

Министерство образования Республики Беларусь
Учреждение образования
«Белорусский государственный университет
информатики и радиоэлектроники»

УДК 621.382.3

Шохонов
Денис Александрович

Моделирование транспортных свойств полупроводникового дисилицида
бария

АВТОРЕФЕРАТ

магистерской диссертации на соискание степени
магистра технических наук

по специальности 1-41 81 03 «Нанотехнологии и
наноматериалы в электронике»

Научный руководитель
д-р.физ.-матем. наук, доцент
Мигас Д.Б.

Минск 2019

Работа выполнена на кафедре микро- и наноэлектроники учреждения образования «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники»

Научный руководитель:

Мигас Дмитрий Борисович,

доктор физико-математических наук, профессор кафедры микро- и наноэлектроники учреждения образования «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники»

Рецензент:

Хмыль Александр Александрович,

доктор технических наук, профессор кафедры электронной техники и технологии «Белорусский государственный экономический университет»

Защита диссертации состоится «24» июня 2019 г. года в 9⁰⁰ часов на заседании Государственной комиссии по защите магистерских диссертаций в учреждении образования «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники» по адресу: 220013, г.Минск, ул. П.Бровки, 6, 1 уч. корп., ауд. 114, тел.: 293-89-26, e-mail: kafme@bsuir.by.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке учреждения образования «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники».

ВВЕДЕНИЕ

На сегодняшний день солнечные элементы активно используются для преобразования энергии солнечного излучения в электрическую энергию. Стоит отметить, что в 2015 году суммарный объем вырабатываемой энергии на установленных солнечных элементах достиг 200 ГВт. Альтернативная энергетика уверенно замещает традиционную энергетика, основанную на использовании углеводородов, за счет увеличения эффективности преобразования и снижения стоимости солнечных батарей. На сегодняшний день более 90% солнечных элементов используют кристаллический кремний, который не токсичен, его (кремния) запасы практически не ограничены, а технология изготовления – это технология современной микроэлектроники. Тем не менее, у кристаллического кремния как основного материала солнечных элементов есть два основных недостатка. Во-первых, кремний является непрямозонным полупроводником, что приводит к небольшим значениям коэффициента оптического поглощения не только возле края собственного поглощения, но и для интервала энергий на 1 – 2 эВ больше ширины запрещенной зоны. Это неизбежно требует увеличения толщины кремниевой пластины до ~180 мкм для эффективного поглощения фотонов и, как следствие, стоимости солнечных элементов. Второй недостаток – это значение ширины запрещенной зоны (~1,1 эВ), что меньше, чем «идеальная» ширина запрещенной зоны (~1,4 эВ) для двухслойных солнечных элементов.

Идеальный материал для солнечных элементов должен обладать значительными значениями коэффициента оптического поглощения у края собственного поглощения, большим значением времени жизни неосновных носителей заряда и шириной запрещенной зоны, близкой к 1,4 эВ. Тема данной диссертационной работы посвящена исследованию транспортных свойств полупроводникового дисилицида бария (BaSi_2), который можно рассматривать в качестве перспективного материала для солнечной энергетике.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы исследования

Анализ экспериментальных значений коэффициента оптического поглощения для BaSi_2 показал наличие ширины запрещенной зоны около 1,30 эВ. Также установлены достаточно большие значения коэффициента оптического поглощения вблизи края собственного поглощения ($\sim 10^5 \text{ см}^{-1}$), большие значения диффузионной длины неосновных носителей заряда (~10 мкм) и большие значения времени жизни неосновных носителей заряда (~10 нс). Молекулярно-лучевая эпитаксия и вакуумное испарение используются для получения тонких пленок $\text{BaSi}_2(100)$ на $\text{Si}(111)$ и из-за незначительного расхождения параметров решеток (менее 1%) возможно сформировать $\text{n}^+\text{-BaSi}_2/\text{p}^+\text{-Si}$ туннельный переход с большим фотооткликом.

Теоретические исследования энергетического спектра и оптических свойств BaSi_2 с помощью методов из первых принципов детально описали зонную структуру данного силицида вблизи запрещенной зоны, отмечая непрямозонный характер запрещенной зоны. Однако из-за наличия нескольких локальных минимумов зоны проводимости, которые близки по энергии к глобальному минимуму, обобщенная плотность электронных состояний оказалась большой вблизи края собственного поглощения, что и привело к большим значениям коэффициента оптического поглощения вблизи края собственного поглощения. Полученные значения $\sim 10\%$ эффективности преобразования энергии солнечного излучения в электрическую в солнечных элементах на основе BaSi_2 в 2,5 раза меньше максимально предсказанной эффективности из-за наличия дефектов структуры, выступающих как центры рассеяния носителей заряда.

Степень разработанности проблемы

Были проведены расчеты легированного BaSi_2 , где атомы Si замещались атомами B, P, N, Al, In, Ga, Sb, которые показали возможность получения n- либо p-типа проводимости в соответствии с экспериментальными данными. Исследования влияния точечных дефектов на электронные и оптические свойства не проводились.

Экспериментальные исследования температурной зависимости подвижности электронов в n- BaSi_2 с концентрацией носителей $n=5 \times 10^{15} \text{ см}^{-3}$ показали наличие максимума ($\sim 1200 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$) на 218 К, что значительно больше, чем для других полупроводниковых силицидов. Как для низкотемпературной области, где доминирует рассеяние на ионизированной примеси, так и для высокотемпературной области с преимущественным рассеянием на акустических фононах обнаружено отклонение соответственно от $T^{3/2}$ и $T^{-3/2}$ зависимостей, что может указывать на наличие других центров рассеяния. Экспериментально не исследовались транспортные свойства носителей заряда для p- BaSi_2 . Теоретического моделирования транспортных свойств также не проводилось.

Пассивация водородом пленок BaSi_2 оказывает значительное влияние на величину фотопроводимости и времени жизни неравновесных носителей заряда. Экспериментально было обнаружено, что продолжительность подачи водорода $t_H = 15$ мин значительно повышает фотопроводимость пленки BaSi_2 . Измерения, связанные с затуханием микроволновой фотопроводимости, показали, что время жизни неравновесных носителей заряда составляло 14 мкс, что на много превышает максимальное значение времени жизни неравновесных носителей заряда в BaSi_2 , которое было достигнуто при ранних исследованиях.

Цель и задачи исследования

Целью диссертации является теоретическое исследование на основе экспериментальных данных температурной зависимости подвижности носителей заряда и зависимости фототклика от времени после прекра-

щения освещения образца в тонких пленках BaSi_2 .

Для выполнения поставленной цели в работе были сформулированы **следующие задачи**:

– провести анализ экспериментальных и теоретических данных температурной зависимости подвижности носителей заряда и кривых затухания фотопроводимости в полупроводниковом BaSi_2 ;

– выбрать и обосновать методы и методики моделирования зависимости подвижности носителей заряда от температуры и зависимости фотопроводимости от времени, используя аналитические выражения в случае различных механизмов рассеяния и различных рекомбинационных процессов, имеющих место в полупроводниковых материалах;

– разработать и написать программный код для моделирования температурной зависимости подвижности носителей заряда и зависимости фотопроводимости от времени в полупроводниковых материалах.

Объектом исследования является полупроводниковый дисилицид бария BaSi_2 – перспективный материал для солнечных элементов.

Предметом работы является исследование транспортных свойств, определяющих эффективность преобразования энергии в солнечных элементах полупроводникового дисилицида бария.

Область исследования. Содержание диссертационной работы соответствует образовательному стандарту высшего образования второй ступени (магистратуры) специальности 1-41 81 03 «Нанотехнологии и наноматериалы в электронике».

Теоретическая и методологическая основа исследования

В основу диссертации легли результаты экспериментальных исследований, проведенных японскими учеными из института прикладной физики университета Цукуба, температурной зависимости подвижности носителей заряда и зависимости фотопроводимости от времени в тонких пленках BaSi_2 .

Для получения теоретических результатов исследования использовались аналитические выражения для времени релаксации импульса в случае различных механизмов рассеяния, а также аналитические выражения для скоростей различных рекомбинационных процессов. Температурная зависимость подвижности носителей заряда при одновременном действии различных механизмов рассеяния была рассчитана с использованием правила Матъессена. Учет вклада различных механизмов рекомбинации в уменьшение концентрации неравновесных носителей заряда и, как следствие, уменьшение фотопроводимости со временем был осуществлен на основе уравнения непрерывности.

Аналитические расчеты по теоретической модели температурной зависимости подвижности носителей заряда и зависимости фотопроводимости от времени осуществлены в пакете Mathcad.

Информационная база для исследования транспортных свойств по-

лупроводникового дисилицида бария BaSi_2 сформирована на основе экспериментальных и теоретических данных.

Научная новизна диссертационной работы заключается в разработке математических моделей, учитывающих различные механизмы релаксации импульса с необходимым набором параметров, а также каналы рекомбинации для воспроизведения экспериментальных данных и выработки рекомендаций с целью получения максимальных значений подвижности носителей заряда и увеличения их времени жизни.

Основные положения, выносимые на защиту

1. Полупроводниковый дисилицид бария обладает наибольшими значениями подвижности электронов (максимум подвижности $\sim 1200 \text{ см}^2/(\text{В}\cdot\text{с})$ на 218 К) и дырок ($\sim 200 \text{ см}^2/(\text{В}\cdot\text{с})$ при 300 К) среди полупроводниковых силицидов, где основными механизмами рассеяния являются рассеяние на акустических фононах, на примесях и на межзеренных границах, причем последний вид рассеяния существенен только при низких температурах (менее 100 К).

Теоретическая значимость диссертации заключается в том, что в ней предложен подход к численному моделированию температурной зависимости подвижности носителей заряда при учете различных механизмов рассеяния и временной зависимости фотопроводимости, обусловленной избыточными (неравновесными) носителями заряда, генерированными облучением образца.

Практическая значимость диссертации состоит в том, что были установлены необходимые для теоретического моделирования температурной зависимости подвижности носителей заряда и временной зависимости фотопроводимости параметры, характеризующие исследуемый материал, что позволит оптимизировать режимы синтеза тонких пленок BaSi_2 для формирования солнечных элементов на их основе.

Апробация и внедрение результатов исследования

Результаты исследования были неоднократно представлены на конференциях: международная конференция «Nanomeeting 2017»; международная конференция «NDTCS – 2017»; 54 научная конференция БГУИР; международная конференция «Материалы и структуры современной электроники», Минск БГУ – 2018; 55 научная конференция БГУИР.

Отдельные положения диссертации, в частности подход к моделированию температурной зависимости подвижности носителей заряда при учете различных механизмов рассеяния используются при преподавании курса физика конденсированного состояния.

Публикации

Основные положения работы и результаты диссертации изложены в пяти опубликованных работах общим объемом 1,5 п.л. (авторский объем 0,5 п.л.), в том числе две в журналах, входящих в перечень ведущих периодических изданий ВАК, авторским объемом 0,4 п.л.

Структура и объем работы. Структура диссертационной работы обу-

словлена целью, задачами и логикой исследования. Работа состоит из введения, четырех глав и заключения, библиографического списка. Общий объем диссертации – 89 страниц. Работа содержит 6 таблиц, 31 рисунок. Библиографический список включает 54 наименования.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** рассмотрено современное состояние проблемы преобразования солнечной энергии, определены основные направления исследований, а также дается обоснование актуальности темы диссертационной работы.

В **общей характеристике работы** сформулированы ее цель и задачи, показана связь с научными программами и проектами, даны сведения об объекте исследования и обоснован его выбор, представлены положения, выносимые на защиту, приведены сведения о личном вкладе соискателя, апробации результатов диссертации и их опубликованность, а также структура и объем диссертации.

В **первой главе** рассматриваются общие свойства полупроводникового дисилицида бария.

Во **второй главе** приведен анализ современного состояния теории рассеяния носителей заряда в полупроводниках и излагается подход к теоретическому моделированию температурной зависимости подвижности носителей заряда.

В **третьей главе** представлены результаты экспериментального и теоретического исследования температурной зависимости подвижности электронов и дырок в полупроводниковом дисилициде бария.

В **четвертой главе** представлены результаты экспериментального и теоретического исследования зависимости фотопроводимости от времени.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Проведенный теоретический и экспериментальный анализ температурной зависимости подвижности электронов и дырок в зернистых поликристаллических пленках BaSi_2 показывает, что в пленках с очень низкими концентрациями примесей ($\sim 5,0 \times 10^{15} \text{ см}^{-3}$) и малым размером зерна (до $\sim 2,5$ мкм) температурная зависимость подвижности в области низких температур (менее 100 К) в основном определяется рассеянием на межзеренных границах с величиной потенциального барьера $\sim 30 - 100$ мэВ, который должны быть преодолены носителями. Подвижность электронов в поликристаллическом BaSi_2 при 300 К ($\sim 816 \text{ см}^2 / \text{В} \cdot \text{с}$) больше, чем в других полупроводниковых силицидах. Анализ температурной зависимости подвижности в пленках p -

BaSi₂ показывает, что подвижность дырок в *p*-BaSi₂ при комнатной температуре примерно на один порядок или в четыре раза меньше (в зависимости от подложки Si) относительно подвижности электронов в *n*-BaSi₂. Также значения подвижности дырок имеют тенденцию к значительному уменьшению от образца к образцу с увеличением концентрации легирующей примеси.

2. Расчеты из первых принципов структуры BaSi₂ с вакансиями атомов кремния выявили возникновение локализованных, частично заполненных состояний в середине запрещенной зоны, которые действуют как ловушки. Было показано, что пассивация водородом может приводить к уменьшению эффективного числа (концентрации) ловушек в BaSi₂ из-за насыщения оборванных связей в тетраэдре, состоящим из атомов кремния (вакансии), что, в свою очередь, обуславливает снижение темпа рекомбинации – более высокое время жизни носителей и, как следствие, более высокие значения фотопроводимости в моменты времени после прекращения освещения образца.

Список опубликованных работ

[1] Deng, T. Transport properties of *n*- and *p*-type polycrystalline BaSi₂ / T. Deng, T. Suemasu, D.A. Shohonov, I.S. Samusevich, A.B. Filonov, D.B. Migas and V.E. Borisenko // *Thin Solid Films*. – 2018. – V. 661, №7. – P. 7 – 15.

[2] Xu, Z. Marked enhancement of the photoresponsivity and minority-carrier lifetime of BaSi₂ passivated with atomic hydrogen / Z. Xu, D. A. Shohonov, A. B. Filonov, K. Gotoh, T. Deng, S. Honda, K. Toko, N. Usami, D. B. Migas, V. E. Borisenko, and T. Suemasu // *Physical Review Materials*. – 2019. – V. 3, №6. – P. 065403(10).

[3] Shohonov, D.A. Effects of lattice parameter manipulations on electronic and optical properties of BaSi₂ / D.A. Shohonov, D. B. Migas, A. B. Filonov, V. E. Borisenko, R. Takabe and T. Suemasu // *Submitted to Thin Solid Films* (2019).

[4] D.A. Shohonov, I.S. Samusevich, A.B. Filonov, D.B. Migas, Effects of grain size on the charge carrier mobility of BaSi₂ polycrystalline thin film, in *Nano-Design, Technology, Computer Simulation*, ed. by V.R. Stempitsky – Minsk 2017. – P. 198-201.

[5] D.A. Shohonov, I.S. Samusevich, A.B. Filonov, D.B. Migas, K. Morita, T. Suemasu, Grain effect in the carrier mobility of BaSi₂ nanofilms, in *Physics, Chemistry and Application of Nanostructures*, ed. by V.E. Borisenko, S.V. Gaponenko, V.S. Gurin, C.H. Kam. – World Scientific Publishing Co., Singapore, 2017. – P. 38-41.

[6] Температурная зависимость подвижности электронов в монокристаллическом полупроводниковом дисилициде бария / Д. А. Шохонов, И. С. Самусевич, А. Б. Филонов, Д. Б. Мигас // *Материалы и структуры современной электроники : материалы VIII Междунар. науч. конф., Минск, 10–12 окт. 2018 г. / редкол.: В. Б. Оджаев (отв. ред.) [и др.]*. – Минск : БГУ, 2018. – С. 79–82.