

УДК 621.315.592

МОДЕЛЮВАННЯ ФОТОПРОВІДНОСТІ ПОРУВАТОГО КРЕМНІЮ ЗІ СФЕРИЧНОЮ ТА ЦИЛІНДРИЧНОЮ ГЕОМЕТРІЄЮ ПОР

Л. Монастирський, Б. Соколовський, М. Павлик

*Львівський національний університет імені Івана Франка,
вул. Драгоманова, 50, 79005 Львів, Україна*

Наведено результати числового моделювання фотопровідності макропоруватого кремнію зі сферичними і циліндричними порами методом скінченних елементів. Проаналізовано залежність фотопровідності від швидкості поверхневої рекомбінації за різних радіусів пор та середніх відстаней між ними. Враховано гаусівський розподіл значень радіусів пор.

Ключові слова: поруватий кремній, фотопровідність, комп'ютерне моделювання, метод скінченних елементів, геометрія пор, розміри пор.

Сьогодні актуальними є хімічні сенсори на кристалічних напівпровідниках, зокрема, на поруватому кремнії. Відомо, що суттєвий вплив на люмінесцентні та оптичні властивості поруватого кремнію має газове середовище і це стимулює появу праць зі створення сучасних фоточутливих систем детектування [1–3].

На відміну від звичайних напівпровідників, поруватий кремній об'єднує унікальну комбінацію кристалічної структури і гігантської зовнішньої поверхні ($200\text{--}500\text{ м}^2/\text{см}^3$), що може значно посилити ефекти адсорбції. Крім того, можна селективно змінювати активність поверхні поруватого кремнію у разі різних обробок і модифікацій: в органічних розчинниках, за термовідпалу, під дією світла. Серед таких сенсорів особливий інтерес становлять фоточутливі структури поруватого кремнію, принцип роботи яких ґрунтується на ефекті зміни фотопровідності в разі адсорбції газів за умов освітлення сенсора світлом. Для проектування таких сенсорів необхідно знати залежності фотопровідності від типу газового середовища, його концентрації, від властивостей поверхні поруватого кремнію – геометрії пор, радіуса пор і середньої відстані між ними. Той факт, що адсорбція молекул газу призводить до зміни швидкості поверхневої рекомбінації фотоносіїв, забезпечує чутливість поруватого кремнію як до типу газу, так і до його концентрації.

Розглянемо пластину макропоруватого кремнію з паралельно розташованими циліндричними або сферичними порами радіуса r_0 , які періодично розподілені в напівпровіднику за середньої відстані між центрами пор $2R$ і утворюють квадратну ґратку в площині xOy , розміщену перпендикулярно до осі пор. Напівпровідник p -типу провідності освітлюють світлом з області фундаментального поглинання, для якого функція генерації фотоносіїв G , тобто кількість фотоносіїв, які генеруються за 1 с в одиничному об'ємі, не залежить від координати. Зазначимо, що умова однорідної генерації фотоносіїв виконується в разі слабого поглинання світла.

Генеровані фотоносії рекомбінують як в об'ємі напівпровідника, так і на поверхнях пор, причому в разі стаціонарного освітлення усталюється такий неоднорідний просторовий розподіл концентрації фотоносіїв, за якого забезпечений баланс між процесами генерації і рекомбінації нерівноважних носіїв заряду.

Просторовий розподіл концентрації фотоносіїв Δn в області $r_0 \leq r \leq R$ описують рівнянням

$$\frac{\partial^2 \Delta n}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Delta n}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Delta n}{\partial z^2} - \frac{\Delta n}{L_n^2} = -\frac{\tau_n G}{L_n^2}, \quad (1)$$

де L_n – дифузійна довжина пробігу електронів; τ_n – час життя електронів. Зазначимо, що для макropоруватого кремнію $L_n \sim 10^{-7}$ м, $\tau_n \sim 10^{-6}$ с [4].

Рівняння (1) доповнюють двома крайовими умовами, перша з яких описує рекомбінацію носіїв на поверхні пори

$$\frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \left[x \frac{\partial \Delta n}{\partial x} + y \frac{\partial \Delta n}{\partial y} + z \frac{\partial \Delta n}{\partial z} \right] \Big|_{x^2 + y^2 + z^2 = r_0^2} = \frac{S \tau_n}{L_n^2} \Delta n \Big|_{x^2 + y^2 + z^2 = r_0^2}. \quad (2)$$

Тут S – швидкість поверхневої рекомбінації фотоносіїв, яка залежить від фізико-хімічного стану пори, наприклад, від наявності в порах молекул газу, що можуть змінювати електростатичний потенціал і, як наслідок, швидкість рекомбінації фотоносіїв.

Друга крайова умова виходить з того, що посередині між порами концентрація фотоносіїв досягає максимального значення

$$\frac{\partial \Delta n}{\partial x} \Big|_{x=\pm R} = 0, \quad \frac{\partial \Delta n}{\partial y} \Big|_{y=\pm R} = 0, \quad \frac{\partial \Delta n}{\partial z} \Big|_{z=\pm R} = 0. \quad (3)$$

На підставі координатного розподілу концентрації фотоносіїв можна розрахувати повну кількість фотоносіїв N в “елементарній комірці”:

$$N = \iiint \Delta n(x, y, z) dx dy dz, \quad (4)$$

де інтегрування ведуть по області з об'ємом A , яка є кубом зі стороною $2R$, що має в центрі круглий виріз радіуса r_0 . Залежно від геометрії пори це може бути циліндр або сфера. Зазначимо, що повна кількість фотоносіїв N з точністю до сталого множника залежного від рухливості носіїв заряду визначає фотопровідність поруватого кремнію.

Задачу (1)–(3) розв'язано методом скінченних елементів [5], який виявляється особливо ефективним у разі розрахунків систем, які мають складну геометричну конфігурацію.

Експериментальні дані засвідчують, що в поруватому кремнії є пори різного розміру, тобто різного радіуса, а розподіл пор за радіусами відповідає нормальному розподілу (розподілу Гауса)

$$f(r_0) = \frac{1}{\delta \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(r_0 - \mu)^2}{2\sigma^2}\right), \quad (5)$$

де μ – математичне сподівання; δ – стандартний відхил; σ^2 – дисперсія випадкової величини.

Тому після розрахунків отримані значення фотопровідності концентрації носіїв для різних значень r_0 усереднено за формулою

$$N_c = h \sum f(r_0) N(r_0). \quad (6)$$

де h – крок підсумовування; $f(r_0)$ – функція розподілу пор за радіусами; $N(r_0)$ – фотопровідність за радіуса пор r_0 .

Функція розподілу пор за радіусами $f(r_0)$ визначала ваговий коефіцієнт для значення фотопровідності відповідного r_0 . Функції розподілу задавали такі параметри: дисперсія випадкової величини $\delta^2 = 1$, математичне сподівання $\mu = 0,05$. За таких параметрів ця функція буде функцією нормального розподілу (рис. 1, крива 1). Якщо збільшимо дисперсію $\delta^2 = 4$, то отримаємо функцію розподілу з більшим розкидом вагових коефіцієнтів (див. рис. 1, крива 2).

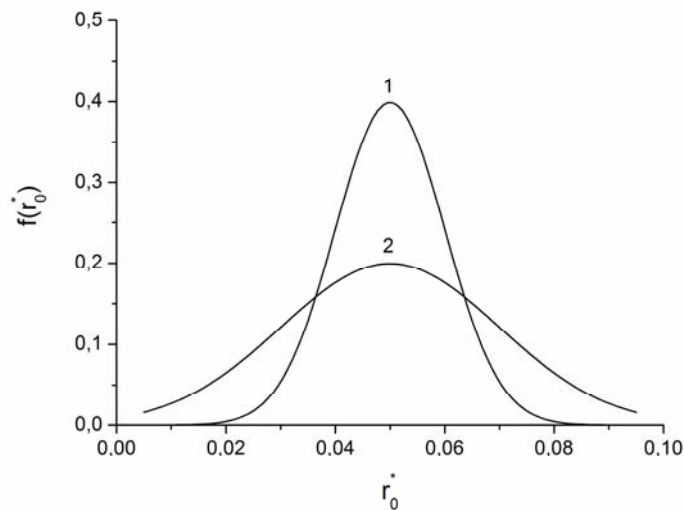


Рис. 1. Густина розподілу пор за радіусами: 1 – $\delta^2 = 1$, $\mu = 0,05$; 2 – $\delta^2 = 4$, $\mu = 0,05$.

Методом скінченних елементів одержано розв'язки рівняння (1) з крайовими умовами (2) та (3) у випадку циліндричної геометрії пор. Ці розв'язки зображено у вигляді графіків залежності усередненої фотопровідності поруватого кремнію від швидкості поверхневої рекомбінації і відстані між порами (рис. 2).

На рис. 2 показано залежності фотопровідності поруватого кремнію для циліндричної пори $r_0 = 0,05$ (крива 1), а також залежність усередненої фотопровідності від відстані між порами. Для визначення усередненого значення фотопровідності N_c^* використовували вираз (6). У цей вираз підставляли значення фотопровідності N^* для пор, радіус яких – від 0,005 до 0,095.

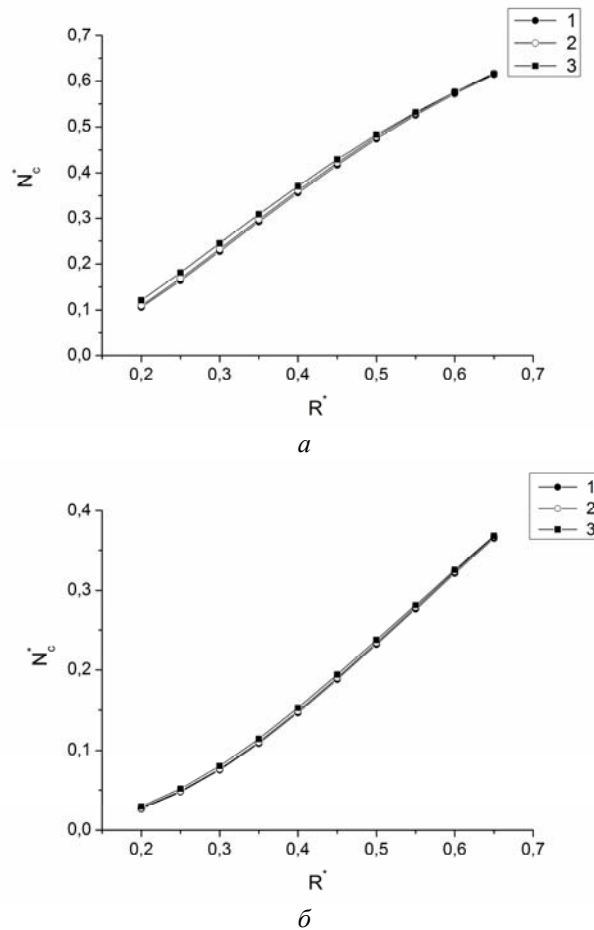


Рис. 2. Залежності усередненої фотопровідності поруватого кремнію від відстані між циліндричними порами: $a - S^* = 5$; $b - S^* = 95$. Крива 1 – фотопровідність ПК при $r_0 = 0,05$; криві 2, 3 – усереднена фотопровідність ПК при $\delta^2 = 1$ та $\delta^2 = 4$, відповідно.

Як показано на рис. 2, значення усередненої фотопровідності поруватого кремнію при $\delta^2 = 1$ практично збігаються зі значеннями фотопровідності поруватого кремнію для $r_0 = 0,05$. Проте значення N_c^* при $\delta^2 = 4$ дещо відрізняються. Це пов'язано з тим, що зі збільшенням відхилення від математичного сподівання збільшується кількість суттєвих вагових коефіцієнтів. Зазначимо, що зі збільшенням відстані між порами всі три криві збігаються.

На рис. 3, 4 зображено залежність N_c^* від швидкості поверхневої рекомбінації та відстані між сферичними й циліндричними порами, відповідно.

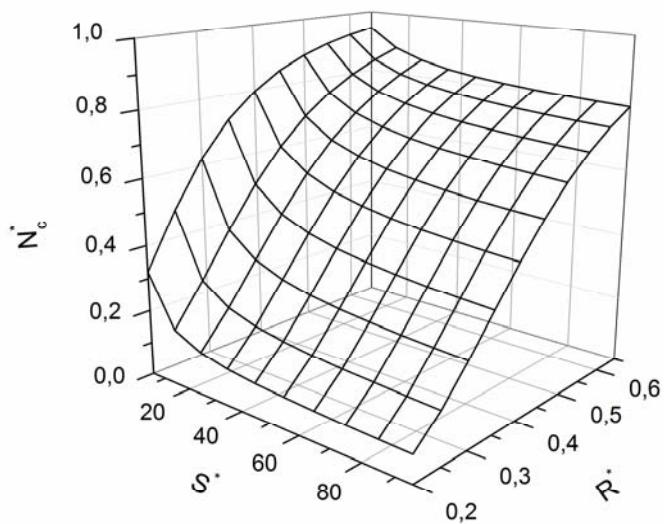


Рис. 3. Залежність усередненої фотопровідності від R^* і S^* для поруватого кремнію зі сферичною геометрією пор.

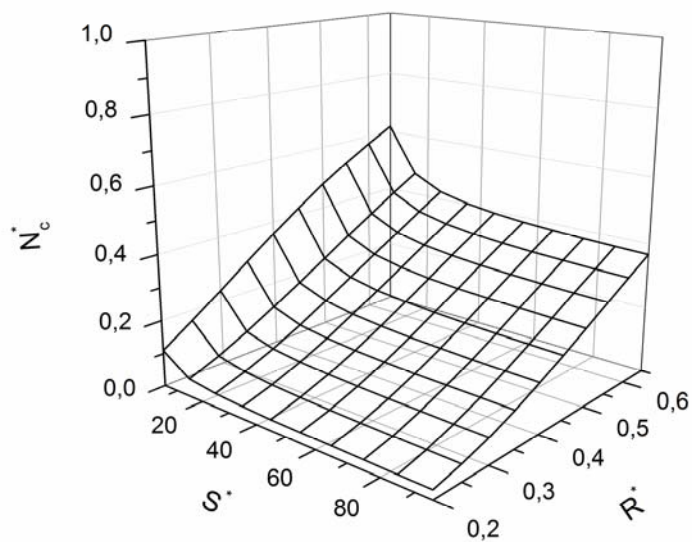


Рис. 4. Залежність усередненої фотопровідності від R^* і S^* для поруватого кремнію з циліндричною геометрією пор.

Для сферичної і циліндричної геометрії усереднена фотопровідність поруватого кремнію зростає зі збільшенням відстані між порами та зменшується в разі збільшення швидкості поверхневої рекомбінації.

Отже, методом скінченних елементів досліджено вплив неоднорідності розмірів пор на фотопровідність поруватого кремнію. Для циліндричних пор суттєвіший вплив гаусівського розподілу розміру пор виявляється для малих відстаней між центрами пор ($R^* \sim 0,2$), та при малих швидкостях поверхневої рекомбінації ($S^* \sim 5$). Типовий характер зростання фотопровідності зі збільшенням відстані між центрами пор має ділянку насичення тільки для малих швидкостей поверхневої рекомбінації ($S^* \sim 5$).

Для поруватого кремнію з циліндричною геометрією пор зменшення фотопровідності завдяки рекомбінаційним процесам за однакових радіусів пор, відстаням між центрами пор та швидкості поверхневої рекомбінації є в кілька разів суттєвішим, ніж для поруватого кремнію зі сферичною геометрією пор.

Отримані результати можна використати в ході створення сенсорних пристроїв, які працюють на особливостях ефекту фотопровідності поруватих матеріалів.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. *Kim S.-J.* Humidity sensors using porous silicon layer with mesa structure / S.-J. Kim, J.-Y. Park, S.-H. Lee, S.-H. Yi // *J. of Physics D: Applied Physics*. – 2000. – Vol. 33, N 15. – P. 1781–1784.
2. *Bratkowski A.* Novel gas sensor based on porous silicon measured by photovoltage, photoluminescence and admittance spectroscopy / A. Bratkowski, P. Borowski, W. Bała [et al.] // *Opto-Electronics Review*. – 2005. – Vol. 13, N 1. – P. 35–38.
3. *Биленко Д. И.* Свойства структур на основе окисленного пористого кремния при воздействии освещения и газовых сред / Д. И. Биленко, О. Я. Белобровая, Э. А. Жарикова [и др.] // *Физика и техника полупроводников*. – 2005. – Т. 39, вып. 7. – С. 834.
4. *Simons A. J.* Carrier mobility in porous silicon / A. J. Simons // *Properties of porous silicon*. Ed. by L. Canham. – London: INSPEC, 1997. – P. 176–184.
5. *Zienkiewicz, O. C.* The finite element method: its basis and fundamentals / O. C. Zienkiewicz, R. L. Taylor, J. Z. Zhu. – Oxford : Elsevier Butterworth-Heinemann, 2005. – 752 p.

*Стаття: надійшла до редакції 19.10.2013,
доопрацьована 28.10.2013,
прийнята до друку 25.11.2013.*

**MODELING OF PHOTOCONDUCTIVITY OF POROUS SILICON
WITH SPHERICAL AND CYLINDRICAL GEOMETRY OF PORES****L. Monastyrskii, B. Sokolovskii, M. Pavlyk***Lviv National University named after Ivan Franko
Str. Drahomanova 50, 79005 Lviv, Ukraine*

This paper investigates by the finite element method the influence of inhomogeneity in the distribution of pores on the photoconductivity of porous silicon.

For cylindrical pores the significant influence the Gaussian distribution of pore radii takes place for small distances between the centers of pores ($R^* \sim 0,2$) and at low velocities of surface recombination of photocarriers ($S^* \sim 5$). Typical part of the photoconductivity growth with increasing the distance between the centers of pores has a saturation region for low surface recombination velocity ($S^* \sim 5$). For porous silicon with a cylindrical pore geometry the photoconductivity decrease due to recombination processes at the same radii of pores between the centres and surface recombination velocities is several times more substantial than for the porous silicon with a spherical pore geometry. The results obtained can be used for creating sensory devices operating on the peculiarities of the photoconductivity effect of porous materials.

Key words: porous silicon, photoconductivity, computer modeling, finite element method, pore geometry.

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОТОПРОВОДИМОСТИ ПОРИСТОГО КРЕМНИЯ
СО СФЕРИЧЕСКОЙ И ЦИЛИНДРИЧЕСКОЙ ГЕОМЕТРИЕЙ ПОР****Л. Монастирський, Б. Соколовський, М. Павлык***Львовский национальный университет имени Ивана Франко
ул. Драгоманова, 50, 79005, Украина*

Методом конечных элементов исследовано влияние неоднородности распределения пор на фотопроводимость пористого кремния.

Для цилиндрических пор существеннее влияние гауссовского распределения величин радиусов пор проявляется для небольших расстояний между центрами пор ($R^* \sim 0,2$) и при малых скоростях поверхностной рекомбинации фотоносителей ($S^* \sim 5$). Типичный характер роста фотопроводимости при увеличении расстояния между центрами пор имеет участок насыщения только для низких скоростей поверхностной рекомбинации ($S^* \sim 5$). Для пористого кремния с цилиндрической геометрией пор уменьшение фотопроводимости за счет рекомбинационных процессов при одинаковых радиусах пор, расстояниях между центрами пор, скоростях поверхностной рекомбинации в несколько раз существеннее, чем для пористого кремния со сферической геометрией пор. Полученные результаты можно использовать при создании сенсорных устройств, работающих на особенностях эффекта фотопроводимости пористых материалов.

Ключевые слова: пористый кремний, фотопроводимость, компьютерное моделирование, метод конечных элементов, геометрия пор, размеры пор.