

## ЧИСЛОВЕ МОДЕЛЮВАННЯ ДИФУЗІЙНО-ДРЕЙФОВИХ ТА РЕКОМБІНАЦІЙНИХ ПРОЦЕСІВ МОДУЛЯЦІЙНОЇ ФОТОПРОВІДНОСТІ В КВАЗІСТАЦІОНАРНОМУ НАБЛИЖЕННІ

Розглядається моделювання числового розв'язку фундаментальної системи рівнянь для аналізу фотопровідності у встановленому квазістаціонарному режимі в лінійному наближенні за параметром модуляції. Запропоновано метод перетворення виразів для швидкості рекомбінації в наближенні часу життя. Отримана система рівнянь розв'язується методом скінчених різниць. Розраховано просторовий розподіл амплітуд змінних концентрацій вільних носіїв заряду та напруженості електричного поля.

The present article examines the methods of numerical solution to the fundamental system of equations by analyzing photoconductivity in the set quasi-stationary regime in the linear approximation according to the modulation parameter. The method of transformation of expressions for recombination rate in the lifetime approximation is suggested. The obtained system of equations is solved by means of finite differences. The amplitude special distribution of the alternating concentrations of free charge carriers and electric field intensity is calculated.

В сучасній фізиці активно розвиваються нові напрямки функціональної електроніки, зокрема фотоелектроніка. Розробка приладів фотоелектроніки вимагає знання таких параметрів як час життя, коефіцієнти захоплення носіїв на локальні рівні, концентрація рекомбінаційних рівнів і рівнів прилипання. Для дослідження цих параметрів фотопровідників широко використовується метод модуляційної фотопровідності. Модуляція можлива як зовнішня, наприклад, по інтенсивності збуджуючого світла, так і внутрішня, коли зовнішнє збудження модулює деяку властивість самого напівпровідника шляхом модуляції температури, величини механічної напруги або ж напруженості електричного поля в кристалі [1]. Для аналізу модуляційних спектрів фотопровідності необхідно враховувати вплив дифузійно-дрейфових процесів, що зумовлено просторовою неоднорідністю задачі, причому неоднорідність можливо зумовлена, як просторовою залежністю темпу оптичної генерації нерівноважних носіїв заряду, так і впливом поверхні або контактів [2]. Тоді виникає необхідність розрахунку просторового розподілу концентрації нерівноважних носіїв заряду та напруженості електричного поля в об'ємі зразка. Ця задача зводиться до розв'язку системи рівнянь неперервності для носіїв заряду і рівняння Пуассона (фундаментальної системи рівнянь (ФСР) [3]. Розв'язок

ФСР в загальному вигляді викликає значні труднощі, які зумовлені нелінійністю системи рівнянь [4]. Тому для її розв'язання широко використовуються числові методи. Однак в області високих рівнів фотозбудження, де є суттєвою нелінійність рекомбінаційних процесів, стандартні числові методи не дають задовільних результатів через їх погану збіжність і стійкість, що зумовлено нелінійністю рекомбінаційних внесків.

У роботі запропоновано метод числового розрахунку просторового розподілу амплітуд змінних концентрацій вільних носіїв заряду та напруженості електричного поля в лінійному наближенні за параметром модуляції.

У квазістаціонарному режимі часова залежність змінної складової концентрації носіїв заряду і напруженості електричного поля визначаються часовою залежністю параметра модуляції. Тому розв'язок ФСР шукаємо методом комплексних амплітуд у вигляді:

$$n\{p, N_r, P_r, E, N_t\} = n_s\{p_s, N_{rs}, P_{rs}, E_s, N_{ts}\} + \Delta n e^{i\omega t} \{p, N_r, P_r, E, N_t\}. \quad (1)$$

Зазвичай при експериментальних дослідженнях виконується умова малості параметру модуляції, тому

$$\begin{aligned} |\Delta n\{p, N_r, P_r, E, N_t\}| &\ll \\ &\ll n_s\{p_s, N_{rs}, P_{rs}, E_s, N_{ts}\}. \end{aligned} \quad (2)$$

Обмежимося в подальшому випадком одновимірної задачі, вважаючи що просторова неоднорідність зумовлена зміною темпу оптичної генерації носіїв заряду по об'єму напівпровідника вздовж осі  $Ox$  перпендикулярно до напрямку протікання струму. Розглянемо випадок зовнішньої модуляції інтенсивності збуджуючого світла. Темп оптичної генерації представимо у вигляді:  $g = g_0 e^{-\alpha x} + \Delta g e^{-\alpha x} e^{-i\omega t}$ , де  $\alpha$  – коефіцієнт поглинання світла. Впливом контактів знехтуємо.

За цих припущень для визначення просторової залежності комплексних амплітуд  $\Delta n$ ,  $\Delta p$ ,  $\Delta E$ ,  $\Delta N_r$ ,  $\Delta P_r$ ,  $\Delta N_t$  отримаємо систему рівнянь:

$$D_n \frac{d^2 \Delta n}{dx^2} + \mu_n \Delta E \frac{dn_s}{dx} + \mu_n E_s \frac{d\Delta n}{dx} + \mu_n \frac{d\Delta E}{dx} n_s + \mu_n \frac{dE_s}{dx} \Delta n - R_n - R_t + \Delta g e^{-\alpha x} = i\omega \Delta n, \quad (3)$$

$$D_p \frac{d^2 \Delta p}{dx^2} - \mu_p \Delta E \frac{dp_s}{dx} - \mu_p E_s \frac{d\Delta p}{dx} - \mu_p \frac{d\Delta E}{dx} p_s - \mu_p \frac{dE_s}{dx} \Delta p - R_p + \Delta g e^{-\alpha x} = i\omega \Delta p, \quad (4)$$

$$\frac{d\Delta E}{dx} = -\frac{e}{\epsilon_0} (\Delta n + \Delta N_r - \Delta p), \quad (5)$$

$$R_n - R_p = i\omega \Delta N_r, \quad (6)$$

$$R_t = i\omega \Delta N_t. \quad (7)$$

Швидкості рекомбінації нерівноважних носіїв запишемо відповідно до моделі Шоклі-Ріда, вважаючи рекомбінацію нерівноважних електронів і дірок як один тип рекомбінаційних центрів з концентрацією  $M_r$  і глибиною залягання  $\epsilon_r$  відносно дна зони провідності і один тип центрів прилипання з концентрацією  $M_t$  і глибиною залягання  $\epsilon_t$ :

$$R_n = C_{nr} P_{rs} \Delta n - C_{nr} (n_s + n_{1s}) \Delta N_r, \quad (8)$$

$$R_p = C_{pr} N_{rs} \Delta p + C_{pr} (p_s + p_{1s}) \Delta N_r, \quad (9)$$

$$R_t = C_{nt} P_{ts} \Delta n - C_{nt} (n_s + n_{1ts}) \Delta N_r, \quad (10)$$

де  $N_{rs}, P_{rs}, N_{ts}, P_{ts}$  – стаціонарні концентрації електронів і дірок локалізованих на рекомбінаційному рівні та на рівні прилипання,

$$n_{1s} = N_c \exp \frac{\epsilon_r}{kT}, \quad p_{1s} = N_v \exp \frac{-\epsilon_g - \epsilon_r}{kT},$$

$n_{1ts} = N_c \exp \frac{\epsilon_t}{kT}$  – концентрації електронів і ді-

рок, приведених до рекомбінаційного рівня та центрів прилипання,  $\epsilon_g$  – ширина забороненої зони,  $N_c, N_v$  – ефективні густини станів,  $D_n, D_p$  – коефіцієнти дифузії,  $\mu_n, \mu_p$  – рухливості електронів і дірок,  $C_{nr}, C_{pr}, C_{nt}$  – коефіцієнти захоплення електронів і дірок на рекомбінаційний рівень і рівень прилипання,  $n_0, p_0, N_{r0}, P_{r0}, N_{t0}$  – рівноважні концентрації носіїв заряду. В подальшому вважатимемо, що стаціонарні значення  $n_s, p_s, E_s, N_{rs}, P_{rs}, N_{ts}$  відомі.

Граничні умови для рівнянь неперервності запишемо в точках  $x = 0$  і  $x = L$

$$\left. \begin{aligned} D_n \frac{d\Delta n}{dx} &= S_n \Delta n \\ D_p \frac{d\Delta p}{dx} &= S_p \Delta p \end{aligned} \right\} \text{при } x = 0 \text{ та } x = L. \quad (11)$$

де  $S_n, S_p$  – швидкості поверхневої рекомбінації.

Граничну умову для рівняння Пуассона запишемо, виходячи з відсутності струму в напрямі осі  $Ox$

$$\int_0^L \left( \mu_n \Delta E n_s + \mu_n E_s \Delta n + D_n \frac{d\Delta n}{dx} + \mu_p \Delta E p_s + \mu_p E_s \Delta p - D_p \frac{d\Delta p}{dx} \right) dx = 0. \quad (12)$$

Для послідовного аналізу впливу рекомбінаційних та дифузійно-дрейфових процесів, перетворимо вирази для швидкостей рекомбінації в наближенні часу життя нерівноважних носіїв. Введемо позначення

$$\begin{aligned} A_n &= C_{nr} P_{rs}, \\ B_n &= C_{nr} (n_s + n_{1s}), \\ A_p &= C_{pr} N_{rs}, \\ B_p &= C_{pr} (p_s + p_{1s}), \\ A_t &= C_{nt} P_{ts}, \\ B_t &= C_{nt} (n_s + n_{1ts}). \end{aligned} \quad (13)$$

Використовуючи позначення (13), запишемо вирази (8)–(10) у вигляді:

$$R_n = A_n \Delta n - B_n \Delta N_r, \quad (14)$$

$$R_p = A_p \Delta p + B_p \Delta N_r, \quad (15)$$

$$R_t = A_t \Delta n - B_t \Delta N_t. \quad (16)$$

З рівняння (7) виразимо  $\Delta N_t$  через  $\Delta n$ :

$$\Delta N_r = \frac{A_n \Delta n - A_p \Delta p}{B_n + B_p + i\omega}. \quad (17)$$

З рівняння (6) виразимо  $\Delta N_r$  через  $\Delta n$  і  $\Delta p$ :

$$\begin{aligned} R_n - R_p &= A_n \Delta n - B_n \Delta N_r - \\ -A_p \Delta p - B_p \Delta N_r &= i\omega \Delta N_r \end{aligned}$$

і отримуємо:

$$\Delta N_r = \frac{A_n \Delta n - A_p \Delta p}{B_n + B_p + i\omega}. \quad (18)$$

Підставимо (17), (18) у рівняння Пуассона (5):

$$\frac{d\Delta E}{dx} = -\frac{e}{\varepsilon\varepsilon_0} \times \left\{ \Delta n \left[ \frac{(B_n + B_p + i\omega) \left(1 + \frac{A_t}{B_t + i\omega}\right) + A_n}{B_n + B_p + i\omega} \right] - \Delta p \left( \frac{A_p + B_n + B_p + i\omega}{B_n + B_p + i\omega} \right) \right\}. \quad (19)$$

Виразимо з (19) почергово  $\Delta n$  через  $\Delta p$  та  $\Delta p$  через  $\Delta n$ :

$$\begin{aligned} \Delta n &= -\frac{\varepsilon\varepsilon_0}{e} \times \\ &\frac{B_n + B_p + i\omega}{A_n + (B_n + B_p + i\omega) \left( \frac{A_t}{B_t + i\omega} + 1 \right)} \frac{d\Delta E}{dx} + \\ &+ \frac{A_p + B_n + B_p + i\omega}{A_n + (B_n + B_p + i\omega) \left( \frac{A_t}{B_t + i\omega} + 1 \right)} \Delta p, \\ \Delta p &= \frac{\varepsilon\varepsilon_0}{e} \frac{B_n + B_p + i\omega}{A_p + B_n + B_p + i\omega} \frac{d\Delta E}{dx} + \\ &+ \frac{A_n + (B_n + B_p + i\omega) \left( \frac{A_t}{B_t + i\omega} + 1 \right)}{A_p + B_n + B_p + i\omega} \Delta n. \end{aligned} \quad (20) \quad (21)$$

Підставимо вирази (20) і (21) в (15) і (14) відповідно. Отримаємо вирази для швидкості рекомбінації нерівноважних електронів і дірок:

$$R_n = \frac{\Delta n}{\tau_n} + \frac{\varepsilon\varepsilon_0}{e} \frac{B_n A_p}{B_n + B_p + A_p + i\omega} \frac{d\Delta E}{dx}, \quad (22)$$

де

$$\tau_n = \frac{B_n + B_p + A_p + i\omega}{A_n A_p + A_n (B_p + i\omega) + A_p B_n \left( 1 + \frac{A_t}{B_t + i\omega} \right)}$$

нестационарний частотно залежний час життя електронів.

$$R_p = \frac{\Delta p}{\tau_p} - \frac{\varepsilon\varepsilon_0}{e} \times$$

$$\frac{B_p A_n}{A_n + (B_n + B_p + i\omega) \left( 1 + \frac{A_t}{B_t + i\omega} \right)} \frac{d\Delta E}{dx}, \quad (23)$$

$$\text{де } \tau_p = \frac{(B_n + B_p + i\omega) \left( 1 + \frac{A_t}{B_t + i\omega} \right) + A_n}{\left\{ \begin{aligned} &A_p A_n + A_n B_p + A_p A_n + \\ &+ A_p (B_p + i\omega) \left( 1 + \frac{A_t}{B_t + i\omega} \right) \end{aligned} \right\}}$$

стаціонарний частотно-залежний час життя дірок.

Вирази (22) і (23), отримані нами в наближенні часу життя носіїв заряду, дають змогу співставити результати з відомими експериментальними даними щодо часу життя і явно описують вплив зміни електричного поля і спрощують рівняння, виключивши змінні  $\Delta N_r$  і  $\Delta N_t$ .

Після проведення всіх перетворень, ми отримали систему рівнянь для визначення комплексних амплітуд  $\Delta n, \Delta p, \Delta E$ :

$$\begin{aligned} D_n \frac{d^2 \Delta n}{dx^2} + \mu_n \Delta E \frac{dn_s}{dx} + \mu_n E_s \frac{d\Delta n}{dx} + \mu_n \frac{d\Delta E}{dx} n_s + \\ + \mu_n \frac{dE_s}{dx} \Delta n - \frac{\Delta n}{\tau_n} - \frac{B_n A_p}{A_p + B_n + B_p + i\omega} \frac{\varepsilon\varepsilon_0}{e} \frac{d\Delta E}{dx} + \\ + \Delta g e^{-\alpha x} = i\omega \left( 1 + \frac{A_t}{B_t + i\omega} \right) \Delta n, \\ D_p \frac{d^2 \Delta p}{dx^2} - \mu_p \Delta E \frac{dp_s}{dx} - \mu_p E_s \frac{d\Delta p}{dx} - \mu_p \frac{d\Delta E}{dx} p_s - \\ - \mu_p \frac{dE_s}{dx} \Delta p - \frac{\Delta p}{\tau_p} + \\ \frac{B_p A_n}{A_n + (B_n + B_p + i\omega) \left( 1 + \frac{A_t}{B_t + i\omega} \right)} \frac{\varepsilon\varepsilon_0}{e} \frac{d\Delta E}{dx} + \\ + \Delta g e^{-\alpha x} = i\omega \Delta p, \\ \frac{d\Delta E}{dx} = -\frac{e}{\varepsilon\varepsilon_0} \frac{(B_n + B_p + i\omega) \left( 1 + \frac{A_t}{B_t + i\omega} \right) + A_n}{B_n + B_p + i\omega} \Delta n + \\ + \frac{e}{\varepsilon\varepsilon_0} \frac{A_p + B_n + B_p + i\omega}{B_n + B_p + i\omega} \Delta p. \end{aligned} \quad (24)$$

Отримана система рівнянь неперервності для електронів і дірок є системою диференціальних

лінійних рівнянь зі змінними коефіцієнтами. Для її розв'язання використаємо різницьвий метод [5]. Для стійкості та збіжності розв'язку, враховуючи що  $\Delta n, \Delta p$  можуть змінюватись на порядки, виконаємо нормування змінних, ввівши безрозмірні концентрації  $y^{(n)}, y^{(p)}$  і напруженість поля  $y^{(e)}$  та безрозмірну просторову координату, пронормувавши її за шириною зразка  $L$ .

$$\Delta n = (\Delta n)_0 y^{(n)}, \quad \Delta p = (\Delta p)_0 y^{(p)},$$

$$\Delta E = (\Delta E)_0 y^{(e)}, \quad \bar{X} = \frac{X}{L}. \quad (25)$$

Нормування змінних мінімізує похибку обчислення, пов'язану зі скінченною розмірністю ЕОМ.

Для перевірки збіжності та стійкості різницевої схеми розв'язку фундаментальної системи рівнянь, після перетворення рекомбінаційних доданків в наближенні часу життя, розраховано залежності зміни просторового розподілу нерівноважних носіїв заряду у випадку сильної і слабкої просторової неоднорідності, що відповідає малим і великим значенням коефіцієнта поглинання лінійного і сильно нелінійного випадків, що відповідає малому й великому темпу оптичної генерації.

Для розрахунків стаціонарних і нестаціонарних величин використані такі параметри напівпровідника:  $L=0,5$  см,  $\epsilon_g=1$  еВ,  $\epsilon_r=-0,5$  еВ,  $\mu_n=1500$  см<sup>2</sup>/(В·с),  $\mu_p=500$  см<sup>2</sup>/(В·с),  $C_{nr}=10^{-10}$  см<sup>-3</sup>с<sup>-1</sup>,  $C_{pr}=10^{-9}$  см<sup>-3</sup>с<sup>-1</sup>,  $M_f=10^{17}$  см<sup>-3</sup>,  $n_0=10^{14}$  см<sup>-3</sup>,  $T=300$  К. За таких параметрів напівпровідника розраховані інші параметри мають значення:  $p_0=2,87318 \cdot 10^6$  см<sup>-3</sup>,  $N_{r0}=9,99872$  см<sup>-3</sup>,  $P_{r0}=1,27502$  см<sup>-3</sup>,  $N_{t0}=1,44727$  см<sup>-3</sup>,  $D_n=39$  см<sup>2</sup>·с<sup>-1</sup>,  $D_p=13$  см<sup>2</sup>·с<sup>-1</sup>,  $\tau_{n0}=1,099 \cdot 10^{-4}$  с,  $\tau_{p0}=1,002 \cdot 10^{-5}$  с. Для інтегрування використовували сітку з 500 вузлів.

Для розрахунку нестаціонарних значень використовувались стаціонарні розраховані за методикою описаною в статті [6]. На рис. 1 наведені розраховані графіки залежностей стаціонарних значень концентрації і напруженості електричного поля для різних значень рівня фотозбудження.

На рис. 2 зображено графіки просторової залежності модулів комплексних амплітуд нестаціонарних концентрацій  $\Delta n, \Delta p$  для різних значень рівня фотозбудження.

На рис. 3 наведені розрахунки просторової

залежності модулів комплексних амплітуд нестаціонарних концентрацій при великому й малому значеннях коефіцієнта поглинання.

На рис.4 показано залежність, усереднених за об'ємом зразка, значень модулів комплексних амплітуд нестаціонарних концентрацій  $\Delta n_{сер}, \Delta p_{сер}$  від рівня фотозбудження.

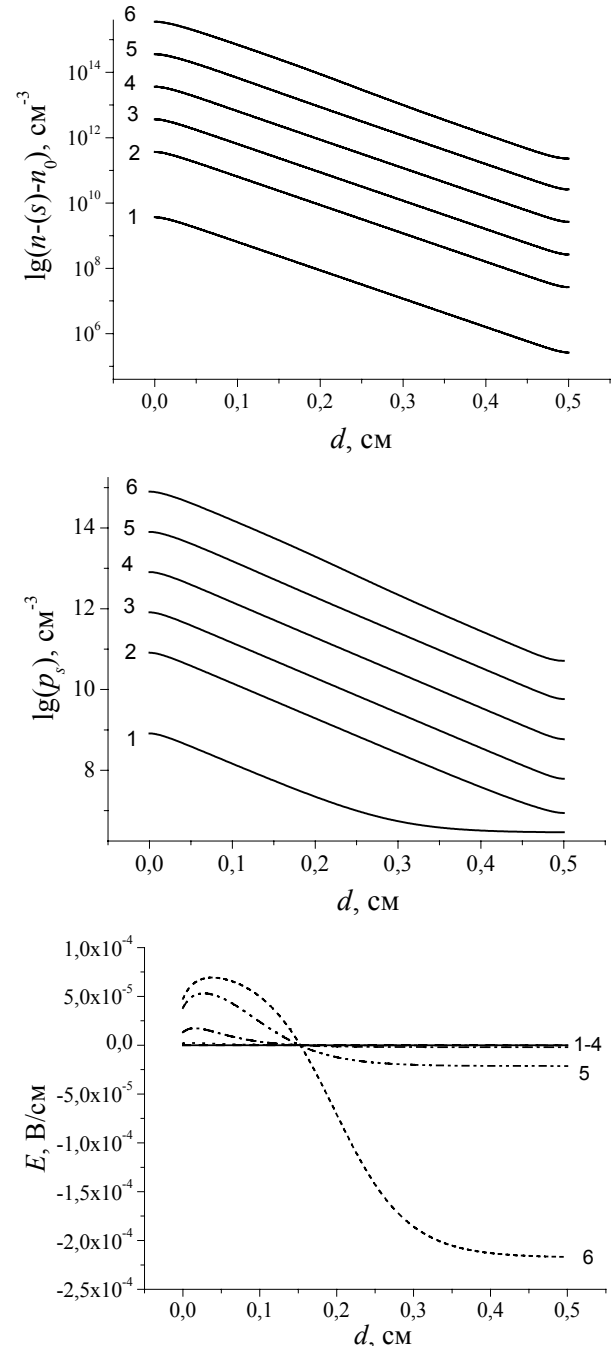


Рис 1. Розподіл стаціонарних концентрацій і електричного поля при  $\alpha=20$  см<sup>-1</sup>,  $M_f=17$  см<sup>-3</sup>с<sup>-1</sup>,  $M_r=10^{14}$  см<sup>-3</sup>, в залежності від величини рівня фотозбудження:  $g_0=10^{14}$ см<sup>-3</sup>с<sup>-1</sup> (1),  $10^{15}$ см<sup>-3</sup>с<sup>-1</sup> (2),  $10^{16}$ см<sup>-3</sup>с<sup>-1</sup> (3),  $10^{17}$ см<sup>-3</sup>с<sup>-1</sup> (4),  $10^{18}$ см<sup>-3</sup>с<sup>-1</sup> (5),  $10^{19}$ см<sup>-3</sup>с<sup>-1</sup> (6)

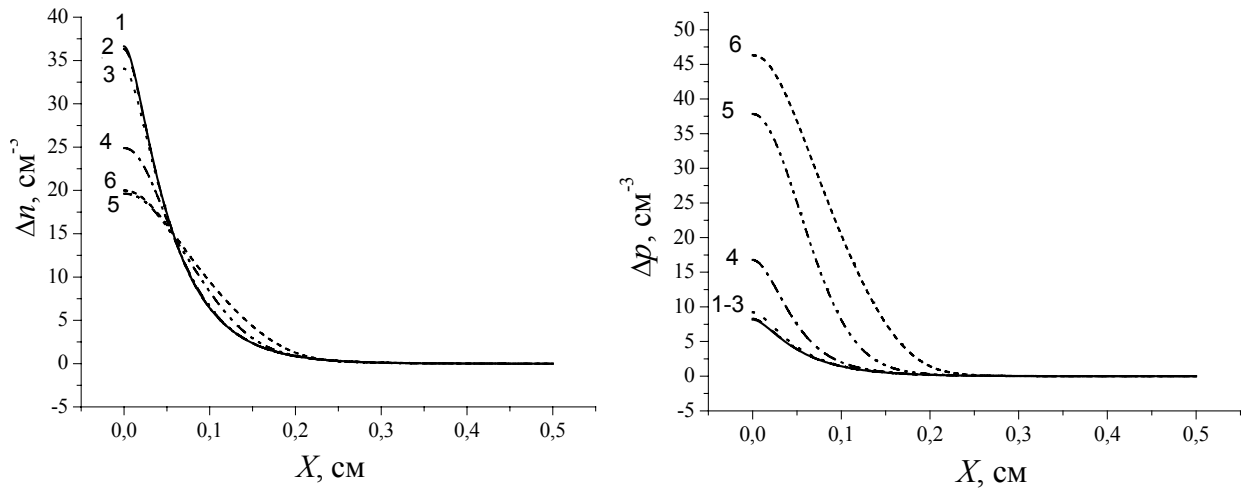


Рис 2. Розподіл просторової залежності модулів комплексних амплітуд нестационарних концентрацій для  $n$  (1),  $p$ -типу (2)

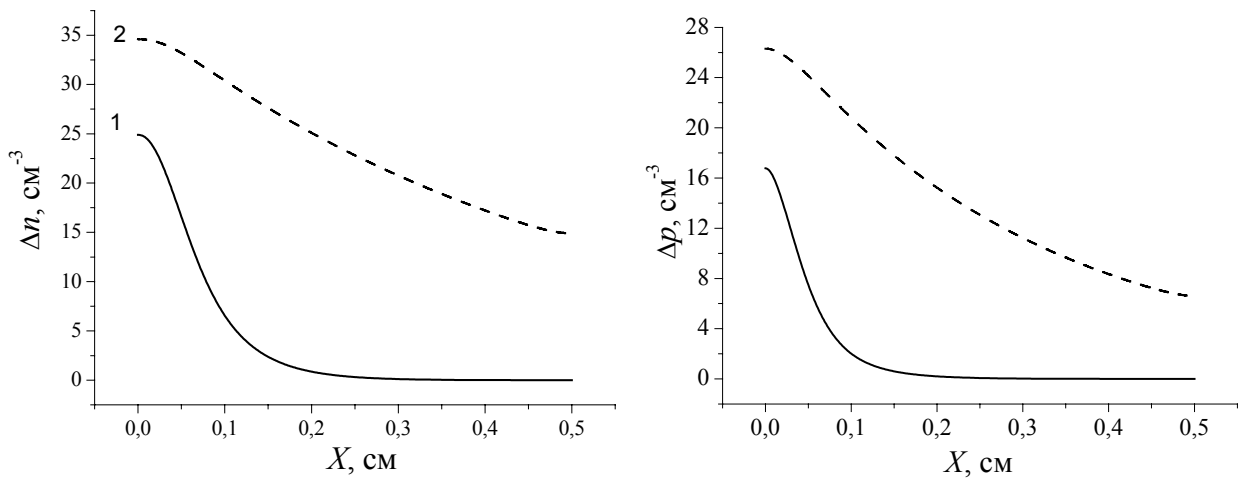


Рис 3. Розподіл розрахунку просторової залежності модулів комплексних амплітуд нестационарних концентрацій при великому (1) і малому (2) значеннях коефіцієнта поглинання

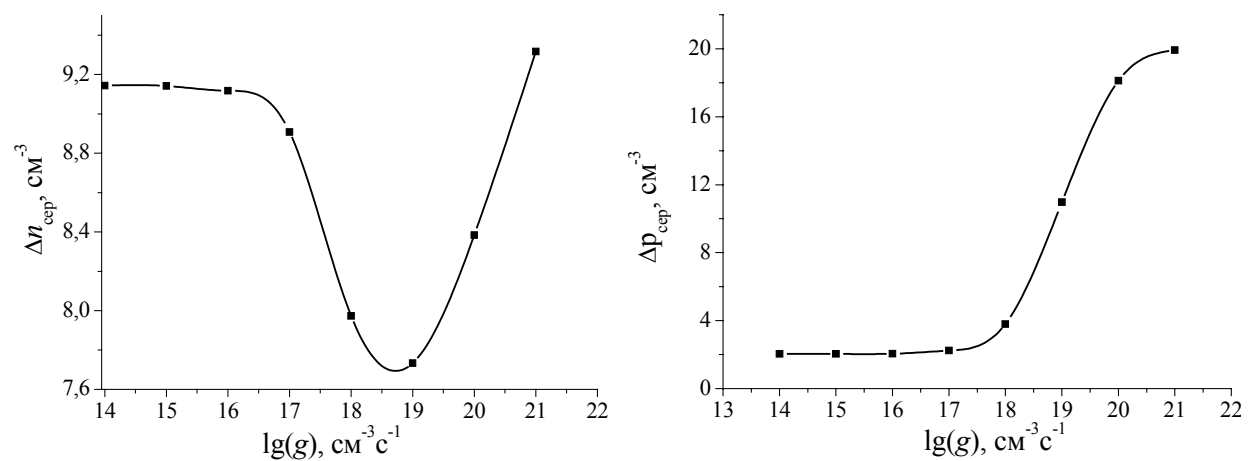


Рис 4. Розподіл , усереднених за об'ємом зразка, значень модулів комплексних амплітуд нестационарних концентрацій при  $\alpha=20 \text{ cm}^{-1}$  (1),  $\alpha=2 \text{ cm}^{-1}$  (2)

Наведені розрахунки та аналіз отриманих залежностей показали, що запропонована методика перетворення ФСР в наближенні часу життя нерівноважних носіїв дає змогу покращити стійкість та збіжність різницевого методу в широкому діапазоні зміни, як внутрішніх параметрів напівпровідника, так і зовнішніх параметрів фотозбудження. На відміну від інших методик, перетворення рекомбінаційних доданків в наближенні часу життя дозволяє отримувати стабільний розв'язок навіть у випадках сильної неоднорідності і високих рівнів фотозбудження.

#### СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. *Рывкин С.М.* Фотоэлектрические явления в полупроводниках. – М.: Физматгиз, 1963.
2. *Шувар Р.Я., Дацюк Ю.Р., Павлишенко Б.М.* Вплив нелінійної динаміки дифузійно-дрейфових процесів на рекомбінаційний механізм п'єзофоторезистивного ефекту // Вісник Львівського університету. Вип. 30: Серія фізична. Львів: ЛУ, 1998. – С.153-156.
3. *Grygiel P., Tomaszewicz W.* // J. Phys.: Condens. Matter. – 2000. – **12**. – P.5209.
4. *Бубенников А.Н.*, Моделирование интегральных микротехнологий, приборов и схем. – М: Высшая школа, 1989.
5. *Калиткин Н.Н.* Численные методы. – М.: Наука, 1988.
6. *Шувар Р.Я., Столярчук О.В.* Чисельний розв'язок фундаментальної системи рівнянь для задач стаціонарної фотопровідності // Вісник Львівського університету. Вип.40: Серія фізична. Львів: ЛУ, 1998.