

a-Si:H/a-SiN_x:H 超晶格中空间 电势分布和光电导的理论计算*

王 洪¹⁾ 朱美芳 郑德娟

中国科学技术大学研究生院物理学部, 北京 100039

1991年8月12日收到; 1991年12月27日收到修改稿

本文从 a-Si:H 体材料的缺陷态模型出发, 考虑在 a-Si:H/a-SiN_x:H 超晶格中由于空间电荷转移掺杂效应, 以及界面不对称引起的 a-Si:H 阱层的能带下降和弯曲, 严格求解空间电势分布和电荷分布, 发现 a-Si:H 阱层中能带的下降值远大于由界面电荷不对称所引起的两端电势能差, 且随转移到阱层中的电荷总量的变化非常敏感. 空间电荷分布比较平缓, 当不对称参数 $K = 0.9$ 时, 空间电荷浓度的最大差值不到两倍. 在此基础上, 计算了超晶格中光电导的温度曲线, 发现引起超晶格中暗电导和光电导相对于单层膜增大的主要原因是转移电荷量的多少, 而界面电荷不对称的影响则小得多. 计算中对带尾态采用 Simmons-Taylor 理论, 考虑 a-Si:H 中悬挂键的相关性, 并用巨正则分布讨论其在复合过程中的行为.

PACC: 7240; 7280N; 7340

一、引 言

关于 a-Si:H/a-SiN_x:H 超晶格中存在电荷转移掺杂效应, 已有许多报道^[1-3]. 这个效应使得 a-Si:H 阱层的费密能级上移, 从而使超晶格的暗电导和光电导增加. Tetsvzo 等人^[1]曾报道 a-Si:H/a-SiN_x:H 超晶格中的暗电导比单层 a-Si:H 薄膜高两个数量级以上, 光电导也高一个数量级左右. Inan Chen^[4] 曾用一个简单的缺陷态分布模型计算 a-Si:H/a-SiN_x:H 超晶格中的能带变化, 定性说明超晶格中暗电导的增加. 然而更细致地分析 a-Si:H 材料及其超晶格的电导行为, 必须考虑实际材料中的缺陷态类型和分布, 统一计算单层 a-Si:H 材料及超晶格的暗电导和光电导. Sakata 等人曾报道 a-Si:H/a-SiN_x:H 超晶格中由于界面电荷不对称而引起的内建场, 以及内建场对光电导的影响^[5]. Roxlo 等人^[2]曾报道 a-Si:H/a-SiN_x:H 超晶格中有 $10^4 - 10^5 \text{V} \cdot \text{cm}^{-1}$ 大小的内建场, 我们实验室也得出类似的结果^[6]. 表明空间电荷转移掺杂效应和内建场的存在是引起超晶格的暗电导和光电导增加的两个主要原因, 但这种影响的程度以及两个因素中哪个占主要地位的问题, 一直没有搞清楚, 也未见有人对非晶超晶格的光电导作过计算.

* 国家自然科学基金资助的课题.

1) 现在通讯地址: 广东省汕头大学物理系, 汕头 515063.

本文试图用一个较完整的缺陷态模型, 求解超晶格中由于空间电荷转移掺杂效应引起的空间电势能分布和空间电荷分布, 进而计算超晶格材料的暗电导和光电导的温度曲线, 并对结果作细致的分析。

二、计算模型与方法

1. a-Si:H 的缺陷态分布与光生载流子的复合

a-Si:H 材料中有大量的带尾局域态和位于带隙中的悬挂键缺陷。参考文献 [6,7], a-Si:H 材料的缺陷分布示于图 1。图中虚线表示指数分布的带尾态, 一般价带尾比导带尾宽。D₃⁰ 为中性悬挂键, D₃⁺ 和 D₃⁻ 分别为 D₃⁰ 失去和获得一个电子后的荷电态。一般认为 a-Si:H 中的悬挂键具有正相关能^[6], 因而 D₃⁻ 的能量高于 D₃⁰ 和 D₃⁺ 态, 相关能为 E_u。在光照的情况下, 过剩载流子通过悬挂键的复合路径如箭头所示, 其中指向悬挂键的路径为俘获电子(发射空穴), 指向扩展态的路径为发射电子(俘获空穴)。E_c, E_v 为导带边和价带边的能量, E_T 为 D₃⁰ 和 D₃⁺ 态的能量, E_T + E_u 为 D₃⁻ 态的能量, G 为光产生率。

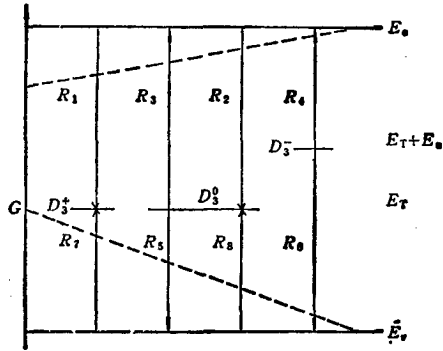


图 1 a-Si:H 材料中缺陷分布和光生载流子复合示意图

带尾态的缺陷分布函数可表示为

$$N_x(E) = N_x^0 \exp[(-1)^x (E - E_x) / kT_x], \quad (1)$$

其中 $x = ct, vt$, 分别代表导带和价带, 且有 $x = ct, (-1)^x = 1$; $x = vt, (-1)^x = -1$, E_x 代表导带与价带边。

悬挂键的三种状态满足如下反应方程:



由于(2)、(3)式所描写的过程, 处理悬挂键的占据分布要用巨正则分布。设三种态所占比率分别为 f^+, f^0, f^- , 则在热平衡时有

$$f_0^+ = \frac{1}{1 + 2 \exp[\beta(E_F - E_T)] + \exp[\beta(2E_F - 2E_T - E_u)]}, \quad (4)$$

$$f_0^0 = \frac{2 \exp[\beta(E_F - E_T)]}{1 + 2 \exp[\beta(E_F - E_T)] + \exp[\beta(2E_F - 2E_T - E_u)]}, \quad (5)$$

$$f_0^- = 1 - f_0^+ - f_0^0. \quad (6)$$

2. 空间电势与电荷分布的计算模型

非晶超晶格中有大量的局域态, 空间电荷转移到势阱层中以后, 都被局域态俘获, 从而空间电荷浓度可由经典表达式给出, 计算势阱层中空间电势能即求解下面泊松方程:

$$\frac{d^2V(x)}{dx^2} = \frac{e^2}{\epsilon} [(p - n) - Q_1], \quad (7)$$

其中 $V(x)$ 为电子的电势能 (不是电势, 因而公式中出现 e^2 , 而不是 e), x 表示空间位置, p, n 为自由空穴和电子浓度, Q_1 为局域态上的电荷浓度, 它们都为 $V(x)$ 的函数. 利用上节的缺陷态模型, 有

$$Q_1 = Q_{db} + Q_{ct} + Q_{vt}, \quad (8)$$

其中

$$Q_{ct} = \int_{E_F}^{E_F - V(x)} N_{ct}^0 \exp\left(\frac{E - E_c}{kT_c}\right) dE, \quad (9)$$

$$Q_{vt} = \int_{E_F}^{E_F - V(x)} N_{vt}^0 \exp\left(\frac{E_v - E}{kT_v}\right) dE, \quad (10)$$

$$Q_{db} = N_{db}(f^- - f^+). \quad (11)$$

方程 (7) 的边界条件采用如下形式:

$$\left. \frac{dV(x)}{dx} \right|_{x=0} = \frac{e^2}{\epsilon} QK, \quad (12)$$

$$\left. \frac{dV(x)}{dx} \right|_{x=L} = -\frac{e^2}{\epsilon} Q(1 - K), \quad (13)$$

其中 L 为势阱层的宽度, ϵ 为阱层材料的介电常数, Q 为转移电荷浓度, K 为决定于界面电荷不对称程度的参数.

(7)–(13) 式已可求解, 另外应满足如下条件:

$$\int_0^L \rho(x) dx = \int_0^L (p - n + Q_1) dx = Q. \quad (14)$$

上式表示 a-Si:H 阱层中的空间电荷总和应等于转移进来的总电荷数. (14) 式在具体计算中并不需要, 但可以对整个计算起到检验作用. 方程 (7) 进行差分离散后, 用拟牛顿法求解, 计算结果精确地满足 (14) 式.

3. 光电导计算模型

在稳态光照下, 光生载流子的复合率与光产生率 G 相等, 同时应满足一定的电荷守恒条件, 考虑带尾态与悬挂键的共同作用, 有以下各式^[8,9]:

$$G = G_i + G_{db}, \quad (15)$$

$$G_i = \sum_{i=1}^m \int_{E_{i,pi}}^{E_{i,ni}} \frac{b_{in} b_{ip} (np - n_0 p_0)}{b_{in} n + b_{ip} p} g_i(E) dE, \quad i = 1, 2, \dots, m, \quad (16)$$

$$G_{db} = N_{db} \left[nc_n^0 + nc_n^+ \left(\frac{1}{a}\right) - e_n^0 - e_n^- \left(\frac{1}{b}\right) \right] f^0, \quad (17)$$

$$E_{i,ni} = E_F + kT \ln \left(\frac{b_{in} n + b_{ip} p}{b_{in} n_0} \right), \quad (18)$$

$$E_{i,pi} = E_F - kT \ln \left(\frac{b_{in} n + b_{ip} p}{b_{ip} p_0} \right), \quad (19)$$

$$a = \frac{c_p^+ + nc_n^+}{c_n^0 + pc_p^0}, b = \frac{c_n^- + pc_p^-}{c_p^0 + nc_n^0}, \quad (20)$$

$$n - p + Q_{ci}(n, p) - Q_{vi}(n, p) + Q_{db}(n, p) = n_0 - p_0 + Q_{ci}(n_0, p_0) - Q_{vi}(n_0, p_0) + Q_{db}(n_0, p_0), \quad (21)$$

$$Q_{db} = N_{db}(f^- - f^+) = \frac{N_{db}(a - b)}{(a + b + ab)}, \quad (22)$$

$$Q_{vi} = \int_{E_v}^{E_c} N_{vi}(E) f_{vi}(E) dE - Q_{vi}(n, p), \quad (23)$$

$$Q_{ci} = \int_{E_v}^{E_c} N_{ci}(E) f_{ci}(E) dE - Q_{ci}(n, p). \quad (24)$$

以上各式中, (16), (18), (19), (23), (24) 式是关于带尾态的, 其中 b_{in}, b_{ip} 为第 i 种缺陷对电子和空穴的俘获系数; n, p 为自由电子和空穴浓度; E_{ini}, E_{ipi} 为第 i 种缺陷的电子准费密能级和空穴准费密能级. (17), (20), (22) 式是关于悬挂键的, 其中 c_n^0, c_n^+ 为 D_1^0 和 D_1^+ 态对电子的俘获系数, c_n^0, c_n^- 为 D_1^0 和 D_1^- 态的电子发射率; c_p^-, c_p^0 为 D_2^- 和 D_2^0 态对空穴的俘获系数, c_p^+, c_p^0 为 D_2^+ 和 D_2^0 态的空穴发射率; f^+, f^0, f^- 为在光照情况下, 悬挂键 D_1^+, D_1^0, D_1^- 所占的比率; N_{db} 为总的悬挂键体密度.

(15) 和 (21) 式联立可计算单层 a-Si:H 材料的光电导问题. 要计算超晶格的光电导, 还需考虑由于空间电荷转移掺杂效应引起的能带变化, 计算载流子浓度在空间的变化 $n(x), p(x)$, 则超晶格的暗电导和光电导可由下列两式求得:

$$\sigma_d = \frac{e}{L} \left\{ \mu_n \int_0^L N_c \exp[(E_F - V(x) - E_c)/kT] dx + \mu_p \int_0^L N_v \exp[(E_v - E_F + V(x))/kT] dx \right\}, \quad (25)$$

$$\sigma_p = \frac{e}{L} \left\{ \mu_n \int_0^L [n_p(x) - n_d(x)] dx + \mu_p \int_0^L [p_p(x) - p_d(x)] dx \right\}, \quad (26)$$

其中 μ_n, μ_p 为电子和空穴的迁移率.

三、计算结果

参考有关文献, 在计算中选用以下固定参数: $N_{ci}^0 = N_{vi}^0 = 10^{21} \text{cm}^{-3} \text{eV}^{-1}$, $kT_c = 45 \text{mV}$, $kT_v = 70 \text{mV}$, $b_n = b_p = 10^{-8} \text{cm}^3 \text{s}^{-1}$, $N_{db} = 1.34 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$, $c_n^+ = c_p^- = 0.5 \times 10^{-6} \text{cm}^3 \text{s}^{-1}$, $c_n^0 = c_p^0 = 0.7 \times 10^{-8} \text{cm}^3 \text{s}^{-1}$, $E_c = 1.7 \text{eV}$, $E_T = 0.85 \text{eV}$, $E_v = 0.3 \text{eV}$, $\mu_n = 10 \text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$, $\mu_p = 1 \text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$, $\epsilon = 15$, $L = 200 \text{\AA}$, 单层 a-Si:H 的费密能级由式 $E_F = E_T + E_v / 2 - \frac{1}{2} kT \ln 2$ 求得为温度的函数, 当 $T = 333 \text{K}$ 时, $E_F = 0.99 \text{eV}$.

有了以上固定参数后, 可求得 a-Si:H/a-SiN_x:H 超晶格中 a-Si:H 势阱层的能带随着参量 Q, K , 以及温度 T 的变化, 也可同时得出空间电荷分布. 如图 2 是在不同的转移电荷量时, 电子的势能分布, 由图 2 可以看出, 转移电荷量的变化使得电子电势能有很大的改变, 当 Q 从 $1.48 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$ 变到 $5 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$ 时, 电势能从 -0.2eV 变到接近

-0.5eV, 且势阱层两端的势能差也有增加, 从 20mV 左右增到 50mV 左右。

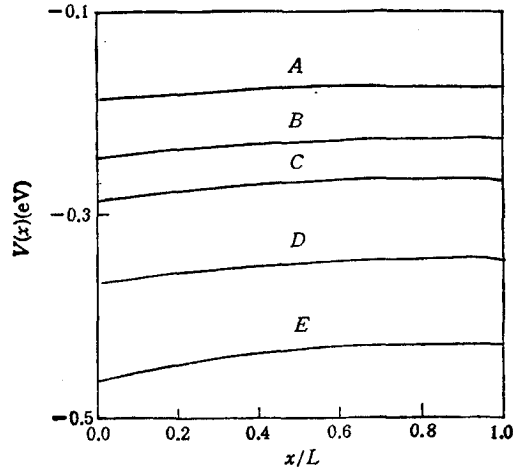


图 2 不同转移电荷量时 a-Si:H 阱层的电子电势能的空间分布 A 为 $Q = 1.48 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$; B 为 $Q = 2.5 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$; C 为 $Q = 2.70 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$; D 为 $Q = 3.00 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$; E 为 $Q = 5.00 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$; $K=0.9$; $T=263\text{K}$

对于相同的转移电荷量 Q 和不同的不对称参数 K , 电势能的分布如图 3 所示。可以看出, 完全对称的曲线 ($K = 0.5$) 和不对称参数 $K = 0.9$ 的曲线, 其两端势能差约为 20mV。还可看出, 两端势能差值远小于势能本身的下降值, 前者在 10mV 的数量级, 后者则是 100mV 的数量级。

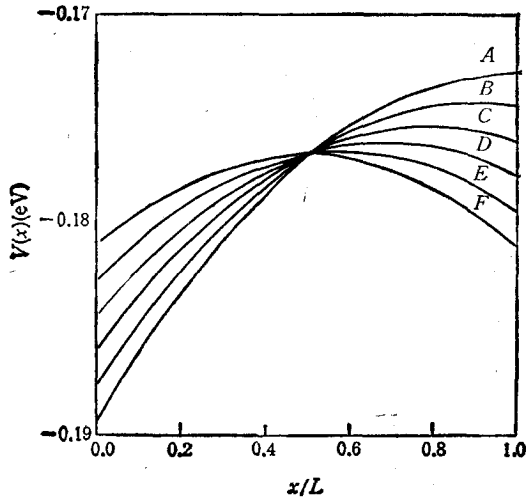


图 3 a-Si:H 阱层电子电势能分布随不对称参数 K 的变化 A 为 $K=1.00$; B 为 $K=0.90$; C 为 $K=0.80$; D 为 $K=0.70$; E 为 $K=0.60$; F 为 $K=0.50$; $Q = 1.48 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$; $T = 263\text{K}$

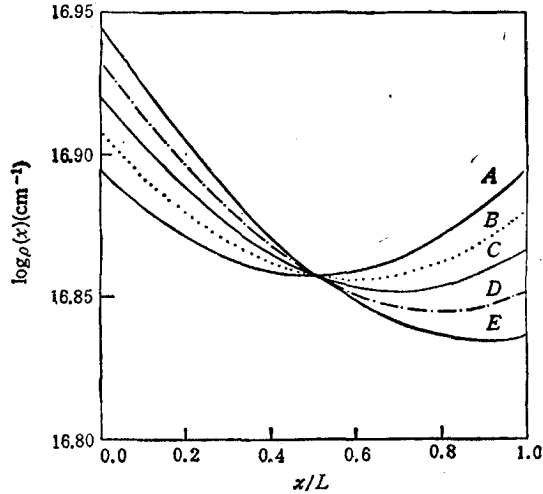


图 4 a-Si:H 阱层中空间电荷分布函数 $\rho(x)$ 随不对称参数 K 的变化 A 为 $K=0.50$; B 为 $K=0.60$; C 为 $K=0.70$; D 为 $K=0.80$; E 为 $K=0.90$; $Q = 1.48 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$; $T = 263\text{K}$

随着界面电荷不对称程度的变化, 即不对称参数 K 的变化, a-Si:H 阱层中的空间电荷分布也有变化。图 4 是几个不同 K 值时, 空间电荷密度 $\rho(x)$ 的分布曲线。可以看出,

$\rho(x)$ 的变化比较平缓,在整个空间内,不同点 $\rho(x)$ 最大差值不到两倍。

求得空间电势能以后,可进而求解超晶格中 a-Si:H 阱层空间各点的暗电导和光电导。考虑到空间电势能的变化比较平缓,远小于空间势本身的下降值,同时空间电荷分布起伏很小,因此在计算中假设空间各点的复合率是均匀的,忽略在光电导计算中载流子的横向输运。从已有的实验结果来看,a-Si:H 材料的光电导很大地依赖于其暗费密能级^[10],在一定的能量范围内(E_c 以下 0.8eV 到 0.2eV),随着暗费密能级的上升,光电导明显增加,即缺陷对载流子的复合能力减弱,这是具有正相关能缺陷的必然结果。在超晶格中,能带下降多的地方即相当于费密能级上升多,也即此处缺陷的复合能力弱,同时由于能带下降多的区域自由载流子浓度较高,补偿了复合能力的减弱,使得复合率趋于空间均匀。

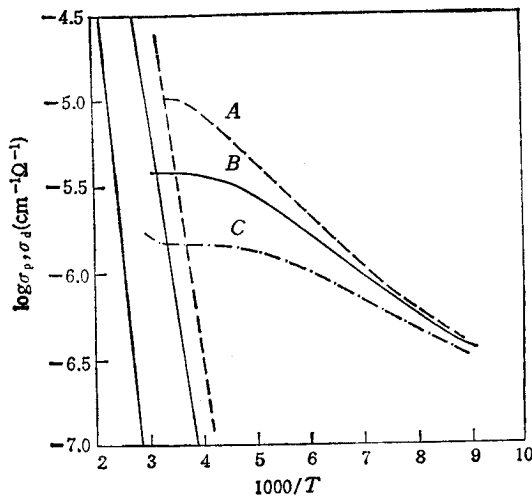


图 5 不同转移电荷量时超晶格的光电导温度曲线 A 为 $Q = 2 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$; B 为 $Q = 1.48 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$; C 为单层 a-Si:H 膜;直线为相应暗电导

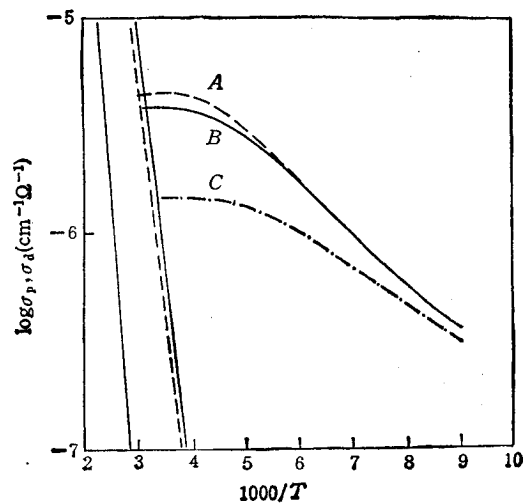


图 6 不同的不对称参数 K 时,超晶格中的暗电导和光电导的温度曲线 A 为 $K = 0.9$; B 为 $K = 0.5$; C 为单层 a-Si:H 膜; $Q = 1.48 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$

对空间各点求解方程 (15)–(24), 然后利用 (25) 和 (26) 式求积分可得超晶格的暗电导和光电导。为了说明空间电荷转移掺杂效应和界面不对称性对超晶格光电导的影响, 计算了不同条件下超晶格材料和单层膜的暗电导和光电导的温度曲线。图 5 所示是两个不同转移电荷量时,超晶格的光电导温度曲线和单层膜的相应曲线。可以看出,随着转移电荷量的增加,光电导和暗电导都有明显增加。图 6 是不同的界面不对称性时,超晶格的光电导和暗电导温度曲线。可以看出,完全对称和不对称参数 $K = 0.9$ 的两条曲线相差很小,这表明超晶格中造成其暗电导和光电导增加的主要原因是空间电荷转移掺杂效应引起的 a-Si:H 层的费密能级上升。

四、结 论

通过以上计算结果和讨论,可以得出以下结论:引起 a-Si:H/a-SiN_x:H 超晶格材

料的光电导和暗电导增加的主要原因是,空间电荷转移掺杂效应引起的 a-Si:H 阱层的费密能级上升,而界面电荷不对称性的影响则小得多。

- [1] Tetsuzo Yoshimura, Kouichi Hiranaka, Tadahisa Yamaguchi, *Phil. Mag.*, **B55**(1987), 409.
- [2] 朱美芳,宗军,张秀增,物理学报,40(1991),253.
- [3] C. B. Roxlo, B. Abeles and T. Tiedje, *Phys. Rev.*, **B34**(1986), 2522;
C. B. Roxlo, B. Abeles and T. Tiedje, *Phys. Rev. Lett.*, **52**(1984), 1994.
- [4] Inan Chen, *Phys. Rev.*, **B32**(1985), 879
- [5] I. Sakata, Y. Hayashi, *IEEE Electron Device Letters*, **EDL-6**(1985), 166.
- [6] F. Vaillant, D. Jousse and J.-C. Bruyere, *Phil. Mag.*, **B57**(1988), 649;
F. Vaillant, D. Jousse, *Phys. Rev.*, **B34**(1986), 4088.
- [7] T. J. McMahon and J. D. Xi, *Phys. Rev.*, **B34**(1986), 2475.
- [8] J. G. Simmons and Taylor, *Phys. Rev.*, **B4**(1971), 502.
- [9] Benyuan Gu, Daxing Han, Chenxi Li and Shifu Zhao, *Phil. Mag.*, **B53**(1986), 321.
- [10] M. Hack, S. Guha and M. Shur, *Appl. Phys. Lett.*, **45**(1984), 467;
M. Hack, S. Guha and M. Shur, *Phys. Rev.*, **B30**(1984), 6991.

CALCULATION OF ELECTRONIC POTENTIAL DISTRIBUTIONS AND PHOTOCONDUCTIVITY IN a-Si:H/a-SiN_x:H SUPERLATTICES

WANG HONG* ZHU MEI-FANG ZHENG DE-JUAN

Department of Physics, Graduate School, University of Science and Technology of China, Beijing 100039

(Received 12 August 1991; revised manuscript received 27 December 1991)

ABSTRACT

A reasonable model is proposed to calculate the temperature dependence of photoconductivity (PC) in a-Si:H and a-Si:H/a-SiN_x:H superlattices. Simmons-Taylor theory and the occupation statistics of correlated defects are used to describe band tail states and dangling bonds states. As in a-Si:H/a-SiN_x:H superlattices, the electronic potential and charge distributions resulting from space-charge doping are calculated at various amounts of transferred charge and different asymmetry boundary conditions. The DC and PC are calculated with corresponding space potential and charge distributions. It is found that the enhancements of DC and PC in superlattices are mainly determined by the amounts of injected charge, and the influence of interface asymmetry is slight.

PACC: 7240; 7280N; 7340

* Address: Department of Physics, Shantou University, Guangdong, Shantou 515063.