

4. Simulationsmodell

4.1 Halbleiter-Grundgleichungen

Die mathematische Grundlage zur Beschreibung der Transportprozesse in einem homogenen Halbleiter wie dem kristallinen Silizium wird von einem System von Differentialgleichungen gebildet [Van Roosbroeck 50].

Eine der vier Maxwell-Gleichungen, Gauß- oder Poisson-Gleichung genannt, liefert den Zusammenhang zwischen dem elektrischen Feld \vec{E} und der Ladungsdichte ρ .

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E}(\vec{r}, t) = \frac{1}{\epsilon_0 \cdot \epsilon_r} \cdot \rho(\vec{r}, t) \quad (4-1)$$

$$\rho(\vec{r}, t) = q \cdot (-n(\vec{r}, t) + p(\vec{r}, t) \pm N_{\text{dot}}) \quad (4-2)$$

Die Ladungsdichte setzt sich im Volumen des dotierten Siliziums aus den Konzentrationen der frei beweglichen Elektronen und Löcher sowie der ortsfesten, bei einer Temperatur von 300 K vollständig ionisierten, Dotieratome N_{dot} zusammen, die je nach Leitungstyp entweder positiv (n-Typ) oder negativ (p-Typ) zu berücksichtigen sind.

Die Kontinuitätsgleichungen bilanzieren Ladungsträgerkonzentrationen, Ströme und die Generation/Rekombination für Elektronen und Löcher an einem Ort des Halbleiters.

$$\frac{\partial}{\partial t} n(\vec{r}, t) = + \frac{1}{q} \cdot \vec{\nabla} \cdot \vec{j}_n(\vec{r}, t) + G(\vec{r}, t) - R_n(\vec{r}, t) \quad (4-3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} p(\vec{r}, t) = - \frac{1}{q} \cdot \vec{\nabla} \cdot \vec{j}_p(\vec{r}, t) + G(\vec{r}, t) - R_p(\vec{r}, t) \quad (4-4)$$

Die optische Generationsrate G enthält nur lichtinduzierte Band-Band-Übergänge und ist somit für Elektronen und Löcher immer gleich. Die Rekombinationsraten der Elektronen R_n und Löcher R_p müssen nur im stationären Fall gleich sein.

Bei der Herleitung der Stromgleichungen aus der Boltzmann-Gleichung [Fonash 81] wird u.a. angenommen, daß kein Temperaturgradient vorhanden ist und die Ladungsträgerkonzentrationen nicht wie beim entarteten Halbleiter zu hoch sind, d.h die Fermi-Statistik darf durch eine Boltzmann-Näherung ersetzt werden. Bei Silizium ist die letzte Annahme

mit einem Fehler von weniger als ein Prozent verbunden, wenn die Ladungsträgerkonzentrationen nicht größer als $2 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ sind. Die Stromgleichungen, die einen Drift- und einen Diffusionsterm enthalten, beschreiben den Transport der Ladungsträger in den Bändern, d.h. über nicht lokalisierte Zustände.

$$\vec{j}_n(\vec{r}, t) = q \cdot \mu_n \cdot n(\vec{r}, t) \cdot \vec{E}(\vec{r}, t) + q \cdot D_n \cdot \vec{\nabla} \cdot n(\vec{r}, t) \quad (4-5)$$

$$\vec{j}_p(\vec{r}, t) = q \cdot \mu_p \cdot p(\vec{r}, t) \cdot \vec{E}(\vec{r}, t) - q \cdot D_p \cdot \vec{\nabla} \cdot p(\vec{r}, t) \quad (4-6)$$

Die Einstein-Relation korreliert bei einem nicht entarteten Halbleiter die Diffusionskonstanten D_n bzw. D_p mit den Beweglichkeiten μ_n bzw. μ_p .

$$D_{n(p)} = \frac{kT}{q} \cdot \mu_{n(p)} \quad (4-7)$$

Einsetzen von (4-5) in (4-3) und von (4-6) in (4-4) verringert die Anzahl der zu lösenden Differentialgleichungen. Des Weiteren besteht zwischen dem elektrischen Feld und dem Potential der Zusammenhang

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = -\vec{\nabla} \cdot \Psi(\vec{r}, t) \quad (4-8)$$

Für den eindimensionalen Fall führt dies unter Verwendung der Einstein-Relation zu dem folgenden System von Gleichungen:

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) + \frac{q}{\epsilon_r \cdot \epsilon_0} \cdot (-n(x, t) + p(x, t) \pm N_{\text{dot}}) \\ 0 &= \mu_n \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[-n(x, t) \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t) + \frac{kT}{q} \cdot \frac{\partial}{\partial x} n(x, t) \right] - \frac{\partial}{\partial t} n(x, t) + G(x, t) - R_n(x, t) \\ 0 &= \mu_p \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[+p(x, t) \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t) + \frac{kT}{q} \cdot \frac{\partial}{\partial x} p(x, t) \right] - \frac{\partial}{\partial t} p(x, t) + G(x, t) - R_p(x, t) \end{aligned} \quad (4-9)$$

Die Beschränkung auf eine Dimension ist gerechtfertigt, da die lateralen Abmessungen groß gegenüber der Dicke des Halbleiters sind.

Im stationären Fall wird der Gesamtstrom durch die Summe zweier ortsabhängiger Komponenten gegeben.

$$j = j_n(x) + j_p(x) \quad (4-10)$$

Im zeitabhängigen Fall ist noch eine Verschiebungsstromkomponente zu berücksichtigen [Macdonald 75].

$$j(t) = j_n(x, t) + j_p(x, t) - \epsilon_r \cdot \epsilon_0 \cdot \frac{\partial^2}{\partial t \cdot \partial x} \Psi(x, t) \quad (4-11)$$

Im stationären wie im zeitabhängigen Fall ist der Gesamtstrom nicht ortsabhängig.

4.2. Modellierung des Volumens

4.2.1 Optische Generation

Wird Silizium mit Photonen belichtet, deren Energie größer als die Bandlücke ist, so werden durch Absorption Elektron-Loch-Paare generiert. Für langwelligeres Licht ($\lambda > 1100 \text{ nm}$) findet wegen der zu geringen Energie fast keine Absorption statt.

In einem homogenen Medium ist die Änderung der Photonenflußdichte ϕ (der Quotient aus der Lichtintensität P und der Photonenenergie E_{ph}) proportional zu ihrem noch vorhandenen Wert.

$$\frac{\partial}{\partial x} \phi(x, t) \sim -\phi(x, t) \quad \Rightarrow \quad \phi(x, t) = \phi(0, t) \cdot e^{-\alpha \cdot x} = \frac{P(t)}{E_{ph}} \cdot e^{-\alpha \cdot x} \quad (4-12)$$

Des weiteren ist die Abnahme von ϕ gleich der Generationsrate.

$$-\frac{\partial}{\partial x} \phi(x, t) = G(x, t) \quad \Rightarrow \quad \boxed{G(x, t) = \alpha \cdot \frac{P(t)}{E_{ph}} \cdot e^{-\alpha \cdot x}} \quad (4-13)$$

Der Absorptionskoeffizient α ist ein spezifischer Materialparameter, der von der Wellenlänge abhängt. Er nimmt mit steigender Photonenenergie zu; dieses Verhalten ist im energetischen Bereich der Bandlücke bei direkten Halbleitern (Galliumarsenid) stärker ausgeprägt als bei indirekten (Silizium). Der Kehrwert von α , die Absorptionslänge, entspricht der Strecke, nach der die Photonenflußdichte auf $1/e$ (ca. 37%) abgefallen ist.

Im Simulationsprogramm wird die optische Generationsrate mit der Gleichung (4-13), die als Lambert-Beer-Gesetz bezeichnet wird, beschrieben.

Bei der Herleitung geht man davon aus, daß jedes absorbierte Photon genau ein Elektron-Loch-Paar erzeugt, d.h. die innere Quantenausbeute beträgt eins. Diese Annahme ist nicht selbstverständlich. Die Quantenausbeute von Silizium kann größer als eins sein [Kolodinski 94]: Ein Photon wird absorbiert und erzeugt ein Elektron-Loch-Paar. Wird dabei auf einen der beiden primär erzeugten Ladungsträger genügend Energie übertragen,

so kann dieser durch Stoßionisation ein weiteres Elektron-Loch-Paar erzeugen. Dieses Erkenntnis führte dazu, daß der maximale theoretische Wirkungsgrad von Solarzellen höher liegt als ursprünglich angenommen. Dieser Effekt tritt erst bei Wellenlängen unterhalb von 400 nm auf und muß daher in dieser Arbeit nicht berücksichtigt werden.

Neben der Absorption, bei der Ladungsträger erzeugt werden, ist auch ein anderer Absorptionsmechanismus [Fonash 81] möglich, bei dem keine Generation erfolgt: Ein Photon hebt mit seiner Energie ein Elektron innerhalb des Leitungsbandes auf ein höheres Energieniveau, welches anschließend über das Gitter relaxiert. Dieser Prozeß tritt jedoch erst bei hohen Elektronenkonzentrationen auf.

Bei stationärer Belichtung des Halbleiters ist die Lichtintensität und somit die Generationsrate zeitlich konstant. Bei der gepulsten Anregung im TRMC-Experiment ist sie nur während der Pulsdauer von Null verschieden; im FRMC-Experiment ist sie stets positiv und variiert periodisch mit der Zeit.

Um die Reflexion des Lichtes an der Oberfläche zu berücksichtigen, ist auf rechten Seite von Gleichung (4-13) ein entsprechender Faktor einzufügen (z.B. 0,8 für eine Reflexion von 20 %).

4.2.2 Volumenrekombination

Da das Silizium im Realfall kein perfekt reiner Kristall ist, kann es im Volumen eine Vielzahl von Defektzuständen geben [Wang 89]. Die freien Ladungsträger wechselwirken mit diesen Zuständen, die in der Bandlücke energetisch verteilt vorliegen. Zur Simulation dieser Prozesse im Silizium wird ein einziges effektives Trap-Niveau in der Bandmitte angenommen. Die dabei auftretenden vier Übergänge sind in Bild 4.1 dargestellt.

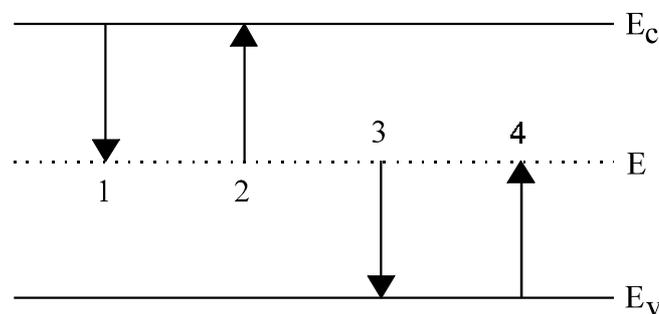


Bild 4.1: Shockley-Read-Hall-Rekombination
(Die Pfeile bezeichnen stets den Elektronenübergang)

Zur Beschreibung dieser Situation entwickelten Shockley, Read und Hall einen „SRH“-Formalismus [Hall 51, Shockley 52], der für ein Trap-Niveau (Rekombinationszentrum) in der „verbotenen Zone“ die Besetzungsfunktion und die Rekombinationsraten als Funktion der freien Ladungsträger liefert. Die vier Übergangsraten lauten:

$$1. \text{ Einfang eines Elektrons} \quad r_1 = c_n \cdot n \cdot (1 - f_T) \cdot N_T \quad (4-14)$$

$$2. \text{ Emission eines Elektrons} \quad r_2 = c_n \cdot n_1 \cdot f_T \cdot N_T \quad (4-15)$$

$$3. \text{ Einfang eines Lochs} \quad r_3 = c_p \cdot p \cdot f_T \cdot N_T \quad (4-16)$$

$$4. \text{ Emission eines Lochs} \quad r_4 = c_p \cdot p_1 \cdot (1 - f_T) \cdot N_T \quad (4-17)$$

$$n_1 = N_C \cdot \exp\left(-\frac{E_C - E}{kT}\right) \quad (4-18)$$

$$p_1 = N_V \cdot \exp\left(-\frac{E - E_V}{kT}\right) \quad (4-19)$$

Dabei sind: c_n Ratenparameter für Elektronen
 c_p Ratenparameter für Löcher
 f_T Besetzungsfunktion des Trap-Niveaus
 N_T Zustandsdichte des Trap-Niveaus

Die Rekombinationsraten ergeben sich allgemein zu

$$R_n = r_1 - r_2 \quad \text{und} \quad R_p = r_3 - r_4 \quad (4-20)$$

Für die Besetzungsfunktion und die Rekombinationsraten kann grundsätzlich zwischen drei Situationen unterschieden werden.

$$1. \text{ thermodynamisches Gleichgewicht:} \quad R_n = R_p = 0 \quad f_T = f_0 \quad (4-21)$$

$$2. \text{ stationärer Zustand:} \quad R_n = R_p = R \quad (4-22)$$

$$3. \text{ zeitabhängiger Fall:} \quad R_n \neq R_p \quad (4-23)$$

mit der Fermi-Funktion

$$f_0 = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right)} \quad (4-24)$$

Für den stationären Zustand ergibt sich nach Shockley, Read und Hall:

$$R = \frac{n \cdot p - n_i^2}{\tau_p \cdot (n + n_1) + \tau_n \cdot (n + n_1)}$$

$$f_T = \frac{n + \frac{\tau_n}{\tau_p} \cdot p_1}{n + n_1 + \frac{\tau_n}{\tau_p} \cdot (p + p_1)}$$
(4-25)

Dabei sind: $\tau_n = \frac{1}{c_n \cdot N_T}$ SRH-Lebensdauer der Elektronen (4-26)

$\tau_p = \frac{1}{c_p \cdot N_T}$ SRH-Lebensdauer der Löcher (4-27)

Eine Volumenlebensdauer läßt sich für den stationären Zustand im neutralen Bereich des Halbleiters, wo die Konzentrationen der Überschußladungsträger

$$\Delta n = n - n_0 \quad \text{und} \quad \Delta p = p - p_0 \quad (4-28)$$

gleich sind, als Quotient definieren:

$$\tau_{vol} = \frac{\Delta n}{R} \quad (4-29)$$

Im Fall der Niedriginjektion ($\Delta n \ll n_0$) und der Hochinjektion ($\Delta n \gg n_0$) ergeben sich aus dem SRH-Formalismus für einen n-dotierten Halbleiter:

$$\tau_{vol} = \tau_p \quad \text{für die Niedriginjektion} \quad (4-30)$$

$$\tau_{vol} = \tau_n + \tau_p \quad \text{für die Hochinjektion} \quad (4-31)$$

Für einen p-Halbleiter ist das Ergebnis analog. Die Volumenlebensdauer ist somit eine injektionsabhängige Größe und eng mit den SRH-Lebensdauern korreliert.

Die Defektzustände in der Energielücke können unterschiedlich geladen sein und sich beim Einfangen oder der Emission eines Ladungsträgers umladen [Wang 89]. In der Simulation wird nur ein effektiver Zustand in der Bandmitte angenommen, so daß nicht zwischen Ratenparametern für Elektronen und Löcher unterschieden wird; sie werden gleich groß gewählt. Dies hat zur Folge, daß auch die SRH-Lebensdauern gleich sind; sie entsprechen beim dotierten Silizium im Fall der Niedriginjektion der Volumenlebensdauer. Dem effektiven Zustand in der Bandmitte wird keine Ladung zugeordnet.

Für den zeitabhängigen Fall ergeben sich die Rekombinationsraten aus (4-20):

$$\boxed{\begin{aligned} R_n &= [n \cdot (1 - f_T) - n_1 \cdot f_T] \cdot \frac{1}{\tau_n} \\ R_p &= [p \cdot f_T - p_1 \cdot (1 - f_T)] \cdot \frac{1}{\tau_p} \end{aligned}} \quad (4-32)$$

Für die Besetzungsfunktion gilt:

$$\frac{\partial}{\partial t} (f_T \cdot N_T) = r_1 - r_2 - r_3 + r_4 \quad (4-33)$$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} f_T(t) = -f_T(t) \cdot [c_n \cdot (n + n_1) + c_p \cdot (p + p_1)] + c_n \cdot n + c_p \cdot p_1 \quad (4-34)$$

Beim Lösen der Grundgleichungen wird die Zeit diskretisiert, d.h. die Differentialgleichungen (4-9) werden nur zu festgelegten Zeiten gelöst. Betrachten wir zwei aufeinanderfolgende Zeitpunkte ($t - \Delta t$ und t) und machen den Ansatz

$$\frac{\partial}{\partial t} f_T(t) = \frac{f_T(t) - f_T(t - \Delta t)}{\Delta t} \quad (4-35)$$

so führt dieser mit (4-34) zu

$$\boxed{f_T(t) = \frac{f_T(t - \Delta t) + \Delta t \cdot (c_n \cdot n + c_p \cdot p_1)}{1 + \Delta t \cdot [c_n \cdot (n + n_1) + c_p \cdot (p + p_1)]}} \quad (4-36)$$

Die aktuelle Besetzungsfunktion ergibt sich aus ihrem Wert des vorherigen Zeitpunktes und den aktuellen Ladungsträgerkonzentrationen. Die Simulation einer zeitabhängigen Situation muß stets mit einem stationären Zustand beginnen, damit ein Anfangswert für die Besetzungsfunktion vorliegt. Des weiteren kann es erforderlich sein, daß die Zeitschritte nichtlinear gewählt werden müssen (z.B. bei einem Pulsexperiment), um die Gültigkeit des Ansatzes (4-35) nicht zu verletzen, d.h. Δt wäre dann keine Konstante.

Neben der SRH-Rekombination über Störstellen in der Bandlücke, sind weitere Verlustmechanismen möglich: die strahlende Rekombination und die Auger-Rekombination. Diese Prozesse werden jedoch erst bei hohen Ladungsträgerkonzentrationen, wie sie in dieser Arbeit nicht auftreten, bedeutsam [Goetzberger 94].

4.3. Modellierung der Oberfläche

4.3.1 Oberflächenrekombination

An der Oberfläche rekombinieren die freien Ladungsträger, indem sie von den Trap-zuständen an der Grenzfläche zum Oxid bzw. Nitrid (Bild 4.2) eingefangen werden. Die Zustände in der unteren Hälfte der Bandlücke haben donatorischen, die in der oberen Hälfte akzeptorischen Charakter. Sie sind mit der Wahrscheinlichkeit $f_D(E)$ bzw. $f_A(E)$ besetzt. Wenn ein Donator-Trap unbesetzt ist, ist es positiv geladen; fängt es ein Elektron ein, so wird es neutral. Ein unbesetztes Akzeptor-Trap ist neutral; fängt es ein Elektron ein, so wird es negativ geladen. Die Trap-Zustände sind entweder unbesetzt oder einfach besetzt; eine Mehrfachbesetzung ist nicht möglich. Die Zustandsdichten sind symmetrisch verteilt und werden mathematisch wie folgt beschrieben:

$$N(E) = N_D(E) + N_A(E) \quad (4-37)$$

$$N_D(E) = a_1 \cdot \exp\left(-\frac{E}{a_2}\right) + a_3 \quad \text{für } E < E_V + \frac{E_{\text{gap}}}{2} \quad (4-38)$$

$$N_A(E) = a_1 \cdot \exp\left(-\frac{(E_{\text{gap}} - E)}{a_2}\right) + a_3 \quad \text{für } E > E_V + \frac{E_{\text{gap}}}{2} \quad (4-39)$$

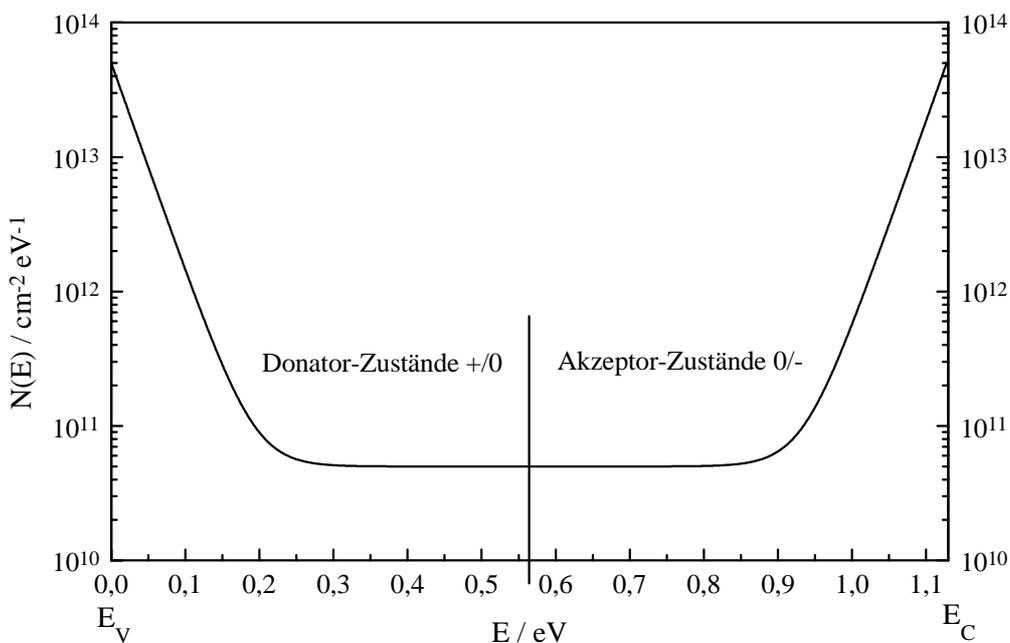


Bild 4.2: Modellierte Grenzflächenzustandsdichte

Die getrapte Ladung ergibt sich durch Integration über die (eine Hälfte der) Energielücke:

$$\begin{aligned}
 p_{\text{trap}} &= \int_{\text{gap}} dE \cdot N_D(E) \cdot (1 - f_D(E)) \\
 n_{\text{trap}} &= \int_{\text{gap}} dE \cdot N_A(E) \cdot f_A(E)
 \end{aligned}
 \tag{4-40}$$

Den Ausgangspunkt zur Beschreibung der Besetzungsfunktionen und der Rekombinationsraten als Funktion der freien Ladungsträgerdichten an der Oberfläche bildet die SRH-Statistik für ein einzelnes Trap-Niveau. Simmons und Taylor [Simmons 71, Taylor 72] entwickelten daraus die Statistik für ein Kontinuum von Zuständen unter der Annahme, daß diese höchstens einfach besetzt sind und nicht untereinander Ladungsträger austauschen. Da die Oberflächenzustände eine Ladung haben, muß es zwei Arten von Ratenparametern geben: δ_n für die Wechselwirkung mit einem neutralen Trap und δ_c für die Wechselwirkung mit einem geladenen Trap. Die Ratenparameter können von der energetischen Lage des Trap-Niveaus abhängig sein; hier wird von energetisch konstanten Werten für δ_n und δ_c ausgegangen.

Im stationären Zustand gilt für die Besetzungsfunktionen

$$\begin{aligned}
 f_D(E) &= \frac{\delta_c \cdot n + \delta_n \cdot p_1(E)}{\delta_c \cdot (n + n_1(E)) + \delta_n \cdot (p + p_1(E))} \\
 f_A(E) &= \frac{\delta_n \cdot n + \delta_c \cdot p_1(E)}{\delta_n \cdot (n + n_1(E)) + \delta_c \cdot (p + p_1(E))}
 \end{aligned}
 \tag{4-41}$$

und für die Rekombinationsrate an der Oberfläche

$$R^S = \int_{\text{gap}} dE \cdot \left[N_D(E) \cdot \frac{n \cdot p - n_i^2}{\frac{1}{\delta_n} (n + n_1(E)) + \frac{1}{\delta_c} (p + p_1(E))} + N_A(E) \cdot \frac{n \cdot p - n_i^2}{\frac{1}{\delta_c} (n + n_1(E)) + \frac{1}{\delta_n} (p + p_1(E))} \right]
 \tag{4-42}$$

Die Funktionen $n_1(E)$ und $p_1(E)$ sind gemäß (4-18) und (4-19) definiert.

Im zeitabhängigen Fall wird die allgemeine Formulierung der Rekombinationsraten betrachtet.

$$\begin{aligned}
 R_n^S &= \int_{\text{gap}} dE \cdot [N_D \cdot \delta_c \cdot \{n \cdot (1 - f_D) - n_1 \cdot f_D\} + N_A \cdot \delta_n \cdot \{n \cdot (1 - f_A) - n_1 \cdot f_A\}] \\
 R_p^S &= \int_{\text{gap}} dE \cdot [N_D \cdot \delta_n \cdot \{p \cdot f_D - p_1 \cdot (1 - f_D)\} + N_A \cdot \delta_c \cdot \{p \cdot f_A - p_1 \cdot (1 - f_A)\}]
 \end{aligned}
 \tag{4-43}$$

Die Herleitung der zeitabhängigen Besetzungsfunktionen erfolgt analog zu der im Volumen. Die partiellen Zeitableitungen lauten [Shaw 91]:

$$\frac{\partial}{\partial t} f_D = \delta_c \cdot n \cdot (1 - f_D) - \delta_c \cdot n_1 \cdot f_D - \delta_n \cdot p \cdot f_D + \delta_n \cdot p_1 \cdot (1 - f_D) \tag{4-44}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} f_A = \delta_n \cdot n \cdot (1 - f_A) - \delta_n \cdot n_1 \cdot f_A - \delta_c \cdot p \cdot f_A + \delta_c \cdot p_1 \cdot (1 - f_A) \tag{4-45}$$

Mit den beiden letzten Gleichungen und dem Ansatz eines Differenzenquotienten analog zu (4-35) erhält man die zeitabhängigen Besetzungsfunktionen in Abhängigkeit der aktuellen Ladungsträgerkonzentrationen und den Werten von f_D bzw. f_A des vorherigen Zeitschrittes.

$$\begin{aligned}
 f_D(t) &= \frac{f_D(t - \Delta t) + \Delta t \cdot (\delta_c \cdot n + \delta_n \cdot p_1)}{1 + \Delta t \cdot [\delta_c \cdot (n + n_1) + \delta_n \cdot (p + p_1)]} \\
 f_A(t) &= \frac{f_A(t - \Delta t) + \Delta t \cdot (\delta_n \cdot n + \delta_c \cdot p_1)}{1 + \Delta t \cdot [\delta_n \cdot (n + n_1) + \delta_c \cdot (p + p_1)]}
 \end{aligned}
 \tag{4-46}$$

Mit der hier dargelegten Statistik läßt sich auch das Volumen des amorphen Siliziums modellieren [Hack 83], wenn der amphotere Charakter der dangling-bonds vernachlässigt wird. Es sind lediglich die Einheiten der Zustandsdichten auf ein Volumen und nicht auf eine Fläche zu beziehen.

4.3.2 Ladung der Grenzfläche

Die Grenzflächenladung ergibt sich als Summe der festen und der getrapten Ladungen.

$$\sigma = q \cdot (Q_{\text{fix}} - n_{\text{trap}} + p_{\text{trap}}) \tag{4-47}$$

Es wird angenommen, daß sich die Ladungen in einer infinitesimal dünnen Fläche befinden [Robinson 95] und die Oberfläche (Bild 4.3) insgesamt neutral ist, d.h. bei einer Integration gilt [Otaredian 93b, Mui 95]:

$$\iiint_V d^3r \cdot \rho + \iint_{\partial V} dA \cdot \sigma = 0 \quad (4-48)$$

Unter Verwendung der Poisson-Gleichung läßt sich (4-48) umformen zu

$$\iint_{\partial V} d\vec{A} \cdot (-\epsilon_r \cdot \epsilon_0 \cdot \vec{\nabla} \Psi + \sigma \cdot \vec{n}) = 0 \quad (4-49)$$

wobei \vec{n} ein nach außen gerichteter Flächeneinheitsvektor ist. Für den eindimensionalen Fall erhält man dann

$$\left. \frac{\partial}{\partial x} \Psi \right|_{x=0} = - \frac{\sigma}{\epsilon_r \cdot \epsilon_0} \quad (4-50)$$

Diese Relation wird zur Formulierung einer der Randbedingungen für die Differentialgleichungen (4-9) dienen. Sie kann auch auf eine andere Art hergeleitet werden. Für die Normalkomponente der dielektrischen Verschiebung läßt sich an einer geladenen Grenzfläche eine Sprungbedingung formulieren; wenn die Passivierungsschicht als feldfrei angenommen wird [Engl 83], so ergibt sich wieder (4-50).

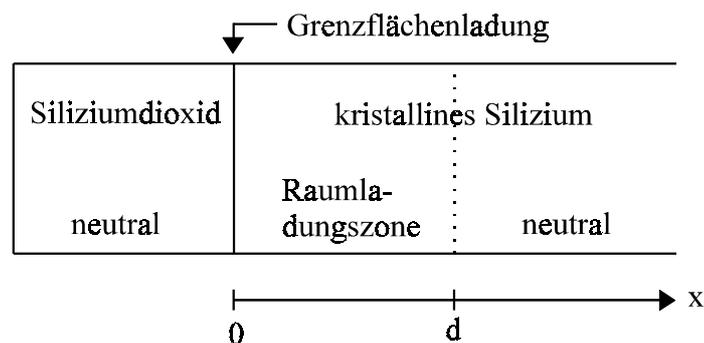


Bild 4.3: Ladungen an der Oberfläche

4.4 Randbedingungen

Um das Gleichungssystem (4-9) zu lösen, müssen geeignete Randbedingungen für n , p und Ψ gewählt werden; drei für die vordere und drei für die hintere Oberfläche.

Die Randbedingungen lauten im kontaktlosen Fall des zweiseitig passivierten Siliziums

$\frac{\partial}{\partial x} \Psi = \frac{-q}{\epsilon_r \cdot \epsilon_0} (Q_{\text{fix}} - n_{\text{trap}} + p_{\text{trap}})$	$\frac{\partial}{\partial x} \Psi = \frac{+q}{\epsilon_r \cdot \epsilon_0} (Q_{\text{fix}} - n_{\text{trap}} + p_{\text{trap}})$	(4-51)
$j_n = +q \cdot R_n^S$	$j_n = -q \cdot R_n^S$	
$j_p = -q \cdot R_p^S$	$j_p = +q \cdot R_p^S$	

wobei sich die beiden Spalten auf die Vorder- bzw. die Rückseite beziehen. Die beiden Gleichungen der ersten Zeile resultieren aus der Ladung an der Grenzfläche. Die anderen vier Gleichungen bedeuten, daß Elektronen und Löcher, die zur Oberfläche fließen, dort rekombinieren. Die zweite Gleichung der ersten Spalte ergibt sich aus (3-10) für den Fall $\xi \rightarrow 0$; die anderen drei Randbedingungen für die Ströme ergeben sich analog.

Wenn die Rückseite des Siliziums nicht passiviert ist, so werden dort andere Randbedingungen gewählt. Die modifizierten Randbedingungen lauten

$\frac{\partial}{\partial x} \Psi = \frac{-q}{\epsilon_r \cdot \epsilon_0} (Q_{\text{fix}} - n_{\text{trap}} + p_{\text{trap}})$	$\Psi = 0$	(4-52)
$j_n = +q \cdot R_n^S$	$n - n_0 = p - p_0$	
$j_p = -q \cdot R_p^S$	$j_n = -q \cdot s \cdot (n - n_0)$ (p-Typ)	
	$j_p = +q \cdot s \cdot (p - p_0)$ (n-Typ)	

wobei sich die erste Spalte wieder auf die Vorderseite und die zweite Spalte auf die Rückseite bei $x = L$ bezieht. Die erste Gleichung der zweiten Spalte definiert einen Bezugspunkt für das Potential; die zweite ist eine Relation für die Überschlußladungsträger. In der dritten Gleichung wird ebenso wie bei der Vorderseite gefordert, daß Elektronen bzw. Löcher, die zur Oberfläche fließen, dort rekombinieren; diese Rekombination wird für die Minoritäten mit einer festen Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeit s beschrieben. Es sei nochmals darauf hingewiesen, daß die rückseitigen Randbedingungen bei $x = L$ und nicht am Eingang der Raumladungszone gewählt werden; eine solche kann trotz fehlender Passivierung vorhanden sein. Da für die Ladungsträgerkonzentrationen im thermodyna-

mischen Gleichgewicht n_0 und p_0 die Werte des Volumens gewählt werden, geht man mit der Wahl von (4-52) davon aus, daß an der Rückseite keine Raumladungszone existiert.

4.5 Lösen der Grundgleichungen

4.5.1 Existenz und Eindeutigkeit

Das Gleichungssystem (4-9) stellt ein gekoppeltes nichtlineares System von partiellen Differentialgleichungen für n , p und Ψ dar. Die Gleichungen können auch für andere Variablensätze formuliert werden; von dieser Möglichkeit wird hier jedoch nicht Gebrauch gemacht. Es ist zu klären, ob für die Variablen n , p und ψ eine Lösung existiert und ob diese auch eindeutig ist. Wenn nun Aussagen zur Eindeutigkeit gemacht werden, so bedeutet „eindeutig“ bei Wahl der Randbedingungen (4-51) lediglich „eindeutig bis auf eine Konstante für das Potential Ψ “; bei Wahl der Randbedingungen (4-52) entfällt diese Einschränkung.

Grundsätzlich müssen physikalisch sinnvolle Randbedingungen gewählt werden, damit eine Lösung existieren kann. Aussagen zur Existenz und Eindeutigkeit sind mit Einschränkungen verbunden, die hauptsächlich die Rekombinationsraten und die Beweglichkeiten betreffen; die für diese Arbeit relevanten Aussagen sind [Mock 83]:

- Im stationären wie im transienten Fall existiert eine Lösung, wenn die Rekombination mit einem SRH-Formalismus beschrieben wird und die Beweglichkeiten konstant sind.
- Im stationären Fall ist die Lösung eindeutig, wenn die Rekombination mit einem SRH-Formalismus beschrieben wird und die Beweglichkeiten konstant sind.
- Im zeitabhängigen Fall ist die Lösung eindeutig, wenn Anfangswerte für n , p und Ψ die Poisson-Gleichung erfüllen.

Da die Rekombination mit einem SRH-Formalismus beschrieben wird, die Beweglichkeiten konstant sind und eine transiente Simulation stets aus einem stationären Zustand heraus entwickelt wird (dabei ist die Poisson-Gleichung erfüllt!), sind alle Lösungen, die später berechnet werden, eindeutig.

4.5.2 Skalierung

Um das Konvergenzverhalten des Simulationsprogrammes zu verbessern, werden die in den Gleichungen auftretenden Größen geeignet skaliert, wobei in der Literatur mehrere Ansätze verbreitet sind [Selberherr 84]. Im folgenden werden alle verwendeten Skalierungswerte und einige betroffene Größen aufgelistet:

$$\Psi_0 = kT / q = 25,85 \cdot 10^{-3} \quad [\text{V}] \quad \text{für} \quad \Psi \quad (4-53)$$

$$x_0 = L \quad [\text{cm}] \quad \text{für} \quad x \quad (4-54)$$

$$D_0 = N_C = 2,86 \cdot 10^{19} \quad [\text{cm}^{-3}] \quad \text{für} \quad n, p, N_{\text{dot}} \quad (4-55)$$

$$\mu_0 = 1400 \quad [\text{cm}^2 / (\text{Vs})] \quad \text{für} \quad \mu_n, \mu_p \quad (4-56)$$

$$t_0 = x_0^2 / (\mu_0 \cdot \Psi_0) \quad [\text{s}] \quad \text{für} \quad t, \tau_n, \tau_p \quad (4-57)$$

$$j_0 = -q \cdot D_0 \cdot \mu_0 \cdot U_0 / x_0 \quad [\text{A} / \text{cm}^2] \quad \text{für} \quad j_n, j_p \quad (4-58)$$

$$c_0 = 1 / (D_0 \cdot t_0) \quad [\text{cm}^3 / \text{s}] \quad \text{für} \quad c_n, c_p, \delta_n, \delta_p \quad (4-59)$$

$$Q_0 = x_0 \cdot D_0 \quad [\text{cm}^{-2}] \quad \text{für} \quad Q_{\text{fix}}, n_{\text{trap}}, p_{\text{trap}} \quad (4-60)$$

$$s_0 = \mu_0 \cdot \Psi_0 / x_0 \quad [\text{cm} / \text{s}] \quad \text{für} \quad s \quad (4-61)$$

$$\lambda_0 = \frac{\Psi_0 \cdot \epsilon_r \cdot \epsilon_0}{q \cdot D_0 \cdot x_0^2} \quad [1] \quad (4-62)$$

Werden die Poisson-Gleichung, die beiden Kontinuitäts- und die beiden Stromgleichungen skaliert und anschließend zusammengefaßt, so ergibt sich analog zu (4-9) das skalierte Gleichungssystem

$$\begin{aligned} 0 &= \lambda_0 \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) + (-n(x, t) + p(x, t) \pm N_{\text{dot}}) \\ 0 &= \mu_n \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[-n(x, t) \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} n(x, t) \right] - \frac{\partial}{\partial t} n(x, t) + G(x, t) - R_n(x, t) \\ 0 &= \mu_p \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[+p(x, t) \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} p(x, t) \right] - \frac{\partial}{\partial t} p(x, t) + G(x, t) - R_p(x, t) \end{aligned} \quad (4-63)$$

Bei der Skalierung der Randbedingungen (4-51) und (4-52) ist das Vorzeichen für die Elektronen- und Löcherströme zu verändern, da j_0 negativ ist. Des weiteren lautet die

Gleichung, die einen Zusammenhang zwischen dem Potential und der Grenzflächenladung liefert

$$\lambda_0 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Psi = \mp (Q_{\text{fix}} - n_{\text{trap}} + p_{\text{trap}}) \quad (4-64)$$

wobei sich das Minus- bzw. das Pluszeichen auf die vordere bzw. die hintere Oberfläche bezieht. Ansonsten werden die Randbedingungen nicht weiter verändert. Im Simulationsprogramm werden die Donator- und Akzeptorzustandsdichten mit Q_0 skaliert, so daß sie dann die Einheit $1/\text{eV}$ haben; dies ist unproblematisch, da sie stets in einem Integral auftreten, bei dem über eine Energie integriert wird.

4.5.3 Methode der finiten Differenzen

Die Grundgleichungen (4-63) werden mit der Methode der finiten Differenzen diskretisiert. Dazu werden N nicht äquidistante Rasterpunkte definiert (im Simulationsprogramm sind es 170), an denen die Gleichungen zu lösen sind; der erste bzw. letzte Rasterpunkt entspricht der vorderen bzw. hinteren Oberfläche. Um den Rechenaufwand zu minimieren, sollten so wenig Punkte wie möglich gewählt werden, andererseits müssen diese dicht genug liegen, um den aus der Diskretisierung resultierenden Fehler klein zu halten. Allgemein gültige Rezepte zur Erzeugung eines optimalen Rasters gibt es nicht.

Mit den Abkürzungen

$$\Delta t_m = t_m - t_{m-1} \quad (m = 1, 2, 3 \dots) \quad (4-65)$$

$$u_i = u(x_i, t_m) \quad (i = 1 \dots N) \quad (4-66)$$

$$u_i^* = u(x_i, t_{m-1}) \quad (i = 1 \dots N) \quad (4-67)$$

werden die Ableitungen von n und p nach der Zeit umgeschrieben:

$$\frac{\partial}{\partial t} n(x, t) \rightarrow \frac{n_i - n_i^*}{\Delta t_m} \quad (4-68)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} p(x, t) \rightarrow \frac{p_i - p_i^*}{\Delta t_m} \quad (4-69)$$

Unter der Annahme, daß zwischen zwei Punkten das Potential linear variiert und der Elektronen- und Löcherstrom konstant ist, werden auch die Ortsableitungen durch

Differenzenquotienten ersetzt. Diese Umformungen wurden zuerst von Scharfetter und Gummel [Scharfetter 69] durchgeführt.

Mit den Bernoulli-Funktionen

$$B_1(i) = \frac{\Psi_{i+1} - \Psi_i}{\exp[\Psi_{i+1} - \Psi_i] - 1} \quad (4-70)$$

$$B_2(i) = \frac{\Psi_i - \Psi_{i+1}}{\exp[\Psi_i - \Psi_{i+1}] - 1} \quad (4-71)$$

und
$$h_i = x_{i+1} - x_i \quad (4-72)$$

ergeben sich die skalierten Teilchenströme zwischen den Rasterpunkten x_i und x_{i+1} zu

$$j_n|_{i+1/2} = \mu_n \cdot \frac{1}{h_i} \cdot [B_2(i) \cdot n_i - B_1(i) \cdot n_{i+1}] \quad (4-73)$$

$$j_p|_{i+1/2} = \mu_p \cdot \frac{1}{h_i} \cdot [B_2(i) \cdot p_{i+1} - B_1(i) \cdot p_i] \quad (4-74)$$

und das Gleichungssystem (4-63) lautet in diskretisierter Form:

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{2 \cdot \lambda_0}{h_i + h_{i-1}} \cdot \left[\frac{\Psi_{i+1} - \Psi_i}{h_i} - \frac{\Psi_i - \Psi_{i-1}}{h_{i-1}} \right] + (-n_i + p_i \pm N_{\text{dot}}) \\ 0 &= -\frac{\mu_n}{h_{i-1}} \cdot B_2(i-1) \cdot n_{i-1} + \left[\frac{\mu_n}{h_i} \cdot B_2(i) + \frac{\mu_n}{h_{i-1}} \cdot B_1(i-1) \right] \cdot n_i \\ &\quad - \frac{\mu_n}{h_i} \cdot B_1(i) \cdot n_{i+1} + \frac{h_i + h_{i-1}}{2} \cdot \left[R_{n_i} - G_i + \frac{n_i - n_i^*}{\Delta t_m} \right] \\ 0 &= -\frac{\mu_p}{h_{i-1}} \cdot B_1(i-1) \cdot p_{i-1} + \left[\frac{\mu_p}{h_i} \cdot B_1(i) + \frac{\mu_p}{h_{i-1}} \cdot B_2(i-1) \right] \cdot p_i \\ &\quad - \frac{\mu_p}{h_i} \cdot B_2(i) \cdot p_{i+1} + \frac{h_i + h_{i-1}}{2} \cdot \left[R_{p_i} - G_i + \frac{p_i - p_i^*}{\Delta t_m} \right] \end{aligned} \quad (4-75)$$

Diese Art der zeitlichen Diskretisierung wird in der Literatur als „Rückwärts-Euler-Methode“ bezeichnet; sie liefert in Hinblick auf die Genauigkeit der Lösung das bestmögliche Ergebnis [Engl 83].

Das zu lösende nichtlineare Gleichungssystem kann nun inklusive der Randbedingungen in der Form

$$\begin{cases} F_1(i) = F_1(n_{i-1}, p_{i-1}, \Psi_{i-1}, n_i, p_i, \Psi_i, n_{i+1}, p_{i+1}, \Psi_{i+1}) = 0 \\ F_2(i) = F_2(n_{i-1}, p_{i-1}, \Psi_{i-1}, n_i, p_i, \Psi_i, n_{i+1}, p_{i+1}, \Psi_{i+1}) = 0 \\ F_3(i) = F_3(n_{i-1}, p_{i-1}, \Psi_{i-1}, n_i, p_i, \Psi_i, n_{i+1}, p_{i+1}, \Psi_{i+1}) = 0 \end{cases} \quad (4-76)$$

geschrieben werden, wobei an den Randpunkten $i = 1$ bzw. $i = N$ eine Abhängigkeit von den Variablen n , p und Ψ mit dem Index $i - 1$ bzw. $i + 1$ nicht existiert.

4.5.4 Lösungsalgorithmus

Mit Hilfe des Newton-Verfahrens wird das Gleichungssystem (4-76) gelöst. Bezeichnet α den Iterationsindex, so lautet die Iterationsvorschrift:

$$\boxed{-\vec{F}(i)^\alpha = \sum_{k=i-1}^{i+1} F_{ik}^\alpha \cdot \vec{L}_k^\alpha} \quad (\alpha = 0, 1, 2, \dots) \quad (4-77)$$

mit

$$\vec{F}(i)^\alpha = \begin{bmatrix} F_1(i) \\ F_2(i) \\ F_3(i) \end{bmatrix}^\alpha \quad \vec{L}_k^\alpha = \begin{bmatrix} n_k^{\alpha+1} - n_k^\alpha \\ p_k^{\alpha+1} - p_k^\alpha \\ \Psi_k^{\alpha+1} - \Psi_k^\alpha \end{bmatrix} \quad (4-78)$$

$$F_{ik}^\alpha = \begin{bmatrix} \frac{\partial F_1(i)}{\partial n_k} & \frac{\partial F_1(i)}{\partial p_k} & \frac{\partial F_1(i)}{\partial \Psi_k} \\ \frac{\partial F_2(i)}{\partial n_k} & \frac{\partial F_2(i)}{\partial p_k} & \frac{\partial F_2(i)}{\partial \Psi_k} \\ \frac{\partial F_3(i)}{\partial n_k} & \frac{\partial F_3(i)}{\partial p_k} & \frac{\partial F_3(i)}{\partial \Psi_k} \end{bmatrix}^\alpha \quad (4-79)$$

Mit einer geeignet gewählten Startnäherung ($\alpha = 0$) für n , p und Ψ beginnend, muß aus dem linearen Gleichungssystem (4-77) stets eine Lösung für den nächsten Iterationsschritt gefunden werden.

Der Ansatz für den Lösungsvektor

$$\boxed{\vec{L}_i^\alpha = A_i^\alpha \cdot \vec{L}_{i+1}^\alpha + \vec{B}_i^\alpha} \quad (4-80)$$

liefert eine Vorschrift zur Bestimmung der Komponenten der Matrizen A_i und der Vektoren \vec{B}_i , die in jeder Iteration benutzt wird, so daß die Lösung sukzessiv errechnet werden kann. Das Abbruchkriterium für die Iteration lautet:

$$\boxed{\text{Maximum}\{|F_1(i)|, |F_2(i)|, |F_3(i)|\}} < 10^{-14} \quad \text{für alle } i = 1 \dots N \quad (4-81)$$

Die Konvergenzeigenschaften hängen entscheidend davon ab, wie weit die Startnäherung von der gesuchten Lösung entfernt ist. In der Regel werden im stationären Fall weniger als zehn und im zeitabhängigen Fall drei Iterationen benötigt.

Im Lösungsalgorithmus werden alle drei Variablen n , p und Ψ simultan verändert. Es ist aber auch möglich, daß man jede Gleichung einzeln für eine Variable löst und die anderen Variablen dabei als konstant annimmt [Gummel 64]. Eine solche Sequenz wird so lange wiederholt, bis alle Gleichungen mit der gewünschten Genauigkeit gelöst sind. Der Nachteil einer solchen Methode ist das schlechte Konvergenzverhalten [Bruns 93].

4.6 Wahl der Parameter

In diesem Kapitel werden die Parameterwerte, wie sie in den Simulationen für eine Temperatur von 300 K gewählt werden, aufgeführt. Abweichungen von diesen Werten werden später stets angegeben.

a) effektive Zustandsdichten, intrinsische Ladungsträgerkonzentration und Bandlücke

$$N_C = 2,86 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3} \quad [\text{Green 90}] \quad (4-82)$$

$$N_V = 3,10 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3} \quad [\text{Green 90}] \quad (4-83)$$

$$n_i = 1,00 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3} \quad [\text{Sproul 91}] \quad (4-84)$$

$$E_{\text{gap}} = kT \cdot \ln \left[\frac{N_C \cdot N_V}{n_i^2} \right] = 1,13 \text{ eV} \quad (4-85)$$

b) relative Dielektrizitätskonstante

$$\epsilon_r = 11,9 \quad [\text{Poerschke 91}] \quad (4-86)$$

c) Beweglichkeiten und Diffusionskonstanten

Die Beweglichkeiten betragen im intrinsischen kristallinen Silizium

$$\mu_n = 1430 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}} \quad [\text{Green 90}] \quad (4-87)$$

$$\mu_p = 480 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}} \quad [\text{Green 90}] \quad (4-88)$$

Durch Streuung der freien Ladungsträger an ionisierten Dotieratomen wird die Beweglichkeit reduziert. Dies wird durch folgende Beziehungen [Selberherr 84] berücksichtigt:

$$\mu_n = 1430 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}} \cdot \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{N_{\text{dot}}}{3 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3} + \frac{N_{\text{dot}}}{350}}}} \quad (4-89)$$

$$\mu_p = 480 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}} \cdot \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{N_{\text{dot}}}{4 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3} + \frac{N_{\text{dot}}}{81}}}} \quad (4-90)$$

Die Beweglichkeiten der Elektronen und der Löcher können durch Streuung der Ladungsträger untereinander und eine hohe elektrische Feldstärke weiter reduziert werden. Der erste Prozeß wird nicht berücksichtigt, da die Konzentrationen der Ladungsträger zu gering sind. Der Einfluß der elektrischen Feldstärke wird beim Silizium oberhalb eines Wertes von $5 \cdot 10^3 \text{ Vcm}^{-1}$ bedeutsam [Schaumburg 91]. Ein solcher Wert tritt, wenn er überhaupt erreicht wird, bei p-dotiertem Silizium in der Inversionsschicht der Raumladungszone auf. Eine Abhängigkeit der Beweglichkeit von der elektrischen Feldstärke kann dazu führen, daß die Halbleiter-Grundgleichungen nicht mehr eindeutig lösbar sind [Selberherr 84]; sie wird daher im Simulationsprogramm nicht berücksichtigt.

d) zeitlicher Verlauf der Lichtintensität

Zur Simulation von zeitabhängigen Situationen muß die Generationsrate als Funktion der Zeit und des Ortes bekannt sein. Dazu wird nach (4-13) der zeitliche Verlauf der Lichtintensität benötigt.

Die Intensität des für TRMC-Messungen verwendeten Anregungspulses wird mit

$$P(t) = P_{\text{max}} \cdot \frac{1}{640} \cdot \left(\frac{t}{\text{ns}}\right)^2 \cdot \exp\left[-\left(\frac{t-1,7\text{ns}}{10\text{ns}}\right)^2\right] \quad \text{für } t < 30 \text{ ns} \quad (4-91)$$

beschrieben. Dabei gilt:

$$\int_0^{30 \text{ ns}} dt \cdot P(t) = P_{\text{max}} \cdot 10^{-9} \text{ s} \quad (4-92)$$

Der zeitliche Verlauf des Anregungspulses ist in Bild 4.4 dargestellt.

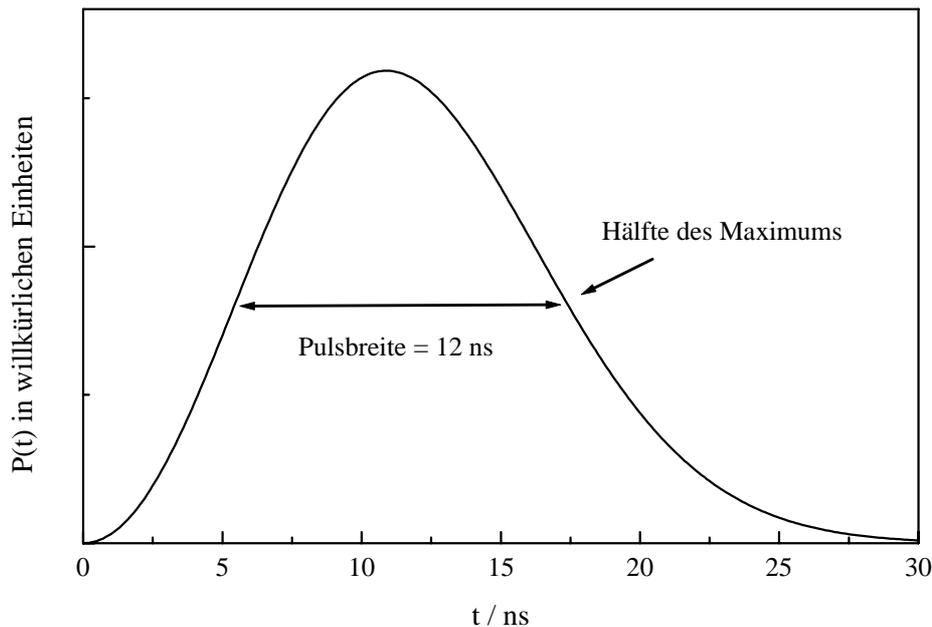


Bild 4.4: Zeitlicher Verlauf des TRMC-Lichtpulses

Im Simulationsprogramm wird die gesamte Pulsdauer von 30 ns in z.B. 300 Zeitschritte unterteilt, bei denen die Gleichungen gelöst werden. Danach sind die Zeitabstände zur Simulation des Abklingens des Mikrowellensignals nicht mehr konstant; sie werden mit der Zeit größer.

Bei FRMC-Messungen wird mit einer Rechteckmodulation von $\pm 10\%$ der dc-Lichtintensität gearbeitet. Im Simulationsprogramm hat die Intensität den folgenden Verlauf:

$$P(t) \sim \left[1 + \frac{m}{100} \cdot \sin(2 \cdot \pi \cdot \nu \cdot t) \right] \quad (4-93)$$

Die Grundwelle der Rechteckmodulation erhält man mit dem Wert $m = 12,7$.

Um Amplitude und Phase des Mikrowellensignals in Bezug zum Anregungssignal zu simulieren, wird eine Periode der Lichtmodulation in 360 oder 720 Zeitpunkte unterteilt, bei denen die Grundgleichungen gelöst werden. Da das Simulationsprogramm Einschwing-

vorgänge erfaßt und sich ein quasi-stationärer Zustand erst nach einiger Zeit einstellt, müssen die Rechnungen unter Umständen über mehrere Modulationsperioden erfolgen.

e) Absorptionskoeffizienten

$$\lambda = 514 \text{ nm:} \quad \alpha = 9,3 \cdot 10^3 \text{ cm}^{-1} \quad [\text{Green 95}] \quad (4-94)$$

$$\lambda = 532 \text{ nm:} \quad \alpha = 7,7 \cdot 10^3 \text{ cm}^{-1} \quad [\text{Green 95}] \quad (4-95)$$

$$\lambda = 1064 \text{ nm:} \quad \alpha = 10 \text{ cm}^{-1} \quad [\text{Green 95}] \quad (4-96)$$

f) Reflexion

Die n-dotierte Siliziumprobe (passiviert mit 70 nm Nitrid) und die p-dotierte Siliziumprobe (passiviert mit 170 nm Oxid) haben unterschiedliche Werte für die Reflexion, da ihre Passivierungsschichten unterschiedlich dick sind und einen anderen Brechungsindex haben. Es wurden die folgenden Werte gemessen:

$$\lambda = 514 \text{ nm:} \quad 8 \% \quad (\text{n-Probe}) \quad (4-97)$$

$$35 \% \quad (\text{p-Probe}) \quad (4-98)$$

$$\lambda = 532 \text{ nm:} \quad 6 \% \quad (\text{n-Probe}) \quad (4-99)$$

$$35 \% \quad (\text{p-Probe}) \quad (4-100)$$

$$\lambda = 1064 \text{ nm:} \quad 25 \% \quad (\text{n-Probe}) \quad (4-101)$$

$$2 \% \quad (\text{p-Probe}) \quad (4-102)$$

g) Lebensdauer und Ratenparameter (Volumen)

Wie bereits in Kapitel 4.2.2 erwähnt, werden die SRH-Ratenparameter und damit nach (4-26) und (4-27) auch die SRH-Lebensdauern gleich groß gewählt, d.h.

$$c_n = c_p = c_{\text{SRH}} \quad (4-103)$$

$$\tau_n = \tau_p = \tau_{\text{SRH}} \quad (4-104)$$

Für die stationären Simulationen wird nach (4-25) lediglich die Lebensdauer benötigt. Bei den zeitabhängigen Simulationen ist nach (4-32) und (4-36) die Kenntnis der Lebensdauer und des Ratenparameters erforderlich.

Der Wert des Ratenparameters, der das Produkt aus der thermischer Geschwindigkeit und dem Einfangquerschnitt ist, hängt stark von der energetischen Lage des Trap-Niveaus ab. Ein genauer Wert für ein effektives Niveau in der Bandmitte kann daher nicht angegeben werden. Der gewählte „typische Wert“

$$c_{SRH} = 1 \cdot 10^{-8} \text{ cm}^3 \cdot \text{s}^{-1} \quad [\text{Goetzberger 94}] \quad (4-105)$$

stimmt im Rahmen eines Fehlers von \pm einer Größenordnung mit Werten einer Störstelle, wie z.B. Eisen, die im Bereich der Bandmitte liegt, überein [Wang 89]. Die Volumenlebensdauer eines Siliziumwafers kann je nach Reinheit des Materials variieren und liegt innerhalb eines Intervalls von etwa $10\mu\text{s}$ bis 5ms . In der Regel führt bei der Herstellung der Wafer das Zonenziehverfahren (FZ) zu höheren Werten als das Czochralskiverfahren (CZ). Die für die n-Probe (FZ-Material) und die p-Probe (CZ-Material) gewählten SRH-Lebensdauern betragen

$$\tau_{SRH} = 2,4 \text{ ms} \quad (\text{n-Probe}) \quad (4-106)$$

$$\tau_{SRH} = 300 \mu\text{s} \quad (\text{p-Probe}) \quad (4-107)$$

h) Dotierung

Der spezifische Widerstand ρ , der Kehrwert der Leitfähigkeit σ , der beiden Proben wurde gemessen.

$$\rho = \sigma^{-1} = 10 \Omega\text{cm} \quad (\text{n-Probe}) \quad (4-108)$$

$$\rho = \sigma^{-1} = 18 \Omega\text{cm} \quad (\text{p-Probe}) \quad (4-109)$$

Daraus resultieren die Dotierungskonzentrationen

$$N_{\text{dot}} = 4,3 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3} \quad (\text{n-Probe}) \quad (4-110)$$

$$N_{\text{dot}} = 7,4 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3} \quad (\text{p-Probe}) \quad (4-111)$$

i) Probendicke

$$L = 290 \mu\text{m} \quad (\text{n-Probe}) \quad (4-112)$$

$$L = 505 \mu\text{m} \quad (\text{p-Probe}) \quad (4-113)$$

j) Ratenparameter (Oberfläche)

Bei den Ratenparametern an der Oberfläche wird zwischen Wechselwirkungen der freien Ladungsträger mit einem neutralen und einem geladenen Trap unterschieden. Der Raten-

parameter δ_c eines geladenen, d.h. „Coulomb-attraktiven“ Übergangs ist größer als der eines ungeladenen Übergangs δ_n . Diese Werte können grundsätzlich von der energetischen Lage der Traps in der Energielücke abhängig sein. Experimentell wurden solche Abhängigkeiten gemessen [Aberle 92], wobei die experimentelle Ungenauigkeit etwa eine Größenordnung beträgt. Die Werte in der Literatur variieren über mehrere Größenordnungen, sowohl für die Siliziumdioxid/Silizium- [Aberle 92] als auch die Siliziumnitrid/Silizium-Grenzfläche [Elmiger 97a]. Die Gründe hierfür sind mögliche Fehler beim Messen/Auswerten, oder die zu ermittelnden Werte sind von der Präparation abhängig. Im Rahmen der Simulationen werden zwei energieunabhängige Werte gewählt.

$$\text{n-Probe:} \quad \delta_c = 1 \cdot 10^{-8} \frac{\text{cm}^3}{\text{s}} \quad (4-114)$$

$$\delta_n = 2 \cdot 10^{-12} \frac{\text{cm}^3}{\text{s}} \quad (4-115)$$

$$\text{p-Probe:} \quad \delta_c = 5 \cdot 10^{-9} \frac{\text{cm}^3}{\text{s}} \quad (4-116)$$

$$\delta_n = 5 \cdot 10^{-10} \frac{\text{cm}^3}{\text{s}} \quad (4-117)$$

k) Grenzflächenzustandsdichte, Bandverbiegung

CV- und SPV-Messungen liefern die Zustandsdichte an der Grenzfläche und die Bandverbiegung. Die Werte a_1 , a_2 , a_3 sind gemäß (4-37) bis (4-39) definiert.

$$\text{n-Probe:} \quad a_1 = 5 \cdot 10^{13} (\text{cm}^2 \cdot \text{eV})^{-1} \quad (4-118)$$

$$a_2 = 28 \text{ meV} \quad (4-119)$$

$$a_3 = 5 \cdot 10^{10} (\text{cm}^2 \cdot \text{eV})^{-1} \quad (4-120)$$

$$\Psi_S = 100 \text{ mV} \quad (4-121)$$

$$\text{p-Probe:} \quad a_1 = 5 \cdot 10^{13} (\text{cm}^2 \cdot \text{eV})^{-1} \quad (4-122)$$

$$a_2 = 28 \text{ meV} \quad (4-123)$$

$$a_3 = 6 \cdot 10^{10} (\text{cm}^2 \cdot \text{eV})^{-1} \quad (4-124)$$

$$\Psi_S = 380 \text{ mV} \quad (4-125)$$

Die Bandverbiegungen werden nicht als Parameter für das Simulationsprogramm benötigt, sondern die festen Ladungen. Diese müssen so gewählt werden, daß sich die gemessenen Bandverbiegungen ergeben.

$$Q_{\text{fix}} = 1 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2} \quad (\text{n-Probe}) \quad (4-126)$$

$$Q_{\text{fix}} = 6,4 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2} \quad (\text{p-Probe}) \quad (4-127)$$

Die n-Probe befindet sich in Akkumulation und die p-Probe in (geringer) Inversion.

l) Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeit

Wenn auf einer Seite der Siliziumprobe die Passivierungsschicht abgeätzt wurde, so werden die Simulationen mit den Randbedingungen (4-52) durchgeführt. Der s-Wert beträgt für die n- und die p-Probe

$$s = 1 \cdot 10^5 \frac{\text{cm}}{\text{s}} \quad (4-128)$$