

ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ ГРАФЕНА НА КРЕМНИИ ПРИ ОБЛУЧЕНИИ СОЛНЕЧНЫМ СВЕТОМ

А. Г. Трафименко, А. Л. Данилюк

*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,
ул. П. Бровки, 6, 220013, Минск, Беларусь, e-mail: evdokimovithi@gmail.com*

Представлены результаты моделирования электрофизических параметров графена на кремнии *n*-типа при облучении солнечным светом: электрохимический потенциал, концентрация дырок, квантовая емкость. Показано, что электрохимический потенциал дырок в графене составляет 0.3–0.4 эВ, концентрация дырок в графене возрастает до 10^{13} см^{-2} , а его квантовая емкость составляет 9–14 мкФ/см². Получены закономерности влияния работы выхода графена и концентрации доноров в кремнии на электрофизические параметры графена.

Ключевые слова: графен; кремний; электрохимический потенциал; напряжение холостого хода; квантовая емкость; солнечный свет.

ELECTROPHYSICAL PARAMETERS OF GRAPHENE ON SILICON UNDER SUNLIGHT IRRADIATION

A. G. Trafimenko, A. L. Danilyuk

*Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics,
Str. P. Brovki, 6, 220013, Minsk, Belarus,
Corresponding author: A. G. Trafimenko (evdokimovithi@gmail.com)*

The results of simulation of the electrophysical parameters of graphene (electrochemical potential, holes concentration, quantum capacity) on *n*-type silicon under sunlight irradiation are presented. The electrochemical potential of holes in graphene is shown to be 0.3–0.4 eV, the holes concentration increases up to 10^{13} cm^{-2} , and the quantum capacity of graphene is 9–14 $\mu\text{F/cm}^2$. The regularities of the influence of the work function of graphene and the donor concentration in silicon on the electrophysical parameters of graphene have been established.

Key words: graphen; silicon; electrochemical potential; open circuit voltage; quantum capacitance; sunlight.

ВВЕДЕНИЕ

Гетероструктуры графен/кремний представляют интерес для создания приборов фотовольтаики: фотодетекторов, солнечных элементов [1, 2]. В фотодетекторах графен используется не только как прозрачный контактный материал, но и как проводящий канал, повышающих чувствительность [3, 4]. Функционирование графеновых транзисторов достаточно подробно исследовано и разработаны соответствующие модели [5]. Менее разработаны вопросы, связанные с электропроводностью графена, находящегося на легированном кремнии. В этом случае из-за непосредственного контакта графена с полупроводником происходит возникновение барьера Шоттки и изменение электрофизических параметров графена в зависимости от типа проводи-

мости кремния и работы выхода графена. При этом меняется электрохимический потенциал графена, концентрации электронов и дырок, квантовая емкость, что оказывает влияние на токоперенос в графене.

Для моделирования характеристик фотодетекторов возникает необходимость исследовать влияние свойств кремния, на поверхности которого находится графен, на изменения электрофизических параметров графена. В данной работе рассмотрена гетероструктура графен/кремний *n*-типа при комнатной температуре при солнечном облучении и определены закономерности влияния параметров кремния (концентрации донорной примеси), а также работы выхода графена на концентрацию носителей заряда в графене, его электрохимический потенциал, квантовую емкость.

МОДЕЛЬ

Концентрация электронов n_e , дырок n_h и квантовая емкость C_Q графена определяются в виде [5]:

$$n_e(\mu) = \int_0^{+\infty} g_{2D}(\varepsilon) f(\varepsilon - \zeta - U) d\varepsilon, \quad (1)$$

$$n_h(\mu) = \int_{-\infty}^0 g_{2D}(\varepsilon) [1 - f(\varepsilon - \zeta - U)] d\varepsilon, \quad (2)$$

$$C_Q = q \partial(n_e - n_h) / \partial \mu, \quad (3)$$

где g_{2D} – плотность состояний графена, ζ – не зависящий от заряда химический потенциал графена, $U = -q\phi$ – электростатическая энергия, ϕ – электростатический потенциал, q – элементарный заряд.

Гетероструктура графен/кремний характеризуется наличием барьера Шоттки, возникающего в кремнии из-за разности работ выхода этих материалов. При облучении светом, возникают разность электрохимических потенциалов для электронов и дырок. Для кремния *n*-типа в его обедненном слое электрохимический потенциал электронов практически равен его химическому потенциалу в объеме, а для дырок сдвигается на величину разности потенциалов, обусловленной освещением. При отсутствии тока в гетероструктуре его величина соответствует напряжению холостого хода V_{oc} (open circuit voltage). Для нахождения V_{oc} рассмотрим гетероструктуру при равенстве нулю суммарного тока электронов и дырок при освещении $J = J_n + J_p = 0$ [6]:

$$J = q(n_0 + \Delta n)\mu_n E_g + q\Delta n\mu_n E_b + qD_n \frac{d\Delta n}{dx} + \\ + q(p_0 + \Delta p)\mu_p E_g + q\Delta p\mu_p E_b - qD_p \frac{d\Delta p}{dx} = 0, \quad (4)$$

где n_0, p_0 – равновесные концентрации электронов и дырок, $\Delta n, \Delta p$ – концентрации неравновесных электронов и дырок, E_b, E_g – напряженность электрического поля в кремнии, создаваемая равновесным и неравновесным распределением носителей заряда, μ_n, μ_p – подвижности электронов и дырок в кремнии, D_n, D_p – коэффициенты диффузии электронов и дырок в кремнии. В этом случае из уравнений непрерывности для стационарного случая следует, что $\Delta n = (\tau_n / \tau_p) \Delta p$ [6]. Здесь τ_n, τ_p – время жизни электронов и дырок. В этом случае величина V_{oc} определяется путем интегрирования $E_g(x)$ по толщине кремния L .

Для обедненного слоя при учете только поверхностной рекомбинации неравновесных носителей заряда, что справедливо при условии меньшей протяженности обедненного слоя W по сравнению с длиной диффузии дырок L_p , уравнения непрерывности могут быть проинтегрированы. Исключая из полученных уравнений величину E_g и преобразуя, получим уравнение для расчета распределения неравновесных дырок в обедненном слое кремния

$$D_p \frac{d\Delta p}{dx} \left(n_0 + \frac{\tau_n}{\tau_p} (p_0 + 2\Delta p) \right) + \mu_p \Delta p E_b(x) \left(n_0 - \frac{\tau_n}{\tau_p} p_0 \right) = \left(n_0 + \frac{\tau_n}{\tau_p} \Delta p \right) \left(\int_0^x G(x) dx + J_p(0) \right) + \left(\frac{\mu_n}{\mu_p} (p_0 + \Delta p) \right) \left(\int_0^x G(x) dx - J_n(0) \right), \quad (5)$$

где $G(x)$ – темп генерации электронно-дырочных пар, $J_n(0)$, $J_p(0)$ – плотности токов электронов и дырок на поверхности кремния при $x = 0$.

В нейтральной области кремния ($W < x < L$) существует только электрическое поле $E_g(x)$, связанное с генерацией электронно-дырочных пар при освещении. В этом случае определяя из уравнения (4) $E_g(x)$ и подставляя его в уравнение непрерывности для дырок в нейтральной области, получаем уравнение для расчета распределения дырок в ней при условии, что $N_d \gg \Delta n$, Δp :

$$G(x) - (\Delta p / \tau_p) - \mu_p D' (\partial \Delta p / \partial x)^2 - (\mu_p D' \Delta p - D_p) (\partial^2 \Delta p / \partial x^2) = 0, \quad (6)$$

где $D' = [D_p - D_n (\tau_n / \tau_p)] / \mu_n N_d$.

Для определения V_{oc} находим распределения дырок в обедненном и нейтральном слоях кремния и сшиваем их на границе при $x = W$, используя условия непрерывности концентрации и первых производных для дырок, а также граничные условия при $x=0$ и $x=L$: $J_p(0) = q S_p \Delta p(0)$, $\Delta p(L) = 0$. Здесь S_p – скорость поверхностной рекомбинации при $x=0$. Темп генерации электронно-дырочных пар:

$$G(x) = G_0 \exp(-\alpha x), \quad (7)$$

где G_0 – множитель, зависящий от плотности мощности и коэффициента отражения солнечного света, α – коэффициент поглощения, зависящий от длины волны излучения. Величина электростатического потенциала ϕ , входящего в уравнения (1) и (2), определяем как часть напряжения холостого хода, приходящаяся на обедненный слой кремния.

Распределение потенциала, напряженности электрического поля и концентрации равновесных электронов и дырок в обедненном слое определяем численно с помощью известной модели [7]

$$E_b(x) = -(\partial \phi / \partial x) = \pm (\sqrt{2} kT / q L_D) F(\phi) \quad (8)$$

где $L_D = (kT \epsilon_0 / q N_d)^{1/2}$ – дебаевская длина, k – постоянная Больцмана, T – температура, κ – относительная диэлектрическая проницаемость кремния, ϵ_0 – электрическая постоянная, функция

$$F(\phi) = \left[\frac{(2N_V / \sqrt{\pi} N_d) \left(\int_0^\phi F_{1/2}[(E_V - E_F - q\phi) / kT] d\phi + \beta\phi \right) + 1}{\exp(\beta\phi) - \beta\phi - 1} \right]^{1/2}, \quad (9)$$

где N_V – эффективная плотность состояний в валентной зоне кремния, E_F – равновесный химический потенциал кремния (уровень Ферми в объеме), $F_{1/2}$ – интеграл Ферми-Дирака. В качестве граничного условия используется высота барьера Шоттки в кремнии: $q\phi_s = F_G - \chi - (E_c - E_F)$.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Для расчетов использовались следующие параметры: концентрация доноров $N_d = 10^{15}$ и 10^{17} см⁻³, работа выхода графена $F_G = 4,65$ – $4,85$ эВ, электронное сродство для кремния $\chi = 4,05$ эВ, ширина запрещенной зоны кремния $\varepsilon_g = 1,12$ эВ, подвижность электронов в кремнии 800 – 1500 см²/(В с) и дырок 300 – 450 см²/(В с), собственная концентрация носителей $1,45 \cdot 10^{10}$ см⁻³, время жизни электронов 5 – 10 мкс и дырок 1 – 5 мкс, $G_0 = (1-2)10^{22}$ см⁻³/с, $\alpha = 10^4$ – 10^5 см⁻¹, $g_{2D} = 2\varepsilon/[\pi(\hbar v_0)^2]$. Здесь $\hbar$ – постоянная Планка, v_0 – скорость Ферми в графене.

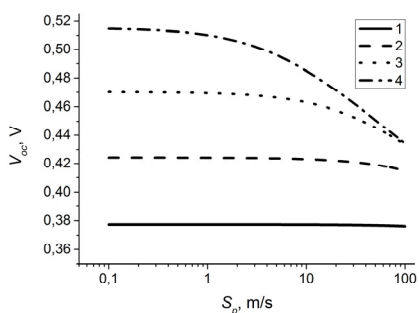


Рисунок 1. – Напряжение холостого хода гетероструктуры графен /кремний в условиях солнечного освещения ($N_d = 10^{15}$ см⁻³): $F_G = 4.7$ эВ (1), 4.75 эВ (2), 4.8 эВ (3), 4.85 эВ (4)

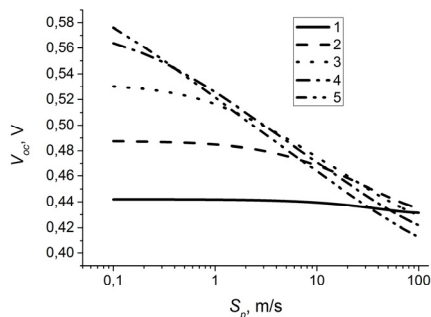


Рисунок 2. – Напряжение холостого хода гетероструктуры графен/кремний ($N_d = 10^{17}$ см⁻³): $F_G = 4.65$ эВ (1), 4.7 эВ (2), 4.75 эВ (3), 4.8 эВ (4), 4.85 эВ (5)

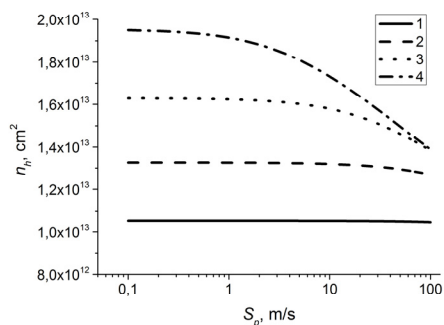


Рисунок 3. – Концентрация дырок в графене при $N_d = 10^{15}$ см⁻³: $F_G = 4.7$ эВ (1), 4.75 эВ (2), 4.8 эВ (3), 4.85 эВ (4)

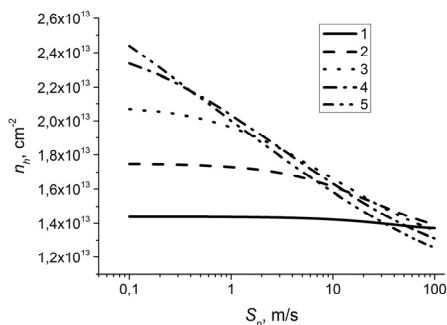


Рисунок 4. – Концентрация дырок в графене при $N_d = 10^{17}$ см⁻³: $F_G = 4.65$ эВ (1), 4.7 эВ (2), 4.75 эВ (3), 4.8 эВ (4), 4.85 эВ (5)

Результаты расчетов V_{oc} показали, что его величина составляет $0,36$ – $0,58$ В в зависимости от скорости поверхностной рекомбинации, работы выхода графена и концентрации доноров в кремнии, рис.1,2. Величина V_{oc} падает с ростом S_p . Наблюдается рост V_{oc} с увеличением работы выхода графена, а также концентрации доноров.

Величина V_{oc} практически соответствует электростатическому потенциалу ϕ для графена, так как падением потенциала V_{oc} в объеме кремния можно пренебречь.

На рис. 3–6 представлены результаты расчетов концентрации дырок в графене и квантовой емкости при условии, что при отсутствии солнечного света химический потенциал графена $\zeta=0$. Концентрация дырок в графене увеличивается с ростом V_{oc} и снижается с ростом S_p . Квантовая емкость также падает с ростом S_p . Значения n_h составляют порядка $(1-2,5)10^{13} \text{ см}^{-2}$, а C_Q меняется в пределах 9–14 мкФ/см².

Уменьшение V_{oc} с ростом скорости поверхностной рекомбинации очевидно и связано с падением концентрации неравновесных дырок на поверхности кремния. Рост V_{oc} с увеличением работы выхода графена связан с увеличением высоты барьера Шоттки, а ослабление падения V_{oc} с увеличением скорости поверхностной рекомбинации с увеличением концентрации доноров – с ростом положительного заряда обедненной области кремния. Эти закономерности носят самосогласованный характер. Этим также объясняется и закономерности изменения концентрации дырок и квантовой емкости графена, так как эти параметры определяются электрохимическим потенциалом графена.

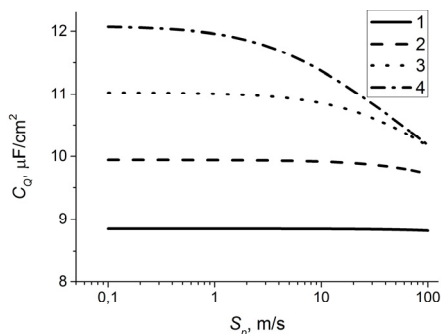


Рисунок 5. – Квантовая емкость в графене при $N_d = 10^{15} \text{ см}^{-3}$: $F_G = 4.7 \text{ эВ}$ (1), 4.75 эВ (2), 4.8 эВ (3), 4.85 эВ (4)

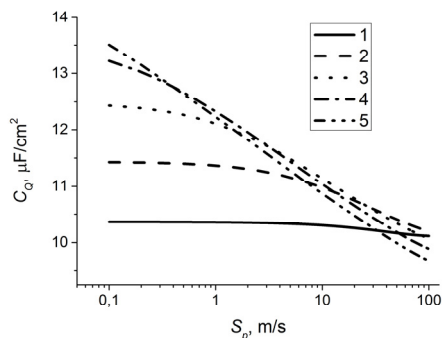


Рисунок 6. – Концентрация дырок в графене при $N_d = 10^{17} \text{ см}^{-3}$: $F_G = 4.65 \text{ эВ}$ (1), 4.7 эВ (2), 4.75 эВ (3), 4.8 эВ (4), 4.8 эВ (5)

Барьер для дырок между потолком валентной зоной кремния и химическим потенциалом графена составляет $\varepsilon_g - (F_G - \chi)$ и в данном случае меняется от 0,3 до 0,55 эВ ($F_G = 4.65-4.85 \text{ эВ}$). Поэтому прямое перетекание дырок из кремния в графен затруднено. При освещении электрохимический потенциал дырок смещается от положения равновесного химического потенциала на величину qV_{oc} , что и ведет к смещению электрохимического потенциала графена в область дырочной проводимости, что согласуется с экспериментальными данными.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенное моделирование напряжения холостого хода для гетероструктуры графен/кремни n -типа, а также концентрации дырок и квантовой емкости графена на кремнии при освещении солнечным светом показало, что происходит существенное изменение электрофизических параметров графена на кремнии. Концентрация дырок в нем возрастает до 10^{13} см^{-2} , а квантовая емкость – до 10–12 мкФ/см². Этот эффект может быть использован при разработке приборов фотовольтаики, например, для создания высокочувствительных фотодетекторов.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ ССЫЛКИ

1. Spectral sensitivity of graphene/silicon heterojunction photodetectors / S. Riazimehr [et al.] // Solid State Electronics. –2016. – V. 115, Part B. – P. 207–212.
2. High performance, self-powered photodetectors based on graphene/silicon Schottky junction diode / D. Periyanaounder [et al.] // J. Mater. Chem. C. – 2018. – V. 6. – P. 9545–9551.
3. Femtosecond light pulse response of photodetectors based on Graphene/*n*-Si heterojunctions / M. Scagliotti [et al.] // Carbon . – 2019. – V. 152. – P.643–651.
4. 2D Carbon Material/Silicon Heterojunctions for Fast Response Self-Powered Photodetector / M. Scagliotti [et al.] // International Journal of Nanoscience. – 2019. – V. 18. – N. 3 & 4. – 1940088.
5. G.I. Zebrev. Graphene Field Effect Transistors: Diffusion-Drift Theory/ 23 Chapter in Physics and Applications of Graphene-Theory / ed. by S. Mikhailov. –InTech, 2011. –P. 476–498.
6. Opencircuit voltage of a Schottkybarrier solar cell / P. K. Dubey [et al.] // Journal of Applied Physics. – 1977. – V. 48. – N.1. – P.324–328.
7. Физика полупроводниковых приборов: в 2-х кн. / под ред. С. Зи. – М. : Мир, 1984. – Кн. 1. –456 с.

ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОЕ ХИМИЧЕСКОЕ ОСАЖДЕНИЕ СУЛЬФИДА ОЛОВА НА НАНОТЕКСТУРИРОВАННУЮ ПОДЛОЖКУ АЛЮМИНИЯ ДЛЯ ФОТОПРЕОБРАЗОВАТЕЛЕЙ СОЛНЕЧНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Е. А. Уткина¹, М. В. Меледина¹, А. А. Ходин²

¹⁾ *Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, ул. П. Бровки 6, 220013 Минск, Беларусь, e-mail: outkina@bsuir.by*

²⁾ *ГНПО «Оптика, оптоэлектроника и лазерная техника», Логойский тракт 22, 220090 Минск, Беларусь, e-mail: alhodin@oelt.basnet.by*

Рассмотрены основные электрофизические характеристики и методы получения тонких пленок и наночастиц сульфида олова SnS из раствора для применения в солнечных элементах и других электронных приборах. Методом послойного осаждения SILAR из растворов прекурсоров на наноструктурированные темплат-подложки Al получены наноструктурированные слои SnS. Представлена схема процесса послойного осаждения на темплат-подложку с nanoостриями Al.

Ключевые слова: сульфид олова; SILAR процесс; наноструктурированная темплат-подложка.

SEQUENTIAL CHEMICAL DEPOSITION OF TIN SULPHIDE ONTO NANOTEXTURED ALUMINUM SURFACE FOR SOLAR LIGHT PHOTOELECTRIC CONVERTERS

Е. А. Outkina¹, М. V. Meledina¹, А. А. Khodin²

¹⁾ *Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, P.Brovky str. 4, 220013 Minsk, Belarus,*

²⁾ *“Optics, Optoelectronics and Laser Techniques” SSPA, Logoisky trakt 22, 220090 Minsk, Belarus
Corresponding author: A. A. Khodin (alhodin@oelt.basnet.by)*