Analyse der Modulierten Photolumineszenz zur Lebensdauerbestimmung in Silizium

Florian Effenberg

Oldenburg, den 20.01.2012

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung						
2	Theorie 2						
	2.1	Rekon	ekombinations dynamik im Halbleiter unter optischer Anregung				
		2.1.1	Relaxation und Lebensdauer	2			
		2.1.2	Effektive Lebensdauer und Quasi-Ferminiveau-Aufspaltung	7			
	2.2	Modul	ierte Photolumineszenz	9			
		2.2.1	Grundlegendes zur Modulierten Photolumineszenz	9			
		2.2.2	Phasensensitive Detektion	10			
		2.2.3	Modell für lineare Rekombination	11			
		2.2.4	Lineares Modell mit Oberflächenparametern	12			
		2.2.5	Modell für quadratische Rekombination	14			
		2.2.6	Dispersives Modell	16			
3	Pro	ben		18			
	3.1	Wafer		18			
	3.2	Zellen		18			
4	Messtechnische Umsetzung 19						
	4.1	Modul	ierte Photolumineszenz	19			
		4.1.1	Lock In-Messung	19			
		4.1.2	Kalibrierung und Korrekturfunktion	21			
		4.1.3	Zeitaufgelöste MPL am Oszilloskop	22			
		4.1.4	Strom- und spannungsabhängige MPL an Zellen	22			
	4.2	Vergle	ichsmessung	23			
		4.2.1	Stationäre kalibrierte Photolumineszenz	23			
		4.2.2	Quasi-Statische Photoleitfähigkeit	24			
5	Erg	ebnisse		26			
	5.1	5.1 Simulation: Vergleich und Diskussion der Modelle					
		5.1.1	Lineare Modelle	26			
		5.1.2	Lineares und nichtlineares Modell	36			
		5.1.3	Lineares und dispersives Modell	38			
	5.2	Messu	ngen	41			
		5.2.1	MPL: Vergleich Rechteck- und Sinusmodulation	41			
		5.2.2	MPL in Reflexionsrichtung und Transmissionsrichtung	44			
		5.2.3	MPL: Vergleich der Modelle	49			
		5.2.4	Ortsaufgelöste MPL	60			

6	Zusammer	nfassung	78
	5.2.9	Strom- und spannungsabhängige MPL	75
	5.2.8	Vergleichsmessung Quasi-Statische Photoleitfähigkeit	73
	5.2.7	Fouriertanalyse zeitabhängiger MPL	68
	5.2.6	Zeitaufgelöste MPL am Oszilloskop	65
	5.2.5	MPL und stationäre kalibrierte Photolumineszenz \hdots	62

1 Einleitung

Die Herstellung hochwertiger Silizium-Halbleiter z. B. für Photovoltaik-Anwendungen erfordert Kenntnis und Überwachung der Güteparameter während des Herstellungsprozesses. Ein wichtiger Materialparameter für die Qualität von Wafern und Solarzellen ist die Lebensdauer der Minoritätsladungsträger. Etablierte Methoden zur Bestimmung dieser Lebensdauer sind zumeist induktive Methoden zur Bestimmung der Photoleitfähigkeit, die jedoch bei hoch dotierten Proben und Proben mit metallischem Rückkontakt nicht oder nur beschränkt einsatzfähig sind. In dieser Arbeit wird Modulierte Photolumineszenz (MPL) als alternative Methode untersucht. Bei der MPL werden mittels Lock In-Technik spektrale Amplitude und Phase als Funktionen der Modulationsfrequenz aufgenommen. Aus ihnen kann die Lebensdauer als wesentlicher Parameter bestimmt werden. Die Abhängigkeit der spektralen Antwort von Probengeometrie, Dotierung und Anregungsdichte muss durch geeignete Modelle beschrieben werden.

In Kap. 2.1 wird zunächst die Rekombinationsdynamik in einem Halbleiter unter optischer Anregung beschrieben und die Lebensdauer von Ladungsträgern eingeführt. Weiter werden die theoretischen Grundlagen der MPL-Methode hergeleitet. Zur Beschreibung der mit Lock-In Technik gemessenen spektralen Phasen und Amplituden werden vier Modelle erklärt, zwei für den linearen Fall sogenannter 'Niederinjektion' und zwei für den nichtlinearen Fall der 'Hochinjektion'. In Kap. 3 werden die zu untersuchenden Proben beschrieben. Die verwendeten Versuchsaufbauten und Methoden zur Vergleichsmessung werden in Kap. 4 erklärt. Im Ergebnisteil in Kap. 5 werden im Rahmen von Simulationen zunächst die verschiedenen Modelle zur Beschreibung des spektralen Antwortverhalten von MPL verglichen. Der experimentelle Teil enthält die Präsentation der Ergebnisse und Auswertungen der Messungen mit MPL und Vergleichsmethoden. Abschließend werden in Kap. 6 eine Zusammenfassung und ein Ausblick gegeben.

Zentraler Anspruch dieser Arbeit ist es, die Einsetzbarkeit der MPL-Methode für ein breites Spektrum an Silizium-Proben zu untersuchen. Dazu wird die spektrale Antwort auf die verwendete rechteckförmige und sinusförmige Modulation anhand des [1] einfachen Modells untersucht. Es wird gezeigt, dass sich das einfache Modell als Spezialfall aus der Lösung der linearisierten ambipolaren Diffusionsgleichung unter Berücksichtigung der Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeiten in den Randbedingungen ergibt.

Die je nach Dotierung und Anregungsdichte im 'Hochanregungsfall' auftretenden nichtlinearen Effekte erfordern eigentlich das Lösen der nichtlinearen ambipolaren Diffusionsgleichung. Als Alternative für das Übergangsregime vom Nieder- zum Hochinjektionsregime wird ein nichtlinearer Ansatz als Erweiterung des bisherigen Modells präsentiert. Als weitere Alternative wird ein dispersives Modell präsentiert, das zur Beschreibung ungeordneter Systeme dient, die linearen und nichtlinearen spektralen Antworten aber ebenfalls darzustellen vermag. Von besonderem Interesse ist der Vergleich des einfachen Modells mit dem exakten Modell und den nichtlinearen Modellen.

Für Vergleichsmessungen werden frequenz- und zeitaufgelöste MPL untersucht. Weiterhin werden die mit MPL bestimmten Lebensdauern mit den aus stationärer Photolumineszenz und der verbreiteten induktiven Quasi-Statischen-Photoleitfähigkeit (QSSPC) bestimmten Lebensdauern verglichen. Abschließend wird untersucht, inwiefern MPL aus der Lebensdauer abgeleitete Aussagen über die Aufspaltung der Quasi-Fermi-Niveaus bzw. der Leerlaufspannung V_{oc} ermöglicht.

2 Theorie

2.1 Rekombinationsdynamik im Halbleiter unter optischer Anregung

2.1.1 Relaxation und Lebensdauer

Betrachtet wird ein Wafer bestehend aus kristalinem Silizium in einem Wärmebad. Die Ladungsträgerkonzentrationen $[\text{cm}^{-3}]$ im thermischen Gleichgewicht der freien Elektronen und Löcher sind mit n_0 und p_0 bezeichnet. Wird der Wafer lokal optisch angeregt, entstehen mit einer Generationsrate G $[\text{cm}^{-3}\text{s}^{-1}]$ Überschussladungsträgerkonzentrationen Δn , Δp in Form von Elektron-Loch-Paaren. Diese gelangen nach einer charakteristischen Zeit durch verschiedene Rekombinationsprozesse gemäß der Rekombinationsrate R $[\text{cm}^{-3}\text{s}^{-1}]$ wieder in den Grundzustand. Die strahlende Rekombination kann in Form von Photolumineszenz-Strahlung detektiert werden. Es stellt sich ein stationärer Nichtgleichgewichtszustand ein. Für die Dichten der Gesamtzahl der freien Ladungsträger gilt dann:

$$n = n_0 + \Delta n, \tag{2.1}$$

$$p = p_0 + \Delta p. \tag{2.2}$$

Die mittlere Zeit zwischen Generation und Rekombination der Elektronen und Lö-

cher wird als Lebensdauer τ [s] bezeichnet. Sie entspricht der mittleren Zeit zwischen Begegnungen von Rekombinationspartnern, bei der es zum Einfang kommt. Sie ist für Elektronen bestimmt durch die Dichte der Rekombinationspartner p_k [cm⁻³] (Löcher im Valenzband, lokalisierte Defektzustände, Strukturdefekte etc.), deren Einfangsquerschnitt q_k [cm²] sowie der mittleren relativen Geschwindigkeit v_{nk} [cms⁻¹]. Gemittelt über alle Ladungsträger im Band ergibt sich für die mittlere Lebensdauer der Elektronen:

$$\tau_{nk} = \frac{1}{\langle q_{nk}v_{nk} \rangle p_k} = \frac{1}{\gamma_{nk}p_k},$$
(2.3)

wobei $\langle q_{nk}v_{nk} \rangle$ den Rekombinationskoeffizienten γ_{nk} [cm³s⁻¹] bezeichnet. Bei mehreren Sorten von Rekombinationszentren gilt für die Lebensdauer:

$$\frac{1}{\tau_n} = \sum_k \frac{1}{\tau_{nk}} = \sum_k \langle q_{nk} v_{nk} \rangle p_k = \sum_k \gamma_{nk} p_k.$$
(2.4)

Analog erfolgt die Herleitung der Lebensdauer von Löchern.

Für einige Modelle im Rahmen dieser Arbeit werden die Rekombinationsprozesse in der sogenannten effektiven Lebensdauer τ_{eff} zusammengefasst (vgl. z.B. [2]):

$$\frac{1}{\tau_{eff}} = \frac{1}{\tau_{bulk}} + \frac{S_1 + S_2}{W}.$$
(2.5)

Hier ist τ_{bulk} die Volumenlebensdauer und S_1 , S_2 die Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeiten $[\text{cms}^{-1}]$. An den Oberflächen endet die periodische Struktur des Festkörpers. Durch das Fehlen von Nachbaratomen treten offene Bindungen (dangling Bonds) auf, die als Rekombinationszentren wirken und im Bereich der Bandlücke zusätzliche Energieniveaus bilden. Die Oberflächenatome können auch die Periodizität verletzende neue Bindungen untereinander eingehen, die ebenfalls zu Zuständen im Bereich der Bandlücke führen und als Einfangzentren fungieren. Die theoretische Beschreibung erfolgt mit Hilfe von Modellen von Shockley, Read und Hall (vgl. [3], [4]). Um diese Formen der Rekombination zu reduzieren, werden die offenen Bindungen mit geeigneten Passivierungsschichten abgesättigt. Die Volumenlebensdauer setzt sich zusammen aus Defekt- , Auger-, und strahlender Lebensdauer:

$$\frac{1}{\tau_{bulk}} = \frac{1}{\tau_{defect}} + \frac{1}{\tau_{Auger}} + \frac{1}{\tau_{rad}}.$$
(2.6)

Die beiden erstgenannten Lebensdauern sind durch nichtstrahlende Prozesse bestimmt. Die Defektrekombination ist auf Fremdatome, Fehlstellen und Dislokationen

zurückzuführen. Diese wirken als Rekombinationszentren und treten als Energievinveaus in der Bandlücke auf. Die Modellierung dieser Effekte erfolgt ebenfalls gemäß Shockley, Read und Hall (s.o.). Beim Auger-Prozess dient die durch Elektron-Loch-Rekombination frei-werdende Energie zur Anregung von Leitungsband-Elektronen oder Valenzband-Löchern. Diese hochangeregten Ladungsträger relaxieren dann unter mehrfacher Phononenanregung wieder in die Nähe der Bandkanten. Für die Raten gilt je nach Dotierung:

$$R_{Auger} = C_n n^2 p, \tag{2.7}$$

bzw.

$$R_{Auger} = C_p n p^2. aga{2.8}$$

Bei der strahlenden Rekombination von Elektronen und Löcher werden Photonen der Energie in der Größenordnung der Bandlücke emittiert. Die Rate ist proportional zur Dichte der Ladungsträger:

$$R_{rad} = Bnp, \tag{2.9}$$

mit dem Rekombinationskoeffizienten $B = 4,73 \ge 10^{-15} \text{ cm}^3 \text{s}^{-1}$ (für Raumtemperatur T = 300 K, vgl. [5]).

Zusammengefasst kann die Rekombinationsdynamik durch die ambipolare Diffusionsgleichung beschrieben werden:

$$\frac{\partial n(x,t)}{\partial t} = D\nabla^2 n(x,t) - \frac{n(x,t)}{\tau} - Bn(x,t)^2 - C_{Auger}n(x,t)^3 + G(x,t), \quad (2.10)$$

bzw. unter Zusammenfassung der Rekombinationsterme $R = R_{defect} + R_{rad} + R_{Auger}$:

$$\frac{\partial n(x,t)}{\partial t} - D\nabla^2 n(x,t) = G(x,t) - R(x,t), \qquad (2.11)$$

mit dem ambipolaren Diffusionskoeffizienten D [cm²s⁻¹] und der Volumenlebensdauer τ . Im linearen Fall reduziert sich Gln. 2.10 auf folgende Form:

$$\frac{\partial n(x,t)}{\partial t} = D\nabla^2 n(x,t) - \frac{n(x,t)}{\tau} + G(x,t).$$
(2.12)

Für die folgenden Betrachtungen werden die zur Rekombination $R = R_{defect} + R_{rad} + R_{Auger}$ gehörenden Anteile dieser Gleichung vereinfacht. Unter Annahme homogen verteilter Ladungsträgerdichten reduziert sich Gl. 2.11 mit $n(t) = n_0 + \Delta n(t)$ auf die einfache Form einer Ratengleichung:

$$\frac{dn(t)}{dt} = \frac{d\Delta n(t)}{dt} = G(t) - R(t), \qquad (2.13)$$

Die Photolumineszenz hat ihren Ursprung in der strahlenden Rekombination R_{rad} und für die folgenden Betrachtungen wird als Ansatz gewählt:

$$R(t) = Bn(t)p(t).$$
(2.14)

Bezeichnet n_i die intrinsische Ladungsträgerkonzentration, so folgt mit $n_0 p_0 = n_i^2$ und $\Delta n = \Delta p$:

$$R(t) = B\left(n_0 + \Delta n(t)\right)\left(p_0 + \Delta p(t)\right) = B\left(n_i^2 + \Delta n(t)(n_0 + p_0) + \Delta n(t)^2\right).$$
 (2.15)

Für die Relaxation der Überschussladungsträger sind zwei Fälle zu unterscheiden: Nieder- und Hochanregungsfall (high- and low-level excitation).

Lineare Rekombination In diesem Fall, der auch als monomolekulare Rekombination bezeichnet wird, ist die Konzentration der erzeugten Überschussladungsträger klein gegenüber der Konzentration der Gleichgewichtsladungsträger ($\Delta n = \Delta p \ll$ $(n_0 + p_0)$). Für die Zeitentwicklung der Überschussladungsträgerkonzentration gilt dann:

$$\frac{d\Delta n(t)}{dt} = G - \frac{\Delta n(t)}{\tau}.$$
(2.16)

Durch Trennung der Variablen und Integration wird die Relaxtionskurve bei Einsetzung der optischen Anregung zum Zeitpunkt t = 0 bestimmt:

$$\Delta n(t) = G\tau (1 - e^{\frac{-t}{\tau}}). \tag{2.17}$$

Diese enthält die Lebensdauer τ als Abklingkoeffizient und strebt für $t \to \infty$ gegen einen stationären Wert $\Delta n_{stat} = G\tau$. Setzt die optische Anregung zum Zeitpunkt t = 0 abrubt aus, so erigbt sich für den Abfall der Überschussladungsträgerkonzentration:

$$\Delta n(t) = G\tau e^{\frac{-t}{\tau}}.$$
(2.18)

Die Antwort des Halbleiters auf einen optischen Rechteckimpuls drückt sich also im exponentiellen Anwachsen und Abklingen der Überschussladungsträgerkonzentrationen mit einer Zeitkonstante τ aus, die der Lebensdauer entspricht. Hervorzuheben ist, dass die stationäre Überschussladungsträgerkonzentration im monomolekularen Fall proportional zur Stärke der optischen Anregung (Photonenflussdichte ϕ [cm⁻²s⁻¹]) ist:

$$\Delta n \sim G \sim \phi. \tag{2.19}$$

Quadratische Rekombination Im Hochanregungsfall, der auch als bimolekulare Rekombination bezeichnet wird, ist die Konzentration der erzeugten Überschussladungsträger groß gegenüber der Konzentration der Gleichgewichtsladungsträger $(\Delta n = \Delta p \gg (n_0 + p_0))$. Im Produkt der Ladungsträgerkonzentrationen dominiert das Quadrat der Überschussladungsträgerdichte. Für die Zeitentwicklung der Überschussladungsträgerkonzentration gilt dann:

$$\frac{d\Delta n(t)}{dt} = G - B(\Delta n(t))^2, \qquad (2.20)$$

mit dem oben erwähnten bimolekularen Rekombinationskoeffizienten B. Die Ausführung der Integration analog zum Fall der monomolekularen Rekombination ergibt für den Anstieg der Überschussladungsträgerdichte folgendes Verhalten:

$$\Delta n(t) = \sqrt{\frac{G}{B}} \tanh(t\sqrt{BG}).$$
(2.21)

Für das Relaxationsverhalten im Abklingfall hingegen:

$$\Delta n(t) = \sqrt{\frac{G}{B}} \frac{1}{t\sqrt{BG} + 1}.$$
(2.22)

Die stationäre Überschussladungsträgerkonzentration im bimolekularen Fall hängt also von der Quadratwurzel der optischen Anregung ab:

$$\Delta n \sim \sqrt{G} \sim \sqrt{\phi}. \tag{2.23}$$

Die Symmetrie der exponentiellen Relaxation wie im monomolekularen Fall ist hier nicht mehr gegeben - während der Anstieg mit einem hyperbolischen Tangens erfolgt, ist das Abklingverhalten durch eine wesentlich langsamer abfallende Hyperbel bestimmt. Ebenfalls ist keine gemeinsame Zeitkonstante mehr gegeben. Die Lebensdauer beim bimolekularen Prozess hängt von der zeitabhängigen Überschussladungsträgerichte ab und ist damit selbst zeitabhängig:

$$\tau(t) = \frac{1}{B\Delta n(t)} = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{GB}\tanh(t\sqrt{G\gamma})} & \text{Anklingfall} \\ t + \frac{1}{\sqrt{GB}} & \text{Abklingfall} \end{cases}$$
(2.24)

Die Lebensdauer ändert ihren Wert während des Relaxationsprozess (in den Grenzfällen $t \to 0, \infty$ treten jedoch keine unendlichen Lebensdauern auf, denn sobald im An- und Abklingfall $\Delta n \ll (n_0 + p_0)$ gilt, setzt gemäß 2.17 und 2.18 wieder exponentieller An- bzw. Abfall mit konstanter Lebensdauer ein). Weil in diesem und im allgemeinen Fall nicht von konstanten Lebensdauern auszugehen ist, sind gemäß [6] momentane Lebensdauern für an- und abklingende Überschussladungsträgerkonzentration einzuführen. Aus Gln. 2.16 kann der Momentanwert der Lebensdauer für Anund Abklingprozess bestimmt werden:

$$\tau(t) = \begin{cases} \frac{\Delta n(t)}{G - \frac{d\Delta n(t)}{dt}} & \text{Anklingfall} \\ -\frac{\Delta n(t)}{\frac{d\Delta n(t)}{dt}} & \text{Abklingfall} \end{cases}$$
(2.25)

Für $\frac{d\Delta n(t)}{dt} = 0$ ergibt sich aus dem Anklingfall in Gln. 2.25 die Lebensdauer im stationären Zustand: $\tau_{stat} = \frac{\Delta n(t)}{G}$.

2.1.2 Effektive Lebensdauer und Quasi-Ferminiveau-Aufspaltung

Für eine monochromatische Anregung der Leistungsdichte P [mWcm⁻²] beträgt die Photonenflussdichte ϕ [cm⁻²s⁻¹]:

$$\Phi = \frac{\lambda}{hc} P. \tag{2.26}$$

Mit der Reflektivität R die (zwischen 0.2 und 0.3 für glatte und 0 für texturierte Wafer) und der Waferdicke W [cm] beträgt die mittlere Generationsrate

$$G \approx \Phi \frac{1-R}{W}.$$
 (2.27)

Für die Überschussladungsträger gilt:

$$\Delta n = \Delta p = G\tau_{eff}.$$
(2.28)

Bedingt durch die optische Anregung herrscht zwischen den Elektronen und Löchern kein thermodynamisches Gleichgewicht mehr und es bilden sich separate Quasi-Ferminiveaus E_{f_e} , E_{f_h} [eV], die wie folgt definiert sind:

$$n = n_i \exp\left(\frac{E_{f_e} - E_i}{k_B T}\right),\tag{2.29}$$

$$p = n_i \exp\left(\frac{E_i - E_{f_h}}{k_B T}\right). \tag{2.30}$$

Es bezeichnen n_i die intrinsische Ladungsträgerkonzentrationen und E_i das intrinsische Ferminiveau im undotierten Halbleiter. Aus dem Produkt der beiden Ladungsträgerkonzentrationen ergibt sich:

$$np = n_i^2 \exp\left(\frac{E_{f_e} - E_{f_h}}{k_B T}\right) = n_i^2 \exp\left(\frac{\mu_f}{k_B T}\right).$$
(2.31)

Die Aufspaltung der Quasi-Ferminiveaus ist also gegeben durch die Größe μ_f [eV]. Diese experimentell zugängliche Größe gibt zugleich einen oberen Grenzwert für die Leerlaufspannung V_{oc} [V] für halbleitendes Material an:

$$V_{oc} = \frac{\mu_f}{q} = \frac{k_B T}{q} \ln\left(\frac{np}{n_i^2}\right) = \frac{k_B T}{q} \ln\left(\frac{(n_0 + \Delta n)(p_0 + \Delta p)}{n_i^2}\right).$$
 (2.32)

In einem p-dotierten Halbleiter ist die thermische Gleichgewichtskonzentration durch die Konzentration der Akzeptoren N_A bestimmt, d.h. $p_0 = N_A \gg n_0$. Mit $\Delta p = \Delta n$ und $N_A \gg n_0$ folgt näherungsweise:

$$V_{oc} = \frac{k_B T}{q} \ln\left(\frac{N_A \Delta n + \Delta n^2}{n_i^2}\right).$$
(2.33)

Für Niedrig- und Hochanregungsfall kann für die Leerlaufspannung weiterhin genähert werden:

$$V_{oc}(\Delta n) \sim \begin{cases} k_B T \ln (\Delta n) & \Delta n \ll N_A \\ 2k_B T \ln (\Delta n) & \Delta n \gg N_A \end{cases}$$
(2.34)

Durch Umstellen von Gleichung 2.31 folgt andererseits:

$$0 = np - n_i^2 \exp\left(\frac{\mu_f}{k_B T}\right)$$

$$= \Delta n^2 + n_i^2 \left(1 - \exp\left(\frac{\mu_f}{k_B T}\right)\right) + (n_0 + p_0) \Delta n + n_i^2 \left(1 - \exp\left(\frac{\mu_f}{k_B T}\right)\right)$$

$$\Leftrightarrow$$

$$\Delta n = -\frac{(n_0 + p_0)}{2} + \sqrt{\frac{(n_0 + p_0)^2}{4} - n_i^2 \left(1 - \exp\left(\frac{\mu_f}{k_B T}\right)\right)}$$

$$\approx -\frac{N_A}{2} + \sqrt{\frac{N_A^2}{4} - n_i^2 \left(1 - \exp\left(\frac{\mu_f}{k_B T}\right)\right)}$$
(2.35)

Mit Gleichung 2.28 ergibt sich die effektive Lebensdauer daraus zu $\tau_{eff} = \Delta n/G$. Für den Zusammenhang zwischen Leerlaufspannung und effektiver Lebensdauer gilt insbesondere:

$$V_{oc} \sim \ln\left(\tau_{eff}\right). \tag{2.36}$$

2.2 Modulierte Photolumineszenz

2.2.1 Grundlegendes zur Modulierten Photolumineszenz

Die modulierte Photolumineszenz basiert auf dem in Kap. 2.1.1 beschriebene Relaxationsverhalten der Überschussladungsträgerkonezentration. Jedoch wird die stationäre Anregung (Bias) mit der Frequenz ω zeitlich-periodisch moduliert. Für die Generation gilt in diesem Fall:

$$\Delta G(t) = \Delta G_0 + \Delta G_1 \exp(i\omega t). \tag{2.37}$$

Die Überschussladungsträgerdichte oszilliert dann in erster Näherung ebenfalls mit der Frequenz ω , ist jedoch bedingt durch die in Kap. 2.1 eingeführte Relaxation der Überschussladungsträgerdichte gegenüber der Anregung phasenverschoben:

$$\Delta n(t) = \Delta n_0 + \Delta n_1(\omega) \exp(i(\omega t + \varphi(\omega))), \qquad (2.38)$$

mit der frequenzabhängigen Amplitude Δn_1 und der frequenzabhängigen Phasenverschiebung φ .

2.2.2 Phasensensitive Detektion

Für geringe Anregung und hohe Frequenzen ist das MPL-Signal im Allgemeinen vom Umgebungsrauschen nur schwer zu separieren. Daher wird ein Lock-In Verstärker zur phasensensitiven Detektion von spektraler Amplitude und Phase verwendet. Zur Detektion benötigt der Lock-In als Eingangsinformationen das Antwortsignal S(t) = $V_S \sin(\omega_S t + \phi_S)$ und das anregende Referenzsignal $r(t) = V_r \sin(\omega_r t + \phi_r)$, mit den Amplituden $V_{S,r}$, den Kreisfrequenzen $\omega_{S,r}$ und den Phasen $\phi_{S,r}$. Ein Multiplikator multipliziert Antwort und Referenz:

$$V_{PSD} = V_S V_r \sin(\omega_S t + \phi_S) \sin(\omega_r t + \phi_r)$$

= $\frac{1}{2} V_S V_r \cos((\omega_S - \omega_r)t + \phi_S - \phi_r) -,$
 $\frac{1}{2} V_S V_r \cos((\omega_S + \omega_r)t + \phi_S + \phi_r)$ (2.39)

Nach Integration und Tiefpassfilterung verbleibt allein der Anteil des Signals mit $\omega_S = \omega_r$. Mit der Phasendifferenz $\phi = \phi_S - \phi_r$. Amplitude U und Phase ϕ können über die In-Phase-Komponente (IP) und die Out-of-Phase-Komponente (OP) (auch X-/Y-Kanal genannt) bestimmt werden. Sie entsprechen Real- und Imaginärteil des fouriertransformierten gefilterten Signalanteils:

$$S_{IP}(\omega) = \frac{2}{T} \int_0^T S(t) \cos(\omega t) dt, \qquad (2.40)$$

$$S_{OP}(\omega) = \frac{2}{T} \int_0^T S(t) \sin(\omega t) dt, \qquad (2.41)$$

mit $T = \frac{2\pi}{\omega}$, wobei $\omega = 2\pi f$ Kreisfrequenz sei. Daraus folgt für das Amplitudenund Phasenspektrum:

$$U(\omega) = \sqrt{S_{IP}(\omega)^2 + S_{OP}(\omega)^2},$$
(2.42)

$$\phi(\omega) = \tan^{-1} \left(\frac{S_{OP}(\omega)}{S_{IP}(\omega)} \right).$$
(2.43)

Bei der LockIn-Detektion von Phase und Amplitude stellt sich die Frage, welche Modulationsmuster geeignet sind. So bieten sich beispielsweise sinus-, rechteck- oder dreieckförmige Modulation an. Für ersteres ist sofort offensichtlich, dass ein Signalanteil mit der Kreisfrequenz ω herausgefiltert wird. Für die letztgenannten Signalformen sind die Fourierreihen zu betrachten, deren Glieder jeweils proportional zu $\sin((2n-1)\omega t) \ (n \in \mathbb{N})$ sind. So stellt sich die Fourierreihe des Rechtecksignals wie folgt dar:

$$f(t) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin\left((2n-1)\,\omega t\right)}{2n-1},\tag{2.44}$$

Bei Filterung bzw. Berechnung der IP- und OP-Komponenten gemäß Gln. 2.40, 2.41 werden jedoch nur die fundamentalen Komponenten für n = 0, also die $\sin(\omega t)$ -Glieder erkannt. Während sich bei der Phase für diese Signalformen keine Unterschiede ergeben, ist dies für die Amplitude nicht der Fall (s.u.). Im Rahmen dieser Arbeit wurde sich auf Rechteck- und Sinusmodulation beschränkt.

2.2.3 Modell für lineare Rekombination

Wie in Kap. 2.1.1 für den Fall der monomolekularen Rekombination beschrieben, ist die stationäre Anregung so gewählt, dass $\Delta n \ll (n_0 + p_0)$ ist. Die stationäre Anregung bewirkt einen stationären Generationsterm $\Delta G = \frac{\Delta n}{\tau}$.

Sinusmodulation Für sinusartige Modulation lautet die Generationsrate für die Überschussladungsträger:

$$\Delta G(t) = \Delta G_0 + \Delta G_1 \sin(\omega t), \qquad (2.45)$$

so dass die Ratengleichung lautet:

$$\frac{d\Delta n(t)}{dt} = \Delta G_0 + \Delta G_1 \sin(\omega t) - \frac{\Delta n(t)}{\tau}.$$
(2.46)

Die Lösung dieser Gleichung ergibt für die zeitabhängige Überschussladungsträgerdichte:

$$\Delta n(t) = \Delta G_0 \tau \left(1 - \frac{\mathrm{e}^{-\frac{t}{\tau}}}{1 + (\omega\tau)^2} \right) + \Delta G_1 \tau \frac{\sin(\omega t) + \omega \tau (\mathrm{e}^{-\frac{t}{\tau}} - \cos(\omega t))}{1 + (\omega\tau)^2}.$$
 (2.47)

Nach der durch die Exponentialterme bestimmten Einschwingzeit (vgl. Anstiegsverhalten in Kap. 2.1.1) reduziert sich Gln. 2.47 auf:

$$\Delta n(t) = \Delta G_0 \tau + \Delta G_1 \tau \frac{\sin(\omega t + \arctan(\omega \tau))}{\sqrt{1 + (\omega \tau)^2}}.$$
(2.48)

Aus diesem Ausdruck können die spektrale Amplitude und spektrale Phase direkt herausgelesen werden:

$$\Delta n_1(\omega) = \frac{\Delta G_1 \tau}{\sqrt{1 + (\omega \tau)^2}},\tag{2.49}$$

$$\varphi(\omega) = -\arctan(\omega\tau) \Leftrightarrow \tan(\varphi) = -\omega\tau.$$
 (2.50)

Der Tangens der Phase hängt also linear von der Frequenz ab. Die Lebensdauer tritt als Steigungsfaktor auf. Alternativ kann die Amplitude über die Phase ausgedrückt werden:

$$\Delta n_1(\omega) = \Delta G_1 \tau \cos(\varphi). \tag{2.51}$$

Dieses lineare Modell wird im Folgenden auch häufig als 'einfaches Modell' (simple model - s.m.) bezeichnet.

Rechteckmodulation Unter Beachtung des in Kap. 2.1.1 für einen rechteckförmigen Anregungspuls beschriebenen Relaxationsverhalten wird an dieser Stelle die sich ergebende spektrale Amplitude direkt angegeben (vgl. dazu [6] und [7]):

$$\Delta n_1(\omega) = \Delta G_1 \tau \tanh\left(\frac{\pi}{2\omega\tau}\right). \tag{2.52}$$

Für die spektrale Phase ergibt sich bei phasensensitiver Detektion des ebenfalls sinusförmigen Gliedes der ersten Harmonischen in 2.44 der gleiche Ausruck wie in Gln. 2.50. Während die spektralen Amplituden sich laut Theorie unterscheiden, ist die spektrale Phase für die beiden Modulationsmuster Sinus- und Rechteckform also gleich.

2.2.4 Lineares Modell mit Oberflächenparametern

Für den Fall linearer Rekombination wird von Orgeret [8] und Sanii [9] ein Modell vorgeschlagen, in dem die Oberflächen besondere Berücksichtigung erfahren. Im Nie-

deranregungsfall reduziert sich Gln. 2.10 auf die Kontinuitätsgleichung. Diese wird im eindimensionalen Fall für die Überschussladungsträgerkonzentration aufgestellt:

$$\frac{\partial \Delta n(x,t)}{\partial t} = D\nabla^2 \Delta n(x,t) - \frac{\Delta n(x,t)}{\tau_{bulk}} + G(x,t), \qquad (2.53)$$

die mit den Randbedingungen

$$D\frac{\partial\Delta n(x,t)}{\partial x}\Big|_{x=0} = S_1\Delta n(0,t)$$

- $D\frac{\partial\Delta n(x,t)}{\partial x}\Big|_{x=W} = S_2\Delta n(W,t)$, (2.54)

gelöst wird. Für periodisch modulierte Anregung und Lock In-Detektion bietet sich eine Lösung im Komplexen an. Die Generationsrate wird als Fourierreihe dargestellt: $G(x,t) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} G_m e^{im\omega t} e^{-\alpha x}$ (mit dem Absorptionskoeffizienten α [cm⁻¹]) und es folgt für die Fourierentwicklung der lokalen Anregungsdichte:

$$\Delta n(x,t) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \Delta n_m^*(x,\omega) e^{im\omega t}, \qquad (2.55)$$

bzw. für die über den Wafer der Dicke W integrierte Anregungsdichte:

$$\Delta N(t) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_0^W \Delta n_m^*(x,\omega) e^{im\omega t} dx = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \Delta N_m^*(\omega) e^{im\omega t}, \qquad (2.56)$$

Bei Lock In-Detektion der ersten Harmonischen wird nur die erste Fourierkomponente (m = 1) betrachtet. Ist τ_{bulk} die Volumenlebensdauer, so wird $\tau_1(\omega) = \frac{\tau_{bulk}}{1+i\omega\tau_{bulk}}$ als komplexer frequenzabhängiger Volumenlebensdauer-Parameter eingeführt. Mit der entsprechend komplexen und frequenzabhängigen Diffusionslänge $L_1(\omega) = \sqrt{D\tau_1(\omega)}$ folgt für die ersten Komponenten der fourierentwickelten lokalen und integrierten Anregungsdichte:

$$\Delta n_1^*(x,\omega) = \frac{G_1 \left(C_1 e^{(x-W)/L_1} + C_2 e^{-(x-W)/L_1} - e^{\alpha x} \right)}{D \left(\alpha^2 - \frac{1}{L_1^2} \right)},$$
(2.57)

bzw.

$$\Delta N_1^*(\omega) = \frac{G_1\left(\alpha L_1 C_1\left(1 - e^{-\frac{W}{L_1}}\right) - \alpha L_1 C_2\left(1 - e^{\frac{W}{L_1}}\right) - \left(1 - e^{-\alpha W}\right)\right)}{D\left(\alpha^2 - \frac{1}{L_1^2}\right)}, \quad (2.58)$$

mit

$$C_{1} = \frac{1}{2} \frac{\left(\alpha D + S_{1}\right) \left(\frac{D}{L_{1}} - S_{2}\right) - \left(\alpha D - S_{2}\right) \left(\frac{D}{L_{1}} + S_{1}\right) e^{-W(\alpha - \frac{1}{L_{1}})}}{\left(\frac{D^{2}}{L_{1}^{2}} + S_{1}S_{2}\right) \sinh\left(\frac{W}{L_{1}}\right) + \frac{D}{L_{1}} \left(S_{1} + S_{2}\right) \cosh\left(\frac{W}{L_{1}}\right)}, \qquad (2.59)$$

$$C_{2} = \frac{1}{2} \frac{(\alpha D + S_{1}) \left(\frac{D}{L_{1}} + S_{2}\right) - (\alpha D - S_{2}) \left(\frac{D}{L_{1}} - S_{1}\right) e^{-W(\alpha + \frac{1}{L_{1}})}}{\left(\frac{D^{2}}{L_{1}^{2}} + S_{1}S_{2}\right) \sinh(\frac{W}{L_{1}}) + \frac{D}{L_{1}} \left(S_{1} + S_{2}\right) \cosh(\frac{W}{L_{1}})}.$$
 (2.60)

Die mittels Lock-In-Messung detektierte spektrale Amplitude wird als proportional zu $\|\Delta N_1^*(\omega)\|$ angenommen und die Phase mit der Relation $\phi(\omega) = \tan^{-1}\left(\frac{\Im(\Delta N_1^*(\omega))}{\Re(\Delta N_1^*(\omega))}\right)$ ermittelt. Die effektive Lebensdauer ist in diesem Modell Modell nicht explizit enthalten, sondern wird aus den Parametern τ_{bulk} , S_1 und S_2 zu $\frac{1}{\tau_{eff}} = \frac{1}{\tau_{bulk}} + \frac{S_1 + S_2}{W}$ bestimmt. Für den Grenzfall $S_1 = S_2 = 0$ ergibt sich gerade $\tan(\phi) = -\omega \tau_{bulk}$, also das lineare Modell aus Gln. 2.50 in Kap. 2.2.3. Für die Amplitude ergibt sich in diesem Grenzfall der zu Gl. 2.49 Ausdruck. In Kap. 5.1 wird untersucht, unter welchen Bedingungen dieser Grenzfall bei Niederanregung noch eine gute Näherung für das spektrale Verhalten von Amplitude und Phase bzw. die effektive Lebensdauer darstellt.

2.2.5 Modell für quadratische Rekombination

Für die bimolekulare Rekombination $(\Delta n \gg (n_0 + p_0))$ gibt es keine analytischen Lösungen für die Ladungsträgerichten bzw. spektrale Phase und Amplitude. Erforderlich sind numerische Lösungen oder geeignet vereinfachte Ansätze für Gln. 2.10. Da im Rahmen dieser Arbeit auch der Übergangsbereich vom Nieder- zum Hochanregungsfall untersucht wird, erfolgt die Herleitung einer Näherungslösung analog zu einem Ansatz von Guidotti vgl. ([10], [11]), jedoch unter Annahme einer variablen Amplitude ($G_1 \leq G_0$). Dazu wird die sich aus Gln. 2.10 ergebende linearisierte Form der Diffusionsgleichung 2.12 dreidimensional für sphärische Koordinaten gelöst. Die effektive Lebensdauer setzt sich aus strahlendem und nichtstrahlendem Anteil zusammen: $\frac{1}{\tau_{eff}} = \frac{1}{\tau_R} + \frac{1}{\tau_{NR}}$. Mit $\theta(\omega) := \arctan(\omega \tau_{eff}), L := \sqrt{D\tau_{eff}}$ und $\Lambda(\omega) := (1 + (\omega \tau_{eff})^2)$ ergibt sich für die ortsabhängige Überschussladungsträgerdichte ($r \in [0, \infty]$) als Lösung:

$$\Delta n(r,t) = \frac{G_0 e^{-Lr}}{8\pi Dr} + \frac{G_1 \cos(r \sin(\frac{1}{2}\theta) L \Lambda^{\frac{1}{4}} - \omega t) e^{-L\Lambda^{\frac{1}{4}} \cos(\frac{1}{2}\theta)r}}{8\pi Dr}.$$
 (2.61)

Das mittels Lock-In-Detektion zugängliche Signal ist proportional zur totalen Rate

der strahlenden Rekombination. Um den Übergang zum Hochanregungsfall, d.h. bimolekulare Rekombination mitzuberücksichtigen wird mit der linearen Lösung 2.61 unter Hinzunahme ihres Quadrats folgende Näherung konstruiert:

$$R(t) = \int_0^\infty \left(\frac{\Delta n(r,t)}{\tau_R} + B\Delta n(r,t)^2\right) 4\pi r^2 dr.$$
 (2.62)

Der erste Term geht auf die Rekombination der Überschussladungsträger mit Defekten (Donator- oder Akzeptordichte) im Halbleiter zurück, während der zweite Term die quadratische Rekombination von Elektronen und Löchern mit dem Koeffizienten für strahlende Rekombination B beschreibt. Die Ortsintegration wird ausgehend von einer Punktquelle über einen unendlich ausgedehnten Halbleiter durchgeführt. Fouriertransformation zur Bestimmung der Lock In-Komponenten $S_{IP} = \frac{2}{T} \int_0^T R(t) \cos(\omega t) dt, S_{OP} = \frac{2}{T} \int_0^T R(t) \sin(\omega t) dt$ liefert mit Gln. 2.43 für die spektrale Phase:

$$\phi(\omega) = -\tan^{-1}\left(\frac{S_{OP}(\omega)}{S_{IP}(\omega)}\right) = \frac{\sin(\frac{1}{2}\theta)\left(G_0B\Lambda^{\frac{3}{4}}L\tau_R + 8\pi D\cos(\frac{1}{2}\theta)(1+\sqrt{\Lambda}+2\Lambda^{\frac{1}{4}}\cos(\frac{1}{2}\theta))\right)}{G_0B\sqrt{\Lambda}L\tau_R(1+\Lambda^{\frac{1}{4}}\cos(\frac{1}{2}\theta)) - 4\pi D(1-2\cos(\frac{1}{2}\theta)^2)(1+\sqrt{\Lambda}+2\Lambda^{\frac{1}{4}}\cos(\frac{1}{2}\theta))}$$
(2.63)

Dieser Ausdruck enthält neben der strahlenden Lebensdauer τ_R implizit (in θ , Λ und L) die effektive Lebensdauer τ_{eff} (s.o.). Ebenso lässt sich mit Gln. 2.42 die spektrale Amplitude bestimmen. Der Ausdruck für diese ist jedoch etwas komplizierter und im Anhang aufgeführt. Für die strahlende Lebensdauer gilt: $1/\tau_R = B(n_0 + p_0 + \Delta n)$ wobei die Anregungsdichte Δn über dem Ort gemittelt ist. Im Unterschied zum linearen Modell geht gemäß Gln. 2.62 unter Berücksichtigung eines zum Quadrat der Überschussladungsträgerdichte proportionalen Terms $(B(\Delta n(r,t))^2)$ auch die Generationsrate G_0 quadratisch in die strahlende Rekombination ein und es entstehen zusätzliche Mischterme, die spektral mit ω und 2ω variieren. Bei Erfassung der ersten Harmonischen wird aber nur der mit ω variierende Anteil gemessen. Während die spektrale Phase im linearen Modell allein durch die effektive Lebensdauer τ_{eff} bestimmt ist, wirkt sich bei Erweiterung mit einem Korrekturterm neben den Parametern B, D, τ_R auch die Generationsrate G_0 aus. Die spektrale Amplitude besitzt eine ähnlich komplizierte Abhängigkeit. Bei der Herleitung nach Gln. 2.62 handelt es sich lediglich um einen Ansatz und keine exakte Lösung. In Kap. 5.1 ist dargelegt, dass dieser Ansatz das Übergangsregime zum Hochanregungsfall zu beschreiben

vermag. Dennoch ist zu betonen, dass die Herleitung physikalisch nicht plausibel erscheint. Eine Mittelung über $Bnp \approx B((n_0+p_0)\Delta n + \Delta n^2)$ zur Bestimmung der Rate der strahlenden Rekombination enthält bereits einen quadratischen Term. Eine Ersetzung mit $1/\tau_R = B(n_0+p_0+\Delta n)$ führt zu $Bnp \approx B((n_0+p_0)+\Delta n)\Delta n = \Delta n/\tau_R$. Da τ_R aber gerade selbst von der Anregungsdichte abhängt und dürfte sie bei der Integration in Gln. 2.62 nicht als konstanter Parameter behandelt werden. Auf die in $\Delta n/\tau_R$ mündende zwangsweise Linearisierung folgt anschließend eine nichtlineare Ergänzung mit $B(\Delta n(r,t))^2$. Der wesentliche Unterschied zu den linearen Modellen ist die zusätzliche Abhängigkeit von spektraler Phase und Amplitude von G_0 und damit von der Anregungsdichte. In Kap. 5.1 bzw. Ergebnisse wird gezeigt, unter welchen Bedingungen diese Konstruktion den nichtlinearen Fall beschreiben kann.

2.2.6 Dispersives Modell

Eine weiteres Modell, welches von einer Verteilungsfunktion von Lebensdauern ausgeht, ist das sogenannte dispersive Modell. Herkömmliche Anwendung ist die Beschreibung von Relaxationsprozessen in amorphen und glasartigen Materialien. Bei periodischer Anregung hängt die Antwort des Systems von der fraktalen Potenz der Modulationsfrequenz ω ab. Bezeichnet $\delta_{disp} \in [0, 1]$ den i.A. nichtganzzahligen Dispersionsparameter und τ_0 die mittlere Lebensdauer, so ergibt sich für die komplexwertige Antwort:

$$\Delta n_1^*(\omega) = \frac{G_1 \tau_0}{1 + (i\omega\tau_0)^{\delta_{disp}}}.$$
(2.64)

Ausgehend von Lock In-Detektion wird aus dieser komplexen Größe der zur spektralen Amplitude proportionale Betrag gebildet:

$$\|\Delta n_1^*(\omega)\| = \frac{G_1 \tau_0}{\sqrt{(\omega \tau_0)^{2\delta_{disp}} + 2(\omega \tau_0)^{\delta_{disp}} \cos(\frac{\pi}{2}\delta_{disp}) + 1}}.$$
 (2.65)

Die spektrale Phase wird entsprechend gebildet:

$$\phi(\omega) = -\tan^{-1}\left(\frac{\Im(\Delta n_1^*(\omega))}{\Re(\Delta n_1^*(\omega))}\right) = -\tan^{-1}\left(\frac{(\omega\tau_0)^{\delta_{disp}}\sin(\frac{\pi}{2}\delta_{disp})}{1+(\omega\tau_0)^{\delta_{disp}}\cos(\frac{\pi}{2}\delta_{disp})}\right).$$
 (2.66)

Der Parameter τ_0 ist in diesem Zusammenhang als mittlere Lebensdauer zu verstehen. Der Dispersionsparameter δ_{disp} ermöglicht die Bestimmung der fraktalen Dimension des Konfigurationsraums (vgl. [20]). Für den Grenzfall $\delta_{disp} = 0$ folgt für die spektrale Amplitude $\|\Delta n_1^*\| = \frac{G_1 \tau_0}{4}$ und für die Phase $\phi = 0$. Dies entspricht dem Maximum an Unordnung. Für $\delta_{disp} = 1$ folgt für die Amplitude $\|\Delta n_1^*\| = \frac{G_1 \tau_0}{\sqrt{1+(\omega \tau_0)^2}}$ und für die Phase: $\tan(\phi) = -\omega \tau_0$, also wieder das einfache Modell gemäß Gln. 2.42 und 2.43.

Die Herleitung der zugeordneten Verteilungsfunktion für die Lebensdauern erfolgt mit einer sogenannten Stieltjes-Transformation (vgl. [12] und [13]):

$$G(\ln(\tau)) = \frac{1}{2\pi i G_1 \tau_0} \left(\Delta n \left(\frac{e^{-i\pi}}{\tau} \right) - \Delta n \left(\frac{e^{i\pi}}{\tau} \right) \right)$$

$$\Rightarrow \qquad (2.67)$$

$$G(\ln(\tau)) = \frac{1}{2\pi} \frac{\sin(\alpha \pi)}{\cosh\left(\alpha \ln\left(\frac{\tau}{\tau_0}\right)\right) + \cos\left(\pi \alpha\right)}.$$

Die Breite der resultierenden Verteilung ist durch den dispersiven Koeffizienten bestimmt. Im linearen Fall ($\delta_{disp} = 1$) ergibt sich eine scharfe Verteilung in Gestalt der Delta-Distribution. Für den nichtlinearen Fall ($\delta_{disp} < 1$) wird die Verteilung breiter. Der Verlauf ist in Kap. 5.1 dargestellt. Auch wenn in dieser Arbeit zumindest das Volumenmaterial der untersuchten Proben aus kristallinem Silizium besteht, kann das vom linearen Modell 2.42, 2.43 bzw. 2.58 abweichende nichtlineare Verhalten insbesondere des Tangens der spektralen Phase durch dieses dispersive Modell ebenfalls beschrieben werden, wie in Kap. 5.1 und 5 gezeigt wird. Dennoch muss konstatiert werden, dass dieses Modell nur unwesentlich mehr Physik bietet als das einfache Modell gemäß 2.42, 2.43. Es enthält eine mittlere Lebensdauer, die wenigstens im Grenzfall $\delta_{disp} = 1$ der effektiven Lebensdauer entspricht, die weitere Physik ist jedoch im Dispersionsparameter δ_{disp} konzentriert.

3 Proben

3.1 Wafer

Es werden hauptsächlich p-dotierte kristalline Silizium-Wafer (c-Si) mit unterschiedlicher Passivierung untersucht. Die Dotierung ist so gewählt, dass sowohl Niedrig-, als auch Hochanregungsfall untersucht werden können (1 Ω cm entsprechend der p-Dotierdichte $N_A = 4,45 \times 10^{15}$ cm⁻³ bzw. n-Dotierdichte $N_D = 1,38 \times 10^{16}$ cm⁻³, bei 14 Ω cm entsprechend der p-Dotierung $N_A = 3.18 \times 10^{14}$ cm⁻³). Eine Übersicht ist in Tab. 3.1 gegeben. Die Struktur der Wafer ist in Abb. 3.1 skizziert.

Bezeichnung	Name	Dotierung / Ωcm	Passivierung	Dicke / μm
PWL1a	$16\mathrm{er}\#1$	(p) 14	(i)pm-Si:H/(n)a-Si:H/	290
PWL1b	$16\mathrm{er}\#2$	(p) 14	(i)pm-Si:H/(n)a-Si:H	290
PWH1a	ISE3a	(p) 1	(i) a:Si	250
PWH1b,c	ISE3b,c	(p) 1	(i) a:Si	250
PWH2	SiN	(p) 1	SiN_x	250
PWH3	304b	(p) 1	(i)a-Si:H	250
PWH4	1642b	(p) 1	(i)a-Si:H	250
PWH5	SiC	(p) 1	SiC	250
PCH1a	F080606-B	(p) 1	(n)a-Si:H/(i)a-Si:H	250
PCH1b	F080606-G	(p) 1	(n)a-Si:H/(i)a-Si:H	250
PCH2	F070417	(p) 1	(n)a-Si:H/(i)a-Si:H	250
PCH3	Zelle S0	(n) 1	(p)a-Si:H/(i)a-Si:H	250

Tabelle 3.1: Übersicht über die untersuchten Proben

3.2 Zellen

Es werden Zellen mit Rückkontakt und transparenten, leitfähigen Oxiden (transparent conducting oxide - TCO) als Frontkontakt untersucht. Die Proben sind damit nicht mehr symmetrisch. MPL-Detektion kann nur auf der bestrahlten Vorderseite in Reflexionsrichtung erfolgen.



Abbildung 3.1: Skizzen der Probengeometrie der Wafer [a] und Zellen [b], [c]

4 Messtechnische Umsetzung

4.1 Modulierte Photolumineszenz

4.1.1 Lock In-Messung

Der Versuchsaufbau für die modulierte Photolumineszenz ist in Abb. 4.1 skizziert. Zur optischen Anregung werden zwei GaAlAs-Laserdioden (LD) vom Typ HL7851G der Wellenlänge $\lambda = 785$ nm verwendet. Sie erzeugen im Normalbetrieb (110 mA Laserdiodenstrom) eine maximale Photonenflussdichte von etwa $\Phi \approx 6.9 \times 10^{18}$ cm⁻²s⁻¹. Die Modulation des Laserstrahls kann einerseits mit einem mechanischen Chopper, der den Strahl in eine Folge von Rechteckpulsen zerlegt erfolgen. In diesem Fall entspricht das Verhältnis von Amplitude zu stationärer Generation: $G_1 = \frac{G_0}{2}$. Andererseits kann mit einem separaten Funktionsgenerator über einen Laserdioden-Controller (LDC) sinusmodulierte Laserstrahlung mit beliebiger Amplitude erzeugt werden. Praktisch wird der im Lock In-Verstärker integrierte Funktionsgenerator zur Erzeugung eines Sinussignals verwendet, dessen Amplitude ca. 10 % der stationären Anregung $(G_1 = \frac{G_0}{10})$ entspricht. Zusätzlich wird in den Strahlengang hinter den Laser noch ein Linienfilter eingebracht. Die Anregung der Probe erfolgt lokal mit einem kleinen Spot von etwa 2-3 mm Durchmesser. Die von der Probe emittierte Photolumineszenz-Strahlung wird in Transmissionsrichtung von der InGaAs-Photodiode DET410 (PD1) detektiert. Ein cut off-Filter zwischen Probe und PD1 filtert etwaige Reste der Anregungslaserstrahlung heraus. In Reflexionsrichtung in etwa 45 Grad zur optischen Achse ist eine zweite InGaAs-Photodiode (PD2) mit cut off-Filter installiert, die ebenfalls zur Detektion der Photolumineszenzstrahlung dient. Durch die Verwendung von Photodioden auf beiden Seiten der

Probe sind Vergleichsmessungen möglich. Ein weiterer Grund für den Einsatz von PD2 ist jedoch, dass Wafer und Zellen mit Rückkontakt nicht in Transmissionsrichtung vermessen werden können. Die Position von PD2 darf nicht im Einstrahlwinkel des Lasers erfolgen, da ansonsten der reflektierte Anteil der Anregungsstrahlung die Photolumineszenzstrahlung überlagert. Die Photonenflussdichte wird bei anregungsabhängigen über Neutraldichte-Filter (ND) variiert. Zur Messung des Photonenstroms stehen ein Powermeter sowie eine Siliziumphotodiode (BPX66) zur Verfügung, die im Versuchsaufbau nicht fest installiert sind, sondern bei Bedarf am Ort der Probe stationiert werden. Vor Auswertung durch den Lock In-Detektor wird das Photodiodensignal mit einem Vorverstärker (amplifier) verstärkt. Mit dem Lock In werden gemäß Kap. 2.2.2 spektrale Amplitude und Phase der ersten Harmonischen gemessen. Das Referenzsignal mit der Modulationsfrequenz $\omega = 2\pi f$ erhält der Lock In wahlweise intern aus dem geräteeignenen Funktionsgenerator oder von einem externen Funktionsgenerator zur Steuerung des Laserdioden-Controllers oder des Choppers. Ein Computer (PC) mit Labview-Mess-Software ermöglicht automatisierte Messungen für vorgegebene Frequenzbereiche und Amplituden. Bei jeder Messung werden Modulationsfrequenz ω [s⁻¹], Amplitude U [V] und Phase ϕ [deg.] erfasst und gespeichert.



Abbildung 4.1: Versuchsaufbau Modulierte Photolumineszenz

4.1.2 Kalibrierung und Korrekturfunktion

Korrekturfunktion Für die Messkomponenten, insbesondere Vorverstärker und die verwendeten Photodioden sind gewisse Zeitkonstanten zu berücksichtigen. In Abbildung 4.2 sind exemplarisch für die beiden verwendeten Vorverstärker (OP1, OP2) die Phasenspektren gemessen mit einer Silizium-Photodiode (PD2) mit und einer Silizium-Photodiode (BPX66) ohne dem bei regulären Messungen verwendeten cutoff-Filter dargestellt. Es zeigt sich, dass Vorverstärker OP1 einen größeren Beitrag zur Phase liefert als OP2. Zusätzlich sorgt der cut off-Filter bei beiden Verstärkern für eine Phasenverschiebung. Die Korrektur der gemessenen Probenspektren erfolgt mit Hilfe der Gerätespektren durch Subtraktion der Gerätephase. Eine Korrektur der Amplitude wird für nicht notwendig befunden, da diese im spektralen Verlauf maximal um weniger als 2% variiert und bei den ohnehin stärker fehlerbehafteten Amplitudenspektren nicht ins Gewicht fällt. Grundsätzlich beeinflusst der Fehler den hochfrequenten Bereich stärker, da er sich im Tangens der Phase dort verstärkt auswirkt. Nach der Phasenkorrektur mit den Gerätefunktionen muss außerdem der Phasenoffset bei $\omega = 0 \text{ s}^{-1}$ beseitigt werden. Die Messungen beginnen jedoch erst ab ca. 20-35 Hz, da für kleinere Frequenzen keine stabile Messung möglich ist. Durch Extrapolation des korrigierten Phasenspektrums bis 0 Hz bei der Datenauswertung wird der Offset ermittelt und von den Daten abgezogen.

Kalibrierung Prinzipiell ist MPL im Niederanregungsfall, wenn die Beziehung $\tan(\phi) = -\omega \tau_{eff}$ erfüllt ist, bei einer festen Frequenz ω_1 möglich: $\tau_{eff} = -\frac{\tan(\phi)}{\omega_1}$. Dafür muss allerdings $\phi(\omega = 0) = 0$ erfüllt werden, d.h. der Phasenoffset muss beseitigt werden. Die Lock In-detektierte Phase wird dazu bei etwa 20 Hz auf Null gesetzt. Zur besseren Kalibrierung kann auch einmalig ein Spektrum der Probe aufgenommen werden, dessen Phase bis $\omega = 0$ extrapoliert wird. Der resultierende Offset wird zur Korrektur verwendet.



Abbildung 4.2: Spektrale Korrekturfunktionen für die beiden verwendeten Vorverstärker sowie für zwei Si-Photodioden mit und ohne cut off-Filter.

4.1.3 Zeitaufgelöste MPL am Oszilloskop

Das MPL-Signal der Probe und das Referenzsignal des Funktionsgenerators werden bei hinreichender Stärke als Spannungssignale zeitaufgelöst für eine feste Frequenz ω auf einem Digitaloszilloskop betrachtet und mit einem Labview-Programm aufgenommen. An die beiden Zeitsignale werden Sinusfunktionen der Form $F_{PL,Ref}(t) =$ $A_{PL,Ref}\sin(\omega t + \phi_{PL,Ref})$ angepasst und die Phasendifferenzen $\Delta \phi = \phi_{PL} - \phi_{Ref}$ bestimmt. Die Zeitkonstante ergibt sich gemäß $\tau(\omega) = -\frac{\tan(\Delta\phi)}{\omega}$ und wird als spektrale Lebensdauer aufgefasst. Diese für gegebenes ω aus der Phasendifferenz der Zeitsignale bestimmte Lebensdauer wird mit der Lebensdauer verglichen, die sich aus der zu ω gehörenden Phase im Lock-In-Phasenspektrum ergibt. Der Messaufbau ermöglicht es, das Zeitsignal parallel zur Lock In-Messung aufzunehmen. Es bietet sich als Kontrollmessung jedoch nur im Fall genügend hoher Anregungen an. Für niedrige Anregungen ist das Signal zu stark verrauscht. Zusätzlich stehen für Fourieranalyse von Zeitsignalen ein PC mit Messwerterfassungskarte und Matlab-Auswerteroutine zur Verfügung. Insbesondere können damit die Anregungssignale auf Unregelmäßigkeiten untersucht werden sowie die Spektren der Proben schnell in Hinblick auf höhere Harmonische untersucht werden.

4.1.4 Strom- und spannungsabhängige MPL an Zellen

Der in Kap. 4.1.1 beschriebene Versuchsaufbau (vgl. Abb. 4.1) ermöglicht durch geringfügige Modifikation ebenfalls die Strom- und Spannungsabhänige MPL an kontaktierten Zellen. Die Messung erfolgt in Reflexionsrichtungrichtug mit der InGaAs-Photodiode PD2. Die zu vermessenden Zellen werden auf einer geeigneten Probenhalterung mit Leitsilber kontaktiert. Für strom- und spannungsabhängige Messungen sowie Messung von V_{oc} steht ein Keythley 2400 Sourcemeter zur Verfügung. Zur großflächigen Beleuchtung der Zellen wird zusätzlich ein Diffusor in den Strahlengang eingebracht. Mit dem dergestalt erweiteren Versuchsaufbau können Strom-Spannungs-Charakteristiken für verschiedene Photonenflussdichten gemessen werden sowie an definierten Arbeitspunkten MPL-Spektren mit aufgezeichnet werden. Insbesondere kann mit den in Kap. 2.1.2 hergeleiteten Beziehungen direkt an der Probe gemessene V_{oc} mit aus dem aus MPL über die Lebensdauerparameter bestimmten $V_{oc}(\tau_{eff,MPL})$ verglichen werden.

4.2 Vergleichsmessung

4.2.1 Stationäre kalibrierte Photolumineszenz

In Abb. 4.3 ist der Versuchsaufbau zur stationären kalibrierten PL erweitert mit Komponenten der MPL gezeigt. Der von einer Laserdiode (LD) emittierte Laserstrahl wird über Spiegel auf die Probe gelenkt. Über Linsen wird die von der Probe ausgehende PL-Strahlung gesammelt und unter Modulation mit einem Chopper durch ein Pinhole (PH) und ein Filter zur Filterung von gestreutem Laserlicht auf das Gitter eines Monochromators (MC) gelenkt. Die wellenlängenselektierte Strahlung wird dann mittels Lock In-Verstärker wahlweise über einen InGaAs-Detektor oder eine Silizium-Photodiode detektiert. Der Messvorgang erfolgt mit Hilfe von Labview-Messsoftware automatisiert. Für die vom Lock In detektierten Spannungssignale stehen geeignete Transferfunktionen zur Berechnung der absoluten PL-Ausbeute zur Verfügung.



Abbildung 4.3: Versuchsaufbau stationäre kalibrierte PL kombiniert mit MPL

MPL kann einerseits gemessen werden, indem der Chopper zur Modulation der Anregungslaserstrahlung eingesetzt wird. Zu beachten ist jedoch, dass aufgrund des zwischengeschalteten Monochromators die MPL-Detektion wellenlängenselektiv erfolgt. Um unter gleichen experimentellen Bedingungen stationäre und modulierte PL zumessen, wird der Aufbau um einige Komponenten erweitert. Eine Photodiode (PD2) misst in Reflexionsrichtung im Winkel von etwa 45 Grad die PL-Antwort der angeregten Probe. Der Laser wird wahlweise mit dem Chopper oder über den Funktionsgenerator des Lock In mit dem Laserdiodenkontroller moduliert. Das mit einem Vorverstärker verstärkte Signal kann dann mit dem vorhandenen Lock In-Detektor erfasst werden.

4.2.2 Quasi-Statische Photoleitfähigkeit

Die Quasi-Statische Photoleitfähigkeit (Quasi-Steady-State Photoconductance -QSSPC) Methode dient ebenfalls zur Bestimmung der injektionsabhängigen effektiven Lebensdauern (vgl. [19] und [18]). Für Vergleichsmessungen steht eine Messapparatur im Forschungszentrum Next Energy zur Verfügung. Die Messanordnung ist in Abb. 4.4 skizziert. Das Feld der Spule eines Radiofrequenz-Schwingkreises induziert Wirbelströme in der zu untersuchenden Probe. Durch optische Anregung mit dem Lichtpuls einer Blitzlichtlampe (flash lamp) wird die Ladungsträgerdichte in der Probe geändert und damit auch deren elektrische Leitfähigkeit. Diese Leitfähigkeitsänderung wird über die nach Lenz'scher Regel durch die Wirbelströme verursachte Gegeninduktion in der Spule über die Brückenschaltung (bridge RF) gemessen. Die Auswertung erfolgt mittels kommerzieller Software des Herstellers. Die Abklingdauer des Lichtblitzes muss deutlich über der zu messenden effektiven Lebensdauer liegen, s.d. bei jeder Beleuchtungsstärke näherungsweise ein stationärer Zustand der Überschussladungsträger gegeben ist. Die Beleuchtungsstärke wird simultan über eine Referenzzelle erfasst. Bei einer einzelnen Messung wird so während des Abklingens der Beleuchtungsstärke innerhalb kurzer Zeit ein großer Bereich an Anregungsdichte vermessen. Die Nachteile der QSSPC gegenüber MPL ist im Wesentlichen, dass nur Proben ohne Rückkontakt untersucht werden können. Zudem erfordert diese integrale Methode für die Untersuchung große Probenstücke mit mehreren cm Durchmesser. Ortsaufgelöste Messungen wie bei MPL sind nicht möglich. Die Methode eignet sich zum groben Vergleich des injektionsabhängigen Verlaufes der Lebensdauern. Für einen exkateren Vergleich wäre die genaue Analyse der für die beiden Methoden verwendeten Modelle und deren verwendeten Parameter zur Lebensdauerbestimmung sowie ein Abgleich der in beiden Methoden verwendeten Photonenflussdichten erforderlich.



Abbildung 4.4: Versuchsaufbau QSSPC

5 Ergebnisse

5.1 Simulation: Vergleich und Diskussion der Modelle

5.1.1 Lineare Modelle

Eine Darstellung von spektraler Amplitude und Phase für sinusmodulierte und rechteckförmiger Anregung gemäß dem einfachen Modell 2.49, 2.50 bzw. 2.52 ist in Abbildung 5.1[a],[b] gegeben. Nach der in Kap. 2.2.3 behandelten Theorie unterscheiden sich die spektralen Amplituden beider Modulationsformen, während die Phasen identisch sind.



Abbildung 5.1: Spektrale Amplitude [a] und Phase [b] für sinus- und rechteckförmig modulierte Anregung im linearen Fall sowie Tangens der spektralen Phase [c].

Von besonderem Interesse ist die Eignung des einfachen Modells zur Bestimmung der effektiven Lebensdauer. Dazu wird das erweiterte Modell aus Kap. 2.2.4 mit variierenden Oberflächenparametern nach Gln. 2.58 zur Simulation von Daten verwendet.

Simuliert werden Siliziumproben mit Parametern, wie sie auch experimentell untersucht werden, d.h. der Probendicke W = 0.025 cm, einer fixen Volumenlebensdauer $\tau_{bulk} = 20 \text{ ms}$, Diffusionskoeffizient für Löcher $D = 12 \text{ cm}^2 \text{s}^{-1}$ und Absorptionskoeffizient $\alpha = 1010 \text{ cm}^{-1}$ für die Anregungswellenlänge $\lambda = 780 \text{ nm}$. Es stellt sich also die Frage, in welchem Bereich eine Verwendung dieses Modells zur Anpassung und Bestimmung der effektiven Lebensdauer zulässig ist. Für symmetrisch $(S_1 = S_2)$ und unsymmetrisch $(S_1 \neq S_2)$ passivierte Proben sind in Abb. 5.2 und 5.43 die Spektren bis 30 kHz aufgelöst dargestellt (bei den experimentellen Messungen beschränkt sich dieser Bereich i.d.R. auf max. 1 kHz). Auf die Darstellung $S_1 = S_2 = 0$ wird verzichtet, denn dort liegen einfaches und komplexes Modell exakt übereinander, die effektive Lebensdauer ist dann gleich der Volumenlebensdauer. Für die symmetrischen Proben werden Spektren mit $S_i \in \overline{S} = \{20, 50, 100, 200, 10^3, 5x10^4, 10^6\}$ cms^{-1} betrachtet. Für gut passivierte Proben sollten eigentlich $S_i < 100 \mathrm{\,cms}^{-1}$ sein. Die Symbole stehen für die mit den gegebenen Parametern simulierten Spektren, die farbigen durchgezogenen Linien entsprechen dem einfachen Modell (Gln. 2.49, 2.50) für die nach Gln. 2.5 mit $\frac{1}{\tau_{eff}}=\frac{1}{\tau_{bulk}}+\frac{S_1+S_2}{W}$ berechnenten effektiven 'Soll-Lebensdauern'. Die schwarz gepunkteten Werte stellen die Anpassung des einfachen Modells an die simulierten Spektren (Gln. 2.58) analog zur Auswertung der experimentellen Daten mit einer einfachen Fit-Routine dar. Bei der Anpassung wird die spektrale Amplitude nach Gln. 2.49 angepasst und nach Gln. 2.50 eine Gerade mit Nulldurchgang an den Tangens der spektralen Phase gefittet. Maßgeblich für den Fitbereich des Tangens der Phase ist dessen Nulldurchgang (für die Amplitude s.u.). Der Betrag der Steigung ergibt die effektive Lebensdauer. Die Abweichung des einfachen Modells ist im Tangens der spektralen Phase in Abb. 5.2[c] deutlich zu erkennen. Die Anpassung mit einer Gerade (gemäß $\tan(\phi) = -\omega \tau_{eff}$) mit Nulldurchgang (schwarze Punkte) führt zu einer betragsmäßig größeren Steigung im Gegensatz zur Gerade mit der nach Gln. 2.5 berechneten 'Soll'-Lebensdauer. Dies ist auch der Fall bei den simulierten unsymmetrischen Proben (vgl. Abb. 5.43[a],[b]), bei denen im ersten Fall die 'gut' passivierte bestrahlte Seite bei $S_1 = 20 \text{ cms}^{-1}$ belassen wird und die Rückseite mit $S_2 \in \overline{S}$ systematisch verschlechtert wird. In Abb. 5.43[c],[d]) ist der umgekehrte Fall dargestellt - die Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeiten der beleuchteten Seite werden gemäß $S_1 \in \overline{S}$ variiert und der Rückseitenparameter bleibt konstant bei $S_2 = 20 \text{ cms}^{-1}$. Rechnerisch ergibt Gln. 2.5 für beide unsymmetrischen Proben identische effektive Lebensdauern. Jedoch liegen die durch Anpassung mit den Fitfunktionen des einfachen Modells ermittelten Lebensdauern für den Fall konstant niedriger S_1 -Werte der bestrahlten Seite höher als im umgekehrten Fall mit konstant niedrigem S_2 und variiertem S_1 . Die Rekombination auf der beleuchteten Seite beeinflusst die durch Anpassung mit dem einfachen Modell bestimmte effektive Lebensdauer demnach nachhaltiger als Rekombination auf der Rückseite. Entsprechend führt bei einer unsymmetrischen Probe die Bestrahlung der 'guten' Seite zu einer durch Anpassung ermittelten höheren effektiven Lebensdauer als Bestrahlung der 'schlechten' Seite.



Abbildung 5.2: Die Symbole entsprechen den simulierten Spektren gemäß erweitertem Modell mit Oberflächenparametern $[S_i, S_j]$ (Gln. 2.59) für symmetrische Proben $(S_i = S_j)$ bis 30 kHz aufgelöst. [a] zeigt die spektrale Amplitude, [b] zeigt den Tangens der spektralen Phase, [c] zeigt den experimentell betrachteten Bereich. Das einfache Modell ist für die sich aus den Simulationsparametern ergebenden effektiven Lebensdauern τ_{eff} in Gestalt der farbigen Linien dargestellt (calc.). Die schwarzen Punkte entsprechen dem einfachen Modell, dass sich bei Anpassung an die Simulationsdaten ergibt (fit).



Abbildung 5.3: Spektrale Amplitude [a],[c] und Tangens der spektralen Phase [b],[d] gemäß erweitertem Modell mit Oberflächenparametern (vgl. Gln. 2.59) für unsymmetrische Proben (eine Seite konstant passiviert ($S_i = 20 \text{ cm s}^{-1}$), die andere Seite systematisch verschlechtert ($S_j \in \overline{S} \text{ cm s}^{-1}$)). In [a],[b] hat die bestrahlte Vorderseite den konstanten Parameter $S_1 = 20 \text{ cm s}^{-1}$ und die Rückseite systematisch verschlechtert ($S_2 \ge 20 \text{ cm s}^{-1}$). Die durchgezogenen Linien entsprechen dem einfachen Modell mit aus den Simulationsparametern berechneter effektiver Lebensdauer (calc.). Die Punkte entsprechen der Anpassung mit dem einfachen Modell durch eine Fitroutine (fit).

In Abb. 5.4 sind die mit dem einfachen Modell durch Anpassung an die simulierten spektralen Amplituden und Phasen nach Gln. 2.58 ermittelten effektiven Lebensdauern $\tau_{eff,op}$ über den nach Gln. 2.5 berechneten effektiven 'Soll-Lebensdauern' $\tau_{eff,calc.}$ aufgetragen. Die prozentuale Abweichung zwischen angepassten und kalkulierten effektiven Lebensdauern beträgt sowohl für die symmetrischen, als auch die unsymmetrischen Proben oberhalb von $S_1 = , S_2 = 200 \text{ cm s}^{-1} 10\%$ und nimmt zu. Es zeigt sich, dass im Gegegensatz zu den berechneten Lebensdauern die angepass-

ten Lebensdauern für $S_1, S_2 \to \infty$ gegen einen konstanten Wert kovergieren. Dieser Grenzwert kann nach [2] zu $\tau_{eff,\infty} = \frac{W^2}{\pi^2 D} \approx 5.27 \times 10^6$ s für symmetrische Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeiten angegeben werden. Für den Fall, dass nur ein S_i variiert wird, kovergiert die angepasste Lebensdauer gegen einen entsprechend höheren Wert.



Abbildung 5.4: Korrelation der durch Anpassung mit dem einfachen Modell (Gln. 2.49 und 2.50) bestimmten Lebensdauern $\tau_{eff,op}$ mit den aus den Simulationsparametern berechneten effektiven Lebensdauern $\tau_{eff,calc}$ (Gln. 2.5).

Zusammenfassend kann für den linearen Fall der Niederanregung für den simulierte Silizium-Proben gemäß obigen Parametersatz festgestellt werden, dass das einfache Modell für die zugrundegelegte Definition der effektiven Lebensdauer gemäß Gln. 2.5 für Proben mit Beschränkung der Oberflächenrekombination auf $S_i \leq 200$ cm s⁻¹ die Spektren bis in den kHz-Bereich hinein nähern kann und mit einem prozentualen Fehler unter 10% ebenso gut zur Lebensdauerextraktion geeignet ist, wie das komplexe Modell.

Spektral und ortsaufgelöste Darstellung von Amplitude und Phase Mit Gln. 2.57 werden zu den im vorherigen Abschnitt erzeugten Spektren die ortsaufgelösten spektralen Amplituden der Anregunsdichten $||\Delta n_1^*(x,\omega)||$ sowie die zugehörigen ortsaufgelösten spektralen Phasen dargestellt $\phi(x,\omega)$ berechnet. In Abb. 5.5[a],[b] sind diese für den Fall symmetrischer Proben $(S_1 = S_2 \in \overline{S} \setminus \{20\})$ und in Abb. 5.6[a],[b] sowie 5.7[a],[b] für den Fall unsymmetrischer Proben $(S_i = 20, S_j \in \overline{S} \setminus \{20\})$ gezeigt. In Abb. 5.5[a] ist für symmetrische Proben zu sehen, dass die Amplitude für die niedrigen Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeiten über dem Ort noch sehr homogen verteilt ist. Ab $S_i = 1000$ cm s⁻¹ (viertes Bild) verläuft das

5 ERGEBNISSE

Anregungsdichteprofil über dem Ort zunehmend inhomogen und fällt für sehr hohe S_i zu den Rändern (x = 0, W) stark ab. Entsprechend der abnehmenden Lebensdauer nimmt auch der Gesamtwert der Amplitude ab. Bei der Ortsdarstellung der spektralen Phase in Abb. 5.5[b] zeigt sich, dass die Phase mit zunehmender Tiefe und Frequenz (betragsmäßig) zunimmt. Mit Zunahme von $S_1 = S_2$ verringert sich die Phase betragsmäßig insgesamt, d.h. die effektive Lebensdauer nimmt ab. Der Fall unsymmetrischer Proben mit konstantem Parameter $S_2 = 20$ cm s⁻¹ ist in Abb. 5.6[a],[b] dargestellt. Charakteristisch sind die zur Rückseite hin abfallenden Amplituden und Phasen, während die bestrahlte Seite wenig Änderung zeigt. Die Variation von S_1 in Abb. 5.7[a],[b] führt entsprechend zu einer Abnahme von Amplitude und Phase auf der bestrahlten Seite. Ab $S_i = 1000$ cm s⁻¹ (viertes Bild) wird die Überschussladungsträgerdichte Profil der Amplitude zunehmend inhomogen über dem Ort und fällt zu der jeweils schlechten Seite ab.

Insgesamt ergibt sich auch hier, dass spektrale Amplitude und Phase (betragsmäßig) bei 'schlechten' bestrahlten Seiten kleiner als bei 'schlechten' der Rückseiten sind, d.h. die effektiven Lebensdauern von ersteren sind kleiner als die von letzteren. Dies entspricht den Resultaten der integrierten Spekten in Abb. 5.4.



(a)



Abbildung 5.5: Ortsaufgelöste Spektren für zur Amplitude proportionalen Überschussladungsträgerdichteverteilung[a] und Phase [b] nach Gln. 2.59 für symmetrische Proben mit $S_1 = S_2 \in \overline{S} \setminus \{20\}$ (von links nach rechts)



(a)



Abbildung 5.6: Ortsaufgelöste Spektren für zur Amplitude proportionalen Überschussladungsträgerdichteverteilung[a] und Phase [b] nach Gln. 2.59 für unsymmetrische Proben mit $S_1 = 20$ und $S_2 \in \overline{S} \setminus \{20\}$ (von links nach rechts).


(a)



Abbildung 5.7: Ortsaufgelöste Spektren für zur Amplitude proportionalen Überschussladungsträgerdichteverteilung[a] und Phase [b] nach Gln. 2.59 für unsymmetrische Proben mit $S_2 = 20$ und $S_1 \in \overline{S} \setminus \{20\}$ (von links nach rechts).

Begründung der Wahl unterschiedlicher Fitbereiche für Amplitude und Bei Verwendung des einfachen Modells (s.m.) nach Gln. 2.49, 2.50 zur An-Phase passung an die in den Simulationen für die übrigen Modelle generierten Spektren sowie der Anpassung an experimentelle Messdaten werden unterschiedliche Frequenzbereiche gewählt. Die Amplitude wird mit der Matlab-Optimierungsroutine 'fminsearch' über dem gesamten Spektrum angepasst. Die Spektren werden zunächst so normiert, dass bei Verwendung des einfachen Modells als Fitfunktion allein die Lebensdauer gemäß $\frac{1}{\sqrt{1+(\omega\tau_{eff})^2}}$ variiert wird. Der Absolutwert der Amplitude sollte für $\omega = 0 \text{ s}^{-1}$ zwar proportional zu $\Delta n = G_1 \tau_{eff}$ sein, jedoch ist der experimentell detektierte Absolutwert oft nicht zuverlässig und variiert nicht immer korrekt mit der Anregungsdichte (vgl. Kap. 5.2). Daher wird das Maximum der Amplitude ignoriert und nur der Gesamtverlauf des normierten Spektrums berücksichtigt. Mit den für eine im Rahmen dieser Arbeit betrachtete typische Siliziumprobe gegebenen Parametern aus Kap. 5.1.1 werden Spektren für verschieden symmetrische und unsymmetrische Oberflächenparameter (S_1, S_2) bis f = 30 kHz simuliert. Die Anpassung des einfachen Modells an den Tangens der spektralen Phase wird im Bereich [0,4] kHz mit der Gerade $tan(\phi) = -\omega \tau_{eff,\phi}$ vorgenommen, da die erzeugten Spektren dort hinreichend linear verlaufen (experimentell wird zumeist bis f=1kHz gemessen und der lineare Bereich je nach Probe und Anregung kleiner gewählt). Es erfolgt die Anpassung der Amplitude des einfachen Modells an die generierten Daten über dem beschränkten Bereich bis 4 kHz ($\tau_{eff,a1}$) sowie über dem gesamten Spektralbereich ($\tau_{eff,a2}$). In Tab. 5.1 sind die Ergebnisse sowie die prozentualen Abweichungen $\Delta \tau_1(\tau_{eff,a1} - \tau_{eff,\phi}), \ \Delta \tau_2(\tau_{eff,a2} - \tau_{eff,\phi})$ zwischen Amplituden- und Phasen-Lebensdauer für die beiden Amplituden-Fitereiche aufgelistet. In Abb. 5.8 sind die zugehörigen Spektren dargestellt. Es zeigt sich eine durchgehend bessere Übereinstimmung ($\Delta \tau_2 < \Delta \tau_1$) zwischen den beiden Lebensdauern, wenn die Amplitude über dem gesamten Spektralbereich anpasst (fit all) wird. Deutlich wird der Sachverhalt an unsymmetrischen Proben, für den symmetrischen Fall erscheint der Effekt geringfügig, doch bei experimentellen Messdaten wirkt er sich nachhaltiger aus.

5 ERGEBNISSE

$S_1,S_2\;/\;{ m cm s^{-1}}$	$ au_{eff,a1} \ / \ \mu { m s}$	$ au_{eff,a2} \; / \; \mu { m s}$	$ au_{eff,\phi} \;/\; \mu$	$\Delta au_1 \ / \ \%$	$\Delta au_2 \ / \ \%$
20, 20	610.1	610.0	608.9	0.2	0.1
20, 200	125.9	127.4	128.6	2.1	0.9
200, 20	125.8	123.9	122.1	2.9	1.4
$20, 10^3$	41.8	42.9	43.0	2.7	0.0
$10^3, 20$	41.4	38.9	38.9	6.3	0.1
$20, 5x10^4$	20.8	21.3	21.5	3.0	0.9
$5x10^4, 20$	20.2	17.8	17.0	16.9	4.3

Tabelle 5.1: Übersicht über die effektiven Lebensdauern und die prozentualen Abweichungen zwischen Amplituden-Lebensdauer und Phasen-Lebensdauer für Anpassung über identischen und verschiedenen Frequenzbereich



Abbildung 5.8: [a] Spektrale Amplitude mit angepassten einfachen Modell über dem selben Fitbereich des linearen Tangens (fit. lim.) und über dem gesamten Spektralbereich (fit all). [b] Tangens der spektralen Phase und Anpassung mit dem einfachen Modell (fit s.m.)

5.1.2 Lineares und nichtlineares Modell

In Anlehnung an Parameter, wie sie sich aus Messungen an niedrigdotierten Proben bzw. Hochinjektion ergeben, werden mit dem nichtlinearen bimolekularen Modell nach Gln. 2.62 Spektren simuliert, die einer p-dotierte Silizium-Probe mit einer Dotierung von $N_A = 7.7 \times 10^{14}$ cm⁻³ entsprechen. Es soll das spektrale Verhalten von Amplitude und Phase unter Variation der Anregung simuliert und mit dem einfachen Modell verglichen werden. Die bimolekulare effektive Lebensdauer ist als $\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_R} + \frac{1}{\tau_{NR}}$ definiert. Die strahlende Lebensdauer ist nach Guidotti ([10]) als

 $\tau_R^{-1} = B(N_A + \Delta n)$ definiert, wobei die Anregungsdichte zu $\Delta n = G_0 \tau$ bestimmt ist. Die effektive Lebensdauer hängt damit über die anregungsdichteabhängige strahlende Lebensdauer $\tau_R(\Delta n) = \tau_R(G_0\tau)$ von sich selbst ab. Daher wird sich darauf beschränkt, die effektive Lebensdauer konstant auf 200 μ s zu setzen, s.d. für den nichtstrahlenden Anteil $\tau_{NR} = \frac{\tau \tau_R}{\tau_R - \tau}$ gilt. In Abb. 5.9 sind die Spektren (Symbole) bis 10 kHz ($\omega \approx 63832 \text{ s}^{-1}$) für Amplitude und Tangens der Phase dargestellt. Experimentell relevant im Rahmen dieser Arbeit ist der Bereich bis 1000 Hz. Zusätzlich ist die vorgenommene Anpassung mit dem einfachen linearen Modell nach Gln. 2.49 und 2.50 in Gestalt der durchgezogenen Linien gezeigt (fit s.m.). Deutlich folgt aus der Tangesdarstellung der spektralen Phase, dass mit zunehmendem G_0 bzw. Anregungsdichte Δn die Spektren vom linearen Verlauf abweichen und zu höheren Frequenzen zunehmend flacher verlaufen. Wird die Phase in eine spektrale Lebensdauer übersetzt, nimmt diese mit der Frequenz also ab. Lineares und nichtlineares Modell liegen nur noch für kleine Frequenzen übereinander. Die mit dem linearen Modell durch Anpassung an die Spektren bestimmte effektive Lebensdauer nimmt mit steigender Anregungsdichte ab. In den Messungen tritt die charakteristische Abweichung im Frequenzbereich bis 1000 Hz bei Anregungsdichten in der Größenordnung der Dotierung und darüber auf. In Abb. 5.9 ist zu sehen, dass die strahlende Lebensdauer τ_R für geringe Anregung gegen $(BN_A)^{-1} \approx 3.2 \times 10^{-1}$ s konvergiert und für $\Delta n > N_A$ mit $(B\Delta n)^{-1}$ abnimmt. Die nichtstrahlende Lebensdauer τ_{NR} weicht nur geringfügig von der bimolekularen effektiven Lebensdauer τ ab. Liegt τ_R in der Größenordnung von Millisekunden, so bestimmt τ_{NR} die Gesamtlebensdauer.

Das nichtlineare Modell kann in dieser Simulation nur zur Formung von Spektren, wie sie auch in den Messungen beobachtet werden, dienen. Die enthaltene effektive Lebensdauer ist konstant gehalten, da eine konsistente Variation von Lebensdauer und Anregungsdichte (bzw. G_0) aufgrund der gegenseitigen Abhängigkeit nicht möglich ist. Der Hochanregungsfall erfordert eigentlich die numerische Lösungen der nichtlinearen Gleichung 2.10. Für kleine Anregungen kann das entspricht die effektive Lebensdauer des einfachen Modell noch näherungsweise der hier festgesetzten effektiven Lebensdauer des quadratischen Modells. Für Anregungsdichten oberhalb des Dotierlevels ergeben sich hier allerdings Abweichungen von 50% und mehr bei der spektralen Phase. Bei Anpassung an die spektrale Amplitude ist die Abweichung noch im Hochanregungsbereich noch größer.



Abbildung 5.9: Spektrale Amplitude [a] und Phase [b] gemäß bimolekularem Modell (nach Gln. 2.62) für eine konstante effektive Lebensdauer von 200 μ s bei Variation der Generationsrate $G_0 \in [1.61 \times 10^{16}, 1.61 \times 10^{20}] \text{ cm}^{-3}\text{s}^{-1}$ und einer Dotierung von $N_A = 7.7 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$. Die durchgezogenen Linien Stellen die Anpassung des linearen Modells (Gln. 2.49 und 2.50) da. In [c] sind die Lebensdauerparameter über der Anregungsdichte Δn gezeigt.

5.1.3 Lineares und dispersives Modell

Auf der Grundlage dispersiven Modells nach Gln. 2.65 und 2.66 werden für eine mittlere Lebensdauer $\tau_0 = 300 \ \mu s$ mit im Intervall [0.75, 1] variierendem dispersiven Parameter δ_{disp} Amplituden- und Phasenspektren erzeugt. Die Untergrenze des Intervalls ist so gelegt, dass die Spektren qualitativ nicht zu sehr von experimentell vorliegenden Spektren abweichen. In Abb. 5.10[a],[b] sind spektrale Amplitude und Phase sowie in Form von durchgezogenen Linien die Anpassung auf Grundlage des linearen Modells (Gln. 2.49 und 2.50) zur Bestimmung der effektiven Lebensdauer dargestellt. Für die Anpassung an den Tanges der spektralen Phase des dispersiven Modells wird der lineare Bereich kleiner Frequenzen gewählt (einige hundert Hz). Die Anpassung der spektralen Amplitude erfolgt analog zum Vorgehen bei den Messungen im gesamten Frequenzbereich. In Abb. 5.11[a] ist die linear angepasste effektive Lebensdauer in Abhängigkeit von δ_{disp} aufgetragen. Für $\delta_{disp} = 1$ liegen Amplituden- und Phasenspektrum beider Modelle übereinander und es ist $\tau_{eff} = \tau_0$. Mit von 1 abweichendem δ_{disp} unterschätzt die effektive Lebensdauer τ_{eff} des einfachen Modells die mittlere Lebensdauer τ_0 des dispersiven Modells. Wie im Falle des bimolekularen Modells in Kap. 5.1.2 verläuft für δ_{disp} der Tangens der Phase mit zunehmender Frequenz deutlich flacher - die aus der Phase übersetzte spektrale Lebensdauer nimmt ab. Mit Abnahme von δ_{disp} verringert sich auch die durch Anpassung des linearen Modells ermittelte effektive Lebensdauer.

In Abb. 5.11[b] sind die zugehörigen Verteilungsfunktionen dargestellt, die sich gemäß Gln. 2.67 ergeben. Für $\delta_{distr} = 1$ ist die Breite der Verteilung 0 und die Verteilung entspricht einer Deltadistribution. Die Verteilungen verbreitern sich mit abnehmendem δ_{distr} . Das dispersive Modell führt das nichtlineare Verhalten, besonders deutlich an der Krümmung des Tangens der Phase erkennbar, auf eine spektrale Verteilung von Lebensdauern zurück. Mit der Simulation auf Grundlage des dispersiven Modells können Spektren die den experimentellen Messdaten im Hochanregungsfall entsprechen erzeugt werden. Die effektive Lebensdauer des einfachen Modells weicht bei der gegebenen Parameterkonstellation von der fixierten mittleren Lebensdauer au_0 ab, unterschätzt diese und beträgt ab $\delta_{distr} \leq 0.9$ etwa 10% und ab $\delta_{distr} \leq 0.8 25$ %. Festzuhalten ist, dass wie beim Vergleich von einfachen Modell und bimolekularem Modell diese Betrachtung qualitativ ist, da eine detaillierte quantitative Analyse den Vergleich der beiden Modelle anhand der numerischen Lösung der nichtlinearen Differentialgleichung 2.10 erfordern würde, die über den Rahmen dieser Arbeit hinaus geht. Der weitere Vergleich erfolgt anhand der experimentellen Messdaten in Kap. 5.2.



Abbildung 5.10: Spektrale Amplitude [a] und Tangens der spektralen Phase [b] gemäß dispersivem Modell (2.65 und 2.66) für variierenden Dispersionsparameter δ_{distr} im Intervall [0.75, 1] für eine mittlere Lebensdauer $\tau_0 = 300 \ \mu$ s: die durchgezogenen Linien entsprechen dem einfachen Modell (Gln. 2.49 und 2.50) Die resultierenden effektiven Lebensdauern τ_{eff} sind in Abb. 5.11 nebst Verteilungsfunktionen dargestellt.



Abbildung 5.11: Effektive Lebensdauer des linearen Modells angepasst an das dispersivem Modell für variierenden Dispersionsparameter δ_{distr} im Intervall [0.75, 1] für die mittlere Lebensdauer $\tau_0 = 300 \ \mu$ s.

5.2 Messungen

5.2.1 MPL: Vergleich Rechteck- und Sinusmodulation

Überprüfung der Amplitudenmodelle für Rechteck- und Sinusmodulation An der hochdotierten Probe PWH1a werden zur Kontrolle der gemäß Theorie (vgl. Kap. 2.2.3 bzw. [6], [7]) vorhergesagten funktionalen Übereistimmung der spektralen Phasen und den funktionalen Unterschieden der spektralen Amplituden im Niederanregungsfall Vergleichsmessungen für sinusförmige und rechteckförmige Anregung durchgeführt. Die Photonenflussdichte beträgt $\Phi = 5.7 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2} \text{s}^{-1}$. Beide Signalformen werden elektronisch mit einem Funktionsgenerator für ein Verhältnis zwischen Amplitude und stationärer Anregung von $G_1 = \frac{G_0}{10}$ erzeugt und an einem Digital-Oszilloskop hinsichtlich Offset, Amplitude und Frequenz kontrolliert. Die Spektren werden bis 1000 Hz aufgezeichnet. Die Ergebnisse sind in 5.12 dargestellt.



Abbildung 5.12: Vergleich Amplitude [a] und Phase [b] für Rechteck- und Sinusmodulation an PWH1a im Niedriganregungsfall für $\Phi = 5.7 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2} \text{s}^{-1}$

Während die spektralen Phasen in der Tangensdarstellung gut übereinstimmen, zeigen sich leichte Abweichungen in der Amplitude. Entgegen der theoretischen Beschreibung entspricht der Verlauf der spektralen Amplitude im Rechteckfall jedoch nicht dem gemäß Gln. 2.52 vorhergesagten Verhalten, sondern ähnelt mehr der Antwort auf die sinusförmige Modulation. Für die effektive Lebensdauer ergibt sich mit dem nach Gln. 2.52 für die rechteckmodulierte Amplitude gültigen Modell eine effektive Lebensdauer von 305 μ s, für die sinusmodulierte Amplitude hingegen nur 163 *mus*. Dies entspricht einer Abweichung von 60 %. Bei den Phasen ergibt sich für den rechteckmodulierten Fall 160 μ s und für die Sinusmodulation 153 μ s mit 5 % Abweichung. Die naheliegende Auswertung der Rechteckamplitude mit der Beziehung für die sinusförmige Amplitude liefert 164 μ s.

Für die in den Messungen ebenfalls verwendete Rechteckmodulation mit dem mechanischen Chopper werden anhand von Probe PWH2 für den Niederanregungsfall für ein Verhältnis zwischen Amplitude und stationärer Anregung von $G_1 = \frac{G_0}{2}$ beide Amplitudenmodelle ebenfalls getestet. In Abb. 5.13 ist eine typische spektrale Amplitude bei Niederinjektion für gechoppte Modulation dargestellt. Beide Modelle werden durch Anpassung geprüft. Wie im obigen Fall passt das Modell für sinusförmige Modulation besser. Die ermittelte effektive Lebensdauern für das Modell rechteckförmiger Modulation beträgt $\tau_{eff,A} = 414 \ \mu$ s. Dies entspricht einer Abweichung von 61 %. Für sinusförmige Modulation ergibt sich $\tau_{eff,A} = 220 \ \mu$ s und stimmt besser überein mit dem Wert aus dem Tangens der Phase: $\tau_{eff,\phi}$)= 204 μ s.



Abbildung 5.13: PWH2 Vergleich der Modelle für Rechteck- und Sinusmodulation im Niedriganregungsfall für $8.9 \ge 10^{17} \text{ cm}^{-2} \text{s}^{-1}$

Möglicherweise ist dafür die ungenügende Schärfe des Rechtecksignals als Ausgangssignal ursächlich, während die Antwort zusätzlich an Schärfe einbüßt und aufgrund der Rundungen an den Flanken in Richtung Form eines Sinussignals verzerrt ist. Die Amplitude der detektierten ersten Harmonischen ähnelt dann der eines Sinussignals. Der Auswertung mit dem Modell für Sinusmodulation ist damit aufgrund der besseren Übereinstimmung der Vorzug zu geben.

Vergleich anregungsdichteabhänige Messung für gechoppte Rechteckund elektronische Sinusmodulation Für eine über einen größeren Bereich varriierende Photonenflussdichte $\Phi \approx [3 \times 10^{17}, 8.6 \times 10^{18}] \text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}$ werden Amplituden und Phasenspektren in einer Messung in Transmissionsrichtung gechoppt und sinus-

5 ERGEBNISSE

moduliert aufgenommen. In Abb. 5.14[b] zeigt sich trotz unterschiedlicher Amplitudenverhältnisse und Modulationsform eine gute Übereinstimmung der Spektren bzgl. der Phase. Es handelt sich um Daten aus zwei unterschiedlichen Messungen, daher sind nicht jeweils zwei Spektren bei derselben Photonenflussdichte aufgezeichnet. Identische Symbole beider Farben repräsentieren jedoch die bzgl. Anregung am nächsten zusammenliegenden Spektren. Die Amplitudenspektren in Abb. 5.14[a] weichen stärker voneinander ab, die gechoppte Amplitude fällt mit höherer Frequenz wesentlich schneller ab. Allerdings sind die Amplituden normiert, es handelt sich um relative Änderungen. Die vom Chopper erzeugte größere Amplitude verliert aufgrund der trägen Relaxation bei großen Frequenzen mehr in Bezug auf ihr Maximum mehr. In Abb. 5.14[c] sind die effektiven Lebensdauern über der Photonenflussdichte aufgetragen. Die Auswertung erfolgt mit dem einfachen Modell (Gln. 2.49 bzw. Gln. 2.50), da hier nur die Übereinstimmung zwischen beiden Modulationsformen von Interesse ist und die übrigen Modelle diesbzgl. keine weiteren Informationen liefern. Es zeigt sich eine gute Übereinstimmung bei den aus den Phasenspektren bestimmten Lebensdauern sowie der Lebensdauer aus der Sinusmodulation, während die Lebensdauern der Rechteckamplituden von den übrigen abweichen.



Abbildung 5.14: [a],[b] Anregungsabhängige MPL für PWLa für gechoppte Rechteckmodulation (magenta) elektronische Sinusmodulation (cyan). [c] Die effektiven Lebensdauer durch Anpassung nach Gln. 2.50 in Abhängigkeit von der Photonenflussdichte.

5.2.2 MPL in Reflexionsrichtung und Transmissionsrichtung

In den in dieser Arbeit betrachteten Modellen wird die Richtung der Detektion der Photolumineszenz-Antwort nicht berücksichtigt. Die untersuchten Wafer ohne Rückkontakt und beidseitig guter Passivierung erlauben die Messung sowohl auf der bestrahlten Seite ('Reflexionsrichtung') als auch auf der unbstrahlten Seite ('Transmissionsrichtung'). Zellen mit Rückkontakt erlauben nur Messung in Reflexionsrichtung. Zumindest für symmetrisch strukturierte Wafer ($S_1 = S_2$) wird die Gleichwertigkeit der Messung anregungsdichteabhängig für beide Richtungen im betrachteten Frequenzbereich für beide Modulationsverfahren (elektronisch moduliertes Kleinsignal und gechopptes Großsignal) festgestellt. Für die SiN_x-passivierte Probe PWH2 wird die beschriebene Vergleichsmessung durchgeführt. Die Modulation erfolgt gechoppt bis f = 800 Hz, die Photonenflussdichte Φ variiert im Bereich $[3 \times 10^{17}, 8.6 \times 10^{18}]$ cm⁻²s⁻¹. Zur Detektion wird in Transmissionsrichtung Photodiode 1 und in Reflexionsrichtung die Photodiode 2 eingesetzt. Beide Detektoren sind vor der Messreihen fest installiert, eine Verschiebung der Probe oder Variation des Ortes der Anregung erfolgt nicht. Es werden erst für alle Anregungsdichten die Spektren in Transmissionsrichtung, danach in Reflexionsrichtung aufgenommen. In Abb. 5.15[a],[b],[c] sind die Spektren sowie die ermittelten Lebensdauern für Amplitude und Phase aus Gln. 2.49 bzw. 2.50 für den Frequenzbereich bis 318 Hz dargestellt. Die roten Datenpunkte repräsentieren die Messung in Reflexionsrichtung, die blauen die Transmissionsrichtung. Für die niedrigsten Anregungsdichten sind die Amplitudenwerte stärker verrauscht, die Fitkurven (durchgezogene Linien) liegen im gezeigten Spektralbereich nicht vollständig in den Daten. Totz der Verwendung zweier verschiedener Detektoren zeigen die Spektren und die Lebensdauern für Amplitude und Phase abgesehen von den beiden niedrigsten Anregungsdichten eine gute Übereinstimmung.



Abbildung 5.15: Amplitude [a] und Tangens der spektralen Phase [b] von anregungsabhängiger MPL für SiN_x -passiviertes Silizium (PWH2) in Reflexionsrichtung (rot) und Transmissionsrichtung (blau) mit gechoppter Rechteckmodulation. Die effektive Lebensdauer [c] wird gemäß dem einfachen Modell aus Gln. 2.49 bzw. 2.50 bestimmt.

Eine weitere Messung wird an der (i)a:Si-passivierten Probe PWH1b bei sinusförmiger Modulation durchgeführt. In diesem Fall erfolgt die Messung in Transmissionsund Reflexionsrichtung zu jeder Anregungsdichte direkt hintereinander bei gleicher Filterstellung, um evtl. durch Filterwechsel bedingte Abweichungen auszuschliessen. Der Photonenfluss variiert im Intervall $[2, 52 \times 10^{17}, 5.79 \times 10^{18}]$ cm⁻²s⁻¹. Die Spektren sind in Abb. 5.16 gezeigt. Die roten Datenpunkte repräsentieren die Messung in Reflexionsrichtung, die blauen die Transmissionsrichtung. Gute Übereinstimmung zeigt sich für die hohen Anregungsdichten, bei denen das MPL-Signal deutlich ist. Mit abnehmender Anregungsdichte unterliegt das MPL-Signal stärkeren Schwankungen, insbesondere die Amplitude zeigt stärkere Abweichungen. Die Auswertung erfolgt mit dem einfachen Modell (Gln. 2.49, 2.50). In Abb. 5.17[a] sind anregungsdichteabhängig die normierten Amplitudenwerte (jeweils normiert auf das Maximum der größten Amplitude in jeder Messreihe) dargestellt. Deutliche Abweichungen treten lediglich für die beiden niedrigsten Anregungsdichten zwischen Transmissionsund Reflexionsrichtung auf bedingt durch das schwache Signal - für das schwächste Signal maximal etwa 13% in der Amplitude und etwa 9% in der Phase. Für die Lebensdauern in Abb. 5.17[b] gilt entsprechendes. Die prozentualen Abweichungen der Amplituden und effektiven Lebensdauern aus den Messungen in Transmissionsrichtung und Reflexionsrichtung liegen mit Ausnahme der beiden niedrigsten Anregungen deutlich unter 10%. Bei der zweitniedrigsten Anregung ($\Phi = 3,8x10^{17}$ cm⁻²s⁻¹) beträgt die prozentuale Abweichung 16%, für die niedrigste Anregung ($\Phi = 2,52x10^{17}$ cm⁻²s⁻¹) etwa 30 %.



Abbildung 5.16: [a] Amplituden- und [b] Phasenspektren der anregungsdichteabhängige MPL für Probe PWH1b ((i)a:Si-Passivierung) bei elektronischer Sinusmodulation. Die roten Symbole stehen für die Spektren der Messung in Reflexionsrichtung, blau für die Messung in Transmissionsrichtung. Identische Symbole zweier Farben stehen für die gleiche Anregungsdichte. In Abb. 5.17 ist der anregungsabhängige Verlauf von Amplitude und Lebensdauer angegeben.



Abbildung 5.17: Anregungsdichteabhängiger Verlauf der Maximalwerte der auf das Maximum der jeweiligen T/R-Reihe normierten Amplituden [a] und effektive Lebensdauen [b] für die (i)a:Si-passivierten Probe PWH1b.

Die richtungsabhängigen Messungen zeigen bzgl. der Lebensdauerparameter und der Absolutwerte der Amplituden (die für $\omega = 0 \text{ s}^{-1}$ wegen $G_1 \tau_{eff}$ ebenfalls proportional zur effektiven Lebensdauer sind) keine wesentlichen Abweichungen. Für niedrigere Anregungsdichte und höhere Frequenzen ist das Signal schwach und unterliegt starken Schwankungen. Es muss auch berücksichtig werden, dass in Reflexionsrichtung die Photoddiode schräg zur Probe positioniert ist und nicht soviel Photolumineszenz-Strahlung einfangen kann, wie die Photodiode auf der Probenrückseite, die senkrecht zur Probe positioniert ist und mit dem Filter direkt aufliegt. Messung in Transmissions- und Reflexionsrichtung finden also auch unter unterschiedlichen Winkeln statt.

5.2.3 MPL: Vergleich der Modelle

Anregungsdichteabhängige MPL an hochdotiertem 1 Ω cm (p) Silizium mit SiN_x -Passivierung Die Messung an PWH2 erfolgt in Transmissionsrichtung, es werden Spektren bei Anregung mit Photonenflussdichten von 1.11×10^{17} bis 6.7205×10^{18} cm⁻²s⁻¹. Bei der Analyse der Spektren und der Extraktion der effektiven Lebensdauer sowie der Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeit wird zwischen Niederanregungsfall und Übergang zum Hochanregungsfall unterschieden (Maßgabe ist die Dotierdichte $N_A \approx 4.45 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$). Es werden die in Kap. 2.2 eingeführten Modelle zur Beschreibung des linearen und des nichtlinearen Verhaltens verwendet. In Abb. 5.18[a],[b] sind die Spektren für den Niederinjektionsfall $\Delta n < N_A$ dargestellt. Die dargestellten Fitfunktionen resultieren aus der Anpassung an die Spektren zur Bestimmung der Lebensdauer mit Hilfe des einfachen (s. m.) und des erweiterten Modells (c. m.) nach Gln. 2.49, 2.50 bzw. Gln. 2.58. Sie liegen nahezu übereinander. Für den Hochinjektionsfall $N_A < \Delta n$ sind die spektralen Amplituden und Phasen separat in Abb. 5.19[a],[b] aufgeführt. Die gezeigten Fitfunktionen ergeben sich aus der Anpassung mit den nichtlinearen Modellen für quadratische Rekombination nach Gln. 2.62 (bim. m.) und dem nichtlinearen Modell nach Gln. 2.65 und 2.66 (disp. m.). Beide nichtlinearen Modelle beschreiben das spektrale Verhalten im Ubergangsregime zur Hochinjektion ähnlich gut. Während beim dispersiven Modell mittlere Lebensdauer τ_0 und dispersiver Parameter δ_{disp} angepasst werden, erfolgt die Anpassung des quadratischen Modells durch drei Parameter: strahlende Lebensdauer τ_R , effektive Lebensdauer τ und strahlenden Rekombinationsparameter $B^* = \xi B$ mit $\xi \in [0, 1]$. Dieses stetige 'Einschalten' von B in Gln. 2.63 bzw. des quadratischen Ergänzungsterms $\xi B \Delta n^2$ in Gln. 2.62 ist bei der Anpassung erforderlich, da ansonsten das Übergangsregime zur Hochanregung spektral nicht beschrieben werden kann. Neben den festen Probenparametern $\{D, alpha, W\}$ und im Falle des linearen Modells nach Gln. 2.58 auch eine fixe Volumenlebensdauer von $\tau_{bulk} = 20$ ms geht in die Anpassung mit dem quadratischen Modell aufgrund der Generationsabhängigkeit die verwendete Photonenflussdichte als Eingangsparameter ein. In Abb. 5.23[a] ist die Photonenflussdichteabhängigkeit des Einschaltparameters ξ $= B^*/B$ der strahlenden Rekombination für das Übergangsregime zur Hochanregung für spektrale Amplitude und Phase dargestellt. Entsprechend dem linearen Verlauf des Tangens der spektralen Phase für die beiden niedrigsten Anregungen (vgl. 5.19[b]) ist zu erkennen, dass der quadratische Term in diesem Fall als Störterm entfällt. Für zunehmende Photonenflussdichte vergrößert sich der Einfluss des quadratischen Terms mit zunehmendem Parameter B^* . Bei der höchsten Anregung ist $B^* = B$. Ebenso chrakteristisch für den Übergang zum nichtlinearen Hochanregungsfall ist die photonenflussabhänige Abnahme des dispersiven Parameters δ_{disp} in

Abb. 5.23[b]. Wie in Kap. 5.1.3 bereits ausgeführt, entspricht $\delta_{disp} < 1$ nichtlinearem Verhalten und geht mit einer Verbreiterung der Verteilungsfunktion von Lebensdauern einher. In Abb. 5.23[c] sind diese Verteilungsfunktionen für die Lebensdauern aus der Phase nach Gln. 2.67 dargestellt. Mit Zunehmender Anregungsdichte und abnehmendem Dispersionsparameter resultieren nach dem dispersiven Modell sich verbreitende Verteilungen von Lebensdauern. Zur Lebensdauer $\tau_{eff,k}$ extrahiert aus Modell k wird die entsprechende Anregungsdichte $\Delta n_k = G_0 \tau_{eff,k}$ gebildet. Zum Vergleich werden alle vier betrachteten Modelle für alle Anregungsdichten an die Spektren angepasst und die resultierenden effektiven Lebensdauern in Abb. 5.21[a] dargestellt. Unter Annahme einer konstanten Volumenlebensdauer von $\tau_{bulk} = 20$ ms wird außerdem die Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeit abgeschätzt (vgl. Abb. 5.21[b]). Für die aus sämtlichen Modellen berechneten Lebensdauern ergibt sich ein recht ähnlicher Verlauf. Mit steigender Injektion erhöht sich auch die Lebensdauer bis etwa zur Dotiergrenze N_A . Für den Übergang zur Hochinjektion ist im Ansatz zu sehen, dass die Lebensdauer ein Maximum erreicht und dann mit weiter zunehmender Anregungsdichte wieder abfällt. Dieses Ergebnis deckt sich bzgl. des qualitativen Verlaufs mit den Ergebnissen in [14] für effektive Lebensdauern und Oberflächenrekombination für p-dotiertes Silizium mit SiN_x -Passivierung. Der Abfall nach Erreichen des Maximums der injektionsabhängigen Lebensdauer in der Nähe von $\Delta n = N_A$ wird von den Autoren mit der in den hier vorliegenden Modellen nicht explizit berücksichtigten Auger-Rekombination erklärt. Bei genauerer Betrachtung der aus den unterschiedlichen Modellen ermittelten Lebensdauern fällt auf, dass das quadratische Modell für den Übergangsbereich zur Hochinjektion relativ zu den übrigen Modellen etwas höhere Lebensdauern ergibt. Insgesamt ergeben sich in dem untersuchten Injektionsbereich keine auffälligen Abweichungen, obgleich die Modelle sich bzgl. der eingehenden und variablen Parameter stark unterscheiden.



Abbildung 5.18: Anregungsabhängiger Verlauf von Amplitude [a] und Tangens der Phase [b] für nitridpassiviertes Silizium im Niederanregungsfall. Es sind Fits gemäß dem einfachen Modell (s.m.)und dem erweiterten Modell (c.m.) gezeigt.



Abbildung 5.19: Anregungsabhängiger Verlauf von Amplitude [a] und Tangens der Phase [b] für nitridpassiviertes Silizium im Übergang zum Hochanregungsfall. Es sind Fits gemäß dem quadratischen Modell (fit bimol. m.) und dem dispersiven Modell (fit disp. m.) gezeigt.



Abbildung 5.20: Anregungsabhängiger Verlauf des Koeffizienten der strahlenden Rekombination [a] und dispersiven Koeffizienten [b] sowie die resultierende Verteilungsfunktion der Lebensdauern [c] (aus der Phase ermittelt) für nitridpassiviertes Silizium im Übergang zum Hochanregungsfall.



Abbildung 5.21: Anregungsabhängiger Verlauf der effektiven Lebensdauer [a] sowie der Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeit [b] für nitridpassiviertes Silizium geämß der unterschiedlichen Modelle.

Anregungsdichteabhängigkeit eines niedrigdotierten (p) 14 Ωcm Silizium-Wafers mit (i)pm-Si:H/(n)a-Si:H Passivierung Die Messung erfolgt an PWL1b sinusmoduliert in Transmissionsrichtung bei Photonenflussdichten von $\Phi \in$ $[3.11 \times 10^{17}, 6.68 \times 10^{18}]$ cm⁻²s⁻¹. Der Dotierlevel liegt bei etwa 3.8×10^{14} cm⁻³, s.d. mit überwiegend $N_A < \Delta n$ der Hochanregungsfall erfüllt ist. In Abb. 5.22[a],[b] ist die Darstellung der Spektren lediglich inklusive der Fitkurven der beiden nichtlinearen Modelle (bimol. m. bzw. disp. m.) gezeigt. In Abb. 5.22[b] tritt die für den Hochanregungsfall charakteristische Krümmung des Tanges der Phase bei allen Anregungsdichten auf. Die Auswertung erfolgt analog zu der im vorherigen Abschnitt beschriebenen Vorgehensweise mit Hilfe aller vier Modelle. In Abb 5.23[a] ist der für die Anpassung des quadratischen Modells zu variierend Einschaltparameter des Koeffizienten der strahlenden Rekombinations dargestellt. Auch hier zeigt sich für die niedrigsten Photonenflussdichten, dass das quadratische Modell sich nur unter Aussetzen des Ergänzungsterms $B\Delta n^2$ an die im Übergangsregime befindlichen Spektren anpassen lässt. Der dispersive Koeffizient δ_{disp} in Abb. 5.23[b] nimmt wiederum mit steigender Photonenflussdichte ab und führt nach Gln. 2.67 auf die Verteilungsfunktionen in Abb. 5.23[c] (erstellt nur für die aus der Phase erhaltenen δ_{disp}). Nach dem dispersiven Modell ergeben sich überwiegend sehr breite Verteilungen der Lebensdauer. In Abb. 5.24 sind die injektionsabhängigen Lebensdauern und Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeiten $S_1 = S_2$ (bei fester Volumenlebensdauer $\tau_{bulk} = 20$ ms) dargestellt. Deutlicher ist bei dieser Probe zu erkennen, dass die Lebensdauern im Hochanregungsbereich wieder beginnen abzufallen. Das quadratische Modell (b. m.) ergibt für die höchsten Anregungsdichten im Vergleich zu den übrigen Model-

5 ERGEBNISSE

len höhere effektive Lebensdauern. Weiterhin ist im Bereich der Hochinjektion zu erkennen, das bei den linearen Modellen und dem quadratischen Modell jeweils die Lebensdauern der Amplituden über denen der Phase liegen. Die aus dem dispersiven Modell abgeleiteten Lebensdauern weisen hingegen keine derartig ausgeprägte Abweichung auf. Für die Erklärung des anregungsabhängigen Verlaufs der effektiven Lebensdauern werden in der Literatur erweiterte SRH-Modelle diskutiert, die die Rekombinationsprozesse an den a-Si:H/c-Si-Übergängen berücksichtigen. So werden von Olibet et al. [15] und Leendertz et al. [16] insbesondere offene Verbindungen (dangling bonds) an den Oberflächen berücksichtigt.



Abbildung 5.22: Anregungsabhängiger Verlauf von Amplitude [a] und Tangens der Phase [b] für PWL1b im Hochanregungsfall. Es sind Fits der Anpassung gemäß dem bimolekularen (fit bimol. m.) und dem dispersiven Modell (fit disp. m.) gezeigt, da hier überwiegend ein nichtlineares Verhalten beobachtet wird.



Abbildung 5.23: Anregungsdichteabhängiger Verlauf der bimolekularen [a] und dispersiven [b] Koeffizienten für PWL1b im Hochanregungsfall sowie die Resultierende Verteilungsfunktion für Lebensdauern [c] (nur für Phase bestimmt).



Abbildung 5.24: Anregungsdichteabhängiger Verlauf der effektiven Lebensdauer [a] sowie der Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeit [b] für PWL1b geämß der unterschiedlichen Modelle.

Anregungsdichteabhängigkeit einer hochdotierten (p) 1 Ω cm Silizium-Zelle mit a-Si:H-Passivierung und TCO Die Messung am TCO-beschichteten p-dotiertem Silizium (1 Ω cm) mit (n)a-Si:H/(i)a-Si:H PCH2 erfolgt sinusmoduliert und aufgrund des Rückkontaktes mit dem erweiterten Versuchsaufbau in Reflexionsrichtung auf der TCO-Schicht. Die Photonenflussdichten variieren im Bereich $[2.93 \times 10^{16}, 5.8 \times 10^{18}]$ cm⁻²s⁻¹. Wie in Abb. 5.25[b] zu erkennen ist, weicht das spektrale Verhalten des Tangens der Phase von den Erwartungen ab. Selbst für geringe Anregungsdichten ist der spektrale Verlauf im nominellen Niederanregungsbereich überwiegend nicht linear. Die gezeigten Fitkurven stammen von der Anpassung mit den nichtlinearen Modellen (bimol. m. und disp. m.). In Abb. 5.26 bestätigt sich aufgrund des durchweg hohen Einschaltparameters des strahlenden Rekombinationskoeffizienten sowie der bis auf die niedrigste Photonenflussdichte deutlich von 1 abweichenden Dispersionsparameter δ_{disp} das nichtlineare Verhalten dieser Probe. Der anregungsdichteabhängige Verlauf der effektiven Lebensdauern und Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeiten in Abb. 5.27, die wie für die oben untersuchten Fälle mit allen vier Modellen bestimmt werden, erinnert an den nichtlinearen Fall der niedrigdotierten Probe aus dem vorherigen Abschnitt. Das nichtlineare Verhalten des Tangens der spektralen Phase kann hier nicht ausschließlich mit Hochinjektion erklärt werden. Sofern bzgl. der angenommenen Dotierung keine erheblichen Abweichungen berücksichtigt werden müssen, wäre zu untersuchen, inwiefern die asymmetrische Struktur der Probe auch im Niederanregungsfall eines erweiterten Modells bedarf.



Abbildung 5.25: Anregungsabhängiger Verlauf von Amplitude [a] und Tangens der Phase [b] für die TCO-beschichtete Zelle im Übergang zum Hochanregungsfall. Es sind Fits der Anpassung gemäß dem bimolekularen und dem dispersiven Modell gezeigt, da hier überwiegend ein nichtlineares Verhalten beobachtet wird.



Abbildung 5.26: Anregungsdichteabhängiger Verlauf von des relativen bimolekularen Parameters B * / B [a] und des dispersiven Koeffizienten [b] δ_{distr} sowie die Resultierende Lebensdauerverteilung [c] für die TCO-beschichtete Zelle im Übergang zum Hochanregungsfall.



Abbildung 5.27: Anregungsdichteabhängiger Verlauf von effektiver Lebensdauer [a] und Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeit [b] für die TCO-beschichtete Zelle im Übergang zum Hochanregungsfall. Zum Vergleich sind hier die Ergebnisse aus den Anpassungen gemäß aller drei Modelle gezeigt.

5.2.4 Ortsaufgelöste MPL

Bei rechteckförmiger Modulation werden bei konstanter Anregung an der (i)a-Si:Hpassivierten Probe PWH1a einige ortsabhängige Messungen durchgeführt. Die Messung erfolgt in Transmissionsrichtung. Die Probe wird in der Probenhalterung vertikal zur optischen Achse verschoben. Die ortsaufgelösten Amplituden- und Phasenspektren der MPL sind in Abb. 5.28[a],[b] wiedergegeben. Für die Lebensdauern in Abb. 5.28[c] ergibt sich eine recht homogene Verteilung mit einer Standardabwichung von unter 3 μ s.



Abbildung 5.28: Amplitude [a] und Phase [b] für ortsaufgelöste Messung an PWH1a bei rechteckförmiger Modulation mit einem Chopper. Die laterale Variation des Ortes erfolgt in Abständen von $\Delta x = 3$ mm bei konstanter Photonenflussdichte Φ .

Aufgrund des kleinen Anregungsspots sind ebenfalls anregungsdichteabhängige Vergleichsmessungen auf einem Wafer mit teilweiser TCO-Beschichtung möglich. Es erfolgt der Vergleich von MPL auf TCO und unbeschichteten Wafer an Probe PCH2. Die Modulation erfolgt gechoppt bis 800 Hz. In Abb. 5.29 sind der Tangens der spektralen Phase sowie die resultierenden Lebensdauern dargestellt für TCO (blau) und blanken Wafer (rot). Die Messung erfolgte in Reflexionsrichtung. Aus der TCO-Schicht resultieren geringfügig höhere Lebensdauern.



Abbildung 5.29: Ortsaufgelöste und anregungsdichteabhängige Messung für zwei Punkte auf einer Zelle ermöglicht den Vergleich TCO Beschichtung und blankem Wafer. Dargestellt sind hier nur Phasenspektren [a] und die resultierenden effektiven Lebensdauern [b]

Probe PCH2 ist so struktueriert, dass auf dem Wafer mehrere Zellen bestehend aus TCO aufgebracht sind. Der kleine Anregungsspot ermöglicht eine lokale Erfassung von MPL-Spektren auf jeder TCO-Zelle. Für gechoppte Modulation bei konstanter Photonenflussdichte wird diese Messung an einer Reihe von TCO-Zellen durchgeführt. Die Spektren sind in Abb. 5.30 dargestellt. Sämtliche Zellen weisen im Tangens der spektralen Phase die für den Hochanregungsfall charakteristische Krümmung auf. Die Auswertung erfolgt mit dem einfachen Modell. Es ergibt sich eine Standardabweichung von 30 mus.



Abbildung 5.30: Amplituden- [a] und Phasenspektren [b] für TCO-Zellen auf Probe PCH2 bei rechteckförmiger Modulation mit einem Chopper. Daneben sind die resultierenden effektiven Lebensdauern [c] für jede Zelle (bzw. Messpunkt auf der Zelle) dargestellt.

5.2.5 MPL und stationäre kalibrierte Photolumineszenz

Zum Vergleich der bestimmten effektiven Lebensdauern werden parallel Messungen mit der MPL Methode sowie mit der stationären kalibrierten Photolumineszenz Methode an verschiedenen Proben an dem in Kap. 4.2.1 beschriebenen Aufbau durchgeführt. Während mit der MPL im Niederinjektionsfall die Lebensdauer leicht aus der spektralen Phase bestimmt werden kann, ist zumindest für die stationäre kalibrierte Photolumineszenz noch die möglichst exakte Stärke der Generation bzw. der Photonenflussdichte Φ erforderlich. Denn aus der ermittelten Aufspaltung der Quasi-Fermi-Niveaus μ kann auf die Anregungsladungsträgerdichte bestimmt werden, die über $\Delta n = G_0 \tau_{eff}$ mit der effektiven Lebensdauer verknüpft ist (vgl. Kap. 2.1.2). Bei den ersten Messreihen wird versucht, allein den Messaufbau der stationären kalibrierten PL ohne zusätzliches Equipment des MPL-Aufbaus zu nutzen. Es steht eine 670 nm-Laserdiode zur Verfügung. Dieser erzeugt bei 110 mA Diodenstrom eine Photonenflussdichte von $\Phi \approx 4 \ge 10^{18} \text{ cm}^{-2} \text{s}^{-1}$. Die Probe wird justiert und der Aufbau mit dem zur Filterung des Anregungslstrahlung notwendigen Kantenfilter ausgestattet. Um ein deutliches Signal zu bekommen wird das Spektrum mit der 100fachen Verstärkung der Standardeinstellung aufgenommen. Nach Aufnahme des stationären PL-Spektrums wird der Monochromator auf die Wellenlänge des Maximum im Spektrum gefahren. Bei dieser Wellenlänge wird mit Hilfe des dem Monochromator nachgeschalteten Silizium-Detektors bei geringstmöglicher Verstärkung (Verstärkung bedeutet größere Zeitkonstanten im System und somit größeren frequenzabhängigen Offset im MPL-Spektrum) manuell MPL durchgeführt. Die Modulation erfolgt rechteckförmig mit Hilfe des im Versuchsaufbau zur Signaldetektion vorhandenen Chopper. Es kann nur ein Frequenzbereich bis 200 Hz mit dem gegebenen Equipment erfasst werden. Exemplarisch ist hier das Ergebnis der Messung an Probe PWH1a angegeben (vgl. Abb. 5.31). Es fällt auf, dass die berechneten Lebensdauern aus stationärer und modulierter Photolumineszenz um eine Größenordnung abweichen. Ahnliche Beobachtungen werden auch bei anderen Proben gemacht.



Abbildung 5.31: MPL [a] und stationäre kalibrierte PL [b] an PWH1a für Anregung mit $\lambda = 670$ nm.

Für präzisere Vergleichsmessung wird der Versuchsaufbau der stationären kalibrierten Photolumineszenz mit der Photodiode PD2, mit der 785 nm Laserdiode, der dazuhörigen Laserdiodenkontrolleinheit und dem batteriebetriebenen Vorverstärker OP2 erweitert, wie in Kap. 4.2.1 beschrieben. Die MPL erfolgt damit integriert über das durch die Photodiode detektierbare Spektrum. Für zwei Proben in Abb. 5.32 und Abb. 5.33 sind die Ergebnisse gezeigt. Die Auswertung erfolgt im linearen Regime mit dem einfachen Modell. Die Lebensdauern weichen im Fall der Hochanregung in Abb. 5.32 um 19% voneinander ab und in 5.33 um 47 %. Dies sind immer noch starke Abweichungen und durch aus den Variationsspielräumen bei den Fitparametern zur Bestimmung der Quasi Fermi Niveau-Aufspaltung kann keine abschließende Aussage über die Güte der Übereinstimmung getroffen werden. Zur Klärung wären vergleichende mehrere Messungen bei Variation des Photonenflusses erforderlich, insbesondere im Niederanregungsfall, für den zuverlässigere Modelle existieren, als für den Hochanregungsfall. Eine mögliche Ursache ist, dass es erhebliche Abweichungen gibt zwischen MPL-Detektion über einer einzelnen Wellenlänge und über Wellenlängen spektral integrierter MPL. Weiterhin wurde für die stationäre kalibrierte PL ein Silizium-Detektor verwendet, für die integrierte MPL hingegen ein InGaAs-Photodiode. Vergleichsmessungen sollten mit möglichst gleichartigen Detektoren möglichst im Niederanregungsfall erfolgen. Mit der stationären kalibrierten PL könnte auch versucht werden, unter Modulation der Anregung durch Messung von Spektren bei zwei verschiedenen Frequenzen wellenlängenabhängige Phasenspektren aufzunehmen, aus denen dann wellenlängenabhängige Lebensdauern bestimmt werden.



Abbildung 5.32: MPL [a] und stationäre kalibrierte PL [b] an PWH2für höchste Anregungsdichte und auf 10 % abgeschwächte Anregungsdichte.



Abbildung 5.33: MPL [a] und stationäre kalibrierte PL [b] an PWL1a für höchste Anregung

5.2.6 Zeitaufgelöste MPL am Oszilloskop

Mit einem Digitaloszilloskop werden Anregung und PL-Signal der Probe aufgenommen. Bei sinusmodulierter Anregung ergibt sich eine sinusförmige Response, verschoben um die Phasendifferenz $\Delta \phi$, aus der sich nach Gln. 2.50 $\tau_{eff} = -\frac{tan(\Delta \phi)}{\omega}$ ergeben soll. Im Niederanregungsfall gilt diese Beziehung exakt, im Hochanregungsfall wird sie näherungsweise angenommen. Für verschiedene Frequenzen und Anregungen werden an den Proben PWH1a und PWL1a diese Phasenverschiebungen vermessen. Zum Vergleich werden MPL-Spektren aufgenommen.



Abbildung 5.34: Ableitung der Lebensdauer aus der Phasenverschiebung zwischen Anregung (Referenz) und PL-Signal der Probe (SiN pass. c-Si).

5 ERGEBNISSE

Für die Frequenzen $f \in \{35, 85, 340, 470, 995\}$ Hz werden zunächst die Zeitkonstanten des Messaufbaus bestimmt, indem mit der sinusmodulierte Laser auf Photodiode 1 gerichtet wird. Mit dem Oszilloskop werden das Referenzsignal des Funktionsgenerators und das Diodensignal aufgezeichnet und mit der Labview-Messsoftware erfasst. Für die beiden niedrigsten Frequenzen ist das Signal sehr verrauscht, die Gerätezeitkonstanten liegen zwischen 20 und 60 μ s. Zum Vergleich werden mit dem Lock In-Detektor Phasenspektren bis 1000 Hz aufgenommen. Dann werden Messungen bei höchster Anregung ($\Phi = 6.71 \times 10^{19} \text{ cm}^{-2} \text{s}^{-1}$) für die Proben PWH1a und PWL1a (hoch- und niedrigdotiertes Silizium) zunächst zeitaufgelöste Messungen mit dem Digitaloszilloskop und anschließend Lock In-Messungen der Phasenspektren durchgeführt. Für die spektrale Phase ergibt sich eine gute Übereinstimmung (vgl. Abb. 5.35[a] und Abb. 5.36[a]). In Abb. 5.35[b] und Abb. 5.36[b] werden diese Phasenverschiebungen in eine Lebensdauer übersetzt mit Hilfe des einfachen Modells. Hier zeigen sich Abweichungen. Problematisch ist der vorliegende Hochanregungsfall, der durch das einfach Modell nicht mehr korrekt beschrieben werden kann. Dennoch kann eingegrenzt werden, dass je nachdem, welcher Fitbereich für den linearen Tangens gewählt wird, die aus der Steigung resultierende Lebensdauer der spektral dargestellten Lebensdauer entspricht. In Abb. 5.37[a], [b] sind die MPL-Spektren für den Tangens der linearen Phase dargestellt mit Fits in zwei unterschiedlichen Frequenzbereichen dargestellt. Für Fits im nieder- und hochfrequenten Bereich in 5.37[b] ist die spektrale Lebensdauer nach oben und unten in Abb. 5.36[b] gut eingegrenzt. Der Fitbereich in 5.37[a] ist hingegen nicht niedrig genug angesetzt und führt damit zu einer deutlich geringeren Lebensdauer in Abb. 5.35[b]. Diese Messung stützt die den Ansatz, aus dem dispersiven Modell auf Verteilungen von Lebensdauern zu schließen.



Abbildung 5.35: [a] Spektrale Phasen mit MPL und zeitaufgelöster Messung mit einem Digitaloszilloskop sowie [b] spektrale Lebensdauern für die Probe PWH1a.



Abbildung 5.36: [a] Spektrale Phasen mit MPL und zeitaufgelöster Messung mit einem Digitaloszilloskop sowie [b] spektrale Lebensdauern für die Probe PWL1a.



Abbildung 5.37: Tangens der spektralen Phase jeweils mit Fits nach dem einfachen Modell im nieder- und hochfrequenten Bereich für [a] PWH1a. und [b] PWL1a.

5.2.7 Fouriertanalyse zeitabhängiger MPL

Spektrum der modulierten Anregungssignale Aus dem Pratikumsversuch steht eine Messkarte zur zeitaufgelösten Erfassung von Messdaten sowie Analysesoftware zur Fouriertransformation zur Verfügung. Zur Prüfung der Form des Anregungssignals werden gechoppter und sinusmoduliertes Laserstrahl ausreichend mit Neutraldichtefiltern abgeschwächt und mit der Siliziumphotodiode BPX66 erfasst. Das zeitabhängige Signal wird eingelesen und spektralanalysiert. In Abb. 5.38 sind die Resultate dargestellt. Für f = 40 Hz entspricht das Rechtecksingal in Abb. 5.38[a] der erwarteten Form, allerdings weisen die Flanken erkennbar eine endliche Steigung auf. In den Spektren treten neben den aus Fourierentwicklung eines idealen Rechtecksignals (vgl.2.44) erwarteten geraden Harmonischen auch die ungeraden Harmonischen auf, jedoch wesentlich schwächer ausgeprägt. Für f = 700 Hz ist das spektrale Verhalten (vgl. Abb. 5.38[b]) bzgl. des Auftretens von geraden Harmonischen unverändert. Das Signal der Anregung behält bei gechoppter Modulation im Frequenzbereich bis 1000 Hz also seine Form bei und ist diesbezüglich zuverlässig und stabil. Bei den Probenresultaten können spektrale Auffälligkeiten aufgrund entsprechender Änderungen im Anregungssignal damit ausgeschlossen werden. Für hohe und niedriege Frequenzen bleibt das Verhältnis beim Rechtecksignal bei etwa 4 % zwischen erster und zweiter Harmonischer (idealerweise wäre es 0 %) und zwischen erster und dritter Harmonischen bei etwa 30 %. Das durch elektronische Modulation erzeugte Sinussignal, das mit etwa 10% um den stationären Anregungslevel variiert wird ebenfalls spektral untersucht. In Abb. 5.38[c],[d] sind Zeitsignal

5 ERGEBNISSE

und Spektren für f = 140 Hz bzw. 700 Hz gegeben. Die Sinussignale sind erkennbar leicht asymmetrisch. Abweichend von einem idealen Sinussignal tritt eine zweite Harmonische mit etwa 11 - 14 % Amplitude der ersten Harmonischen auf (der Vergleich der beiden Sinussignale stammt jedoch von zwei verschiedenen Messungen jeweils mit Neujustage der Versuchskomponenten). Das Ausgangssignal des Lock In-Funktionsgenerators wird ebenfalls geprüft - es stellt ein nahezu ideales Sinussignal ohne höhere Harmonische dar.



Abbildung 5.38: Rechtecksignal [a][b] mit BPX66 40Hz vs 700Hz und Sinus [c][d] mit 140 Hz und 700Hz
Spektralanalyse an Proben An der p-dotierten $(1 \ \Omega cm)$ Probe PCH2 mit (n)a-Si:H/(i)a-Si:H-Passivierung wird aufgrund des nichtlinearen Spektralverhaltens des Tangens der Phase eine Fouriertransformation für den nieder- und hochfrequenten Bereich bei f = 40 Hz und 700 Hz durchgeführt. Die Anregung wird mit dem Chopper rechteckmoduliert bei einer Photonenflussdichte von $\Phi = 5.6 \text{x} \ 10^{18} \text{ cm}^{-2} \text{s}^{-1}$ (Hochanregung) durchgeführt. Im Bereich kleiner Frequenzen ist das MPL-Signal der Probe noch als Rechtecksignal erkennbar (vgl. 5.39[a]). Die ungeraden Harmonischen dominieren im Spektrum. Im Bereich großer Frequenzen ist das ursprüngliche Rechtecksignal stark verzerrt (vgl. 5.39[b]). Im Spektralbereich sind jeweils zweite und dritte, sowie vierte und fünfte Harmonische gleich stark ausgeprägt. Das Verhältnis von zweiter zu ersten Harmonischen bleibt für 40 Hz und 700 Hz etwa gleich bei 9 %. Der Anteil von dritter an erster Harmonischen beträgt bei 40 Hz noch etwa 31~% (wie beim Anregungssignal s.o.), beträgt bei 700 Hz jedoch nur noch ca. 9~%und ist damit genauso gering wie der Anteil der zweiten Harmonischen. Das Antwortsignal ändert zum höheren Frequenzbereich deutlich seine Form gegenüber dem Ausgangssignal. In diesem Frequenzbereich verläuft auch der Tangens der Phase deutlich flacher. Wie oben ausgeführt, liegt dies nicht am anregenden Signal, dessen Form ist auch bei 700 Hz noch erhalten. Für die Probe reicht die bei hohen Frequenzen kurze Dauer eines Rechteckpulses nicht mehr, einen maximalen stationären Plateauwert einzunehmen - noch während der Anstieges der Ladungsträgerdichte setzt der Rechteckpuls bereits wieder aus. Folglich ist die Anregungsdichte wieder im Abklingen begriffen, doch bevor sich ein stationärer Plateauwert einstellt, folgt bereits die nächste Anregung. In Abb. 5.40[a],[b] sind die Spektren der Analyse für Sinusmodulation bei 40 Hz und 800 Hz dargestellt. Das Signal ist weniger deutlich, da im Gegensatz zur Rechteckmodulation die Amplitude nur 10% der stationären Anregung beträgt. Sowohl für die niedrige Frequenz, als auch die hohe Frequenz ist die zweite Harmonische ausgeprägt. Im ersten Fall entspricht die Amplitude der zweiten Harmonischen etwa 55 % der ersten Harmonischen. Für hohe Frequenzen entspricht die zweite Harmonische nur etwa 28% der ersten Harmonischen.

Insgesamt deutet die Fourieranalyse, die in dieser Form nur bei gut leuchtenden Proben und hohen Anregungen durchführbar ist, auf einen Einfluss der höheren Harmonischen hin. Aufgrund der Gerätezeitkonstanten sowie dem Durchschneiden des Laserstrahl-Querschnitts endlicher Ausdehnung sind keine idealen Rechteck- und Sinussignale möglich und eine gewisse Ausprägung nicht zum Fourierspektrum der theoretischen Idealsignale gehörender Harmonischen ist im Spektrum der realen Anregung erkennbar. Die Verhältnisse zwischen erster und zweiter bzw. dritter Harmonischer bleiben bei den realen Anregungssignalen bei niedrigen und hohen Frequenzen konstant. Bei den Antwortsignalen der Probe variieren diese Verhältnisse jedoch



frequenzabhängig und sind damit probenbedingt.

Abbildung 5.39: PCH2 bei Sinusmodulation [a] 40 Hz und [b] 700 Hz



Abbildung 5.40: PCH2 bei Rechteckmodulation [a] 40 Hz und [b] 700 Hz

MPL-Vergleich für ω und 2ω Die im vorhergehenden Abschnitt mittels Fourieranalyse für hohe Photonenflussdichten ermittelten höheren Harmonischen können ebenfalls mittels Lock In-Technik erfasst werden. Dazu werden an der niedrigdotierten 14 Ω cm Probe PWL1a sowie an der hochdotierten 1 Ω cm Probe PWH1a jeweils Amplituden und Phasenspektren bei hoher Anregung ($\Phi = 6.72 \times 10^{18} \text{ cm}^{-2} \text{s}^{-1}$)

aufgenommen (vgl. Abb. 5.41[a],[b]). Aus dem Tangens der Phasen der ersten Harmonischen werden mit dem einfachen Modell Lebensdauern von $\tau_{eff} = 172$ s für PWL1a und $\tau_{eff} = 185$ s für PWH1a ermittelt. Das Verhältnis der Plateauwerte der Amplituden von erster und zweiter Harmonischen für niedrige Frequenzen ist für PWL1a etwa 30 %, für PWH1a lediglich 5 %. Da die niedrigdotierte PWL1a bzgl. der Anregungsdichte Δn bei gegebener Photonenflussdichte den Dotierlevel N_A sehr viel mehr übertrifft als die hochdotierte PWH1a, ist der Anteil der zweiten Harmonischen bei ihr größer.



Abbildung 5.41: [a] Amplituden und [b] Phasenspektrum der ersten und zweiten Harmonischen für niedrigdotierte PWL1a und hochdotierte PWH1a.

Um das anregungsdichteabhängige Verhalten der zweiten Harmonischen zu untersuchen, werden für Photonenflussdichten $\Phi \in [3.1 \times 10^{17}, 6.72 \times 10^{18}] \text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}$ bei fester Frequenz f = 117 Hz durch Lock In jeweils die Amplituden erfasst. In Abb. 5.42[a],[b] sind für PWL1a und PWH1a die Absolutwerte von von photonenflussdichteabhängiger erster und zeiter Harmonischer aufgetragen. In Abb. 5.42[c] ist jeweils der Anteil der zweiten Harmonischen an der ersten Harmonischen aufgetragen. Die Absolutwerte unterliegen starken Schwankungen. In der Tendenz ist zu erkennen, dass das Verhältnis der Harmonischen für PWL1a ohne Berücksichtigung der Ausreißer für geringe Photonentlussdichten im Mittel bei etwa 20 % liegt, bei PWH1a hingegen bei etwa 15 % und dann im Niederinjektionsbereich auf unter 1 % abfällt.



Abbildung 5.42: Anregungsdichteabhängiger Verlauf der Amplitudenwerte der ersten und zweiten Harmonischen für niedrigdotierte [a] PWL1a und hochdotierte [b] PWH1a. [c] Verhältnis der Amplitude zwischen erster und zweiter Harmonischen.

Diese Messung bestätigt das im vorherigen Abschnitt durch Fourieranalyse gezeigte Auftreten der zweiten Harmonischen bei Hochinjektion und die prinzipielle Durchführbarkeit von MPL für beliebige Harmonische.

5.2.8 Vergleichsmessung Quasi-Statische Photoleitfähigkeit

Mit dem in Kap. 4.2.2 beschriebenen durch das Forschungszentrum Next Energy zur Verfügung gestellten Aufbau werden Messungen mit der Quasi-Statische Photoleitfähigkeit Methode durchgeführt und mit MPL-Ergebnissen verglichen. Als aufgrund ihrer Größe geeignet erweisen sich die hochdotierte Probe PWH1a sowie die niedrigdotierte Probe PWL1a. Die Ergebnisse sind in Abb. 5.43 gezeigt. Bei der QSSPC-Messung werden beide Seiten der Proben einmal bestrahlt, um den symmetrischen Aufbau bzw. die identische Passivierung von Vorder- und Rückseite der

beiden Proben zu verifizieren. Die MPL-Auswertung erfolgt auf Grundlage von injektionsabhängigen Messungen, wobei jeweils die Lebensdauer aus der spektralen Phase mit dem einfachen Modell und mit dem bimolekularen Modell bestimmt werden. In Abb. 5.43[a] scheinen die qualitativen Verläufe der mit beiden Methoden bestimmten Lebensdauern über der Anregungsdichte sich stark zu ähneln. Für die niedrigdotierte Probe in Abb. 5.43[b] wird die mit QSSPC bestimmte effektive Lebensdauer gegenüber der aus MPL bestimmten effektiven Lebensdauer überschätzt. Diese Beobachtung deckt sich mit einer Vergleichsmessung von MPL und QSS in [17]. Dort wird als Ursache vermutet, dass die großflächige Anregung mit infratoter Strahlung eine homogenere Verteilung der angeregten Ladungsträger bei der konduktiven Methode bewirkt. Die MPL Methode hingegen regt nur lokal an, ist sensitiver bzgl. Inhomogenitäten, geht jedoch im Fall des einfachen Modells von einer homogenen Verteilung der Ladungsträger aus.



Abbildung 5.43: Anregungsdichteabhängige Lebensdauern mit MPL und QSSPC bestimmt für [a] hochdotierte PWH1a sowie [b] niedriegdotierte PWL1b.

5.2.9 Strom- und spannungsabhängige MPL

Mit dem in Kap. 4.1.4 beschriebenen erweiterten Versuchsaufbau werden Messungen an der Zelle PCH3 (1 Ω cm n-dotiert mit (p)a-Si:H/(i)a-Si:H-Passivierung) durchgeführt. Der zu vermessende TCO-beschichtete Bereich hat eine Fläche von 0,47 x 0,53 cm². Mit einem Diffusor wird der für die folgenden Messungen zu feine Anregungsspot aufgeweitet, s.d. der kontaktierte Zellbereich vollständig beleuchtet wird. Im Unterschied zu den vorhergehenden MPL-Messungen wird hier also vergleichsweise großflächig angeregt. Mit dem Sourcemeter werden Strom-Spannungs-Kennlinien bei ausgeschalteter Beleuchtung und bei Anregung mit Photonenflussdichten von 7.4 x 10¹⁷ cm⁻²s⁻¹ und 2.5 x 10¹⁷ cm⁻²s⁻¹ für die Probe bestimmt (vgl. 5.44[a]).

Zum Vergleich von mit dem Sourcemeter gemessener Leerlaufspannung V_{oc} und der über die MPL-Lebensdauer bestimmtem $V_{oc,MPL}$ werden für Photonenflussdichten $\Phi \in [1.3 \times 10^{17}, 7.4 \times 10^{17}] \text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}$ Spektren aufgezeichnet und aus dem Tangens der spektralen Phase effektive Lebensdauern für das einfache Modell (Gln. 2.50) bestimmt. Mit Gln. 2.33 wird aus diesen $V_{oc,MPL}$ bestimmt. Zusätzlich werden zur jeder Anregungsdichte die Leerlaufspannung V_{oc} sowie die Kurzschluss-Stromdichte $j(V = 0) = j_{sc}$ gemessen. In Abb. 5.44[b] sind für die Photonenflussdichten V_{oc} und $V_{oc,MPL}(\tau_{eff})$ über der Kurzschlussstromdichte j_{sc} aufgetragen. Abb. 5.44[a] zeigt die Proportionalität von Photonenflussdichte Kurzschlussstromdichte j_{sc} . In Abb. 5.44[b] sind die aus dem Phasenspektrum ermittelten effektiven Lebensdauern anregungsdichteabhängig dargestellt. Für das betrachtete Injektionsregime ist die kann vom Niederanregungsfall ausgegangen werden. Nach Fuyuki [22] ist in der idealen Diodengleichung ein Diodenfaktor m zu berücksichtigen:

$$j(V_a) = j_s \left[\exp\left(\frac{eV_a}{mk_BT}\right) \right] - j_{sc}, \tag{5.1}$$

wobei j_s die Sättigungsstromdichte bezeichnet. Der Diodenfaktor wird aus der Steigung auf Grundlage folgender Herleitung bestimmt:

$$0 = j_s \left[\exp\left(\frac{eV_{oc}}{mk_BT}\right) \right] - j_{sc}$$

$$\Leftrightarrow \qquad . \tag{5.2}$$

$$eV_{oc} = mk_BT \log\left(\frac{j_{sc}}{j_s} + 1\right) \approx mk_BT \log\left(\frac{j_{sc}}{j_s}\right)$$

Für die gemessene Leerlaufspannung ergibt sich ein Diodenqualitätsfaktor von 1.33, für die über MPL ermittelten Leerlaufspannungen ergibt sich hingegen ein Diodenfaktor von 1.16. Im Vergleich zum mit dem Sourcemeter gemessenen V_{oc} sind die aus MPL ermittelten Werte um etwa 0.063 V erhöht.

Um die Diodenkennlinie möglichst fein zu erfassen werden mit MPL für einen möglichst großen Bereich strom- und und spannungsabhängig für eine feste Frequenz Phase sowie Amplitude aufgenommen nach der in Kap. 4.1.2 erläuterten Methode.

Bei einer realen Diode ist außerdem der Serienwiderstand R_s zu berücksichtigen. Dieser wird aus der Steigung der Diodenkennlinie nahe V_{oc} zu $R_s = 21.5\Omega$ bestimmt. Die mit MPL aus der Lebensdauer bestimmten Aufspaltungen der Quasi-Fermi-Niveaus entsprechen nicht der angelegeten Spannung V_a , sondern aufgrund des Serienwiderstandes $V_a - jAR_s$. Zur Überprüfung der Konsistenz wird gemäß $V_a = eV_{oc} + k_BT \log(Y_{PL}(V_a)/Y_{PL}(V_{oc})) + jAR_s$ in Abb. 5.46 aufgetragen.



Abbildung 5.44: [a] Dunkelkennlinien und Hellkennlinien bei Anregung mit $\Phi = 7.4 \ge 10^{17} \text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}$ und 2.5 $\ge 10^{17} \text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}$. [b] Anregungsdichte abhängige effektive Lebensdauern. Der Dotierlevel beträgt $N_D = 1.38 \ge 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. [c] Vergleich von gemessenen Leerlaufspannungen V_{oc} und aus MPL bestimmten $V_{oc,MPL}(\tau_{eff})$ für Photonenflussdichten $\Phi \in [1.3 \ge 10^{17}, 7.4 \ge 10^{17}] \text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}$ über der Photostromdichte j_{ph} . Die Steigung ergibt den Diodenqualitätsfaktor m.



Abbildung 5.45: [a] Spektrale MPL-Amplitude über dem Photonenfluss. [b] Überschussladungsträgerdichte $\Delta n(V_{oc})$ über V_{oc} jeweils gemessen sowie durch MPL bestimmt.



Abbildung 5.46: [a] MPL: aus Phase bestimmte effektive Lebensdauern bei einer Frequenz in Abhängigkeit von V_a sowie [b] spektrale Amplitude in Abhängigkeit von V_a . [c] Diodenkennlinie sowie über MPL-Amplitude und Va

6 Zusammenfassung

Im Rahmen dieser Arbeit wurde für den Niederinjektionsfall zunächst das bisher verwendete einfache Modell (vgl. [1]) mit dem komplexen Modell, welches sich als exakte Lösung der Diffusionsgleichung unter Berücksichtigung von Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeiten in den Randbedingungen ergibt untersucht. Es konnte gezeigt werden, dass für gut passivierte Wafer mit symmetrischer und unsymmetrischer Struktur mit dem einfachen Modell im niederfrequenten Bereich die effektive Lebensdauer gut abgeschätzt werden kann. Abweichungen treten erst bei höheren Frequenzen bzw. schlecht passivierten Oberflächen auf $(S \gg 200 \text{ cm s}^{-1})$. Im Vergleich mit den nichtlinearen Modellen zeigt sich, dass das einfache Modell bzgl. spektraler Amplitude und Phase nur im niederfrequenten Bereich mit diesen konsistent ist. Gegenüber dem quadratischen Modell unterschätzt das einfache Modell im Hochanregungsfall die effektive Lebensdauer. Da das quadratische Modell an sich ein noch näher zu untersuchenden Ansatz darstellt, wäre ein Vergleich mit numerischen Lösungen der nichtlinearen ambipolaren Diffusionsgleichung für Hochanregung aufschlussreicher.

Experimentell wurde zunächst gezeigt, dass Sinusmodulation mit im Verhältnis auf die stationäre Anregung kleiner Amplitude ($G_0 = 10 \times G_1$) gleichwertig zur Messung mit Rechteckmodulation mit dem Chopper bei einem Verhältnis von Amplitude zur stationären Anregung gemäß $G_1 = \frac{G_0}{2}$ ist, die Messungen im betrachteten Spektralbereich also nahezu amplitudenunabhängig sind. Allerdings hat sich ergeben, dass die in der Literatur hergeleitete Theorie (vgl. u.a. [6]) bzgl. der spektralen Amplitude bei Rechteckmodulation zumindest bei den in dieser Arbeit betrachteten Proben nicht gilt, sondern besser durch das Modell der spektralen Amplitude der Sinusmodulation beschrieben wird.

Für MPL-Messungen in Reflexions- und Transmissionsrichtung wurde ein gute Übereinstimmung zwischen Messungen auf der beleuchteten und auf der unbeleuchteten Seite für symmetrische Wafer gezeigt. Im für die Ermittlung der Lebensdauer betrachteten Frequenzregime konnten keine nicht auf Signalschwankungen bei niedriger Anregung zurückführbare Richtungsabhängigkeit festgestellt werden. Die Vernachlässigung der Richtungsabhängigkeit der PL-Detektion in den Modellen erscheint also gerechtfertigt.

Bei der anregungsdichteabhängigen MPL wurde gezeigt, dass die untersuchten linearen und nichtlinearen Modelle die spektrale Variation für Nieder- und Hochanregungsfall sehr gut zu beschreiben vermögen. Die mit den unterschiedlichen Modellen ermittelten Lebensdauern weisen anregungsdichteabhängig einen ähnlichen Verlauf auf. Das quadratische Modell überschätzt gegenüber den übrigen Modellen im Hochanregungsfall die Lebensdauer. Lediglich die unsymmetrisch strukturierte TCO-beschichtete Zelle PCH2 fällt aus dem Rahmen, denn sie zeigt auch im Niederinjektionsbereich deutlich einen nichtlinearen Verlauf des Tangens der spektralen Phase. Hier greift auch die exakte Lösung der Diffusionsgleichung für die erste Harmonische mit unsymmetrischen Oberflächen zu kurz und neue Modelle sind evtl. erforderlich.

Als weitere Einsatzmöglichkeit wurde gezeigt, dass MPL für ortsaufgelöste Messun-

gen geeignet ist und die ortsabhängige Variation der Wafer- bzw. Zellenbeschichtung in Hinblick auf eine Variation der Lebensdauer aufzulösen vermag.

Der Vergleich von MPL mit stationärer kalibrierter PL zeigt bzgl. der bestimmten effektiven Lebensdauer in einigen Messungen Übereinstimmung, jedoch auch erhebliche Abweichungen. Für einen zuverlässigen Vergleich sollten unter identischen Messbedingungen, am besten kombinierter MPL und stationärer kalibrierter PL mit dem gleichen Anregungslaser, Messungen mit gleichartigen Detektoren durchgeführt werden (bei kal. PL InGaAs statt Silizium-Detektor). Außerdem wäre eine wellenlängenabhängige Phasenmessung interessant, die mit der kal. PL unter Modulation der Anregung durch zwei Messungen bei unterschiedlichen Frequenzen erfolgen könnte.

Durch zeitaufgelösten MPL mit dem Oszilloskop konnten die Ergebnisse der MPL im Hochanregungsfall nachgeprüft und bestätigt werden. Die zeitaufgelöst detektierten Phasenverschienungen stimmen mit den entsprechenden Werten im MPL-Spektrum sehr gut überein. Die frequenzaufgelöste Darstellung der Lebensdauer deutet auf eine Frequenzabhängigkeit im Hochanregungsfall hin. In weiteren Untersuchungen wäre zu klären, ob z.B. das einfache Modell daraus eine mit anderen Messungen konsistente Lebensdauer ableiten kann.

Mit Fourieranalyse konnten Geräteeffekte in den spektralen Auffälligkeiten der Proben ausgeschlossen werden. Weiterhin wurde das Auftreten höherer Harmonischer im Hochanregungsfall gezeigt. Durch MPL-Messung der zweiten Harmonischen konnte deren Auftreten ebenfalls detektiert werden. Weitergehende Untersuchungen zum Einfluss höherer Harmonischer bei Hochinjektion erscheinen sinnvoll.

Mittels strom- und spannungsabhängiger MPL an einer Zelle sind Strom-Spannungs-Charakteristiken erstellt worden. Es wurden direkt gemessenes V_{oc} mit via MPLdetektierter Lebensdauer ermittelten $V_{oc,MPL}$ verglichen. Während bestätigt wurde, dass der Logarithmus der Anregungsdichte über $V_{oc,MPL}$ ebenfalls mit $(k_BT)^{-1}$ variiert, wird V_{oc} durch MPL jedoch überschätzt. Eine mögliche Überschätzung von $V_{oc,MPL}$ gegenüber V_{oc} sollte in weiteren Messungen geklärt werden.

Literatur

- R. BRÜGGEMANN, S. REYNOLDS: Modulated photoluminescence studies for lifetime determination in amorphous-silicon passivated crystalline-silicon wafers, Journal of Non-Crystalline Solids 352, 1888 - 1891 (2006)
- [2] D. K. SCHRODER: Semiconductor Material and Device Characterization. Third Edition. Wiley-Interscience/IEEE, New York, (2006).
- [3] W. SHOCKLEY, W. T. READ, JR.: Statistics of the Recombinations of Holes and Electrons. Phys. Rev.87(5), 835–842 (1952)
- [4] R.N. HALL: Electron-Hole Recombination in Germanium. Phys. Rev.87(2), 387–387 (1952)
- [5] T. TRUPKE, M. A. GREEN, P. WÜRFEL, P. P. ALTERMATT, A. WANG, J. ZHAO, R. CORKISH: Temperature dependence of the radiative recombination coefficient of intrinsic crystalline silicon. J. Appl. Phys. 94(8), 4930-4937 (2003).
- [6] S. M. RYWKIN: Photoelektrische Erscheinungen in Halbleitern. Akademie Verlag, Berlin (1965).
- [7] C. BOTTA, S. LUZZATI, R TUBINO, D. D. C. BRADLEY, R. H. FRIEND: Photoinduced absorption of polymer solutions. Phys. Rev. B. 48(20), 14809 (1993).
- [8] M. ORGERET, J. BOUCHER: Cratérisation d'un substrat semiconducteur par technique micro-onde et injection photonique. Revue de Physique Aplliquée 13(1), 29-37 (1978).
- [9] F. SANII, F. P. GILES, R- J- SCHWARTZ, J. L. GRAY: Contactless nondestructive measurement of bulk and surface recombination using frequency-modulated free carrier absorption. Solid-State Electronics 35 (3), 311-317 (1991)
- [10] D. GUIDOTTI, J. S. BATCHELDER, A. FINKEL, J. A. VAN VECHTEN: Firstovertone response in modulated photoluminescence emission in silicon at room temperature. Phys. Rev. B 38 (2), 1569-1572 (1988)
- [11] D. GUIDOTTI, J. S. BATCHELDER, A. FINKEL, P.D. GERBER, J. A. VAN VECHTEN: Modelling of luminescence phase delay for nondestructive characterization of Si wafers. J. Appl. Phys. 66 (6), 2542-2553 (1989)

- [12] D. W. DAVIDSON, R. H. COLE: Dielectric Relaxation in Glycerol, Propylene Glycol, and n-Propanol^{*}. J. Chem. Phys. **19** (12), 1484 - 1490 (1951)
- [13] R. FUOSS, J. G. KIRKWOOD: Electrical Properties of Solids. VIII. Dipole Moments in Polyvinyl Chloride-Diphenyl Systems*. J. Am. Chem. Soc. 63 (2), 385-394 (1941)
- [14] M. J. KERR, A. CUEVAS: Recombination at the interface between silicon and stochiometric plasma silicon nitride. Semicond. Sci. Technol. 17 166-172 (2002)
- [15] S. OLIBET, E. VALLAT-SAUVAIN, C. BALLIF: Model for a-Si:H/c-Si interface recombination based on the amphoteric nature of silicon dangling bonds. Phys. Rev. B 76 035326 (2007)
- [16] C. LEENDERTZ, R. STANGL, T. F. SCHULZE, M. SCHMIDT, L. KORTE: A recombination model for a-Si:H/c-Si heterostructures. Phys. Status Solidi C 7 (3-4) 1005-1010 (2010)
- [17] R. CHOUFFOT, A. BREZARD-OUDOT, J.-P. KLEIDER, R. BRÜGGEMANN, M. LABRUNE C , P. ROCA I CABARROCAS, P.-J. RIBEYRON: Modulated photoluminescence as an effective lifetime measurement method: Application to a-Si:H/c-Si heterojunction solar cells. Materials Science and Engineering B 159-160, 186-189 (2009)
- [18] H. NAGEL, C. BERGE, A.G. ABERLE: Generalized analysis of quasi-steadystate and quasi-transient measurements of carrier lifetimes in semiconductors.
 J. Appl. Phys. 86(11), 6218-6221 (1999).
- [19] R.A. SINTON, A. CUEVAS: Contactless determination of current-voltage characteristics and minority-carrier lifetimes in semiconductors from quasi-steadystate photoconductance data. Appl. Phys. Lett. 69(17), 2510-2512 (1996).
- [20] O. EPSHTEIN, G. NAKHMANOVICH, Y. EICHEN, E. EHRENFREUND: Dispersive dynamics of photoexcitations in conjugated polymers measured by photomodulation spectroscopy. Phys. Rev. B 63 (12), 125206 (2001)
- [21] J. A. GIESECKE, M. C. SCHUBERT, D. WALTER, W. WARTA: Minority carrier lifetime in silicon wafers from quasi-steady-state photoluminescence. Appl. Phys. Lett. 97 (9), 092109-1 - 092109-3 (2010) XX
- [22] TAKASHI FUYUKI, HAYATO KONDO, YASUE KAJI, AKIYOSHI OGANE, YU TAKAHASHI: Analytic findings in the electroluminescence characterization of crystalline silicon solar cells. J. Appl. Phys. 101 023711 (2007)