

## Моделювання фотопровідності поруватого кремнію: підвищення точності аналітичних розрахунків

Любомир Монастирський<sup>1</sup>, Богдан Соколовський<sup>2</sup>, Михайло Павлик<sup>3</sup>

<sup>1</sup> к. ф.-м. н., доцент, Львівський національний університет імені Івана Франка, вул. Драгоманова, 50, Львів, 79005, e-mail: monastyr@electronics.wups.lviv.ua

<sup>2</sup> к. ф.-м. н., с. н. с., Львівський національний університет імені Івана Франка, вул. Драгоманова, 50, Львів, 79005

<sup>3</sup> Львівський національний університет імені Івана Франка, вул. Драгоманова, 50, Львів, 79005, e-mail: m.pavlyk@meta.ua

*У роботі подані результати чисельного моделювання фотопровідності макропоруватого кремнію зі сферичними та циліндричними порами методом скінченних елементів. Шляхом порівняння їх з аналітичними розрахунками підібрані коректуючі коефіцієнти. Використовуючи ці коефіцієнти, отримані нові аналітичні вирази для розрахунку фотопровідності макропоруватого кремнію для різних діаметрів пор і відстаней між ними, які зменшують похибку до 1-5 %. Проаналізовано залежність фотопровідності від швидкості поверхневої рекомбінації для різних радіусів пор і середніх відстаней між ними.*

**Ключові слова:** поруватий кремній, радіус пори, фотопровідність, комп'ютерне моделювання, метод скінченних елементів.

**Вступ.** У наш час активно досліджують і використовують поруваті матеріали, зокрема поруватий кремній. Поруватий кремній має велику ефективну поверхню ( $200 \text{ м}^2/\text{см}^3$ ), тому адсорбція хімічно активних молекул може призвести до значної зміни концентрації носіїв заряду, електропровідності, фотопровідності, виходу люмінесценції. Значний інтерес викликає зміна фотопровідності поруватого кремнію під дією зовнішніх факторів, наприклад різних газових середовищ. З огляду на це, такі структури можуть використовуватися як ефективні газові сенсори [1-4]. Для проектування, прогнозування та формування необхідних параметрів таких сенсорів потрібно знати залежність фотопровідності від властивостей поверхні поруватого кремнію, які змінюються під дією газового середовища, середнього діаметра та відстані між порами. У багатьох працях [5-7] досліджується фотопровідність поруватого кремнію, однак відсутні детальні розрахунки, які прогнозують залежність фотопровідності від розмірів і геометрії пор в умовах доволі інтенсивної рекомбінації фотоносіїв на поверхні пор.

У роботі [8] було запропоновано аналітичну модель фотопровідності макропоруватого кремнію зі сферичними порами. Продовженням цього дослідження була праця [9], де сформовано аналітичну модель фотопровідності макропоруватого кремнію з циліндричними порами. Однак ці моделі можуть давати правильні

результати у разі доволі великих відстаней між центрами пор, якщо забезпечується сферична або циліндрична симетрія структури. Тому виникла необхідність оцінити похибку аналітичних моделей фотопровідності макропоруватого кремнію для реальних випадків, якщо розподіл фотоносіїв не володіє сферичною чи циліндричною симетрією. З цією метою у роботі проведено чисельне моделювання фотопровідності макропоруватого кремнію методом скінченних елементів і встановлено залежність похибки аналітичних розрахунків від середньої відстані між порами. Для зменшення величини похибки (до 1 %) запропоновано процедуру введення коректуючих коефіцієнтів в аналітичні вирази та встановлено кількісне значення таких коефіцієнтів.

## 1. Фотопровідність макропоруватого кремнію зі сферичними порами

Розглянемо модель напівпровідника р-типу провідності, в якому рівномірно розміщені сферичні пори радіуса  $r_0$ , середня відстань між центрами пор становить  $2R$ .

Вважаємо, що на напівпровідник падає світло, яке створює електронно-діркові пари, кількість яких не залежить від координати та в одиниці об'єму дорівнює  $G$ . Внаслідок сильної рекомбінації фотоносіїв на поверхні пор у напівпровіднику встановлюється неоднорідний розподіл фотоносіїв і відбувається амбіполярна дифузія фотоносіїв до пор. Просторовий розподіл концентрації фотоносіїв  $\Delta n$  для випадку сферичної симетрії в області  $r_0 \leq r \leq R$  описується рівнянням

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

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

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

$$\frac{d \Delta n(r_0)}{dr} = \frac{S \tau_n}{L_n^2} \Delta n(r_0). \quad (2)$$

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

Друга крайова умова ґрунтується на тому, що посередині між порами концентрація фотоносіїв досягає максимального значення

$$\frac{d \Delta n(R)}{dr} = 0. \quad (3)$$

Розв'язком рівняння (1) із крайовими умовами (2) та (3) є

$$\frac{\Delta n(r^*)}{G\tau_n} = 1 - \frac{S^* r_0^* \left[ \left(1 + \frac{1}{R^*}\right) \exp(r^* - R^*) + \left(1 - \frac{1}{R^*}\right) \exp(-r^* + R^*) \right]}{2r^* \left\{ \left[ \frac{1}{r_0^*} - \frac{1}{R^*} + S^* \right] \cosh(R^* - r_0^*) - \left[ \frac{1}{r_0^* R^*} - 1 + \frac{S^*}{R^*} \right] \sinh(R^* - r_0^*) \right\}}, \quad (4)$$

де  $R^* = R/L_n, r_0^* = r_0/L_n, r^* = r/L_n, S^* = S\tau_n/L_n$  — безрозмірні величини.

Вираз для визначення середньої концентрації фотоносіїв  $\langle \Delta n \rangle$ , яка відповідає фотопровідності поруватого кремнію, має вигляд [8]

$$\frac{\langle \Delta n \rangle}{G\tau_n} = 1 - \frac{R^{*3} (6 - \pi) \left[ 1 - \Delta n(R^*) \right] + 3\pi r_0^{*2} S^* \Delta n(r_0^*)}{6R^{*3} - \pi r_0^{*3}}, \quad (5)$$

в який входять значення функції (4) тільки в точках  $r_0^*, R^*$ .

Методом скінченних елементів [11] були одержані розв'язки рівняння (1) із крайовими умовами (2), (3) у випадку, якщо відсутня сферична симетрія. Ці розв'язки подані у вигляді графіків залежності фотопровідності поруватого кремнію від радіуса пор  $i$  та відстані між порами для різних значень швидкості поверхневої рекомбінації (рис. 1а, б).

Знайдено, що фотопровідність поруватого кремнію зростає зі збільшенням відстані між порами та зменшується у разі зростання радіуса пор або швидкості поверхневої рекомбінації. Результати розрахунків показують, що значення, отримані чисельним методом, є більші, порівняно з даними аналітичної моделі. Зі збільшенням відстані між порами різниця між чисельними й аналітичними результатами розрахунків зменшується. Для оцінки величини цієї різниці вводимо позначення

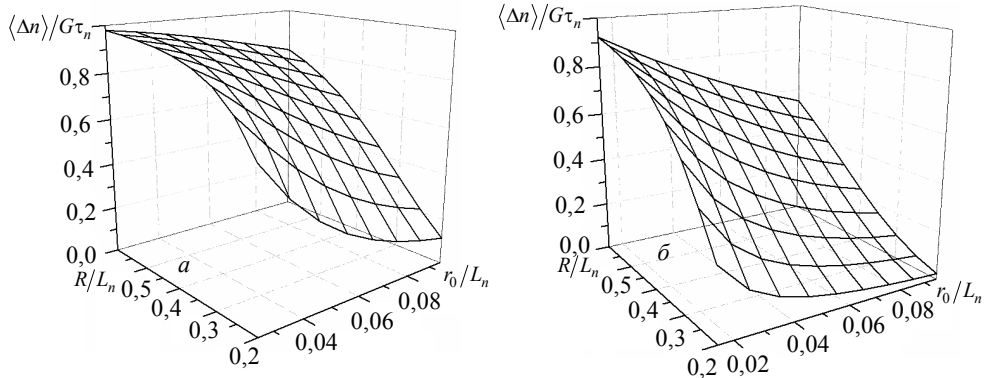


Рис. 1. Залежності фотопровідності від  $R/L_n$  і  $r_0/L_n$  для різних значень швидкості поверхневої рекомбінації  $S^* = 5$  (а) та  $S^* = 200$  (б) для поруватого кремнію зі сферичною геометрією пор

$$\varepsilon = \left[ (\Delta n / G\tau_n)_{num} - (\Delta n / G\tau_n)_{analytic} \right] / (\Delta n / G\tau_n)_{num},$$

де  $\varepsilon$  — похибка між чисельними й аналітичними результатами розрахунків.

Аналітичний метод відносно чисельного для малих значень відстаней між порами дає суттєву похибку  $\varepsilon = 50-60\%$ , а для  $R > L_n$  похибка прямує до  $1\%$  (рис. 2, криві 1, 2). Для зменшення похибки у разі малих  $R$  можна зробити заміну  $R^{**} = R^*/a$ ,  $a = 0,73$  [8] у виразі для фотопровідності

$$\frac{\langle \Delta n \rangle}{G\tau_n} = 1 - \frac{R^{*3}(6 - \pi) \left[ 1 - \Delta n(R^{**}) \right] + 3\pi r_0^{*2} S^* \Delta n(r_0^*)}{6R^{*3} - \pi r_0^3}. \quad (6)$$

Для розрахунку середньої концентрації фотоносіїв  $\langle \Delta n \rangle$  було вибрано «елементарну комірку» у напівпровіднику, яка є кубом із стороною  $2R^*$ , і в цій комірці було розраховано повне число фотоносіїв. Для того, щоб врахувати фотоносії в областях куба поза порою, можна в першому наближенні концентрацію носіїв у цих областях вважати постійною та рівною  $\Delta n(R^{**})$  — концентрації фотоносіїв посередині між порою та вершиною куба. У результаті такої заміни похибка зменшилася до  $3-8\%$  (рис. 2, криві 3, 4). Обчислення показують, що  $\Delta n(R^*)$ , розраховане чисельним методом, перевищує відповідне значення, отримане аналітичним методом. Це пов'язано з тим, що відбувається дрейф фотоносіїв із тих областей «елементарної комірки», які знаходяться поза порою. Подальше зменшення похибки (до  $1\%$ ) можна досягнути шляхом введення скоректованих змінних  $R^* = R^*/b$ ,  $R^{**} = R^{**}/b$  у виразі (6)

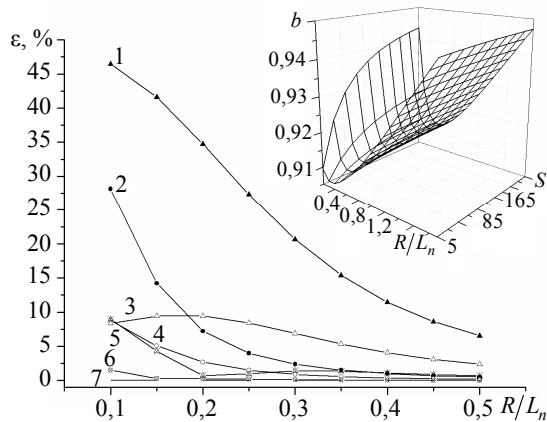


Рис. 2. Залежності відносної різниці  $\varepsilon$  між результатами фотопровідності, одержаної чисельним і аналітичним методами розрахунку, від відстані між порами для  $S^* = 5$  (криві 1,3,5) і  $S^* = 200$  (криві 2,4,6), якщо  $r_0^* = 0,01$ .

На вставці — залежність коректуючого коефіцієнта  $b$  від відстані між порами та швидкості поверхневої рекомбінації для  $r_0^* = 0,01$

$$\frac{\langle \Delta n \rangle}{G\tau_n} = 1 - \frac{R'^{*3}(6 - \pi) \left[ 1 - \Delta n(R'^{*}) \right] + 3\pi r_0'^{*2} S^* \Delta n(r_0'^{*})}{6R'^{*3} - \pi r_0'^{*3}}. \quad (7)$$

Коефіцієнт  $b$  підбираємо таким чином, щоб похибка була менша, ніж 1 %, (рис. 2, крива 7) для різних значень відстаней між порами  $R^*$  та швидкостей поверхневої рекомбінації  $S^*$  (рис. 2, вставка). За збільшення  $R^*$  коефіцієнт  $b$  прямує до 1. Це відбувається тому, що для  $R^* \gg L_n$  помилка, яку вносить симетрія задачі, зменшується. Отже, похибка також зменшується і коефіцієнт  $b$  повинен прямувати до 1.

Використовуючи діапазон значень коефіцієнта  $b$  (рис. 2, вставка), було підбрано його усереднене значення, яке рівне 0,92, і для виразу (7) при цьому значенні було визначено похибку, яка не перевищувала 1-2 % (рис. 2, криві 5, 6).

## 2. Фотопровідність макропоруватого кремнію з циліндричними порами

Розглянемо тепер модель поруватого напівпровідника одиначної товщини з паралельно розташованими циліндричними порами радіуса  $r_0$ , які рівномірно розміщені в об'ємі напівпровідника за середньої відстані між центрами пор  $2R$ . Для випадку циліндричної симетрії просторовий розподіл концентрації фотонів  $\Delta n$  описується таким диференціальним рівнянням

$$\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left( r \frac{d\Delta n}{dr} \right) - \frac{\Delta n}{L_n^2} = -\frac{G\tau_n}{L_n^2}. \quad (8)$$

Рівняння (8) доповнюється крайовими умовами — (2) та (3). Аналітичний розв'язок рівняння (8) із крайовими умовами (2) та (3) отримано нами [9]

$$\frac{\Delta n(r^*)}{G\tau_n} = 1 - \frac{S^* \left[ I_1(R^*) K_0(r^*) + K_1(R^*) I_0(r^*) \right]}{I_1(R^*) \left[ K_1(r_0^*) + S^* K_0(r_0^*) \right] - K_1(R^*) \left[ I_1(r_0^*) - S^* I_0(r_0^*) \right]}, \quad (9)$$

де  $I_n, K_n$  — функції Бесселя уявного аргументу порядку  $n$  [12].

Вираз для визначення середньої концентрації  $\langle \Delta n \rangle$ , яка відповідає фотопровідності поруватого кремнію, має вигляд

$$\frac{\langle \Delta n \rangle}{G\tau_n} = 1 - \frac{1}{4R'^{*2} - \pi r_0'^{*2}} \left\{ \frac{2\pi r_0'^{*} S^* \Delta n(r_0'^{*})}{G\tau_n} + R'^{*2} (4 - \pi) \left[ 1 - \frac{\Delta n(R'^{*})}{G\tau_n} \right] \right\}. \quad (10)$$

Співвідношення (10) містить значення функції (9) тільки в точках  $r_0^*, R^*$ .

Методом скінченних елементів були отримані розв'язки рівняння (8) із крайовими умовами (2) та (3) в загальному випадку, якщо відсутня циліндрична симетрія (рис. 3а, б).

У цій моделі фотопровідність поруватого кремнію також зростає зі збільшенням відстані між порами та зменшується у разі збільшення радіуса пор або швидкості

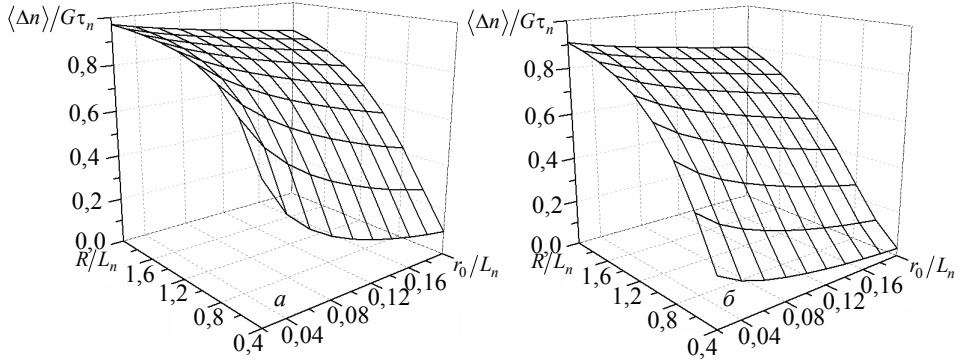


Рис. 3. Залежності фотопровідності від  $R/L_n$  і  $r_0/L_n$  для різних значень швидкості поверхневої рекомбінації  $S^* = 5$  (а) і 200 (б) для поруватого кремнію з циліндричною геометрією пор

поверхневої рекомбінації. Значення, отримані чисельним методом, є більші, порівняно зі значеннями, отриманими з аналітичної моделі. Зі збільшенням відстані між порами різниця між чисельними й аналітичними результатами розрахунків зменшується.

Аналітичний метод розрахунку відносно чисельного для малих значень відстаней між порами дає суттєву похибку 20-30 %, а для  $R > L_n$  похибка прямує до 1 % (рис. 4, криві 1, 2). Для зменшення похибки у разі малих  $R$  можна зробити заміну  $R^{**} = R^*/a$ ,  $a = 0,83$  [9] у виразі для фотопровідності

$$\frac{\langle \Delta n \rangle}{G\tau_n} = 1 - \frac{1}{4R^{*2} - \pi r_0^{*2}} \left\{ \frac{2\pi r_0^* S^* \Delta n(r_0^*)}{G\tau_n} + R^{*2} (4 - \pi) \left[ 1 - \frac{\Delta n(R^{**})}{G\tau_n} \right] \right\}. \quad (11)$$

Ця заміна та наступна проводилися з тих самих міркувань, що були запропоновані вище, тільки використовувалася «елементарна комірка» у вигляді паралелепіпеда одиничної висоти та з квадратною основою зі стороною  $2R^*$ . Внаслідок

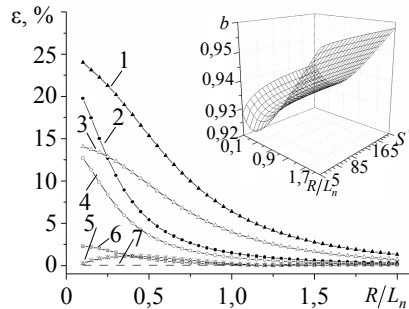


Рис. 4. Залежності відносної різниці  $\epsilon$  між результатами фотопровідності, одержаної чисельним і аналітичним методами розрахунку від відстані між порами для  $S^* = 5$  (криві 1,3,5) і  $S^* = 200$  (криві 2,4,6), якщо  $r_0^* = 0,01$ .

На вставці — залежність коректуючого коефіцієнта  $b$  від відстані між порами та швидкості поверхневої рекомбінації для  $r_0^* = 0,01$

такої заміни похибка зменшилася до 5-15 % (рис. 4, криві 3, 4). Подальше зменшення похибки (до 1 %) можна досягнути шляхом введення скоректованих змінних  $R^* = R^*/b$ ,  $R^{**} = R^{**}/b$  у виразі (11)

$$\frac{\langle \Delta n \rangle}{G\tau_n} = 1 - \frac{1}{4R^{*2} - \pi r_0^{*2}} \left\{ \frac{2\pi r_0^* S^* \Delta n(r_0^*)}{G\tau_n} + R^{**2} (4 - \pi) \left[ 1 - \frac{\Delta n(R^{**})}{G\tau_n} \right] \right\}. \quad (12)$$

Коефіцієнт  $b$  обираємо таким чином, щоб похибка була менша, ніж 1 % (рис. 4, крива 7) для різних значень відстаней між порами  $R^*$  та швидкостей поверхневої рекомбінації  $S^*$  (рис. 4, вставка). Коефіцієнт  $b$  також прямує до 1 зі збільшенням  $R^*$ , отже помилка, яку вносить симетрія задачі, зменшується і, як наслідок, похибка також зменшується. Аналогічно, як у випадку сферичної геометрії, можна підібрати на основі даних на рис. 4 (вставка) усереднене значення  $b = 0,94$ . При цьому похибка для виразу (12) із цим значення не перевищуватиме 1-5 % (рис. 4, криві 5, 6).

**Висновки.** Проведено чисельне моделювання фотопровідності макропоруватого кремнію методом скінченних елементів і, шляхом порівняння отриманих результатів з аналітичними розрахунками, підібрані усереднені коректуючі коефіцієнти  $b = 0,92$  та  $0,94$  для задач із сферичною та циліндричною симетрією відповідно. Використовуючи усереднені коефіцієнти  $b$ , отримані нові аналітичні вирази для розрахунку фотопровідності макропоруватого кремнію, які зменшують похибку до 1-5 %. Встановлено, що в той час, коли аналітичні вирази без корекції дають похибку 20-45 % у разі малих відстаней між порами, введення коректуючих коефіцієнтів дозволяє суттєво зменшити похибку (до 1 %) аналітичних розрахунків.

Показано, що фотопровідність макропоруватого кремнію для фіксованого ненульового значення швидкості поверхневої рекомбінації зростає зі збільшенням середньої відстані між порами та зменшується за збільшення радіуса пор.

## Література

- [1] Свойства структур на основе окисленного пористого кремния при воздействии освещения и газовых сред / Д. И. Биленко, О. Я. Белоброва, Э. А. Жарикова и др. // ФТП. — 2005. — Т. 39, вып. 7. — С. 834.
- [2] Novel gas sensor based on porous silicon measured by photovoltage, photoluminescence and admittance spectroscopy / A. Bratkowski, P. Borowski, W. Bala et al. // Opto-Electronics Review. — 2005. — Vol. 13, No 1. — P. 35-38.
- [3] Multiparametric porous silicon sensors / C. Baratto, G. Faglia, G. Sberveglieri et al. // Sensors. — 2002. — Vol. 2. — P. 121-126.
- [4] Humidity sensors using porous silicon layer with mesa structure / S.-J. Kim, J.-Y. Park, S.-H. Lee, S.-H. Yi // Journal of Physics D: Applied Physics. — 2000. — Vol. 33, No 15. — P. 1781-1784.
- [5] Photoconductivity characteristics of porous silicon / L. Kaifeng, W. Yumin, Z. Lei et al. // Chin. Phys. Lett. — 1994. — Vol. 11, No 5. — P. 289-292.
- [6] Photoconductivity in macroporous silicon with regular structure of macropores / V. I. Ivanov, L. A. Karachevtseva, N. I. Karas et al. // Semiconductor Physics, Quantum Electronics and Optoelectronics. — 2007. — Vol. 10, No 4. — P. 72-76.
- [7] Study of anodization parameters effects on photoconductivity of porous silicon / H. Khalili, R. S. Dariani, A. MortezaAli et al. // J. Mater. Sci. — 2007. — Vol. 42, No 3. — P. 908-913.

- [8] *Монастырский, Л. С.* Расчет фоточувствительности пористого кремния для оптоэлектронных устройств / *Л. С. Монастырский, Б. С. Соколовский* // Прикладная физика. — 2007. — № 6. — С. 127-131.
- [9] *Monastyrskii, L. S.* Calculation of photosensitivity of porous silicon with the cylindrical geometry of pores // *L. S. Monastyrskii, B. S. Sokolovskii, V. S. Vasylyshyn* // Optical Memory and Neural Networks. — 2009. — Vol. 18, No 1. — P. 55-59.
- [10] *Simons, A. J.* Carrier mobility in porous silicon / In: Properties of porous silicon. Ed. by *Canham L. / A. J. Simons*. — London: INSPEC, 1997. — P. 176-184.
- [11] *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.
- [12] *Ватсон, Г. Н.* Теория бесселевых функций: пер. со 2-го англ. изд. / *Г. Н. Ватсон*; пер. *В. С. Берман*. — Москва: Изд. иностр. лит., 1949. — Ч. 1. — 798 с.

## **Modeling of photoconductivity of porous silicon: increasing accuracy of analytic calculations**

Lubomyr Monastyrskii, Bohdan Sokolovskii, Mykhailo Pavlyk

*The paper presents the results of analytical and numerical calculations of photoconductivity of macroporous silicon with spherical and cylindrical pores. By comparing them with analytical calculations the correction coefficients were chosen. Using these coefficients new analytical expressions for calculation of the photoconductivity of macroporous silicon for different pore diameters and distances between them, which reduce the error to the value of 1-5 %, were obtained. The photoconductivity dependence on the velocity of surface recombination at different values of pore radius and the average distance between them was analyzed.*

## **Моделирование фотопроводимости пористого кремния: повышение точности аналитических расчетов**

Любомир Монастырский, Богдан Соколовский, Михаил Павлик

*В работе представлены результаты численного моделирования фотопроводимости макропористого кремния со сферическими и цилиндрическими порами методом конечных элементов. Путем сравнения их с аналитическими расчетами подобраны корректирующие коэффициенты. Используя эти коэффициенты, получены новые аналитические выражения для расчета фотопроводимости макропористого кремния для различных диаметров пор и расстояний между ними, которые уменьшают погрешность до 1-5 %. Проанализирована зависимость фотопроводимости от скорости поверхностной рекомбинации при различных радиусах пор и средних расстояниях между ними.*

Представлено професором Є. Чаплею

Отримано 02.06.11