aligned} u(\omega) &= 1 \quad \text{für } \omega \ll e_i \\ u(\omega) &= 0 \quad \text{für } \omega \gg e_i \end{aligned} \quad (5.20)$$

Die Ladungsänderung dQ und dU erhält man nach 5.13 und 5.14

$$dQ = \int_0^{x(\Psi=0)} \delta\rho(x) dx = u e N_i dx_1 + e N_d dx_d \quad (5.21)$$

$$dU = \frac{e}{\varepsilon} \int_0^{x(\Psi=0)} x \delta\rho(x) dx = \frac{e}{\varepsilon} (u N_i x_1 dx_1 + N_d x_d dx_d) \quad (5.22)$$

Für eine infinitesimale Änderung $\delta x_d \ll x_d$ erhält man die Raumladungskapazität

$$C = \frac{\varepsilon A (u N_t + N_d)}{u N_t x_1 + N_d x_d} \quad (5.23)$$

Bei hohen Frequenzen verschwindet u ($u \rightarrow 0$) und die Kapazität hängt nur noch von der Weite der Raumladungszone x_d ab. Diese Weite x_d hängt jedoch auch von der Defektdichte ab, da im Bereich $x < x_1$ die Ladungsdichte durch $N_t + N_d$ gegeben ist. Bei der Distanz x_1 ist das Potential gleich der Differenz zwischen der Defektenergie E_t und dem Fermi-niveau des neutralen Halbleiters E_f .

$$-e\Psi(x_1) = E_c(x_1) - E_c(x_d) = E_f - E_t \quad (5.24)$$

Durch Lösen der Poissongleichung erhält man den Zusammenhang

$$x_d - x_1 = \sqrt{\frac{2\varepsilon}{e^2 N_d} (E_f - E_t)} = L_d \sqrt{\frac{2(E_f - E_t)}{kT}} \quad (5.25)$$

der unabhängig von der angelegten Spannung ist. Diese Distanz wird in der englischen Literatur auch als „transition length“ bezeichnet.

Für die Auswertung der Kapazitäts-Spannungs-Messungen ergeben sich daraus zwei Bereiche bei unterschiedlichen Biasspannungen:

- bei sehr geringen Spannungen verschwindet der Bereich, an dem die Defekte geladen sind ($x_1 < 0$). Die Ladungsdichte und damit die Steigung der Geraden in der $C^2(U)$ -Darstellung ist damit allein durch die Dotierdichte N_d gegeben
- bei hohen Spannungen in Sperrpolung dominiert der Bereich, an dem die Defekte geladen sind ($x_1 \gg (x_d - x_1)$). Die Ladungsdichte und damit die Steigung der Geraden in der $C^2(U)$ -Darstellung ist durch die Summe aus Defektladung und Dotierladung $N_d + N_t$ bestimmt.

5.2 Simulation der Kapazität durch Laplace-

Transformationen von Stromdichtetransienten

Da die analytische Herleitung für die hier untersuchten a-Si:H/c-Si Heteroübergänge zu viele Vereinfachungen und Beschränkungen aufweist, wurde die Simulation auch auf die Berechnung der Kapazität bzw. Admittanzen ausgeweitet. Die physikalischen Gleichungen sind dabei identisch mit dem in Kapitel 3 vorgestellten Satz von Gleichungen für die stationäre Lösung. Im Unterschied zu den stationären Berechnungen der Stromdichten wird hier die zeitliche Entwicklung der physikalischen Zustandsgrößen nach Änderung der angelegten

Spannung berechnet. Die Spannung wird zum Zeitpunkt $t=0$ instantan von einem ursprünglichen Wert U_0 auf $U_0+\Delta U$ verändert. Die daraus resultierende Stromdichte wird in Abhängigkeit der Zeit simuliert (Abbildung 5.3).

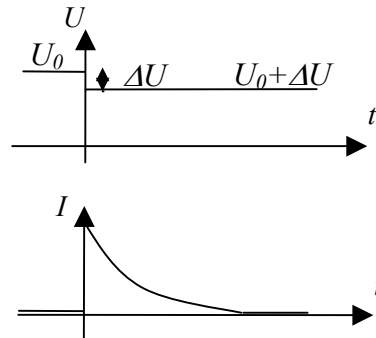


Abb. 5.3 Berechnung der Stromtransienten $I(t)$ für d Kapazitätssimulation durch Schalten der angelegten Spannung zum Zeitpunkt $t=0$ von U_0 auf $U_0+\Delta U$. Eine anschließende Laplacetransformation führt zur Admittanz bzw. Kapazität

Während diese Berechnung im Zeitbereich durchgeführt wird, findet die Messung, bei der eine Wechselspannung angelegt wird im Frequenzbereich statt. Um die Ergebnisse miteinander vergleichen zu können, werden die simulierten Größen durch eine komplexe Laplacetransformation vom Zeitbereich in den Frequenzbereich transformiert. Die Übertragungsfunktion $Y(\omega)$, die schematisch in Abbildung 5.4 gezeigt ist, entspricht der Meßgröße der Admittanz.

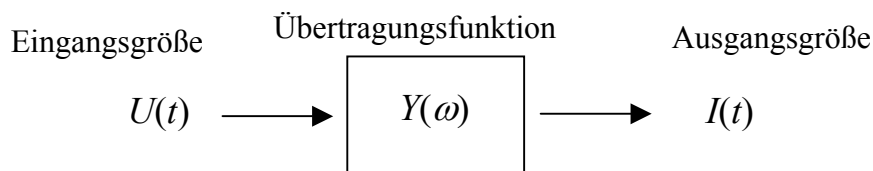


Abb 5.4 Signalübertragung beim Anlegen einer zeitlich veränderlichen Spannung an ein elektrisches Bauelement. Die Übertragungsfunktion $Y(\omega)$ entspricht der Admittanz

Um die Übertragungsfunktion im Frequenzraum zu bestimmen, werden die Eingangsgröße $U(t)$ und die Ausgangsgröße $I(t)$ in den Frequenzraum durch die komplexe Laplacetransformation (siehe z.B. [Führer 84] oder [Mayhan 84])

$$\tilde{F}(\omega) = \int_0^{\infty} F(t) e^{-i\omega t} dt \quad (5.26)$$

überführt. Die Übertragungsfunktion erhält man aus

$$Y(\omega) = \frac{\tilde{I}(\omega)}{\tilde{U}(\omega)} \quad (5.27)$$

Für die Laplacetransformierte der Spannungsstufe ergibt sich der einfache Zusammenhang

$$\tilde{U}(\omega) = \frac{\Delta U}{i\omega} \quad (5.28)$$

Die Laplacetransformierte des Stroms $\tilde{I}(\omega)$ bzw. der Stromdichte wird numerisch durchgeführt. Die Admittanz $Y(\omega)$ wird durch einen reellen Anteil, der einen ohmschen Leitwert darstellt, und einen kapazitiven Anteil interpretiert.

$$Y(\omega) = \frac{1}{R} + i\omega C \quad (5.29)$$

Numerisch wird die komplexe Laplacetransformation aufgeteilt in zwei durch einen Phasenwinkel von 90° getrennte Integrationen für den Real- und Imaginärteil:

$$\text{Im}(Y(\omega)) = \frac{\omega}{\Delta U} \int_0^{\infty} I(t) \cos(\omega t) dt \quad (5.30)$$

$$\text{Re}(Y(\omega)) = \frac{\omega}{\Delta U} \int_0^{\infty} I(t) \sin(\omega t) dt \quad (5.31)$$

Die Kapazität erhält man aus dem Imaginärteil der Admittanz nach (5.12) zu

$$C = \text{Im}\left(\frac{Y(\omega)}{\omega}\right) = \frac{1}{\Delta U} \int_0^{\infty} I(t) \cos(\omega t) dt \quad (5.32)$$

Es muß für eine simulierte Halbleiterprobe gegebenenfalls noch überprüft werden, ob der Kleinsignalfall vorliegt, d.h. daß die Spannungsänderung dU klein genug ist, daß die Kapazität unabhängig davon ist. Dies sollte für die Vergleichbarkeit mit Meßergebnissen sichergestellt sein.

Im Vergleich zu Kapazitätssimulationen, bei denen die analytischen Gleichungen mit einem harmonischen Ansatz gelöst werden, ist diese Methode sehr aufwendig. Aus einer Stromtransiente erhält man die frequenzabhängige Kapazität für eine Bias-Spannung (und Beleuchtung). Dafür hat sie den Vorteil, daß keinerlei analytische Näherungen gemacht werden und Nichtlinearitäten berücksichtigt werden.

5.3 Meßaufbau und Meßtechnik der Admittanzmessungen

Für die Admittanzmessungen wurde ein Impedanz-Analysator HP 4192A verwendet. Dieses Gerät liefert sowohl die Biasspannung als auch die Wechselspannung, die an die Probe ange-

legt werden und mißt Amplitude und Phasenwinkel des resultierenden Stroms. Die Probe wurde in einem Kryostat bei Temperaturen zwischen 100 und 320 K gemessen. Der Meßaufbau ist schematisch in Abbildung 5.4 dargestellt. Die Verkabelung der Probe mit dem Impedanzmeßgerät erfolgt in einer „4-Terminal“-Methode, bei der sichergestellt wird, daß Innen- und Außenleiter der BNC-Kabel den gleichen Strom führen, wodurch induktive Störwiderstände verringert werden [HP81]. Dabei müssen die Außenleiter sowie paarweise die Innenleiter der BNC-Kabel so kurz wie möglich vor der Probe verbunden werden.

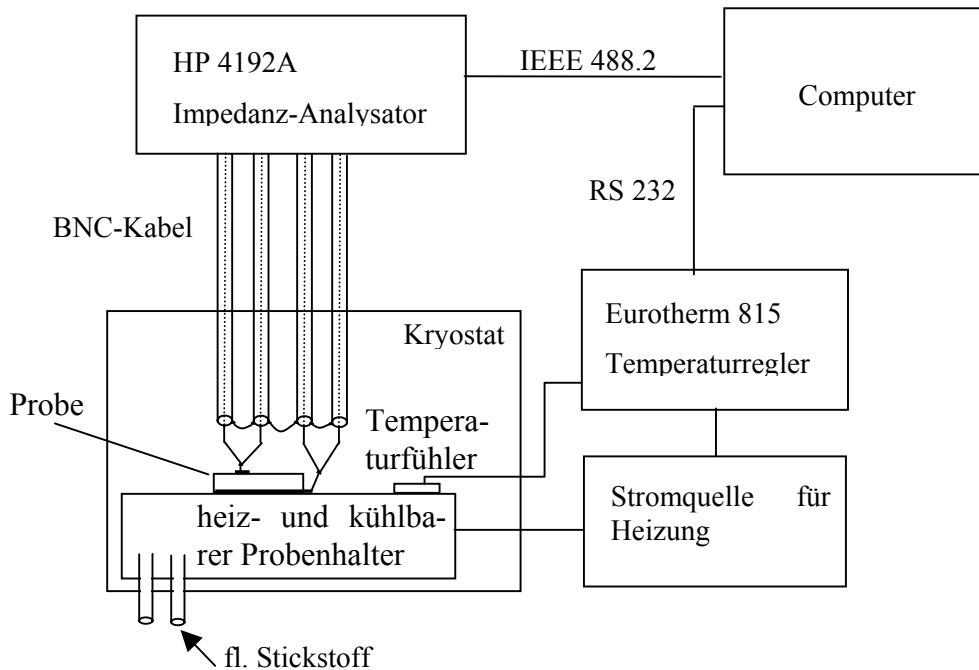


Abb. 5.3 Meßaufbau für temperaturabhängige Admittanzmessungen. Der Impedanzanalysator HP4192A liefert sowohl Bias- und Wechselspannung und mißt Amplitude und Phasenwinkel (bzw. Real- und Imaginärteil) des resultierenden Strom

Die Interpretation der gewonnenen Admittanzdaten erfordert große Sorgfalt. Das Impedanzmeßgerät liefert entweder Real- und Imaginärteil der Admittanz/Impedanz oder Amplitude und Phasenwinkel. Auch kann aus den gemessenen Werten des Imaginärteils der Admittanz eine Kapazität oder Induktivität der Probe berechnet und an den Computer ausgegeben werden. Diese interne Berechnung erfolgt dabei entweder nach einem Modell der Serien- oder Parallelschaltung von reellem und imaginärem Widerstand. Daß die tatsächlich vorliegende Schaltung aus Verkabelung und Probe, sowohl aus reellen Widerständen sowie kapazitiven und induktiven Elementen besteht, wird dabei nicht berücksichtigt. Die so erhaltenen Werte für Serien- oder Parallelwiderstände sowie Kapazität sind damit verfälscht. Diese Ver-

fälschung wird sich in verschiedenen Frequenzbereichen sehr unterschiedlich auswirken.

Um diese Verfälschung möglichst gering zu halten und somit möglichst korrekte Werte für die Kapazität zu erhalten sind 2 Vorgehensweisen denkbar:

Zum einen kann man versuchen, die Schaltelemente für Serien- und Parallelwiderstände, Streukapazitäten und Induktivitäten zu bestimmen und eine solche Schaltung realistisch zu gestalten, und dann aus dem gemessenen Imaginärteil der Admittanz die Kapazität der Probe zu berechnen. Dies ist dann jedoch schwierig, wenn die Probe durch mehrere dieser Schaltelemente beschrieben werden muß, was hier immer der Fall sein wird.

Zum anderen kann man sich auf einen Frequenzbereich beschränken, in dem die Fehler für die Berechnung der Kapazität klein genug ist. Mit diesem Ansatz wurden die in dieser Arbeit vorliegenden Meßdaten erhalten. Die Beschränkung des Frequenzbereichs nach oben ist wegen des Einflusses von Induktivitäten nötig, die Beschränkung zu niedrigen Frequenzen wird vor allem wegen des zu hohen Verhältnisses des Realteils zum Imaginärteil der Admittanz wichtig, was zu einem großen Meßfehler führt. Eine realistische Ersatzschaltung für die Messung von Admittanzen ist in Abbildung 5.5 gezeigt.

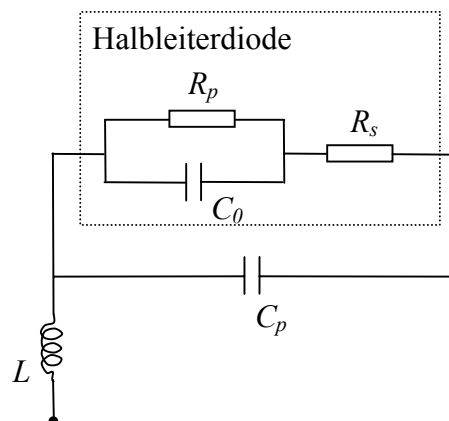


Abb. 5.5 typisches Ersatzschaltbild für Diode und Meßkabel. Während die Halbleiterdiode gut durch einen Kondensator (C_0), einen Serien- und Parallelwiderstand (R_s , R_p) charakterisiert ist, kommen weitere Schaltelemente durch Induktivität (L) und Streukapazität (C_p) der Meßkabel hinzu.

Diese Schaltungselemente sind in einer realistischen Meßanordnung praktisch nicht zu vermeiden. Wie stark sie sich auf die Ergebnisse auswirken, hängt von ihrem Zahlenwert ab.

Im verwendeten Meßaufbau sind die Parameter $L=45$ nH und $C_p=8 \times 10^{-12}$ F. Sie sind konstante Eigenschaften der Meßkabel und der Kontaktierstifte und unabhängig von den Proben. (Während C_p direkt meßbar ist, läßt sich L durch die Messung der Resonanzfrequenzen für verschiedene bekannte Kapazitäten nach $\omega_r = 1/\sqrt{LC}$ ermitteln). Die Parameter C_0 , R_s und

R_p hängen von der jeweiligen Probe ab. Für gute Dioden mit typischen Eigenschaften der hier verwendete a-Si:H/c-Si Proben mit Flächen im Bereich 0.1 cm^2 liegen diese Werte bei $C_0 \approx 2 \times 10^{-9} \text{ F}$, $R_s \approx 2 \Omega$ und $R_p \approx 10^6 \Omega$.

In Abbildung 5.6 ist der Imaginärteil der Admittanz geteilt durch die Kreisfrequenz $C_m = \text{Im}(Y)/\omega$ gezeigt, was einer einfachen Parallelschaltung eines Kondensators mit einem ohmschen Widerstand entspricht. Dies sollte idealerweise die Kapazität der Probe C_0 sein. Die Parameter sind dabei typisch für den verwendeten Meßaufbau.

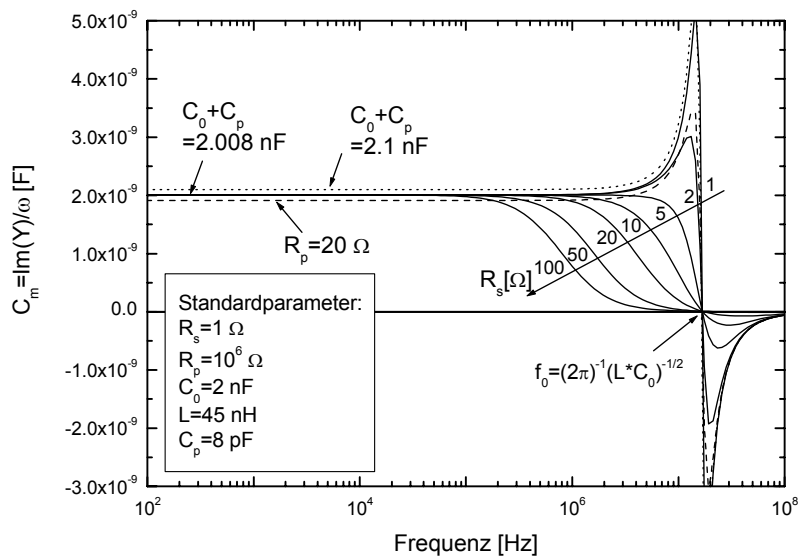


Abb. 5.6 Imaginärteil der Admittanz geteilt durch Kreisfrequenz $\text{Im}(Y)/\omega = C_m$ für eine typische Ersatzschaltung des verwendeten Meßaufbaus. Variiert wurden der Serienwiderstand R_s (durchgezogene Linien), sowie $R_p = 50 \Omega$ (punktirt) und Streukapazität C_p (gestrichelt)

Eine detaillierte analytische Diskussion (allerdings ohne Streukapazität C_p) wurde von Scofield [Scofield95] durchgeführt. Vernachlässigt man die sehr kleine Parallelkapazität C_p , so läßt sich ein (noch einigermaßen überschaubarer) analytischer Ausdruck für die „Meßkapazität“ C_m erhalten:

$$C_m = \text{Im}\left(\frac{Y}{\omega}\right) = C_0 \frac{1 - \left(\frac{\sqrt{L/C_0}}{R_p}\right)^2 - \omega^2 LC_0}{\left[1 + \left(\frac{R_s}{R_p}\right) - \omega^2 LC_0\right]^2 + \omega^2 \left[R_s C_0 + \frac{L}{R_p}\right]^2} \quad (5.33)$$

Für den Realteil der Admittanz, den Leitwert erhält man

$$G = \operatorname{Re}(Y) = \frac{1}{R_p} \frac{1 + \left(\frac{R_s}{R_p}\right) - \omega^2 R_s R_p C_0^2}{\left[1 + \left(\frac{R_s}{R_p}\right) - \omega^2 L C_0\right]^2 + \omega^2 \left[R_s C_0 + \frac{L}{R_p}\right]^2} \quad (5.34)$$

Der wesentliche Einfluß der jeweiligen Parameter auf das Resultat C_m erklärt sich unter der Annahme, daß die Dioden typische Werte für das Fluß- zu Sperrstrom-Verhältnis bzw. $R_p/R_s \geq 100$ haben:

- Die Induktivität L führt bei hohen Frequenzen zu einer Resonanz mit der Resonanzfrequenz $f_0 \approx (2\pi)^{-1} [L(C_0 + C_p)]^{-1/2} \approx (2\pi)^{-1} (L C_0)^{-1/2}$
- Ein zunehmender Serienwiderstand R_s dämpft die Resonanz und verschiebt den Bereich mit konstanten C_m zu tieferen Frequenzen.
- Ein geringer Parallelwiderstand R_p verschiebt bei niedrigen Frequenzen C_m um einen konstanten Beitrag zu kleineren Werten. Für $\omega \rightarrow 0$ erhält man aus Gleichung 5.31

$$C_m \xrightarrow{\omega \rightarrow 0} C_0 \frac{1 - \left(\frac{\sqrt{L/C_0}}{R_p}\right)^2}{\left(1 + \frac{R_s}{R_p}\right)^2} \quad (5.35)$$

Eine gute Übereinstimmung der aus der Admittanz ausgewerteten gemessenen Kapazität $C_m = \operatorname{Im}(Y)/\omega$ mit der Probenkapazität C_0 erhält man damit unter 2 Bedingungen:

1. $R_s/R_p \ll 1$: die relative Abweichung $|C_m - C_0|/C_0 < 0,1\%$ für $R_s/R_p < 5 \times 10^{-4}$. Dies ist bei den meisten verwendeten Dioden erfüllt (typische Werte: $R_s/R_p = 10^{-3} - 10^{-6}$)

2. $\sqrt{L/C_0} / R_p \ll 1$: Mit den oben genannten Standardwerten ist $\sqrt{L/C_0} = 4,7 \Omega$.

$|C_m - C_0|/C_0 < 0,1\%$ für $R_p > 150 \Omega$. (Typische Werte $R_p = 10^3 - 10^7 \Omega$). In Abbildung 5.6 ist für einen extrem niedrigen Parallelwiderstand $R_p = 20 \Omega$ eine konstante Absenkung gezeigt (gestrichelte Kurve)

- Eine parallele Kapazität verschiebt bei niedrigen Frequenzen C_m um den additiven Beitrag C_p . Bei kleinen Serienwiderständen, was hier gut erfüllt ist, gilt:

$$C_m \xrightarrow{R_s \rightarrow 0} C_0 + C_p \quad (5.36)$$

Dieser Beitrag ist immer vorhanden, läßt sich durch Subtraktion jedoch leicht eliminieren. In Abbildung 5.6 ist für eine sehr hohe Streukapazität die gemessene Kapazität C_m dargestellt (punktierte Kurve). Im Normalfall liegt dieser additive Beitrag jedoch

unter 1% (C_p beim verwendeten Meßaufbau ist 8 pF).

Zusammenfassend läßt sich sagen, daß man für Frequenzen, die genügend weit unter der Resonanzfrequenz liegen, und wenn Serienwiderstand R_s genügend klein und Parallelwiderstand R_p genügend hoch sind, die Kapazität der Probe aus dem Imaginärteil der Admittanz durch Division der Kreisfrequenz und Subtraktion der Streukapazität erhält:

$$C_0 = C_m - C_p = \frac{\text{Im}(Y)}{\omega} - C_p \quad (5.37)$$

Damit sichergestellt ist, daß Serien- und Parallelwiderstand den oben aufgelisteten Bedingungen entsprechen, müssen sie für jede Probe (und bei allen Temperaturen) abgeschätzt werden. Dafür wird die Admittanz in Abhängigkeit der Frequenz gemessen. Bei niedrigen Frequenzen (wenn die Impedanz der Probenkapazität $1/(\omega C)$ höher als der Parallelwiderstand R_p ist) ist der Realteil der Admittanz, d.h. der Leitwert G durch $1/(R_p + R_s) \approx 1/R_p$ gegeben. Bei hohen Frequenzen, solange der Einfluß der Resonanz noch nicht merklich ist, ist der Leitwert $G \approx 1/R_s$.

Die in den folgenden Kapiteln gemessenen Proben-Kapazitäten C_0 sind nach diesem Schema aus der Admittanz bestimmt und werden im folgenden einfach als gemessene Kapazität bezeichnet.

5.4 Kapazitäts-Spannungs Messung

Zur Bestimmung der Ladungsträgerdichte und des eingebauten Potentials U_{bi} wurde die Kapazität einer (n)-a-Si:H/(p)-c-Si Diode in Abhängigkeit der angelegten Spannung bei 300 K gemessen (Alle folgenden gezeigten Messungen wurden an der Probe MW65 durchgeführt, solange nicht explizit die Probennummer angegeben ist). Dies ist in Abbildung 5.7 in einer $C^2(U)$ -Darstellung für verschiedene Frequenzen im Bereich 100 Hz bis 1 MHz aufgetragen.

Für 1 MHz erhält man eine Gerade, was eine konstante Ladungsdichte über einen ausgedehnten räumlichen Bereich anzeigt. Bei tiefen Frequenzen erhält man jedoch eine erhöhte Kapazität (bzw. niedrigeres $1/C^2$). Hier ist auch die Steigung von $1/C^2(V)$ nicht mehr konstant, sondern sie nimmt zu höheren Sperrspannungen ab. Hier wird der Einfluß von Defekten deutlich. Da die Kurven für 100 kHz und 1 MHz sich nicht mehr stark unterscheiden kann man davon ausgehen, daß ein möglicher Einfluß der Defekte in diesem Bereich nur noch sehr gering ist und eine Auswertung der Steigung und des Achsenabschnitts verlässliche

Werte ergibt.

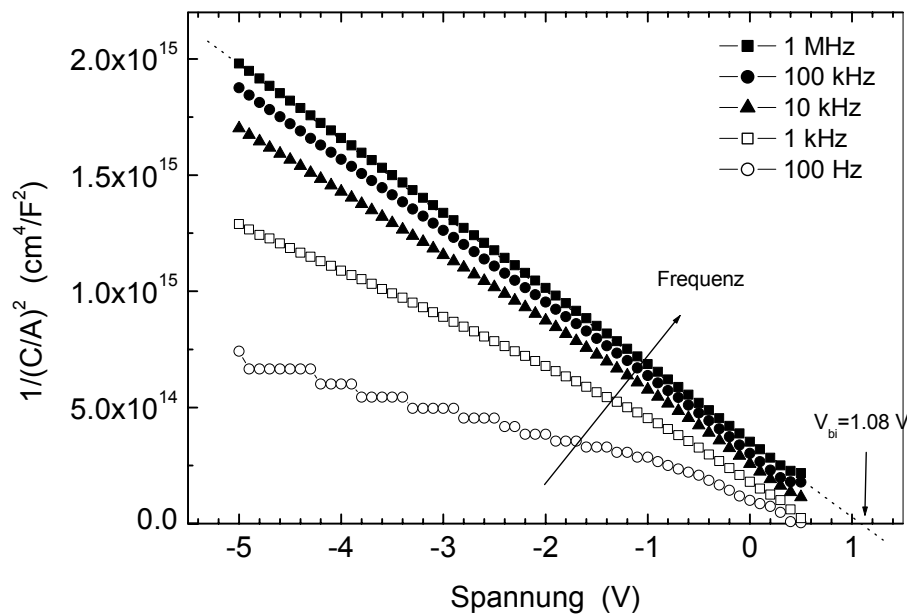


Abb. 5.7 Kapazität einer (n)-a-Si:H/(p)-c-Si Diode (MW65, $A=0.049\text{cm}^2$) bei 300 K als C^{-2} gegen U aufgetragen für Frequenzen von 100 Hz bis 1 MHz. Bei hohen Frequenzen erhält man eine Gerade, was eine konstante Ladungsdichte in der RLZ bedeutet.

Die Steigung von $3.26 \times 10^{14} \text{ cm}^4 \text{ F}^{-2} \text{ V}^{-1}$ ermöglicht eine Aussage über die Ladungsdichten in der Diode. Nimmt man eine einseitig stark dotierte Diode an, so erhält man nach Gleichung 5.7 die Akzeptordichte N_a im (p)-c-Si zu $3.70 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. Die Annahme, daß die Steigung nur von der schwachen Dotierung abhängt, ist gerechtfertigt, da die Dotierung im (n)-a-Si:H in der Größenordnung von 10^{19} cm^{-3} liegt, die Veränderung $(1+N_a/N_d)$ damit ca. 0.3 % beträgt. Zur Überprüfung des Wertes der Akzeptordichte kann man daraus den spezifischen Widerstand des p-Wafers errechnen: Die Beweglichkeit der Löcher bei einer Dotierung von $3.70 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ liegt bei ca. $400 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ [Sze85b]. Daraus ergibt sich ein spezifischer Widerstand $\rho = (e\mu_p N_a) = 0.42 \text{ } \Omega \text{ cm}$. Laut Herstellerangabe der Firma Wacker, Burghausen, liegt die Leitfähigkeit für den verwendeten $0.5 \text{ } \Omega \text{ cm}$ Wafer bei $0.42\text{-}0.58 \text{ } \Omega \text{ cm}$. Wegen der guten Übereinstimmung wird davon ausgegangen, daß die gemessenen Hochfrequenzwerte (1 MHz) der Kapazität praktisch ausschließlich durch die Akzeptor-Dotierung des kristallinen Wafers verursacht werden.

Aus dem Achsenabschnitt der Spannungsachse läßt sich die Diffusionsspannung („built-in-voltage“) U_{bi} nach Gleichung 5.7 zu 1.08 V bestimmen. Bei weiteren Proben schwankt dieser Wert jedoch merklich zwischen 0.89 und 1.1 V mit einem mittleren Wert von

0.98±0.12V.

Da auch die Fermienergie und Bandlücken der beiden am Heteroübergang beteiligten Halbleiter bekannt sind, lassen sich daraus die Sprünge in Valenz- und Leitungsband nach

$$\begin{aligned} V_{bi} &= (E_f - E_v)_2 - (E_f - E_v)_1 + \Delta E_v \\ &= (E_c - E_f)_1 - (E_c - E_f)_2 + \Delta E_c \end{aligned} \quad (5.38)$$

bestimmen (siehe Abbildung 5.8). Eine bei der gemessenen Diode vorhandene 5 nm dünne intrinsische amorphe Schicht beeinflusst diese Gleichungen nicht. Nur die Aufteilung der Bandverbiegung, bzw. der Diffusionsspannung U_{bi} , auf den amorphen und kristallinen Anteil wird verändert.

Das Fermienergie im kristallinen p-dotierten Wafer kann mit der effektiven Valenzbandzustandsdichte N_v sehr genau berechnet werden durch $E_f - E_v = kT \ln(p/N_v) = 0.17$ eV. Die Fermienergie $E_c - E_f$ des n-dotierten amorphen Siliziums der hier verwendeten Proben wurde aus Leitfähigkeitsmessungen an ca. 1 µm dicken Schichten bestimmt und schwankt bei Werten um 0.27±0.02 eV. Wegen der geringen a-Si:H-Schichtdicke in Heterodioden < 100 nm kann die Leitfähigkeit nicht zuverlässig für die jeweilige Probe gemessen werden. Zudem ist die effektive Bandlücke oder „Beweglichkeitslücke“ nur ungenau bestimmbar und liegt bei ca. 1.7±0.05 eV. Diese Unsicherheit der Bandlücke des (n)-a-Si:H schlägt sich nur auf den Wert für ΔE_v nieder, weil dafür $E_f - E_v$ aus $E_g - (E_c - E_f)$ berechnet werden muß, während der Wert $(E_c - E_f)$ zur Bestimmung des Leitungsbandsprungs ΔE_c direkt aus der Leitfähigkeit des (n)-a-Si:H bestimmt wird.

Damit erhält man für den Sprung im Leitungsband ΔE_c einen Wert von -0.30±0.14 eV, d.h. das Leitungsband im kristallinen Silizium liegt um 0.30 eV tiefer als im amorphem. Der Valenzbandsprung ΔE_v beträgt 0.28±0.19 eV und ist für die (n)-a-Si:H/(p)-c-Si Struktur mit einer höheren Unsicherheit behaftet, als der Leitungsbandsprung.

Für eine zusätzliche Bestimmung der „Bandoffsets“ wurden auch $C^{-2}(U)$ -Kurven der invers dotierten (p)-a-Si:H/(n)-c-Si Struktur gemessen. Die gesamte Bandverbiegung U_{bi} betrug für mehrere Proben Werte von 0.41-0.66 eV. Zur Bestimmung von ΔE_c und ΔE_v wird ein Mittelwert $U_{bi} = 0.53 \pm 0.13$ eV angesetzt. Die Fermienergie $E_f - E_v$ für (p)-a-Si:H liegen bei ca. 0.38±0.03 eV, $E_c - E_f$ für den n-dotierten kristallinen (3-6) Ωcm Siliziumwafer bei 0.24 eV, während die Bandlücken unverändert bleiben. Bei dieser Struktur kann nun $E_f - E_v$ des amorphen Siliziums bestimmt werden, und die Unbestimmtheit der Bandlücke verursacht eine erhöhte Unsicherheit des Werts für $E_c - E_f$.

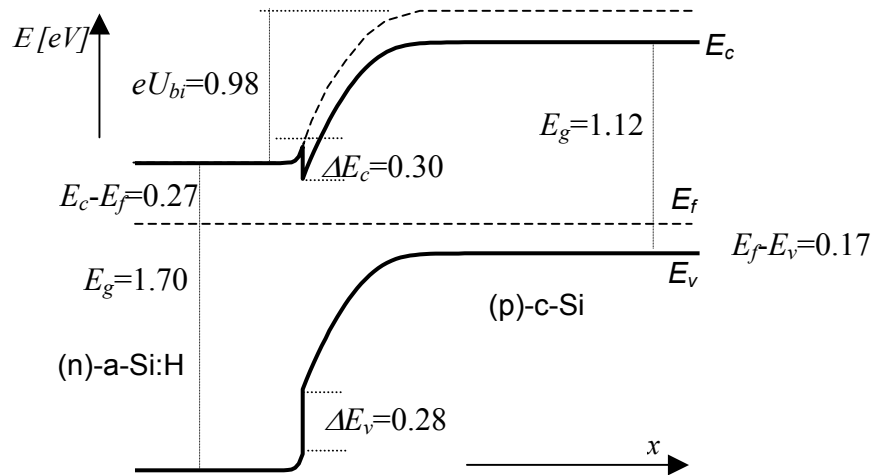


Abb. 5.8 Aus den $C(U)$ -Messungen ermittelte Werte (in [eV]) für das Banddiagramm einer (n)-a-Si:H/(p)-c-Si Diode

Für die (p)-a-Si:H/(n)-c-Si Struktur erhält man damit Bandoffsets von $\Delta E_v = 0.03 \pm 0.16$ eV und $\Delta E_c = -0.55 \pm 0.23$ eV.

Die Diskrepanz der Ergebnisse für die Bandoffsets der invers dotierten Heterodioden ist beträchtlich. Insgesamt erhält man die Tendenz, daß der Leitungsbandsprung ΔE_c größer als der Valenzbandsprung ist.

Diese Bestimmungsmethode wird möglicherweise durch Defekte verfälscht, die auch zur Streuung der Meßwerte für U_{bi} führen. Es kann jedoch auch nicht ausgeschlossen werden, daß die Bandoffsets tatsächlich durch die entgegengesetzte Dotierung unterschiedlich sind.

Der Einfluß eines Defektzustands mit einem Energieniveau und einer örtlich homogenen Defektdichte, der zu einer unterschiedlichen Steigung für verschiedene Spannungen führt, wurde im Kapitel 5.2 diskutiert. Man kann daraus eine maximale Verfälschung des Achsen-schnittpunkts bei $U=U_{bi}$ durch die Defekte abschätzen. Da bei der gemessenen Kurve für 1 MHz nur eine Steigung zu sehen ist, die auch für hohe Sperrspannungen konstant ist, muß dies die kleinere Steigung sein, die durch die Summe aus Dotier- und Defektladung ($N_{akzeptor} + N_i$) verursacht wird. Die Akzeptordichte sollte wegen der Herstellerangabe der Waferleitfähigkeit von (0.42-0.58) Ωcm maximal einen Faktor $0.42/0.58=0.724$ geringer sein, was zu einer maximal 0.724 höheren Steigung der $C^{-2}(U)$ -Kurve bei Spannungen in Flußrichtung führt. Die Steigung der $C^{-2}(U)$ -Kurve ist konstant bis zu einer Spannung von mindestens 0.45 V. Der aus der Steigung extrapolierte Anteil (bis $U_{bi}=1.08$ V) ist damit 0.63V. Legt man für diesen extrapolierten Bereich nun die maximal steile Steigung zu Grunde, so erhält man einen extrapolierten Wert von $U_{bi}=0.45+0.63 \cdot 0.724$ V = 0.91 V. Der Wert für ΔE_c würde so-

mit (betragsmäßig) um 0.17eV kleiner auf den Wert -0.07 ± 0.14 absinken. Nun ist jedoch für den in höchster Qualität hergestellten Float-Zone-Wafer eine solche homogene Defektdichte, die nahe an die Akzeptordichte der Größenordnung 10^{16} cm^{-3} reicht, auszuschließen. Eine solch hohe Defektdichte erscheint allenfalls an der Oberfläche des Wafers möglich, verursacht durch die Präparation der Heterostrukturen.

Auch eine Grenzflächenladung durch Interfacedefekte kann jedoch die Kapazitäts-Spannungskurven verändern. Als eine einfache Abschätzung wurde eine konstante Oberflächenladung σ am Heteroübergang angenommen, die von der angelegten Spannung unabhängig ist. Aus der Formulierung der Raumladungszone einer np-Diode mit einer Oberflächenladung σ erhält man mit der Poissongleichung und der Bedingung der Ladungsneutralität eine zu Gleichung 5.6 analoge Beziehung für die Kapazität,

$$C/A = \sqrt{\frac{e\epsilon N_1 N_2}{2(N_1 + N_2)(U_{bi} - U) - \frac{\sigma^2}{e\epsilon}}} \quad (5.39)$$

die vom Vorzeichen der Oberflächenladung unabhängig ist. In Abbildung 5.9 sind berechnete quadratische inverse Kapazitäten für verschiedene Oberflächenladungen (0 - 10^{13}) cm^{-2} im Vergleich zur Hochfrequenzmessung bei 1 MHz dargestellt.

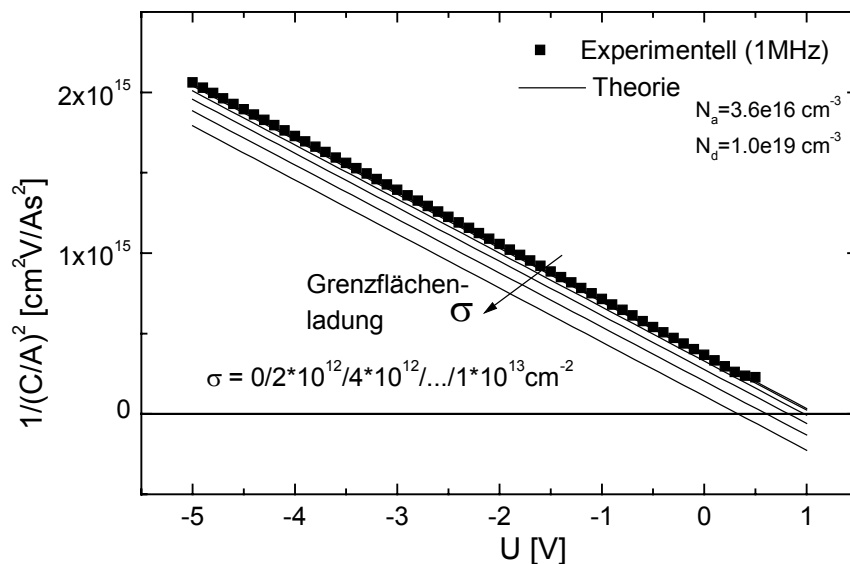


Abb. 5.9 Berechnete Kapazitäts-Spannungskurven nach Gl. 5.35 für verschiedene Oberflächenladungen σ (0 bis $10^{13} \text{ Ascm}^{-2}$) am Heteroübergang im Vergleich mit experimentellen Daten (bei $T=300 \text{ K}$)

Die Dotierung des p-type Wafers und des (n)-a-Si:H wurde für die Berechnungen mit 3.7×10^{16} und 10^{19} cm^{-3} angesetzt. Man erhält eine Verschiebung der Geraden mit konstanter

Steigung, jedoch verringertem Schnittpunkt mit der Spannungs-Achse, der U_{bi} entspricht.

Die gemessenen Werte würden für einen solchen Fall also zu niedrige Werte für U_{bi} ergeben, im Gegensatz zum Einfluß einer homogenen Defektdichte. Für eine merkliche Verringerung von U_{bi} muß die Oberflächenladung mindestens $2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ betragen.

Der Einfluß einer räumlich nicht konstanten Defektschicht ist jedoch nicht so einfach abzuschätzen. Auch sind die Defekte nicht unbedingt durch ein einziges Energieniveau charakterisiert. Für solche Fälle werden im nächsten Kapitel Simulationsrechnungen der Raumladungskapazität durchgeführt, die auch für den Anstieg der Kapazität bei kleineren Frequenzen eine Erklärungen liefern sollen.

5.5 Erhöhte Niederfrequenz-Kapazität durch Defekte

In den vorgestellten $C-U$ Messungen war ein Anstieg der Kapazität zu niedrigen Frequenzen zu beobachten. Im folgenden Abschnitt wird diese Frequenzabhängigkeit der Kapazität näher untersucht. Der Einfluß von Volumen- und Grenzflächendefekten wird in Simulationsrechnungen mit den Messungen verglichen.

Zu erwarten ist ein Einfluß von Defekten, die nahe an der Grenzfläche liegen, vor allem bei Spannungen in Flußrichtungen. In diesem Fall ist die Raumladungszone klein und ihre Ränder sind näher am Interface. Im hoch dotierten und defektreichen amorphen Silizium ist die Raumladungszone mit etwa 5nm sehr klein. Eine Verschiebung mit der angelegten Spannung ist dort minimal. Die Änderung der Raumladungszone findet fast ausschließlich im niedriger dotierten kristallinen Wafer statt.

Für hohe Sperrspannungen ist das Ende der Raumladungszone weiter entfernt von eventuellen Interfacedefekten. Deren Beitrag zu Ladungsänderungen durch Defektumladungen wird daher geringer sein. Um dies zu prüfen, werden die Kapazität einer (n)-a-Si:H/(p)-c-Si Struktur bei 100 kHz für Biasspannungen von 0 bis -4V in Abhängigkeit der Temperatur in Abbildung 5.10 gezeigt.

Bei 0V Biasspannung ist der Anstieg der Kapazität zu hohen Temperaturen am stärksten. Dort tragen mehr Ladungsträger durch Defektumladung zur Kapazität bei. Um die Defekte näher zu charakterisieren, konzentriere ich mich im folgenden auf den Bereich um 0V Biasspannung.

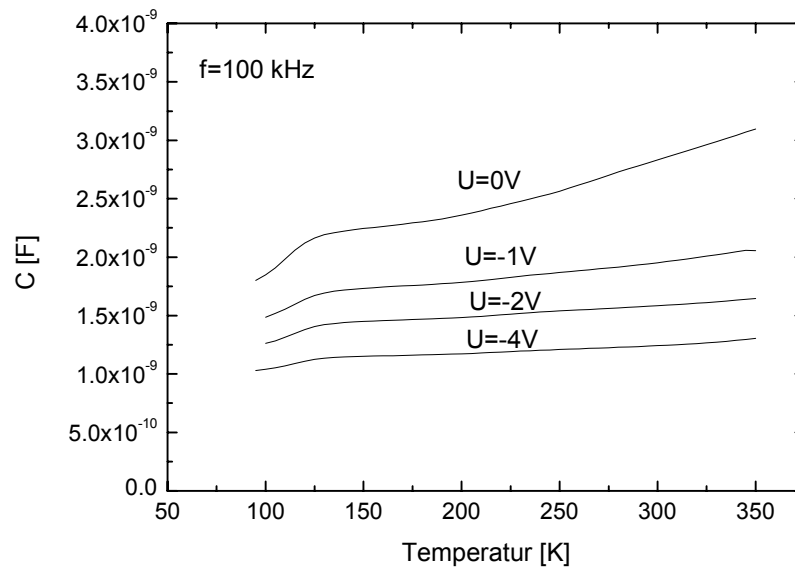


Abb. 5.10 Temperaturabhängigkeit der Kapazität einer (n)-a-Si/(p)-c-Si Diode bei 100 kHz für verschiedene Biasspannungen. Bei 0V (kleine RLZ) findet der höchste Anstieg der Kapazität zu hohen Temperaturen und damit der stärkste Beitrag von Defekten statt

In Abbildung 5.11 ist für eine (n)-a-Si:H/(p)-c-Si Heterodiode die Kapazität bei 0V Biasspannung für verschiedene Frequenzen (158 Hz - 631 kHz) über der Temperatur aufgetragen. Man erkennt zwei Bereiche, in denen die Kapazität ansteigt. Bei tiefen Temperaturen ($T < 150$ K) gibt es eine deutlich definierte Stufe, bei der die Kapazität von 1.76 nF auf 2.31 nF (bei 631 kHz) ansteigt. Bei höheren Temperaturen gibt es eine weitere, starke Erhöhung um fast einen Faktor zwei. Der Anstieg erfolgt für die Meßkurven mit niedrigerer Frequenz bei tieferen Temperaturen. Dies ist ein typischer Verlauf für eine thermische Aktivierung.

Der Anstieg bei tiefen Temperaturen wird jedoch nicht durch Defekte verursacht, sondern rührt von der geringen Leitfähigkeit der amorphen Schicht her. Wird diese Leitfähigkeit bei einer gegebenen Frequenz zu gering, kann die Ladung ΔQ nicht mehr von den äußeren Kontakten bis zum Ende der Raumladungszone im a-Si:H transportiert werden. Man spricht vom „Ausfrieren“ des amorphen Siliziums. Dieses Ausfrieren findet statt, wenn die Wechselfrequenz der angelegten Spannung höher als die dielektrische Relaxationsfrequenz $\omega_r = \sigma/\varepsilon$ ist (σ und ε sind die spezifische Leitfähigkeit und die dielektrische Suszeptibilität des amorphen Siliziums). Die spezifische Leitfähigkeit ist ebenso wie die Defekte thermisch aktiviert mit $\sigma = \sigma_0 \exp[-E_{akt}/(kT)]$, was zur gleichen Abhängigkeit von Frequenz und Temperatur wie bei Defektemission führt.

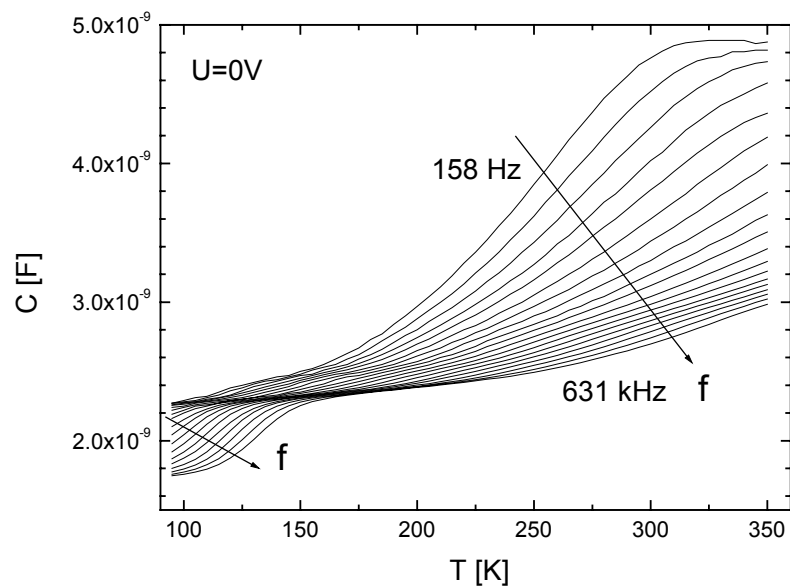


Abb. 5.11 $C(T)$ einer (n)-a-Si:H/(p)-c-Si Diode (MW65, $A=0.049\text{cm}^2$) bei verschiedenen Frequenzen von 158 Hz bis 631 kHz (19 Kurven, die Frequenz je um Faktor 1.583 erhöht: 158,251,398,631,1000,1583Hz,...) und einer Biasspannung von 0V

Zur Überprüfung dieser Annahme muß aus der Stufenhöhe die Schichtdicke der amorphen Schicht von ca. 60 ± 20 nm berechnet werden können. Diese Schichtdicken wurden zum einen aus gleichzeitig zu den Heterodioden auf Glas abgeschiedenen a-Si:H-Schichten durch optische Interferenzauswertungen und durch AFM-Messungen an den Heterodioden ermittelt. (Beide Methoden ergaben jedoch für die Schichtdicken nur eine Übereinstimmung von ca. 30 %, wobei die höheren Schichtdicken immer auf Glas gemessen werden)

Für die Kapazitäten ohne (C_1) und mit Ausfrieren (C_2) des a-Si:H gilt, wobei w die Weite der Raumladungszone ist

$$C_1 = \varepsilon A \left(\frac{1}{w} \right) \quad (5.40) \quad C_2 = \varepsilon A \left(\frac{1}{d+w} \right) \quad (5.41)$$

Daraus berechnet sich die Schichtdicke d im a-Si:H als

$$d = \varepsilon A \left(\frac{1}{C_2} - \frac{1}{C_1} \right) \quad (5.42)$$

und man erhält mit $\varepsilon = \varepsilon_r \times \varepsilon_0 = 11.7 \times 8.85 \times 10^{-12} \text{ AsV}^{-1} \text{ m}^{-1}$ und einer Diodenfläche $A = 0.049 \text{ cm}^2$ eine a-Si:H Schichtdicke von 69 nm und eine RLZ-Weite w von 221 nm.

Bei -2V Biasspannung gibt es bei tiefen Temperaturen eine Kapazitätsstufe von 1.21 auf 1.45 nF. Daraus erhält man ebenfalls eine a-Si:H-Dicke von 69 nm bei einer RLZ-Weite von

348 nm.

Diese konstante Schichtdicke von 69 nm auch für verschiedene Frequenzen entspricht etwa der Schichtdicke des a-Si:H aus AFM-Messungen. Diese Schichtdickenbestimmung durch eine Kapazitätsstufe liefert vermutlich sogar verlässlichere Werte für die a-Si:H Schichtdicken als die Dickenmessung durch AFM. Die Schichtdickenmessung durch AFM war problematisch, da es keine abrupte Stufe vom c-Si-Wafer zur amorphen Schicht gibt. Die optischen Transmissionsmessungen an a-Si-Schichten auf Glas und deren Interferenzauswertung liefern zwar zuverlässige Werte, aber es ist nicht sicher, ob das a-Si-Wachstum auf dem Wafer genauso wie auf Glas ist. (Die AFM-Messungen von amorphen Schichtdicken an a-Si/c-Si Dioden ergaben immer etwas niedrigere Schichtdicken als bei a-Si auf Glas).

Wertet man die Temperaturen, bei denen der Anstieg der Kapazität maximal ist, aus, indem die Frequenz gegen $1/T$ aufgetragen wird, so erhält man für die Tieftemperaturstufe eine Aktivierungsenergie von 0.13 eV. Dies entspricht ebenfalls etwa der Aktivierung der Leitfähigkeit im (n)-a-Si:H in diesem Temperaturbereich (bei Raumtemperatur ist die Aktivierungsenergie jedoch mit ca. 0.19 eV etwas höher).

Der starke Anstieg der Kapazität bei hohen Temperaturen und niedrigen Frequenzen wird hingegen durch Defekte verursacht. Bei der Bestimmung der Aktivierungsenergie muß man jedoch den Vorfaktor T^2 aus Gleichung 5.11 berücksichtigen. Man trägt deshalb logarithmisch den Quotienten aus Frequenz/ T^2 gegen die inverse Temperatur auf, um eine Geradensteigung zu ermitteln. Für jede Frequenz wird nun die Peak-Temperatur der Steigung ermittelt, bei dem der Defekt die größte Änderung der Kapazität verursacht. Diese Bestimmung ist leider ungenau, weil zum einen im Niederfrequenzbereich die Meßgenauigkeit nicht sehr hoch ist, zum anderen der Anstieg über einen weiten Temperaturbereich erfolgt, der Peak somit sehr breit ist. Die Fehlerbalken erstrecken sich deshalb längs der Temperaturachse. Die Auswertung bei höheren Frequenzen ist nicht möglich, da der Hauptbeitrag der Defekte erst bei höheren Temperaturen als 350 K auftritt. Die Proben dürfen jedoch nicht zu stark erhitzt werden, um irreversible Schäden zu vermeiden.

Man erhält eine Aktivierungsenergie der Defekte von 0.22 ± 0.05 eV (Bei einer Biasspannung von -1V ergab sich eine Aktivierungsenergie von 0.25 eV). Im p-dotierten kristallinen Silizium ist die Aktivierungsenergie durch den Abstand der Defektenergie zum Valenzband $E_r - E_v$ gegeben.

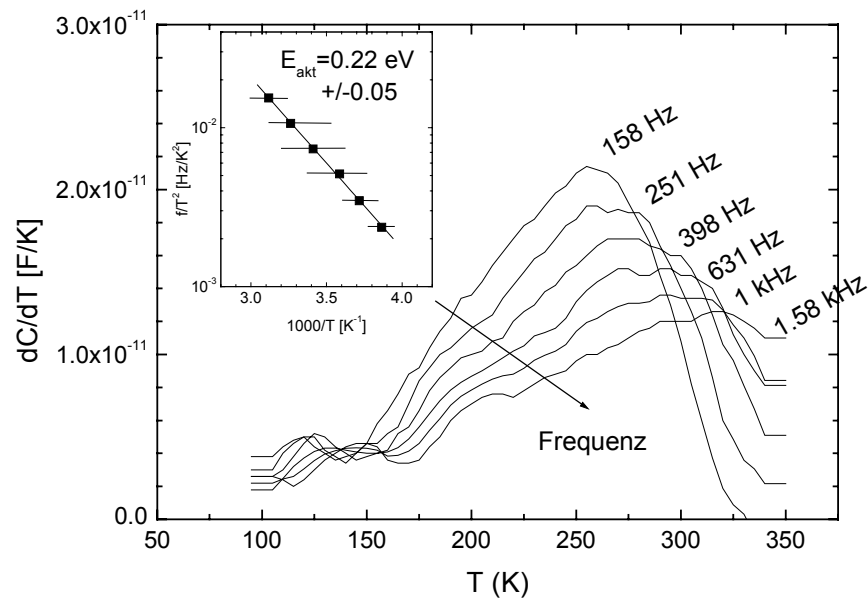


Abb. 5.12 Auswertung des Kapazitätsanstiegs im Niederfrequenzbereich. Aus der Auftragung der Frequenz/ T^2 gegen die inverse Peak-Temperatur der maximalen Steigung erhält man die Aktivierungsenergie der Defekte mit 0.22 ± 0.05 eV

Der Fehler der Aktivierungsenergie ist vergleichsweise groß, weil der Anstieg der Kapazität nicht in einer scharf definierten Kante, sondern über einen weiten Temperaturbereich „verschmiert“ verläuft. Dies deutet auf eine breite energetische Verteilung der Defektenergien und nicht auf ein einziges Energieniveau analog zur Zustandsdichte der Dangling Bonds im amorphen Silizium hin.

Der Vorfaktor aus dem exponentiellen Anstieg Γ_0 hat den Wert 60 HzK^{-2} . Für den Vorfaktor $\Gamma = \Gamma_0 T^2$ bei 300 K ergibt sich damit ein Wert von 5.4×10^6 Hz. Laut Lang und Cohen [Lang82] sollte der Vorfaktor im kristallinem Silizium bei 10^{11} bis 10^{13} Hz liegen. Der Vorfaktor der hier festgestellten Aktivierung ist also um mindestens 4 Größenordnungen kleiner als bei typischer thermischer Aktivierung. Dies könnte an einer Kopplung der thermischen Emission mit einem weiteren Prozeß liegen [Brendel00].

Die Defektdichte aus dem Anstieg analytisch zu bestimmen, ist für diese Proben sehr schwierig. Gegenüber analytischen Auswertungen von $C(f)$ -Messungen an a-Si:H Schottkydioden, die von Cohen und Lang [Cohen82] durchgeführt wurden, gibt es bei der Interpretation bei a-Si/c-Si Heterostrukturen weitere Erschwernisse.

Dies ist zum einen eine Barriere am Heteroübergang, der auf der kristallinen Seite zu einer Inversionsschicht führt. Dann hat man hier auf beiden Seiten Halbleiter mit Defekten. Die Defektdichte im float-zone Wafer muß durch die Präparation der Heterostrukturen entstanden

sein und wird sich nicht beliebig tief in den Wafer fortsetzen.

Aus diesen Gründen wird versucht, durch numerische Simulation die Größenordnung der Defektdichte abzuschätzen.

5.6 Numerische Simulation der Kapazität mit Grenzflächen- und Volumendefekten

In diesem Abschnitt werden numerische Rechnungen vorgeführt, die die unterschiedlichen Kapazitätseffekte bei Grenzflächendefekten und im Volumen der Raumladungszone darstellen sollen. Dies wird mit den vorgestellten experimentellen Ergebnissen verglichen.

5.6.1 Simulation der Kapazität einer (ni)-a-Si:H/(p)-c-Si Diode mit Grenzflächendefekten

Zur Simulation der Grenzflächendefekte wurde eine energetisch verteilte Zustandsdichte analog zur Zustandsdichte im amorphen Silizium mit Bandausläufern und gaußförmigen Defektzuständen nahe der Bandmitte angenommen. Die Defektschicht wurde auf der kristallinen Seite des a-Si:H/c-Si Grenzübergangs in einer 2 nm dicken Schicht eingebaut. Dort trifft eine hohe Defektdichte mit der hohen Ladungsträgerdichte der kristallinen Seite (wegen der kleineren Bandlücke) zusammen, was zu einer erhöhten Rekombination führt. Eine Defektschicht auf der amorphen Seite würde wegen der geringeren Ladungsträgerdichte zu keinem wesentlichen Anstieg der Rekombination führen.

Die Kapazität wird dabei in Abhängigkeit der Frequenz der Wechselspannung dargestellt und nicht in Abhängigkeit der Temperatur wie in den vorangegangenen Messungen. Die darin enthaltene Information über den Beitrag von Defekten zur Kapazität ist in beiden Fällen dieselbe. Für die Anwendung der Simulation stellt diese eine wesentliche Vereinfachung dar. Während man für verschieden Temperaturen jeweils einen eigenen Stromdichtetransienten berechnen muß, erhält man durch Laplacetransformation aus einer Transienten die Kapazität für den gesamten Frequenzbereich.

Einen maximalen Anstieg der Kapazität erhält man bei Defektenergien von ca. $E_v+0.45$ eV und einer Breite des Gaußpeaks von 0.2 eV (σ_E nach Gl. 3.10). Die Defektdichte wurde so variiert, daß sie mit der Schichtdicke von 2 nm multipliziert eine Oberflächendefektdichte σ ergibt.

In Abbildung 5.13 sind die Ergebnisse dieser numerischen Rechnungen experimentellen Daten gegenübergestellt (Kapazität pro Fläche in Abhängigkeit der Frequenz bei 300 K, $U_{bias}=0V$ und $\Delta U=-0.02V$). Dabei wurde die Oberflächendefektdichte von 0 bis 10^{12} cm^{-2} variiert.

Der einzige Simulationsparameter, der angepaßt werden muß, um eine gute Übereinstimmung der Hochfrequenzkapazität bei 1 MHz mit dem Experiment zu erreichen, ist die Dotierung des kristallinen Wafers, die nach den Ergebnissen der $C-U$ -Messung mit $3.7 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ angesetzt wurde.

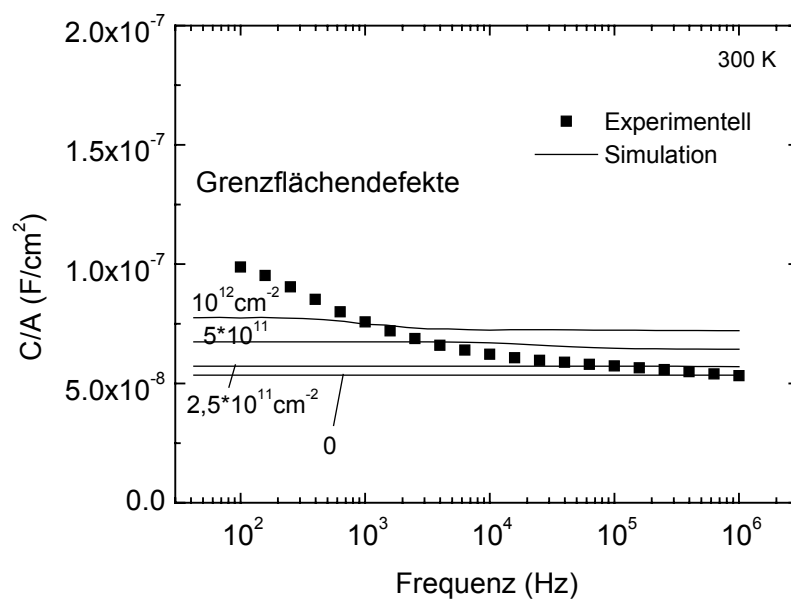


Abb. 5.13 Numerisch simulierte und experimentelle Kapazität einer (n,i)a-Si:H/(p)-Si Diode mit 2 nm Defektschicht am Heteroübergang in Abhängigkeit der Frequenz (300K, $U=0V$)

In den simulierten $C(f)$ -Kurven steigt die Kapazität im gesamten Frequenzbereich mit zunehmender Oberflächendefektdichte an. Während die Kapazität ohne Oberflächendefekte ($\sigma=0$) konstant ist, steigt bei einer Grenzflächendichte von 10^{12} cm^{-2} die simulierte Kapazität zu niedrigen Frequenzen um ca. 5% an. Die experimentellen Daten zeigen jedoch einen Anstieg um nahezu den Faktor zwei.

Mit der Simulation unter Einfluß von Interfacedefekten war es nach einer ausführlichen Variation der Parameter nicht möglich, eine Übereinstimmung mit der experimentellen Kapazität zu erreichen. Entweder man wählt eine kleine Interfacedefektdichte und erhält dann keinen Anstieg der Kapazität für niedrige Frequenzen oder man wählt eine hohe Defektdichte, bei der dann keine Übereinstimmung mehr bei hohen Frequenzen möglich ist. Außerdem

erhält man in keinem Fall einen Anstieg auch nur annähernd um einen Faktor zwei wie beim Experiment, obwohl die Defektenergie und –Verteilung schon auf einen maximalen Anstieg optimiert wurde.

Um die Verhältnisse einer Diode mit Grenzflächendefekten anschaulich zu machen, muß man sich die Ladungsverteilung für diesen Fall näher betrachten. Die Kapazität ist nach Gleichung 5.18 durch einen mittleren Abstand $\langle w \rangle$ der Ladungsänderungen bestimmt. Ein starker Anstieg der Kapazität bedeutet also immer, daß sich der räumliche Abstand der Ladungsänderungen von Elektronen und Löchern verringert. Im Fall von Interfacedefekten wird sich das Ende der Raumladungszone im kristallinen Silizium näher zum Heteroübergang verschieben. Eine Ladung am Interface führt also zu einer Verkleinerung der Raumladungszone. In Abbildung 5.14 ist die Simulation der Bandverbiegung für eine Heterostruktur ohne Defekte, mit Interfacedefekten und mit einer 120 nm tief ins c-Si reichenden Defektschicht abgebildet.

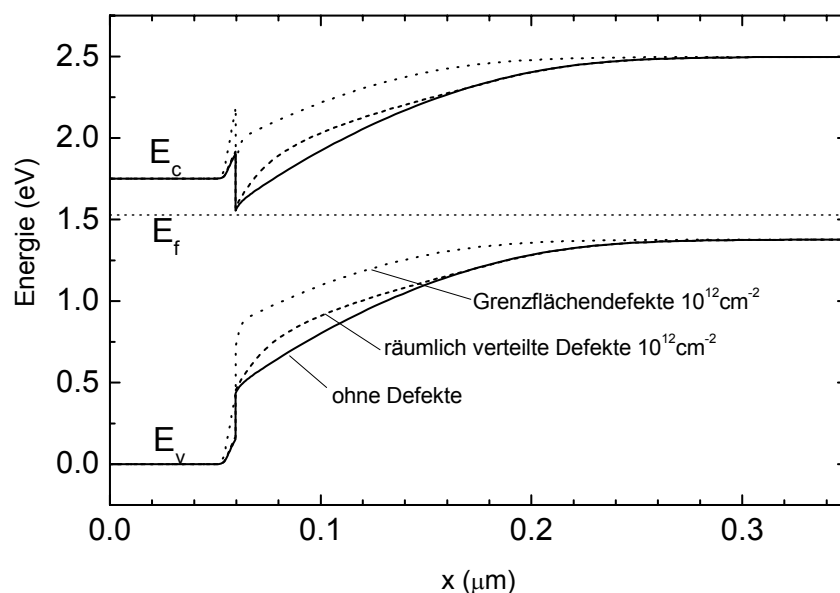


Abb. 5.14 Energiebänder einer n/i-a-Si/p-c-Si Heterostruktur ohne Defektschicht, mit Grenzflächendefekten am Interface und mit räumlich im c-Si verteilten Defekten (Defektverteilung siehe Kap. 5.6.2)

Diesen Effekt der Verkürzung der Raumladungszone sieht man auch im analytischen Ausdruck in Gleichung 5.39, bei dem eine konstante Oberflächenladung σ zusätzlich zur Raumladung auf beiden Seiten des Heteroübergangs eingeführt wurde. Dieser Effekt ist jedoch frequenzunabhängig, da im kristallinen Silizium keine Defekte vorhanden sind, die umgeladen werden und die Raumladungszone von ca. 220 nm fast vollständig im kristallinen Silizium liegt.

Beim leichten Anstieg der Kapazität zu tiefen Frequenzen werden Defekte am Heteroübergang umgeladen, das Ende der Raumladungszone verschiebt sich dabei vom amorphen Silizium zur Grenzfläche. Die maximale Verkleinerung der Raumladungszone ergibt sich durch die Weite der Raumladungszone im n-a-Si:H, die bei 3-5 nm liegt, zuzüglich der Schichtdicke der intrinsischen amorphen Schicht von ca. 5nm. Damit erhält man eine Verkürzung der Raumladungszone (220 nm) um ca. 10 nm. Der maximale Kapazitätsanstieg liegt also etwa bei 5%.

Ein stärkerer Kapazitätsanstieg zu niedrigen Frequenzen ist also nur möglich, wenn Ladungen innerhalb der weiten Raumladungszone im kristallinen Silizium zur Kapazität beitragen.

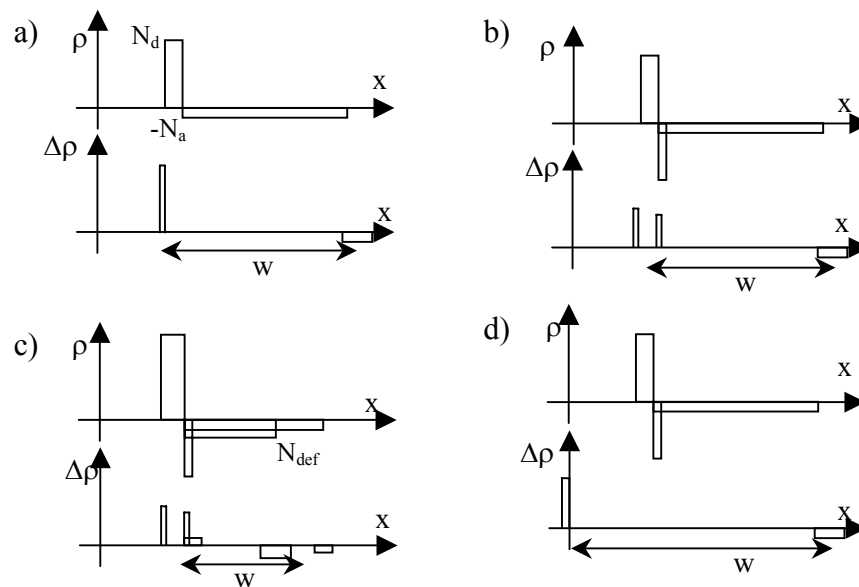


Abb. 5.15 Schematische Darstellung der Ladungsdichte ρ einer n^+p -Diode und der Änderung der Ladungsdichte $\Delta\rho$, verursacht durch eine Spannungsänderung ΔU , sowie die effektive Weite der RLZ w , aus der sich die Kapazität $C=eA/w$ ergibt für verschiedene Fälle:

- Ideale pn-Diode mit jeweils konstanter Ladungsdichte im p- und n-Gebiet
- mit zusätzlicher Grenzflächenladung am Übergang: *kleine Verringerung der Effektiven Weite $\langle w \rangle \downarrow$, d.h. kleine Erhöhung der Kapazität ($C \uparrow$)*
- Zusätzliche Ladungsdichte durch Fremdatome oder Defektzustände. *deutliche Verringerung von $\langle w \rangle \downarrow$, d.h. starke Erhöhung der Kapazität ($C \uparrow$)*
- „Ausfrieren“ der freien Ladungsträger links. *$\langle w \rangle \downarrow$, erhöht sich um die n-Schichtdicke, Die Kapazität sinkt ($C \downarrow$)*

Abbildung 5.15 zeigt schematisch die Ladungsdichteverteilung ρ der Raumladungszone sowie die Ladungsdichteänderung $\Delta\rho$ beim Verändern der angelegten Spannung ΔU und die daraus resultierende effektive Weite $\langle w \rangle$, die die Kapazität nach $C=\epsilon A/w$ bestimmt, für vier verschiedene Fälle:

- ideale pn-Diode mit kurzer RLZ links im (n)-typ-Halbleiter und großer RLZ im p-typ

Halbleiter rechts

- b) pn-Diode mit Interfaceladung. Die Weite $\langle w \rangle$ ist am Heteroübergang gegenüber der idealen Diode leicht verkürzt. Die Kapazität ist leicht erhöht
- c) pn-Diode mit Interfaceladung und tief in den p-typ ausgedehnten Defektschicht. Die RLZ ist rechts im p-typ verkürzt. Die Kapazität steigt deutlich.
- d) pn-Diode mit „Ausfrieren“ des n-typ Halbleiters. $\omega \gg \sigma/\varepsilon$, die Leitfähigkeit der n-Schicht ist so gering, daß die Ladungsträger am Ende der RLZ nicht umgeladen werden können. Die Ladungsänderung findet am Metallkontakt statt. Die Raumladungszone erhöht sich um die n-typ Schichtdicke. Die Kapazität sinkt.

Ein deutlicher Anstieg der Kapazität (>5%) durch den Einfluß von Defekten ist nur dann zu erwarten, wenn Defekte räumlich im sub- μm -Bereich in der Raumladungszone verteilt sind. Dies wird im nächsten Abschnitt simuliert.

5.6.2 Simulation der Kapazität einer (ni)-a-Si:H/(p)-c-Si Diode mit Volumendefekten im kristallinen Silizium

Um eine gute Übereinstimmung der Kapazitätssimulation mit dem Experiment zu erhalten, wurden folgende Simulationsparameter systematisch angepaßt (Alle weiteren Parameter wurden unverändert aus der Literatur übernommen; siehe Anhang C):

1. Wie schon bei der Simulation mit Grenzflächenzuständen wurde die Akzeptordichte gemäß den Resultaten aus der $C-U$ -Messung auf $3.7 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ gesetzt. Damit erreicht man eine sehr gute Übereinstimmung bei hohen Temperaturen und hohen Frequenzen.
2. Um das Ausfrieren der n-dotierten a-Si:H bei der richtigen Temperatur zu simulieren wurde die Leitfähigkeit der (n)-amorphen Schicht besser an die experimentelle Leitfähigkeit angepaßt. Dafür wurden das Fermi-niveau und die Elektronenbeweglichkeit optimiert. Zur Anpassung der Kapazitätsänderung ΔC bei tiefen Temperaturen wurde die a-Si:H Schichtdicke auf 65 nm gesetzt.
3. Zur Simulation einer Defektschicht wurden verschiedene Defektenergien $E_t - E_v$ von 0.15 bis 0.8 eV variiert. Auch wurde nicht nur ein einzelnes Defektniveau betrachtet, sondern eine gaußförmige Energieverteilung der Defektzustandsdichte angenommen. Damit wird die Frequenz, bei der die Kapazität ansteigt, beeinflußt.

4. Die örtliche Verteilung der Defekte im c-Si wurde variiert. Dabei wurde zuerst von einer räumlich konstanten, in der Schichtdicke begrenzten Defektschicht ausgegangen. Ist die Defektschichtdicke jedoch zu groß, wird die Hochfrequenzkapazität davon beeinflusst. Deshalb wurden weitere Defektschichten an der Grenzfläche hinzugefügt. Schließlich ergaben in der Defektdichte abgestufte defektreiche Schichten im c-Si eine gute Übereinstimmung mit dem Experiment. Eine räumlich abgestufte Defektdichte wurde auch von der Vermutung gestützt, daß die Defekte durch die Präparation verursacht werden, und deshalb näher zur Waferoberfläche eine höhere Defektdichte zu erwarten ist.

Abbildung 5.16 zeigt den Vergleich der simulierten und experimentellen Kapazität bei einer angelegten Spannung von 0 V über der Frequenz.

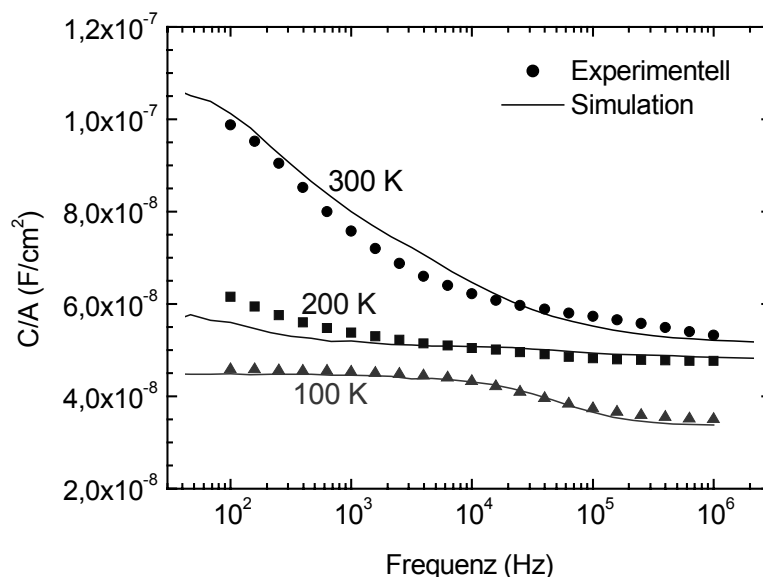


Abb. 5.16 Simulierte und experimentelle frequenzabhängige Kapazität einer (n,i)-a-Si:H/c-Si Heterodiode bei verschiedenen Temperaturen ($U_{bias}=0$ V, $\Delta U=-20$ mV)

Man erhält eine gute Übereinstimmung bei 100 und 300 K, bei 200 K erfolgt der Anstieg der simulierten Kapazität jedoch bei etwas zu niedrigen Frequenzen. Dies kann an der Defektzustandsdichte liegen, die nicht unbedingt gaußförmig ist. Zum anderen ist das Modell mit einigen Defektschichten sicherlich zu grob.

Diese Optimierung der Parameter wurde auf eine gute Übereinstimmung bei verschiedenen Temperaturen und 0 V Spannung ausgerichtet. Variiert man die angelegte Biasspannung,

dann wird die Übereinstimmung etwas schlechter.

Auch wenn keine perfekte Übereinstimmung zwischen Experiment und Simulation besteht, reproduziert die simulierte Kapazität doch alle wesentlichen Merkmale des Experiments. Die prinzipiellen Verhältnisse in der Heterostruktur sind damit gut beschrieben.

Die Defektenergie der simulierten Heterostruktur liegt bei $E_t - E_v = 0.33$ eV bei einer Breite der gaußförmigen Verteilung von 0.15 eV (σ_E nach Gl. 3.10). Die Schichtdicken und Defektdichten der 4 Defektschichten im kristallinen Silizium sind in Abbildung 5.17 dargestellt.

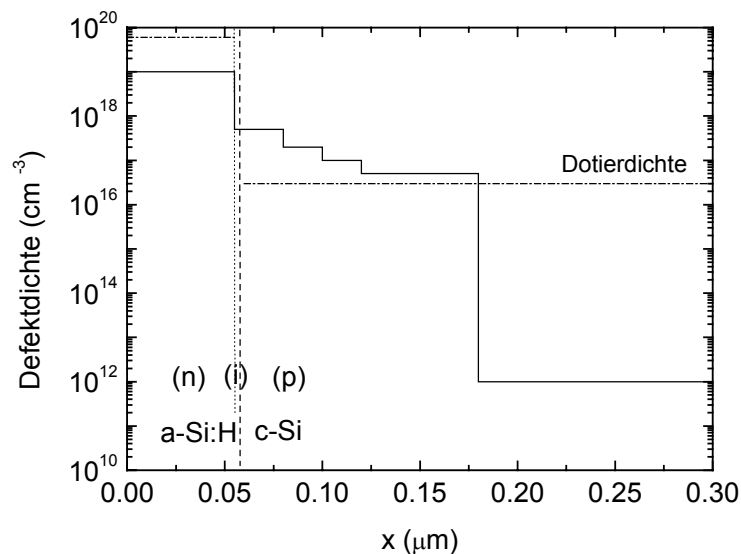


Abb. 5.17 Räumliche Defektverteilung und Dotierdichte der simulierten Heterodiode. Die Defekte wurden gaußförmig verteilt mit einer Energie von 0.33 eV und einer Breite von 0.15 eV (Dotierdichte in a-Si:H und c-Si gestrichelt)

Die Defektdichte wurde in 4 Schichten von 5×10^{17} bis auf $5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ abgestuft, bei einer Gesamtdicke der Defektschichten von 120 nm. Die Defektschicht reicht also bis 60 % tief in die Raumladungszone des c-Si und kann damit die effektive Weite $\langle w \rangle$ der Ladungsänderungen und die Kapazität um ca. einen Faktor 2 verändern.

In Abbildung 5.18 sind die Ladungsänderungen der transienten Simulation der Heterostruktur für verschiedene Zeitpunkte über dem Ort aufgetragen. Die angelegte Spannung wurde dafür von 0 V auf -20 mV (in Sperrrichtung) geschaltet und dann die räumliche Ladungsdichteverteilung transiente Stromdichte berechnet. Dabei fließen freie Ladungsträger vom Ende der Raumladungszone zu den Kontakten und vergrößern die Raumladungszone.

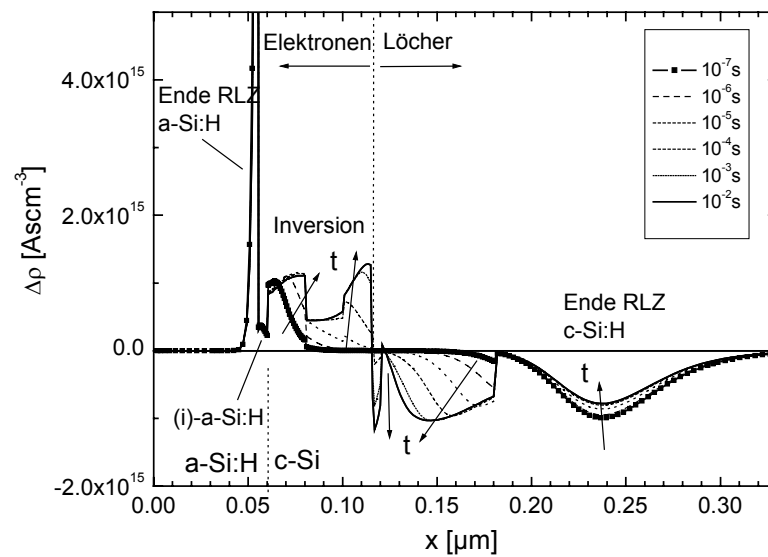


Abb. 5.18 Simulierte Ladungsdichteänderung $\Delta\rho$ für Zeiten von $t=10^{-7}$ s bis 10^{-2} s nach Verändern der Spannung von $U = 0 \text{ V} \rightarrow -20 \text{ mV}$. Für große Zeiten ($t=10^{-2}$ s) findet in der RLZ im c-Si (bei 70-180 nm) eine Defektumladung statt

Eine Besonderheit von Heterostrukturen im Vergleich zu einer np-Homodiode liegt darin, daß durch den Sprung im Leitungsband die Elektronen bis in eine Tiefe von ca. 60 nm auch im p-typ c-Si die Majoritäten darstellen. Es existiert nahe dem Heteroübergang eine Inversionsschicht. Die Grenze, bei der die Elektronen- und Löcherdichten gleich sind, ist gestrichelt angedeutet.

Für kurze Zeiten $t=10^{-7}$ s findet die negative Änderung der Ladungsdichte (auf der rechten Seite in Abb. 5.18) im c-Si fast ausschließlich am Ende der Raumladungszone (bei 240 nm) statt. Dort fließen Löcher aus den Akzeptoratomen nach rechts zum Metallkontakt ab. Auf der Elektronen-dominierten Zone (links in Abb. 5.18) findet die positive Ladungsdichteänderung teils durch Emission aus den Donatoratomen am Ende der Raumladungszone im (n)-a-Si:H statt und teils wird in einer Inversionsschicht im c-Si nahe am Grenzübergang (bei 60-70 nm) die Elektronendichte verringert.

Zu größeren Zeiten werden Ladungsträger aus Defekten emittiert und fließen nach außen zu den Kontakten ab (hier: Elektronen nach links und Löcher nach rechts). Die Ladungsänderung am Ende der Raumladungszone wird mit der Zeit wieder geringer. (Diese Verringerung ist auf der a-Si:H-Seite nicht auf dem Bildausschnitt wiedergegeben). Die effektive Weite der Raumladungszone $\langle w \rangle$, die durch den Schwerpunkt der Ladungsdichteänderung $\Delta\rho$ definiert ist, verkleinert sich zu großen Zeiten, d.h. die Kapazität steigt für niedrige Frequenzen. Eine Defektumladung im hoch dotierten amorphen Silizium ist für die Kapazität bedeutungslos.

Diese Umladung findet innerhalb einer räumlichen Ausdehnung von ca. 1 nm statt, der Einfluß auf die effektive Weite $\langle w \rangle$ ist vernachlässigbar.

Obwohl die Volumendefekte nur im p-typ c-Si umgeladen werden, findet die Umladung wegen der Inversionsschicht von beiden Seiten her durch Elektronen und Löcher statt. Bei größeren Spannungen in Sperrrichtung liegt das Ende der Raumladungszone im kristallinen Silizium weiter vom Grenzübergang und von der Defektschicht entfernt. In diesem Fall findet die Defektumladung nur noch durch Elektronen nahe am Grenzübergang statt. Der Kapazitätsanstieg ist geringer, wie das auch die Meßergebnisse zeigen (Abb. 5.10).

Der wahrscheinlichste Herstellungsschritt, der zur Entstehung der Defekte führen kann ist die Beschichtung des Wafers mit amorphem Silizium in der DC-PECVD-Anlage (Chemical Vapour Deposition mit Gleichstrom). Um diese Annahme testen, wurde eine Schottkydiode durch thermisches Verdampfen von Chrom hergestellt und mit a-Si/c-Si Heterodioden verglichen. Als Wafer wurde ein unbehandelter (3-6) Ωcm Czochralski-Wafer verwendet. Sowohl Schottkydiode als auch die Heterostruktur wurden mit HF geätzt und erhielten einen aufgedampften Aluminium-Rückkontakt. Die Heterostrukturen erhielten zusätzlich noch Aluminium-Frontkontakte.

Für beide Strukturen wurde der Anstieg der Kapazität von hohen zu niedrigen Frequenzen gemessen. Bei der Schottkystruktur ergab sich ein Kapazitätsanstieg von 4% von 1MHz auf 100 Hz. Bei den Heterostrukturen erhielt man für verschieden Proben einen Anstieg um einen Faktor 2-8 (Diese extrem hohen Kapazitätsanstiege sind erklärbar wenn die effektive Weite durch Defekte im Bereich unter 100 nm bleibt, während die Raumladungszone wegen der geringeren Dotierung um eine Faktor 3 länger ist als beim bisher verwendeten Wafer).

Die Defekte werden folglich von der DC-Plasmabeschichtung verursacht. In der Literatur gibt es Nachweise einer Defekterzeugung durch ein Wasserstoffplasma [Beckers98]. So wurden mikrokristalline Siliziumschichten amorphisiert, was durch Ramanspektroskopie nachgewiesen wurde, während in kristallinem Silizium durch TEM-Analysen (Transmission Electron Microscope) Löcher (von ca. 20 nm Größe !) entdeckt wurden. Ähnliche Effekte könnten auch bei der a-Si:H-Beschichtung durch DC-PECVD auftreten.

Während Defektenergien im kristallinen Silizium z.B. durch Vakanzen bei diskreten Energieniveaus liegen können, ist für größere Löcher eine verbreiterte Zustandsdichte in Analogie zu Oberflächenzuständen zu erwarten. Auch hängen die Defektenergien bei Einzel- oder Doppelvakanzen in kristallinem Silizium von der Elektronen-Besetzung der Vakanz ab (z.B. Vakanz V^{++} , V^+ : $E_v+0.13$ eV, Di-Vakanz V_2^+ : $E_v+0.21$ eV, V_2^0 : $E_c-0.42$ eV, V_2^- : E_c-

0.24 eV [Schulz82]).

5.7 Heterodioden mit unterschiedlicher Plasmabehandlung

In diesem Abschnitt werden experimentelle Ergebnisse von vier (p)-a-Si:H/(n)-c-Si Heterodioden präsentiert, die einer unterschiedlichen Plasma-Behandlung/-Beschichtung in der CVD-Kammer unterzogen wurden. Es werden C - f -Messungen und I - U -Messungen (dunkel und unter Beleuchtung) gegenübergestellt.

Die p-typ amorphen Schichten wurden auf einen (3-6) Ω cm Czochralski-Wafer (100-orientiert) durch DC-PECVD abgeschieden. Dabei wurde teilweise vorher eine 3-minütige Wasserstoffplasma-Behandlung durchgeführt (bei 1 mbar, 1.1 kV, 5 mA, bei 5 cm Plattenabstand, ca. 180 cm² Plattenfläche). H-Plasmen werden einerseits zur Oberflächenreinigung durchgeführt, andererseits können dadurch auch Defekte erzeugt werden [Beckers98]. Die verwendeten Werte für das H-Plasma wurden nicht optimiert. Es soll dadurch nur eine Variationsmöglichkeit bei der Deposition getestet werden. Die andere Variation besteht im Hinzufügen/Weglassen einer ca. 5 nm dicken intrinsischen amorphen Schicht auf den Wafer.

Alle Proben wurden vor der a-Si:H-Deposition mit HF geätzt und erhielten Front- und Rückkontakte durch thermische Verdampfung von Aluminium. Die Al-Frontkontakte wurden kreisförmig in einer dicken (>100 nm) und einer halbdurchsichtigen Version (Transmissionen von 5-40 % im sichtbaren Spektrum) aufgedampft.

In Tabelle 5.1 sind die unterschiedlichen Behandlungen für die vier Proben zusammengestellt.

Tab. 5.1 Unterschiedliche Plasmabehandlung bzw. Beschichtung der (n)-a-Si:H/(p)-c-Si Heterostrukturen in der CVD-Anlage

Probe	H-Plasma	(i)-a-Si:H	(p) ⁺ -a-Si:H
0	-	-	~60 nm
H	Ja	-	~60 nm
i	-	5 nm	~55 nm
Hi	Ja	5 nm	~55 nm

In Abbildung 5.19 sieht man frequenzabhängige Kapazitäten bei 300 K. Die Diode ohne H-Plasma-Behandlung und mit einer intrinsischen a-Si:H Schicht (Probe „i“) zeigt dabei mit Abstand die geringste Niederfrequenzkapazität. Die höchste Niederfrequenzkapazität und damit die höchste Defektdichte im kristallinen Silizium hat die Probe „0“ ohne H-Plasmabehandlung und ohne intrinsische Zwischenschicht. Die Defektdichten bei den Proben „H“ und „Hi“ liegen zwischen diesen Extremfällen.

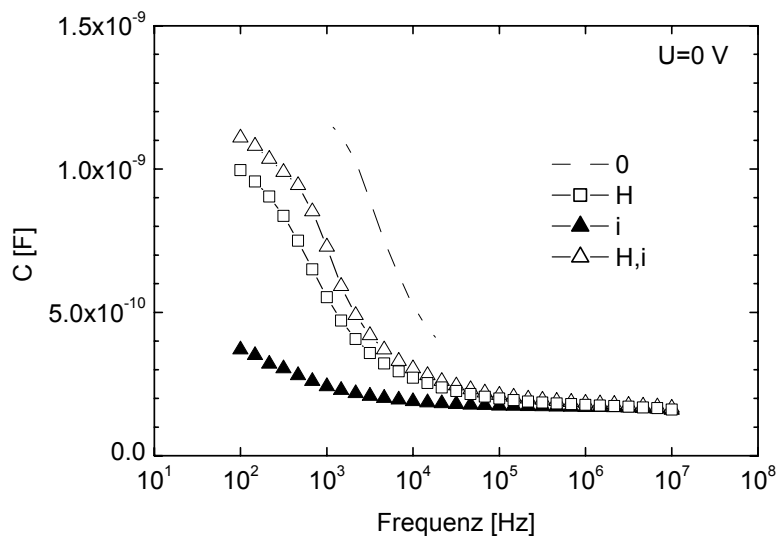


Abb. 5.19 Experimentelle $C(f)$ -Kurven für Proben mit unterschiedlicher Plasma-behandlung bzw. a-Si:H-Beschichtung ($T=300$ K)

Daß die Defektdichte durch ein H-Plasma geringer wird (Proben „H“ und „0“), legt den Schluß nahe, daß durch Wasserstoff zwar Defekte entstehen, diese aber teilweise durch H-Atome abgesättigt werden können, wie dies im a-Si:H der Fall ist. Das Plasma beim Beschichten, das aus Silan (SiH_4) und ca 3% Phosphin (PH_3) gebildet wird, kann die erzeugten Defekte möglicherweise schlechter absättigen.

Warum beim Beschichten durch eine zusätzliche dünne intrinsische a-Si:H-Schicht deutlich weniger Defekte entstehen, ist nicht plausibel. Die Unterschiede im Plasma machen sich allerdings auch in der angelegten Spannung deutlich. Bei reinem Silan erhielt man die gleiche Stromdichte von 10 mA bei 1.1 kV, im Vergleich dazu bei der Silan/Phosphin-Mischung bei 1.35 kV. Auch dadurch könnten die Verhältnisse bei der Beschichtung der intrinsischen Schicht günstig für eine Defektabsättigung sein.

Es soll hier durch Variation der Präparationsbedingungen ein Zusammenhang zwischen Kapazitäts-Frequenz und Stromdichte-Spannungsmessungen gezeigt werden.

In den Abbildungen 5.20 und 5.21 sind I - U Dunkel- und (auf eins normierte) Hellkennlinien der vier Proben gezeigt.

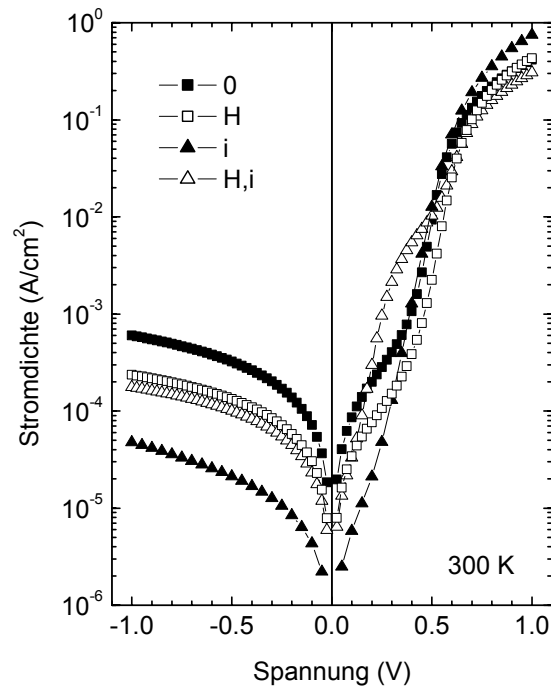


Abb. 5.20 Stromdichte-Spannungs-Kurven (dunkel) für Proben mit unterschiedlicher Plasmabehandlung bzw. a-Si:H-Beschichtung ($T=300$ K)

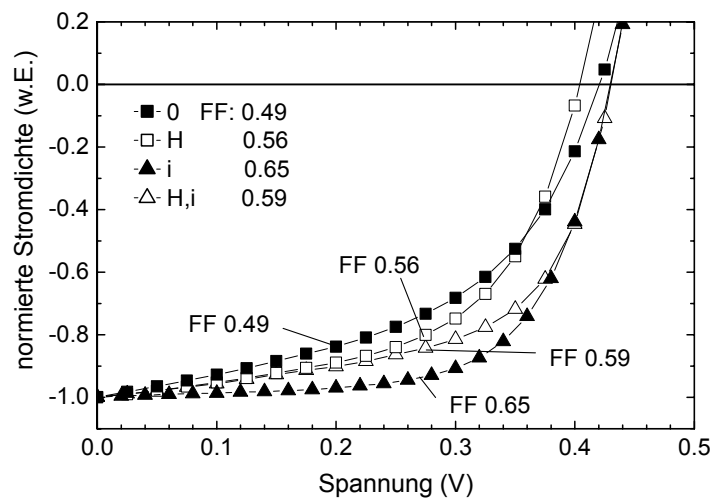


Abb. 5.21 Normierte Stromdichte-Spannungs-Kurven unter Beleuchtung mit Weißlicht für Proben mit unterschiedlicher Plasmabehandlung bzw. a-Si:H-Beschichtung ($T=300$ K)

Je niedriger der Kapazitätsanstieg der Probe bei kleinen Frequenzen ist, desto kleiner ist auch die Stromdichte in Sperrspannung. Die gleichrichtenden Diodeneigenschaften sind besser.

Die geringste Defektdichte der Probe „i“ mit einer intrinsischen Zwischenschicht zeigt sich auch in den Dunkelkennlinien durch die niedrigste Stromdichte in Sperrrichtung und bei kleinen Spannungen in Flußrichtung. Die Probe „Hi“ zeigt zwar die zweitniedrigste Stromdichte in Sperrrichtung, jedoch eine erhöhte Stromdichte für kleine Spannungen in Flußrichtung, was auf einen zusätzlichen Transportpfad am Heteroübergang oder eine erhöhte Rekombination in der Raumladungszone deutet.

Die Stromdichte-Spannungs-Kennlinien unter Beleuchtung wurden auf die Kurzschlußstromdichte $J(0\text{ V})$ normiert, da die Transmission der vier Proben um einen Faktor 4-5 variierte. (Die Schichtdicken der halbtransparenten Aluminiumfrontkontakte mit ca. 15-30 nm sind bei der thermischen Verdampfung nicht genau reproduzierbar). Damit weichen auch die Leerlaufspannungen U_{oc} der Dioden voneinander ab.

Die Füllfaktoren der Hellkennlinien korrelieren mit der Niederfrequenzkapazität und der Dunkelstromdichte in Sperrrichtung. Ein niedriger Kapazitätsanstieg führt zu einem hohen Füllfaktor. Während der Füllfaktor für die Diode „0“ ohne H-Plasma und i-a-Si:H Zwischenschicht 0.49 beträgt, liegt er für die Heterostruktur „i“ bei 0.65.

Eine weitere Optimierung der a-Si:H Beschichtung wurde im Rahmen dieser Arbeit nicht vorgenommen. Die Präparation war optimiert für die Erzeugung möglichst defektarmen intrinsischen amorphen Siliziums. Hiermit soll jedoch der Zusammenhang der frequenzabhängigen Kapazitätsmessungen mit Solarzelleneigenschaften gezeigt werden.

5.8 Ergebnisse der Kapazitätsmessungen/-Simulationen

Aus $C(U)$ -Messungen bei 300 K und 1 MHz wurden Sprünge in Leitungs- und Valenzband ΔE_c und ΔE_v bestimmt. Für (n)-a-Si:H/(p)-c-Si ergaben sich Werte von $\Delta E_c=0.30\pm 0.14$ eV und $\Delta E_v\sim 0.28\pm 0.19$ eV. Für die invers dotierte (p)-a-Si:H/(n)-c-Si Struktur erhält man davon abweichende Bandoffsets von $\Delta E_c\sim 0.55\pm 0.23$ eV und $\Delta E_v=0.03\pm 0.16$ eV. Die Ermittlung der Diffusionsspannung U_{bi} , die Grundlage für die Berechnung der Bandlückensprünge ist, wird jedoch durch Defekte verfälscht.

Aus dem Vergleich von Simulationsrechnungen mit temperatur- und frequenzabhängigen Kapazitätsmessungen wurde die Existenz von Volumendefekten im kristallinen Silizium postuliert. Die räumliche Ausdehnung der Volumendefekte in den kristallinen Wafer muß in der Größe von 100 nm liegen, um den Anstieg der Niederfrequenzkapazität zu erklären. Die Defekte entstehen in der Gleichstrom-CVD-Anlage bei der a-Si:H Beschichtung.

6 Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit wurde der Ladungsträgertransport an (n)-a-Si:H/(p)-c-Si Heterodioden aus amorphem und kristallinem Silizium untersucht. Dazu wurden Strom-Spannungskennlinien dunkel und unter Bestrahlung sowie Kapazitäten in Abhängigkeit von Temperatur und Frequenz gemessen. Zur Unterstützung der Interpretationen wurde ein vielseitig verwendbares 1-dimensionales Simulationsprogramm für Halbleiterbauelemente entwickelt, bei dem speziell die Defektstatistik von Dangling Bonds berücksichtigt wird. Das Gleichungssystem kann dabei sowohl stationär als auch transient gelöst werden. Die transiente Simulation der Stromdichte nach dem Schalten einer Spannungsstufe und anschließende Laplacetransformation ermöglichen eine detaillierte Untersuchung des Einflusses von Defekten auf die frequenzabhängige Kapazität.

Aus temperaturabhängigen Strom-Spannungskennlinien ergaben sich in verschiedenen Spannungs- und Temperaturbereichen unterschiedliche Strommodelle. Bei tiefen Temperaturen und kleinen Spannungen in Flußrichtung ist ein modifiziertes Tunnelmodell, das von Matsuura vorgeschlagene Multi-Capture-Emission-Tunneling (MTCE) Modell, für die Stromdichte maßgeblich. Dabei tunneln Elektronen in Defekte im kristallinen Wafer und rekombinieren dort durch Löchereinfang. Dies liefert eine plausible Erklärung für die temperaturunabhängige Steigung der Dunkel-Strom-Spannungskennlinien in diesem Bereich mit konstanter Aktivierungsenergie von 0.164 eV, was genau dem Fermi-niveau des p-typ dotierten kristallinen Siliziums entspricht. Bei weiteren Proben mit einer höheren Defektdichte im kristallinen Silizium nimmt die Stromdichte in diesem Bereich zu oder es findet alternativ Rekombination in der Raumladungszone statt. Bei tiefen Temperaturen und höheren Spannungen in Flußrichtung ist der Ladungsträgertransport durch ein Tunneln durch eine spitze Heterobarriere im Leitungsband geprägt. Dieser Transportpfad dominiert bei hohen Temperaturen im gesamten Spannungsbereich.

Eine S-Form der Strom-Spannungskennlinien unter Beleuchtung bei tiefen Temperaturen läßt sich durch den Vergleich mit Simulationsrechnungen mit einer Barriere im Leitungsband am Heteroübergang erklären. Daraus ergibt sich eine Leitungsbanddiskontinuität ΔE_c am

a-Si:H/c-Si Übergang ΔE_c von mindestens 0.36 eV. Der Einfluß einer eventuellen Barriere am Frontkontakt zum a-Si:H auf die S-Form der Strom-Spannungs Kurven läßt sich jedoch nicht ausschließen.

Die Auswertung von Kapazitäts-Spannungsmessungen an (n)-a-Si:H/(p)-c-Si Heterostrukturen ergibt einen Leitungsbandsprung ΔE_c von ca. 0.30 eV; ein Wert, der allerdings von Probe zu Probe schwankt. Eine scheinbare Absenkung dieses Werts läßt sich jedoch mit dem Vorhandensein einer Oberflächenladung am Heteroübergang theoretisch erklären und diese kann bei der schwer zu kontrollierenden Oberflächenpräparation unterschiedlich ausfallen. Daraus resultiert eine Valenzbanddiskontinuität ΔE_v von ca. 0.28 eV. Dieser Leitungsbandsprung ist höher als bei vielen in der Literatur angegebenen Werten, die meist bei 0.05 – 0.2 eV liegen, aber auch Werte >0.5 eV erreichen.

Die Kapazität zeigte einen merklichen Anstieg von hohen zu niedrigen Frequenzen. Aus dem Vergleich mit numerischen Simulationsrechnungen konnte dieser Anstieg auf eine räumlich ausgedehnte Verteilung von Defekten auch im kristallinen Silizium bis in eine Tiefe von ca. 100 nm zurückgeführt werden. Der Anstieg ist nicht durch Interfacedefekte allein zu erklären. Diese Defekte werden durch die DC-PECVD-Beschichtung verursacht.

Der Vergleich mit den Ergebnissen anderer Forschungsgruppen und die Streuung eigener Messungen an verschiedenen Proben deutet auf eine starke Abhängigkeit der Meßergebnisse und der daraus folgenden Interpretationen von der Oberflächenpräparation unmittelbar vor der Deposition des a-Si:H auf den kristallinen Wafer. Eine systematisch unterschiedliche Präparation durch ein Wasserstoffplasma und das Auftragen einer intrinsischen a-Si:H Schicht zeigt eine Korrelation zwischen der Stromdichte und dem durch Defekte verursachten Anstieg der Kapazität zu niedrigen Frequenzen.

Schließlich wurde ein Vergleich der np- und pn-dotierten Struktur mit unterschiedlichen Banddiskontinuitäten numerisch durchgeführt. Daraus ergibt sich die allgemeine Aussage, daß ein großer Leitungsbandsprung für die (n)-a-Si:H/(p)-c-Si Struktur bzw. ein großer Valenzbandsprung für die invers dotierte Struktur günstig für die erreichbare Leerlaufspannung ist. Dies ist besonders dann wichtig, wenn Grenzflächendefekte am Heteroübergang vorhanden sind, die durch eine starke Inversionsladung dann kaum zur Rekombination beitragen.

Die Bedeutung der Bandlückensprünge zeigte sich in vielen Details dieser Arbeit. Wegen der Streuung der Proben, die wohl vor allem durch Defekte verursacht werden, konnten keine exakten Werte dafür ermittelt werden. Deshalb ist es wichtig die Präparation der Heterostrukturen zu verbessern. Interessant wäre ein Vergleich von Proben die durch Gleichstrom- und

Wechselstrom PECVD sowie durch „Hot-Wire“-Technik hergestellt werden.

Weitere Informationen zur Defektcharakterisierung könnten z.B. durch DLTS-Messungen erzielt werden.

Besonders interessant wäre ein detaillierter Vergleich von np- und pn-dotierten Strukturen für die Verwendung als Solarzellen.

Anhang A

Präparation der Heterostrukturen

A.1 Präparationsschritte

Die untersuchten Heterostrukturen wurden in Oldenburg hergestellt, für die (n)-a-Si:H/(p)-c-Si Strukturen wurden die Wafer in Freiburg am ISE vorbehandelt. Die (100)-orientierten Float-Zone-Wafer sind n-typ dotiert (Phosphor) mit einem spezifischen Widerstand von $0.5 \Omega\text{cm}$. Die Dicke der Wafer beträgt $200 \mu\text{m}$. Zuerst wurde auf beiden Seiten ca. $5 \mu\text{m}$ abgeätzt und dann einer RCA-Reinigung unterzogen, um saubere Oberflächen zu erhalten. Die Rückseite wurde dann mit Aluminium beschichtet. Die Vorderseite wurde bei 850°C oxidiert, was zu einem etwa 5 nm dicken Oxid führt, das als Schutzschicht für die Oberfläche dient. Nach einer weiteren Aluminiumbeschichtung wird der Rückkontakt gesintert, d.h. auf ca. 400°C erhitzt, was zur Eindiffusion von Aluminium in den Wafer führt. Dies bildet das sogenannte Back-Surface-Field aus, das eine erhöhte Dotierung nahe am Rückkontakt darstellt, und zu einem guten ohmschen Kontakt führt. In dieser Form wurden die Wafer aus Freiburg bezogen.

Die Präparation von entgegengesetzt dotierten (p)-a-Si:H/(n)-c-Si Heterodioden wurde mit $375 \mu\text{m}$ dicken $3\text{-}6 \Omega\text{cm}$ n-dotierten Czochralski Wafern komplett selbst durchgeführt. Bei diesen Proben wurde der Rückkontakt aus Aluminium erst nach der Deposition von amorphem Silizium aufgebracht.

Die Präparation der Heterodioden erfolgt in diesen Schritten:

- Abätzen des thermisch gewachsenen bzw. natürlichen Oxids auf der Waferoberfläche.
- Beschichtung des Wafers mit amorphem Silizium durch DC-PECVD
- Aufbringen der Frontkontakte (Aluminium thermisch verdampft, bzw..

- transparente leitfähige Kontakte aus ZnO:Al durch Sputtern)
- Bei den (p)-a-Si:H/(n)-c-Si Proben als Rückkontakt Aluminium thermisch verdampft.

Im weiteren werden wichtige Präparationschritte, das Entfernen des Oxids und die Deposition des amorphen Siliziums näher erläutert.

A.2 Abätzen des Oxids

Die Behandlung der Oberfläche ist ein besonders kritischer Prozess bei der Herstellung von a-Si:H/c-Si Heterostrukturen. Die Verfahren haben einen merklichen Einfluß auf die Diodeneigenschaften [Jagannathan96]. Eine Oxidschicht auf der Oberfläche muß vor der a-Si Deposition entfernt werden, um nicht eine Barriere für die Ladungsträger am Heteroübergang zu erhalten. Die zusätzliche Barriere führt dazu, daß eine wesentlich höhere Spannung angelegt werden muß um ähnliche Stromdichten zu erhalten wie bei Heterodioden ohne diese Oxidschicht. Auch kann durch Ätzen mit HF-Lösungen die Dichte extrinsischer Defekte an der Oberfläche verringert werden [Angermann95]. Das Entfernen einer Oxidschicht auf der Waferoberfläche wurde mit einer mit 40%igen NH_4F -Lösung durchgeführt. Die Verwendung einer gepufferten Flußsäure führt zu einer langsameren und daher für sehr dünne Schichten besser kontrollierbaren Ätzung des Oxids [Bogenschütz67] und einer Absättigung der offenen Bindungen der Siliziumatome an der Oberfläche mit Wasserstoffatomen, der sogenannten H-Terminierung [Angermann96b]. Higashi et al. [Higashi90] berichteten, daß diese H-Terminierung mit steigendem pH-Wert vollständiger wird. Sie verwendeten zur Erhöhung des pH-Wert nicht nur NH_4F , sondern zusätzliche Basen wie NH_4OH . Solche Wafer können durch Ätzen mit NH_4F - im Gegensatz zu HF-Lösungen nahezu einatomar glatt geätzt werden, wie durch STM Messungen (Scanning Tunneling Microscope) gezeigt wurde [Higashi91]. Bei (100) orientierten Wafern führt das Ätzen auch zur Entstehung von kleinen (111) Oberflächen [Nakamura96, Higashi89]. Man erhält also eine gezackte Oberfläche.

Um die Rauigkeit auf einer (100)-Oberfläche möglichst klein zu halten, ist es deshalb wichtig, möglichst kontrolliert zu ätzen und sofort nach dem Entfernen des Oxids den Ätzprozess zu beenden. Daß sich eine möglichst kurze Ätzzeit auch auf die Eigenschaften von Heterosolarzellen positiv auswirkt, wurde von Kolter [Kolter97] festgestellt. Die Entfernung des Oxids kann leicht festgestellt werden, weil die Siliziumoxidoberfläche hydrophil ist, d.h.

die Oberfläche von der wässrigen Lösung benetzt wird, während die Siliziumoberfläche hydrophob ist und Tröpfchen der Lösung davon abperlen.

Eine wichtige Eigenschaft der H-terminierten Siliziumoberflächen ist ihre chemische Stabilität, ohne die es schwer möglich wäre, die Proben in Luft zu präparieren. Untersuchungen zur Oxidation nach der Entfernung des Oxids mit HF-haltigen Ätzlösungen zeigen zum Teil widersprüchliche Ergebnisse über die Dauer, bis die Siliziumoberfläche an Luft mit einer Monolage Siliziumoxid bedeckt ist. Während bei (111) Si Oberflächen von Zeiten bis 800 h berichtet wird [Neuwald92] werden Werte für (100) Oberflächen von etwa 1 Stunde [Morita89] und 7 Tagen [Gräf90] angegeben. Daß schon eine anfängliche Oxidschicht von 0.2 – 0.4 nm existiert, führt Morita auf das 10-minütige Spülen mit hochreinem Wasser zurück. Auch wird dort auf den Einfluß der Luftfeuchtigkeit auf die Wachstumsgeschwindigkeit einer Oxidschicht hingewiesen. Die Dauer von mindestens 1 h bis zur merklichen Oxidierung ist jedoch auch im ungünstigen Fall ausreichend, um die Wafer nach dem Ätzen zur a-Si:H-Deposition in die Vakuumkammer zu transferieren, was höchstens wenige Minuten erfordert.

Ein Problem ist das Ätzen von Wafern, die schon einen Aluminium Rückkontakt besitzen. Dieser Rückkontakt wird von der Flußsäure angegriffen und führt zur Verunreinigung der Lösung und zu möglichen Ablagerungen auf der Oberfläche. Um starke Schwankungen der Diodeneigenschaften von Probe zu Probe zu vermeiden, wurde als Schutzschicht die Rückseite mit Gold bedampft, das in HF chemisch stabil ist. Auch Borchert und Grabosch [Borchert98] stellen fest, daß Solarzellen, deren Rückkontakt erst nach Deposition der amorphen Schicht aufgebracht wird, höhere Wirkungsgrade besitzen als bei Ätzen der Oberfläche bei schon vorhandenem Rückkontakt, und führen dies auf mögliche Rückstände des Metalls auf der Waferoberfläche zurück. Besonders der Füllfaktor der Solarzellen wird dadurch massiv (von 70 auf 41%) reduziert.

Die hier vorgestellten Proben wurden mit einer gepufferten $\text{NH}_4\text{F}:\text{HF}$ (7:1) Lösung geätzt, bis die Oberflächen hydrophob wurden. Die Ätzzeit ist bei den thermisch oxidierten (n)-Si Wafern mit 5 nm Oxiddicken gut reproduzierbar (ca. 10s), während sie bei den (p)-Si Wafern mit natürlichem Oxid teils unterschiedlich lang war. Die Proben wurden anschließend einige Sekunden in destilliertem Wasser gespült und mit einer Stickstoffpistole trocken geblasen.

A.3 Deposition von amorphem Silizium

Die Deposition von amorphem Silizium erfolgte durch plasmaunterstützte chemische Gasphasenabscheidung in einer Gleichstromanlage (DC-PECVD). Die Dotierung durch Zugabe von Phosphin (PH₃) wurde für möglichst hohe spezifische Leitfähigkeit optimiert. Für n- und p- dotiertes a-Si:H ergaben sich Leitfähigkeiten (bei ca. 1 μm dicken a-Si:H Schichten) von bis zu $9 \times 10^{-3} \Omega^{-1} \text{cm}^{-1}$ und $1.5 \times 10^{-4} \Omega^{-1} \text{cm}^{-1}$, was Fermienergie von ca. 0.25 eV unter der Leitungsbandkante bzw. 0.35 eV über der Valenzbandkante entspricht [Fuhs92]. Bei undotiertem a-Si:H liegen die Fermienergie bei etwa 0.6-0.65 eV unter der Leitungsbandkante.

Die Defektdichten und Urbachenergie der intrinsischen a-Si Filme wurden durch CPM-Messungen (Constant-Photocurrent-Method) als $2 \times 10^{16} \text{cm}^{-3}$ und 52 meV bestimmt. Für n⁺-dotiertes a-Si:H lagen die Defektdichten bei 10^{19}cm^{-3} und die Urbachenergie bei ca. 200 meV. Diese Werte wurden auch in der Simulation verwendet.

Tabelle A.1: Parameter für die a-Si:H Beschichtung mit der PECVD Anlage

Restgasdruck vor der Beschichtung	$\sim 10^{-6}$ mbar
Gasfluß SiH ₄	10 sccm
Gasfluß (5% PH ₃ in H ₂)	5 sccm bei n-Dotierung
Gasfluß (3% B ₂ H ₆ in H ₂)	5 sccm bei p-Dotierung
Gasdruck während Deposition	0.25 mbar
Substrattemperatur	250 °C
El. Leistungsdichte	30-100 mW/cm ²

Zur Messung der Schichtdicken wurden a-Si:H Filme jeweils parallel zur Deposition auf c-Si auf Glassubstraten abgeschieden, an denen die Schichtdicke aus spektral abhängigen Transmissionsmessungen durch Interferenzanalyse bestimmt wurde. Wie in Abbildung A.1 gezeigt ist, ist der Zusammenhang zwischen Schichtdicke und Depositionszeit auch für sehr geringe Schichtdicken (bis 9 nm gemessen) linear. Die Abweichungen vom Mittelwert liegen im Bereich bis ca. 15%.

Schichtdickenmessungen von a-Si Filmen auf c-Si durch Reflexionsmessungen waren nicht möglich. Wegen zu geringem Unterschied der Brechungsindizes der beiden Materialien ergaben sich keine auswertbaren Interferenzmuster. Direkte mechanische Messungen (Dek-

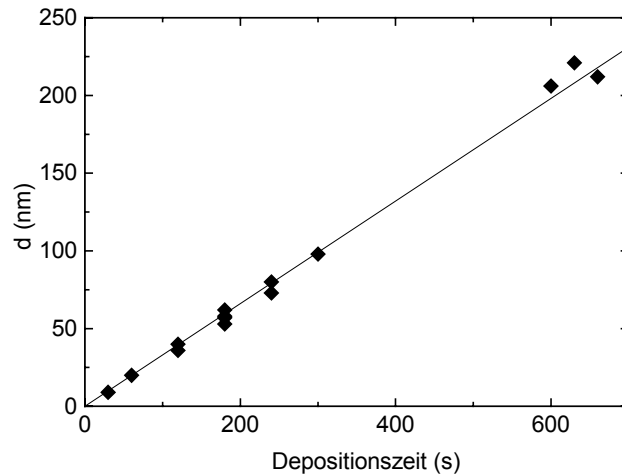


Abb. A.1: Schichtdicken von dünnen (n^+)-a-Si:H Filmen auf Glassubstrat in Abhängigkeit der Depositionszeit.

tak Schichtdicken Messgerät) waren ebenfalls schwierig, weil dafür eine Stufe am Schicht-
rand benötigt wird. Da die a-Si:H Schicht am Rand jedoch in einem Bereich von ca. 0.5 mm
allmählich dicker wird (Einfluß der Maske auf das Potential während der Deposition), ist
auch die mechanische Messung stark fehlerbehaftet. Die AFM-Messungen an Heterodioden
zeigten um einen Faktor 0.45-0.55 geringere Schichtdicken als die Transmissionsauswertun-
gen an gleichzeitig auf Glassubstrat deponierten a-Si:H Filme. Die gleiche Aussage erhält
man aus der Auswertung der geometrischen Kapazität von (n)-a-Si/(p)-c-Si Heterodioden bei
tiefen Temperaturen, aus der ebenfalls die Schichtdicke einiger Proben bestimmt wurde. Die-
ser Faktor 2 in der Schichtdicke wird bei der Dickenangabe der a-Si:H Schichten der Hetero-
dioden berücksichtigt.

Anhang B

Numerische Lösung der physikalischen Gleichungen

Die numerische eindimensionale Lösung der Halbleitergleichungen erfordert mehrere Schritte. Zum einen muß die Halbleiterstruktur räumlich diskretisiert werden. Dann müssen die physikalischen Gleichungen auf diese diskreten Gitterpunkte bezogen werden. Schließlich muß das Gleichungssystem gelöst werden. Dies kann sowohl eine stationäre als auch eine transiente Lösung sein.

Vor einer transienten oder stationären Berechnung unter Beleuchtung oder außen angelegten Spannung werden zuerst die Gleichungen für eine Halbleiterstruktur im thermischen Gleichgewicht gelöst. Dies ist eine wesentliche Vereinfachung, da alle zu berechnenden Größen durch die Potentialverteilung ausgedrückt werden können. Es muß also nur das elektrostatische Potential an allen Gitterpunkten gelöst werden. Die gefundene Lösung dient dann als Ausgangspunkt für weitere Berechnungen unter Beleuchtung oder angelegter Spannung.

B.1 Skalierung

Für die numerische Lösung der Gleichungen ist es vorteilhaft, wenn die Variablen etwa die gleiche Größenordnung besitzen, um numerische Auslöschungen zu vermeiden. Dies ist für die Ladungsdichten nicht möglich, da sowohl die Zustandsdichte einen exponentiellen Zusammenhang mit der Energie hat, als auch die Ladungsträgerdichten exponentiell vom Abstand des Ferminiveaus zu den besetzten Zuständen abhängen. Das Potential kann jedoch durch eine geeignete Skalierung in eine ähnliche Größenordnung wie die freien Ladungsträ-

gerdichten im neutralen Halbleiter gebracht werden. Ebenfalls skaliert werden Ort, Zeit, Beweglichkeiten und Diffusionskonstanten, Einfang- und Emissionskonstanten, Stromdichten und Generationsraten. Damit tauchen in der Poissongleichung und den Kontinuitätsgleichungen physikalische Größen auf, die Werte etwa in der Größenordnung Eins haben. Die in der Tabelle B.1 aufgelisteten Skalierungsfaktoren sind aus der Literatur [Selberherr1984] entnommen.

Tabelle B.1: Skalierungsfaktoren für physikalische Größen

Physikalische Größe	Skalierungsfaktor
Ort x	L (Länge der Struktur)
Energie E	kT
Potential Ψ	kT/e
Ladungsdichten n, p, n_t^+, DB^+, \dots	$Q_{dot,max}$ (höchste Dotierdichte)
Diffusionskonst. D	D_{max} (höchste Diffusionskonst.)
Beweglichkeit μ	eD_{max}/kT
Einfangkoeff. C	$D_{max}/(Q_{dot,max} L^2)$
Generationsrate G	$D_{max} Q_{dot,max}/L^2$
Zeit t	L^2/D_{max}

B.2 Räumliche Diskretisierung

Um die physikalischen Gleichungen numerisch zu lösen, wird die Halbleiterstruktur zuerst örtlich in Gitterpunkte aufgeteilt. Dies kann mit variablem Gitterabstand erfolgen und zwar ist es vorteilhaft, den Gitterabstand an Orten, an denen ein großer Potentialunterschied und damit deutlich unterschiedliche Ladungsträgerdichten zu erwarten sind, kleiner zu wählen. Vor allem an Rändern und Schichtgrenzen zwischen unterschiedlichen Halbleitern ist dies

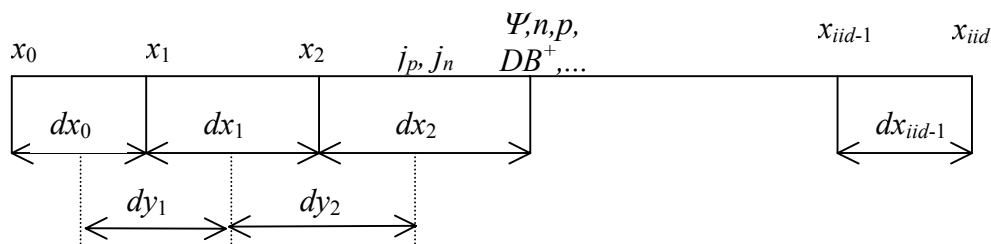


Abbildung B.1: Räumliche Diskretisierung der Halbleiterstruktur

sinnvoll. Das Bauelement wird in iid Gitterpunkte $x(i)$ ($i=0,1,\dots,iid$) aufgeteilt, die unterschiedlichen Abstände der Gitterpunkte werden mit $dx(i)$ bezeichnet, auf jeden Gitterpunkt $x(i)$ entfällt dann eine räumliche Breite $dy(i)$. An jedem Gitterpunkt werden das Potential, die freien Ladungsträgerdichten und die geladenen Defektzustände bestimmt, während die Stromdichten zwischen den Gitterpunkten definiert sind.

Ableitungen werden in der Simulation durch Differenzenquotienten angenähert. Dabei müssen die unterschiedlichen Abstände berücksichtigt werden. Damit erhält man die Poissongleichung als

$$\mathcal{G} \left(\frac{\Psi_{i+1} - \Psi_i}{dx_i dy_i} - \frac{\Psi_i - \Psi_{i-1}}{dx_{i-1} dy_i} \right) + p_{id} - n_{id} + Q_{dot,id} + \sum_{NDB} (DB_i^+ - DB_i^-) + \sum_{Ntail} (pt_i^+ - nt_i^-) = 0 \quad (\text{B.1})$$

wobei die Ladung aus freien Ladungsträgern und Ladungen in Defektzuständen und der Dotierladung besteht. Die Konstante \mathcal{G} ergibt sich aus der Skalierung durch $kT\varepsilon_r\varepsilon_0/e^2L^2Q_{max}$. Da die Stromdichten zwischen den Gitterpunkten definiert sind, werden die Dichten der freien Ladungsträger an dieser Stelle durch das arithmetische Mittel der Ladungsträgerdichten an den benachbarten Gitterplätzen angenähert.

$$j_{n,i} = D_n \frac{n_{i+1} - n_i}{dx_i} - \mu_n \frac{n_{i+1} + n_i}{2} \frac{\Psi_{i+1} - \Psi_i}{dx_i} \quad (\text{B.2})$$

$$j_{p,i} = -D_p \frac{p_{i+1} - p_i}{dx_i} - \mu_p \frac{p_{i+1} + p_i}{2} \frac{\Psi_{i+1} - \Psi_i}{dx_i} \quad (\text{B.3})$$

Verwendet man diese Stromgleichungen, kann es zu numerischen Instabilitäten kommen, wenn die Potentialdifferenz $2kT/e$ übersteigt [Scharfetter69]. Deshalb werden die Differentialgleichungen für die Stromdichten analytisch gelöst, wobei das elektrische Feld zwischen den Gitterpunkten konstant angenommen wird. Man erhält daraus einen Ausdruck für die Stromdichten von

$$j_{n,i} = \frac{D_n}{dx_i} [n_{i+1} B(\Psi_{i+1} - \Psi_i) - n_i B(\Psi_i - \Psi_{i+1})] \quad (\text{B.4})$$

$$j_{p,i} = \frac{D_p}{dx_i} [p_i B(\Psi_{i+1} - \Psi_i) - p_{i+1} B(\Psi_i - \Psi_{i+1})] \quad (\text{B.5})$$

mit der Bernoulli-Funktion $B(x)$ die durch

$$B(z) = \frac{z}{e^z - 1} \quad (\text{B.6})$$

gegeben ist. Die direkte Verwendung dieser Beziehung führt jedoch zu numerischen Fehlern und ist für $z=0$, d.h. im feldfreien Fall, nicht definiert. Selberherr [Selberherr84] ersetzt des-

halb die Bernoulli-Funktion in verschiedenen Teilbereichen durch verschiedene Näherungen (siehe auch [Cordes98]). Diese Methode wird in dem in dieser Arbeit verwendeten Simulationsprogramm benützt.

An Halbleitergrenzflächen werden die Stromdichten jedoch nicht durch Drift- und Diffusionsstrom beschrieben, sondern durch thermionische Emission. Zwischen diesen Gitterpunkten wird deshalb nicht die Methode von Selberherr angewendet sondern die Stromdichte direkt durch thermionische Emission berechnet, wobei sich der Gitterpunkt i auf der Grenzfläche befindet, der Gitterpunkt selbst jedoch noch der linken Schicht mit den jeweiligen Halbleiterparametern zugeordnet wird (siehe Abbildung B.2). Die Variablen der Schicht rechts vom Übergang am Gitterpunkt i werden aus den Variablen am nächsten Gitterpunkt $i+1$ extrapoliert. Die energetische Position des Leitungsbandmaximums bzw. Valenzbandminimums ist dabei durch das Potential am Halbleiterübergang bestimmt. Der Nullpunkt des Potentials wird am linken Rand der Halbleiterstruktur bei $x=0$ festgelegt. Der Verlauf des Leitungsbandes und des Valenzbands am Gitterpunkt i in der l -ten Halbleiterschicht ist dann gegeben durch

$$E_{v,i} = -\Psi_i + \Delta E_v(l) \quad (\text{B.7})$$

$$E_{c,i} = E_g(1) - \Psi_i + \Delta E_c(l) \quad (\text{B.8})$$

wobei sich der Leitungsbandsprung und Valenzbandsprung der l -ten Schicht auf die erste Schicht am linken Rand ($x=0$) beziehen. Die Barriere am Heteroübergang der Schichten l und $l+1$ wird definiert als

$$E_{c,\max} = \max\{E_{c,i}, E_{c,i} + \Delta E_c(l+1) - \Delta E_c(l)\} \quad (\text{B.9})$$

$$E_{v,\min} = \min\{E_{v,i}, E_{v,i} + \Delta E_v(l+1) - \Delta E_v(l)\} \quad (\text{B.10})$$

Dadurch wird festgelegt, ob die Barriere zur rechten oder linken Schicht zählt. Die Quasiferminiveaus E_{fn} und E_{fp} werden aus den Dichten der freien Ladungsträger bestimmt. Dies muß an beiden Seiten der Grenzfläche mit den jeweiligen Halbleiterparametern geschehen.

$$E_{fn,i} = E_{c,i} + \ln\left(\frac{n_i}{N_c(l)}\right) \quad (\text{B.11})$$

$$E_{fp,i} = E_{v,i} - \ln\left(\frac{p_i}{N_v(l)}\right) \quad (\text{B.12})$$

Am rechten Rand des Übergangs erhält man die Ladungsträgerdichten aus den Dichten am Gitterpunkt $i+1$ durch Extrapolation mit Hilfe der bekannten Potentialdifferenz $\Psi_{i+1}-\Psi_i$. Für

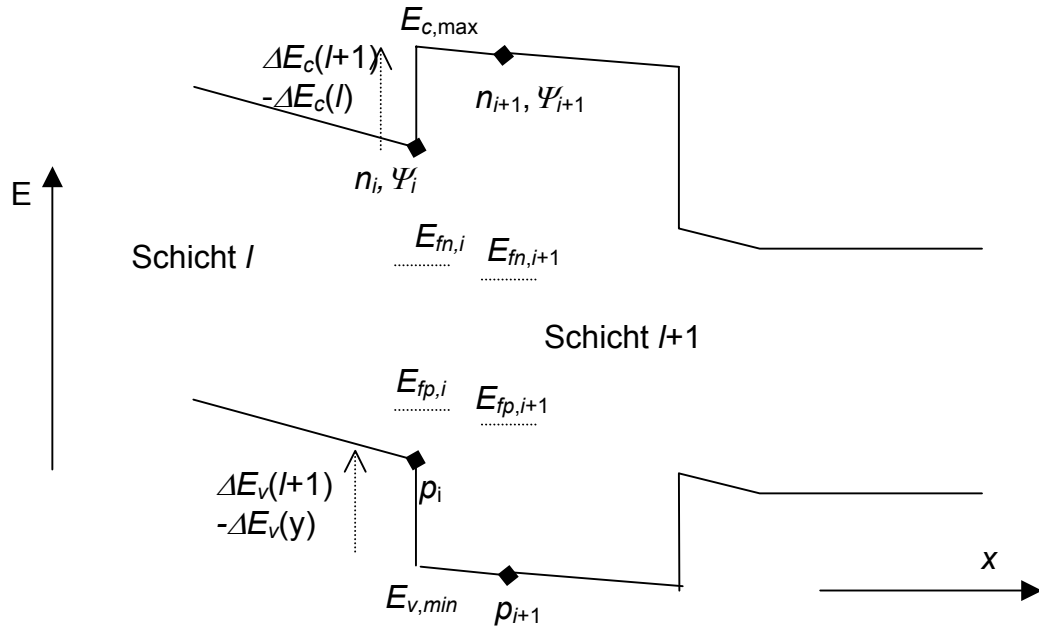


Abb. B.2: Gitterpunkte am Heteroübergang für thermionische Emission

die thermionische Stromdichte für Elektronen und Löcher am Heteroübergang erhält man durch Einsetzen der Quasiferminiveaus und der Bandkanten am Grenzübergang in Gleichung 3.27, bzw. 3.28

$$j_{n,i} = -A_n * T^2 \left[\exp(\Delta E_c(l) - E_{c,max}) \frac{n_i}{N_c(l)} - \exp(\Delta E_c(l+1) - E_{c,max}) \frac{n_{i+1} \exp(-\Psi_{i+1} + \Psi_i)}{N_c(l+1)} \right] \quad (\text{B.13})$$

$$j_{p,i} = A_p * T^2 \left[\exp(E_{v,min} - \Delta E_v(l)) \frac{p_i}{N_v(l)} - \exp(E_{v,min} - \Delta E_v(l+1)) \frac{p_{i+1} \exp(\Psi_{i+1} - \Psi_i)}{N_v(l+1)} \right] \quad (\text{B.14})$$

Die diskretisierten Kontinuitätsgleichungen lauten mit den so berechneten Stromdichten

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = \frac{j_{n,i} - j_{n,i-1}}{dy_i} - R_{n,i} + G_{n,i} \quad (\text{B.15})$$

$$\frac{\partial p_i}{\partial t} = -\frac{j_{p,i} - j_{p,i-1}}{dy_i} - R_{p,i} + G_{p,i} \quad (\text{B.16})$$

Zusammen mit den (schon diskretisierten) Ratengleichungen für Emission und Einfang von freien Ladungsträgern geben die Kontinuitätsgleichungen explizit die Zeitabhängigkeit der

einzelnen Variablen an, die zur Berechnung außerhalb des thermischen Gleichgewichts benötigt werden.

B.3 Numerische Lösung im thermischen Gleichgewicht

Im thermischen Gleichgewicht, d.h. ohne Beleuchtung und ohne angelegte Spannung ist das System allein durch die Potentialverteilung festgelegt. Man benötigt weder die zeitabhängigen Gleichungen für den Transport noch die Kontinuitätsgleichungen. Die Besetzung der Zustände mit Ladungsträgern ist durch die Fermiverteilungsfunktion für freie Ladungsträger in den Bändern sowie in den Bandausläufern festgelegt und die Ladung der Dangling Bonds ist durch die in den Gleichungen 3.12 bis 3.15 in Kap. 3 vorgestellte Besetzungsfunktion bestimmt. Das Ferminiveau ist im thermischen Gleichgewicht über den ganzen Halbleiter konstant. Die energetische Position der Zustände und damit die Ladung $\rho(x_i)$ hängt vom Potential am jeweiligen Ort ab.

Um die ganze Struktur im thermischen Gleichgewicht zu berechnen, muß also das Potential $\Psi=(\Psi_0, \Psi_1, \dots, \Psi_{iid})$ an jedem Gitterpunkt so gelöst werden, daß die Poissongleichung erfüllt ist. Eine Bedingung für die Potentialverteilung ist durch das eingebaute Potential V_{bi} gegeben, das nur vom Unterschied der Ferminiveaus und von Bandkantensprüngen der ersten und der letzten Halbleiterschicht abhängt. Als Bezugsniveau für die Energien wird die Energie der Valenzbandkante und das elektrische Potential am linken Rand zu Null gesetzt.

$$U_{bi} = (E_f - E_v)_{links} - (E_f - E_v)_{rechts} + \Delta E_{vlinks} - \Delta E_{vrechts} \quad (\text{B.16})$$

Die Potentiale am linken und rechten Rand sind damit gegeben durch

$$\Psi_0 = 0, \Psi_{iid} = U_{bi} \quad (\text{B.17})$$

Zur Lösung mit Hilfe eines mehrdimensionalen Newton-Verfahrens, dem Newton-Raphson-Verfahren führt man eine Funktion $g(\Psi)$ ein, die aus der Poissongleichung stammt.

$$g_i(\Psi_i) = \frac{\partial^2 \Psi_i}{\partial x^2} + \frac{\rho(\Psi_i, x_i)}{\epsilon_r \epsilon_0} \quad (\text{B.18})$$

Gesucht ist nun die Nullstelle des Vektors $g(\Psi)=(g_0, g_1, g_2, \dots, g_{iid})$, womit die Poissongleichung an allen Orten $i=0,1,\dots,iid$ erfüllt ist. Durch Linearisierung der Funktion $g(\Psi)$ erhält man

$$0 = \bar{g}(\bar{\Psi}) + \frac{\partial \bar{g}}{\partial \bar{\Psi}} d\bar{\Psi} + \dots \quad (\text{B.19})$$

Diese mehrdimensionale algebraische Gleichung ist nach $d\Psi$ aufzulösen. Die Jacobimatrix $dg/d\Psi$ kann durch Differenzenquotienten angenähert werden. Da die Gleichungen für g aus Besetzungsfunktionen jedoch bekannt sind, werden die Ableitungen nach den Potentialen hier analytisch berechnet. Dies erhöht die Genauigkeit der gewonnenen Lösung und beschleunigt das Lösungsverfahren. Die mehrdimensionale algebraische Gleichung für $d\Psi$ lautet umgestellt

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial g_0}{\partial \Psi_0} & \frac{\partial g_0}{\partial \Psi_1} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\partial g_1}{\partial \Psi_0} & \frac{\partial g_1}{\partial \Psi_1} & . & 0 & 0 \\ 0 & . & . & . & 0 \\ 0 & 0 & . & . & . \\ 0 & 0 & 0 & . & \frac{\partial g_{iid}}{\partial \Psi_{iid}} \end{bmatrix} d\bar{\Psi} = -\bar{g}(\bar{\Psi}) \quad (\text{B.20})$$

Die Lösung der Gleichung nach $d\Psi$ erfolgt durch die sogenannte L-R Zerlegung (Links-Rechts Zerlegung; die Darstellung der Matrix durch eine Multiplikation einer linken, unteren und einer rechten, oberen Dreiecksmatrix). Da wegen der zweiten Ableitung des Potentials die Funktion g jeweils nur von den nächsten Nachbarn abhängt, hat die Jacobimatrix Bandform mit einer Zeile unterhalb und oberhalb der Diagonalen. Somit benötigt man weniger Speicherplatz und erniedrigt die Rechenzeit, wenn man spezielle Lösungsverfahren für Bandmatrizen verwendet. Das hier verwendete Newtonverfahren wurde in leicht modifizierter Form aus den Numerical Recipies übernommen [Press88].

Iterativ erhält man aus dem Startwert Ψ eine Korrektur $\Delta\Psi$. Der neue Wert $\Psi + \Delta\Psi$ stellt eine bessere Näherung der Nullstelle dar. Als Startwert für die Potentialverteilung wird ein linearer Ansatz von 0 zu U_{bi} gemacht. Die Iteration wird durchgeführt, bis der Fehler in der Poissongleichung, der durch die Norm des Vektors g ausgedrückt wird, genügend klein ist.

B.4 Transiente Lösung

Wird das Halbleitersystem aus dem thermischen Gleichgewicht gestört, so kann der zeitliche Verlauf des Systems aus den vorgestellten Gleichungen zeitabhängig berechnet werden. Für die transiente Rechnung wird das frei zugängliche Programmpaket LSODI (livermore solver for ordinary differential equations, implicit form) von J. Painter und A. C. Hindmarsh [Hindmarsh83] verwendet, das dieses Gleichungssystem implizit löst. Dieses Programm setzt

voraus, daß zum Zeitpunkt $t=0$ die physikalischen Gleichungen erfüllt sind. Dies ist z.B. der Fall, wenn man die Lösung im thermischen Gleichgewicht oder eine Lösung der physikalischen Gleichungen im Nichtgleichgewicht als Startpunkt verwendet. Im weiteren wird kurz beschrieben, wie die zeitabhängigen Gleichungen aufbereitet werden müssen, damit sie von LSODI verwendet werden können. Eine ausführliche Beschreibung des Programmpakets LSODI selbst wird in [Hindmarsh83] oder auch in den Quelltexten der Programme gegeben. LSODI löst ein System von Differentialgleichungen erster Ordnung der Form

$$A(t, \bar{y}) \frac{d\bar{y}}{dt} = \bar{g}(t, \bar{y}) \quad (\text{B.21})$$

wobei $A(t, \bar{y})$ eine Matrix ist. Die Größe $\bar{y}(t)$ stellt hier die physikalischen Variablen der Halbleiterstruktur dar. Die Halbleiterstruktur wird an jedem Gitterpunkt i durch das elektrostatische Potential, die Dichten der freien Ladungsträger, und die geladenen Defektzustände bestimmt. Der Variablenvektor y hat damit die folgende Form:

$$\bar{y} = \left(\begin{array}{c} (\Psi, n, p, n_{t1}, \dots, n_{tN}, p_{t1}, \dots, p_{tN}, d_{+1}, \dots, d_{+Nd}, d_{-1}, \dots, d_{-Nd})_1, \dots, \dots, \dots \\ \dots, \dots, (\Psi, n, p, n_{t1}, \dots, n_{tN}, p_{t1}, \dots, p_{tN}, d_{+1}, \dots, d_{+Nd}, d_{-1}, \dots, d_{-Nd})_{id} \end{array} \right) \quad (\text{B.22})$$

Für die Zeitabhängigkeit des Variablenvektors y werden die Kontinuitätsgleichungen und die Emissions- und Einfangsrate für die Defektzustände in die von LSODI benötigte Form der Matrix $A(y, t)$ und des Vektors $g(y, t)$ gebracht. Bei dem hier vorliegenden Gleichungssystem vereinfacht sich die Matrix A sehr, da die zeitlichen Ableitungen der Variablen y_i weder einen explizit von der Zeit noch einen von den Variablen y_k selbst abhängigen Faktor haben. Die Elemente der Matrix A sind deshalb nur Null oder Eins. Auch die Poissongleichung kann in die Form der Gleichung B.21 gebracht werden. Dazu wird an der Position des Vektors $g(y, t)$, der dem Potential am Gitterpunkt i entspricht, die Poissongleichung in der impliziten Form wie bei der Lösung im thermischen Gleichgewicht in den Vektor $g(y, t)$ geschrieben. Das dazugehörige Element der Matrix A_{ij} dazu ist Null, da es keine explizite zeitliche Ableitung der Größe Ψ_i gibt.

$$0 \times \frac{dy_i}{dt} = \frac{\partial^2 y_i}{\partial x^2} - \frac{\rho(\bar{y})}{\epsilon \epsilon_0} \quad (\text{B.23})$$

Die Poissongleichung wird dadurch simultan mit den anderen Gleichungen gelöst.

Der Startwert $y(t=0)$, der die physikalischen Gleichungen erfüllen muß, ist durch eine vorher berechnete Lösung vorgegeben. Durch Einschalten von Licht oder durch Anlegen einer Spannung wird das System aus dem bisherigen Zustand verändert. Die zeitliche Änderung des Variablenvektors y wird dann von LSODI berechnet. Die zeitliche Diskretisierung wird

von LSODI selbst ausgeführt. Die Zeitschritte werden dabei so gewählt, daß der abgeschätzte Fehler für die Variablen $y_i(t)$ unterhalb einer vorgegebenen Toleranz bleibt. Für jeden Zeitschritt wird eine neue Lösung des Variablenvektors y ermittelt.

Es muß ferner berücksichtigt werden, daß sich die Randbedingungen für das elektrostatische Potential verändern, wenn die außen anliegende Spannung verändert wird. Wird z.B. an einen Halbleiter im thermischen Gleichgewicht eine Spannung U zum Zeitpunkt $t=0$ angelegt, so verändert sich die Potentialverteilung $\Psi(t<0)$ um eine lineare Überlagerung durch das äußere Potential auf

$$\Psi(x, t = 0) = \Psi(x, t < 0) + \frac{U}{L}x \quad (\text{B.24})$$

Daß sich eine neue Potentialverteilung höchstens mit Lichtgeschwindigkeit ausbreitet, wird nicht berücksichtigt (In einer realistischen Messung läßt sich auch die außen angelegte Spannung nicht instantan verändern).

Wird bei $t=0$ die Bestrahlung verändert, so bleiben die Randbedingungen konstant. Einzig die Generationsraten für freie Ladungsträger im gesamten Halbleiter werden dadurch beeinflußt.

B.5 Stationäre Lösung

Will man unter gegebenen Rahmenbedingungen eine stationäre Lösung des Gleichungssystems ermitteln, z.B. für Strom–Spannungskennlinien, so wäre es sehr umständlich, wenn man die Rechnung transient bis zu sehr langen Zeiten durchführen würde. Dasselbe Gleichungssystem mit den gleichen Randbedingungen, das zeitabhängig gelöst wird, kann auch dazu benützt werden, um eine stationäre Lösung zu berechnen. Dafür ist keine Diskretisierung in der Zeit notwendig, sondern man sucht nach einer Lösung, bei der die zeitliche Ableitung aller Variablen Null wird. Gesucht ist also der Variablenvektor y , so daß

$$\dot{\bar{y}} \equiv 0 \quad (\text{B.25})$$

Die Lösung wird analog zur Lösung im thermischen Gleichgewicht ermittelt. Mit dem Newton-Raphson-Verfahren wird die Nullstelle der zeitlichen Ableitung dy/dt bestimmt. Dies führt auf das Gleichungssystem

$$0 = \dot{\bar{y}} + \frac{\partial \dot{\bar{y}}}{\partial \bar{y}} d\bar{y} \quad (\text{B.26})$$

Aus einem Startwert y_0 wird damit eine Korrektur dy berechnet. Dies wird so lange ite-

riert, bis dy/dt hinreichend klein ist. Die Wahl der tolerierten Abweichung von ist dabei nicht trivial. Sie wurde für verschiedene Halbleiterstrukturen unter verschiedenen äußeren Bedingungen wie Temperatur und Beleuchtungssituation interaktiv ermittelt. Auch die Gewichtung der einzelnen Fehler der unterschiedlichen Variablen ist nicht einfach. Eine wichtige Rolle spielt dabei die Skalierung, wodurch die numerischen Werte für Potential und Ladungsträgerdichten angeglichen wird. Sind alle Werte y_j etwa in der gleichen Größenordnung, so können alle Gewichte eins gewählt werden. Hier wurde für die Wahl der einzelnen Gewichte und der Toleranzen eine Mischung aus absoluten und relativen Werten gewählt, die aus Teilprogrammen von LSODI stammen.

Es ist sinnvoll, als Startwert eine Lösung der Variablen y zu verwenden, die unter ähnlichen Randbedingungen gewonnen wurde. Dadurch wird die benötigte Anzahl der Iterationsschritte wesentlich verringert. Dies ist wichtig, da der Rechenaufwand gegenüber der Lösung im thermischen Gleichgewicht wesentlich höher ist. Hier werden nicht nur das Potential, sondern auch alle anderen Variablen simultan gelöst.

Für eine Simulation mit 200 Gitterpunkten und jeweils 15 Niveaus in den beiden Bandausläufern und den Dangling Bonds ergeben sich 200 mal 48 Variablen (Potential, Dichten freier Ladungsträger und geladene Defektniveaus). Dies ist auch die Dimension der Jacobimatrix $d(dy/dt)/dy$. Da jedoch bei den hier verwendeten Ladungsträgertransportmodellen der Strom nur von den nächsten Nachbarn abhängt, reduziert sich die Matrix auf eine Bandmatrix mit der Breite 3 mal Anzahl der Variablen pro Gitterpunkt (im Bsp. 3 mal 48). Zur Lösung der Gleichung B.26 nach dy wird deshalb auch hier wieder eine Lösungsroutine in Bandform verwendet, um die Rechenzeit und den benötigten Speicherplatz zu minimieren.

Diese schmale Bandform ist nicht mehr gegeben, wenn der Strom an einem Gitterpunkt nicht nur von den nächsten sondern von mehreren Gitterpunkten in der Nähe abhängt. Dies ist bei Tunnelströmen der Fall. Besonders beim Tunneln an Halbleitergrenzflächen, wo die Gitterabstände besonders klein gewählt werden, um große Potentialunterschiede zu vermeiden, muß man die Abhängigkeit von vielen Gitterpunkten berücksichtigen.

Anhang C

Simulationsparameter

Die in der Simulation verwendeten Parameter für n-typ dotiertes und intrinsisches amorphes Silizium und für p-typ kristallines Silizium sind in Tabelle C.1 aufgeführt. Die Aufteilung der Bandlückensprünge auf Valenz- und Leitungsband wurden in den Simulationsrechnungen zum Teil variiert und werden jeweils bei den Ergebnissen angegeben.

Tab. C.1: Simulationsparameter

Parameter	(n ⁺)-a-Si:H	(i)-a-Si:H	(p)-c-Si
E_{gap} (eV)	1.7	1.75	1.12
N_c, N_v (cm ⁻³)	10 ²⁰ 10 ²⁰	10 ²⁰ 10 ²⁰	2.8×10 ¹⁹ 1.04×10 ¹⁹
Charakteristische Energie der Bandausläufer E_c, E_v (eV)	0.12 0.20	0.03 0.05	0 0
Defektdichte (cm ⁻³)	10 ¹⁹	10 ¹⁶	10 ¹²
μ_n, μ_p (cm ² V ⁻¹ s ⁻¹)	10 1	10 1	900 300
Dotierung (cm ⁻³)	6.8×10 ¹⁹	5.0×10 ¹⁵ (n)	3×10 ¹⁶
Rel. Dielekt. Suszept. ϵ_r	11.7	11.7	11.7
$E_{Defekt}, \sigma_E, U_{corr}$ (eV)	0.9 0.2 0.2	0.9 0.2 0.2	0.55 0.2 0.9
Einfangkoeff, Def.	5×10 ⁻⁸ 5×10 ⁻⁹	5×10 ⁻⁸ 5×10 ⁻⁹	5×10 ⁻⁸ 5×10 ⁻⁹
$C_{np}, C_{nn}, C_{pn}, C_{pm}$	5×10 ⁻⁸ 5×10 ⁻⁹	5×10 ⁻⁸ 5×10 ⁻⁹	5×10 ⁻⁸ 5×10 ⁻⁹
Einfangkoeff für Bandausläufer	10 ⁻⁹	10 ⁻⁹	(10 ⁻⁹)

Die Bandlücken, effektiven Zustandsdichten N_c und N_v , die Beweglichkeiten bei der Dotierung $3 \times 10^{16} \text{cm}^{-3}$ für kristallines Silizium wurde aus Sze [Sze81] entnommen. Die relative dielektrische Suszeptibilität für a-Si:H und c-Si stammen von Shur [Shur90]. Die Bandlücken für amorphes Silizium wurden nach der Methode von Tauc [Tauc74] an eigenen Proben aus optischen Transmissionsmessungen bestimmt. Während sich daraus für (i)-a-Si:H ein Werte von 1.75 eV ergibt, lassen sich die Transmissionspektren für (n⁺)-a-Si:H nicht gut nach Tauc auswerten. Die ermittelten Tauc Bandlücken schwanken von Probe zu Probe und zeigen bis zu 0.15 eV kleinere Werte. Die Beweglichkeiten für amorphes Silizium werden im Bereich angenommen, der von Tiedje und anderen ermittelt wurde [Tiedje81]. Die effektiven Zustandsdichten in a-Si:H wurden einer Zustandsdichte von $4 \times 10^{21} \text{cm}^{-1} \text{eV}^{-1}$ entsprechend angesetzt unter der Annahme, daß der Großteil der Ladungsträger sich in einem Energieintervall von $2kT$ nahe der Bandkante befindet. Die Einfangkoeffizienten für a-Si:H sind den Simulationsrechnungen der Dissertation von Brüggemann [Brüggemann93] entnommen. Sie liegen zwischen den experimentell durch Time-of-Flight Messungen von Stutzmann [Stutzmann85] und Street [Street84] ermittelten Werten für Einfangquerschnitte. Da die Einfangkoeffizienten für c-Si sehr stark von der Art der Defekte abhängt, wurden zur Vereinfachung dieselben Werte wie für a-Si:H angewendet. Später wurde dann die Defektdichte im kristallinen Silizium so angepaßt, daß sich realistische Werte für die Diffusionslängen der Minoritätsladungsträger von 400 μm ergeben.

Die nicht genau bekannte Defektdichte im float zone (p)-c-Si wurde so angepaßt, daß sich aus Einfangkoeffizienten und Defektdichte typische Lebensdauern für Elektronen von 0.6 ms ergeben. Landsberg und Kousik geben dafür ca. 0.8-0.9 ms an [Landsberg84]. Die Defektdichten in a-Si:H sind typische Werte für selbst hergestellten a-Si:H Filme, die aus konstanten Photostrom Messungen (CPM) ermittelt wurden. Sie stimmen gut mit von Street [Street85, Street85b] berichteten Defektdichten von ca. $8 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ an hoch n-dotiertem a-Si:H überein. Die charakteristischen Energien des Valenzbandausläufers wurden für intrinsisches und n-dotiertes a-Si:H mit 50 und 200 meV den mit CPM an eigenen Proben gemessenen Urbachausläufern gleichgesetzt. Die charakteristische Energie des Leitungsbandausläufers für (n)-a-Si:H wurde mit 120 meV so angenommen, daß das Verhältnis zwischen Leitungs- und Valenzbandausläufer dem für (i)-a-Si:H von 30meV zu 50meV entspricht. Die Dotierung des amorphen Siliziums wurde aus der Simulation durch Versuch so ermittelt, daß sich typische Werte für die Fermi-niveaus von 0.25 eV bzw. 0.7 eV unter dem Leitungsband für (n)- bzw. (i)-a-Si:H ergeben. Der Wert von $7 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$ für die Donatordichte in (n)-a-Si:H ist dabei um einen Faktor 3 höher als man durch Abschätzungen bei einer Dotiereffizienz von

ca. 1% erhält, die von Stutzmann et. al [Stutzmann87] für hoch dotiertes (n)-a-Si:H angegeben wird. Bei einem Dotiergasverhältnis von 5% PH₃ ergäbe sich aus einer Atomdichte von $5 \times 10^{22} \text{cm}^{-3}$ eine effektive Dotierung von $2.5 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$. Mit dieser Dotierung und den Beweglichkeiten erhält man auch spezifische Leitfähigkeiten von ca. $10^{-2} \Omega^{-1} \text{cm}^{-1}$ (300K), wie sie von Spear und LeComber [Spear75] sowie Beyer et al. [Beyer81] berichtet werden und die auch an eigenen Proben gemessen wurden. Auch die Temperaturabhängigkeit der Leitfähigkeit für $T > 160 \text{K}$ gut mit eigenen Experimenten überein. Die energetische Position der Defekte wurde in der Bandmitte angenommen, wie für (n)-a-Si:H von Street mit einer Energie von 0.8-0.9 eV unter dem Leitungsband angegeben wird [Street91]. Die Korrelationsenergie für die Besetzung der Dangling Bonds mit zwei Elektronen wurde ein Wert von 0.2 eV angesetzt. Nach theoretischen Berechnungen ergibt sich dafür Werte zwischen 0.4 eV [Northrup89] und 0.1 eV [Bar-Yam86].

Literaturverzeichnis

- [Adler76] D. Adler, E.J. Joffa, Phys. Rev. Lett. **34**, 953 (1975)
- [Anderson62] R. Anderson, Solid State Electronics **5**, 341 (1962)
- [Angermann95] H. Angermann, K. Kliefoth, W. Füssel, H. Flietner, Microelectronic Engineering **28**, 51 (1995)
- [Angermann96] H. Angermann, Hahn Meitner Institut, Berlin, Private Mitteilung, 1996
- [Baccarani76] G. Baccarani, J. Appl. Phys. **47**, 4122 (1976)
- [Bar-Yam86] Y. Bar-Yam, J. D. Joannopoulos, Phys. Rev. Lett. **56**, 2203 (1986)
- [Bauer93] T. Bauer, Diplomarbeit, Fachbereich Elektrotechnik, Techn. Universität München (1993)
- [Beckers98] I. Beckers, N.H. Nickel, W. Pilz, W. Fuhs, Influence of hydrogen on the structural order of microcrystalline silicon during the growth process, J. of Non-Cryst. Solids **227-230**, 847-851 (1998)
- [Berz85] F. Berz, Solid State Electr. **28**, 1007 (1985)
- [Bethe42] H.A. Bethe, "Theory of the Boundary Layer of Crystal Rectifiers", MIT Radiat Lab. Rep. 43-12 (1942)
- [Beyer81] W. Beyer, H. Mell, H. Overhof, J. Physique, **42**, C4-103 (1981)
- [Blood92] P. Blood, J.W. Orton, "The Electrical Characterization of Semiconductors: Majority Carriers and Electron States", Kap.5.2.3, Academic Press, London,1992
- [Blood92b] P. Blood, J.W. Orton, "The Electrical Characterization of Semiconductors: Majority Carriers and Electron States", Kap. 6.5, Academic Press, London, 1992
- [Bogenschütz67] A.F. Bogenschütz, Ätzpraxis für Halbleiter, Kap. 5.2, Carl Hanser Verlag, München, 1967
- [Borchert97] D. Borchert, R. Hussein, G. Grabosch, W.R. Fahrner, Proceedings of the 14th European Photovoltaic Solar Energy Conference, Barcelona,1997, ed. by H.A. Ossenbrink, P. Helm, H. Ehmman, S. 590, (1997)

- [Borchert98] D. Borchert, G. Grabosch, Proc. of 2nd World Conf. On Photovoltaic Solar Energy Conversion, Vienna, ed. J. Schmidt, H.A. Ossenbrink, P.Helm, H. Ehmann, E.D. Dunlop, 1721 (1998)
- [Brendel00] K. Brendel, Diplomarbeit an der C.v.O. Universität Oldenburg, Fachbereich Physik, 2000
- [Brüggemann93] R. Brüggemann, Dissertation am Fachbereich Physik, Phillips Universität Marburg (1993)
- [Brüggemann98] R. Brüggemann, H. Cordes, K. Lips, J. Non-Cryst Solids **230**, 1173 Part B, 1998
- [Brüggemann99] R. Brüggemann, M. Rösch, J. Meyer, Solar Energy Materials & Solar Cells **57**, 303 (1999)
- [Carballes68] J.C. Carballes, J. Lebailly, Sol. St. Commun. **6**, 167, (1968)
- [Chang65] L.L. Chang, Solid State Electronics, **8**, 721 (1965)
- [Chen90] Y-W. Chen, Y-K. Fang, H-D. Lee, C-Y. Chang, Appl. Phys. Lett. **56** (11), 1034-1036, (1990)
- [Chen94] K-H.Chen, Y-K. Fang, C-R. Liu, B-C. Fang, L-C. Kuo, Jpn. J. Appl. Phys. **33**, 6466-6469, (1994)
- [Chynoweth61] A.G. Chynoweth, W.L. Feldmann, R.A. Logan, Phys. Rev., Vol. **121**, No. **3**, 684 (1961)
- [Cody80] G.D. Cody, B. Abeles, C. Wronski, C.R. Stephens, B. Brooks, Solar Cells **2**, 227 (1980)
- [Cohen82] J.D. Cohen, D.V. Lang, Phys. Rev. B **25**, 5321, (1982)
- [Cordes98] H. Cordes, Diplomarbeit, Fachbereich Physik, Carl von Ossietzky Universität Oldenburg (1997)
- [Crowell65] C.R. Crowell, Solid State Electron., **8**, 395 (1965)
- [Crowell69] C.R. Crowell, V.L. Rideout, Solid State Electronics **12**, 89 (1969)
- [Cuniot88] M. Cuniot, J. Marfaing, Phil. Mag. B **57**, 291 (1988)
- [dellaSala95] D. della Sala, P. Grillo, S. Parisi, G. Di Francia, F. Roca, Proceedings of the 13th European Photovoltaic Solar Energy Conference, Nice, ed. by W. Freiesleben, W. Palz, H.A. Ossenbrink, P. Helm, 906, (1995)
- [Eschrich93] H. Eschrich, J. Bruns, L. Elstner; C. Swiatkowski, J. Non.Cryst. Solids **166** (1993) 717
- [Essick89] J.M. Essick, J.D. Cohen, Appl. Phys. Lett. **55**, 1232-1234 (1989)
- [Essick96] J. M. Essick, Z. Nobel, Y.-M. Li, M.S. Bennett, Phys. Rev. B **54**, 4885 (1996)

- [Eschrich93] H. Eschrich, J. Bruns, L. Elstner, C. Swiatkowski, *Journal of Non-Crystalline Solids* **164-166**, 717 (1993)
- [Führer84] A. Führer, K. Heidemann, W. Nerreter, *Grundgebiete der Elektrotechnik, Band 2 : Zeitabhängige Vorgänge, Kap 10.1.3*, Carl Hanser Verlag München, Wien, 1984
- [Fuhs92] W. Fuhs, in "Amorphous & microcrystalline semiconductor devices", J. Kanicki (Editor) Vol II: Materials and device Physics, Kap. 1.2.2, Artech House, Boston, 1992
- [Gall95] S. Gall, R. Hirschauer, D. Bräunig, *Proceedings of the 13th European Photovoltaic Solar Energy Conference, Nice*, ed. by W. Freiesleben, W. Palz, H.A. Ossenbrink, P. Helm, S.1264, (1995)
- [Gall96] S. Gall, R. Hirschauer, M. Kolter, D. Bräunig, *Materials Research Society Symposium Proceedings* (1996)
- [Gall97] S. Gall, R. Hirschauer, M. Kolter, D. Bräunig, *Solar Energy Materials & Solar Cells* **49**, 157 (1997)
- [Goetzberger97] A. Goetzberger, B.Voß, J. Knobloch, „Sonnenenergie: Photovoltaik“, Teubner, Stuttgart, (1997) S. 166
- [Gräf90] D. Gräf, M. Grundner, R. Schulz, *J. Appl. Phys.* **68** (10), 5155 (1990)
- [Green02] M. A. Green, K. Emery, D. L. King, S. Igari, W. Warta, *Prog. Photovolt: Re. Appl.* **10**, 355-360 (2002)
- [Hall60] R. N. Hall, *IRE Trans. Electron Devices*, **ED-7**, 1 (1960)
- [Harth81] W. Harth, M. Claassen, *Aktive Mikrowellendioden*, Springer (1981), Berlin, Kap. 1.3.4
- [Hatanaka91] Y. Hatanaka, *Appl. Surface Science* **48/49** (1991) 457-463
- [Higashi90] G.S. Higashi, Y.J. Chabal, G.W. Trucks, K. Raghavachari, *Appl. Phys. Lett.* **56** (7), 656 (1990)
- [Higashi91] G.S. Higashi, R.S. Becker, Y.J. Chabal, A.J. Becker, *Appl. Phys. Lett.* **58** (15), 1656 (1991)
- [Hindmarsh83] A.C. Hindmarsh, *Odepack, a systematized collection of ode solvers, in scientific computing*, North-Holland, Amsterdam (1983)
- [HP81] Hewlett Packard, *Operation and Service Manual 4192A LF Impedance Analyzer*, Kap. 3.75 Hewlett Packard, 1981
- [Jagannathan96] B. Jagannathan, W.A. Anderson, *Solar Energy Materials and Solar Cells* **44**, 165- 176 (1996)

- [Jagannathan97] B. Jagannathan, W.A. Anderson, J. Coleman, *Solar Energy Materials and Solar Cells* **46**, 289-310 (1997)
- [Kolter95] M.Kolter, H. Eschrich, L. Elstner, C. Beneking, H. Wagner, Proceedings of the 13th European Photovoltaic Solar Energy Conference, Nice, ed. by W. Freiesleben, W. Palz, H.A. Ossenbrink, P. Helm, S. 1526, (1995)
- [Kolter97] M. Kolter, Forschungsbericht 3471 des Forschungszentrums Jülich, Institut für Schicht und Ionentechnik, 1997
- [Kondo96] M. Kondo, T. Shiba, Y. Tamaki, T. Nakamura, *J. Electrochem. Soc.* **143**, 1949, (1996)
- [Kuwano92] Y.Kuwano, S. Nakano, M. Tanaka, T. Matsuyama, M. Isomura, N. Nakamura, H. Haku, M. Nishikuni, H. Nishiwaki, S. Tsuda, *Materials Research Society Symposium Proceedings*, vol **258**, S.857 (1992)
- [Laih97] L.-H. Laih, J.-C. Wang, Y.-A. Chen, T.-S. Jen, W.-C. Tsay, J.-W. Hong, *Sol. State Electr.* **41**, 1693-1697 (1997)
- [Landsberg84] P.T. Landsberg, G.S. Kousik, *J. Appl. Phys.* **56**, 1696 (1984)
- [Lang74] D.V. Lang, *J. Appl. Phys* **45**, S. 3023, 1974
- [Lang82] D.V. Lang, J.D. Cohen, *Phys. Rev. B* **25**, S. 5285, 1982
- [Ley84] L. Ley, Photoemission and optical properties in „The Physics of hydrogenated amorphous Silicon“, Kap.3, Springer, Berlin, 1984
- [Luft93] W. Luft, Y. S. Tsuo, „Hydrogenated amorphous silicon alloy deposition processes“, Marcel Dekker, New York, 1993
- [Marsal96] L.F.Marsal, J. Pallares, X.Correig, *J. Appl. Phys.* **79**, 8493-8497 (1996)
- [Marsal97] L.F.Marsal, J. Pallares, X.Correig, M. Dominguez, D. Bardes, J. Calderer, R. Alcubilla, *Diamond and related Materials* **6**, 1555-1558 (1997)
- [Marsal96b] L.F.Marsal, J. Pallares, X.Correig, J. Calderer, R. Alcubilla, *Semicond. Sci. Technol.* **11**, 1209-1213 (1996)
- [Matsumuura91] M. Matsumuura, *Amorphous & Microcrystalline Semiconductor devices – Optoelectronic devices*, Kap. 4, ed. J. Kanicki, ArtechHouse, Boston 1991
- [Matsuura84] H.Matsuura, T. Okuno, H. Okushi, K. Tanaka, *J.Appl. Phys.* **55**, 1012 (1984)
- [Matsuura89] H. Matsuura, *IEEE Transactions On Electron Devices*, **36**, 2908 (1989)
- [Mayhan84] R.J. Mayhan, *discrete-time and continuous-time linear systems*, Kap. 7, Addison Wesley, 1984
- [Melchior72] H. Melchior, „Demodulation and Photodetection Techniques“, Herausgeber F.T. Arecchi und E.O. Schulz-Dubois, *Laser Handbook*, Vol. 1, North-

- Holland, Amsterdam, S.725-835, 1972
- [Miller72] G. L. Miller, IEEE Transactions on Electron Devices, **ED-19**, S. 1103, (1972)
- [Mimura85] H. Mimura, Y. Hatanaka, Jap. J. Appl. Phys. **24**, No.5 (1985), L355-L357
- [Mimura87] H. Mimura, Y. Hatanaka, Appl. Phys. Lett. **50**, 326 (1987)
- [Mimura87b] H. Mimura, Y. Hatanaka, Jap. J. Appl. Phys. **26**,1 (1987), 60-65
- [Mimura92] H. Mimura, Y. Hatanaka, J. Appl. Phys. **71**, 2315-2320 (1992)
- [Morita89] M. Morita, T. Ohmi, E. Hasegawa, M. Kawakami, K. Suma, Appl. Phys. Lett. **55** (6), 562 (1989)
- [Mott68] N.F. Mott, J. Non-Cryst. Solids, **1**, 1, (1968)
- [Nakamura96] M. Nakamura, M.-B. Song, M. Ito, Electrochimica Acta **41** (5), 681 (1996)
- [Neitzert95] H. C. Neitzert, N. Layadi, P. Roca i Cabarrocas, R. Vanderhaghen, J. Appl. Phys. **78** (3), 1438 (1995)
- [Neuwald92] U. Neuwald, H.E. Hessel, A. Feltz, U. Memmert, J. Behm, Appl. Phys. Lett. **60** (11), 1307 (1992)
- [Northrup89] J.E. Northrup, Phys. Rev. B **40**, 5875 (1989)
- [Nussbaum81] A. Nussbaum, Semiconductor & Semimetals, Vol 15, "Contacts, Junctions, Emitters", Kap.2, von R.K. Willarson und A.C. Beer, Academic Press, New York, 1981
- [Okamoto75] H. Okamoto, Y. Hamakawa, Solid State Commun. **24**, 23 (1976)
- [Padovani66] Padovani, Stratton, Solid State Electronics **9**, 695 (1966)
- [Press88] W.H. Press, B.P. Falnner, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, Numerical Recipes in C, Kap. 9.6, Cambridge University Press, Cambridge (1988)
- [Rahman84] M. M. Rahman, S. Furukawa, Jap. J. Appl. Phys, **23**, 515-524 (1984)
- [Rhoderick88] E.H. Rhoderick, R.H. Williams, Metal-Semiconductor Contacts, 2. Ausgabe , Clarendon Press, Oxford (1988), Kap. 3.2.3
- [Ribben66] A.R. Ribben, D.L. Feucht, Solid-State Electronics **9**, 1055 (1966)
- [Ribben66b] A.R. Ribben, D.L. Feucht, Int. J. Electronics **20**, 583 (1966) [Rhoderick88] E.H. Rhoderick, R.H. Williams, Metal-Semiconductor Contacts, 2nd Edit., Clarendon Press, Oxford (1988), Kap. 3.2.3
- [Rösch98] M. Rösch, R. Brüggemann, G.H. Bauer, Proceedings of the 2nd World Conference On Photovoltaic Energy Conversion, Editor J. Schmid , H.A. Ossenbrink, P. Helm, H. Ehmman, E.D. Dunlop, 946, 1998
- [Sah57] C. T. Sah, R.N. Noyce, W. Shockley, Proc. IRE, **45**, 1228 (1957)
- [Sawada94] T. Sawada, N. Terada, S. Tsuge, T. Baba, T. Takahama, K. Wakisaka, S.

- Tsuda, S. Nakano, Proceedings of the 1st World Conference on Photovoltaic Energy Conversion, Hawaii 1994, 1219 (1994)
- [Scharfetter69] D.L. Scharfetter, H.K. Gummel. IEEE Transactions on Electron devices **16**, 1 (1969)
- [Schulz82] M. Schulz, in Landolt-Börnstein: „Zahlenwerte und Funktionen aus Naturwissenschaften und Technik“, Neue Serie, Gesamtherausgabe: K.-H. Hellwege, Band 17, Halbleiter: Herausgeber: O. Madelung, M. Schulz, Teilband a, „Physik der Elemente der IV. Gruppe und der III-V Verbindungen, Kap. 1.2 Fig. S. 363
- [Schwabl80] F. Schwabl, „Quantenmechanik“, 2. Aufl., Springer, Berlin, 1980
- [Scofield95] J. H. Scofield, Effects of series resistance and inductance on solar cell admittance measurements, Solar Energy Material & Solar Cells, **37** (2), S. 217-233, 1995
- [Sebastiani95] M. Sebastiani, L. Di Gaspare, G. Capellini, C. Bittencourt, F. Evangelisti, Phys. Rev. Lett. **75**, 3352-3355 (1995)
- [Shockley49] W. Shockley, Bell Syst. Tech. J. **28**, 435, (1949)
- [Shur90] M. Shur, Physics of Semiconductor Devices, Prentice Hall, Englewood Cliffs (1990)
- [Spear75] W.E. Spear, P.G. LeComber, Solid State Commun. **17**, 1193 (1975)
- [Staebler77] D.L. Staebler, C.R. Wronski, Appl. Phys. Lett. **31**, 292, (1977)
- [Street84] R.A. Street, Phil. Mag. B **49**, L15 (1984)
- [Street85] R.A. Street, J. Non-Cryst. Solids **77&78**, 1 (1985)
- [Street85b] R.A. Street, et.al., Phil. Mag. **52**, 235 (1985)
- [Street91] R.A. Street, Hydrogenated amorphous silicon, Kap. 2.1.1, Cambridge University Press, Cambridge, 1991
- [Street91] R.A. Street, Hydrogenated amorphous silicon, Kap.4.2.5, Cambridge University Press, Cambridge (1991)
- [Stutzmann85] M. Stutzmann, W. Jackson, C. Tsai, Phys. Rev. B **32**, 23 (1985)
- [Stutzmann87] M. Stutzmann, D.K. Biegelsen, R.A. Street, Phys. Rev. B **35**, 5666, (1987)
- [Suzuki91] K. Suzuki, Amorphous & Microcrystalline Semiconductor devices – Optoelectronic devices, Kap. 3, ed. J. Kanicki, Artech House, Boston 1991
- [Sze66] S.M Sze, G. Gibbons, Appl. Phys. Lett. **8**, 111, (1966)
- [Sze81] S.M. Sze, “Physics of Semiconductor Devices“, 2nd Edition, Kap. 2, John Wiley&Sons, New York, 1981

- [Sze85] S.M. Sze, "Semiconductor Devices - Physics and Technology", Kap. 8, John Wiley & Sons, New York, 1985
- [Sze85b] S. M. Sze, Semiconductor Devices – Physics and Technology, Kap 2.1.1, John Wiley & Sons, New York, 1985
- [Sze85c] S. M. Sze, Semiconductor Devices – Physics and Technology, Kap 2.6, John Wiley & Sons, New York, 1985
- [Tanaka92] M. Tanaka, M. Taguchi, T. Matsuyama, T. Sawada, S. Tsuda, S. Nakano, H. Hanafusa, Y. Kuwano, Jpn. J. Appl. Phys. **31**, 3518-3522, (1992)
- [Tauc74] J. Tauc, Amorphous and liquid semiconductors, Plenum Press, New York, 1974
- [Tiedje81] T. Tiedje, J.M. Cebulka, D.L. Morel, B. Abeles, Phys. Rev. Lett. **46**, 1425 (1981)
- [vanCleef96] M.W.M. van Cleef, M.W.H. Philippens, F.A. Rubinelli, M.A. Kolter, R.E.I. Schropp, Materials Research Society Symposium Proceedings, 1996
- [vanCleef98] M.W.M. van Cleef, „Amorphous crystalline silicon heterostructures solar cells“, Doktorarbeit der Fakultät für Natur- und Sterrenkunde, Universität Utrecht, Niederlande, 1998
- [Vanecek83] M. Vanecek, A. Abraham, O. Stoika, J. Struchlik, J. Kocka, Phys. Stat. Solidi, Vol. A **83**, 617 (1983)
- [Wagemann94] H.G. Wagemann, H. Eschrich „Grundlagen der photovoltaischen Energieumwandlung“, Kap. 4, Teubner-Verlag, Stuttgart (1994)
- [Walton94] J.T. Walton, W.S. Hong, P.N. Luke, N.W. Wang, IEEE Trans. On Nucl. Science **44**, 961-964 (1997)
- [Wanka97] H. Wanka, „Ellipsometrie und Rasterkraftmikroskopie – Untersuchung der Nukleation und des Wachstums von Si-Dünnschichten“, Dissertation an der Fakultät Elektrotechnik, Universität Stuttgart, 1997
- [Wei96] G. Wei, W. Wu, T. Kita, H. Nakayama, T. Nishino, W. Ma, H. Okamoto, M. Okuyama, Y. Hamakawa, Jpn. J. Appl. Phys. **35**, 5342-5345 (1996)
- [Wu79] C.M. Wu, E.S. Yang, Solid State Electron. **22**, 241 (1979)
- [Würfel00] P. Würfel, Physik der Solarzellen, Spektrum Akademischer Verlag, Heidelberg 2000
- [Wu79] C.M. Wu, E.S. Yang, Solid State Electronics **22**, 241 (1979)
- [Xu95] X. Xu, J. Yang, A. Banerjee, S. Phys. Lett. **67**, 2323-2325 (1995)
- [Yang93] K. Yang, J. R. East, G. I. Haddad, Sol. State Electr. **36**, 321-330 (1993)

- [Yang97] J. Yang, A. Banerjee, S. Sugiyama, S. Guha, "Recent Progress in Amorphous Silicon Alloy Leading to 13% Stable Cell Efficiency", Conf. Record, 26th IEEE Photovoltaic Specialists Conference, Anaheim, September/October, 1997, pp. 563-568.

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich herzlich bei denen bedanken, die mich bei dieser Arbeit unterstützt haben.

Gottfried H. Bauer hatte immer ein offenes Ohr für mich. Vor allem bei analytischen Fragestellungen habe ich in zahlreichen Diskussionen mit ihm viel gelernt. Auch hatte ich in seiner Arbeitsgruppe viel Freiraum, um meine Ideen auszuprobieren.

Durch die anfängliche Betreuung und Einführung in die Thematik des amorphen Siliziums erhielt ich wertvolle Unterstützung von Rudi Brüggemann. Er war auch bei der Entwicklung der numerischen Simulation ein wichtiger Ansprechpartner.

Die intensivsten, für mich sehr wertvollen Diskussionen führte ich mit Thomas Unold, der immer an meiner Arbeit interessiert war, und der mich durch seine konstruktive Kritik oft auf neue Ideen brachte. Er stand auch bei experimentellen Fragen hilfreich zur Seite.

Schließlich möchte ich allen Mitgliedern der Arbeitsgruppe GRECO danken, mit denen mir die Arbeit fast immer Freude gemacht hat, sowie meinen Korrekturlesern, die beim Zustandekommen dieser Arbeit geholfen haben.

Besonders danke ich meiner Freundin Corinna Klotz für die moralische Unterstützung während dieser Zeit und meinen Eltern, die mir das Studium ermöglichen haben.

Erklärung

Hiermit erkläre ich, daß ich die vorliegende Dissertation „Experimente und numerische Modellierung zum Ladungsträgertransport in a-Si:H/c-Si Heterodioden“ selbständig verfaßt und nur die angegebenen Hilfsmittel verwendet habe.

Oldenburg, den 22.05.2003

(Rösch Maximilian)

Lebenslauf

13.12.68 Geburt in Markt Indersdorf

1975-1979 Grundschule in Erdweg und Königsdorf (Obb.)

1979-1988 Gymnasium in Bad Tölz

1988-1994 Physikstudium an der TU München

1994 Diplom in Physik erhalten (Dipl.-Physiker)

1995-1999,

2002 Angestellter der Carl von Ossietzky Universität Oldenburg, FB Physik, AG
GRECO