В.Ф. Онищенко, М.І. Карась

РОЗРАХУНОК СПЕКТРІВ ФОТОПРОВІДНОСТІ В КРЕМНІЇ З ПОВЕРХНЯМИ, СТРУКТУРОВАНИМИ МАКРОПОРАМИ

Розраховано особливості спектрів фотопровідності в кремнії з поверхнями, структурованими макропорами, в залежності від коефіцієнта відбиття від поверхні. У представленій моделі спектра фотопровідності ми врахували багаторазове відбиття світла від частково відбиваючих кремнієвих поверхонь, структурованих макропорами. Наведено розподіл інтенсивності електромагнітного випромінювання та розподіл надлишкових неосновних носіїв заряду в структурі макропористого кремнію від відстані до поверхні, що освітлюється. Розраховано довжини хвиль, при яких фотопровідність у структурі макропористого кремнію з двома макропористими поверхнями зростає ефективно. Показано розподіл надлишкових неосновних носіїв заряду у структурі макропористого кремнію для коефіцієнтів відбиття 0 та 0,5 при падінні електромагнітної хвилі 0,95 мкм.

Ключові слова: макропористий кремній, спектр, фотопровідність, розподіл носіїв заряду.

1. ВСТУП

Пористий кремній використовується в сенсорах, приймачах, в інтегральних мікросхемах. Кремнієва матриця з порами ефективно поглинає світло і є фоточутливою [1]. Поверхня монокристалічного кремнію структурується конусами [2], пірамідками [3] і порами [4]. Структурована поверхня кремнію не тільки зменшує відбиття світла, але й розсіює його, що збільшує оптичний шлях світла та його поглинання [3]. Якщо структурувати дві кремнієві поверхні, то отримуємо багаторазове відбиття світла між цими поверхнями. Частина розсіяних однією поверхнею променів буде повністю відбита від іншої поверхні завдяки тому, що вони падали під кутами, більшими ніж критичний кут повного внутрішнього відбиття [4, 5]. Аналітичні розрахунки кутового розподілу світла в об'ємі структурованого конусами кремнію показують, що 70% світла може піддаватися внутрішньому відбиттю [5]. Кутовий розподіл світла в об'ємі кремнію, коефіцієнт відбиття, пропускання та поглинання структурованого конусами кремнію можна обчислити за допомогою строгого аналізу зв'язаних хвиль [2]. Структурована кремнієва поверхня поглинає світло у широкому діапазоні довжин хвиль, тому вона знайшла застосування в сонячних батареях [1, 6], фотодетекторах та сенсорах зображення з підвищеною чутливістю [7, 8]. Кремній зі структурованими поверхнями має велику площу поверхні, яку треба якісно пасивувати [9]. Час життя неосновних носіїв заряду в сонячних батареях із пасивованими чорними структурованими кремнієвими поверхнями дорівнює мілісекундам [10]. Для фотопровідності структур макропористого кремнію використовується знаходження розрахунок розподілу фотоносіїв в шарі макропористого кремнію та монокристалічній підкладці при їх однорідній генерації по об'єму зразка [11, 12]. Розрахунки показали, що при збільшенні глибини макропор до 10 мкм концентрація нерівноважних неосновних носіїв заряду різко зменшується [13]. Розраховано залежність ефективного часу життя неосновних носіїв заряду в макропористому кремнії [14] та в чорному кремнії, структурованому конусами і пірамідками від діаметра основи конуса, сторони основи піраміди, висоти конуса і піраміди [15]. Чисельний розрахунок з використанням експериментальних даних показав, що полірована пластинка, як з монокристалічного, так і з чорного кремнію *n*- та *p*-типу, має великий час життя неосновних носіїв заряду як в об'ємі, так і на поверхні кремнію [15]. Досліджено провідність та фотопровідність структур макропористого кремнію від розмірів макропор та зразка [16].

Метою даної роботи є чисельний розрахунок та дослідження зміни спектрів фотопровідності в кремнії з двома структурованими поверхнями. Оцінка збільшення фотопровідності, яке виникає за рахунок відбивання від структурованих поверхонь, в залежності від коефіцієнта відбивання від структурованих поверхонь.

2. РОЗРАХУНОК РОЗПОДІЛУ НАДЛИШКОВИХ НОСІЇВ ЗАРЯДУ В КРЕМНІЇ З ДВОМА МАКРОПОРИСТИМИ ПОВЕРХНЯМИ

Нехай ми маємо монокристал кремнію з двома макропористими поверхнями, які відбивають електромагнітне випромінювання всередину монокристала кремнію з коефіцієнтом відбиття k. Тобто в даному випадку ми розглядаємо структуру макропористого кремнію з неглибокими макропорами, які розташовані на двох його поверхнях. Рівняння дифузії для надлишкових неосновних носіїв заряду в монокристалі кремнію з двома макропористими поверхнями запишемо у вигляді [17]:

$$D_{p} \frac{\partial^{2} p(x)}{\partial x^{2}} - \frac{\delta p(x)}{\tau_{b}} + g_{p}(x) = 0 \quad .$$

$$\tag{1}$$

Функцію розподілу інтенсивності електромагнітного випромінювання в монокристалі кремнію з двома макропористими поверхнями визначимо таким чином:

$$g_{p}(x) = \begin{cases} g_{p0} \exp(-\alpha x), n = 1 \\ g_{p0} \left[\exp(-\alpha x) + \left((1+k)\cosh(\alpha x) + (1-k)\sinh(\alpha x)\right) \sum_{n=1}^{n} \left(k^{2n0-1}\exp(-2\alpha hn_{0})\right) \right], n > 1 \end{cases}$$
(2)

де α – коефіцієнт поглинання електромагнітного випромінювання в монокристалічному кремнії, g_{p0} – генерація неосновних носіїв заряду на поверхні зразка, h – товщина зразка макропористого кремнію, n – кількість відбивань від поверхонь. Електромагнітне випромінювання відбивається та розсіюється від дна макропор. Глибина макропор досягає 0,5 мкм. Якщо кількість відбивань від макропористих поверхонь прямує до нескінченності, тоді рівняння (2) перепишемо так:

$$g_{p}(x) = g_{p0} \left[\exp(-\alpha x) + \frac{(1+k)\cosh(\alpha x) + (1-k)\sinh(\alpha x)}{\exp(2\alpha h) - k^{2}} k \right].$$
 (3)

Загальний розв'язок рівняння (1) набуває вигляду:

$$\delta p(x) = C_1 \cosh\left(\frac{x}{L_p}\right) - C_2 \sinh\left(\frac{x}{L_p}\right) - C_3, \qquad (4)$$

де C_1 , C_2 , C_3 – константи, $L_p = \sqrt{D_p \tau_b}$, D_p – коефіцієнт дифузії неосновних носіїв заряду, τ_b – час життя надлишкових неосновних носіїв заряду в об'ємі монокристалічного кремнію. Знайдемо константу C_3 , підставивши загальний розв'язок (4) в рівняння (1). Розподіл концентрації надлишкових неосновних носіїв заряду в макропористому кремнії з двома макропористими поверхнями від координати *x*:

$$\delta p(x) = C_1 \cosh\left(\frac{x}{L_p}\right) - C_2 \sinh\left(\frac{x}{L_p}\right) - \frac{\tau_b}{(\alpha L_p)^2 - 1} g_p(x).$$
(5)

Постійні знайдемо C_1 , C_2 з граничних умов. Гранична умова на поверхні макропористого кремнію, на яку падає електромагнітне випромінювання, має вигляд:

$$D_p \frac{d\delta p}{dx}(0) = s_1 \delta p(0) , \qquad (6)$$

де s₁ – швидкість поверхневої рекомбінації. Гранична умова на іншій поверхні:

$$D_{p}\frac{d\delta p}{dx}(h) = -s_{2}\delta p(h), \qquad (7)$$

де s₂ – швидкість поверхневої рекомбінації на протилежній поверхні макропористого кремнію.

На рис. 1 показано розрахований за рівняннями (3), (5)-(7) розподіл надлишкових неосновних носіїв заряду в монокристалі кремнію та в макропористому кремнії з двома пористими поверхнями. Електромагнітне випромінювання, яке падало на поверхню макропористого кремнію з двома пористими поверхнями, мало довжину хвилі 0.95 мкм або 1.05 мкм. Ми зробили розрахунок для випадку, коли коефіцієнт відбиття від структурованої макропорами поверхні дорівнював 0,5. Товщина зразка 200 мкм. Також враховано, що коефіцієнт поглинання залежить від довжини хвилі $\alpha = \alpha(\lambda)$. Потужність електромагнітного випромінювання була однаковою для всіх довжин хвиль. Ми розглядали випадок, коли швидкість поверхневої рекомбінації на поверхнях монокристала та макропористого кремнію була однаковою – 0,9 м/с. 3 рис. 1 видно, що концентрація надлишкових неосновних носіїв заряду в макропористому кремнії з макропористими поверхнями суттєво більша (криві 1, 4), ніж у монокристалі (криві 2, 3), при падінні електромагнітного випромінювання з довжиною хвилі 1,05 мкм. Концентрація надлишкових неосновних носіїв заряду у макропористому кремнії з макропористими поверхнями збільшувалась тільки завдяки відбиттю від макропористих поверхонь. Електромагнітне випромінювання, падаючи на дно неглибоких макропор, розсіюється під різними кутами. Частина електромагнітного випромінювання падає на протилежну поверхню під кутами, більшими ніж критичний кут повного внутрішнього відбиття, та відбивається. Інша частина електромагнітного випромінювання проходить крізь структуровані макропорами поверхні та бокові грані зразка. Відбиття та проходження електромагнітного випромінювання задається коефіцієнтом відбиття від поверхонь. Електромагнітні хвилі з довжинами хвиль до 0,95 мкм поглинаються в кремнії на відстані до 63 мкм від поверхні, що освітлюється, тому додаткова фотопровідність у структурі макропористого кремнію, яка пов'язана з відбиттям від поверхонь при цих довжинах хвиль, не отримується.



Рис. 1. Розрахований розподіл надлишкових неосновних носіїв заряду в монокристалі кремнію (2, 3) та в макропористому кремнії з двома пористими поверхнями (1, 4) при падінні на його поверхню електромагнітного випромінювання з довжиною хвилі 0,95 мкм (1, 2), 1,05 мкм (3, 4).

3. РОЗРАХУНОК СПЕКТРІВ ФОТОПРОВІДНОСТІ В КРЕМНІЇ З ДВОМА МАКРОПОРИСТИМИ ПОВЕРХНЯМИ

Фотопровідність надлишкових неосновних носіїв заряду за нескінченної кількості відбивань між двома поверхнями макропористого кремнію визначається як

$$\delta\sigma_{p} = e\mu_{p} \left[L_{p} \left(C_{1} \sinh\left(\frac{h}{L_{p}}\right) - 2C_{2} \sinh^{2}\left(\frac{h}{L_{p}}\right) \right) - \frac{\tau_{b}g_{p0}\alpha^{-1}}{(\alpha L_{b})^{2} - 1} \left(1 - \exp(-\alpha x) + \frac{2\sinh(\alpha x)}{k^{-1}\exp(2\alpha h) - 1} \right) \right].$$
(8)

Для побудови спектральної залежності фотопровідності монокристала кремнію зі структурованими відбиваючими поверхнями треба врахувати те, що коефіцієнт поглинання залежить від довжини хвилі $\alpha = \alpha(\lambda)$. На рис. 2 показано розраховану спектральну залежність фотопровідності у макропористому кремнії з двома макропористими поверхнями при різному коефіцієнті відбиття від пористих поверхонь. Зі спектра фотопровідності видно, що тільки при довжині хвилі 0,95 мкм фотопровідність починає зростати. Це відбувається за рахунок того, що електромагнітне випромінювання з довжинами хвиль від 0,95 мкм, яке слабо поглинається кремнієм, відбивається та збільшує фотопровідність.

Спектр фотопровідності починає розширюватись у довгохвильову область спектра. Площа під кривими, показаними на рис. 2, це провідність макропористого кремнію при падінні на його поверхню електромагнітного випромінювання з довжинами хвиль 0,4–1,2 мкм. З рис. 2, криві 5, 6, видно, що зменшення коефіцієнта відбиття з 1 до 0,8 призводить до втрати майже половини приросту фотопровідності, яку вона отримає за рахунок відбиття від макропористих поверхонь. Це вказує на те, що збільшення фотопровідності відбувається тоді, коли поверхні ефективно відбивають хвилі довші за 0,95 мкм.



Рис. 2. Розрахована спектральна залежність фотопровідності у макропористому кремнії з двома макропористими поверхнями при коефіцієнті відбивання від пористих поверхонь: 0 (1); 0,2 (2); 0,4 (3); 0,6 (4); 0,8 (5); 1 (6).

4. ВИСНОВКИ

Виявлено розширення спектрів фотопровідності в довгохвильову область в макропористому кремнії з поверхнями, структурованими макропорами, при зростанні коефіцієнта відбиття від структурованих поверхонь.

Розраховано інтенсивність електромагнітного випромінювання та розподіл надлишкових неосновних носіїв заряду в структурі макропористого кремнію з двома пористими поверхнями в залежності від відстані до поверхні, що освітлюється.

Фотопровідність у структурі макропористого кремнію з двома макропористими поверхнями отримує додатковий приріст при довжинах хвиль від 0,95 до 1,15 мкм.

V.F. Onyshchenko, M.I. Karas'

Calculation of photoconductivity spectra in silicon with surfaces structured with macropores

Specific features of the photoconductivity spectra in silicon with the surfaces structured with macropores depending on the coefficient of reflection from the surface have been calculated. In the presented model of the photoconductivity spectrum, we took into account the multiple reflection of light from these partially reflecting silicon surfaces. Adduced are distributions of the intensity of electromagnetic radiation and excess minority carriers in the structure of macroporous silicon as a function of distance from the illuminated surface. The wavelengths, at which the photoconductivity in the structure of macroporous silicon with two macropores surfaces grows effectively, has been calculated. The distribution of excess minority carriers in the structure of macroporous silicon at the reflection coefficients of 0 and 0.5 under the incidence of the electromagnetic waves 0.95 and 1.05 µm has been shown.

Keywords: macroporous silicon, spectrum, photoconductivity, charge carrier distribution.

- 1. Savin H., Repo P., Gastrow G., Ortega P., Calle E., Garín M., Alcubilla R. Black silicon solar cells with interdigitated back-contacts achieve 22.1% efficiency. *Nature Nanotechnology*. 2015. **10**, No 7. P. 624–628.
- 2. Bett A.J., Eisenlohr J., Höhn O., Repo P., Savin H., Bläsi B., Goldschmidt J.C. Wave optical simulation of the light trapping properties of black silicon surface textures. *Opt. Exp.* 2016. **24**, No 6. P. 434–445.
- 3. Karachevtseva L.A., Lytvynenko O.O., Konin K.P., Parshyn K.A., Sapelnikova O.Yu., Stronska O.J. Electrooptical effects in 2D macroporous silicon structures with nanocoatings. *Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics*. 2015. **8**, No 4. P. 377–384.
- 4. Karachevtseva L.A., Kartel M.T., Lytvynenko O.O., Onyshchenko V.F., Stronska O.J. Polymer-nanoparticle coatings on macroporous silicon matrix. *Adv. Mater. Lett.* 2017. **8**, No 4. P. 336–341.
- 5. Oh J., Yuan H.-C. & Branz H.M. An 18.2%-efficient black-silicon solar cell achieved through control of carrier recombination in nanostructures. *Nature Nanotechnology*. 2012. **7**, No 11. P. 743–748.
- 6. Garnett E., Yang P. Light trapping in silicon nanowire solar cells. *Nano Lett.* 2010. 10, No 3. P. 1082–1087.
- 7. Juntunen M.A., Heinonen J., Vähänissi V., Repo P., Valluru D., Savin H. Near-unity quantum efficiency of broadband black silicon photodiodes with an induced junction. *Nature Photonics*. 2016. **10**, No 12. P. 777–781.
- 8. Otto M., Algasinger M., Branz H., Geseman B. et al. Black silicon photovoltaics. *Adv. Opt. Mater.* 2015. **3**, No 2. P. 147–164.
- 9. Otto M., Kroll M., Käsebier T., Salzer R., Tünnermann A., Wehrspohn R.B. Extremely low surface recombination velocities in black silicon passivated by atomic layer deposition. *Appl. Phys. Lett.* 2012. **100**, No 19. P. 191603–191606.
- 10. Zhong S.H., Liu B.W., Xia Y., Liu J.H., Liu J., Shen Z.N., Xu Z., Li C.B. Influence of the texturing structure on the properties of black silicon solar cell. *Sol. Energ. Mat. Sol. C.* 2013. **108**. P. 200–204.
- 11. Онищенко В.Ф. Розподіл нерівноважних носіїв заряду в структурах макропористого кремнію при їх однорідній генерації по об'єму зразка. Оптоэлектроника и полупроводниковая техника. 2015. № 50. С. 125–131.
- 12. Онищенко В.Ф. Розподіл фотоносіїв у макропористому кремнії при їх неоднорідній генерації. Оптоэлектроника и полупроводниковая техника. 2016. № 51. С. 158–162.
- 13. Онищенко В.Ф. Вплив підкладки та поверхні макропори на фотопровідність у двовимірних структурах макропористого кремнію. *Оптоэлектроника и полупроводниковая техника*. 2014. № 49. С. 75–81.
- Onyshchenko V.F. Karachevtseva L.A. Effective minority carrier lifetime and distribution of steady-state excess minority carriers in macroporous silicon. *Chemistry, Physics and Technology of Surface*. 2017. 8, No 3. P. 322– 332.
- 15. Onyshchenko V.F., Karachevtseva L.A., Lytvynenko O.O., Plakhotnyuk M.M., Stronska O.Y. Effective lifetime of minority carriers in black silicon nano-textured by cones and pyramids. *Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics*. 2017. **20**, No 3. P. 325–329.
- 16. Onyshchenko V.F., Karachevtseva L.A. Conductivity and photoconductivity of two-dimensional macroporous silicon structures. *Ukr. J. Phys.* 2013. **58**, No 9. P. 846–852.
- 17. Бонч-Бруевич В.Л., Калашников С.Г. *Физика полупроводников*: учебное пособие. 2-е изд. Москва: Наука, 1990.

Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України, 41, проспект Науки, 03680 Київ, Україна

E-mail: onyshchenkovf@isp.kiev.ua