

# Влияние хвостов зон $a\text{-Si:H}$ на заполнение состояний оборванных связей и величину фотопроводимости

© С.В. Кузнецов, Е.И. Теруков\*<sup>¶</sup>

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,  
119899 Москва, Россия

\*Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,  
194021 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 9 ноября 2000 г. Принята к печати 15 ноября 2000 г.)

Представлены результаты численного расчета температурных зависимостей фотопроводимости и заполнения состояний оборванных связей для  $a\text{-Si:H}$  с различным уровнем легирования. Расчеты показывают, что энергетическое положение ловушек оказывает существенное влияние на характер температурных зависимостей фотопроводимости. Это влияние осуществляется не только через участие ловушек в рекомбинации при низких температурах, но и через влияние на заполнение состояний оборванных связей. Установлено, что для  $a\text{-Si:H}$   $p$ -типа концентрация нейтральных оборванных связей ( $D^0$ -центров) в области средних и низких температур не зависит от уровня Ферми. Показано, что эта особенность — следствие асимметрии положения  $D^0$ - и  $D^-$ -центров (отрицательно заряженных оборванных связей), а не асимметричности расположения ловушек в запрещенной зоне относительно краев разрешенных зон.

## 1. Введение

К настоящему времени опубликовано большое количество экспериментальных результатов и численных расчетов, посвященных свойствам  $a\text{-Si:H}$  и фотопроводимости ( $\sigma_{ph}$ ), в частности. Однако до сих пор нет модели, которая удовлетворительно объясняет все особенности  $\sigma_{ph}$ . К числу спорных вопросов относится интерпретация асимметричной зависимости  $\sigma_{ph}$  от положения уровня Ферми ( $E_F - E_V$ ). Ранее было показано, что фотопроводимость  $a\text{-Si:H}$   $p$ -типа, в отличие от  $\sigma_{ph}$   $a\text{-Si:H}$   $n$ -типа, слабо зависит от величины  $E_F - E_V$  [1,2] и от концентрации оборванных связей ( $D$ -центров) [2]. Было предложено объяснять эту слабую зависимость асимметрией хвостов зон, которая приводит к существенному отличию неравновесного заполнения  $D$ -центров от их заполнения в условиях равновесия [2]. В настоящей работе представлены результаты численного расчета влияния энергетического положения ловушек в хвостах зон на вид температурной зависимости фотопроводимости  $a\text{-Si:H}$   $p$ -типа.

## 2. Модель

Для проверки рекомбинационных моделей, интерпретирующих экспериментальные результаты, часто используется компьютерное моделирование. Как правило, численные расчеты выполняются для упрощенной плотности состояний в щели подвижности и учитывают только основные для рассматриваемой модели рекомбинационные и эмиссионные потоки. Модель плотности состояний, использованная в наших расчетах, представлена на рис. 1. Как видно из этого рисунка, вместо непрерывного

распределения плотности состояний в щели подвижности рассматриваются четыре дискретных уровня:  $E_{tp}$ ,  $E_D$ ,  $E_D + U$  и  $E_{tn}$ . Уровни  $E_{tp}$  и  $E_{tn}$  с концентрацией состояний  $N_{tp}$  и  $N_{tn}$  — эффективные уровни хвоста валентной зоны и зоны проводимости соответственно. Уровни  $E_D$  и  $E_D + U$  — энергетические уровни положительно коррелированных состояний оборванных связей. При феноменологическом описании рекомбинации в полупроводниках локализованные состояния делят в зависимости от их положения по отношению к демаркационным уровням на рекомбинационные и ловушки. Как правило, состояния хвостов действуют, как ловушки, поэтому для уровней  $E_{tp}$  и  $E_{tn}$  в дальнейшем будут использоваться термины "ловушки для дырок" и "ловушки для электронов" соответственно. В соответствии с рис. 1 в настоящей работе были рассмотрены два возможных канала рекомбинации: прямой захват свободных электронов и дырок на  $D$ -центры (потоки  $U_1$ ,  $U_2$ ,  $U_5$  и  $U_6$ ) и туннель-

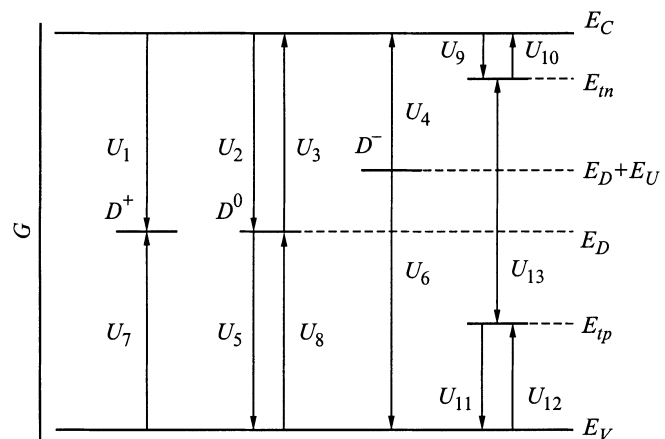


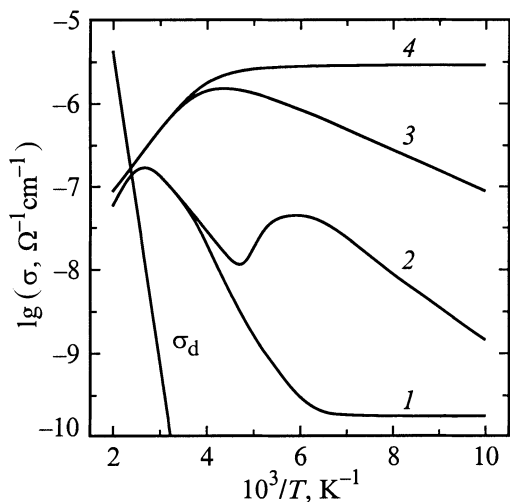
Рис. 1. Схематическое представление электронных переходов для упрощенной модели плотности состояний в щели подвижности  $a\text{-Si:H}$ .

<sup>¶</sup> E-mail: eug.terukov@pop.ioffe.rssi.ru  
Fax: (812) 2471017

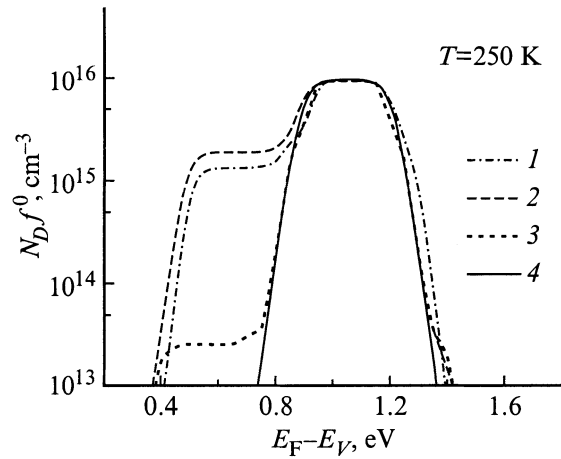
ная рекомбинация между электронами, захваченными на состоянии хвоста зоны проводимости, а также дырками, захваченными на состоянии хвоста валентной зоны ( $U_{13}$ ). В предыдущей статье [3] приведены аргументы в пользу выбора такой модели рекомбинации и записаны соответствующие кинетические уравнения. В следующем параграфе будут представлены результаты численного решения этих уравнений при тех же значениях входящих в них параметров при варьировании  $E_F - E_V$ ,  $E_{tp}$  и  $E_m$ .

### 3. Результаты численного расчета и их обсуждение

На рис. 2 представлены рассчитанные температурные зависимости фотопроводимости (ТЗФ) для  $E_F - E_V = 0.75$  эВ (слабо легированный  $a\text{-Si:H}$   $p$ -типа), соответствующие трем разным соотношениям между положениями ловушек: 1) симметричные мелкие ловушки  $E_{tp} - E_V = E_C - E_m = 0.1$  эВ (кривая 3), 2) симметричные глубокие ловушки  $E_{tp} - E_V = E_C - E_m = 0.3$  эВ (кривая 1), 3) асимметричные ловушки  $E_{tp} - E_V = 0.3$  эВ,  $E_C - E_m = 0.1$  эВ (кривая 2). На этом же рисунке построена температурная зависимость темновой проводимости  $\sigma_d$ , а также ТЗФ для плотности состояний, не содержащей ловушки, т.е.  $E_{tp} - E_V = E_C - E_m = 0$  (кривая 4). Для темпа оптической генерации ( $G$ ) и концентрации  $D$ -центров ( $N_D$ ) были взяты значения:  $G = 10^{19} \text{ см}^{-3} \text{ с}^{-1}$ ,  $N_D = 10^{16} \text{ см}^{-3}$ . Из рис. 2 следует вывод о возрастании влияния ловушек на величину фотопроводимости с понижением температуры и с ростом значений  $E_{tp} - E_V$  и  $E_C - E_m$ . При этом, согласно расчетам, ловушки могут стать рекомбинационными состояниями (для кривых 1 и 2). Напротив, при высоких температурах, где  $\sigma_d > \sigma_{ph}$ , влияние ловушек на ТЗФ незначительно. В области средних температур ТЗФ имеет активационный характер с энергией активации  $E_A = 0.05$  и  $0.15$  эВ для кривых 3 и



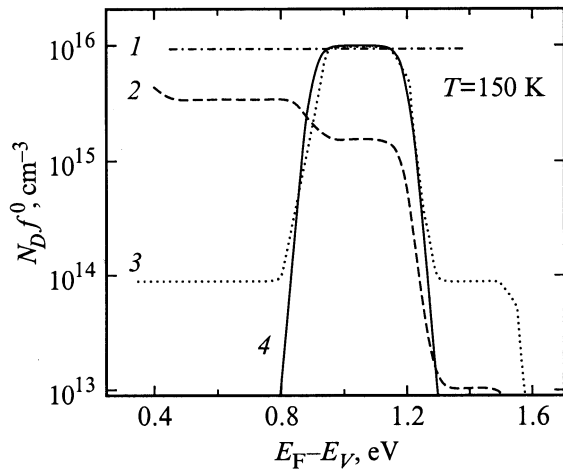
**Рис. 2.** Температурные зависимости фотопроводимости (1–4) для  $E_F - E_V = 0.75$  эВ и разных соотношений между  $E_C - E_m$  и  $E_{tp} - E_V$ . Подробности в тексте.



**Рис. 3.** Численный расчет концентрации  $D^0$ -центров при  $T = 250$  К в темноте (4) и в условиях освещения (1–3) в зависимости от положения уровня Ферми для соотношений между  $(E_C - E_m)$  и  $(E_{tp} - E_V)$ , эВ: 1 —  $E_C - E_m = E_{tp} - E_V = 0.3$ ; 2 —  $E_C - E_m = 0.1$ ,  $E_{tp} - E_V = 0.3$ ; 3 —  $E_C - E_m = E_{tp} - E_V = 0.1$ .

2 соответственно (т.е.  $E_A = 0.5(E_{tp} - E_V)$ ) и  $E_A = 0.2$  эВ (кривая 1). Независимо от соотношения между  $E_{tp} - E_V$  и  $E_C - E_m$  в этой области температур выполняется соотношение  $p_t = N_D f^0$ , где  $p_t$  — концентрация дырок, захваченных на ловушку для дырок,  $f^0$  — вероятность нахождения оборванной связи в нейтральном состоянии ( $D^0$ -состоянии),  $N_D$  — концентрация  $D$ -центров в  $D^0$ -состоянии (концентрация  $D^0$ -центров). Как показано ранее [2], это соотношение получается из условия электронейтральности и означает, что в  $a\text{-Si:H}$   $p$ -типа в условиях освещения неравновесный положительный заряд локализован на состояниях хвоста валентной зоны, а неравновесный отрицательный заряд — на  $D$ -центрах. Следует заметить, что перезарядка  $D$ -центров при освещении ( $D^+ + e \rightarrow D^0$  и  $D^0 + e \rightarrow D^-$ ) в случае асимметричных ловушек приводит к температурному гашению фотопроводимости (ТЗФ) (рис. 2, кривая 2). При температурах ниже области ТЗФ наклон ТЗФ равен  $0.09$  эВ, что близко к значению  $E_C - E_m = 0.1$  эВ.

Теперь рассмотрим, как влияют параметры ловушек на заполнение  $D$ -центров. На рис. 3 представлены зависимости  $N_D f^0$  при  $T = 250$  К от уровня Ферми ( $E_F - E_V$ ) для разных соотношений между  $E_{tp} - E_V$  и  $E_C - E_m$ . Из рисунка следует, что зависимость величины  $N_D f^0$  от  $(E_F - E_V)$  имеет асимметричный характер независимо от параметров ловушек: для уровней Ферми, лежащих в верхней половине щели подвижности, концентрация  $D^0$ -центров незначительно отличается от равновесной; напротив, для уровней Ферми в интервале  $E_F - E_V = 0.5 - 0.75$  эВ (соответствующих  $a\text{-Si:H}$   $p$ -типа) концентрация  $N_D f^0$  не зависит от  $E_F - E_V$  и существенно отличается от равновесного значения. При этом следует заметить, что в  $a\text{-Si:H}$   $p$ -типа величина  $N_D f^0$  в основном определяется значением  $E_{tp} - E_V$ , а не  $E_C - E_m$ .



**Рис. 4.** Численный расчет концентрации  $D^0$ -центров при  $T = 150$  К в зависимости от положения уровня Ферми. Номера кривых соответствуют тем же условиям, что и на рис. 3.

Рассмотрим зависимость  $N_D f^0(E_F - E_V)$  при  $T = 150$  К (рис. 4). Из рис. 4 следует, что симметричным ловушкам соответствуют симметричные (относительно  $E_D + U/2$ ) зависимости  $N_D f^0(E_F - E_V)$ , а асимметричным — асимметричная зависимость  $N_D f^0(E_F - E_V)$ . Как видно из рис. 3 и 4, для  $a$ -Si:H  $p$ -типа соотношение между  $E_{tp} - E_V$  и  $E_C - E_{in}$  влияет только на величину  $N_D f^0$ , но не на характер зависимости  $N_D f^0(E_F - E_V)$ . Следует отметить, что асимметричные ловушки приводят к большей перезарядке  $D$ -центров, чем симметричные.

Анализ расчетов позволяет сделать вывод, что асимметрия зависимости  $N_D f^0(E_F - E_V)$  при  $T = 250$  К — следствие асимметрии положения уровней  $E_D$  и  $E_D + U$  относительно середины щели подвижности, а не асимметрии расположения ловушек относительно краев зон  $E_C$  и  $E_V$ .

Независимость  $N_D f^0$  от  $E_F - E_V$  для  $a$ -Si:H  $p$ -типа приводит к независимости фотопроводимости  $\sigma_{ph}$  от уровня легирования, если предполагать, что в области средних температур основным каналом рекомбинации является прямой захват свободных носителей через  $D$ -центры. В пользу такого типа рекомбинации говорят экспериментальные результаты о наличии эффекта ТГФ у слабо легированного бором  $a$ -Si:H  $p$ -типа [2,4], так как максимум фотопроводимости в области ТГФ связывается со сменой при повышении температуры туннельной рекомбинации или рекомбинации "зона-хвост" [5] на рекомбинацию свободных носителей через оборванные связи.

#### 4. Заключение

Суммируя вышесказанное, можно сделать вывод, что независимость фотопроводимости в  $a$ -Si:H  $p$ -типа является имманентным свойством этого материала, задаваемым распределением плотности состояний в щели подвижности, которое приводит в условиях освещения

к существенно неравновесной концентрации  $D^0$ -центров, являющихся основными рекомбинационными центрами.

Авторы благодарят А.Г. Казанского за полезные дискуссии при обсуждении результатов.

#### Список литературы

- [1] P.E. Vanier. Solar. Cells, **9**, 85 (1983).
- [2] С.В. Кузнецов. ФТП, **34**, 748 (2000).
- [3] S.V. Kuznetsov. J. Non-Cryst. Sol. (in press).
- [4] H. Fritzsche, M.Q. Tran, B.-G. Yoon, D.-Z. Chi. Proc. of ICAS 14 (Garmisch-Partenkirchen, 1991).
- [5] F. Vaillant, D. Jousse, J.-C. Bruyere. Phil. Mag. B, **57**, 649 (1988).

Редактор Т.А. Полянская

#### Influence of band tails in $a$ -Si:H on the occupation of dangling bonds states and magnitude of photoconductivity

S.V. Kuznetsov, E.I. Terukov

Moscow State University,  
119899 Moscow, Russia  
Ioffe Physicotechnical Institute,  
Russian Academy of Sciences,  
194021 St. Petersburg, Russia

**Abstract** Results on calculations of the temperature dependence of photoconductivity and the occupation of dangling bonds in differently doped  $a$ -Si:H are presented. Calculations show that the energy position of traps influence essentially on the shape of  $T$ -dependences of photoconductivity. This influence is realized by both recombination through traps and by dangling bonds occupation. It was obtained that concentration of neutral [charged] dangling bonds ( $D^0$ -centers) in  $p$ -type  $a$ -Si:H at low and moderate temperatures doesn't depend on Fermi level. As is shown, this feature is a consequence of asymmetry of  $D^0$ - and  $D^-$  (negative charged dangling bonds) centers positions, but not that of asymmetry of hole and electron traps in band tails.