

Computer simulation of photoconductivity in hydrogenated amorphous silicon thin films

Sh.Chadraabal¹, P.Altantsog², G.Batdemberel¹, T.Bayaraa², L.Khenmedeh¹,
M.Tserenchimed² and L.Oyunbileg²

¹School of Material Technology, Mongolian University of Science and Technology,
Ulaanbaatar, Mongolia, email: shchadraa@yahoo.com

²Institute of Physics and Technology, Mongolian Academy of Sciences,
Ulaanbaatar, Mongolia, email: bayaraa@ipt.ac.mn

Abstract: We used a computer simulation for photoconductivity as a function of temperature in a-Si:H thin films. Utilizing a two level model for photoconductivity, calculated stationary photoconductivity values in a wide range of temperature. The nonlinear differential equations system [1] was solved numerically by iteration technique. For the mobility edge of a-Si:H films, we assumed a model with two level dangling bond centers in the mobility gap.

It was shown, that the computer modeling results describe well influences of such parameters, as exciting light intensities, capture coefficients for electrons and holes and state densities of dangling bond center levels on behavior of temperature dependence curves of photoconductivity in a-Si:H films.

Key Word: a-Si:H, photoconductivity, dangling bond

INTRODUCTION

A hydrogenated amorphous silicon (a-Si:H) thin film is one of the most suitable semiconductors for producing of solar cells. Consequently, it is of fundamental and practical importance to determine the photoelectrical properties of a-Si:H thin films in dependence of technological parameters of deposition and to give a detailed explanation of the a-Si:H mobility edge, the structure, the nature and energy positions of localized states in it.

We have done investigation by means of measuring and computer simulating of temperature dependences of photoconductivity in a-Si:H. The main purpose of our study was determination of some parameters of a-Si:H by fitting of the calculated $\sigma(T)$ curves, obtained on the basis of modeling with the experimental ones.

THE MODEL

We have considered two level – model with the energy positions E_1 and E_2 from all exited states in a-Si:H and assumed that the state-2 generate and also capture electrons but the state-1 generate electrons only.

It can be expressed the non-equilibrium concentration of the charge carriers by next differential equation [1].

$$\begin{aligned}\frac{d\delta n_i}{dt} &= G - a_i \delta n_i - b_i \delta p_i, \\ \frac{d\delta p_i}{dt} &= G - c_i \delta p_i - d_i \delta n_i\end{aligned}\quad (1)$$

Where

$$a_i = \alpha_{n,i} (N_{i,i}^o + n_{o,i} + n_{1,i} + \delta n_i),$$

$$b_i = -\alpha_{n,i} (n_{o,i} + n_{1,i} + \delta n_i),$$

$$c_i = \alpha_{p,i} (N_{i,i}^o + p_{o,i} + p_{1,i} + \delta p_i),$$

$$d_i = -\alpha_{p,i} (p_{o,i} + p_{1,i} + \delta p_i)$$

with $i = 1, 2$ for states.

$N_{i,i}$ - total concentration of states, G_i - excitation intensity.

$n_{o,i}, p_{o,i}$ - equilibrium concentrations of electrons and holes

$n_{1,i}, p_{1,i}$ - non-equilibrium concentrations of electrons and holes

$\alpha_{n,i}, \alpha_{p,i}$ - electron and hole capture coefficients.

The values a_i, b_i, c_i and d_i depend on δn_i and δp_i and the equation system is nonlinear.

If the conditions $\delta n \ll n_o + n_1$, $\delta p \ll p_o + p_1$ were not taken into consideration, so the equation (1) is non-linear.

We solved this equation directly for stationary case, e.a $d\delta n/dt = 0$, $d\delta p/dt = 0$, using iteration method.

In another words, the calculation begins by selecting the values $n(0)$ and $p(0)$. Then, substitution of these values in equation (1) give with the solving of (1) the next values $n(1)$ and $p(1)$ and so on [2].

This procedure is continued till that the next condition will be fulfilled:

$$\left| \frac{n(k) - n(k+1)}{n(k)} \right| < \varepsilon$$

$$\left| \frac{p(k) - p(k+1)}{p(k)} \right| < \varepsilon$$

In our case, $\varepsilon = 0.0001$.

In a-Si:H the main charge carrier is an electron and photoconductivity is given as:

$$\sigma(T) = e(\mu_n \delta n + \mu_p \delta p)$$

where, μ_n - electron mobility, μ_p - hole mobility and e - electron charge.

The calculation accomplished in the temperature range between 100K and 1000K. By changing the following parameters: $G = 2 \cdot 10^9 - 10^{12} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$, $N_t = 10^{14} - 5 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, $E_1 = 0.6 - 0.9 \text{ eV}$, $E_2 = 0.9 - 1.1 \text{ eV}$ and capture coefficients for electrons and holes, we can be fitting the calculated curve to measured. Than we found the parameters N_t, E_1, G from the one of best fitting curve.

While the correlation coefficient of fitted and measured curves was greater than 0.95, it shown us, the fitting was satisfactory.

EXPERIMENTAL

Experimental measurements made on the undoped a-Si:H samples obtained by decomposition of 10% $\text{SiH}_4 + 90\% \text{H}_2$ gas mixtures in RF glow discharge plasma. a-Si:H layers with $0.6 \pm 0.7 \mu\text{m}$ thickness were deposited on quartz glass substrates at substrate temperature $T = 343 \text{ K}$. Nichrome contacts were formed on the film surface. Measurements were made at electric field of 12 V/cm .

The measured sample was firstly degraded by illuminating with 40 W wolfram lamp light passed through a heat filter during 30 minutes and then was heated at 387°K temperature during 10 minutes. After that the temperature

dependence curves of photoconductivity were measured for two illumination levels:

One (for curve 1) is two times higher than the other one (for curve 2). All these experimental procedures were made in a vacuum cryostat with pressure of 10 Torr.

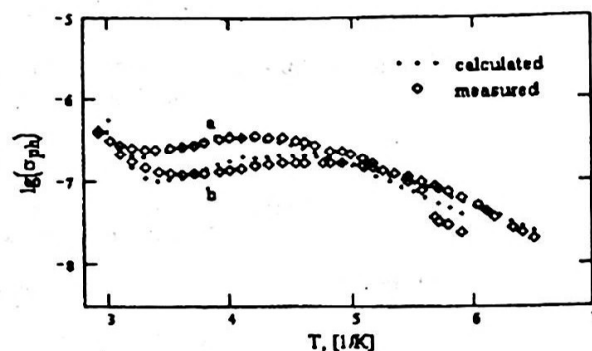


Figure 1. The experimental and fitted temperature dependent photoconductivity curves of a-Si:H film for two illumination levels (curve 1 and 2), a-I=10 mA, b-I=20 mA.

RESULT

By using the least of square method, fitted the calculated $\sigma(T)$ -curves to measured curves. The results are shown in Figure 1 and the obtained values of some parameters of the undoped a-Si:H sample are presented in Table 1.

Curve	E_1, eV	E_2, eV	N_{t1}, cm^{-3}	N_{t2}, cm^{-3}	$G, \text{cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$
a	0.6	0.9	$6 \cdot 10^{15}$	$5 \cdot 10^{14}$	$2 \cdot 10^{10}$
b	0.6	0.9	$6 \cdot 10^{15}$	$1 \cdot 10^{16}$	$6 \cdot 10^{11}$

Table 1. Obtained values from fitting

It can be seen from the Table 1, that the evaluated values of the parameters of the sample are reasonable for undoped a-Si:H films. Therefore, we can conclude that our model based on the general photoconductivity equations and two level silicon dangling bond states in mobility gap of a-Si:H films should describe good temperature dependence features of photoconductivity in undoped a-Si:H films.

REFERENCE

- [1] V.L.Bonch-Bruevich and S.G.Kalashnikov, Physics of Semiconductors, Nauka, Moscow, 1997 (in Russian), 307-311.
- [2] T.Bayaraa, P.Altantsog, L.Khenmedekh, G.Batdemberel, L.Oyunbileg, M.Tserenchimed and Sh.Chadraabal, Numerical simulation of photoconductivity in a-Si:H films, Renewable Energy & engineering, 4, 2004, 33-34.

Турмалин кристаллын бүтэц

Г.Буянцэцэг, Ш.Мөнхжаргал, Ч.Баярхүү, Л.Ням-Очир, Д.Отгонбаяр

МУИС, Физик Электроникийн сургууль,
Онол Туршилагын Физикийн тэнхим

Товч: Бид энэ ажлаараа турмалин кристаллын 2 дээж авч харьцуулан кристалл бүтцийг рентген бүтцийн аргаар судалсан. Судалгааны үр дүнгээс турмалины кристаллын агуулгыг тодорхойлж бүтцийг дүрслэв. Туршилтаар турмалин кристалл байгаль дээр туйлширсан бүтэцтэй болох нь батлагдав.

1. ОРШИЛ

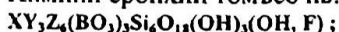
Бидний энэ ажилд турмалин кристаллын бүтцийг судлав. Турмалин бол боросиликат бүлгийн минерал ба ферроэлектрик ба фезоэлектрик гэсэн өвөрмөц шинж чанарыг үзүүлдэг юм.



Зураг.1 Турмалины кристалл

Үүнийг саяхныг болтол үнэт чулуу гэж үзэж байсан, хэдий тиймч орчин үед, түүний олон төрлийн хэрэглээ, цахилгаан шинж чанарыг шинээр нээж байна [1]. Энэ кристалл цахилгаан үйлдвэрлэх шинж чанартай. Тиймээс ч “электрон чулуу” гэж ч хэлдэг. Турмалин нь байнгын электрон шинж чанартай цорын ганц эрдэс юм [2]. 1986 оны үед Японы судалгаагаар, турмалин нь жижиг хэсгүүдэд хуваагдсан ч талстын аль ч төгсгөлд зэрэг сөрөг электрод оршин байдаг бөгөөд, 1000⁰-д буцалгах хүртэл алга болдоггүй байна. Турмалин нь амьтан ургамлын метаболизмыг идэвхжүүлдэг нь судлагдаж ирсэн [3]. Турмалин гэдэг нь байгалийн силикат эрдэсийн бүлгийн нэр юм.

Химийн ерөнхий томъёо нь:



X=Na, Ca, K;

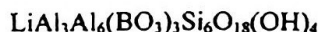
Y=Mg, Fe, Mn, Li, Cr⁺³, V⁺³, Ti, Al;

Z=Al, Mg, Fe, V⁺³, Cr⁺³.

Хамгийн түгээмэл турмалинууд:

Elbaite	$Na(Li, Al)_3Al_6(BO_3)_3Si_6O_{18}(OH)_4$
Dravite	$NaMg_3(Al, Fe)_6(BO_3)_3Si_6O_{18}(OH)_4$
Schorl	$NaFe_3(Al, Fe)_6(BO_3)_3Si_6O_{18}(OH)_4$
Uvite	$Ca(Mg, Fe)_3Al_5Mg(BO_3)_3Si_6O_{18}(OH)_4$
Buergerite	$NaFe_3Al_6(BO_3)_3Si_6O_{18}(OH)_3F$
Foite	$Na(Fe, Al)_3Al_6(BO_3)_3Si_6O_{18}(OH)_4$
Liddicoatite	$Ca(Li, Al)_3Al_6(BO_3)_3Si_6O_{18}(OH, F)_4$

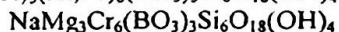
Rossmannite



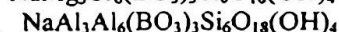
Feruvite



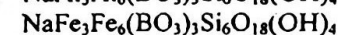
Chromdravite



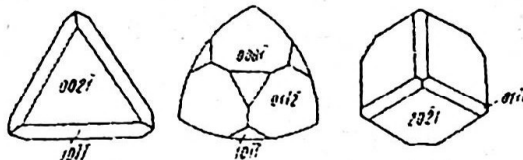
Olenite



Povondravite



Турмалин кристалл паралель группд харагддаг (ургахдаа), ба ромбохедрал (тригональ) кристалл бүтэцтэй огторгуйн групп нь $R3m$ [6]. Талст хэлбэр нь (3m) бүтэцтэй ромбохедрал торон бүтэцтэй. Ихэнхдээ ромбохедрал системийн талстууд нь гексагональ кристалл торыг агуулж байдаг. Ромбохедрал гексагональ бүтцийн өөрчлөлтний нарийвчилсан мэдээлэл өгөгдсөн. Энэ нь давхар пирамид буюу тэгш хэмт талстад тооцогддог [4].



Зураг.2 Турмалины кристаллын хабитс

It cleaves very poorly on planes {1120} and {1011}. Tourmaline varies in colour from transparent to opaque as in black schorl [4].

2. X-RAY ДИФРАКТОМЕТР D500

SIEMENS D500 рентген диффрактометр бүрэн компьютержсэн, олон төрлийн мэдээлэлийг боловсруулж, шинжилгээ хийлэг MDI программ ашигладаг. Программ нь хайлт, тохируулга, алгоритм, тоон анализ, дүрс тохируулагч, XRD-ийн шинж чанарыг тооцоолох зэрэг үр дүн болон ойролцоо талстын мэдээлэл ба кристаллын хэмжээг агуулдаг.

3. ТУРШИЛТЫН ҮР ДҮН

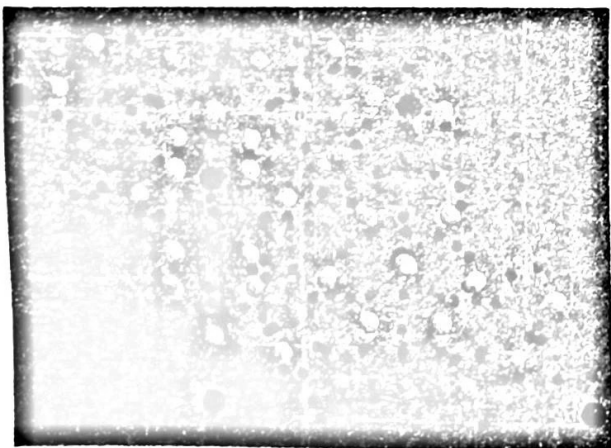
Our samples of tourmaline were measured on and on D500 siemens diffractometer.

Турмалины бүтцийн параметруудийг доор үзүүлэв.

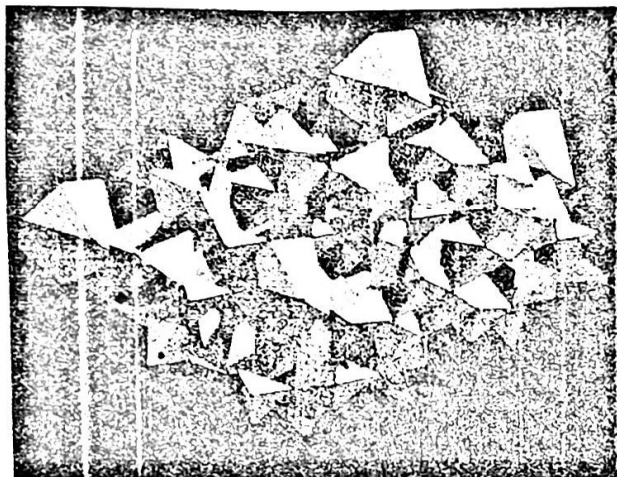
Бүтцийн хэлбэр	Гексагонал
Кристаллын өгөгдөл	
Огторгуйн групп Хэмжээсүүд	$R\bar{3}m$ (no. 160) $a = 15.9510 \text{ \AA}$ $c = 7.2400 \text{ \AA}$
Wyckoff sequence	$c^5b^6a^2$ $\alpha = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$ $Z = 3$

Атомуудын координат [7]

Atom	Wyck.	x	y	z
X	3a	0	0	0.8408
Y	9b	0.06148	0.93852	0.4269
Z	18c	0.26126	0.29749	0.4534
Si	18c	0.18986	0.19175	0.0640
B	9b	0.8904	0.1096	0.6113
H	9b	0.1264	0.8736	0.6876
O(1)	3a	0	0	0.2929
O(2)	9b	0.93958	0.06042	0.5795
O(3)	18c	0.13052	0.86948	0.5538
O(4)	9b	0.90697	0.09303	-0.0087
O(5)	9b	0.09146	0.90854	-0.0292
O(6)	18c	0.18417	0.19430	0.2874
O(7)	18c	0.28499	0.28554	-0.0137
O(8)	18c	0.26962	0.20899	0.6249



Зураг. 3а Турмалины атомууд



Зураг. 3б Турмалины кристаллжилт

4. ШҮҮН ХЭЛЭЛЦЭХҮЙ

Турмалины кристалл бүтцийг судлан атомын холбоосын урт, агуулагдаж байгаа элементүүдийн байршилыг тодорхойлсон байдаг. Верделит турмалиныг гамма-резонансаар судалж, төмрийн ионууд нь тодорхой зайд шилжсэн байдагч, түүний кристалл бүтцэд ямарч өөрчлөлт гардаггүй нь тогтоогдсон. Налуу гадаргуу маш бага тул талстын гадаад байдалд нөлөөлдөггүй, босоо бүслүүр хэлбэрүүд үүссэнээр гадаад байдлаар нь салгаж ангилах боломжтой болдог. Энэ нь Гексагональ-призм, тригональ-призм, ба цилиндр гэх мэт. Бидний судалсан хоёр дээж гексагональ-призмд талсжсан. Турмалины бүтцийн рентген судалгаа нь урьд нь хийгдэж байгаагүй тул бидний үр дүн хязгаарлагдмал тооны турмалины мэдээлэлтэй харьцуулагдсан. Үндсэн холбоонууд дээр үндэслэн бид агуулагдаж байгаа элементүүдийн координатыг тодорхойлсон дүнг туршилтын үр дүнгүүдтэй харьцуулсан. Бид Na-Fe-Al, B-O-Si, ба Al-O-B [7] гэсэн үндсэн холбоосууд болон туршилтын үр дүнд тулгуурлан турмалины кристаллын кристалл бүтцийг 4-р зурагт дүрслэн үзүүлэв.