

**Untersuchung von Defektreaktionen in Silicium mittels  
Ladungsträger-Lebensdauer-Spektroskopie**

DISSERTATION  
ZUR ERLANGUNG DES AKADEMISCHEN GRADES

DOKTOR-INGENIEUR (DR.-ING.)

VORGELEGT DEM RAT DER PHYSIKALISCH-ASTRONOMISCHEN FAKULTÄT  
DER FRIEDRICH SCHILLER UNIVERSITÄT JENA  
FACHBEREICH MATERIALWISSENSCHAFT

VON DIPL.-ING.  
MATTHIAS ROST

geboren am 21.01.1985 in Jena

Gutachter:

Prof. Dr. C. Ronning, IFK uni Jena

Prof. Dr. J. Weber, IAP TU Dresden

Prof. Dr. S. W. Glunz, Inatech Uni Freiburg

Tag der Disputation: 01.03.2019

# Inhaltsverzeichnis

<b>1. Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2. Festkörperphysikalische Grundlagen</b>	<b>3</b>
2.1. Halbleiter und Bändermodell . . . . .	3
2.2. Intrinsische Halbleiter . . . . .	3
2.3. Dotierte Halbleiter . . . . .	5
2.4. Thermische Abhängigkeiten . . . . .	7
2.4.1. Bandlücke . . . . .	7
2.4.2. Modell für die effektiven Massen . . . . .	8
2.4.3. Freeze Out . . . . .	10
2.4.4. Intrinsische Leitung . . . . .	10
2.4.5. Verwendetes Ladungsträger-Gleichgewichts-Modell . . . . .	11
2.5. Mobilität . . . . .	12
2.6. Leitfähigkeit . . . . .	13
2.7. Generation und Rekombination . . . . .	14
2.7.1. Strahlende Rekombination . . . . .	15
2.7.2. Auger-Rekombination . . . . .	16
2.7.3. Coulomb verstärkte Auger Rekombination (CE-Auger) . . . . .	16
2.7.4. Shockley-Read-Hall-Rekombination (SRH) . . . . .	17
2.7.5. Oberflächenrekombination . . . . .	19
2.7.6. Effektive Lebensdauer . . . . .	20
2.8. Grundlagen der Thermodynamik und Kinetik chemischer Reaktionen . . . . .	21
2.8.1. Kinetik . . . . .	21
2.8.2. Thermodynamik . . . . .	22
<b>3. Experimentelles Vorgehen</b>	<b>24</b>
3.1. Probenpräparation gezielt kontaminierter Proben . . . . .	24
3.2. Vier-Spitzen-Methode . . . . .	27
3.3. Lebensdauerermesstechnik . . . . .	28
3.3.1. Quasi Steady State Photoconductance (QSS-PC) . . . . .	29
3.3.2. Quasi Steady State Photoluminescence (QSS-PL) . . . . .	32
3.4. Deep Level Transient Spectroscopy (DLTS) . . . . .	33
<b>4. Grundlagen der Lebensdauerspektroskopie</b>	<b>35</b>
4.1. SRH-Gleichung . . . . .	35
4.2. Defektparameter . . . . .	35
4.3. Injektionsabhängige Lebensdauerspektroskopie (IDLS) . . . . .	36
4.3.1. Intrinsische Rekombination . . . . .	37
4.3.2. Mehrere Defekte . . . . .	38
4.3.3. Defect Parameter Solution Surface Diagramme . . . . .	39
4.3.4. SRH-Formalismus: DPSS-Gleichungen . . . . .	40
4.4. Temperatur- und Injektionsabhängige Lebensdauerspektroskopie (T-IDLS) . . . . .	41
4.4.1. Überlagerung der DPSS- $k_{\sigma}$ -Kurven: Defektcharakterisierung . . . . .	43
4.4.2. Überlagerung der DPSS- $\tau_{n0}$ -Kurven: Auswertung der Defektkonzentration . . . . .	45
4.4.3. Defektparameter und Trapping . . . . .	48
<b>5. Defektcharakterisierung</b>	<b>52</b>
5.1. Kontaminierte Proben . . . . .	52

5.2. Eisen-Kontamination . . . . .	52
5.2.1. T-IDLS Spektrum der mit Eisen kontaminierten p-Typ Silicium Probe mit Siliciumnitrid Passivierung . . . . .	53
5.2.2. Dissoziations-Spektrum der mit Eisen kontaminierten p-Typ Silicium Probe mit Siliciumnitrid Passivierung . . . . .	60
5.2.3. T-IDLS Spektrum der mit Eisen kontaminierten n-Typ Silicium Probe mit Siliciumnitrid Passivierung . . . . .	64
5.3. Kupfer-Kontamination . . . . .	67
5.3.1. T-IDLS Spektrum der mit Kupfer kontaminierten p-Typ Silicium Probe mit Siliciumoxid Passivierung . . . . .	68
5.3.2. T-IDLS Spektrum der mit Kupfer kontaminierten p-Typ Silicium Probe mit Siliciumnitrid Passivierung . . . . .	72
5.4. Nickel-Kontamination . . . . .	78
5.4.1. T-IDLS Spektrum der mit Nickel kontaminierten p-Typ Silicium Probe mit Siliciumoxid Passivierung . . . . .	79
5.4.2. T-IDLS Spektrum der mit Nickel kontaminierten p-Typ Silicium Probe mit Siliciumnitrid Passivierung . . . . .	82
5.4.3. T-IDLS Spektrum der mit Nickel kontaminierten n-Typ Silicium Probe mit Siliciumnitrid Passivierung . . . . .	85
<b>6. Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>88</b>
<b>7. Referenzen</b>	<b>91</b>
<b>A. Verwendete Parameter</b>	<b>95</b>
<b>B. Details des Mobilitätsmodells nach Dorkel und Leturcq</b>	<b>96</b>
<b>C. Einfluss der Lebensdauer auf die Funktionsweise von Solarzellen</b>	<b>97</b>
<b>D. Das Referenzierungsproblem</b>	<b>99</b>
<b>E. Herleitung der SRH-Gleichung</b>	<b>102</b>
<b>F. Variationen der SRH-Gleichung</b>	<b>104</b>
<b>G. Grenzfälle der SRH-Rekombination</b>	<b>108</b>
<b>H. Ableitungen der SRH-Gleichung in doppelt-logarithmischer Darstellung</b>	<b>110</b>

# 1. Einleitung

Der Begriff Photovoltaik bezeichnet wörtlich die Entstehung einer elektrischen Spannung bei Bestrahlung eines halbleitenden Bauteils (Solarzelle) mit Licht (Photonen). Gemeint ist dabei die direkte Umwandlung von Lichtenergie in elektrische Energie. Aufgrund der großen Verfügbarkeit an Lichtenergie ist die Photovoltaik eine wichtige Quelle erneuerbarer Energie. Laut dem Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz, und nukleare Sicherheit (BMU) ist der Klimawandel die größte globale Herausforderung unserer Zeit [BMU14]. Mit umfassenden Maßnahmen, wie der Umstellung auf erneuerbare Energien und einer Verbesserung der Energieeffizienz soll das Ziel, die globale Erwärmung auf 2 °C zu begrenzen, erreicht werden. In Deutschland wurden 2017 36 % des Bruttostromverbrauchs durch erneuerbare Energien bereitgestellt. Davon wurden 18 % durch Photovoltaik erzeugt [BMU18]. Im Jahr 2013 lag der Anteil an installierter Photovoltaikleistung zur Stromerzeugung bei 16,2 % [BMW16] und war damit die am schnellsten wachsende Form erneuerbarer Energie zur Stromerzeugung in Deutschland. Dieser Trend verdeutlicht, dass die Photovoltaik in naher Zukunft eine tragende Rolle in der Stromversorgung der Bundesrepublik Deutschland einnehmen kann. Dem „Photovoltaics Report“ ist zu entnehmen, dass der Großteil der Photovoltaikanlagen kristalline Silicium Solarzellen verwendet [ISE14b]. Die drastische Reduktion der Stromgestehungskosten für Photovoltaik hat nach Breyer et. al. in vielen Gebieten auf der Erde bereits zum Erreichen der „Grid Parity“ geführt [BG13]. Dieser Begriff bedeutet, dass die Stromgestehungskosten für Photovoltaik gleichwertig zum lokal herrschenden Marktpreis sind. Damit ist die Photovoltaik in diesen Ländern bereits eine konkurrenzfähige Alternative zu konventioneller Energieerzeugung.

Aktuelle Schwerpunkte im Bereich Forschung und Entwicklung zielen darauf ab, die Kosten pro erzeugter Leistung durch Photovoltaik weiter zu senken [ISE14b]. Einerseits kann dieses Ziel durch optimierte Prozesse, andererseits durch effizientere Solarzellen erreicht werden. Konzepte, wie rückseitig kontaktierte Solarzellen (Interdigitated Back Contact Solar Cells - IBC), haben ein signifikantes Potential für Wirkungsgradsteigerungen, wie Sunpower zeigen konnte [MRC<sup>+</sup>4]. Jedoch stellen alle Hocheffizienzkonzepte hohe Anforderungen an das verwendete Halbleitermaterial [Gre98, Lam77]. Verunreinigungen im Halbleiterkristall können elektrisch aktive Defekte bilden, welche die Leistungsfähigkeit elektronischer Bauteile beeinträchtigen [Die09]. Deswegen sind Methoden zur Identifikation dieser Defekte wertvolle Hilfsmittel in der Halbleiterindustrie.

Der Fokus dieser Arbeit liegt in der Anwendung der *Lebensdauerspektroskopie* (Lifetime Spectroscopy - LS), einer extrem sensitiven Analyseverfahren zur Materialcharakterisierung von Halbleiterproben, welche umfassend von Rein beschrieben wurde [Rei05]. Weit verbreitet sind Analysemethoden wie zum Beispiel *Massenspektrometrie* (MS) und *Deep Level Transient Spectroscopy* (DLTS)[Lan74], die in der Lage sind, bereits extrem niedrige Defektkonzentrationen nachzuweisen. Jedoch können auch Defekte unterhalb der Nachweisgrenze dieser Methoden die elektrischen Eigenschaften eines Bauteils maßgeblich beeinflussen [Rei05]. Die Lebensdauerspektroskopie geht einen anderen Weg. Sie versucht, direkt aus der für das Bauteil kritischen Größe, der Ladungsträgerlebensdauer des Halbleiters, auf die Defekteigenschaften zurück zu schließen. Damit ist sie eine sehr empfindliche Methode und theoretisch in der Lage, auch bei kleinsten Defektkonzentrationen den limitierenden elektrisch aktiven Defekt zu bestimmen [Rei05]. Gerade für Solarzellen spielt die Ladungsträgerlebensdauer eine große Rolle. So ist die Messung der Lebensdauer eine Routinemessung zur Beurteilung der Güte von Siliciumwafern in der Photovoltaik. Vor allem für kristallines Silicium existiert bereits eine Reihe von Konzepten, die Kosten pro Watt-Peak zu senken. Möglich sind unter anderem Wirkungsgradsteigerungen und Materialsubstitutionen [Die09]. Bei Materialsubstitutionen wird versucht kostengünstigeres Material mit gleichwertigen elektrischen Eigenschaften herzustellen. Zum Beispiel kann das üblicherweise verwendete *Czochralski-Silicium* (Cz-Si) durch das hochwertigere *Float-Zone-Silicium* (FZ-Si) ersetzt werden, wodurch die Materialkosten jedoch steigen [Rei05]. Eine wesentliche Materialalternative stellt das Multikristalline Silicium (MC-Si) dar. Die Herstellungskosten sind durch das einfache Verfahren der gerichteten Erstarrung in einer Kokille gering, jedoch beein-

flussen Defekte vor allem in Kombination mit der Kornstruktur die Eigenschaften des Materials [MRG<sup>+</sup>12, MWAT13]. Im Falle von bordotiertem Silicium tritt durch den höheren Sauerstoffanteil des Cz-Si der Effekt der *lichtinduzierten Degradation (LID)* über den sogenannten „*Metastabilen Cz-Defekt*“ auf [Die09]. Dieser Defekt konnte bisher nicht mittels DLTS nachgewiesen werden, obwohl Lebensdauer und Zelleffizienz maßgeblich beeinflusst werden. Es konnte gezeigt werden, dass es sich um Bor-Sauerstoff-Verbindungen ( $B_sO_{2i}$ ) handelt [BSS05]. Dies zeigt die praktische Relevanz der Lebensdauerspektroskopie im Vergleich zu klassischen Methoden. Aktuell besteht ein breiter Konsens, dass sich sowohl mit DLTS als auch LS das Defektenergieniveau verschiedener Defekte mit hoher Genauigkeit bestimmen lässt. Jedoch gibt es große Unterschiede zwischen den Methoden, wenn das Verhältnis der Einfangquerschnitte (der Symmetriefaktor) bestimmt werden soll. Ein Effekt, der alle LS-Methoden überlagert, ist das so genannte „Trapping“, welches die Bestimmung des Symmetriefaktors erschwert. Dieser Effekt ist bei leitfähigkeitsbasierten Messungen stark ausgeprägt.

Ziel dieser Arbeit ist es, Defektreaktionen innerhalb eines Halbleiters zu beobachten und zu analysieren. Dazu wurde eine Methode entwickelt, mit welcher trotz der genannten Restriktionen eine präzise Konzentrationsbestimmung der dominanten Defekte möglich ist. In Kapitel 2 werden die festkörperphysikalischen Grundlagen erläutert, die zur Modellierung des temperaturabhängigen Ladungsträgergleichgewichts verwendet werden. Dies ist die Grundlage der Lebensdauerspektroskopie, da die elektrischen Eigenschaften des Materials empfindlich von der Konzentration der Ladungsträger abhängen. Des Weiteren werden die Prozesse der Erzeugung (Generation) und der Vernichtung (Rekombination) freier Ladungsträger erläutert und in diesem Zusammenhang der Begriff der Ladungsträgerlebensdauer definiert. Des Weiteren werden die Grundlagen der Thermodynamik und Kinetik chemischer Reaktionen für mögliche Defektreaktionen diskutiert. In Kapitel 3 werden die einzelnen Experimente und die verwendete Messtechnik vorgestellt. Dabei werden anhand der Quasi-Statistischen Photoleitfähigkeitsmethode (QSS-PC) die Voraussetzungen für eine exakte Messung der Lebensdauer erläutert, sowie die Restriktionen der Methode beschrieben. Kapitel 4 stellt analytische Konzepte zur Auswertung der Lebensdauerermessung vor. In Kapitel 5 werden die Ergebnisse der einzelnen Experimente vorgestellt. Abschließend werden die Ergebnisse in Kapitel 6 zusammengefasst.

## 2. Festkörperphysikalische Grundlagen

### 2.1. Halbleiter und Bändermodell

Halbleiter sind Festkörper und besitzen eine spezifische elektrische Leitfähigkeit zwischen  $10^{-8}$  und  $10^4 \text{ S} \cdot \text{cm}^{-1}$  [Sze85]. Damit besitzen Sie elektrische Leitfähigkeiten im Übergangsbereich von Isolatoren und Metallen, was in Abbildung 2.1 a dargestellt ist.

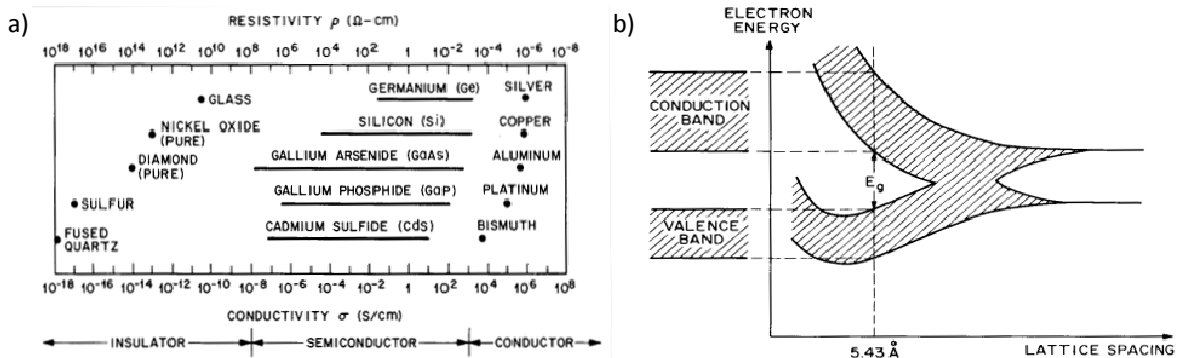


Abb. 2.1: a) Elektrische Leitfähigkeiten diverser Halbleiter. Die Leitfähigkeit von Halbleitern liegt zwischen der von Metallen und Isolatoren und kann gezielt variiert werden. b) Schematische Darstellung der Lage der Bandlücke in Silicium. Für einen unendlichen Abstand der Atome ergeben sich diskrete Energieniveaus. Im Gleichgewichtsabstand spalten die diskreten Energieniveaus in Bänder auf. Bei Halbleitern überlappen Leitungsband und Valenzband nicht, sodass sich eine Bandlücke ergibt. Quelle: [Sze85]

Zur Beschreibung der elektrischen Eigenschaften von Halbleitern wird das Bändermodell angewendet. Demnach existieren für die Energieverteilung der Elektronen statt diskreter Niveaus Bänder mit einem kontinuierlichen Energiebereich. Wie in Abbildung 2.1 b zu sehen, besitzt die Bandstruktur eines Halbleiters eine verbotene Zone (Bandlücke, engl. „band gap“), welche zwischen Valenzbandkante  $E_V$  und Leitungsbandkante  $E_C$  liegt. Diese Bandlücke  $E_g$  besitzt eine diskrete Energie  $E_g = E_C - E_V$  [Rei05, Sze85]. Elektronen innerhalb des Valenzbandes bilden die chemische Bindung zwischen den Atomen des Halbleiters aus und sind dann keine freien Ladungsträger. Hingegen sind Elektronen aus dem Leitungsband frei bewegliche Ladungsträger. Nahe dem absoluten Nullpunkt sind alle Elektronen im Valenzband gebunden. Bei Erhöhung der Temperatur können Elektronen durch die thermische Energie in das Leitungsband angeregt werden, wodurch ein frei bewegliches Elektron im Leitungsband sowie ein frei bewegliches Defektelektron (Loch) im Valenzband entsteht. Das Erzeugen von frei beweglichen Ladungsträgern (Generation) kann die Leitfähigkeit von Halbleitern signifikant erhöhen [Sze85].

### 2.2. Intrinsische Halbleiter

Unter einem intrinsischen Halbleiter wird ein idealer, defektfreier, halbleitender Festkörper verstanden. Seine Eigenschaften bezeichnet man als intrinsische Eigenschaften. Die Zustandsdichte  $N$  beschreibt die Anzahl der möglichen, zu besetzenden energetischen Zustände in einem Volumen. Sie besitzt eine Verteilung über der Energie der Ladungsträger  $E$  [Sze85]:

$$N(E) = 4\pi \left( \frac{2m_{e/h}^*}{h^2} \right)^{3/2} E^{1/2}, \quad (2.1)$$

mit  $m_{e/h}$  der effektiven Masse der Elektronen, bzw. Löcher und  $h$  dem Planckschen Wirkungsquantum. Die Wahrscheinlichkeit für die Besetzung eines Zustandes in einem Band durch einen

Ladungsträger lässt sich mit der Fermi-Dirac-Verteilung beschreiben [Gre98]:

$$f(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T}\right)}, \quad (2.2)$$

mit  $k_B$  der Boltzmann-Konstante,  $T$  der Temperatur in Kelvin und  $E_F$  der Fermi-Energie. Die Anzahl der im thermodynamischen Gleichgewicht erzeugten Elektronen  $n_0$  und Löcher  $p_0$  lässt sich durch Integration des Produktes der effektiven Zustandsdichten mit der Fermi-Dirac-Verteilung über den erlaubten Energiebereich des jeweiligen Bandes berechnen [Sze85]:

$$n_0 = \int_{E_C}^{\infty} N(E) \cdot f(E) dE \text{ und} \quad (2.3a)$$

$$p_0 = \int_{-\infty}^{E_V} N(E) \cdot f(E) dE. \quad (2.3b)$$

Für einen nicht degenerierten Halbleiter lässt sich die Fermi-Dirac-Verteilung in guter Näherung durch die einfachere Boltzmann-Verteilung ersetzen [Rei05]:

$$f(E) = \exp\left(-\frac{E - E_F}{k_B T}\right). \quad (2.4)$$

Damit ergeben sich die Konzentrationen für Elektronen im Leitungsband  $n_0$  und Löcher im Valenzband  $p_0$  zu [Sze85]:

$$n_0 = N_C \cdot \exp\left(-\frac{E_C - E_F}{k_B T}\right) \text{ und} \quad (2.5a)$$

$$p_0 = N_V \cdot \exp\left(-\frac{E_F - E_V}{k_B T}\right), \quad (2.5b)$$

hierbei sind  $N_{C/V}$  die effektiven Zustandsdichten im Leitungs- bzw. Valenzband. Man erkennt die starke Abhängigkeit der Ladungsträgerdichte von der Lage des Fermi-Energie-Niveaus und der Temperatur.

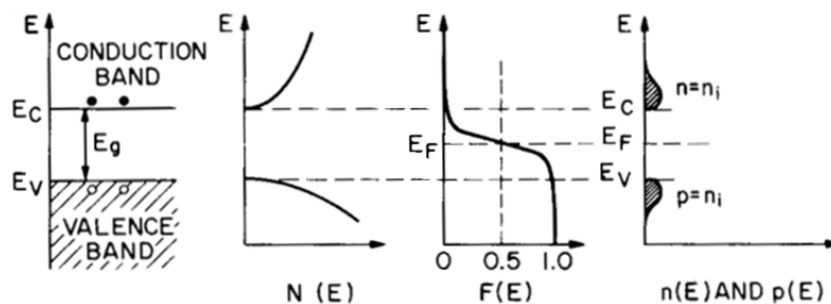


Abb. 2.2: Schematische Darstellung für die Berechnung der Gleichgewichtskonzentrationen eines intrinsischen Halbleiters. Zustände innerhalb der Bandlücke sind nicht erlaubt, während die Zustandsdichte  $N(E)$  von der Energie der Teilchen abhängt. Die Fermi-Verteilung  $F(E)$  beschreibt die Wahrscheinlichkeit für die Besetzung eines Zustandes durch Elektronen, bzw. Löcher. Für intrinsisches Silicium liegt das Fermi-Niveau  $E_F$  nahe der Bandlückenhälfte. Durch Integration des Produktes aus Zustandsdichte und Fermi-Verteilung ergeben sich die Ladungsträgerkonzentrationen  $n$  und  $p$ . Quelle: [Sze85]

Das Produkt der Ladungsträgerkonzentrationen im thermodynamischen Gleichgewicht ergibt folgende Gleichung, die auch als Massenwirkungsgesetz bezeichnet wird:

$$p_0 \cdot n_0 = N_C \cdot N_V \cdot \exp\left(\frac{-E_g}{k_B T}\right) = n_i^2. \quad (2.6)$$

Das bedeutet, dass das Produkt der freien Ladungsträgerkonzentrationen in einem Halbleiter



unabhängig von der Fermi-Energie (oder Dotierung) ist. Es ist vielmehr ein materialspezifischer Parameter, welcher von der Bandlückenenergie  $E_g$ , der Temperatur  $T$  und den effektiven Zustandsdichten  $N_C$  und  $N_V$  abhängt [Sze85]. Für einen intrinsischen Halbleiter kann eine thermische Anregung von Elektronen nur vom Valenz- in das Leitungsband erfolgen, wodurch immer ein Elektron und ein Loch generiert werden [Sze85]. Deshalb gilt für intrinsische Halbleiter:

$$p_0 = n_0 = n_i, \quad (2.7)$$

mit der intrinsischen Ladungsträgerdichte  $n_i \sim 10^{10} \text{ cm}^{-3}$  für Silicium bei  $T = 300 \text{ K}$  [Spr91]. Durch Einsetzen von 2.5a und 2.5b in Gleichung 2.7 ergibt sich das Fermi-Energie-Niveau für intrinsische Halbleiter zu [Sze85]:

$$E_F - E_V = \frac{E_g}{2} - \frac{k_B T}{2} \cdot \ln \left( \frac{N_C}{N_V} \right). \quad (2.8)$$

Da der letzte Term der Gleichung relativ klein ist, liegt das Fermi-Energie-Niveau für intrinsische Halbleiter nahe der Bandlückenhälfte [Sze85]. Der physikalische Zusammenhang zwischen der Lage des Fermi-Niveaus, der Zustandsdichte und den Gleichgewichtsladungsträgerkonzentrationen ist in Abbildung 2.2 für intrinsische Halbleiter schematisch dargestellt.

### 2.3. Dotierte Halbleiter

Technisch werden häufig dotierte Halbleiter eingesetzt. Dabei wird gezielt eine elektrisch aktive Verunreinigung in den Kristall eingebracht. Man unterscheidet zwischen Donatoren und Akzeptoren. Donatoren besitzen in der äußersten Schale ein Elektron mehr als das Wirtsatom und können dieses in das Leitungsband abgeben. Akzeptoren besitzen in der äußersten Schale ein Elektron weniger als das Wirtsatom und können ein Elektron aus dem Valenzband aufnehmen, wodurch ein Loch zurückbleibt. Technisch sinnvolle Dotierstoffe erzeugen Energieniveaus nahe der Valenz-, bzw. Leitungsbandkante innerhalb der Bandlücke [Sze85]. Typische Dotierstoffkonzentrationen reichen von  $10^{13}$  bis  $10^{20} \text{ cm}^{-3}$ , wobei die Konzentration an Siliciumatomen etwa  $5 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$  beträgt [Sze85]. Die Konzentration an Akzeptoren wird mit  $N_A$ , die der Donatoren mit  $N_D$  bezeichnet. Unter der Voraussetzung, dass alle Dotierstoffatome ionisiert wurden, ergeben sich für  $N_{A/D} \gg n_i$  die Gleichgewichtsladungsträgerkonzentrationen bei einer Temperatur von  $T = 300 \text{ K}$  nach dem Massenwirkungsgesetz (Gleichung 2.6) durch folgende Formeln [Rei05]:

$$\text{für n-dotiertes Silicium} \quad n_0 \approx N_D^+ \approx N_D; \quad p_0 \approx \frac{n_i^2}{N_D} \quad \text{und} \quad (2.9a)$$

$$\text{für p-dotiertes Silicium} \quad p_0 \approx N_A^- \approx N_A; \quad n_0 \approx \frac{n_i^2}{N_A}. \quad (2.9b)$$

Durch die Dotierung wird eine Einteilung in Majoritätsladungsträger (Großteil der frei beweglichen Ladungsträger) und Minoritätsladungsträger (seltener vorkommende frei bewegliche Ladungsträger) sinnvoll [Rei05]. Das Material lässt sich nach der Art der Dotierung in p-Typ (Dotierung mit Akzeptoren) und n-Typ (Dotierung mit Donatoren) einteilen. Abbildung 2.3 stellt den physikalischen Zusammenhang zwischen Dotierung und Gleichgewichtsladungsträgerkonzentration dar. Grundlage zur Berechnung der Ladungsträgerkonzentrationen ist die Annahme der Ladungsneutralität [Rei05]. Unter der Annahme vollständiger Ionisierung der Dotierstoffatome ergibt sich für p-Typ, bzw. n-Typ Silicium:

$$n_0 + N_A = p_0; \quad p_0 + N_D = n_0. \quad (2.10)$$

Unter Zuhilfenahme des Massenwirkungsgesetzes (Gleichung 2.6) lässt sich die Konzentration an Minoritäten als Funktion von der Konzentration der Majoritäten umformulieren. Man erhält eine quadratische Gleichung, mit welcher die Konzentration an Majoritäten berechnet werden

kann. Für p-Typ und n-Typ Silicium ergeben sich folgende Formeln:

$$\text{p-Typ:} \quad p_0 = \frac{1}{2} \left( N_A + \sqrt{N_A^2 + 4n_i^2} \right) \quad \text{und} \quad (2.11a)$$

$$\text{n-Typ:} \quad n_0 = \frac{1}{2} \left( N_D + \sqrt{N_D^2 + 4n_i^2} \right). \quad (2.11b)$$

Abbildung 2.3 zeigt schematisch den Einfluss der Dotierung auf die Bandstruktur und die Berechnung der Gleichgewichtsladungsträgerkonzentrationen für dotierte Halbleiter.

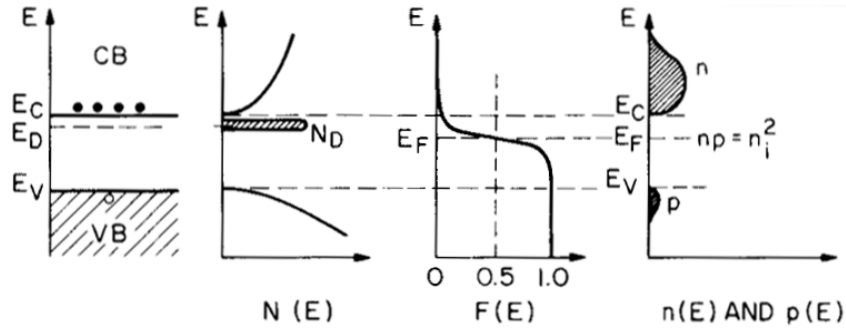


Abb. 2.3: schematische Darstellung für die Berechnung der Gleichgewichtskonzentrationen in n-dotierten Halbleitern. Durch die Zugabe an Donatoren wird das Fermi-Energie-Niveau  $E_F$  zur Leitungsbandkante verschoben. Dadurch ist es wahrscheinlicher, dass ein Zustand im Leitungsband durch ein Elektron besetzt wird. Im thermodynamischen Gleichgewicht ist das Produkt der Ladungsträgerkonzentrationen  $p_0 \times n_0$  auch für dotierte Halbleiter durch die intrinsische Ladungsträgerkonzentration  $n_i$  festgelegt. Es gilt  $p_0 \times n_0 = n_i^2$ . Quelle: [Sze85]

Die Lage des Fermi-Energie-Niveaus innerhalb der Bandlücke kann durch die Konzentration der Majoritäten berechnet werden. Abbildung 2.4 zeigt diese Abhängigkeit für n-Typ und p-Typ Material bei  $T = 300\text{ K}$ . Sie ergibt sich nach folgenden Formeln zu:

$$E_F - E_V = k_B T \cdot \ln \left( \frac{N_V}{p_0} \right) \quad \text{für p-Typ, und} \quad (2.12a)$$

$$E_C - E_F = k_B T \cdot \ln \left( \frac{N_C}{n_0} \right) \quad \text{für n-Typ.} \quad (2.12b)$$

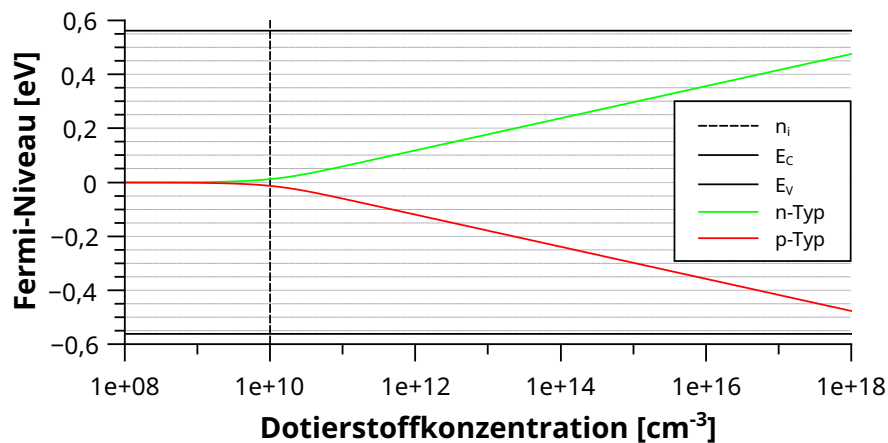


Abb. 2.4: Simulation der Lage des Fermi-Energie-Niveaus in Abhängigkeit von der Dotierung für  $T = 300\text{ K}$ . Die Werte für n-Typ Material sind grün und für p-Typ Material rot eingezeichnet. Ist die Dotierstoffkonzentration  $N_{A/D}$  weitaus kleiner als die intrinsische Ladungsträgerkonzentration  $n_i$  (in dieser Simulation  $1 \times 10^{10}\text{ cm}^{-3}$ ), so liegt das Fermi-Niveau nahe der Bandmitte. Unter der Annahme, dass die Dotierung die Lage der Bandkanten nicht beeinflusst, ergibt sich ein logarithmischer Zusammenhang zwischen Fermi-Niveau und Dotierstoffkonzentration.

## 2.4. Thermische Abhängigkeiten

Für Lebensdauerspektroskopie ist eine möglichst genaue Modellierung der Ladungsträgerkonzentrationen bei verschiedenen Temperaturen notwendig. Wesentlich beeinflussende Effekte sind das „Ausfrieren“ der Dotierstoffatome, die Störstellenerschöpfung, sowie die intrinsische Leitung [Rei05]. Außerdem beeinflussen „Bandgap Narrowing“ sowie die effektiven Massen der Ladungsträger die Konzentration der Ladungsträger bei hohen, bzw. niedrigen Temperaturen [Sze85, Gre98]. Wie bereits in Gleichung 2.10 muss für jede Temperatur Ladungsneutralität gelten, wobei die Dotierstoffe nicht vollständig ionisiert sind. Somit ergibt sich:

$$\text{für p-Typ:} \quad n_0(T) + N_A^-(T) = p_0(T) \quad \text{und} \quad (2.13a)$$

$$\text{für n-Typ:} \quad p_0(T) + N_D^+(T) = n_0(T) . \quad (2.13b)$$

Damit kann nun, wie in Gleichung 2.11, die Konzentration an Majoritäten in Abhängigkeit der Temperatur bei bekannter Dotierung berechnet werden:

$$\text{für p-Typ:} \quad p_0(T) = \frac{1}{2} \left( N_A^-(T) + \sqrt{(N_A^-(T))^2 + 4n_i^2(T)} \right) \quad \text{und} \quad (2.14a)$$

$$\text{für n-Typ:} \quad n_0(T) = \frac{1}{2} \left( N_D^+(T) + \sqrt{(N_D^+(T))^2 + 4n_i^2(T)} \right) . \quad (2.14b)$$

Die Gleichgewichtsladungsträgerkonzentration der Majoritäten ist damit abhängig von der intrinsischen Ladungsträgerkonzentration und der Konzentration an ionisierten Dotierstoffatomen.

### 2.4.1. Bandlücke

Die Bandlücke in Silicium ist ebenfalls temperaturabhängig und kann für einen großen Temperaturbereich nach Sze<sup>1</sup> wie folgt beschrieben werden [Sze85]:

$$E_g(T) = E_g(0\text{ K}) - \frac{\alpha \cdot T^2}{T + \beta} . \quad (2.15)$$

Die Bandlücke ist demnach mit 1,17 eV bei 0 K am größten und nimmt mit steigender Temperatur ab. Charakteristisch ist die Bandlücke von Silicium bei 300 K von 1,124 eV. Der Verlauf der Bandlücke über der Temperatur ist in Abbildung 2.5 dargestellt.

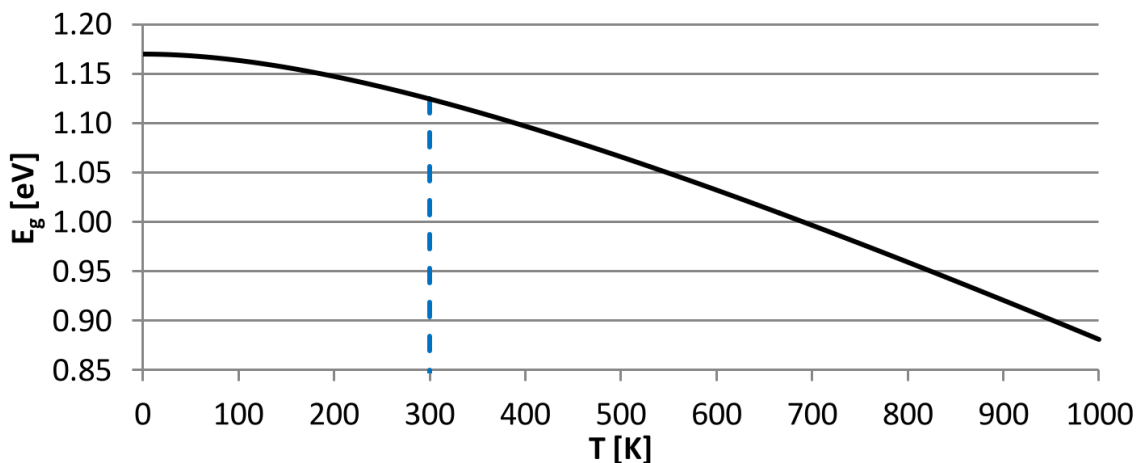


Abb. 2.5: Simulierter Verlauf der Bandlückenenergie  $E_g$  nach [Sze85]. Charakteristisch ist die Bandlückenenergie von 1,124 eV für  $T = 300\text{ K}$  (blaue Linie) und die Verringerung der Bandlücke mit steigender Temperatur.

<sup>1</sup>Parametrisierung von  $E_g(T)$  nach [Sze85]  $E_g(0\text{ K}) = 1,17\text{ eV}$ ;  $\alpha = 4,73 \times 10^{-4}\text{ eV/K}$ ;  $\beta = 636\text{ K}$

### 2.4.2. Modell für die effektiven Massen

Die effektiven Zustandsdichten  $N_C$  bzw.  $N_V$  sind temperaturabhängig. Dabei müssen sowohl die Temperaturabhängigkeit der kinetischen Energie der Teilchen als auch der effektiven Masse für die Zustandsdichten der Ladungsträger  $m_{de}^*$  berücksichtigt werden. Dies kann durch folgende Gleichungen nach Green<sup>2</sup> [Gre90] beschrieben werden:

$$N_{C/V} \left( T; m_{de,e/h}^*(T) \right) = N \cdot \left[ \frac{m_{de,e/h}^*(T)}{m_0} \right]^{\frac{3}{2}} \cdot \left[ \frac{T}{300 \text{ K}} \right]^{\frac{3}{2}}, \quad (2.16)$$

$$m_{de,e}^*(T) = 6^{3/2} \cdot \left[ \left( \frac{m_t}{m_0}(T) \right)^2 \cdot \frac{m_l}{m_0} \right]^{\frac{1}{3}} \quad \text{mit} \quad \frac{m_t}{m_0}(T) = \frac{m_t^0}{m_0} \cdot \frac{E_g(0 \text{ K})}{E_g(T)}, \quad \text{und} \quad (2.17)$$

$$m_{de,h}^*(T) = \left( \frac{a + bT + cT^2 + dT^3 + eT^4}{1 + fT + gT^2 + hT^3 + iT^4} \right). \quad (2.18)$$

Mit der Ruhemasse des Elektrons  $m_0$  und einem Vorfaktor  $N$ , welcher die physikalischen Konstanten zusammenfasst. Wie aus Gleichung 2.17 ersichtlich wird, ist die effektive Masse der Zustandsdichten für Elektronen abhängig von der transversalen ( $m_t$ ) und longitudinalen effektiven Masse ( $m_l$ ) im Leitungsband.

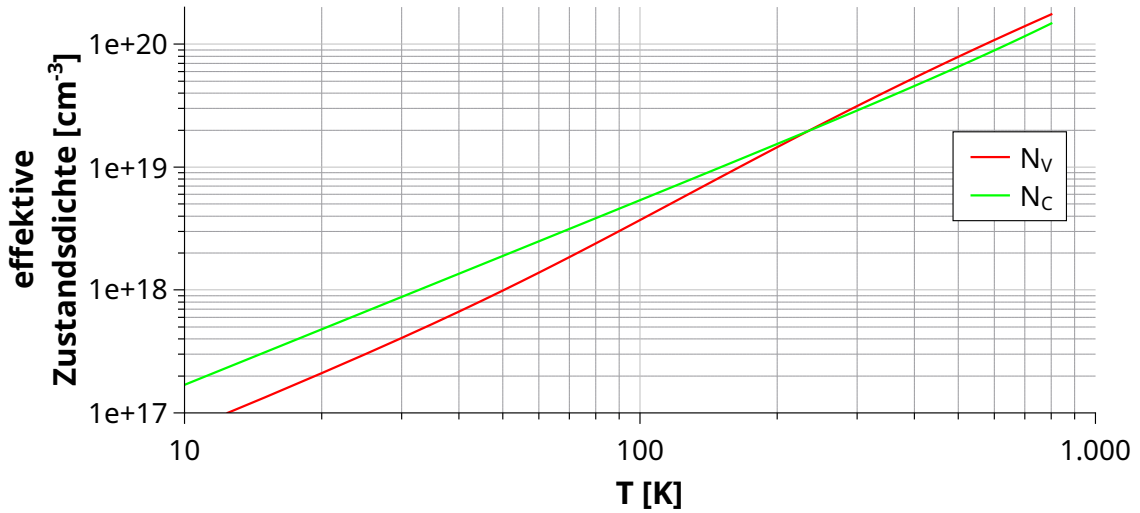


Abb. 2.6: Verlauf der Zustandsdichten nach [Gre90]. Die Zustandsdichte für Löcher im Valenzband  $N_V$  ist stärker temperaturabhängig als die Zustandsdichte von Elektronen im Leitungsband  $N_C$ .

Da im Valenzband unterschiedliche Subbänder existieren, ist die Temperaturabhängigkeit der effektiven Masse von Löchern und Elektronen qualitativ anders. Wie in Abbildung 2.6 zu sehen ist, führt dies dazu, dass die Zustandsdichte für Löcher im Valenzband stärker temperaturabhängig ist als für Elektronen im Leitungsband.

<sup>2</sup>Parametrisierung der effektiven Massen der Zustandsdichten nach [Gre90]:  $N = 2,540933 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ ;  
 $m_t^0/m_0 = 0,1905$ ;  $m_l/m_0 = 0,9163$ ;  $a = 0,4435870$ ;  $b = 0,3609528 \text{ K}^{-1}$ ;  $c = 1,173515 \times 10^{-4} \text{ K}^{-2}$ ;  
 $d = 1,263218 \times 10^{-6} \text{ K}^{-3}$ ;  $e = 3,025581 \times 10^{-7} \text{ K}^{-4}$ ;  $f = 4,683382 \times 10^{-3} \text{ K}^{-1}$ ;  $g = 2,286895 \times 10^{-4} \text{ K}^{-2}$ ;  
 $h = 7,469271 \times 10^{-7} \text{ K}^{-3}$ ;  $i = 1,727481 \times 10^{-9} \text{ K}^{-4}$

Des Weiteren kann die mittlere thermische Geschwindigkeit der Ladungsträger  $v_{\text{th}}$  über die thermische effektive Masse  $m_{\text{th}}^*$  berechnet werden [Gre90]:

$$v_{\text{th}, e/h} = \sqrt{\frac{8k_{\text{B}}T}{\pi m_{\text{th}, e/h}^*}}. \quad (2.19)$$

Für die thermische effektive Masse der Elektronen wurde von Green<sup>3</sup> [Gre90] eine analytische Gleichung publiziert. Für Löcher hingegen wurden in dieser Arbeit die Messwerte von Green durch eine analytische Gleichung, ähnlich der zur Beschreibung der effektiven Massen für die Zustandsdichten, angenähert. Der Verlauf der thermischen effektiven Massen mit der Temperatur lässt sich durch folgende Gleichungen beschreiben:

$$m_{\text{th}, e}^*(T) = 4 \cdot m_1 \cdot \left[ 1 + \left( \frac{m_1}{m_t(T)} \right)^{1/2} \cdot \frac{\sin^{-1}(\delta)}{\delta} \right]^{-2} \quad \text{mit } \delta = \sqrt{1 - \frac{m_t(T)}{m_1}} \quad \text{und} \quad (2.20)$$

$$m_{\text{th}, h}^*(T) = \left( \frac{a + bT + cT^2 + dT^3 + eT^4}{1 + fT + gT^2 + hT^3 + iT^4} \right) - jT - k. \quad (2.21)$$

Prinzipiell unterscheiden sich die thermischen effektiven Massen und die effektiven Massen der Zustandsdichten deutlich voneinander. Für die Berechnung der Ladungsträgerkonzentrationen sind jedoch nur die effektiven Massen der Zustandsdichten relevant. Die unterschiedlichen Geschwindigkeiten beider Ladungsträgerarten werden erst bei der Auswertung der Lebensdauer in Abschnitt 4.2 relevant. Abbildung 2.7 a zeigt die Messwerte von Green für die thermischen effektiven Massen bei verschiedenen Temperaturen sowie die in dieser Arbeit verwendeten Funktionen.

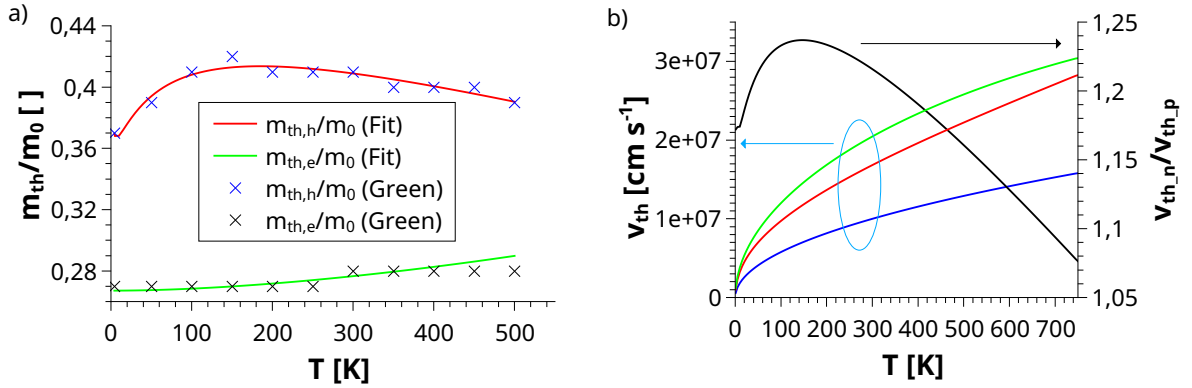


Abb. 2.7: a) Messwerte für die thermischen effektiven Massen von Elektronen  $m_{\text{th}, e}^*$  (schwarze Kreuze) und Löchern  $m_{\text{th}, h}^*$  (blaue Kreuze) bei verschiedenen Temperaturen nach [Gre90], sowie deren analytische Anpassungsfunktionen (grün für Elektronen, rot für Löcher). b) Berechneter Verlauf der thermischen Geschwindigkeiten von Elektronen  $v_{\text{th}, e}$  (grün) und Löchern  $v_{\text{th}, h}$  (rot), sowie deren Verhältnis (schwarz als Funktion der Temperatur). Das Modell nach Rein [Rei05] ist in dieser Darstellung als blaue Linie gekennzeichnet.

Mithilfe der Gleichungen 2.19 bis 2.21 lassen sich die thermische Geschwindigkeit der Ladungsträger, sowie deren Verhältnis für beliebige Temperaturen berechnen. In Abbildung 2.7 b ist der Temperaturverlauf dieser drei Größen dargestellt. Für Temperaturen größer 500 K wurden die Werte extrapoliert. Nach diesem Modell ist das Verhältnis der Geschwindigkeiten von Elektronen zu Löchern bei 150 K maximal und nähert sich im untersuchten Temperaturbereich mit steigender Temperatur einem Wert von 1 an.

<sup>3</sup>Parametrisierung der thermischen effektiven Massen nach [Gre90]:  $m_t^0/m_0 = 0,1905$ ;  $m_1/m_0 = 0,9163$ ;  
 Diese Arbeit:  $a = 0,6019730$ ;  $b = 0,2134957 \text{ K}^{-1}$ ;  $c = 6,6290973 \times 10^{-2} \text{ K}^{-2}$ ;  $d = 0,7705816 \text{ K}^{-3}$ ;  
 $e = 1,2269252 \times 10^{-2} \text{ K}^{-4}$ ;  $f = 0,1463224 \text{ K}^{-1}$ ;  $g = 3,1056744 \times 10^{-2} \text{ K}^{-2}$ ;  $h = 1,0720653 \text{ K}^{-3}$ ;  
 $i = 1,4579803 \times 10^{-2} \text{ K}^{-4}$ ;  $j = 1,3432933 \times 10^{-4} \text{ K}^{-1}$ ;  $k = 0,3681965$

Das Verhältnis lässt sich nach Gleichung 2.19 wie folgt berechnen:

$$\frac{v_{\text{th,e}}}{v_{\text{th,h}}} = \sqrt{\frac{m_{\text{th,h}}^*}{m_{\text{th,e}}^*}}. \quad (2.22)$$

Für den in dieser Arbeit relevanten Temperaturbereich von 280 bis 600 K sollte dieses Modell hinreichend genau sein, da der relative Fehler zwischen Gleichung und Messwert bis zu einer Temperatur von 500 K kleiner 5 % ist. Ebenfalls in Abbildung 2.7 b eingezeichnet ist das Modell nach Rein [Rei05], welches einen Schätzwert der thermischen Geschwindigkeit, für den Fall das  $m_{\text{th}}^* \approx m_0$  ist, darstellt. Dieses Modell unterscheidet nicht zwischen Elektronen und Löchern.

### 2.4.3. Freeze Out

Das „Ausfrieren“ der Dotierstoffatome, auch „Freeze-Out“ genannt, findet bei tiefen Temperaturen statt. Gemeint ist der geringere Ionisierungsgrad  $f_A$  von Dotierstoffen durch geringere thermische Energie bei niedrigen Temperaturen [Sze85, Rei05]:

$$f_A(T) = \frac{N_A^-(T)}{N_A}. \quad (2.23)$$

Unter der Annahme, dass eine niedrige Dotierstoffkonzentration vorliegt, kann weiterhin angenommen werden, dass durch die Coulombabstoßung zweier gleich geladener Ladungsträger die doppelte Besetzung eines Dotierstoffatoms nahezu nicht möglich ist. Dies lässt sich nach Rein [Rei05] mit einer Modifikation der Fermi-Dirac-Statistik beschreiben. Folgende Gleichung beschreibt den Ionisationsgrad für ein Akzeptorniveau mit  $E_A$  dem Abstand des Akzeptorniveaus zur Valenzbandkante:

$$f_A(T; N_A; E_A) = \frac{-1 + \sqrt{1 + 2C(T; N_A; E_A)}}{C(T; N_A; E_A)} \quad (2.24)$$

mit

$$C(T; N_A; E_A) = \frac{4N_A}{N_V(T)} \cdot \exp\left(\frac{E_A - E_V}{k_B T}\right). \quad (2.25)$$

### 2.4.4. Intrinsische Leitung

Abhängig von Dotierstoffkonzentration und Temperatur kann der Fall eintreten, dass die Konzentration thermisch angeregter intrinsischer Ladungsträger die Konzentration der durch Ionisation von Dotierstoffatomen erzeugten Ladungsträger überschreitet [Sze85, Rei05]. Man spricht dann von intrinsischer Eigenleitung, da nun im Halbleiter, unabhängig von seiner Dotierart, die Konzentration von Minoritäten und Majoritäten annähernd gleich sind. Zusammenfassend lassen sich Temperaturbereiche feststellen, in denen folgende Näherungen gelten [Rei05]:

$$\text{Freeze-Out bei niedrigen Temperaturen} \quad p_0 = f_A \cdot N_A \quad (2.26)$$

$$\text{Störstellenerschöpfung bei moderaten Temperaturen} \quad p_0 = N_A \quad (2.27)$$

$$\text{Intrinsische Eigenleitung bei hohen Temperaturen} \quad p_0 = n_i \quad (2.28)$$

Es sei angemerkt, dass die Temperaturbereiche, in denen einer der genannten thermischen Effekte dominant ist, maßgeblich von der Dotierstoffkonzentration und dem verwendeten Modell abhängt. Für übliche Basisdotierungen von industriell gefertigten Solarzellen von  $N_{\text{dop}} = 10^{15} - 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  liegt der Temperaturbereich, in welchem die Störstellenreserve dominant, ist bei Raumtemperatur. Um Unstetigkeiten im Verlauf der temperaturabhängigen Ladungsträgerkonzentration zu vermeiden, können alle drei Effekte mittels folgender Formel für p-Typ Silicium berechnet werden:

$$p_0(T) = \frac{1}{2} \left( f_A(T) \cdot N_A + \sqrt{f_A^2(T) \cdot N_A^2 + 4n_i^2(T)} \right). \quad (2.29)$$

Dieses Modell ist äquivalent zu der Annahme, dass die thermische Ionisation von Dotierstoffen und die thermische Ionisation von Siliciumatomen unabhängige Prozesse darstellen, welche bei allen Temperaturen stattfinden. Bei niedrigen Temperaturen kann  $n_i(T)$  vernachlässigt werden, sodass sich die Gleichung zu 2.26 vereinfacht. Bei moderaten Temperaturen ist  $f_A \approx 1$ , wodurch sich näherungsweise Gleichung 2.27 ergibt, während  $n_i$  immer noch vernachlässigbar klein bleibt. Bei hohen Temperaturen wird  $n_i$  groß gegenüber  $N_A$ , wodurch Gleichung 2.28 erreicht wird. Die Konzentration an Minoritäten kann über das Massenwirkungsgesetz beschrieben werden:

$$n_0(T) \cdot p_0(T) = n_i^2(T). \quad (2.30)$$

Da die Lage des Fermi-Energie-Niveaus innerhalb der Bandlücke vom Gleichgewicht der Ladungsträgerkonzentrationen abhängt, lässt sich auch hier eine Temperaturabhängigkeit formulieren [Rei05]. Für p-Typ und n-Typ Silicium ergeben sich folgende Formeln:

$$\text{für p-Typ:} \quad (E_F - E_V)(T) = k_B T \cdot \ln \left( \frac{N_V(T)}{p_0(T)} \right) \quad \text{und} \quad (2.31a)$$

$$\text{für n-Typ:} \quad (E_C - E_F)(T) = k_B T \cdot \ln \left( \frac{N_C(T)}{n_0(T)} \right). \quad (2.31b)$$

#### 2.4.5. Verwendetes Ladungsträger-Gleichgewichts-Modell

Bei dem in dieser Arbeit verwendeten Ladungsträger-Gleichgewichts-Modell werden die Gleichungen 2.29 und 2.30 mit den in diesem Kapitel besprochenen thermischen Abhängigkeiten, namentlich der Bandlücke, den effektiven Zustandsdichten, dem „Freeze-Out“ und der intrinsischen Leitung angewendet. Dadurch ergeben sich spezifische temperaturabhängige Gleichgewichtsladungsträgerkonzentrationsverläufe, welche die Grundlage der Lebensdauerspektroskopie bilden. Diese sind in Abbildung 2.8 zu sehen. Die Temperaturabhängigkeit der Bandlücke und der effektiven Massen der Zustandsdichten beeinflussen dabei den Anstieg der intrinsischen Ladungsträgerkonzentration über der Temperatur, sowie den Anteil an ionisierten Störstellen.

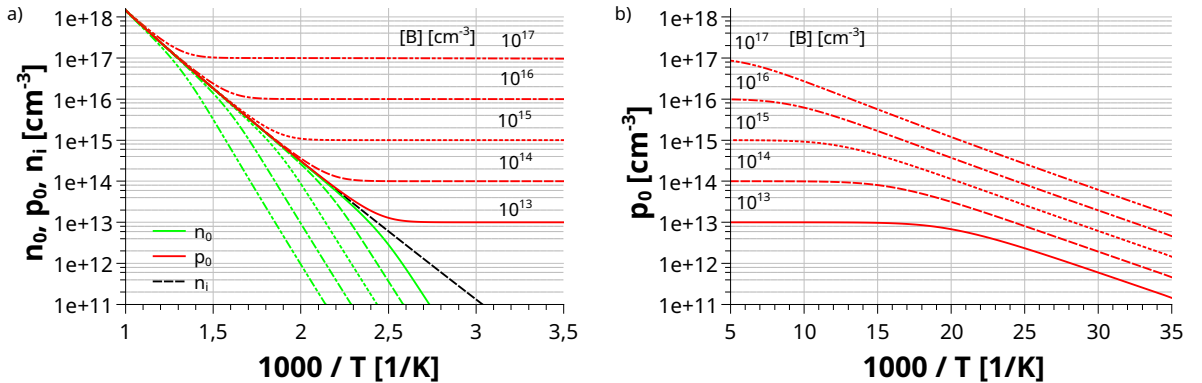


Abb. 2.8: a) Berechnete Gleichgewichtsladungsträgerkonzentrationen ( $p_0$ ,  $n_0$ ), sowie die intrinsische Ladungsträgerkonzentration  $n_i$  für verschiedene Dotierstoffkonzentrationen an Bor  $[B]$  als Funktion der Temperatur für Temperaturen größer  $T = 300$  K. b) Zugehörige Gleichgewichtsladungsträgerkonzentration  $p_0$  für verschiedene Dotierstoffkonzentrationen an Bor  $[B]$  als Funktion der Temperatur für Temperaturen kleiner  $T = 300$  K durch unvollständige Ionisation von Dotierstoffatomen.

Die Lage des Fermi-Energie-Niveaus ist in dem verwendeten Modell ( $E_g(T)$ ) stärker temperaturabhängig als mit der Annahme einer konstanten Bandlücke. Dies bedeutet effektiv, dass die Eigenleitung bei geringeren Temperaturen einsetzt. Das in dieser Arbeit verwendete Ladungsträger-

Gleichgewichts-Modell beschreibt den Einfluss von Temperatur und Dotierstoffkonzentration auf die Gleichgewichtsladungsträgerkonzentrationen  $p_0$  und  $n_0$ . Es ähnelt damit dem „advanced model“ von Rein [Rei05], ist jedoch nicht in zwei unterschiedliche Temperaturbereiche unterteilt. Der kontinuierliche Übergang der dominierenden Effekte wie Freeze-Out, Störstellenreserve und intrinsischer Leitung wird durch die Annahme erreicht, dass die Prozesse der Ionisation von Dotierstoffatomen und Siliciumatomen im gesamten Temperaturbereich parallel ablaufen. Abbildung 2.9 a zeigt den Ionisierungsgrad für verschiedene Dotierstoffkonzentrationen über der Temperatur nach dem verwendeten Modell ( $E_g(T)$ ). Abbildung 2.9 b zeigt den Verlauf des Fermi-Energie-Niveaus als Funktion der Temperatur für verschiedene Dotierstoffarten und Konzentrationen.

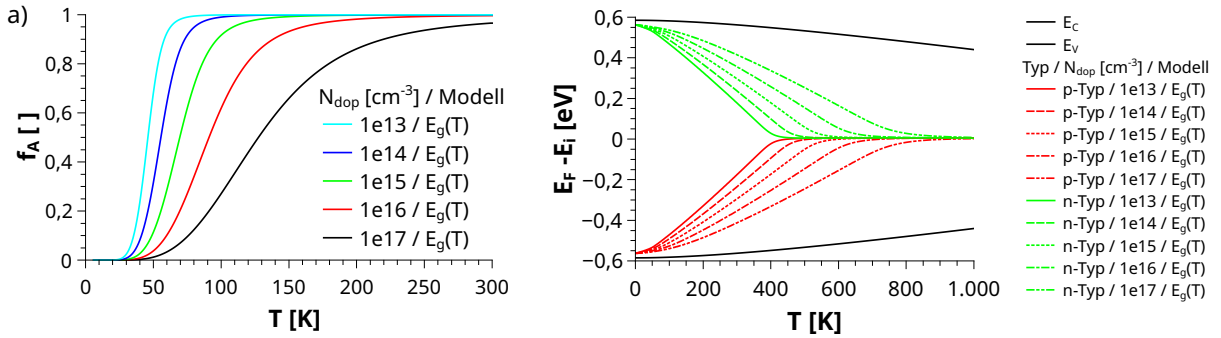


Abb. 2.9: a) Ionisierungsgrad von Bor Atomen  $f_A$  durch den Freeze-Out Effekt bei verschiedenen Dotierstoffkonzentrationen als Funktion der Temperatur. b) Lage des Fermi-Niveaus bei verschiedenen Dotierstoffkonzentrationen  $N_{dop}$  an Phosphor für n-Typ (grün) und Bor für p-Typ (rot) als Funktion der Temperatur.

## 2.5. Mobilität

Die Mobilität  $\mu$  der frei beweglichen Ladungsträger beschreibt den Zusammenhang zwischen der Driftgeschwindigkeit  $v_{\text{Drift}}$  und dem anliegenden elektrischen Feld  $E$  [Sze85]:

$$v_{\text{Drift}} = \mu \cdot E. \quad (2.32)$$

Die Mobilität ist dabei abhängig von der Dotierstoffkonzentration, der Ladungsträgerdichte, sowie der Temperatur [Die09]. Maßgeblich beteiligt an der Temperaturabhängigkeit der Mobilität sind die Prozesse der Phononenstreuung (Streuung am Kristallgitter), Streuung an ionisierten Störstellen und Carrier-Carrier-Streuung (Streuung der Ladungsträger untereinander). Der Haupteinfluss liegt dabei auf der Streuung am Kristallgitter. Verwendet für die Berechnung der Mobilität wurde das Modell von Dorkel und Leturq<sup>4</sup> [DL81].

$$\mu_L = \mu_{L0} \left( \frac{T}{T_0} \right)^{-\alpha} \quad (2.33)$$

Gleichung 2.33 beschreibt den Einfluss des Gitters auf die Mobilität. Die Temperaturabhängigkeit der Mobilität durch Stöße mit dem Gitter ist vergleichsweise hoch. Der negative Exponent bedeutet, dass die Mobilität der Ladungsträger mit der Temperatur abnimmt.

$$\mu_I = \frac{A \cdot T^{\frac{3}{2}}}{N} \left( \ln \left( 1 + \frac{B \cdot T^2}{N} \right) - \frac{B \cdot T^2}{N + B \cdot T^2} \right)^{-1} \quad (2.34)$$

<sup>4</sup>Parametrisierung des verwendeten Mobilitätsmodells nach [DL81]:  $T_0 = 300 \text{ K}$ ;  $\alpha = 2, 2$ ;  
 $\mu_{L0,e^-} = 1430 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ ;  $A_{e^-} = 4,61 \times 10^{17} \text{ cm}^{-1} \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1} \text{ K}^{-3/2}$ ;  $B_{e^-} = 1,52 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3} \text{ K}^{-2}$ ;  
 $\mu_{L0,p^+} = 495 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ ;  $A_{p^+} = 1,00 \times 10^{17} \text{ cm}^{-1} \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1} \text{ K}^{-3/2}$ ;  $B_{p^+} = 6,25 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3} \text{ K}^{-2}$ ;  
 $C_1 = 2 \cdot 10^{10} \text{ cm}^5 \text{ K}^{-\frac{3}{2}} \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ ;  $C_2 = 8,28 \cdot 10^8 \text{ cm}^2 \text{ K}^{-2}$



Gleichung 2.34 beschreibt den Einfluss der Konzentration geladener Störstellen  $N$  auf die Mobilität der Ladungsträger. Je höher die Störstellenkonzentration, desto geringer die Mobilität. Die Temperaturabhängigkeit dieses Terms ist positiv und schwächer als die des Gitters. Ist die Defektkonzentration deutlich kleiner als die Dotierstoffkonzentration, kann man näherungsweise folgende Relation ansetzen:  $N = f_A \times N_{\text{dop}}$

$$\mu_{\text{CCS}} = C_1 \cdot \frac{T^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{p \cdot n}} \left( \ln \left( 1 + C_2 \cdot \frac{T^2}{(p \cdot n)^{1/3}} \right) \right)^{-1} \quad (2.35)$$

Gleichung 2.35 beschreibt den Einfluss der Streuung der Ladungsträger untereinander. Wobei  $p \cdot n$  das Produkt der Ladungsträgerkonzentrationen beschreibt, wie sie in Gleichung 2.40 definiert sind. Je höher die Ladungsträgerkonzentration, desto geringer die Mobilität. Dieser Term besitzt ebenfalls eine schwache, positive Temperaturabhängigkeit.

$$x = \sqrt{\frac{6\mu_L(\mu_I + \mu_{\text{CCS}})}{\mu_I \cdot \mu_{\text{CCS}}}} \quad (2.36)$$

Gleichung 2.36 wichtet die einzelnen Streuprozesse im Verhältnis zur Streuung am Kristallgitter. Dies bedeutet, dass der Einfluss der geladenen Störstellen und der Streuung der Ladungsträger untereinander auf die Ladungsträgermobilität mit steigender Temperatur schwächer wird.

$$\mu = \mu_L \left( 1,025 \cdot \left( 1 + \left( \frac{x}{1,68} \right)^{1,45} \right)^{-1} - 0,025 \right) \quad (2.37)$$

Mit Gleichung 2.37 lässt sich eine effektive Mobilität für jede Ladungsträgerart berechnen. Abbildung 2.10 zeigt den berechneten Temperaturverlauf der Mobilitäten für Elektronen  $\mu_n$  und Löcher  $\mu_p$  bei einer Dotierstoffkonzentration von  $N_{\text{dop}} = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$  und einer Injektionsdichte von  $\Delta n = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ . Eine detaillierte Berechnung von Mobilitäten unter verschiedenen Bedingungen ist in Anhang B zu finden.

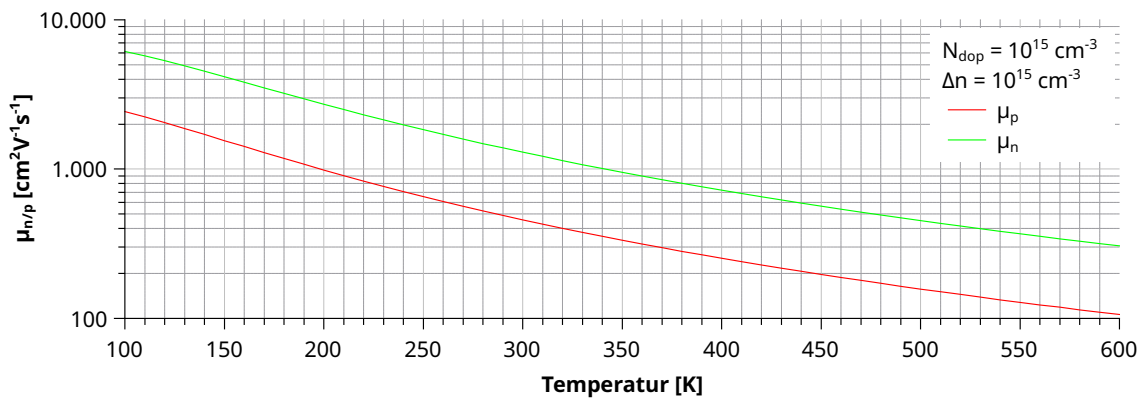


Abb. 2.10: Berechneter temperaturabhängiger Verlauf der Mobilitäten für Elektronen  $\mu_n$  (grün) und für Löcher  $\mu_p$  (rot) nach [DL81]. Modellparameter sind eine Dotierung an Bor mit einer Konzentration von  $N_{\text{dop}} = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ , sowie eine Überschussladungsträgerdichte von  $\Delta n = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ . Mit steigender Temperatur nimmt die Mobilität der Ladungsträger ab.

## 2.6. Leitfähigkeit

Den Zusammenhang zwischen der elektrischen Spannung  $U$  und der Stromstärke  $I$  liefert das Ohmsche Gesetz:

$$R = \frac{U}{I} = \rho \cdot \frac{l}{A}, \quad (2.38)$$

mit dem Widerstand  $R$ , der Länge des Widerstandes  $l$  und der Querschnittsfläche des Widerstandes  $A$ . Wobei die Materialeigenschaft  $\rho$  als spezifischer Widerstand bezeichnet wird. Die Leitfähigkeit  $\sigma$  eines Halbleiters lässt sich beschreiben durch [Sze85]:

$$\sigma = q \cdot (\mu_n \cdot n + \mu_p \cdot p) = \frac{1}{\rho} = \frac{1}{R_{\square} W}, \quad (2.39)$$

mit  $q$  der Elementarladung,  $\mu_{n/p}$  der Mobilität der jeweiligen Ladungsträger,  $n$  der Konzentration an Elektronen im Leitungsbandband und  $p$  der Konzentration an Löchern im Valenzband. Häufig wird der Schichtwiderstand  $R_{\square}$  einer Halbleiterprobe über die Vier-Spitzen-Methode bestimmt, welcher bei homogener Dotierung des Wafers nach Gleichung 2.39 durch die Dicke des Wafers  $W$  mit dem spezifischen Widerstand verknüpft ist. Die Mobilitäten und die Ladungsträgerkonzentrationen sind von der Temperatur abhängig. Unabhängig davon kann die Konzentration an Ladungsträgern und damit auch die Leitfähigkeit durch Lichtabsorption erhöht werden [Cue03]. Man spricht von optischer Anregung. Dabei werden Überschussladungsträger  $\Delta n$  und  $\Delta p$  generiert:

$$p = p_0 + \Delta p; n = n_0 + \Delta n. \quad (2.40)$$

Es gilt  $\Delta n = \Delta p$ , da für jedes in das Leitungsband angeregte Elektron ein Loch im Valenzband verbleibt. Die Änderung der Leitfähigkeit  $\Delta\sigma$  beträgt dann:

$$\Delta\sigma = q \cdot \Delta n \cdot (\mu_n + \mu_p). \quad (2.41)$$

## 2.7. Generation und Rekombination

Im thermodynamischen Gleichgewicht finden Erzeugung (Generation) und Vernichtung (Rekombination) freier Ladungsträger gleichzeitig statt und führen so zu den Gleichgewichtsladungsträgerkonzentrationen  $n_0$  und  $p_0$ . Durch Lichtabsorption kann ein Elektron vom Valenzband ins Leitungsband angeregt werden, wobei ebenfalls ein Loch im Valenzband erzeugt wird. Der Absorptionsprozess setzt die Erhaltung von Energie und Impuls voraus. Das bedeutet, dass nur dann Photonen (Lichtquanten) absorbiert werden können, wenn ihre Energie  $E = h\nu$  größer als die Bandlückenenergie  $E_g$  ist, mit  $h$  dem Planckschen Wirkungsquantum und  $\nu$  der Frequenz der Welle.

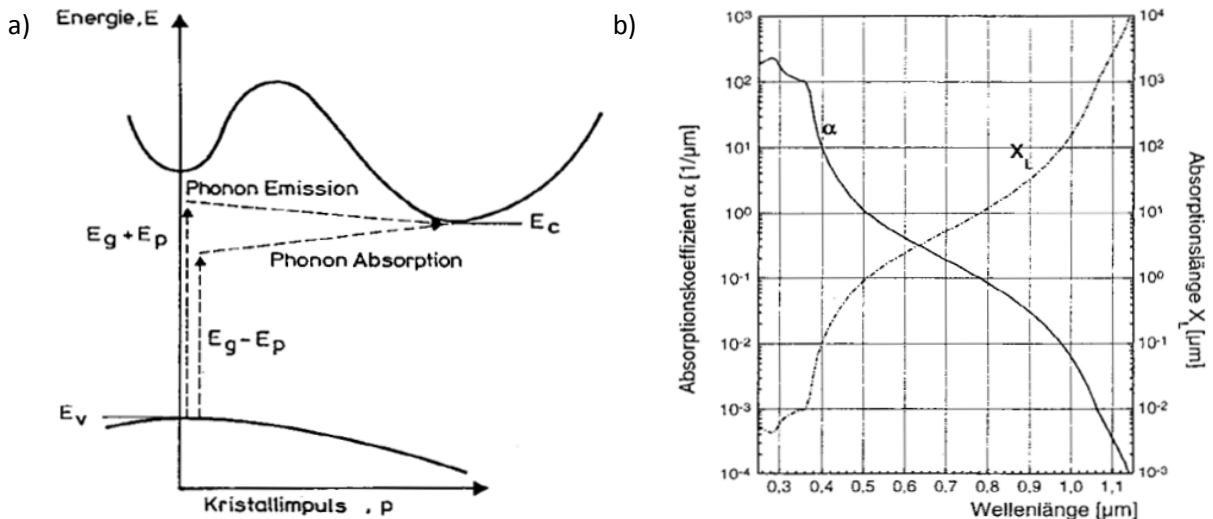


Abb. 2.11: a) Bandschema des indirekten Halbleiters Silicium. Für die Absorption von Photonen müssen Energieerhaltung und Impulserhaltung erfüllt sein. Dadurch wird ein Ladungsträger aus dem Valenzband in das Leitungsband angeregt. b) Absorptionskoeffizient  $\alpha$  als Funktion der Wellenlänge. Der Absorptionskoeffizient ist stark wellenlängenabhängig, so dass die Weglänge (Absorptionslänge  $x_L$ ) nach der 63% Prozent der Photonen absorbiert wurden für hohe Wellenlängen sehr groß wird. Quelle: [Gö94]

Silicium ist ein indirekter Halbleiter, bei dem der Kristallimpuls vom Maximum des Valenzbandes und dem Minimum des Leitungsbandes verschieden ist. Das bedeutet, dass für die Absorption der Energie eines Photons zusätzlich ein Phonon (Quant der Gitterschwingung) erzeugt bzw. vernichtet werden muss [Gö94], wie es in Abbildung 2.11 a schematisch dargestellt ist. Dadurch ist der Absorptionskoeffizient in indirekten Halbleitern in der Regel kleiner als in direkten Halbleitern und außerdem, wie in Abbildung 2.11 b gezeigt, stark von der Wellenlänge der einstrahlten Photonen abhängig. Um diesen Nachteil zu kompensieren, ist der Absorber in Solarzellen aus kristallinem Silicium meist dicker ( $> 160 \mu\text{m}$ ) als bei Solarzellen aus direkten Halbleitern ( $\sim 2 \mu\text{m}$ ). Außerdem führen eine texturierte Oberfläche und eine verspiegelte Rückseite zu mehrfachen Reflexionen innerhalb der Solarzelle und somit zu einer erhöhten Lichtausbeute. Die Anzahl an zusätzlich generierten freien Ladungsträgern pro Volumen wird als Injektionsdichte oder Überschussladungsträgerdichte  $\Delta n$ , bzw.  $\Delta p$  bezeichnet. Wegen der gleichzeitigen Generation von Elektronen und Löchern gilt im idealen Halbleiter  $\Delta n = \Delta p$ . Durch die erhöhte Generationsrate wird laut Gleichung 2.42 ein Überschuss an Ladungsträgern im Vergleich zum thermodynamischen Gleichgewicht erzeugt, womit sich der Halbleiter im thermodynamischen Ungleichgewicht befindet [Sze85].

$$(p_0 + \Delta p)(n_0 + \Delta n) = n \cdot p > n_i^2 = n_0 \cdot p_0 \quad (2.42)$$

Im thermodynamischen Ungleichgewicht ist die Rekombinationsrate erhöht. Dies liegt daran, dass die Rekombinationswahrscheinlichkeit proportional zur Ladungsträgerdichte ist. Da die Überschussladungsträger nicht instantan rekombinieren können, wird nach dem Abschalten der Generationsquelle die Überschussladungsträgerdichte  $\Delta n$  mit der Zeit  $t$  abnehmen, was sich durch die Kontinuitätsgleichung beschreiben lässt [Ber98]:

$$\frac{\partial \Delta n}{\partial t} = G - U + D_n \frac{\partial^2 \Delta n}{\partial x^2}, \quad (2.43)$$

dabei ist  $G$  die Generationsrate,  $U$  die Rekombinationsrate,  $D_n$  die Diffusionskonstante für Elektronen und  $\frac{\partial^2 \Delta n}{\partial x^2}$  der Gradient der Überschussladungsträgerverteilung. Der Gradient ist bei homogener Ladungsträgerverteilung Null. Das Nullsetzen der Generationsrate  $G$  führt zu der Annahme eines exponentiellen Abklingens der Injektionsdichte mit der Zeit, wobei die Zeitkonstante  $\tau$  für den exponentiellen Abfall durch folgende Gleichung beschrieben werden kann [Ber98]:

$$\tau = \frac{\Delta n}{U}. \quad (2.44)$$

Diese Zeitkonstante wird auch als Rekombinationslebensdauer bezeichnet. Rekombination kann über unterschiedliche Mechanismen auftreten, wobei sich deren Raten addieren. Dies bedeutet auch, dass sich die reziproken Lebensdauern der einzelnen Prozesse bei gleicher Injektionsdichte  $\Delta n$  zu einer resultierenden reziproken Lebensdauer addieren [Ber98]. Diese ist somit kleiner als die kleinste Lebensdauer der vorhandenen Mechanismen.

$$U_{\text{res}} = \sum_i U_i \quad \text{und} \quad \tau_{\text{res}}^{-1} = \sum_i \tau_i^{-1} \quad (2.45)$$

Intrinsische Rekombinationsmechanismen treten auch in idealen Halbleitern auf. Sie lassen sich über die Art der Energieabgabe einteilen [Gö94].

### 2.7.1. Strahlende Rekombination

Bei der strahlenden Rekombination rekombinieren jeweils ein Elektron und ein Loch über die Bandlücke. Die überschüssige Energie wird in Form von Photonen abgegeben, wobei die Energie der Photonen mindestens so groß wie Bandlückenenergie sein muss. Dieser Prozess dominiert bei direkten Halbleitern wie Galliumarsenid, da der Übergang direkt, ohne die zusätzliche Erzeugung

bzw. Vernichtung eines Phonons, stattfindet. Bei indirekten Halbleitern wie Silicium ist der Übergang indirekt, wodurch die Wahrscheinlichkeit für die strahlende Rekombination deutlich geringer ist [Sze85]. Die strahlende Rekombination lässt sich durch folgende Ratengleichung mit  $B = 1 \times 10^{-14} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$  für Silicium beschreiben [Rei05]:

$$U_{\text{rad}} = B \cdot (n \cdot p - n_i^2) \text{ und} \quad (2.46)$$

$$\tau_{\text{rad}} = \frac{1}{B \cdot (n_0 + p_0 + \Delta n)}. \quad (2.47)$$

Damit ist das Ausmaß der strahlenden Rekombination proportional zur Abweichung vom thermodynamischen Gleichgewicht  $n \times p - n_i^2$ .

### 2.7.2. Auger-Rekombination

Auger-Rekombination ist ein weiterer intrinsischer Rekombinationsprozess bei dem drei Teilchen miteinander wechselwirken [Gö94]. Die Rekombination eines Elektrons und eines Loches über die Bandlücke findet dabei unter Abgabe der Energie auf einen weiteren Ladungsträger (Elektron oder Loch) statt. Somit muss zwischen Elektron-Elektron-Loch (eeh) und Elektron-Loch-Loch (ehh) Prozess unterschieden werden. Die Rekombinationsraten sind proportional zu  $n^2 p$  bzw.  $n p^2$ :

$$U_{\text{Auger}} = C_n \cdot (n^2 \cdot p - n_0^2 \cdot p_0) + C_p \cdot (n \cdot p^2 - n_0 \cdot p_0^2), \quad (2.48)$$

hierbei sind  $C_n$  und  $C_p$  die jeweiligen Auger-Koeffizienten für den Elektron-Elektron-Loch-Prozess und den Elektron-Loch-Loch-Prozess.

### 2.7.3. Coulomb verstärkte Auger Rekombination (CE-Auger)

Um sich von diesem theoretischen Modell den experimentellen Ergebnissen der Auger-Rekombination zu nähern, wurde das Coulomb verstärkte Auger-Modell<sup>5</sup> entwickelt [Rei05]. Es besagt, dass die einzelnen Prozessteilchen miteinander durch ihre elektrische Ladung wechselwirken und somit maßgeblich die Rekombinationswahrscheinlichkeit beeinflussen. Dabei werden sogenannte Verstärkungsfaktoren  $g$  (engl. „enhancement-factors“) eingeführt. Außerdem werden die Auger-Koeffizienten nach Konzentration der Ladungsträger gewichtet. Die CE-Auger-Rekombinationslebensdauer ergibt sich dann zu:

$$\tau_{\text{CE-Auger}} = \frac{\Delta n}{C_n^* \cdot (n^2 \cdot p - n_0^2 \cdot p_0) + C_p^* \cdot (n \cdot p^2 - n_0 \cdot p_0^2)}. \quad (2.49)$$

Hierbei ergibt sich der Auger-Koeffizient für den Elektron-Elektron-Loch-Prozess zu:

$$C_n^* = g_{\text{eeh}} \cdot C_n \left( \frac{n_0}{n_0 + \Delta n} \right) + \frac{C_A}{2} \left( \frac{\Delta n}{n_0 + \Delta n} \right) \quad (2.50)$$

und der Auger-Koeffizient für den Elektron-Loch-Loch-Prozess zu:

$$C_p^* = g_{\text{ehh}} \cdot C_p \left( \frac{p_0}{p_0 + \Delta n} \right) + \frac{C_A}{2} \left( \frac{\Delta n}{p_0 + \Delta n} \right). \quad (2.51)$$

Dabei ist  $C_A$  der ambivalente Auger-Koeffizient:  $C_A = C_p + C_n$ . Ebenfalls müssen die Verstärkungsfaktoren für den Elektron-Elektron-Loch-Prozess und den Elektron-Loch-Loch-Prozess nach folgenden Formeln berechnet werden:

<sup>5</sup> Auger-Koeffizienten nach [Rei05]:  $C_n = 2,8 \times 10^{-31} \text{ cm}^6 \text{ s}^{-1}$ ;  $C_p = 9,9 \times 10^{-32} \text{ cm}^6 \text{ s}^{-1}$

$$g_{\text{eeh}}(N_D) = 1 + 44 \left( 1 - \tanh \left( \left( \frac{N_D}{5 \cdot 10^{16}} \right)^{0,34} \right) \right) \text{ und} \quad (2.52)$$

$$g_{\text{ehh}}(N_A) = 1 + 44 \left( 1 - \tanh \left( \left( \frac{N_A}{5 \cdot 10^{16}} \right)^{0,29} \right) \right). \quad (2.53)$$

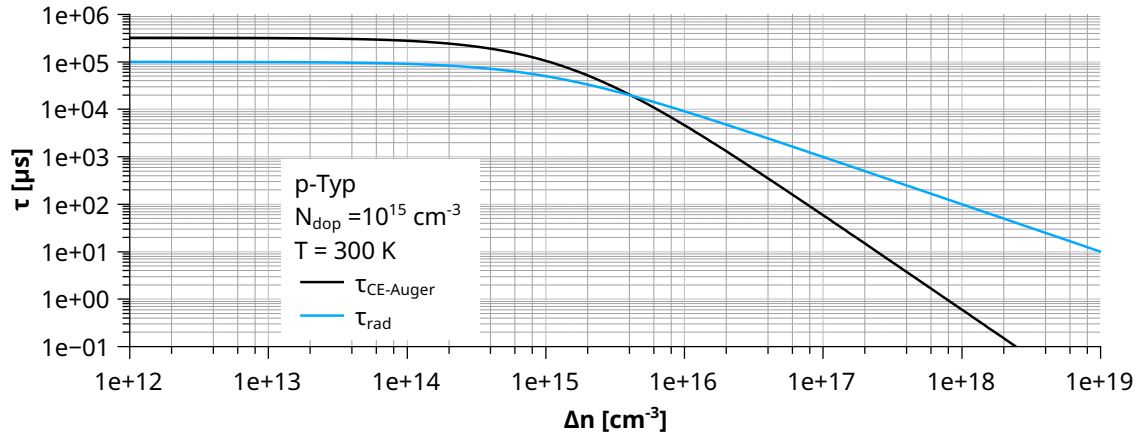


Abb. 2.12: Simulierter Verlauf der Ladungsträgerlebensdauer für die Prozesse von strahlender Rekombination ( $\tau_{\text{rad}}$ ) und Coulomb verstärkter Auger-Rekombination ( $\tau_{\text{CE-Auger}}$ ) als Funktion der Injektionsdichte  $\Delta n$ . Es ist deutlich zu erkennen, dass die *CE – Auger*–Rekombination in Hochinjektion dominant ist.

In Abbildung 2.12 sind strahlende Rekombination und Coulomb verstärkte Auger-Rekombination simuliert worden. Für moderate Dotierstoffkonzentrationen in Silicium kann die strahlende Rekombination unter Niederinjektion den dominierenden intrinsischen Rekombinationsprozess darstellen. Bei hohen Injektionsdichten ist die Auger-Rekombination immer der dominierende intrinsische Rekombinationsprozess.

#### 2.7.4. Shockley-Read-Hall-Rekombination (SRH)

Extrinsische Rekombinationsmechanismen über Defekte sind in realen Kristallen nicht zu vermeiden. Die Störstelle kann auf verschiedene Arten mit den Bandkanten wechselwirken, was sich durch Ratengleichungen beschreiben lässt [SR52, Hal52]. Je nachdem, welche Mechanismen dominieren, kann der Defekt als Rekombinationszentrum, Generationszentrum oder Trappingzentrum wirken [Rei05]. Die einzelnen Teilprozesse sind in Abbildung 2.13 dargestellt.

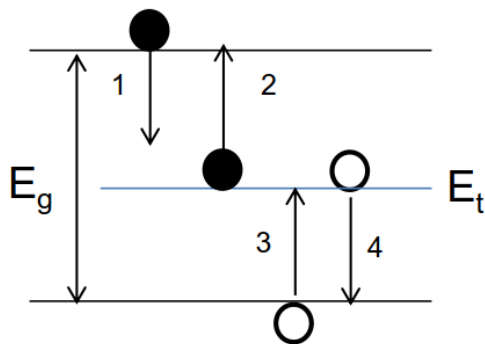


Abb. 2.13: Schematische Darstellung der möglichen Teilprozesse der SRH-Rekombination eines Defektes mit einem diskreten Niveau  $E_t$  innerhalb der Bandlücke  $E_g$ . 1 - Elektroneneinfang, 2 Elektronenemission, 3 Locheneinfang und 4 Lochemission.

Ein Generationszentrum emittiert ein Loch ins Valenzband und ein Elektron ins Leitungsband (2+4). Ein Rekombinationszentrum annihiliert ein Elektron und ein Loch aus den jeweiligen Bändern (1+3). Ein Trappingzentrum fängt einen Ladungsträger aus einem Band ein und gibt ihn später wieder in das entsprechende Band ab (1+2, bzw. 3+4). Die Shockley-Read-Hall Theorie (SRH-Theorie) beschreibt Rekombination über Defekte mit diskreten Energieniveaus ( $E_t$ ) in der Bandlücke. Durch das Aufstellen von Ratengleichungen zu den einzelnen Prozessen lässt sich für ein Rekombinationszentrum folgende Gleichung herleiten (siehe Anhang E) [SR52]:

$$U_{\text{SRH}} = \frac{dn}{dt} = \frac{dp}{dt} = \frac{(np - n_i^2)}{[N_t \sigma_n v_{\text{th,e}}]^{-1} \cdot (p + p_1) + [N_t \sigma_p v_{\text{th,h}}]^{-1} \cdot (n + n_1)}, \quad (2.54)$$

mit den SRH-Dichten  $n_1$  und  $p_1$ . Diese ergeben sich aus den Gleichungen 2.5 a und b unter der Annahme, dass das Fermi-Niveau  $E_F$  für den Defekt gleich der energetischen Lage der Störstelle  $E_t$  ist [SR52]. Es ergeben sich folgende Gleichungen:

$$n_1 = N_C \cdot \exp\left(-\frac{E_C - E_t}{k_B T}\right); \quad p_1 = N_V \cdot \exp\left(-\frac{E_t - E_V}{k_B T}\right). \quad (2.55)$$

Die Einfang-Zeitkonstanten wiederum ergeben sich nach folgenden Gleichungen:

$$\tau_{n0} = [N_t \sigma_n v_{\text{th,e}}]^{-1}; \quad \tau_{p0} = [N_t \sigma_p v_{\text{th,h}}]^{-1}, \quad (2.56)$$

mit den Defekt spezifischen Einfangquerschnitten  $\sigma_{n/p}$ , der Defektkonzentration  $N_t$  und der thermischen Geschwindigkeit der Ladungsträger  $v_{\text{th}}$  [Gre90]. Diese lassen sich nach folgender Gleichung berechnen:

$$v_{\text{th,e/h}} = \sqrt{\frac{8k_B T}{\pi m_{\text{th,e/h}}^*}}. \quad (2.57)$$

Durch  $\Delta n = \Delta p$ , und die Gleichungen 2.54 und 2.56 ist die injektionsabhängige Lebensdauer eines SRH-Rekombinationszentrums  $\tau_{\text{SRH}}$  gegeben durch:

$$\tau_{\text{SRH}} = \frac{\tau_{n0} (p_0 + p_1 + \Delta n) + \tau_{p0} (n_0 + n_1 + \Delta n)}{p_0 + n_0 + \Delta n} \quad (2.58)$$

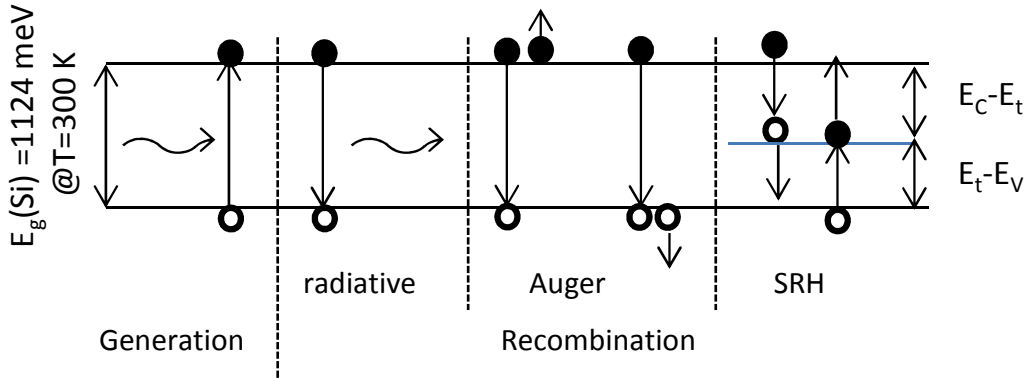


Abb. 2.14: Übersicht über Bulk-Rekombination und Generation. Von links nach rechts: Generation eines Elektron-Loch-Paares, strahlende Rekombination eines Elektrons und eines Loches mit Abgabe eines Photons, Auger-Rekombination eines Elektrons und eines Loches durch Abgabe der Energie an einen weiteren Ladungsträger, SRH-Rekombination über Störstellen innerhalb der Bandlücke.

In Abbildung 2.14 sind die im Volumen stattfindenden Generations- und Rekombinationsprozesse dargestellt. Links ist der Generationsprozess zu sehen, bei dem ein Photon absorbiert wird und mit dessen Energie ein Elektron und Loch generiert werden. Daneben befindet sich der umgekehrte Prozess der strahlenden Rekombination, bei dem ein Elektron und ein Loch rekombinieren und die Energie in ein Photon umgewandelt wird. Folgend sind beide Auger-Teilprozesse eingezeichnet. Hierbei rekombinieren ein Elektron und ein Loch, während die Energie auf einen weiteren Ladungsträger übergeht. Rechts sind die SRH-Teilprozesse dargestellt, sowie die energetische Lage der Störstelle innerhalb der Bandlücke.

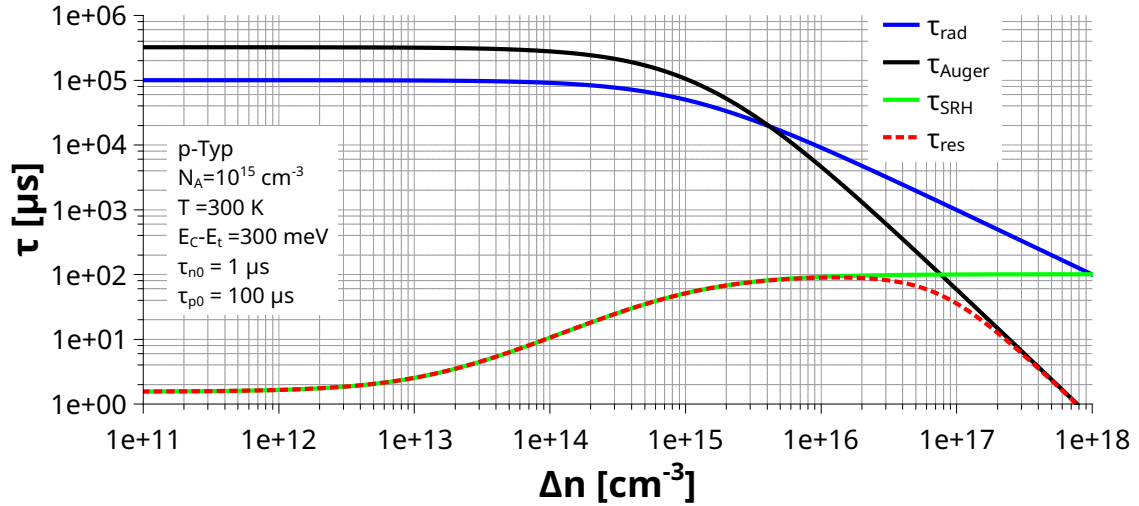


Abb. 2.15: Simulierte injektionsabhängige Lebensdauerkurve  $\tau_{\text{res}}$  für ein SRH-Zentrum unter Berücksichtigung von strahlender Rekombination und Auger-Rekombination. Die SRH-Rekombination  $\tau_{\text{SRH}}$  dominiert die Lebensdauer bis zu einer Injektionsdichte von  $\Delta n = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ . In Hochinjektion dominiert die Auger-Rekombination.

Abbildung 2.15 zeigt eine simulierte injektionsabhängige Lebensdauerkurve. Wie zu erkennen, ist die SRH-Rekombination über einen großen Injektionsbereich der dominierende Mechanismus. Nur in Hochinjektion dominiert die Auger-Rekombination. Die strahlende Rekombination hat nur einen geringfügigen Einfluss.

### 2.7.5. Oberflächenrekombination

Grenzflächenzustände stellen eine abrupte Änderung der Kristallstruktur dar. Oberflächen sind häufig mit einer Vielzahl an Defekten dekoriert und bieten eine Fülle an Energiezuständen innerhalb der Bandlücke an denen Rekombination stattfinden kann [Mä99]. Prominente Beispiele hierfür sind Dangling-Bonds. Oberflächenrekombination lässt sich ähnlich wie die Shockley-Read-Hall-Rekombination über Defektenergieniveaus innerhalb der Bandlücke beschreiben. Jedoch sind diese Energieniveaus aufgrund der Fülle an einzelnen Zuständen über die komplette Bandlücke verteilt. Deswegen sind die Grenzflächenzustandsdichte  $D_{\text{it}}(E_t)$  und die Einfangquerschnitte  $\sigma_p(E_t)$  und  $\sigma_n(E_t)$  energieabhängige Größen [Mä99]. Eine Möglichkeit, die Oberflächenrekombination formal zu beschreiben, besteht darin, die SRH-Rekombinationsrate, wie sie für Punktdefekte nach Shockley-Read-Hall gezeigt wurde, mit der Grenzflächenzustandsdichte zu wichten und diese dann über den Bereich der Bandlücke zu integrieren [Mä99]:

$$U_S = (n_S p_S - n_i^2) \int_{E_V}^{E_C} \frac{v_{\text{th}} D_{\text{it}}(E_t)}{[n_S + n_1(E_t)] \sigma_p^{-1}(E_t) + [p_S + p_1(E_t)] \sigma_n^{-1}(E_t)} dE_t. \quad (2.59)$$

Die Ladungsträgerdichten an der Oberfläche sind mit  $n_S$  und  $p_S$ , die SRH-Dichten als  $n_1$  und  $p_1$  bezeichnet. Die analytische Lösbarkeit erfordert die experimentelle Bestimmung der Grenzflächenparameter  $D_{\text{it}}$ ,  $\sigma_p$ ,  $\sigma_n$  sowie der Grenzflächenladungsträgerkonzentrationen  $n_S$  und  $p_S$ . Die Oberflächenrekombination kann nicht als eine Art Lebensdauer aufgefasst werden, da Sie eine zeitliche Rate pro Flächeninhalt darstellt [Mä99]. Es bietet sich daher an, eine Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeit zu definieren:

$$S = \frac{U_S}{\Delta n}. \quad (2.60)$$

Die Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeit ist eine praktikable, messbare Größe, die es erlaubt, verschiedene Oberflächen hinsichtlich ihres Rekombinationsverhaltens zu beurteilen. Die Injektionsabhängigkeit der Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeit gestaltet sich aufgrund der vielen energieabhängigen Variablen recht komplex. Prinzipiell lässt sich eine Siliciooberfläche mittels Dielektrika wie Siliciumoxid ( $SiO_x$ ) oder Siliciumnitrid ( $SiN_x$ ) passivieren [Rei05]. Zum einen werden die Defektzustände an der Oberfläche zum Großteil abgesättigt, was die Grenzflächenzustandsdichte ( $D_{it}$ ) um mehrere Größenordnungen senkt. Andererseits kann die oberflächennahe Minoritätsladungsträgerdichte, zum Beispiel durch eine Feldeffektpassivierung, gesenkt werden. Beide Effekte reduzieren die Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeit stark. In der Praxis werden häufig ein so genanntes Back Surface Field und dielektrische Schichten mit entsprechenden ortsfesten Ladungen eingesetzt. Wobei Solarzellenkonzepte existieren, bei denen beide Maßnahmen angewandt werden. Durch Passivierung der Siliciooberfläche mit üblichen dielektrischen Schichten findet sowohl eine Reduzierung der Grenzflächenzustände, als auch eine Reduzierung der Minoritätsladungsträger statt [Rei05].

### 2.7.6. Effektive Lebensdauer

Der Begriff effektive Lebensdauer beschreibt eine messbare Größe, welche sich aus der Überlagerung mehrerer Prozesse ergibt. Es addieren sich die Rekombinationsraten der einzelnen Prozesse, wodurch sich für die effektive Lebensdauer folgende Gleichung ergibt [Rei05]:

$$\tau_{\text{eff}}^{-1} = \tau_{\text{bulk}}^{-1} + \tau_{\text{surf}}^{-1} = \tau_{\text{SRH}}^{-1} + \tau_{\text{Auger}}^{-1} + \tau_{\text{rad}}^{-1} + \tau_{\text{surf}}^{-1}. \quad (2.61)$$

Da die strahlende und die Auger-Rekombination in guter Näherung zu modellieren sind, bleibt noch die Oberflächenrekombination, welche den Zugang zur defektbasierten Volumenlebensdauer  $\tau_{\text{SRH}}$  verwehrt. Der Einfluss der Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeit auf die effektive Lebensdauer lässt sich näherungsweise für die Grenzfälle von sehr guter und sehr schlechter Passivierung über analytische Gleichungen abschätzen [Mä99]. Für gute Passivierung ergibt sich die Oberflächenrekombinationslebensdauer zu:

$$\tau_{\text{surf}} = \frac{W}{2S}, \quad (2.62)$$

mit der Waferdicke  $W$ . Als langsamster Prozess begrenzt die Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeit den Einfluss auf die effektive Lebensdauer. Für sehr schlechte Passivierung ergibt sich:

$$\tau_{\text{surf}} = \frac{\left(\frac{W}{\pi}\right)^2}{D_n}, \quad (2.63)$$

mit  $D_n$  dem Diffusionskoeffizienten für Elektronen. Als langsamster Prozess begrenzt die Diffusion von Ladungsträgern zur Oberfläche den Einfluss der Oberflächenrekombination auf die effektive Lebensdauer. Beide Gleichungen lassen sich für beliebige  $W$ ,  $S$  und  $D_n$  zu:

$$\tau_{\text{surf}} = \frac{\left(\frac{W}{\pi}\right)^2}{D_n} + \frac{W}{2S} \quad (2.64)$$

kombinieren. Die Volumenlebensdauer lässt sich zwar durch Subtraktion der Oberflächenlebensdauer berechnen, der einfachere und präzisere Weg zur Materialcharakterisierung ist jedoch die Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeit technisch so weit zu begrenzen, dass die gemessene Lebensdauer  $\tau_{\text{eff}}$  in guter Näherung der Volumenlebensdauer  $\tau_{\text{bulk}}$  entspricht.



## 2.8. Grundlagen der Thermodynamik und Kinetik chemischer Reaktionen

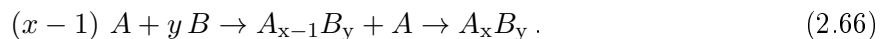
In diesem Kapitel werden grundlegende Konzepte zur Auswertung von Defektreaktionen erläutert. Mit deren Hilfe können die lebensdauerspektroskopischen Ergebnisse falsifiziert werden.

### 2.8.1. Kinetik

Chemische Reaktionen lassen sich als Stöße unterschiedlicher Komponenten beschreiben [AP09]:



Da die Reaktion in Teilschritten ablaufen kann, ist über die Messung der Konzentrationen der unterschiedlichen Komponenten als Funktion der Zeit nur die Analyse des geschwindigkeitsbestimmenden Schrittes möglich, wie es beispielhaft in folgender Gleichung dargestellt ist:



Da der Prozess der chemischen Reaktion einen gleichzeitigen Stoß der beteiligten Teilchen voraussetzt, ist die Wahrscheinlichkeit für diesen Stoß proportional zur Konzentration der beteiligten Komponenten potenziert mit der jeweiligen Anzahl  $m$  der gleichen Stoßpartner. Die Kinetik dieser chemischen Reaktion lässt sich allgemein durch [AP09]:

$$\frac{\partial [A]}{\partial t} = k \cdot [A]^m \cdot [B]^n \quad (2.67)$$

beschreiben. Hierbei können  $m$  und  $n$  gebrochen rationale Zahlen sein. Sie stellen die Ordnung der chemischen Reaktion nach der jeweiligen Konzentration  $[A]$ , bzw.  $[B]$  des Stoßpartners dar. Es gilt für den geschwindigkeitsbestimmenden Schritt  $m \leq x$  bzw.  $n \leq y$ . Ist die Konzentration einer Komponente über den gesamten Reaktionsverlauf nahezu konstant, zum Beispiel durch ein Überangebot von  $B$ , so kann  $[B]^n$  in die Reaktionskonstante  $k$  aufgenommen werden  $k^* = k \times [B]^n$  [AP09]. Die Ordnung der Reaktion bezüglich  $[B]$  ist dadurch vernachlässigbar. Für Reaktionen unterschiedlicher Ordnungen  $m$  ergeben sich unterschiedliche zeitliche Konzentrationsverläufe. Für den Fall einer Reaktion erster Ordnung ergibt sich eine exponentielle Reaktionskinetik mit:

$$[A](t) = [A](t_0) \cdot \exp(-k \cdot (t - t_0)) . \quad (2.68)$$

Eine Reaktion zweiter Ordnung lässt sich durch:

$$[A](t) = \left( \frac{1}{[A](t_0)} + k \cdot (t - t_0) \right)^{-1} \quad (2.69)$$

beschreiben. Reaktionen dritter Ordnung folgen:

$$[A](t) = \left( \frac{1}{([A](t_0))^2} + 2k \cdot (t - t_0) \right)^{-1/2} . \quad (2.70)$$

Die Reaktionskonstante  $k$  beschreibt dabei die Wahrscheinlichkeit für das Ablaufen der chemischen Reaktion bei einer gegebenen Konzentration, ihre Einheit ist vom Reaktionstyp abhängig. Die Konzentration zum Zeitpunkt  $t_0$  ist  $[A](t_0)$  und  $(t - t_0)$  das Zeitintervall zwischen zwei Reaktionszuständen. Falls es sich um eine Gleichgewichtsreaktion handelt, müssen sowohl die Kinetik der Hin- als auch der Rückreaktion berücksichtigt werden. Für den Fall, dass beide Reaktionen erster Ordnung sind, ergibt sich folgende Reaktionskinetik [AP09]:

$$[A](t) = [A](t_0) \cdot \exp(-k \cdot (t - t_0)) + x \times [A_x B_y](t_0) \cdot (1 - \exp(-k \cdot (t - t_0))) . \quad (2.71)$$

Damit ist der zeitliche Verlauf von  $[A](t)$  von beiden momentanen Konzentration  $[A](t_0)$  und  $[A_x B_y](t_0)$  abhängig.

## 2.8.2. Thermodynamik

Für den Fall einer Gleichgewichtsreaktion ist der Zustand des thermodynamischen Gleichgewichts dann erreicht, wenn sich die Konzentrationen nicht mehr ändern.

$$\frac{\partial [A](t)}{\partial t} = \frac{\partial [B](t)}{\partial t} = 0 \quad (2.72)$$

Dadurch sind die Reaktionsgeschwindigkeiten für Hin- und Rückreaktion gleich [AP09]:

$$v_{\text{Hin}} = k_{\text{Hin}} \cdot [A]^m \cdot [B]^n = k_{\text{Rück}} \cdot [A_x B_y]^p = v_{\text{Rück}}, \quad (2.73)$$

wobei  $p$  die Ordnung bezüglich des Reaktionsproduktes darstellt. Das Verhältnis der Reaktionskonstanten im Gleichgewicht wird als Gleichgewichtskonstante  $K_C$  bezeichnet.

$$K_C = \frac{k_{\text{Rück}}}{k_{\text{Hin}}} = \frac{[A]^m \cdot [B]^n}{[A_x B_y]^p} \quad (2.74)$$

Ob das Gleichgewicht zu den Produkten oder den Edukten verschoben ist, wird durch das Prinzip von Le Chatelier beschrieben [AP09]. Unter der Annahme, dass bei der chemischen Reaktion eine diskrete Menge Energie  $E$  verbraucht, bzw. abgegeben wird, ergibt sich ein exponentieller Verlauf von  $K_C$  als Funktion der Temperatur [AP09]:

$$K_C(T) = K_C^0 \cdot \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right). \quad (2.75)$$

Durch eine Arrhenius-Auftragung von  $\ln(K_C/K_C^0)$  über der inversen Temperatur lässt sich im Idealfall  $E$  über den Anstieg einer linearen Anpassung bestimmen. Alternativ kann das entstehende Polynom gelöst werden. Für einen deutlichen Überschuss an  $[B]$  und einer Ordnung der Rückreaktion von  $p = 1$ , sowie den Fall dass  $m = x$  ist ergibt sich folgendes Polynom:

$$0 = [A]_{\text{eq}}^x + \frac{K_C(T)}{x} \left( [A]_{\text{eq}} - [A]_{\text{total}} \right) \quad \text{mit} \quad [A]_{\text{total}} = x \cdot [A_x B_y]_{\text{eq}} + [A]_{\text{eq}}, \quad (2.76)$$

hierbei ist  $[A]_{\text{total}}$  die in verschiedenen Verbindungen gebundene Gesamtkonzentration an  $A$ . Gleichung 2.76 ist für den Fall einer ersten Ordnung von  $m = x = 1$  analytisch durch:

$$[A]_{\text{eq}} = [A]_{\text{total}} \cdot \left( 1 + (K_C(T))^{-1} \right)^{-1} \quad (2.77)$$

lösbar. Für den Fall einer zweiten Ordnung von  $m = x = 2$  ergibt sich durch quadratische Ergänzung:

$$[A]_{\text{eq}} = \frac{\left[ (K_C(T))^2 + 8K_C(T) [A]_{\text{total}} \right]^{\frac{1}{2}} - K_C(T)}{4}. \quad (2.78)$$

Für den Fall einer dritten Ordnung von  $m = x = 3$  kann durch Anwendung der Cardanischen Lösungsformeln zusammen mit dem Satz von Vieta die Gleichung nach der Konzentration aufgelöst werden [Pap03]. Für eine positive Diskriminante, welche sich aus einer nicht negativen Konzentration ergibt, existiert stets nur eine reellwertige Lösung:

$$[A]_{\text{eq}} = \left[ \frac{K_C(T)}{54} \left( \sqrt{4K_C(T) + (9[A]_{\text{total}})^2} + 9[A]_{\text{total}} \right) \right]^{\frac{1}{3}} - \frac{K_C(T)}{9} \left[ \frac{K_C(T)}{54} \left( \sqrt{4K_C(T) + (9[A]_{\text{total}})^2} + 9[A]_{\text{total}} \right) \right]^{-\frac{1}{3}}. \quad (2.79)$$

Mit diesen Gleichungen lassen sich temperaturabhängige Konzentrationsverläufe direkt anpas-

sen ohne den Umweg über die logarithmische Darstellung zu gehen. Die Gleichungen 2.77 bis 2.79 wurden in dieser Arbeit als Grundlage der Auswertung der Thermodynamik von Defektreaktionen benutzt.

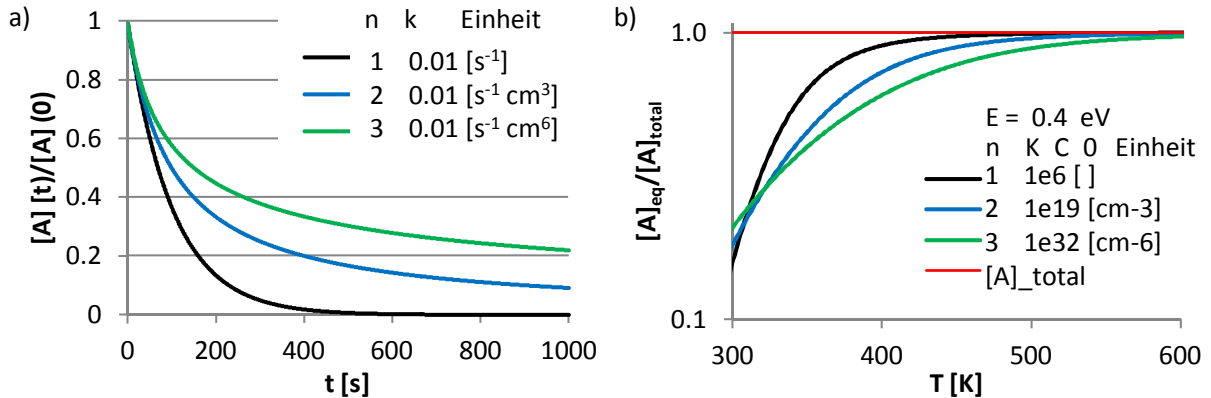


Abb. 2.16: a) Kinetik: berechneter Konzentrationsverlauf für chemische Reaktionen mit unterschiedlichen Reaktionsordnungen  $m$  als Funktion der Zeit  $t$ , b) Thermodynamik: berechnete Gleichgewichtskonzentrationen  $[A]_{eq}$  chemischer Reaktionen mit unterschiedlichen Reaktionsordnungen  $m$  und Gleichgewichtskonstanten  $K_C^0$  als Funktion der Temperatur.

Abbildung 2.16 a zeigt den berechneten zeitlichen Konzentrationsverlauf  $[A]/[A]_0(t)$  für chemische Reaktionen unterschiedlicher Reaktionsordnungen  $m$  bei gleicher Zeitkonstante  $k = 0,01$  s. Es ist deutlich zu erkennen, dass die Reaktionsgeschwindigkeit bei hohen Konzentrationen nahezu identisch ist, während für niedrigere Konzentrationen die Reaktionen höherer Ordnungen langsamer verlaufen, was auf die geringere Wahrscheinlichkeit für einen Vielteilchenstoß bei geringeren Konzentrationen zurückzuführen ist. Abbildung 2.16 b zeigt den berechneten temperaturabhängigen Verlauf der Gleichgewichtskonzentration  $[A]_{eq}/[A]_{total}(T)$  für verschiedene Reaktionsordnungen  $m$  und Gleichgewichtskonstanten  $K_C^0$  in  $[cm^{-3}]^{m-1}$  bei gleicher Energie  $E$ . Es ist deutlich zu erkennen, dass der Anstieg der Konzentration mit der Temperatur bei gleicher Energie der chemischen Reaktion für steigende Reaktionsordnungen flacher wird.

### 3. Experimentelles Vorgehen

In diesem Kapitel werden die Methoden vorgestellt, mit denen die Proben hergestellt und charakterisiert wurden. Es erfolgt eine Abschätzung der Defektkonzentration durch numerische Simulation des Diffusionsprozesses und es werden Methoden vorgestellt, mit denen die Proben hinsichtlich ihrer Dotierstoffkonzentration und ihrer Defektkonzentration charakterisiert werden können. Die Vor- und Nachteile der Methoden werden besprochen. Der Schwerpunkt dieser Arbeit stellt die Anwendung der Quasistatischen Photoleitfähigkeitsmessung (QSS-PC) dar. Es wird ein neuer Lösungsansatz vorgestellt, um das Trapping als Hauptproblem der QSS-PC-Methode mathematisch zu korrigieren.

#### 3.1. Probenpräparation gezielt kontaminierter Proben

Es wurden p-Typ Czochralski-Silicium-Wafer mit einem Basis-Widerstand von rund  $6 \Omega\text{cm}$  und n-Typ Wafer mit einem Basis-Widerstand von rund  $3,5 \Omega\text{cm}$  gewählt. Diese Proben wurden mittels 0,5 molarer Salzsäurelösung ( $\text{HCl}$ ) bei  $50^\circ\text{C}$  für rund 5 Minuten gereinigt. Darauf folgte eine Sägeschadenätze mit 17 %-iger Kaliumhydroxidlösung ( $\text{KOH}$ ) für acht Minuten bei  $70^\circ\text{C}$ . Anschließend fand eine aus drei Schritten bestehende Metallionenreinigung der Waferoberfläche (RCA-Ätze) statt. Dabei wurde zuerst eine SC1-Reinigung mit wässriger Lösung von Ammoniumhydroxid ( $\text{NH}_4\text{OH}$ ) und Wasserstoffperoxid ( $\text{H}_2\text{O}_2$ ) bei  $50^\circ\text{C}$  im Konzentrationsverhältnis  $[\text{NH}_4\text{OH}] / [\text{H}_2\text{O}_2] / [\text{H}_2\text{O}] = 1/1/50$  durchgeführt. Danach wurden die Wafer in 1 molarer Flusssäurelösung ( $\text{HF}$ ) für ungefähr eine Minute bei Raumtemperatur behandelt. Den letzten Schritt der Metallionenreinigung stellt die SC2 Reinigung dar. Hier wurde eine wässrige Lösung aus  $\text{HCl}$  und  $\text{H}_2\text{O}_2$  im Konzentrationsverhältnis  $[\text{HCl}] / [\text{H}_2\text{O}_2] / [\text{H}_2\text{O}] = 1/1/50$  bei  $50^\circ\text{C}$  angewandt.

Danach wurden diese Proben einzeln in verschiedene 0,1 molare Metallsalzlösungen bei  $50^\circ\text{C}$  getaucht, in DI-Wasser gereinigt und anschließend getrocknet. Die unterschiedlichen Metallsalzlösungen waren dabei Kupfer-II-nitrat ( $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2$ )<sub>aq</sub>, Eisen-III-Nitrat ( $\text{Fe}(\text{NO}_3)_3$ )<sub>aq</sub> und Nickel-II-Nitrat ( $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2$ )<sub>aq</sub>. Abbildung 3.1 zeigt die Löslichkeit  $S$  und die Diffusionskonstante  $D$  der zugehörigen Metalle in Silicium im verwendeten Temperaturbereich (gestrichelte Linien), berechnet nach Graff [Gra00].

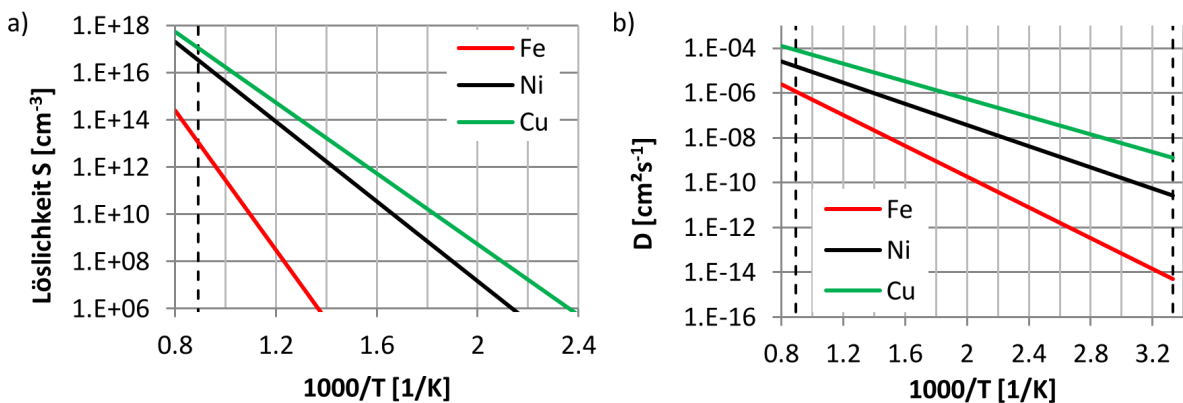


Abb. 3.1: a) Löslichkeit und b) Diffusionskonstante der untersuchten Metalle in Silicium sind exponentiell von der Temperatur abhängig. Bei gleicher Temperatur diffundiert Kupfer deutlich schneller und besitzt auch eine deutlich höhere Löslichkeit als Eisen.

Bei gleichen Temperaturen hat Kupfer die höchste Löslichkeit und Diffusionskonstante und Eisen die niedrigste. Um die oberflächliche Kontamination in das Volumen des Wafers einzubringen wurde in einem Diffusionsofen bei  $850^\circ\text{C}$  für 30 Minuten eine thermische Oxidation durchgeführt. Die Kühlung der Proben erfolgte durch das Ausfahren des Bootes an die Umgebungsluft.

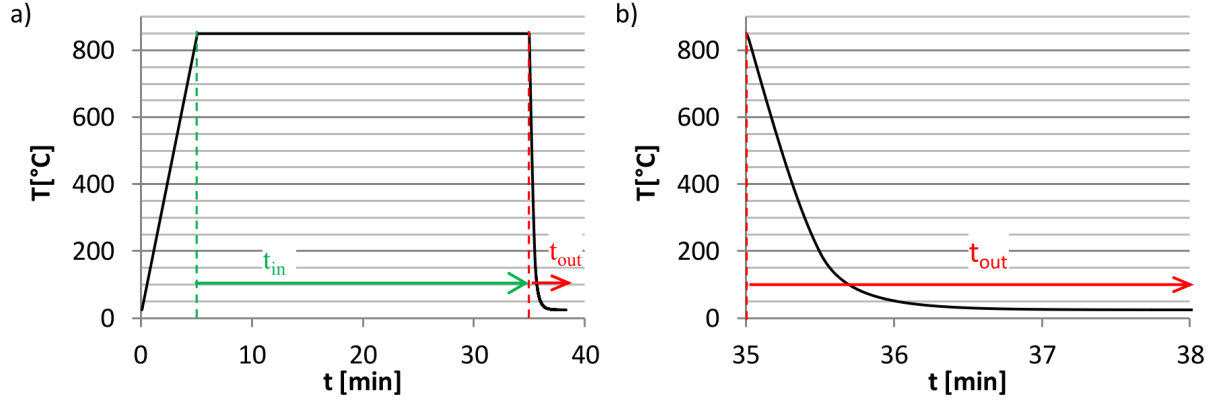


Abb. 3.2: a) Berechnetes Temperaturprofil für die verwendete thermische Oxidation der kontaminierten Proben. b) Detailansicht des Temperaturprofils für die Abkühlung der Proben auf Raumtemperatur.

Abbildung 3.2 zeigt die verwendete Temperaturrampe für die thermische Oxidation. Die Zeit  $t_{in}$  beschreibt die verstrichene Zeit für die Eindiffusion ab Erreichen der Eintreibtemperatur  $T_{in}$ , die Zeit  $t_{out}$  beschreibt die verstrichene Zeit für die Ausdiffusion ab dem Zeitpunkt, ab dem die Proben aus dem Ofen ausfahren und durch die Umgebungstemperatur abkühlen. Die Abkühlrate wurde numerisch über die Prozesse der Wärmestrahlung und Wärmeleitung berechnet. Daraus ergibt sich, dass die Proben innerhalb von 180 Sekunden auf Raumtemperatur abkühlen. Beim Eintreiben der Kontamination führt die Diffusion zu einem spezifischen Konzentrationsprofil über die komplette Probendicke. Der kritische Schritt der Kontamination ist das Abkühlen auf Raumtemperatur. Durch die Temperaturniedrigung sinkt die Löslichkeit der Metalle in Silicium, wodurch eine Übersättigung auftritt. Diese führt entweder zur Bildung von Präzipitaten oder aber zur Diffusion der Kontamination zur Oberfläche, mit eventueller Bildung von Präzipitaten an der Oberfläche. Um einen oberen Grenzwert für die Konzentration an gelösten Metallen im Wafer zu berechnen, wurde angenommen, dass im Volumen keine Präzipitatbildung stattfindet. Für die Berechnung der zu erwartenden Konzentrationsprofile wurde das zweite Ficksche Gesetz verwendet.

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}. \quad (3.1)$$

Ein eindimensionales numerisches Modell für die Berechnung der orts- und zeitabhängigen Konzentrationsverteilung kann durch die Finite Differenzen Methode erstellt werden [RBD10]. Dazu wird das zweite Ficksche Gesetz als Differenzenquotient dargestellt.

$$c_{t,x} = c_{t-\Delta t,x} + D(T(t)) \cdot \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \cdot (c_{t-\Delta t,x-\Delta x} + c_{t-\Delta t,x+\Delta x} - 2 \cdot c_{t-\Delta t,x}), \quad (3.2)$$

mit  $\Delta x$  der Schrittweite entlang der Waferdicke  $W$ ,  $\Delta t$  dem Intervall eines Zeitschrittes und  $D(T(t))$  dem temperaturabhängigen Diffusionskoeffizienten. Die Temperatur ist hierbei eine Funktion der Zeit, wie sie in Abbildung 3.2 zu sehen ist. Es muss nun ein Gitter erstellt werden mit  $(W/\Delta x) + 1$  Gitterpunkten. Wobei in dieser Arbeit eine konstante Schrittweite  $\Delta x$ , von ein Hundertstel der Waferdicke  $W$  ( $\sim 160 \mu m$ ), verwendet wurde. Gleichung 3.2 berechnet nun nach einem Zeitschritt  $\Delta t$  für jede Stelle  $x$  eine neue Konzentration aus den Konzentrationsdifferenzen zu den nächsten Nachbarn  $x + \Delta x$  und  $x - \Delta x$ . Ist das Produkt aus Diffusionskonstante und Zeitschritt  $D(t) \times \Delta t$  zu groß, perturbiert das Konzentrationsprofil und führt zu nicht sinnvollen Lösungen von Gleichung 3.2. Deswegen muss die Größe des verwendeten Zeitschrittes  $\Delta t$  für die jeweilige Kontamination angepasst werden. Für Kupfer wurde ein Zeitschritt von 0,1 ms verwendet, für das langsam diffundierende Eisen 30 ms. Der Fehler in diesem Modell ist proportional zu  $\Delta x^2$ , sodass ein feineres Gitter genauere Lösungen liefern kann, wenn der Zeitschritt  $\Delta t$  entsprechend angepasst wird, was den Rechenaufwand jedoch proportional zu  $\Delta x^{-3}$  erhöht.

Als Randwerte für die Eindiffusion der Kontamination bei konstanter Temperatur  $c_{t_{in},x=0}$  und  $c_{t_{in},x=W}$  wurde die Löslichkeit der Kontamination in Silicium bei der Eintreibetemperatur angenommen (Dirichlet Bedingung) [RBD10]. Dies ist äquivalent zu der Annahme, dass für  $t_{in} = 0$  eine unendlich dünne Schicht an der Waferoberfläche existiert, welche schon gesättigt ist (die Konzentration hat die Löslichkeit erreicht) ( $c_{t_{in}=0,x=0} = c_{t_{in}=0,x=W} = S(T_{in})$ ). Da diese Randbedingung für die Eindiffusion konstant ist, handelt es sich numerisch um Diffusion aus unendlicher Quelle. Die Ausgangskonzentration im Volumen des Wafers  $c_{t_{in}=0,x}$  wurde für alle Werte von  $0 < x < W$  mit 0 angenommen. Nach etwa  $W/2 \cdot \Delta x$  Zeitschritten bildet sich ein typisches, symmetrisches Konzentrationsprofil aus. In Abbildung 3.3 a ist beispielhaft das Konzentrationsprofil für die Eindiffusion von Eisen bei verschiedenen Zeiten dargestellt. Abbildung 3.3 b zeigt den zeitlichen Verlauf der über die Probendicke  $W$  gemittelten Konzentrationen der einzelnen Metallkontaminationen.

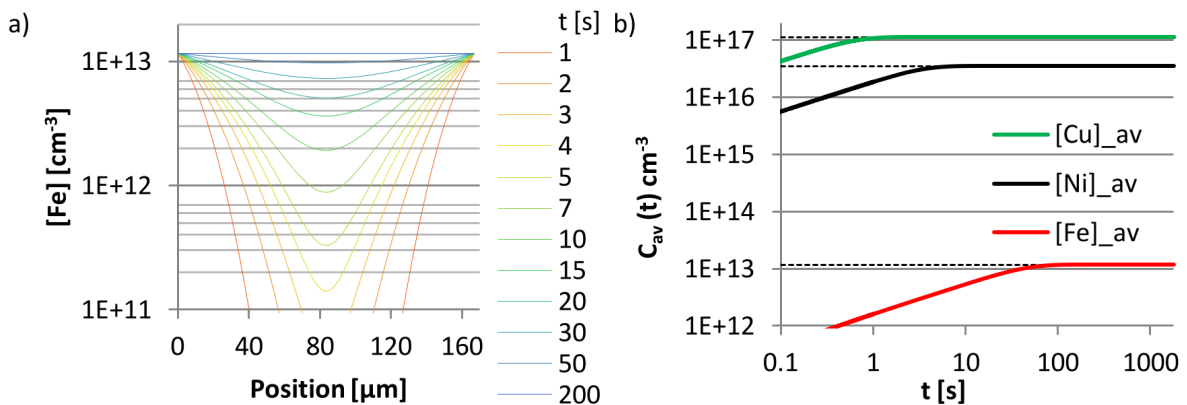


Abb. 3.3: a) Berechnete Konzentrationsprofile für verschiedene Zeitschritte während der Eindiffusion durch thermische Oxidation von Eisen. Nach 200 Sekunden ist das Volumen des Wafers nahezu mit Eisen gesättigt. b) Berechneter zeitlicher Verlauf der mittleren Metallkonzentration in den verwendeten Proben, während der Eindiffusion durch thermische Oxidation. Das Volumen der mit Kupfer kontaminierten Probe ist schon nach 2 Sekunden, die mit Nickel kontaminierte nach 20 Sekunden gesättigt.

Es ist deutlich zu erkennen, dass nach einer Eintreibzeit von 200 Sekunden der Wafer mit Eisen gesättigt ist. Da die anderen Kontaminanten deutlich schneller diffundieren, tritt die Sättigung schon bei geringeren Eintreibzeiten ein. Für die Ausdiffusion der Kontamination wurde dasselbe Modell verwendet. Der Unterschied zur Eindiffusion bei konstanter Temperatur ist, dass sowohl die Randwertkonzentration als auch die Diffusionskonstante, entsprechend der jeweiligen Temperaturabhängigkeit, durch die Abkühlung mit der Zeit abnimmt. Die Änderung der Randwertkonzentration mit der Temperatur entspricht dabei der Annahme, dass eine unendlich dünne Schicht an der Waferoberfläche existiert, welche nicht mehr übersättigt ist. Durch die geringere Randwertkonzentration entsteht ein Konzentrationsgradient zur Oberfläche, welcher in diesem Modell die Triebkraft für die Ausdiffusion der Kontamination darstellt. Abbildung 3.4 a zeigt die Ergebnisse der Simulationen für alle drei Kontaminationen. Wie zu erkennen ist, sinkt die mittlere Defektkonzentration mit der Zeit. Für die schnell diffundierenden Kontaminationen Nickel und Kupfer ist die residuelle Defektkonzentration weitaus niedriger als deren Löslichkeit bei der Eintreibetemperatur. Es ist auch zu erkennen, dass ein höherer Diffusionskoeffizient einen stärkeren Konzentrationsgradienten über die Waferdicke bedingt. So ist für Eisen das Verhältnis von maximaler zu minimaler Konzentration in etwa 10, für Kupfer und Nickel beträgt das Verhältnis rund 30. Es lässt sich ebenfalls erkennen, dass diese Methode der Probenpräparation einen wesentlichen Nachteil hat. So sinkt auch bei einer Abkühlung der Probe auf Raumtemperatur innerhalb einer Sekunde die Defektkonzentration an der Oberfläche um bis zu eine Größenordnung. Dies muss bei der Anwendung oberflächensensitiver Messmethoden zur Konzentrationsbestimmung berücksichtigt werden.

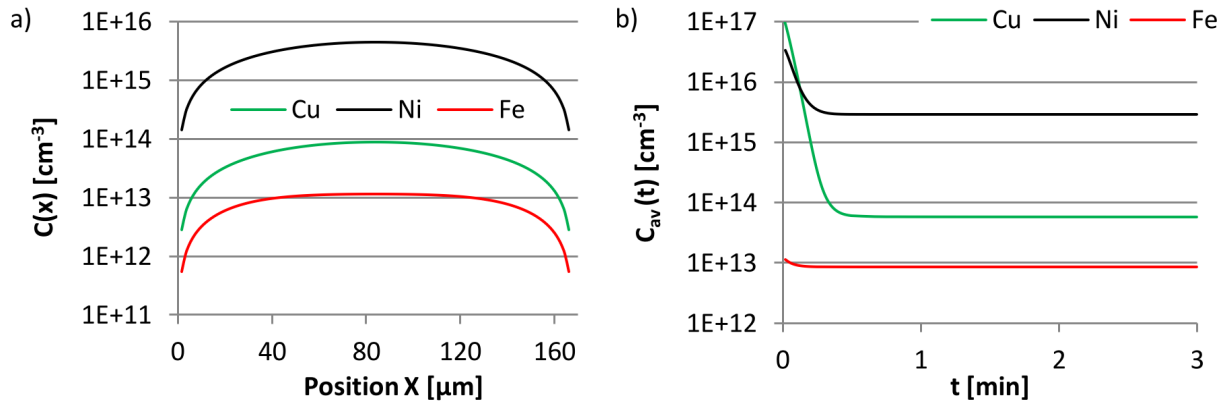


Abb. 3.4: a) Berechnete residuelle Konzentrationsprofile nach thermischer Oxidation für die verschiedenen Kontaminationen. Nickel bildet die höchste residuelle Konzentration aus, während die residuelle Konzentration an Eisen am geringsten ist. Für alle Proben ist die oberflächennahe Volumenkonzentration durch Ausdiffusion erniedrigt. b) Zeitlicher Verlauf der mittleren Volumenkonzentration für die verschiedenen Kontaminationen als Funktion der Zeit während des Abkühlens. Während die mittlere Volumenkonzentration an Eisen durch das Abkühlen nahezu unverändert bleibt, sinken die mittleren Volumenkonzentrationen an Kupfer und Nickel stark ab. Da Kupfer einen höheren Diffusionskoeffizienten als Nickel besitzt und auch bei geringeren Temperaturen mobil ist, sinkt die mittlere Volumenkonzentration an Kupfer auf ein niedrigeres Niveau als die des Nickels ab.

Es sei angemerkt, dass die berechneten Konzentrationsprofile eine Abschätzung für die maximal zu erwartende Fremdatomkonzentration darstellen. Zum einen muss die Annahme einer unendlichen Quelle nicht erfüllt sein, zum anderen können nachfolgende Temperaturbehandlungen wie z.B. während der Siliciumnitridabscheidung das Konzentrationsprofil homogenisieren. Außerdem kann Präzipitatbildung im Volumen die gelöste Konzentration deutlich senken. Bei der thermischen Oxidation wird an der Waferoberfläche eine Passivierschicht aus Siliciumoxid ( $SiO_x$ ) erzeugt. Dadurch waren erste Messungen an den Proben möglich. Anschließend konnte das Oxid mittels einer wässrigen, 1 molaren HF-Lösung bei Raumtemperatur chemisch abgetragen werden. Eine darauf folgende SC2-Reinigung mit finalem HF-Dip diente der erneuten Reinigung der Oberfläche. Die Wafer konnten nun durch einen Plasma unterstützten chemischen Abscheideprozess (PECVD) mit einem Siliciumnitrid ( $SiN_x$ ) für eine deutlich bessere Passivierung beschichtet werden. Hierbei wurde ein Prozess zur Abscheidung eines Nitrids mit hohem Brechungsindex und hoher Wasserstoffkonzentration gewählt, um eine möglichst gute Passivierung zu gewährleisten. Die Zuverlässigkeit der Lebensdauermessungen an den so hergestellten Proben ist im Vergleich zu den mit  $SiO_x$  passivierten Proben deutlich besser. Durch das Abtragen des Oxids wird jedoch in der Regel ein Großteil der oberflächlichen Kontamination entfernt, wodurch sich die Messungen, trotz ausreichender Passivierung von Oxid und Nitrid, an derselben Probe mit unterschiedlicher Passivierung qualitativ stark unterscheiden können. Ebenfalls ist es möglich, dass sich durch die Nitridabscheidung neue Defektkomplexe zum Beispiel mit Wasserstoff bilden.

### 3.2. Vier-Spitzen-Methode

Zur Bestimmung der Dotierstoffkonzentration eines dünnen Siliciumwafers bietet sich die Vier-Spitzen-Methode an, bei welcher der spezifische Widerstand  $\rho$  über den Schichtwiderstand  $R_{\square}$  nach [Sch06]:

$$\frac{1}{\sigma \cdot W} = \frac{\rho}{W} = R_{\square} = \frac{\pi}{\ln 2} \cdot \frac{U}{I} \quad (3.3)$$

berechnet wird, wobei  $\sigma$  die Leitfähigkeit der Probe,  $W$  die Waferdicke,  $U$  die angelegte Spannung und  $I$  die gemessene Stromstärke sind. Der geometrische Korrekturfaktor  $\pi/\ln 2$  gilt unter der

Annahme einer dünnen, unendlich ausgedehnten Probe. Der Korrekturfaktor ergibt sich unter anderem durch den Spitzenabstand und die Probendicke und kann bei der Messung unterschiedlicher Probenpositionen variieren. Eine detaillierte Beschreibung zur Berechnung des Korrekturfaktors findet sich in [Sch06]. Durch Einsetzen der Leitfähigkeit  $\sigma$  in das Mobilitätsmodell nach Dorkel und Leturcq [DL81] für  $T = 300 \text{ K}$  und  $\Delta n = 0$ , sowie der Wahl der Dotierart lassen sich die Gleichgewichtsladungsträgerkonzentrationen berechnen. Da diese, wie auch die Mobilitäten, Funktionen der Anzahl an ionisierten Störstellen sind, müssen numerische Methoden, wie iterative Berechnung, angewendet werden. Der Index  $j$  kennzeichnet den jeweiligen Iterationsschritt. Für p-Typ Silicium ergibt sich aus Gleichung 2.39 die Konzentration an Majoritäten zu:

$$p_{0;j+1} = \frac{\sigma/q - \mu_n \left( N_{A;j}^- \right) \cdot n_{0;j}}{\mu_p \left( N_{A;j}^- \right)}, \quad (3.4)$$

hierbei sind  $\sigma$  die Leitfähigkeit der Probe,  $q$  die Elementarladung,  $\mu_{n/p}$  die Mobilitäten der Ladungsträger,  $p_0$  und  $n_0$  die Gleichgewichtsladungsträgerkonzentrationen und  $N_A^-$  die Konzentration an ionisierten Dotierstoffatomen. Aufgrund des Massenwirkungsgesetzes (Gleichung 2.6) lässt sich  $n_0$  berechnen, wobei  $n_i (T = 300 \text{ K})$  die intrinsische Ladungsträgerkonzentration bei Raumtemperatur darstellt:

$$n_{0;j+1} = \frac{n_i^2 (T = 300 \text{ K})}{p_{0;j+1}}. \quad (3.5)$$

Mit der Bedingung der Ladungsneutralität (Gleichung 2.10) ergibt sich die Konzentration an ionisierten Dotierstoffatomen  $N_A^-$  zu:

$$N_{A;j+1}^- = p_{0;j+1} - n_{0;j+1}. \quad (3.6)$$

Dieser Schätzwert für  $N_A^-$  dient als Eingabe für das Mobilitätsmodell, wodurch sich beim nächsten Iterationsschritt ( $j = j + 1$ ) ein besserer Schätzwert für  $N_A^-$  ergibt. Dieses Modell ergibt nach drei Iterationsschritten einen selbstkonsistenten Wert für  $N_A^-$ . Dies bedeutet, dass der Fehler in der Berechnung von  $N_A^-$  kleiner 10 Prozent ist. Um Rechenfehler weiter zu minimieren, wurden für jede Probe acht Iterationsschritte durchgeführt. Als Startwerte wurden verwendet:

$$N_{A;j=0}^- = 0; n_{0;j=0} = 0. \quad (3.7)$$

Die Dotierstoffkonzentration lässt sich nun ebenfalls iterativ, unter Zuhilfenahme von Gleichung 1.16 und 1.17 durch folgende Formel für p-Typ Material bestimmen:

$$N_{A;j+1} = \frac{N_A^-}{f_A (T = 300 \text{ K}; N_{\text{dop}} = N_{A;j}; E_A)}. \quad (3.8)$$

Hierbei wurden wieder acht Iterationsschritte durchgeführt mit  $N_{\text{dop}} = N_A^-$  als Startwert. Der so erhaltene Wert für die mittlere Dotierstoffkonzentration  $N_A$  berücksichtigt alle bisher beschriebenen thermischen Abhängigkeiten und wurde zur Berechnung des Ladungsträgergleichgewichtes für die Lebensdauerspektroskopie verwendet. Es sei angemerkt, dass sich je nach Wahl des zugrunde liegenden Mobilitätsmodells unterschiedliche Dotierstoffkonzentrationen ergeben können.

### 3.3. Lebensdauermesstechnik

Bei der Messung der Lebensdauer wird aus einem primären Signal die Überschussladungsträgerdichte  $\Delta n$  berechnet. Wobei die Überschussladungsträger in der Regel optisch erzeugt werden. Durch die zeitliche Variation der Bestrahlungsstärke kann ein zeitlicher Verlauf der Überschussladungsträgerdichte erzeugt werden. Es gibt hierzu verschiedene Methoden, welche sich bezüglich



der Beleuchtung in statisch, transient und quasi-statisch einteilen lassen [Rei05]. Statische Beleuchtungsmethoden haben für die Lebensdauerermessung kaum Relevanz, da sich während der Beleuchtung die Temperatur der Probe stark ändert, was sich auf die gemessene Lebensdauer auswirkt. Transiente Beleuchtungsmethoden erzeugen einen kurzen intensiven Lichtpuls. Danach kann der zeitliche Verlauf des Leitwertes ohne Beleuchtung gemessen werden. Eine dritte Möglichkeit ist es, einen Lichtpuls zu verwenden, der über mehrere Millisekunden in seiner Intensität abklingt. Die Zeitkonstante für das Abklingen der Lichtintensität ist dabei so groß, dass die Rekombinationsprozesse innerhalb der Probe unter nahezu statischen Bedingungen ablaufen. Dies lässt sich dadurch erreichen, dass die gemessene Lebensdauer weitaus kleiner ist als die Abklingzeitkonstante des Lichtpulses. Die Methode ist auch bekannt als „quasi steady state“. Die Änderung der Injektionsdichte  $\Delta n$  mit der Zeit  $t$  am Ort  $x$  lässt sich durch die Kontinuitätsgleichung beschreiben [Ber98]:

$$\frac{\partial \Delta n(t, x)}{\partial t} = G(t, x) - U(t, x) + D_n \frac{\partial^2 \Delta n(t, x)}{\partial x^2}. \quad (3.9)$$

Mit  $G$  und  $U$  der Generationsrate und Rekombinationsrate,  $\Delta n$  der Überschussladungsträgerdichte und  $D_n$  der Diffusionskonstante für Elektronen. Der letzte Term ist bei homogener Beleuchtung mit infrarotem Licht und vernachlässigbarer Oberflächenrekombination vergleichsweise klein. Die effektive Lebensdauer einer Probe ergibt sich dann mit Gleichung 2.44 zu:

$$\tau_{\text{eff}}(\Delta n) = \frac{\Delta n(t)}{G(t) - \frac{\partial \Delta n(t)}{\partial t}}. \quad (3.10)$$

Dies ist eine Gleichung für den allgemeinen Fall einer optischen Anregung und wird generalisierte Auswertung genannt [Ber98]. Sie ist prinzipiell auf alle Methoden anwendbar, vorausgesetzt die Injektionsdichte  $\Delta n$  und die Generationsrate  $G$  können als Funktion der Zeit  $t$  berechnet werden. Für die transiente optische Anregung vereinfacht sich die Gleichung zu:

$$\tau_{\text{eff}}(\Delta n) = \frac{\Delta n(t)}{-\frac{\partial \Delta n(t)}{\partial t}}. \quad (3.11)$$

Diese Gleichung gilt nur, wenn die Abklingzeitkonstante des Lichtpulses wesentlich kleiner ist als die zu messende Lebensdauer [Ber98]. Da die Messung des Leitwertes im Anschluss an den Lichtpuls im Dunkeln gemessen wird, entfällt der Generationsterm. Sodass für transiente Messungen nur  $\Delta n$  als Funktion der Zeit  $t$  berechnet werden muss. Für den quasi-statischen Fall vereinfacht sich die Gleichung zu:

$$\tau_{\text{eff}}(\Delta n) = \frac{\Delta n(t)}{G(t)}. \quad (3.12)$$

Diese Gleichung ist nur gültig, wenn die Abklingzeit des Lichtpulses wesentlich größer ist als die zu messende Lebensdauer [Ber98]. Abbildung 3.5 a und b zeigen schematisch die Verläufe quasistatischer und transienter Photoleitfähigkeitsmessungen.

### 3.3.1. Quasi Steady State Photoconductance (QSS-PC)

Für die temperaturabhängigen Lebensdauerermessungen wurden sowohl ein modifizierter „Brick-Lifetime-Tester BCT 400“ als auch ein „Wafer-Lifetime-Tester WCT 120“ der Firma Sinton Instruments verwendet. Eine Blitzlampe dient als Beleuchtungsquelle, während die Lichtintensität mit einer, durch einen Messwiderstand kurzgeschlossenen, Referenzsolarzelle bestimmt wird. Unter Beleuchtung wird die an diesem Widerstand abfallende Spannung gemessen. Sie korreliert linear mit der Intensität  $I(t)$  des einfallenden Lichtes. Der Wafer wird induktiv durch eine Spule an einen Schwingkreis angekoppelt, was bei einem angelegten zeitlich veränderlichen Magnetfeld,

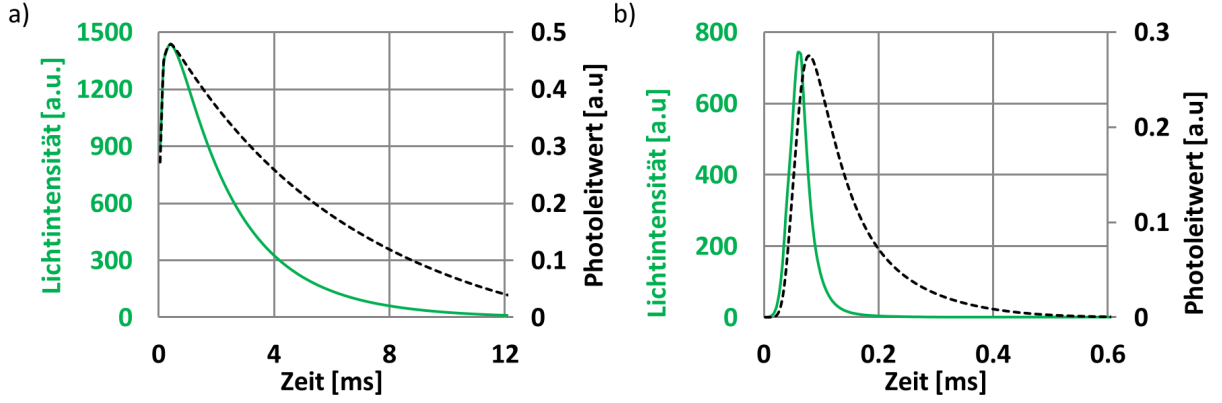


Abb. 3.5: Messwerte für die Lichtintensität und den Photoleitwert einer Lebensdauerprobe bei a) quasistatischer Photoleitfähigkeitsmessung und b) transientser Photoleitfähigkeitsmessung. Der Lichtpuls bei transientser Beleuchtung ist deutlich kürzer und klingt demzufolge in seiner Intensität schneller ab.

zu einem Wirbelstrom im Wafer führt. Nach der Lenzschen Regel erzeugt dieser Wirbelstrom ein, der Ursache entgegengesetztes, Magnetfeld. Durch die Wahl eines geeigneten Schwingkreises kann eine Spannung abgegriffen werden, von welcher der Leitwert  $S(t)$  der Probe quadratisch abhängt [Ber98]. Zur Berechnung der Lebensdauer müssen wie in den oben genannten Gleichungen die Generationsrate (außer im transienten Fall) und die Überschussladungsträgerdichte ermittelt werden. Die Generationsrate kann aus der Lichtintensität berechnet werden. Dazu wird angenommen, dass die Probe nur einen Teil des Lichtes absorbiert ( $f_{\text{abs}} < 1$ ). Die Lichtintensität wird in der Einheit „Sonnen“ angegeben ( $1 \text{ Sonne} = 1000 \text{ W/m}^2$ ),  $N_{\text{ph}}^{1\text{sun}}$  ist der Photonfluss bei einer Sonne und  $W$  ist die Dicke des Wafers:

$$G_{\text{av}}(t) = \frac{I_{\text{av}}(t) \cdot f_{\text{abs}} \cdot N_{\text{ph}}^{1\text{sun}}}{W}. \quad (3.13)$$

Die Überschussladungsträgerdichte kann aus dem Leitwert  $S$  der Probe berechnet werden, indem die Leitfähigkeit  $\sigma$  als Produkt von Mobilität und Ladungsträgerdichte ausgedrückt wird. Leitwert und Leitfähigkeit können demnach ineinander überführt werden:

$$\sigma(t) = \frac{S(t)}{W} = q \cdot (\mu_n(n) \cdot n(t) + \mu_p(p) \cdot p(t)). \quad (3.14)$$

Die Überschussladungsträgerdichte  $\Delta n = \Delta p$  ergibt sich somit aus der Änderung des Leitwertes  $\Delta S$  zwischen beleuchtetem und unbeleuchtetem Zustand nach folgenden Gleichungen:

$$\Delta S(t) = q \cdot \Delta n(t) \cdot (\mu_n(\Delta n) + \mu_p(\Delta n)) \cdot W \text{ und} \quad (3.15)$$

$$\Delta n(t) = \frac{\Delta S(t)}{q \cdot (\mu_n(\Delta n) + \mu_p(\Delta n)) \cdot W}. \quad (3.16)$$

Während relative Leitfähigkeitsänderungen  $\Delta\sigma$  mit hoher Genauigkeit und Zeitauflösung gemessen werden können, ist die Bestimmung des Absolutwertes der Leitfähigkeit  $\sigma$  und somit des spezifischen Widerstandes  $\rho$  mit dieser Methode zu ungenau für lebensdauerspektroskopische Zwecke. Da die Mobilität der Ladungsträger von der Überschussladungsträgerdichte  $\Delta n$  abhängt, muss sich den realen Werten von  $\Delta n$  und  $\mu_{n/p}$  numerisch mit einem injektionsabhängigen Mobilitätsmodell genähert werden, wobei in dieser Arbeit aus Konsistenzgründen wieder das Modell von Dorkel und Leturcq [DL81] gewählt wurde. Dabei liefern erfahrungsgemäß drei Iterationsschritte eine selbstkonsistente Näherung mit relativ geringem Fehler ( $< 10\%$ ). Um Fehler weiter zu reduzieren, wurden innerhalb dieser Arbeit für jeden Messwert sieben Iterationsschritte unter

Zuhilfenahme der Gleichungen 2.33 bis 2.37 durchgeführt:

$$\Delta n_{j+1}(t) = \frac{\Delta S(t)}{q \cdot W} \cdot \frac{1}{(\mu_n(\Delta n_j) + \mu_p(\Delta n_j))}. \quad (3.17)$$

Als Startwerte für die Mobilitäten wurden die Werte für den phononischen Anteil der Mobilität  $\mu_L$  (Gleichung 2.33) nach Dorkel und Leturcq verwendet, da diese einen oberen Grenzwert der Mobilität bei gegebener Temperatur darstellen.

Die QSSPC-Anlage BCT 400 war mit einem beheizten Probenhalter für Temperaturen bis 280 °C, die Anlage WCT 120 mit einem beheizten Probenhalter bis 180 °C ausgestattet. Messungen bei Temperaturen unterhalb von Raumtemperatur konnten nicht durchgeführt werden. Bei beiden Systemen konnte die Pulsdauer um zwei Größenordnungen variiert werden, was sowohl transiente als auch quasistatische Photoleitfähigkeitsmessungen ermöglichte. Die Benutzung der Anlage im QSSPC-Modus im Zusammenhang mit der generalisierten Berechnung der Lebensdauer ermöglicht eine schnelle und zuverlässige Messung bei Lebensdauern zwischen 1 und mehreren 100  $\mu\text{s}$ , sowie Injektionsdichten von  $10^{12}$  bis  $10^{17} \text{ cm}^{-3}$  für das WCT 120 und bis  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$  für das BCT 400. Sofern es möglich war wurden die Lebensdauermessungen bei verschiedenen Temperaturen mit dem BCT 400 durchgeführt, da dies einige Vorteile hatte. Erstens ist die Spule größer, sodass der Leitwert  $S$  über eine größere Fläche gemittelt wird. Außerdem ist der optische Weg zwischen Blitzlampe und Wafer deutlich kürzer und es wird nur ein kleiner Fleck von rund  $3 \text{ cm}^2$  beleuchtet, wodurch sich, selbst bei stark kontaminierten Proben, die Lebensdauer in Hochinjektion messen ließ. Des Weiteren sind die Heizelemente leistungsstärker wodurch sich höhere Temperaturen einstellen ließen. Außerdem ist die thermische Masse des Probenhalters deutlich höher, sodass die Proben deutlich langsamer abkühlen. Dies wurde bei den Messungen am BCT 400 ausgenutzt, indem die Proben zuerst auf eine möglichst hohe Temperatur aufgeheizt wurden. Anschließend wurden die jeweiligen Temperaturschritte mit ausgeschalteten Heizern, ohne definiertes Temperaturregime, und langsamer Abkühlrate durchfahren. Das Temperaturprofil über den kompletten Wafer ist bei abgeschaltetem Heizer sehr homogen. Es wurden 10 Messungen für jede Temperatur durchgeführt und die Ergebnisse gemittelt. Die Messung der Proben-temperatur erfolgte durch ein eingebautes Thermoelement an der Unterseite des Probenhalters. Durch die Verwendung einer Probenabdeckung konnte, durch die Ausbildung eines Wärmestaus unterhalb der Abdeckung, eine geringere Temperaturdifferenz zwischen Probenoberfläche und internem Temperatursensor von weniger als einem Kelvin erreicht werden. Abbildung 3.6 a zeigt den Aufbau der BCT 400 Anlage. Abbildung 3.6 b zeigt schematisch das Funktionsprinzip der BCT 400 Anlage.

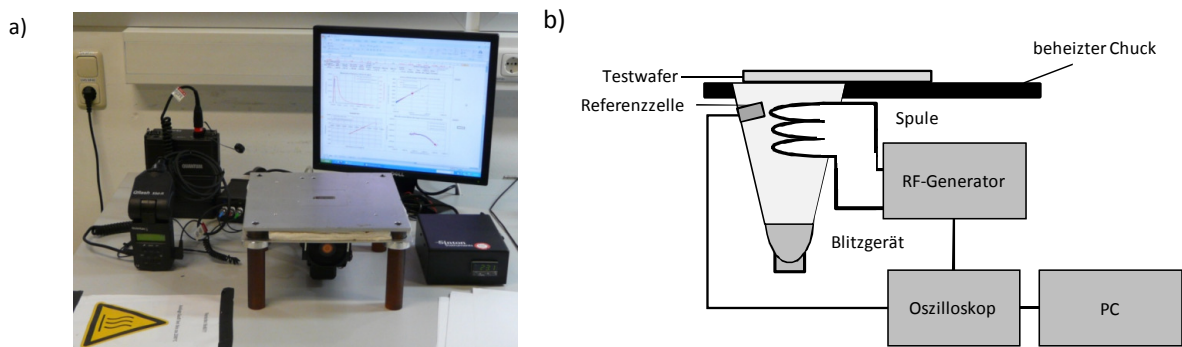


Abb. 3.6: a) Apparativer Aufbau der BCT 400 QSS-PC Anlage b) Schematische Darstellung des BCT 400. Bei der BCT 400 Anlage liegt der Wafer auf dem beheizbaren Chuck mit integrierter Spule auf. Er wird durch einen Lichtleiter mit geringer Apertur von unten mit infrarotem Licht beleuchtet. Die Referenzsolarzelle ist im Strahlengang integriert.

Für viele Proben konnte jedoch mit dem modifizierten BCT 400 die Lebensdauer in Niederin-

jektion nicht zuverlässig gemessen werden. Grund dafür war der eingebaute Messwiderstand der Referenzsolarzelle. Bei Proben mit hoher Lebensdauer war das Signal bei schwacher Lichtintensität zu stark verrauscht, um zuverlässige Messungen zu ermöglichen.

Die verwendete WCT 120 Anlage hingegen war für Messungen hoher Lebensdauern in Niederrinjektion ausgelegt, sodass sämtliche Proben mit hoher Lebensdauer ( $1\mu s > 100\mu s$ ) mit ihr gemessen wurden. Ein Vorteil der WCT 120 Anlage ist, dass die zu messenden Proben homogen ausgeleuchtet werden. Restriktionen der Anlage waren vor allem die schwachen Heizelemente, durch die nur ein eingeschränkter Temperaturbereich zur Verfügung stand. Außerdem war die thermische Masse des Probenhalters klein, sodass die Messungen bei eingeschaltetem Heizelement durchgeführt werden mussten. Die schwache Heizleistung beeinflusste das laterale Temperaturprofil des Wafers nur geringfügig. Die einzelnen Temperaturschritte wurden gezielt angefahren. Die Messungen wurden erst dann durchgeführt, wenn die zeitliche Schwankung des Messwertes des Temperatursensors über mehrere Minuten kleiner 0,5 K war.



Abb. 3.7: a) Apparativer Aufbau der WCT 120 Anlage b) Schematische Darstellung des WCT 120. Bei der WCT 120 Anlage liegt der Wafer auf einem beheizbaren Probenhalter mit integrierter Spule auf. Der Wafer wird von oben mit infrarotem Licht beleuchtet. Die Referenzsolarzelle befindet sich neben dem beheizbaren Probenhalter.

Abbildung 3.7 a zeigt den Aufbau der WCT 120 Anlage, Abbildung 3.7 b zeigt schematisch das Funktionsprinzip. Für den Fall, dass die Probe optisch dissoziierbare Kontaminationen enthielt, konnte mit dem BCT 400 eine Dissoziation (Abschnitt 5.2.2) durchgeführt werden. Dazu wurde der Infrarotfilter aus dem Strahlengang entfernt und die Probe mehrmals mit einem lang anhaltenden Lichtpuls bestrahlt. Beim WCT 120 war die Lichtintensität durch den langen optischen Weg selbst ohne Infrarotfilter recht schwach. Deswegen wurde bei diesem Gerät die Dissoziation mit einer separaten Hochleistungsblitzlichtlampe durchgeführt. Die Messung der Lebensdauer als Funktion der Zeit wurde an beiden Anlagen mit Infrarotfilter durchgeführt, um über die Probendicke eine homogene Generation von Ladungsträgern zu erreichen und um eine mögliche Dissoziation von Defekten während der Messung zu vermeiden.

### 3.3.2. Quasi Steady State Photoluminescence (QSS-PL)

Photolumineszenzbasierte Lebensdauerermessungen (PL) beruhen auf dem Effekt der strahlenden Rekombination. Die Intensität der PL-Strahlung  $I_{PL}$  ist damit proportional zur Rekombinationsrate für strahlende Rekombination (siehe Gleichung 2.46)  $U_{rad}$  [TB05]:

$$I_{PL}(t) = A_i \cdot U_{rad}(t) , \quad (3.18)$$

mit  $A_i$  einem anlagenspezifischen Vorfaktor. Die Rekombinationsrate ist abhängig von der Temperatur und der Ladungsträgerkonzentration:

$$U_{\text{rad}}(t) = B(T, n, p) \cdot \left( n(t) \cdot p(t) - n_i^2(t) \right), \quad (3.19)$$

$$U_{\text{rad}}(t) = B(T, n, p) \cdot \left( \Delta n^2(t) + (p_0 + n_0) \cdot \Delta n(t) \right). \quad (3.20)$$

Damit lässt sich die Überschussladungsträgerdichte  $\Delta n$  nach folgender Formel berechnen:

$$\Delta n = -\frac{p_0 + n_0}{2} + \sqrt{\frac{(p_0 + n_0)^2}{4} + \frac{I_{\text{PL}}}{A_i \cdot B(T, \Delta n, N_{\text{dop}})}}. \quad (3.21)$$

In der Literatur [TB05] wird häufig die Näherung der Störstellenreserve getroffen:  $p_0 + n_0 \approx N_{\text{dop}}$ , welche bei moderaten Temperaturen und Dotierstoffkonzentrationen ihre Gültigkeit besitzt. Die messbare Photolumineszenzintensität  $I_{\text{PL}}$  wird durch mehrere Prozesse beeinflusst. Zu nennen wären die Wiederabsorption von Photonen innerhalb des Wafers, die Abhängigkeit des Koeffizienten für strahlende Rekombination von der Temperatur und der Ladungsträgerkonzentration, sowie die Abhängigkeit des Lumineszenzsignals von der Oberflächenbeschaffenheit.

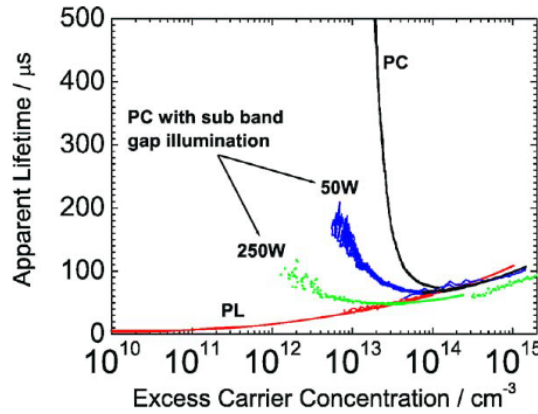


Abb. 3.8: Vergleich der effektiven Lebensdauer ermittelt durch QSS-PC (schwarz) und QSS-PL (rot). Während sich die Lebensdauer nach QSS-PC und QSS-PL in Niederinjektion stark unterscheiden, so überlagern sich beide Kurven in guter Näherung in Hochinjektion. Quelle:[BTSR06]

Aufgrund der vielen Einflüsse wird häufig eine Kalibrierung mittels QSS-PC durchgeführt, sodass sich die injektionsabhängigen Lebensdauerkurven in Hochinjektion überlagern. Der große Vorteil der PL ist, dass durch die Auswertung des Produktes der Ladungsträgerkonzentrationen, die berechnete Lebensdauer unter Niederinjektion kaum durch externes Trapping beeinflusst wird [TB05]. Abbildung 3.8 zeigt einen Vergleich von Lebensdauerermessungen mittels QSS-PC (schwarz) und QSS-PL (rot). Es ist deutlich zu erkennen, dass die Lebensdauer in Hochinjektion für beide Verfahren nahezu identisch ist. Im Niederinjektionsbereich wird die Lebensdauer nach der QSS-PC Methode aufgrund des Trappings massiv überschätzt. Diese Eigenschaft der Lebensdauerkurven von QSS-PL und QSS-PC Messungen sich in Hochinjektion zu überlagern wird in Abschnitt 4.4.3 aufgegriffen, um ein neuartiges Modell zur Korrektur des Trapping Effektes bei leitfähigkeitsbasierten, temperaturabhängigen Lebensdauerermessungen zu erstellen.

### 3.4. Deep Level Transient Spectroscopy (DLTS)

Die prominenteste Methode der Defektcharakterisierung ist die DLTS-Methode. Sie wurde 1974 durch D.V. Lang eingeführt [Lan74]. Die meisten Defektparameter, die in der Literatur zu finden sind, wurden mit dieser Methode ermittelt. Bei der DLTS werden mittels eines elektrischen Füllpulses die Defekte mit Ladungsträgern besetzt. Nach Abschalten des Füllpulses werden von

den Defekten Ladungsträger thermisch emittiert. Diesen Prozess kann man durch die Messung der Kapazitätsänderung der Raumladungszone verfolgen. Durch Variation der Temperatur können dadurch die Defektparameter bestimmt werden. Die zu untersuchenden Proben müssen eine Raumladungszone besitzen. Dazu wird meist auf der einen Seite der Probe ein ohmscher Kontakt und auf der anderen Seite ein Schottky-Kontakt erzeugt. Durch die höhere Austrittsarbeit des Metalls des Schottky-Kontaktes kommt es an der Oberfläche des Halbleiters zu einer Bandverbiegung und somit zur Ausbildung einer Raumladungszone mit der Breite  $z_d$ , mit

$$z_d = \sqrt{\frac{2\varepsilon_r\varepsilon_0}{qN_{\text{dop}}}} (V_{\text{bi}} - V_{\text{ext}}). \quad (3.22)$$

Die Kapazität  $C_0$  in der so entstehenden Raumladungszone lässt sich durch folgende Gleichung beschreiben:

$$C_0 = \frac{\varepsilon_r\varepsilon_0 A}{z_d} = A \sqrt{\frac{q\varepsilon_r\varepsilon_0 N_{\text{dop}}}{2(V_{\text{bi}} - V_{\text{ext}})}}, \quad (3.23)$$

hierbei sind  $\varepsilon_r$  und  $\varepsilon_0$  die Permittivitäten für das Material und für das Vakuum.  $q$  ist die Elementarladung,  $N_{\text{dop}}$ , die Dotierstoffkonzentration,  $z_d$  ist die Breite der Raumladungszone,  $A$  ist die Kontaktfläche des Schottky-Kontaktes,  $V_{\text{bi}}$  das durch die Bandverbiegung erzeugte Potential und  $V_{\text{ext}}$  ist die extern angelegte Spannung. 3.9 a zeigt schematisch die Bandverbiegung in der Raumladungszone.

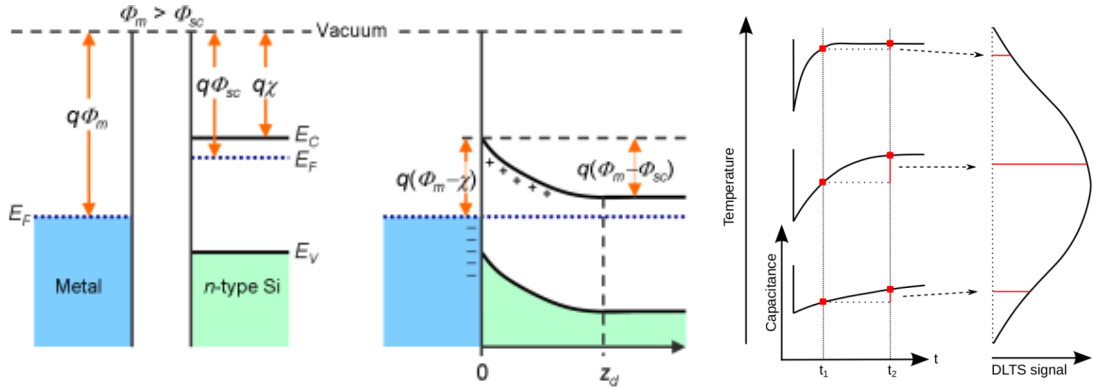


Abb. 3.9: a) Schematische Darstellung eines Schottky-Kontaktes mit der Breite der Raumladungszone  $z_d$ ; Quelle:[Rot08a] b) Double Box-Car Auswertung eines Kapazitätstransientenspektrums aus Scheffler [Sch15]

Nach Abschalten des Füllpulses werden Ladungsträger thermisch emittiert. Damit nimmt die Dichte an besetzten Störstellen  $n_T$  mit der Zeit ab, was sich durch folgende Gleichung beschreiben lässt [Rot08a]:

$$n_T(t) = N_t \cdot \exp\left(-\frac{t}{\tau_n}\right). \quad (3.24)$$

Der zeitliche Verlauf der Kapazität lässt sich damit näherungsweise durch folgende Gleichung beschreiben:

$$C(t) = C_0 \left(1 - \frac{n_T(t)}{2N_{\text{dop}}}\right). \quad (3.25)$$

Bestimmt man die maximale Kapazitätsänderung  $\Delta C$ , mittels einer Doppel-Boxcar-Auswertung (siehe 3.9 b), so korreliert diese nach folgender Gleichung mit der Defektkonzentration:

$$N_t = 2 \frac{\Delta C}{C_0} N_{\text{dop}}. \quad (3.26)$$

## 4. Grundlagen der Lebensdauerspektroskopie

### 4.1. SRH-Gleichung

Die Grundlage für eine lebensdauerspektroskopische Auswertung bildet die Shockley-Read-Hall Gleichung (SRH-Gleichung). Eine ausführliche Herleitung ist im Anhang E zu finden. Eine wesentliche Annahme der SRH-Gleichung ist, dass kein Trapping auftritt und somit die Überschussladungsträger  $\Delta n$  und  $\Delta p$  gleiche Konzentrationen besitzen. Dann gilt:

$$\tau_{\text{SRH}} = \frac{\tau_{n0}(p_0 + p_1 + \Delta n) + \tau_{p0}(n_0 + n_1 + \Delta n)}{(p_0 + n_0 + \Delta n)}. \quad (4.1)$$

Die Berechnung der Gleichgewichtsladungsträgerkonzentrationen  $p_0$  und  $n_0$  wurden in Kapitel 2.4 beschrieben. Die SRH-Dichten  $p_1$  und  $n_1$  werden ähnlich wie die Gleichgewichtsladungsträgerkonzentrationen berechnet und beschreiben die thermische Emission von Ladungsträgern aus den Defekten in die entsprechenden Bänder [Rei05]:

$$n_1 = N_C \cdot \exp\left(-\frac{E_C - E_t}{k_B T}\right); p_1 = N_V \cdot \exp\left(-\frac{E_t - E_V}{k_B T}\right). \quad (4.2)$$

Die SRH-Dichten hängen damit von der Lage des Defektenergieniveaus  $E_t$  innerhalb der Bandlücke, den effektiven Zustandsdichten  $N_{C/V}$  sowie der Temperatur  $T$  ab. Die Einfangzeitkonstanten  $\tau_{n0}$  und  $\tau_{p0}$  lassen sich mit:

$$\tau_{n0} = (N_t \cdot \sigma_n \cdot v_{\text{th,e}})^{-1}; \tau_{p0} = (N_t \cdot \sigma_p \cdot v_{\text{th,h}})^{-1} \quad (4.3)$$

berechnen. Sie stellen Proportionalfaktoren zu der jeweiligen Defektkonzentration  $N_t$  dar und sind des Weiteren abhängig von den Einfangquerschnitten  $\sigma_{n/p}$  des Defektzentrums und der thermischen Geschwindigkeit der Ladungsträger  $v_{\text{th,e/h}}$ .

### 4.2. Defektparameter

Die SRH-Dichten  $p_1$  und  $n_1$ , welche die Emission von Ladungsträgern von einem besetzten Defekt in die entsprechenden Bänder beschreiben, werden durch das Defektenergieniveau  $E_t$ , die Zustandsdichten  $N_{C/V}$  und die Temperatur  $T$  beschrieben. Abbildung 4.1 zeigt die Abhängigkeit der SRH-Dichten als Funktion der energetischen Lage  $E_C - E_t$  und der Temperatur  $T$ .

Das Verhältnis  $k$  der Einfangquerschnitte wird auch als Symmetriefaktor bezeichnet. In der Literatur wird dieser wie folgt beschrieben [Rei05]:

$$k = \frac{\sigma_n}{\sigma_p} = \frac{\tau_{p0}}{\tau_{n0}}. \quad (4.4)$$

Diese Gleichung setzt voraus, dass die mittleren Geschwindigkeiten der unterschiedlichen Ladungsträgerarten gleich sind. Wie in Abschnitt 2.4.2 gezeigt ist das nicht der Fall. Der allgemeinere Fall lässt sich mit Hilfe von Gleichung 2.19 wie folgt beschreiben:

$$k_\tau = \frac{\tau_{p0}}{\tau_{n0}} = \frac{\sigma_n \cdot v_{\text{th,e}}}{\sigma_p \cdot v_{\text{th,h}}} = k_\sigma \cdot \frac{v_{\text{th,e}}}{v_{\text{th,h}}} = k_\sigma \cdot \sqrt{\frac{m_{\text{th,h}}^*}{m_{\text{th,e}}^*}}, \quad (4.5)$$

dabei ist der für den Defekt spezifische Wert das Verhältnis der Einfangquerschnitte  $k_\sigma$ , während der mittels Lebensdauerspektroskopie ermittelte Wert das Verhältnis der Einfangzeitkonstanten  $k_\tau$  darstellt. Dieser kann durch das Verhältnis der thermischen effektiven Massen  $m_{\text{th,h}}^*/m_{\text{th,e}}^*$  in  $k_\sigma$  überführt werden. Im Folgenden wird die Auswertung der Lebensdauerspektren mittels  $k_\tau$  als Symmetriefaktor beschrieben. Eine Methode  $k_\sigma$  zu bestimmen wird ebenfalls in Abschnitt 4.3.4

vorgestellt. Setzt man  $k_\tau$  in die SRH-Gleichung ein so ergibt sich [Rei05]:

$$\tau_{\text{SRH}} = \tau_{\text{n0}} \cdot \frac{(p_0 + p_1 + \Delta n) + k_\tau (n_0 + n_1 + \Delta n)}{(p_0 + n_0 + \Delta n)}. \quad (4.6)$$

Die Defektkonzentration und der Einfangquerschnitt des Defektes manifestieren sich in dieser Darstellung nur im Vorfaktor  $\tau_{\text{n0}}$ . Der Kurvenverlauf der injektionsabhängigen Lebensdauer wird deshalb nur durch  $E_t$  und  $k_\tau$  beeinflusst und ist damit von der Defektkonzentration  $N_t$  entkoppelt. Dadurch ist es mittels Lebensdauerspektroskopie theoretisch möglich das Defektenergieniveau  $E_t$  und den Symmetriefaktor  $k_\tau$  zu bestimmen, während die Defektkonzentration  $N_t$  und der Einfangquerschnitt  $\sigma_n$ , bzw.  $\sigma_p$  unbekannt bleiben, da sich nur deren Produkt  $N_t \cdot \sigma$  bestimmen lässt. Dies ist zugleich Vor- und Nachteil der Lebensdauerspektroskopie. Um die Defektkonzentration zu bestimmen, braucht es eine weitere Messmethode wie DLTS, mit welcher sich der Einfangquerschnitt für diesen Defekt bestimmen lässt. Andererseits ist gerade die Sensitivität für Defekte, die in kleinen Konzentrationen rekombinationsaktiv sind, also ein großes Produkt aus  $N_t$  und  $\sigma$  haben, für die Materialcharakterisierung relevant.

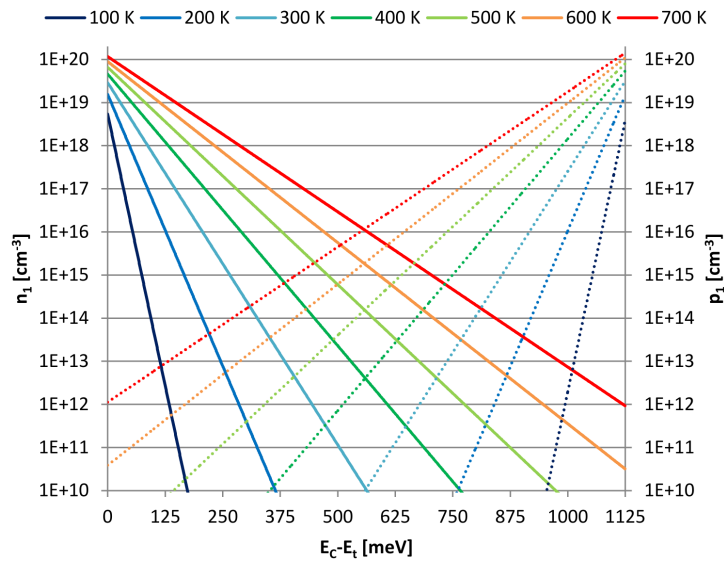


Abb. 4.1: Schematische Darstellung der SRH-Dichten als Funktion der Lage des Energieniveaus  $E_C - E_t$  und der Temperatur  $T$ . Die Werte für  $n_1$  sind als durchgezogene Linien, die Werte für  $p_1$  als gestrichelte Linien dargestellt. Die Temperatur wird über die Farbe codiert.

### 4.3. Injektionsabhängige Lebensdauerspektroskopie (IDLS)

Die Lebensdauer nach Shockley Read Hall ist im Allgemeinen von der Überschussladungsträgerdichte abhängig. Dies kann verdeutlicht werden, indem man die Grenzfälle der Lebensdauer für Niederinjektion (engl. low level injection - LLI)  $\Delta n \ll n_0 + p_0$  und Hochinjektion (engl. High level injection - HLI)  $\Delta n \gg n_0 + p_0$  betrachtet [Rei05].

$$\tau_{\text{SRH}}^{\text{LLI}} = \tau_{\text{n0}} \cdot \frac{p_0 + p_1 + k_\tau (n_0 + n_1)}{p_0 + n_0} \quad (4.7)$$

$$\tau_{\text{SRH}}^{\text{HLI}} = \tau_{\text{n0}} \cdot (1 + k_\tau) = \tau_{\text{n0}} + \tau_{\text{p0}} \quad (4.8)$$

$$\Delta \tau_{\text{SRH}} = \tau_{\text{SRH}}^{\text{HLI}} - \tau_{\text{SRH}}^{\text{LLI}} = \tau_{\text{n0}} \cdot \frac{n_0 - p_1 + k_\tau (p_0 - n_1)}{p_0 + n_0} \quad (4.9)$$



Während die Lebensdauer bei gegebener Temperatur und Defektkonzentration, unter Niederinjektion stark von der Dotierung, dem Defektenergieniveau und dem Symmetrie-Faktor abhängt, ist die Lebensdauer unter Hochinjektion nur von den beiden Einfangzeitkonstanten und somit vom Symmetriefaktor abhängig.

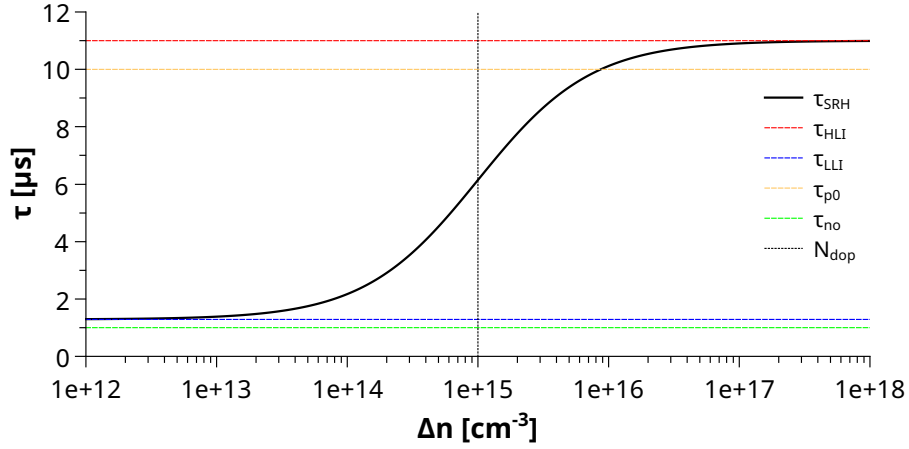


Abb. 4.2: Simulierter Verlauf einer injektionsabhängigen Lebensdauerkurve. Durch die Grenzfälle für Hoch- und Niederinjektion können  $\tau_{n0}$  und  $\tau_{p0}$  berechnet werden, sofern  $E_t$ ,  $N_{dop}$  und  $T$  bekannt sind.

Abbildung 4.2 zeigt den injektionsabhängigen Kurvenverlauf eines Rekombinationszentrums mit  $E_t - E_V = 300 \text{ meV}$ ,  $\tau_{n0} = 1 \mu\text{s}$  und  $k_\tau = 10$  bei Raumtemperatur. Eingezeichnet sind beide Einfangzeitkonstanten  $\tau_{n0}$  und  $\tau_{p0}$ , die Grenzfälle der Lebensdauer für Hoch- und Niederinjektion  $\tau^{\text{HLI}}$  und  $\tau^{\text{LLI}}$ , sowie die Dotierstoffkonzentration  $N_{dop}$ . Da der Anstieg einer injektionsabhängigen Lebensdauerkurve (engl. Injection dependent lifetime spectroscopy, IDLS) sowohl von der Defektenergetiefe  $E_t$  als auch vom Symmetriefaktor  $k_\tau$  abhängt, ist eine eindeutige Parametrisierung der Kurve bei gegebener Dotierung und Temperatur nicht möglich. Prinzipiell lässt sich trotzdem aus jeder IDLS-Analyse eine spektroskopische Information extrahieren. Um eine eindeutige Lösung zu finden, muss die Lage des Fermi-niveaus verändert werden. Dabei sind Variationen der Dotierstoffkonzentration oder der Temperatur möglich [Rei05]. Im Rahmen dieser Arbeit wurde immer die Temperatur variiert, da dies an einer einzelnen Probe möglich ist.

#### 4.3.1. Intrinsische Rekombination

Lebensdauerspektroskopie wird immer durch intrinsische Rekombination beeinträchtigt. Die Volumen-Lebensdauer  $\tau_{\text{bulk}}$  (engl. Bulk Lifetime) ergibt sich zu [Rei05]:

$$\tau_{\text{res}}^{-1} = \tau_{\text{bulk}}^{-1} (+\tau_{\text{surf}}^{-1}) = \tau_{\text{SRH}}^{-1} + \tau_{\text{CE-Auger}}^{-1} + \tau_{\text{rad}}^{-1} (+\tau_{\text{surf}}^{-1}) . \quad (4.10)$$

Die aus der Messung resultierende Lebensdauer  $\tau_{\text{res}}$  setzt sich aus der Volumen-Lebensdauer und der Oberflächen-Lebensdauer  $\tau_{\text{surf}}$  zusammen. Die Volumen-Lebensdauer setzt sich wiederum aus der Shockley-Read-Hall Lebensdauer  $\tau_{\text{SRH}}$  und den Lebensdauern der intrinsischen Rekombinationsmechanismen zusammen. Die strahlende Rekombination  $\tau_{\text{rad}}$  hat aufgrund der Bandstruktur in Silicium weniger Einfluss als die Auger-Rekombination  $\tau_{\text{CE-Auger}}$ , welche vor allem in Hochinjektion dominiert. Bei zu hohen Dotierstoffkonzentrationen ist die Überlagerung durch die Auger-Rekombination zu stark, um präzise spektroskopische Ergebnisse zu erzielen. Auch bei flachen Defekten, welche einen negativen Anstieg in der injektionsabhängigen Lebensdauer besitzen, wirkt sich die Auger-Rekombination nachteilig aus, da der Kurvenverlauf in Hochinjektion maßgeblich verändert wird. Die gute Modellierbarkeit der intrinsischen Rekombination ermöglicht die Auswertung eines Teils des durch Auger-Rekombination dominierten Bereiches.

### 4.3.2. Mehrere Defekte

Häufig zu beobachten ist außerdem die Existenz zweier Klassen von Defektzentren, einem tiefen und einem flachen Defekt, welche sich überlagern [Rei05]. Der tiefe Defekt kann hierbei die Niederinjektion dominieren und ist damit der relevante Defekt für Solarzellen, da diese in der Regel unter Niederinjektion arbeiten. Der flache Defekt kann, in der Regel gefolgt von der Auger-Rekombination, die Hochinjektion dominieren. Da eine typische IDLS-Kurve aus einem Bereich mit positivem Anstieg und einem Bereich mit negativem Anstieg besteht, lassen sich der positive Anstieg über den tiefen Defekt und der negative Anstieg über den flachen Defekt modellieren. Vorausgesetzt externes Trapping sowie Auger- und Oberflächen- Rekombination beeinflussen die Messung nicht zu sehr, lassen sich mittels eines  $\chi^2$ -Fits Lösungen der SRH-Gleichung für den tiefen und flachen Defekt ermitteln. Die Lösung für den flachen Defekt beeinflusst dabei die Lösung des tiefen Defektes nicht, was auch umgekehrt gilt.

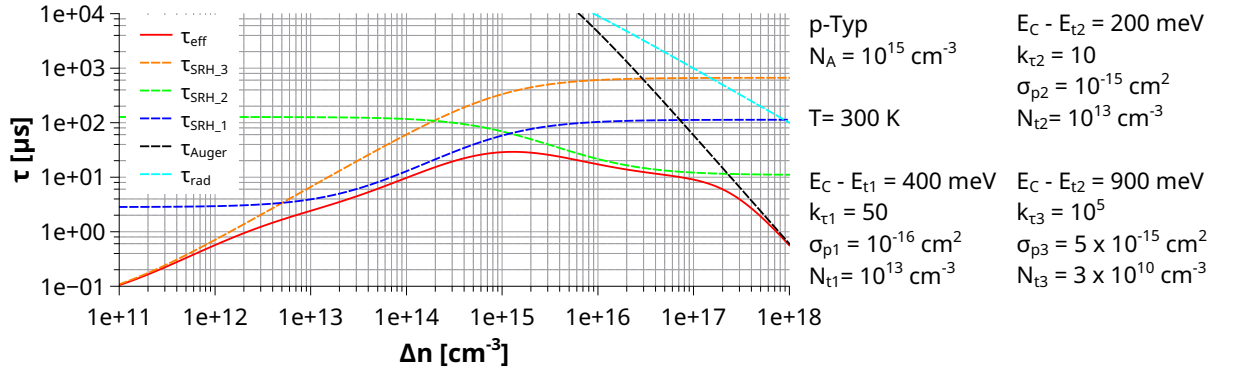


Abb. 4.3: simulierte injektionsabhängige Lebensdauerkurve ( $\tau_{\text{res}}$ ) mit 3 qualitativ verschiedenen SRH-Rekombinations-Zentren ( $\tau_{\text{SRH}_1}$  bis  $\tau_{\text{SRH}_3}$ ) unter Berücksichtigung von strahlender ( $\tau_{\text{rad}}$ ) und Auger-Rekombination ( $\tau_{\text{CE-Auger}}$ ). Die Parametrisierung ist der nebenstehenden Tabelle zu entnehmen.

Weiterhin besteht die Möglichkeit, dass eine dritte Klasse von Defekten die Lebensdauer unter sehr niedriger Injektion maßgeblich beeinflusst [GHB10]. Dies ist dann möglich, wenn es sich entweder um einen stark asymmetrischen Defekt handelt, welcher einen relativ großen Einfangsquerschnitt für Minoritäten besitzt oder aber eine stark injektionsabhängige Oberflächenrekombination, zum Beispiel durch eine Inversionsschicht [RRR<sup>+</sup>12], auftritt. Diese beiden Effekte können dazu führen, dass das häufig bei leitfähigkeitsbasierten Lebensdauermessungen in Niederinjektion beobachtete Trapping nicht mehr dominant ist und daher nicht mehr beobachtet wird. Diese These wird in dieser Arbeit untersucht (siehe Kapitel 5). Beide Effekte lassen sich durch einen steilen Anstieg in Niederinjektion modellieren, jedoch unterscheiden sich die Temperaturabhängigkeiten beider Effekte stark. Je nach Stärke der steilen Injektionsabhängigkeit in Niederinjektion kann dieser Effekt die Lebensdauer des tiefen Defektes überlagern, was dessen exakte Bestimmung erschwert. Die effektive Lebensdauer kann durch Überlagerung aller simulierten Rekombinationskanäle berechnet werden:

$$\tau_{\text{res}}^{-1} = \tau_{\text{SRH}_1}^{-1} + \tau_{\text{SRH}_2}^{-1} + \tau_{\text{SRH}_3}^{-1} + \tau_{\text{CE-Auger}}^{-1} + \tau_{\text{rad}}^{-1} (+\tau_{\text{surf}}^{-1}) . \quad (4.11)$$

Wie in Abbildung 4.3 zu sehen ist, können drei Klassen von SRH-Defektzentren die Lebensdauer beeinflussen. Tiefe Defekte (SRH\_1) mit moderaten Symmetrie-Faktoren beeinflussen die Lebensdauer in Niederinjektion, während flache Defekte (SRH\_2) die Lebensdauer in Hochinjektion beeinflussen. Generell konvergiert die Lebensdauer bei sehr hoher Injektionsdichte gegen die Auger-Lebensdauer. Stark asymmetrische Defekte (SRH\_3) mit großen Symmetrie-Faktoren sind in der Regel nur in Niederinjektion rekombinationsaktiv und können den Lebensdauerverlauf des tiefen Defektes überlagern. Die effektive Lebensdauer konvergiert dann bei niedriger Injektion gegen die Lebensdauer des asymmetrischen Defektes. Ist kein asymmetrischer Defekt (bzw. eine

Inversionsschicht oder ähnliches) vorhanden, so konvergiert die Lebensdauer in Niederinjektion gegen die Lebensdauer des tiefen Defektes, was eine Auswertung deutlich erleichtert. Für die Beispielrechnungen zu den DPSS-Diagrammen und der Auswertung der T-IDLS-Spektren, wird die in diesem Diagramm zugrunde liegende Defektparametrisierung für SRH\_1 bis SRH\_3 nach der neben Abbildung 4.3 stehenden Tabelle beibehalten.

### 4.3.3. Defect Parameter Solution Surface Diagramme

Für die numerische Lösung einer IDLS Kurve durch die SRH-Gleichung gibt es eine ganze Schar möglicher Parametrisierungen für jedes Defektzentrum. Diese Mehrdeutigkeit lässt sich mittels der „Defect-Parameter-Solution-Surface“ (DPSS) darstellen [Rei05]. Hierbei werden für schrittweise variierte Energieniveau  $E_t$  die anderen beiden Defektparameter  $k_\tau$  und  $\tau_{n0}$  mittels  $\chi^2$ -Fit ermittelt. Die Fitgüte  $\chi^2$  ist bei allen Lösungen des Fitproblems gleich [Rei05]. Stellt man nun die Fitparameter  $k_\tau$  und  $\tau_{n0}$  als Funktion des Defektenergieniveaus  $E_t$  dar, ergeben sich charakteristische Kurvenverläufe, die *DPSS* –  $k_\tau$  und die *DPSS* –  $\tau_{n0}$  Kurven. Die Abbildung 4.4 zeigt die DPSS-Kurven für die in Abbildung 4.3 simulierte Lebensdauerkurve.

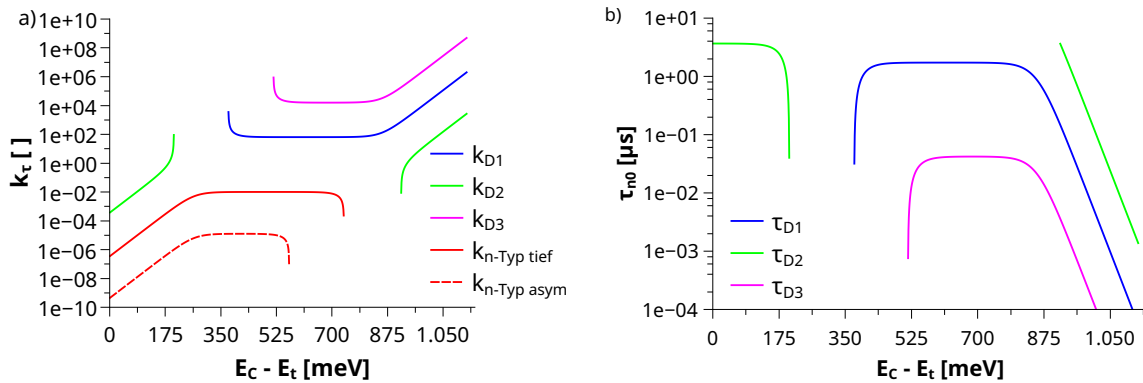


Abb. 4.4: a) *DPSS* –  $k_\tau$  – Diagramm der einzelnen Defekte für die in Abbildung 4.3 simulierte Lebensdauerkurve in p-Typ Silicium. Mit  $k_{D1}$  dem tiefen Defekt,  $k_{D2}$  dem flachen Defekt und  $k_{D3}$  dem asymmetrischen Defekt. Die roten Linien ( $k_{n-Typ\ tief}$  tiefer Defekt und  $k_{n-Typ\ asym}$  asymmetrischer Defekt) entsprechen Defekten in n-Typ Silicium, welche dieselbe Injektionsabhängigkeit erzeugen würden. Das Diagramm enthält alle möglichen Parametrisierungen von  $E_C - E_t$  und  $k_\tau$  für die entsprechende injektionsabhängige Lebensdauerkurve (IDLS). b) *DPSS* –  $\tau_{n0}$  – Diagramm der einzelnen Defekte für die in Abbildung 4.3 simulierte Lebensdauerkurve in p-Typ Silicium. Parametrisierung:

$$D1: E_C - E_t = 400 \text{ meV}; k_\tau = 50; \sigma_p = 10^{-16} \text{ cm}^2; N_t = 10^{13} \text{ cm}^{-3}$$

$$D2: E_C - E_t = 200 \text{ meV}; k_\tau = 10; \sigma_p = 10^{-15} \text{ cm}^2; N_t = 10^{13} \text{ cm}^{-3}$$

$$D3: E_C - E_t = 900 \text{ meV}; k_\tau = 10^5; \sigma_p = 5 \times 10^{-15} \text{ cm}^2; N_t = 3 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3}$$

Wie in Abbildung 4.4 zu sehen ist, ergeben sich die Lösung einer SRH-Parametrisierung als Funktion des Energieniveaus  $E_C - E_t$ . Für den tiefen Defekt ( $k_{D1}$ ) mit einem positiven Anstieg der Lebensdauer ergibt sich ein Bereich mit nahezu konstantem Symmetrie-Faktor nahe der Bandmitte. Dies liegt daran, dass bei tiefen Defekten die Lebensdauer von Niederinjektion zu Hochinjektion näherungsweise um  $\tau_{n0} \cdot k_\tau$  ansteigt. Je flacher das Energieniveau, desto höher sind die SRH-Dichten und umso geringer ist bei gleichem Symmetriefaktor die Lebensdauerdifferenz zwischen Hoch- und Niederinjektion. Das heißt, um eine identische Lebensdauerkurve zu generieren muss der Symmetrie-Faktor erhöht und gleichzeitig die Einfangzeitkonstante erniedrigt werden, um zu der gemessenen Lebensdauer zu passen. Die Lebensdauerdifferenz zwischen Hoch- und Niederinjektion für Defekte in der Minoritätsbandhälfte (MinBH) bei p-dotiertem Silicium ist nur für  $n_1/p_0 < 1$  positiv [Rei05]. Daher existiert ein Bereich in der Minoritätsbandhälfte in dem keine Lösung für den tiefen Defekt möglich ist.

$$\Delta\tau_{SRH}^{p-Typ; MinBH} \approx \tau_{n0} \cdot k_\tau \left(1 - \frac{n_1}{p_0}\right) \quad (4.12)$$

Im Gegensatz dazu existieren für Defekte innerhalb der Majoritätsbandhälfte (MajBH) immer Lösungen, da in diesem Fall  $k_\tau > p_1/p_0$  sein muss und  $k_\tau$  beliebig variiert werden kann [Rei05].

$$\Delta\tau_{\text{SRH}}^{p\text{-Typ; MajBH}} \approx \tau_{n0} \cdot \left( k_\tau - \frac{p_1}{p_0} \right) \quad (4.13)$$

Für flache Defekte ( $k_{D2}$ ) mit einem negativen Anstieg der Lebensdauer ergeben sich zwei Bereiche nahe den Bandkanten in denen Lösungen der SRH-Gleichung möglich sind. Dies liegt daran, dass für Defekte innerhalb der Minoritätsbandhälfte  $n_1/p_0 > 1$  und für Defekte innerhalb der Majoritätsbandhälfte  $p_1/p_0 > k_\tau$  sein muss. Für Defekte in der Mitte der Bandlücke sind somit keine Lösungen möglich, da in diesem Bereich  $p_1, n_1 \ll p_0$  gilt [Rei05].

Für stark asymmetrische Defekte ( $k_{D3}$ ) ähnelt das DPSS-Diagramm dem des tiefen Defektes. Durch die hohe Differenz der Lebensdauer zwischen Hoch- und Niederinjektion sind die Werte zu höheren Symmetrie-Faktoren verschoben. Außerdem ist das Diagramm in Richtung der Majoritätsbandhälfte verschoben. Dies liegt daran, dass der Einfluss der Minoritäten auf die Lebensdauer unter Niederinjektion mit dem Symmetrie-Faktor skaliert. Das bedeutet für p-Typ Silicium, dass  $k_\tau \times n_1 \ll p_0$  sein muss, da sonst die Lebensdauer unter Niederinjektion stark erhöht ist. Bei sehr hohen gemessenen Differenzen der Lebensdauer zwischen Hoch- und Niederinjektion und damit hohen Werten für  $k_\tau$  kann dies dazu führen, dass nur Lösungen innerhalb der Majoritätsbandhälfte möglich sind.

$$\Delta\tau_{\text{SRH}}^{p\text{-Typ}} \approx \tau_{n0} \cdot \left( k_\tau \cdot \left( 1 - \frac{n_1}{p_0} \right) - \frac{p_1}{p_0} \right) \quad (4.14)$$

Zusätzlich sind in Abbildung 4.4 ein tiefer und ein asymmetrischer Defekt für n-Typ Material eingetragen (rote Kurven). Man erkennt, dass für diese Defekte das  $DPSS - k_\sigma$ -Diagramm sowohl in x- als auch y- Richtung gespiegelt ist. Der Bereich möglicher Lösungen für flache Defekte bleibt bei einem Wechsel der Dotierart gleich. Statt des  $DPSS - \tau_{n0}$ -Diagramms wird bei n-Typ Material das  $DPSS - \tau_{p0}$ -Diagramm aufgetragen. Durch den Wechsel von Majoritäten und Minoritäten ist das Diagramm im Vergleich zum  $DPSS - \tau_{n0}$ -Diagramm in y-Richtung gespiegelt [Rei05].

#### 4.3.4. SRH-Formalismus: DPSS-Gleichungen

Um die Vieldeutigkeit der IDLS-Parametrisierungen mathematisch greifbar zu machen, wurden von Rein [Rei05] analytische Gleichungen hergeleitet, welche den Verlauf der DPSS-Kurven beschreiben. Dabei werden die Gleichungen 4.7 und 4.9 verwendet. Ausgangspunkt sind die Lebensdauer unter Niederinjektion, sowie die Lebensdauerdifferenz zwischen Hoch- und Niederinjektion.  $\tau_{n0}$  und  $k_\tau$  werden als von  $E_t$  abhängige Variablen behandelt, wobei  $E_t$  nur indirekt über die SRH-Dichten  $n_1$  und  $p_1$  verwendet wird. Durch Lösung des Gleichungssystems lassen sich folgende analytische Gleichungen herleiten [Rei05] (siehe Anhang F):

$$k_\tau^{DPSS} = \frac{k_\tau \cdot (-p_0 + n_0) + (p_1 + k_\tau n_1) - p_1^{DPSS} (1 + k_\tau)}{(-p_0 + n_0) - (p_1 + k_\tau n_1) + n_1^{DPSS} (1 + k_\tau)}, \quad (4.15)$$

$$\tau_{n0}^{DPSS} = \tau_{n0} \cdot \frac{(p_0 - n_0) + (p_1 + k_\tau n_1) - n_1^{DPSS} (1 + k_\tau)}{(p_0 - n_0) + (p_1^{DPSS} - n_1^{DPSS})} \text{ und} \quad (4.16)$$

$$\tau_{p0}^{DPSS} = \tau_{p0} \cdot \frac{(p_0 - n_0) - (p_1 k_\tau^{-1} + n_1) + p_1^{DPSS} (1 + k_\tau^{-1})}{(p_0 - n_0) + (p_1^{DPSS} - n_1^{DPSS})}. \quad (4.17)$$

Wie zu erkennen, sind die Abhängigkeiten von  $k_\tau^{DPSS}$ ,  $\tau_{n0}^{DPSS}$  und  $\tau_{p0}^{DPSS}$  von dem Defektenergieniveau auf die entsprechende Parametrisierung, bestehend aus  $p_0$ ,  $n_0$ ,  $p_1$ ,  $n_1$  und  $k_\tau$ , beschränkt. Für die Einfangzeitkonstanten ist zusätzlich  $\tau_{n0}$ , bzw.  $\tau_{p0}$  als Vorfaktor zu berücksichtigen.

sichtigen. Einzige Variable in diesen Gleichungen ist das Defektenergieniveau  $E_t^{DPSS}$ , welches sich in den SRH-Dichten  $n_1^{DPSS}$  und  $p_1^{DPSS}$  manifestiert.

$$p_1^{DPSS} = N_V \cdot \exp\left(\frac{E_t^{DPSS} - E_V}{k_B T}\right); n_1^{DPSS} = N_C \cdot \exp\left(\frac{E_C - E_t^{DPSS}}{k_B T}\right) \quad (4.18)$$

Das bedeutet, dass die Ergebnisse einer  $\chi^2$  Anpassung an eine IDLS-Kurve einen Parametersatz bereitstellt, welcher alle möglichen Parametrisierungen dieser IDLS-Kurve für jedes mögliche Defektenergieniveau enthält. Hierbei sind  $p_0$  und  $n_0$  durch das Ladungsträgergleichgewicht gegeben. Es müssen nur die Anpassungsparameter  $p_1$ ,  $n_1$ ,  $k_\tau$ ,  $\tau_{n0}$  und  $\tau_{p0}$  in die obigen Gleichungen eingesetzt und  $E_t^{DPSS}$  variiert werden. Die Anwendung einer analytischen Gleichung bedeutet, dass die Anpassungsprozedur nur einmal durchgeführt werden muss. An dieser Stelle kann auch eine Korrektur des Symmetriefaktors durchgeführt werden, sodass sich das Verhältnis der Einfangquerschnitte bestimmen lässt:

$$k_\sigma^{DPSS} = k_\tau^{DPSS} \cdot \sqrt{\frac{m_{th,e}^*(T)}{m_{th,h}^*(T)}}. \quad (4.19)$$

Durch diese Korrektur (effektive Massen Korrektur, engl. effective mass correction) lassen sich  $DPSS - k_\sigma$ -Diagramme erzeugen, welche in dieser Arbeit ausschließlich zur Auswertung der Lebensdauerspektren benutzt wurden. Es muss jedoch berücksichtigt werden, dass das Verhältnis der thermischen effektiven Massen temperaturabhängig ist. Durch die schwache Temperaturabhängigkeit der thermischen effektiven Massen findet erfahrungsgemäß eine geringe Verschiebung (0,5–3 meV) der Schnittpunkte im  $DPSS - k_\sigma$ -Diagramm im Vergleich zum  $DPSS - k_\tau$ -Diagramm statt. (siehe Abschnitt 4.4.1)

#### 4.4. Temperatur- und Injektionsabhängige Lebensdauerspektroskopie (T-IDLS)

Die Temperatur- und injektionsabhängige Lebensdauerspektroskopie Methode wurde 2003 von Jan Schmidt eingeführt [Sch03, SS03]. Sie beruht auf den folgenden Prinzipien. Für einen tiefen Defekt ist eine Variation der Temperatur mit einer geringen Änderung der Lebensdauer verbunden. Den Hauptanteil für moderate Temperaturänderungen trägt die Temperaturabhängigkeit von  $\tau_{n0}$  bei [Rei05]. Wie in Kapitel 2.4.5 erläutert sind auch die Gleichgewichtsladungsträgerkonzentrationen temperaturabhängig. Um den Einfluss der Temperatur auf den injektionsabhängigen Lebensdauerungsverlauf übersichtlich darzustellen, wurde deshalb in den folgenden Diagrammen  $\tau_{n0}$  als konstant angesetzt und die Injektionsdichte auf  $p_0 + n_0$  normiert.

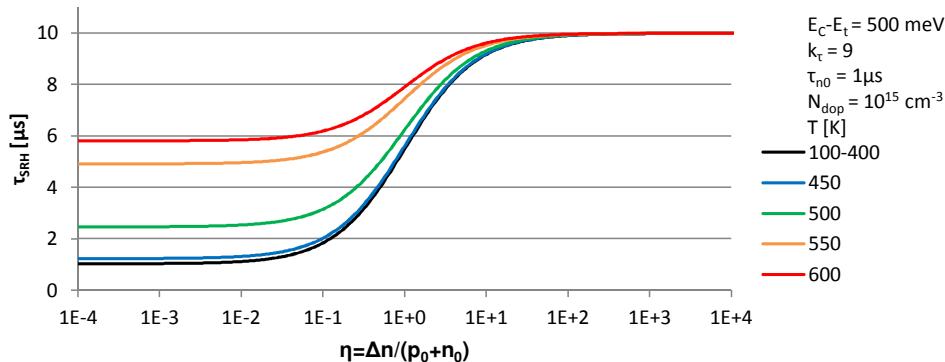


Abb. 4.5: Injektionsabhängige Lebensdauer eines tiefen Defektes bei verschiedenen Temperaturen. Für niedrige bis mittlere Temperaturen führt die Erhöhung der SRH-Dichten zu keiner Änderung. Erst ab einer Temperatur von  $T = 450$  K beginnt die Lebensdauer in Niederinjektion leicht zu steigen.

Abbildung 4.5 zeigt injektionsabhängige Lebensdauerungsverläufe bei verschiedenen Temperaturen für einen tiefen Defekt bei gegebener Dotierstoffkonzentration. Wie zu erkennen ist, ist die

Lebensdauer bei tiefen Temperaturen nahezu konstant. Bei Temperaturen über  $400\text{ K}$  steigt die Lebensdauer in Niederinjektion leicht an.

Für flache Defekte führt eine Erhöhung der Temperatur zu einer starken Erhöhung der Lebensdauer in Niederinjektion. Zusätzlich ist die Lebensdauer wiederum durch  $\tau_{n0}$  beeinträchtigt [Rei05]. Abbildung 4.6 zeigt injektionsabhängige Lebensdauererläufe bei verschiedenen Temperaturen für einen flachen Defekt bei gegebener Dotierstoffkonzentration. Wie zu erkennen ist steigt die Lebensdauer in Niederinjektion für Temperaturen größer  $300\text{ K}$  stark an.

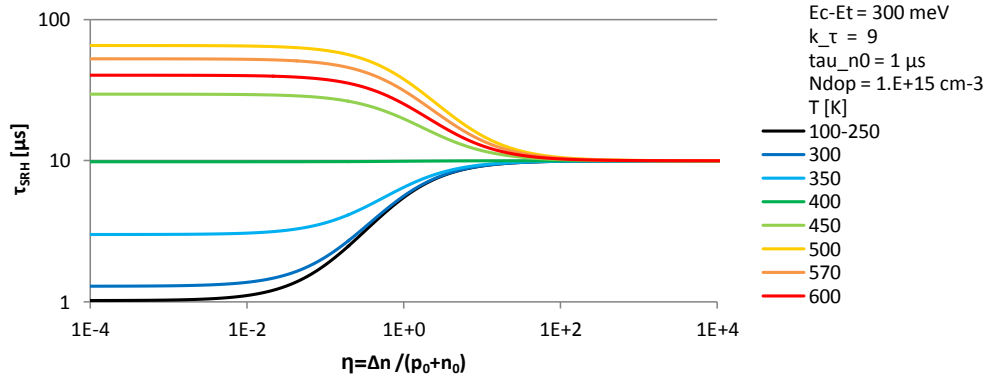


Abb. 4.6: Injektionsabhängige Lebensdauer eines flachen Defektes bei verschiedenen Temperaturen. Ab einer Temperatur von  $T = 300\text{ K}$  beginnt die Lebensdauer in Niederinjektion exponentiell zu steigen. Mit Erreichen der intrinsischen Leitung bei  $T = 570\text{ K}$  beginnt die Lebensdauer unter Niederinjektion zu sinken.

Im Allgemeinen steigt die Lebensdauer in Niederinjektion mit der Temperatur an. Mit Einsetzen der Eigenleitung kann die Lebensdauer in Niederinjektion auch leicht sinken. Wie in Abbildung 4.6 zu sehen ist, ändert sich in einem gewissen Temperaturbereich der Anstieg der injektionsabhängigen Lebensdauer von einem positiven zu einem negativen Anstieg. Dies verdeutlicht, dass die Einteilung in flache und tiefe Defekte maßgeblich von der Temperatur und Dotierstoffkonzentration abhängt. Durch die Messung der injektionsabhängigen Lebensdauer bei verschiedenen Temperaturen erhält man ein T-IDLS-Spektrum. Aus diesem Spektrum lassen sich durch Modellierung der Lebensdauer verschiedener Rekombinationszentren DPSS-Kurven für die jeweiligen Temperaturen generieren [Rot08a].

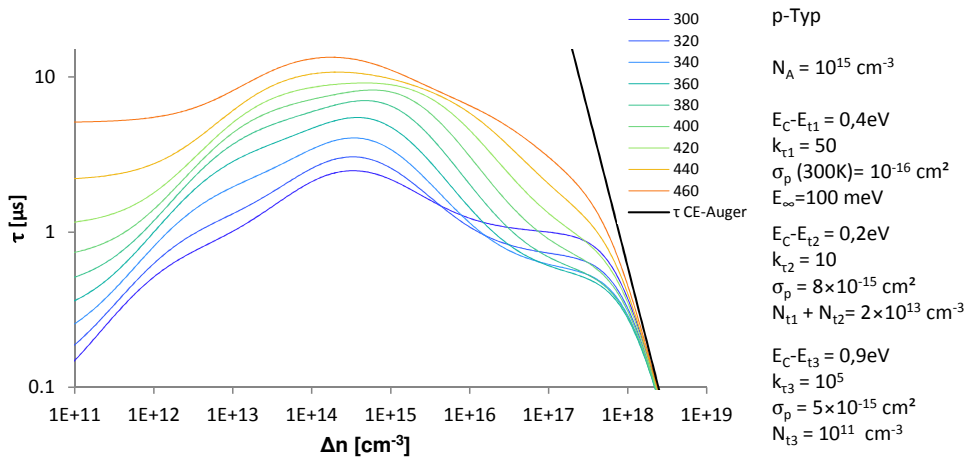


Abb. 4.7: Simuliertes T-IDLS-Spektrum drei sich überlagernder Defekte. Mit steigender Temperatur erhöht sich in der Regel die Lebensdauer. Die Abhängigkeit der Lebensdauer von der Temperatur wird durch die zugrunde liegenden Defektparameter bestimmt, welche in nebenstehender Tabelle dargestellt sind. Ebenfalls eingezeichnet ist das Auger-Limit  $\tau_{\text{CE-Auger}}$ , welches die Lebensdauer in Hochinjektion dominiert.

Abbildung 4.7 zeigt ein simuliertes T-IDLS Spektrum mit den drei Defekten, die auch in

Abbildung 4.3 verwendet wurden, für Temperaturen von  $300\text{ K}$  bis  $460\text{ K}$ . Jedes gemessene T-IDLS-Spektrum stellt dabei einen „elektrischen Fingerabdruck“ der elektrisch dominanten Defekte dar. Wie zu erkennen ist, ist die Temperatur über die Farbe der injektionsabhängigen Lebensdauerkurve kodiert. Die relative Zuordnung von rot für hohe Temperaturen und blau für tiefe Temperaturen wird in dieser Arbeit beibehalten. Ein stark asymmetrischer Defekt dominiert die Lebensdauer bis zu einer Injektionsdichte von  $10^{13}\text{ cm}^{-3}$ . Ein tiefer Defekt ist bei moderaten Temperaturen im Injektionsbereich von  $10^{13}\text{ cm}^{-3}$  bis  $5 \times 10^{15}\text{ cm}^{-3}$  dominant. Bei hohen Temperaturen ist sein Anstieg negativ und er bestimmt dann die Lebensdauer im Injektionsbereich von  $5 \times 10^{14}\text{ cm}^{-3}$  bis  $5 \times 10^{16}\text{ cm}^{-3}$ . Ein flacher Defekt bestimmt die Lebensdauer in Hochinjektion. Ab einer Injektionsdichte von ungefähr  $2 \times 10^{17}\text{ cm}^{-3}$  konvergiert die Lebensdauer gegen das Auger-Limit. Wie in Abbildung 4.7 zu sehen ist, steigt die Lebensdauer bei einer Temperaturerhöhung an. Dies ist der Regelfall, da die thermische Aktivierung der Defekte, über die Erhöhung der SRH-Dichten  $n_1$  und  $p_1$ , die Lebensdauer in Niederinjektion erhöht. Am deutlichsten ist die Erhöhung der Lebensdauer für den stark asymmetrischen Defekt zu erkennen, was auf die starke Abhängigkeit der Lebensdauer von der Konzentration an Minoritäten unter Niederinjektion zurückzuführen ist. Ausnahmen dieser Regel können auftreten, da einerseits die thermische Geschwindigkeit der Ladungsträger  $v_{\text{th}}$  mit der Temperatur ansteigt und somit die Einfangzeitkonstanten erniedrigt, andererseits können sich auch die Einfangquerschnitte und die Defektkonzentration mit der Temperatur ändern. Thermisch aktivierte Defektreaktionen können somit nur durch synchrone Auswertung von Einfangquerschnitt und Defektkonzentration analysiert werden.

#### 4.4.1. Überlagerung der DPSS- $k_{\sigma}$ -Kurven: Defektcharakterisierung

Durch Überlagerung der  $DPSS - k_{\sigma}$ -Kurven eines Defektes bei verschiedenen Temperaturen ergeben sich im Idealfall zwei Schnittpunkte, einer bei der wahrscheinlichsten Energietiefe und einer in der gegenüberliegenden Bandhälfte. Für ein reales Spektrum entsprechen diese beiden Schnittpunkte den wahrscheinlichsten Lösungen der SRH-Gleichung.

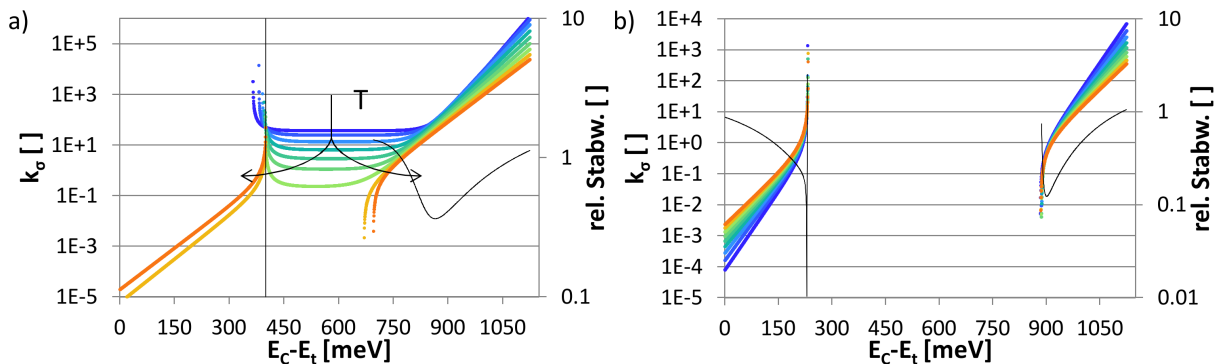


Abb. 4.8: a)  $DPSS - k_{\sigma}$ -Diagramm nach Anpassung des simulierten T-IDLS-Spektrums für den tiefen Defekt. Eine Temperaturerhöhung führt zu einer Aufspaltung des ehemals kontinuierlichen Lösungsbereiches. Es ergibt sich ein scharfer Schnittpunkt bei  $E_C - E_t = 400\text{ meV}$  und ein unscharfer Schnittpunkt in der gegenüber liegenden Bandhälfte b)  $DPSS - k_{\sigma}$ -Diagramm für den flachen Defekt. Der Lösungsbereich ist im gesamten Temperaturbereich nicht kontinuierlich. Es ergeben sich zwei scharfe Lösungen bei  $E_C - E_t = 200\text{ meV}$  und bei  $E_C - E_t = 928\text{ meV}$ .

Abbildung 4.8 a zeigt das  $DPSS - k_{\sigma}$ -Diagramm für den tiefen Defekt der simulierten Temperatur- und injektionsabhängigen Lebensdauerkurve aus Abbildung 4.7. Man erkennt, dass für niedrige Temperaturen der Lösungsbereich kontinuierlich ist. Mit steigender Temperatur verschwindet der Bereich in dem der Symmetrie-Faktor konstant ist [Rei05]. Erhöht man die Temperatur weiter, so teilt sich der Lösungsbereich wie bei einem flachen Defekt in einen Bereich nahe dem Leitungsband und einen Bereich nahe dem Valenzband [Rei05] auf. Bildet man für jedes Defektenergieniveau  $E_t^{DPSS}$  die relative Standardabweichung (schwarze Kurven) aller zu-

gehörigen  $k_\sigma$ -Werte, so lassen sich numerisch die Schnittpunkte im  $DPSS - k_\sigma$ -Diagramm bestimmen. Es ergeben sich ein scharfer Schnittpunkt (geringe relative Standardabweichung) bei der in der Simulation hinterlegten Defekt-Energietiefe von  $E_C - E_t = 400 \text{ meV}$  und ein unscharfer Schnittpunkt (höhere relative Standardabweichung) in der gegenüberliegenden Bandhälfte bei  $E_C - E_t = 862 \text{ meV}$ . Unter den realen Bedingungen eines Experiments ist eine relative Standardabweichung von 0,1 ein sehr guter Wert. Deswegen kann es schwierig werden in einem Experiment die zwei Lösungen in einen scharfen und einen unscharfen Schnittpunkt zu unterscheiden, da zufällige Messfehler die relative Standardabweichung der Schnittpunkte erhöhen. Die Unschärfe des zweiten Schnittpunktes lässt sich nach Rein im Idealfall über folgende Gleichung abschätzen [Rei05]:

$$E^{corr}(k_\tau, T) = k_B T \cdot \ln \left( k_\tau \frac{N_C(T)}{N_V(T)} \right). \quad (4.20)$$

Wie aus der Gleichung 4.20 zu erkennen ist, skaliert der Korrekturterm des Defektenergieniveaus der gegenüberliegenden Bandhälfte linear mit der Temperatur und logarithmisch mit dem Symmetrie-Faktor und dem Verhältnis der Zustandsdichten. Da für den tiefen Defekt in dieser Simulation ein relativ asymmetrischer Symmetrie-Faktor von 50 verwendet wurde, ist der Einfluss des Korrekturterms groß. Dies führt zu der hohen relativen Standardabweichung von 0,4 für den zweiten Schnittpunkt im  $DPSS - k_\sigma$ -Diagramm. Abbildung 4.8 b zeigt das  $DPSS - k_\sigma$ -Diagramm für den flachen Defekt. Aufgrund des negativen Anstieges der Lebensdauer sind in dem untersuchten Temperaturbereich nur Lösungen nahe den Bandkanten möglich. Die Auswertung des  $DPSS - k_\sigma$ -Diagramms erfolgt wiederum über die relative Standardabweichung. Es ergeben sich zwei scharfe Schnittpunkte, einer bei  $E_C - E_t = 200 \text{ meV}$ , was dem hinterlegten Energieniveau entspricht. Auf der gegenüberliegenden Bandhälfte ergibt sich ein Schnittpunkt bei  $E_C - E_t = 928 \text{ meV}$ . Wie schon erwähnt, sind beide Schnittpunkte scharf, weswegen eine exakte Bestimmung des Energieniveaus nicht möglich ist. Dadurch, dass für die Simulation ein Symmetrie-Faktor von 10 gewählt wurde, ist die Verschiebung durch  $E^{corr}$  relativ klein ( $3 \text{ meV}$ ). Die Bestimmung des Energieniveaus für flache Defekte ist dann begünstigt, wenn mindestens eine  $DPSS - k_\sigma$ -Kurve mit kontinuierlichem Lösungsbereich vorhanden ist. Dies kann erreicht werden, indem entweder eine höhere Dotierstoffkonzentration verwendet wird oder die Lebensdauer bei tieferen Temperaturen gemessen wird. Beides verschiebt das Fermi-Niveau näher an die Bandkante, wodurch der vermeintlich flache Defekt eine Lebensdauerkurve mit positivem Anstieg ausbildet. Dadurch ist der Defekt jedoch in Niederinjektion rekombinationsaktiver, wodurch eine Überlagerung mit dem tiefen Defekt eintritt, was wiederum die Auswertung des Spektrums erschweren kann.

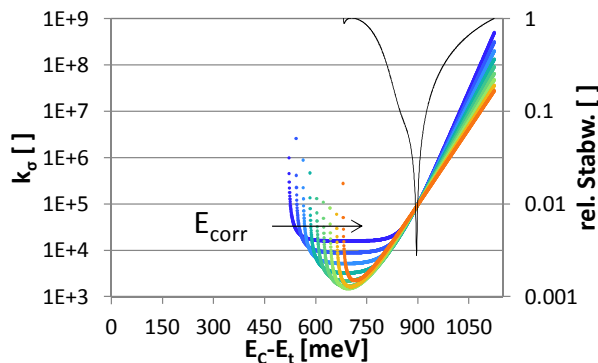


Abb. 4.9:  $DPSS - k_\sigma$ -Diagramm nach Anpassung des simulierten T-IDLS-Spektrums für den asymmetrischen Defekt. Der Lösungsbereich ist im gesamten Temperaturbereich kontinuierlich. Es ergibt sich durch die Verschiebung von  $E_{corr}$  nur eine scharfe Lösung bei  $E_C - E_t = 896 \text{ meV}$ .

Abbildung 4.9 zeigt das  $DPSS - k_\sigma$ -Diagramm für den asymmetrischen Defekt. Man erkennt, dass für alle Temperaturen der Lösungsbereich kontinuierlich ist. Mit steigender Temperatur



verschwindet der Energiebereich, in dem der Symmetriefaktor konstant ist. Mittels der relativen Standardabweichung lässt sich ein Schnittpunkt im  $DPSS-k_\sigma$ -Diagramm bestimmen. Es ergibt sich ein Schnittpunkt nahe der hinterlegten Defekt-Energietiefe von  $E_C - E_t = 896 \text{ meV}$ . Wie zuvor schon theoretisch erläutert, finden sich keine Lösungen für den asymmetrischen Defekt im Bereich der Minoritätsbandhälfte. Deutlich zu erkennen ist die starke Verschiebung des unscharfen Energieniveaus durch  $E^{corr}$  im Bereich der Bandmitte, welche eine Auswertung des Energieniveaus in der Minoritätsbandhälfte mittels relativer Standardabweichung unmöglich macht. Damit lässt sich immer eine eindeutige Lösung für das Defektenergieniveau des asymmetrischen Defektes bestimmen, sofern der Injektionsbereich der Messkurve den Bereich beinhaltet, in dem die Lebensdauer des asymmetrischen Defektes gegen einen konstanten Wert konvergiert.

Defekt	1		2		3				
	wahr	Anpassung		wahr	Anpassung		wahr	Anpassung	
Lösung		1.	2.		1.	2.		1.	2.
$E_C - E_t [\text{meV}]$	400	400	865	230	230	901,5	900	-	896,5
$\Delta E [\text{meV}]$	-	< 0,5	$\begin{smallmatrix} +139 \\ -65 \end{smallmatrix}$	-	< 0,5	$\begin{smallmatrix} +43 \\ -11 \end{smallmatrix}$	-	-	$\pm 1,5$
$k [ ]$	50	49,12	67,88	10	9,97	0,5	100000	-	89863
$\Delta k/k [\%]$	-	1,74	35,75	-	0,25	95	-	-	10,13
Rel.Stabw.	-	0,01	0,36	-	0,008	0,027	-	-	0,0037

Tab. 4.1: Ausgangswerte (wahr) für die Simulation und Ergebnisse nach Auswertung der DPSS-Diagramme

Tabelle 4.1 zeigt die für die Simulation der T-IDLS-Spektren verwendeten Parameter (wahr). Die beiden Lösungen (1. und 2.) des Anpassungsproblems für die einzelnen Defekte, sowie die Fehler in den so bestimmten Parametern sind ebenfalls dargestellt (Anpassung).

#### 4.4.2. Überlagerung der DPSS- $\tau_{n0}$ -Kurven: Auswertung der Defektkonzentration

Abbildung 4.10 a zeigt das  $DPSS-\tau_{n0}$ -Diagramm für den tiefen Defekt des simulierten T-IDLS-Spektrums. Die aus dem  $DPSS-k_\sigma$ -Diagramm bestimmten Defektenergieniveaus sind durch die schwarzen Linien gekennzeichnet. Auch im  $DPSS-\tau_{n0}$ -Diagramm ergeben sich Schnittpunkte, welche jedoch nicht mit den Energieniveaus aus dem  $DPSS-k_\sigma$ -Diagramm übereinstimmen müssen [Rei05]. Dies liegt daran, dass sich  $\tau_{n0}$  durch die Temperaturabhängigkeit der thermischen Geschwindigkeit  $v_{th}$  und der Einfangquerschnitte  $\sigma_p$  bzw.  $\sigma_n$  mit der Temperatur verändert. Abbildung 4.10 b zeigt das  $DPSS-\tau_{n0}$ -Diagramm für den flachen Defekt mit den aus  $DPSS-k_\sigma$ -Diagramm bestimmten Energieniveaus.

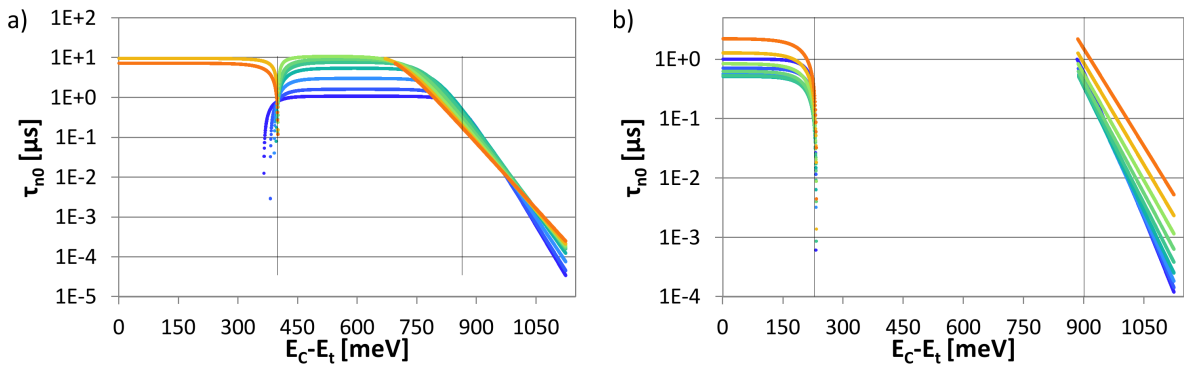


Abb. 4.10: a)  $DPSS-\tau_{n0}$ -Diagramm nach Anpassung des simulierten T-IDLS-Spektrums für den tiefen Defekt. b)  $DPSS-\tau_{n0}$ -Diagramm nach Anpassung des simulierten T-IDLS-Spektrums für den flachen Defekt. Die schwarzen Linien kennzeichnen die aus dem  $DPSS-k_\sigma$ -Diagramm bestimmten Lösungen für  $E_C - E_t$ . Damit lassen sich die Temperaturabhängigkeiten der Einfangzeitkonstanten für die einzelnen Defekte berechnen.

Außerdem kann eine Änderung der Defektkonzentration eine Verschiebung der  $\tau_{n0}$ -Kurven bewirken. Durch Auftragen von  $\tau_{n0}$  bei der aus dem  $DPSS - k_\sigma$ -Diagramm bestimmten Energieniveaus über der Temperatur ergeben sich charakteristische Kurven, welche sich beschreiben lassen durch:

$$\tau_{n0}(T) = (N_t(T) \cdot \sigma_n(T) \cdot v_{th,e}(T))^{-1}. \quad (4.21)$$

Aus diesen Kurven lässt sich das Produkt aus Einfangquerschnitt  $\sigma_n$  und Defektkonzentration  $N_t$  als Funktion der Temperatur bestimmen, da  $v_{th,e}(T)$  bekannt ist (siehe 2.4.2). Abbildung 4.11 a zeigt den Kurvenverlauf der  $\tau_{n0}(T)$ -Kurve für beide Lösungen des  $DPSS - k_\sigma$ -Diagrammes. Während als Resultat der Simulation die Einfangzeitkonstante des asymmetrischen Defektes ( $\tau_{n03}$ ) nahezu konstant ist, bilden der tiefe Defekt ( $\tau_{n01}$ ) und der flache Defekt ( $\tau_{n02}$ ) temperaturabhängige Verläufe der Einfangzeitkonstanten aus, deren Extrema sich überlagern. In Abbildung 4.11 b sind das Produkt von Einfangquerschnitt  $\sigma_n$  und Defektkonzentration  $N_t$  zu sehen. Da sowohl  $\sigma_n$  als auch  $N_t$  für den flachen und den tiefen Defekt in der Simulation variiert wurden, ergibt sich eine Funktion der Temperatur. Mit Kenntnis des Einfangquerschnittes bei der jeweiligen Temperatur ließe sich die Defektkonzentration berechnen.

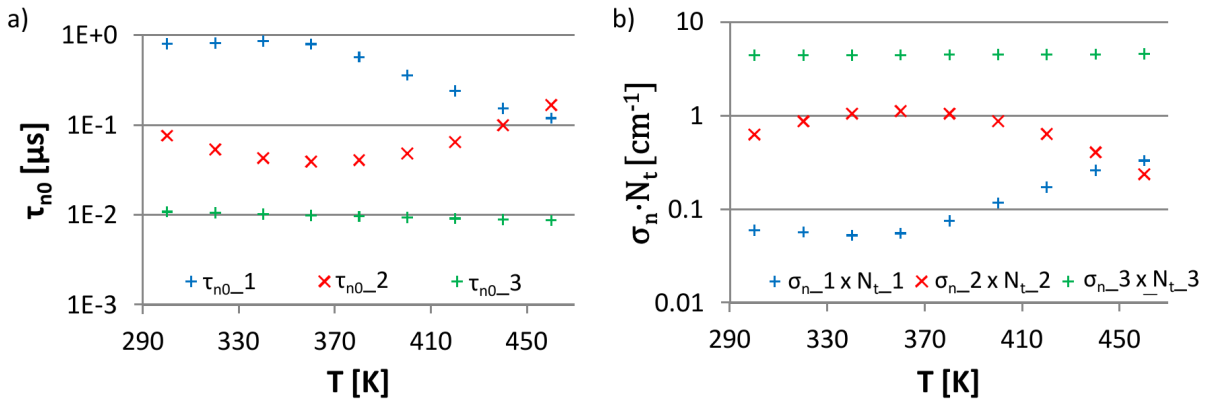


Abb. 4.11: a)  $\tau_{n0}(T)$ -Kurven für die Lösungen der drei Defekte, bestimmt nach Auswertung der  $DPSS - k_\tau$ - und  $DPSS - \tau_{n0}$ -Diagramme. b)  $\sigma_n(T) \times N_t(T)$ -Kurven berechnet aus den  $\tau_{n0}(T)$ -Kurven und der thermischen Geschwindigkeit für Elektronen  $v_{th}$  nach dem effektiven Massen Modell.

Die Temperaturabhängigkeiten der Einfangquerschnitte ergeben sich aus den Mechanismen, wie die überschüssige Energie bei Einfang eines Ladungsträgers abgegeben wird [Rei05]. Hierbei gibt es die Möglichkeiten eines strahlenden Prozesses, eines Auger-Prozesses, sowie die Emission einer oder mehrerer Phononen. Tabelle 4.2 nach Rein [Rei05] fasst typische Einfangprozesse zusammen und beschreibt die zu erwartende Temperaturabhängigkeit der Einfangquerschnitte.

Einfangmechanismus	erwartete Temperaturabhängigkeit	erwartete Parametrisierung
strahlender Einfang		
Photon emission capture	$\sigma(T) = konst.$	$\sigma = 10^{-24} - 10^{-22} \text{cm}^2$
Auger Einfang		
Classical auger capture	$\sigma(T) \approx konst.$	$\sigma < 10^{-15} \text{cm}^2$
Excitonic auger capture	$T > 60 \text{K} : \sigma(T) = \sigma_0 \times T^{-\alpha}$	$\sigma = 10^{-12} - 10^{-15} \text{cm}^2, \alpha > 0$
Phononisch unterstützter Einfang		
Multiphonon emission capture	$T > 60 \text{K} :$ $\sigma(T) = \sigma_\infty \times \exp(-E_\infty/k_B T)$	$\sigma_\infty = 10^{-14} - 10^{-15} \text{cm}^2$ $E_\infty = 0 - 560 \text{meV}$
Cascade capture	$\sigma(T) = \sigma_0 \times T^{-\alpha}$	$\alpha = 1 - 4$
Two-stage model of cascade capture	$\sigma(T) = \sigma_0 \times T^{-2} \times \exp(-\Delta E/k_B T)$	$\Delta E = E_1 - E_\infty$

Tab. 4.2: Übersicht für verschiedene Einfangmechanismen und deren erwartete Temperaturabhängigkeit des Einfangquerschnittes nach Rein [Rei05]

Für die Beispielrechnung ist die Summe der Defektkonzentrationen von tiefem und flachem

Defekt konstant, wie es bei einer Defektreaktion theoretisch zu erwarten ist. Diese Zwangsbedingung kann benutzt werden, um die Temperaturabhängigkeit der Einfangquerschnitte des tiefen und flachen Defektes zu bestimmen. Mit Kenntnis des Absolutwertes des Einfangquerschnittes eines Defektes bei einer definierten Temperatur lassen sich nicht nur die Absolutwerte der Defektkonzentrationen berechnen, es kann außerdem der Absolutwert des Einfangquerschnittes des anderen Defektes berechnet werden. Mathematisch lässt sich dies wie folgt beschreiben:

$$N_{t,ges}(T) = N_{t,1}(T) + N_{t,2}(T) = const., \quad (4.22)$$

$$N_{t,ges} = \frac{1}{\tau_{n0,1}(T) \cdot \sigma_{n,1}(T) \cdot v_{th,e}(T)} + \frac{1}{\tau_{n0,2}(T) \cdot \sigma_{n,2}(T) \cdot v_{th,e}(T)}, \quad (4.23)$$

$$\sigma_n(T) = \sigma_n^0 \cdot T^{-\alpha} \cdot \exp\left(-\frac{E_\infty}{k_B T}\right). \quad (4.24)$$

Durch das *DPSS* –  $\tau_{n0}$ –Diagramm ist  $\tau_{n0}$  und  $v_{th,e}$  durch das effektive Massenmodell gegeben. Parameter in diesem Modell sind  $\sigma_n^0$ ,  $\alpha$  und  $E_\infty$ . Sind zusätzliche Informationen, wie der Einfangmechanismus des Defektes bekannt, so lässt sich das Modell anpassen, wodurch sich die Anzahl der Anpassungsparameter reduziert. Für die Beispielrechnung wurde eine strikt exponentielle Temperaturabhängigkeit angenommen. Zusätzlich muss für die Berechnung der Absolutwerte der Defektkonzentrationen ein Referenzwert für den Wirkungsquerschnitt eines Defektes bekannt sein. Für die Beispielrechnung wurde  $\sigma_{n,1}^0$  als Referenzwert, wie in Abbildung 4.7, angenommen.

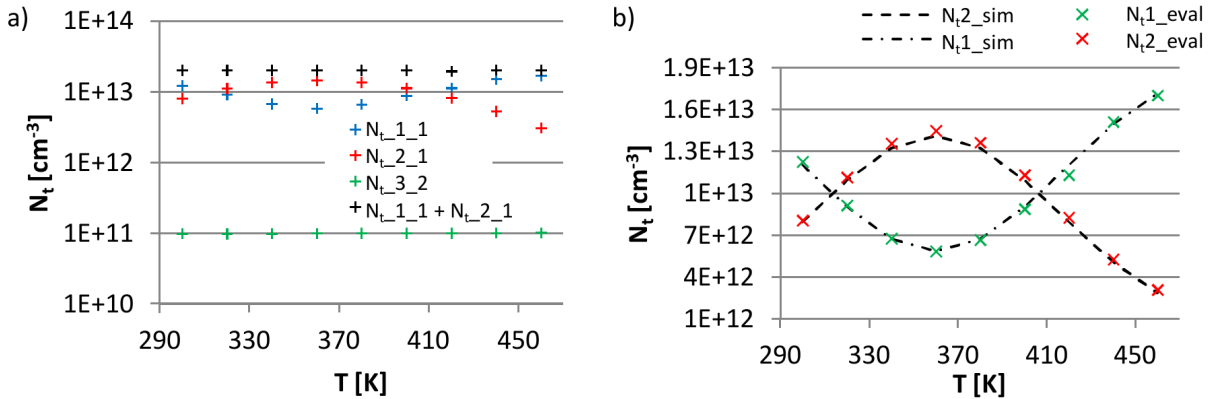


Abb. 4.12: a) Simulierte  $N_t(T)$ –Kurven für die Lösungen der drei Defekte nach Gleichung 4.23. b) Detailansicht der Defektkonzentrationen des tiefen und des flachen Defektes. Wie zu erkennen stimmen die Anpassungs-Ergebnisse ( $N_{t\_eval}$ ) mit der in der Simulation hinterlegten Konzentrationsfunktion ( $N_{t\_sim}$ ) der beiden Defekte sehr gut überein.

Abbildung 4.12 a zeigt die berechneten Defektkonzentrationen für alle drei simulierten Defekte. Unter der Annahme einer konstanten Defektkonzentration ergibt sich für den asymmetrischen Defekt eine nahezu vernachlässigbare Temperaturabhängigkeit des Einfangquerschnittes, wie es in den Eingabeparametern hinterlegt ist. Ist dieser bekannt, so lässt sich die Defektkonzentration berechnen. In Abbildung 4.12 a ist diese durch die grünen Kreuze dargestellt. Für den flachen und den tiefen Defekt ergeben sich unabhängig vom verwendeten Modell für die Temperaturabhängigkeit des Einfangquerschnittes variable Konzentrationen. Dies liegt daran, dass sich für beide Defekte die Konzentrationen mit der Temperatur ändern, deren Summe jedoch konstant ist. Dies ist typisch für Defektreaktionen bei denen sich die Defektkonfiguration ändert. Prominente Beispiele dafür sind Metallionen-Akzeptor-Paare, welche sich durch die Reaktion von positiv geladenen Metallionen  $Me^+$  und negativ geladenen Akzeptorionen  $A^-$  bilden können [Gra00]:



Die Summe der Konzentrationen der Metallionen und der Paare bleibt aufgrund der Massenerhaltung gleich. Dies ist in Abbildung 4.12 a anhand der schwarzen Kreuze zu erkennen. Essentiell für eine solche Auswertung ist, dass beide Defektkonfigurationen rekombinationsaktiv und damit detektierbar sind. In Abbildung 4.12 b sind die Eingangsparameter der Simulation und die Ergebnisse der Auswertung für den flachen und den tiefen Defekt dargestellt. Es ist zu erkennen, dass Eingabeparameter und Simulationsergebnisse sehr gut übereinstimmen. Der maximale relative Fehler in der Simulation beträgt weniger als 7%. Des Weiteren können durch die Simulation der Einfangquerschnitt des flachen Defektes, sowie die Temperaturabhängigkeiten der Einfangquerschnitte bestimmt werden. Tabelle 4.3 fasst die Ergebnisse der Simulation zusammen.

Defekt	1		2		3	
	wahr	Fit	wahr	Fit	wahr	Fit
$\Delta N_{t,\max} [\%]$	-	6,5	-	6,7	-	2,0
$E_\infty [meV]$	100	103	0	1,5	0	0
$\sigma_p (300 K) [cm^2]$	$10^{-16}$	$10^{-16}$	$8 \times 10^{-16}$	$7,9 \times 10^{-16}$	$5 \times 10^{-16}$	$5 \times 10^{-16}$

Tab. 4.3: Ergebnisse der Auswertung der Einfangzeitkonstanten.

Der relative Fehler im Absolutwert des Einfangquerschnittes für den flachen Defekt beträgt weniger als 2%. Durch die Annahme einer strikt exponentiellen Temperaturabhängigkeit ergeben sich Aktivierungsenergien für die Einfangquerschnitte der beiden Defekte. Für den tiefen Defekt ergeben sich 103 meV und für den flachen Defekt 1,5 meV. Die Standardabweichung des Anstieges  $\sigma_m$  der gesamten Defektkonzentration über der Temperatur  $T$  entspricht einem Energieintervall, und wurde über die Summe der Fehlerquadrate  $\chi^2$  des Anpassungsergebnisses nach folgender Gleichung für ein Konfidenzniveau von 95% abgeschätzt.

$$\pm \Delta E = 2 \cdot k_B \cdot \sigma_m = 2 \cdot k_B \cdot \sqrt{\frac{N \cdot \sum (\chi^2(T))}{N \cdot \sum (T^{-2}) - (\sum (T^{-1}))^2}}, \quad (4.26)$$

hierbei ist  $k_B$  die Boltzmannkonstante und  $N$  die Anzahl der Messwerte. Der Fehler beträgt für die Beispielrechnung  $\pm 4 meV$ . Damit wird die in der Simulation hinterlegten Aktivierungsenergie von 100 meV für den tiefen Defekt und 0 meV für den flachen Defekt innerhalb Intervalls des berechneten Fehlers wiedergegeben. Im Rahmen der Beispielrechnung war der Einfangquerschnitt bekannt. Ist dies nicht der Fall, so kann man eine Defektreaktion dahingehend auswerten, dass die Summe der Defektkonzentrationen, unabhängig von den absoluten Werten, konstant ist. Damit lässt sich zumindest die Temperaturabhängigkeit der Einfangquerschnitte für den Temperaturbereich der Messung bestimmen. Für den Absolutwert der Defektkonzentration ist jedoch die Kenntnis des Einfangquerschnittes, zum Beispiel durch Bestimmung mittels DLTS, notwendig.

#### 4.4.3. Defektparameter und Trapping

Unter Niederinjektion kann die Lebensdauer durch externes Trapping überlagert sein. Trapping tritt prinzipiell bei jeder Lebensdauermessung auf, da Defekte nicht nur als Rekombinationszentren sondern auch als Trappingzentren agieren. Die Trappingzentren wechselwirken mit den Bandkanten, indem sie Ladungsträger einfangen und nach einiger Zeit wieder in die Bänder abgeben. Dadurch werden die eingefangenen Ladungsträger temporär an der Rekombination gehindert. Dies kann zu einem Überschuss einer Sorte von Überschussladungsträgern führen ( $\Delta n \neq \Delta p$ ). Unabhängig davon führt die thermische Emission von Ladungsträgern aus Trappingzentren in die entsprechenden Bänder zu einer scheinbar erhöhten Rekombinationslebensdauer. Dieser Effekt betrifft vor allem leitfähigkeitsbasierte Messmethoden wie QSS-PC. Photolumineszenz basierte Messungen sind prinzipiell weniger anfällig für Trapping, da hier das Produkt der Überschussladungsträgerkonzentrationen ausgewertet wird und nicht deren Summe. In Hochinjektion ist die Anzahl der Überschussladungsträger in der Regel deutlich größer als die Anzahl

der durch Trapping in die Bänder abgeben Ladungsträger. Deshalb kann theoretisch bei allen Verfahren die Lebensdauer in Hochinjektion präzise gemessen werden, vorausgesetzt es werden genügend Überschussladungsträger generiert. Um die Verzerrung der gemessenen Lebensdauer zu vermeiden, wurde, wie in Abbildung 4.13 a, der Niederinjektionsteil der effektiven Lebensdauer mit negativem Anstieg verworfen. Des Weiteren muss davon ausgegangen werden, dass das externe Trapping auch im Injektionsbereich  $\Delta n < p_0 + n_0$  maßgeblich die effektive Lebensdauer und damit auch den Symmetriefaktor des tiefen Defektes beeinflusst.

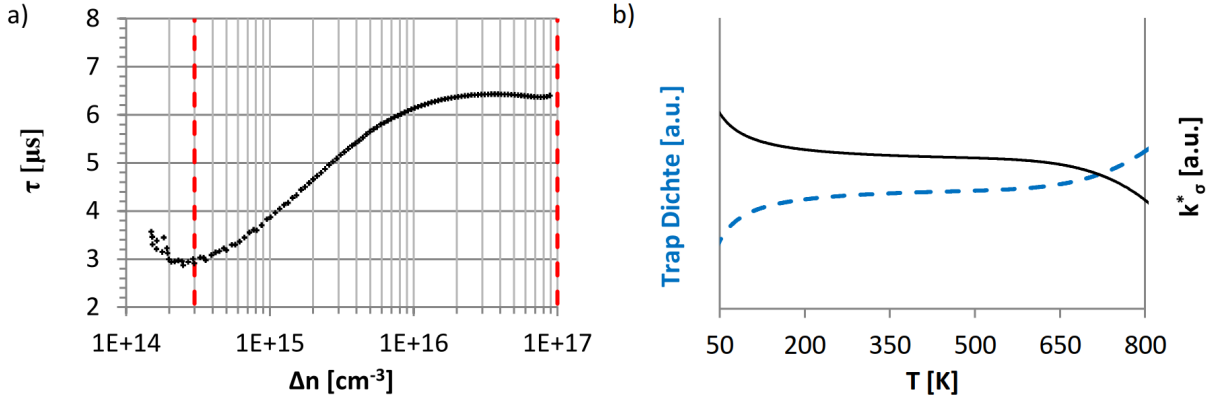


Abb. 4.13: a) Trapping behaftete injektionsabhängige Lebensdauerkurve. Ein Trapping-Artefakt in Niederinjektion muss verworfen werden. Die Grenzen des Injektionsbereiches für die Simulation sind als rote Linien eingezeichnet. b) Simulierte Reduzierung des anscheinenden Symmetriefaktors als Funktion der Temperatur. Da mit steigender Temperatur mehr Trappingzentren thermisch aktiviert werden, wird die anscheinende Lebensdauer  $\tau_{n0}^*$  in Niederinjektion erhöht und der anscheinende Symmetriefaktor  $k_\sigma^*$  erniedrigt. Existiert ein Temperaturbereich, in dem der anscheinende Symmetriefaktor  $k_\sigma^*$  nahezu konstant ist, wird dieser Bereich zur Defektidentifikation verwendet.

Weiterhin muss angenommen werden, dass externes Trapping thermisch aktiviert ist, da Trappingzentren ein Niveau in der Bandlücke einnehmen. Um den Einfluss des externen Trappings numerisch greifbar zu machen, muss also ein Temperaturbereich gefunden werden, in dem sich die Defektparameter  $E_t$  und  $k_\sigma$  des tiefen Defektes im  $DPSS - k_\sigma$ -Diagramm nahezu nicht ändern. Damit lässt sich  $E_t$  für den tiefen Defekt theoretisch bestimmen. Jedoch ist es bei einer durch Trapping überlagerten Lebensdauerkurve besser von einem scheinbaren Symmetriefaktor  $k_\sigma^*$  bzw. einer scheinbaren Einfangzeitkonstante  $\tau_{n0}^*$  zu sprechen. Abbildung 4.13 b zeigt schematisch den Verlauf des scheinbaren Symmetriefaktors mit der Temperatur für den Fall, dass die Trap-Dichte mit der Temperatur ansteigt. Falls ein hinreichend großer Temperaturbereich existiert, in dem der scheinbare Symmetriefaktor nahezu konstant ist, kann in diesem Bereich das Energieniveau bestimmt werden. Ist dies nicht der Fall, so kann die Defektidentifikation scheitern. Die Konzentrationsbestimmung durch die Auswertung der anscheinenden Einfangzeitkonstante für Minoritäten (für p-Typ:  $\tau_{n0}^*$ ) nach folgender Gleichung, ist in der Regel mit Trapping behaftet:

$$N_t^* = \frac{1}{\tau_{n0}^* \cdot \sigma_n \cdot v_{th,e}} . \quad (4.27)$$

Dieser Fehler kann durch die Auswertung der Lebensdauer unter Hochinjektion, wo Trapping eine untergeordnete Rolle spielt, korrigiert werden. Die Einfangzeitkonstante für Majoritäten  $\tau_{p0}^*$  berechnet sich aus dem Produkt der scheinbaren Größen für den Symmetriefaktor  $k_\tau^*$  und der Einfangzeitkonstante für Minoritäten  $\tau_{n0}^*$ :

$$\tau_{p0}^* = k_\tau^* \cdot \tau_{n0}^* . \quad (4.28)$$

Die Berechnung der Defektkonzentration erfolgt analog nach folgenden Gleichungen:

$$p - Typ : N_t^* = \frac{1}{\tau_{p0}^* \cdot \sigma_p \cdot v_{th,h}} = \frac{1}{k_\tau^* \cdot \tau_{n0}^* \cdot \sigma_p \cdot v_{th,h}} = \frac{1}{k_\sigma^* \cdot \tau_{n0}^* \cdot \sigma_p \cdot v_{th,e}}, \quad (4.29)$$

$$n - Typ : N_t^* = \frac{1}{\tau_{n0}^* \cdot \sigma_n \cdot v_{th,e}} = \frac{k_\tau^*}{\tau_{p0}^* \cdot \sigma_n \cdot v_{th,e}} = \frac{k_\sigma^*}{\tau_{p0}^* \cdot \sigma_n \cdot v_{th,p}}. \quad (4.30)$$

Der Fehler dieser Methode der Konzentrationsbestimmung kann durch folgende Gleichungen abgeschätzt werden, wenn  $\tau^{HLI}$  nicht vom Trapping beeinflusst wird.

$$p - Typ : \frac{N_t^{corr}}{N_t^*} = \frac{\tau_{p0}^*}{\tau_{p0}^{corr}} = \frac{\left(1 + \frac{1}{k_\tau^{corr}}\right)}{\left(1 + \frac{1}{k_\tau^*}\right)} = \frac{\left(\frac{v_{th,e}}{v_{th,h}} + \frac{1}{k_\sigma^{corr}}\right)}{\left(\frac{v_{th,e}}{v_{th,h}} + \frac{1}{k_\sigma^*}\right)}, \quad (4.31)$$

$$n - Typ : \frac{N_t^{corr}}{N_t^*} = \frac{\tau_{n0}^*}{\tau_{n0}^{corr}} = \frac{(1 + k_\tau^{corr})}{(1 + k_\tau^*)} = \frac{\left(1 + \frac{v_{th,e}}{v_{th,h}} \cdot k_\sigma^{corr}\right)}{\left(1 + \frac{v_{th,e}}{v_{th,h}} \cdot k_\sigma^*\right)}. \quad (4.32)$$

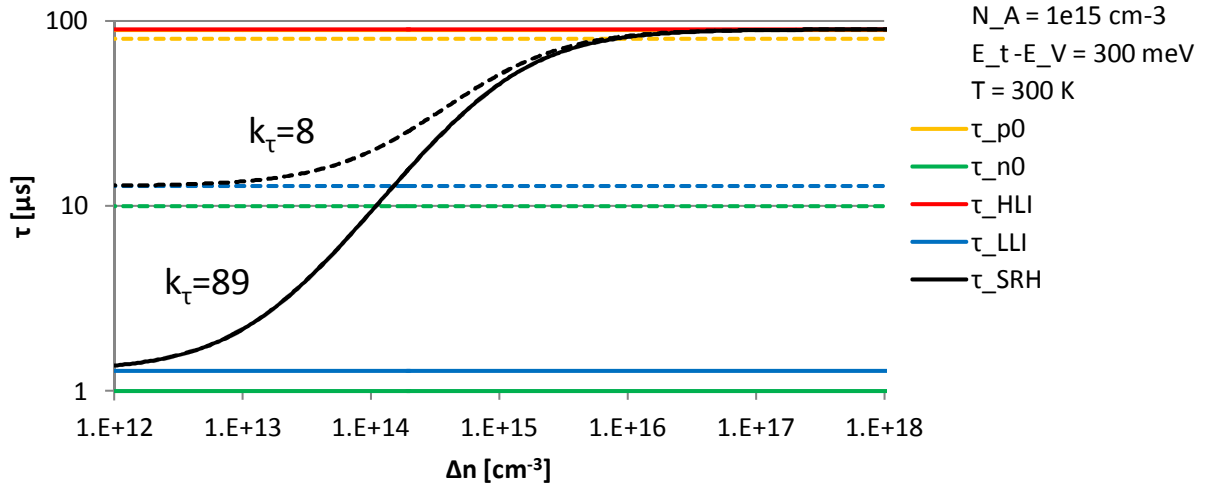


Abb. 4.14: Einfluss des Trappings auf eine IDLS-Kurve. Die durchgezogenen Linien stellen die reale Lebensdauerkurve und ihre Parametrisierungen dar, während die mit Trapping behaftete Kurve und die zugehörigen Parametrisierungen gestrichelt dargestellt sind. Die Einfangzeitkonstante für Minoritäten variiert durch Trapping in der Simulation um eine Größenordnung. Die Einfangzeitkonstante für Majoritäten bleibt vom Trapping nahezu unbeeinflusst.

Man erkennt, dass der Fehler in diesem Modell stark von dem Einfluss des Trappings auf den Symmetriefaktor abhängt. Da durch das Trapping der anscheinende Symmetriefaktor für p-Typ Material immer deutlich kleiner als der durch eine Referenzmethode bestimmte Symmetriefaktor  $k^{corr}$  ist, wird die reale Defektkonzentration überschätzt. Der Fehler ist umso kleiner, je asymmetrischer der Defekt ist. Für einen anscheinenden Symmetriefaktor  $k_\tau^*$  von 50 in p-Typ Silicium ist der Fehler in der berechneten Konzentration nach diesem Modell kleiner  $N_t^*/k_\tau^*$  und damit unabhängig vom Wert von  $k_\tau^{corr}$  kleiner 2 %. Abbildung 4.14 verdeutlicht den Vorteil der Auswertung der Einfangzeitkonstanten für Majoritäten, indem zwei IDLS-Kurven mit unterschiedlichem Symmetriefaktor  $k_\tau$  (89 und 8) in p-Typ Material mit einer Dotierstoffkonzentration an Bor von  $N_{dop} = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$  dargestellt sind, die in Hochinjektion gegen dieselbe Lebensdauer konvergieren. Der niedrigere Symmetriefaktor stellt dabei die durch Trapping beeinflusste Lebensdauer dar, welche in Abbildung 4.14 gestrichelt eingezeichnet ist. Die für die Bestimmung der Defektkonzentration relevanten Größen  $\tau_{p0}$  und  $\tau_{n0}$  sind ebenfalls eingezeichnet. Für den hohen Symmetriefaktor ist  $\tau_{p0}$  nahezu identisch mit  $\tau^{HLI}$ , weshalb sich diese Kurven in Abbildung 4.14 überlagern. Es ist deutlich zu erkennen, dass  $\tau_{n0}^*$  von der Stärke des Trappings abhängig

ist, während  $\tau_{p0}^*$  nahezu unbeeinflusst ist, da die Summe aus  $\tau_{p0}$  und  $\tau_{n0}$  gleich  $\tau^{HLI}$  und damit konstant ist. Ist ein Referenzwert für den Symmetriefaktor bekannt, so kann ein genauerer Wert für die Defektkonzentration durch Gleichung 4.31 bzw. 4.32 berechnet werden.

## 5. Defektcharakterisierung

Metallische Verunreinigungen spielen in der Entwicklung von Halbleitern eine große Rolle, da sie energetische Zustände innerhalb der Bandlücke ausbilden. Um diese Punktdefekte zu analysieren, wurden verschiedene Methoden entwickelt, von denen die Deep Level Transient Spectroscopy (DLTS) wohl die am meisten genutzte ist. Defektenergielevel  $E_t$ , sowie Einfangquerschnitte für Majoritäten  $\sigma$  sind durch DLTS zugänglich. Es existieren Tabellen mit Energieniveaus für bekannte Störstellen, die als Referenz für bekannte Defekte dienen können. Damit ist es möglich, die Ergebnisse der Lebensdauerspektroskopie zu falsifizieren. Mittels Lebensdauerspektroskopie können das Defektenergieniveau  $E_t$  und der Symmetriefaktor  $k$  einer Störstelle bestimmt werden, womit sich bei bekanntem Einfangquerschnitt für Majoritäten theoretisch der Einfangquerschnitt für Minoritäten berechnen lässt. Wie in Abschnitt 4.4.3 beschrieben, ist dies mit leitfähigkeitsbasierten Methoden nur bedingt möglich, da externes Trapping die effektive Lebensdauer unter Niederinjektion deutlich beeinträchtigen kann. Die in diesem Abschnitt entwickelte Methode zur Korrektur des externen Trappings wird dabei angewandt, um die Defekte zu charakterisieren, mögliche Defektreaktionen in den Proben zu analysieren und die Temperaturabhängigkeit der Einfangquerschnitte für Majoritäten zu bestimmen. Als Ausgangspunkt wurden, wie in Abschnitt 3.1 beschrieben, Cz-Silicium Wafer gezielt kontaminiert, um eine Referenz für häufig anzutreffende Defekte herzustellen. Sie dienen als Modellmaterialien und außerdem der Validierung der verwendeten Modelle.

### 5.1. Kontaminierte Proben

### 5.2. Eisen-Kontamination

Eisen gehört zu den prominentesten Metallkontaminanten, da es häufig Bestandteil der Produktionsanlagen ist und daher eine Vielzahl potentieller Kontaminationsquellen existieren [Rei05]. So kann der mechanische Kontakt zu Stahl oder aber die Anlagerung von Eisen-Ionen während der chemischen Behandlung der Proben zu einer oberflächlichen Kontamination führen. Nachfolgende Hochtemperaturprozesse, wie Diffusion, Abscheidung der Passivierung und das Einlegieren der elektrischen Kontakte können dazu beitragen, Eisen in das Volumen eines Wafers zu befördern. Im Volumen können sich, abhängig von dem Temperaturverlauf während des Abkühlens der Probe, aufgrund von Übersättigung des Siliciumkristalls Eisen-Präzipitate bilden. Diese sind laut Henley und Ramappa [HR97] nur schwach rekombinationsaktiv. Bleibt das Eisen gelöst, so besetzt es höchstwahrscheinlich Zwischengitterplätze. Man spricht dann von interstitiellem Eisen ( $Fe_i$ ), welches entweder neutral oder einfach positiv geladen sein kann. Aufgrund der positiven Ladung stellt es einen Donator-Zustand dar, dessen Energieniveau durch verschiedene Methoden konsistent zu  $E_t - E_V = 385 \pm 15 \text{ meV}$  bestimmt wurde [Rei05, IHW99, Gra00]. Eisen besitzt außerdem die Eigenschaft häufig Paare mit negativ geladenen Akzeptoren zu bilden [Gra00]. Prominentestes Beispiel sind in Bor-dotiertem Silicium die Eisen-Bor-Paare ( $FeB$ ), welche je nach Ladungszustand ein Akzeptor- bzw. Donatorniveau einnehmen können. Es ist aus der Literatur bekannt, dass sich Eisen-Bor-Paare optisch, thermisch und elektrisch dissoziieren lassen, was sich durch folgende Reaktionsgleichung beschreiben lässt:



Da Bor nahezu vollständig substitutionell gebunden und damit bei moderaten Temperaturen nicht mobil ist, werden sich die Eisen-Bor-Paare durch Diffusion des mobilen  $Fe_i$  zu den Bor-Ionen bilden. Dies bedeutet auch, dass eine ausreichende Mobilität von  $Fe_i$  vorhanden sein muss, um  $FeB$  zu dissoziieren, da sich ansonsten in extrem kurzer Zeit wieder  $FeB$  bilden wird. Folgende Tabelle fasst die Ergebnisse diverser Autoren für die verschiedenen Defektkonfigurationen von Eisen in Bor-dotiertem Silicium zusammen.



Defekt	$E_t - E_V$ [meV]	$E_C - E_t$ [meV]	$k_\sigma$ []	$\sigma_p(300\text{ K})$ [cm <sup>2</sup> ]	$E_\infty$ [meV]	Methode	Quelle
$Fe_i$ Donator	$394 \pm 5$		$51 \pm 5$	$7,0 \times 10^{-17}$	24	TDLS	[Rei05]
	$380 \pm 10$		571	$7,0 \times 10^{-17}$	$45 \pm 5$	DLTS	[IHW99]
	$390 \pm 10$		491	$5,3 \times 10^{-17}$	43	DLTS	[Gra00]
$FeB$ Akzeptor		$260 \pm 30$	0,45	$5,5 \times 10^{-15}$	-	TDLS	[Rei05]
		$260 \pm 30$	0,08	$3,0 \times 10^{-14}$	-	DLTS	[IHW99]
		270	1,56	$1,6 \times 10^{-15}$	-	DLTS	[Gra00]
$FeB$	100		20	$2,0 \times 10^{-14}$	-	DLTS	[IHW99]
Donator	100		4	$6,4 \times 10^{-14}$	-	DLTS	[Gra00]

Tab. 5.1: Defektparameter für verschiedene Defektkonfigurationen von Eisen

Wie erwähnt, lassen sich mit DLTS und Lebensdauerspektroskopie (LS) das Defektenergieniveau für  $Fe_i$  und  $FeB$  mit hoher Präzision bestimmen. Der durch leitfähigkeitsbasierte LS bestimmte Symmetriefaktor ist für  $Fe_i$  deutlich niedriger, als für die beiden DLTS Ergebnisse. Wie in 3.4.3 erläutert, kann externes Trapping den anscheinenden Symmetriefaktor deutlich reduzieren. Ferner ist die Aktivierungsenergie  $E_\infty$  der Einfangquerschnitte in der Tabelle für  $Fe_i$  nach Rein halb so groß, wie die durch DLTS bestimmten Werte. Dies kann daran liegen, dass für die Bestimmung von  $E_\infty$  die Einfangzeitkonstante für Minoritäten ausgewertet wurde [Rei05], welche ebenfalls durch das Trapping beeinflusst wird.

### 5.2.1. T-IDLS Spektrum der mit Eisen kontaminierten p-Typ Silicium Probe mit Siliciumnitrid Passivierung

Für die Lebensdauermessungen bei verschiedenen Temperaturen wurde die mit Eisen kontaminierte Probe nach der Nitridbeschichtung mit dem BCT 400 bis zu einer Temperatur von 513 K aufgeheizt. Vor jeder Messung wurde eine optische Dissoziation der  $FeB$ -Paare durch Entfernen des optischen Filters und zehn Lichtpulsen durchgeführt. Es wurden Photoleitfähigkeitsmessungen von 513 K bis 303 K in der Regel in Schritten von 10 K mit optischem Filter durchgeführt. Das daraus berechnete T-IDLS-Spektrum ist in Abbildung 5.1 a zu sehen.

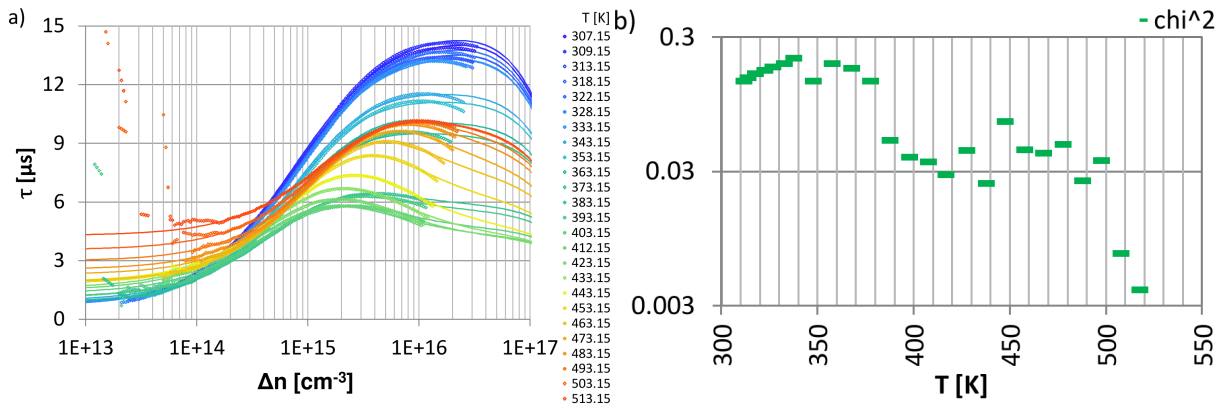


Abb. 5.1: a) T-IDLS-Spektrum einer mit Eisen kontaminierten p-Typ Silicium Probe im Temperaturbereich von 303 bis 513 K. Punkte stellen Messwerte dar, durchgezogene Linien sind Lösungen des Fitproblems. Die Lebensdauer in Niederinjektion steigt kontinuierlich mit der Temperatur an. In Hochinjektion hingegen besitzt die Lebensdauer ein Minimum bei  $T = 433\text{ K}$ . Dies ist ein Indiz für eine von der Temperatur abhängige Defektreaktion. b) Fitgüte  $\chi^2$  des Fitproblems für die verschiedenen IDLS Kurven über der jeweiligen Temperatur.

Die Farbe der Messpunkte codiert dabei die Temperatur bei der die Messung durchgeführt wurde. Die durchgezogenen Linien mit der gleichen Farbcodierung entsprechen den Simulati-

onsergebnissen. Blau entspricht dabei einer tiefen Temperatur, während rot hohe Temperaturen codiert. Abbildung 5.1 b zeigt die Anpassungsgüte  $\chi^2$  für die einzelnen Temperaturen. Man erkennt, dass der Fit mit steigender Temperatur besser wird, was unter anderem daran liegt, dass bei höheren Temperaturen ein größerer Teil der Messwerte aufgrund von Trapping verworfen werden musste und sich damit der auswertbare Injektionsbereich reduziert. Es ist deutlich zu erkennen, dass die Lebensdauer unter Niederinjektion leicht mit der Temperatur ansteigt, was auf einen tiefen Defekt in Niederinjektion schließen lässt. In Hochinjektion ist das Verhalten komplizierter. Die Lebensdauer ist hier bei tiefen Temperaturen am höchsten, sinkt dann bis auf ein Minimum bei 433 K ab und steigt dann stetig für noch höhere Temperaturen wieder an. Dies ist ein eindeutiges Zeichen für eine Defektreaktion, da die Temperaturabhängigkeiten der thermischen Geschwindigkeit der Ladungsträger und der Einfangquerschnitte in der Regel stetige Funktionen ohne Extrema sind. Das Spektrum lässt sich sehr gut mit zwei SRH-Defektzentren anpassen. Auch eine 3-Defekt-Anpassung wurde aufgrund der Existenz von  $FeB$  Donatoren durchgeführt, jedoch aufgrund der schlechten Modellierbarkeit verworfen. Abbildung 5.2 a und b zeigen die durch Simulation erhaltenen  $DPSS - k_\sigma$ -Diagramme für den tiefen und den flachen Defekt.

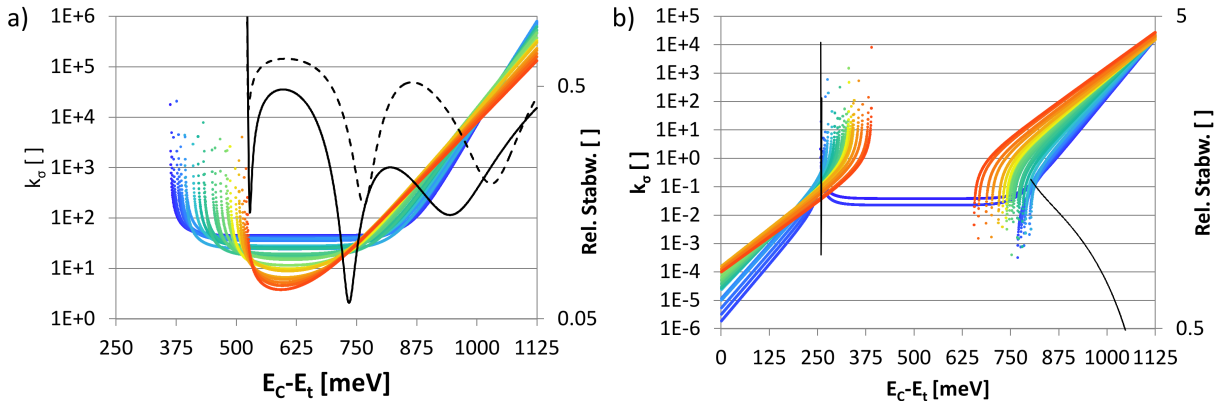


Abb. 5.2: a)  $DPSS - k_\sigma$ -Diagramm für den tiefen Defekt mit einem scharfen Schnittpunkt bei  $E_t - E_V = 390 \text{ meV}$ . Die Auswertung ohne Trapping-Korrektur führt zu der als gestrichelte schwarze Linie dargestellten relativen Standardabweichung. Durch die Anwendung der Trapping-Korrektur wird das Minimum der relativen Standardabweichung in Richtung der Bandmitte verschoben (schwarze durchgezogene Kurve). b)  $DPSS - k_\sigma$ -Diagramm für den flachen Defekt mit einem scharfen Schnittpunkt bei  $E_C - E_t = 260 \text{ meV}$ . Bei tiefen Temperaturen findet die Aufspaltung des kontinuierlichen Lösungsbereiches statt. Dies ermöglicht die Bestimmung des Energieniveaus von  $FeB$  mit relativ geringem Fehler.

Für den tiefen Defekt ergibt sich ein Energieniveau in der unteren Bandhälfte. Die Annahme eines thermisch aktivierten Trappings führt zu einer Senkung des anscheinenden Symmetriefaktors für den tiefen Defekt mit steigender Temperatur. Sie verursacht eine scheinbare Verschiebung des Schnittpunktes zu den Bandkanten (gestrichelte schwarze Linie). Der Temperaturbereich wurde so gewählt, dass der resultierende Schnittpunkt einen maximalen Bandabstand besitzt. In diesem Fall lag der optimale Temperaturbereich zwischen 380 und 520 K. Die relative Standardabweichung für den Schnittpunkt im  $DPSS - k_\sigma$ -Diagramm (durchgezogene schwarze Linie) konnte durch Auswertung des reduzierten Temperaturbereiches deutlich erniedrigt werden. Die Energieniveaus bei  $E_t - E_V = 390 \pm 25 \text{ meV}$  für den tiefen Defekt und  $E_C - E_t = 260 \pm 0,5 \text{ meV}$  für den flachen Defekt identifizieren diese Defekte eindeutig als  $Fe_i$  und  $FeB$  Akzeptoren. Tabelle 5.2 fasst die erhaltenen Parametrisierungen für  $Fe_i$  und  $FeB$  zusammen.

Defekt	$E_C - E_t$ [meV]	$E_t - E_V$ [meV]	$k_\sigma^*$ (300 K) []	$\sigma_p$ (300 K) [cm <sup>-2</sup> ]	$\sigma_n^*$ (300 K) [cm <sup>-2</sup> ]	$E_\infty$ [meV]
$Fe_i$		$390 \pm 25$	$51 \pm 5$	$7,0 \times 10^{-17}$	$3,6 \pm 0,35 \times 10^{-15}$	$44 \pm 3$
$FeB$	$260 \pm 0,5$		$0,1 \pm 0,025$	$1,1 \pm 0,1 \times 10^{-14}$	$1,1 \pm 0,28 \times 10^{-15}$	$0,15 \pm 3$

Tab. 5.2: Wahrscheinlichste Parametrisierung für das T-IDLS-Spektrum der mit Eisen-kontaminierten p-Typ Probe.

Die Ergebnisse aus den T-IDLS Spektren stimmen sehr gut mit den von Rein [Rei05] durch TDLS ermittelten Werten überein. Dies verdeutlicht wie präzise und reproduzierbar Lebensdauer-spektroskopische Untersuchungen sein können.

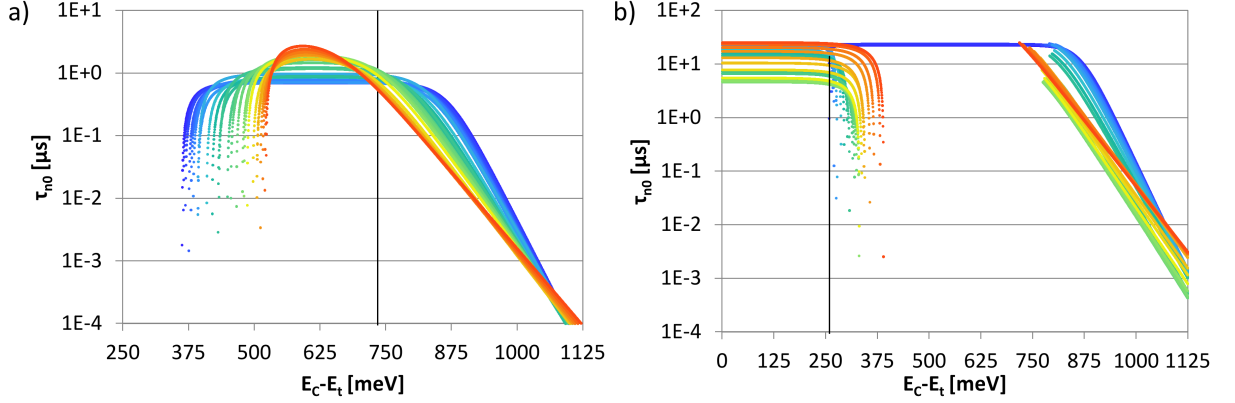


Abb. 5.3: a)  $DPSS - \tau_{n0}$ -Diagramm für  $Fe_i$  mit eingezeichneter Lösung aus dem entsprechenden  $DPSS - k_\sigma$ -Diagramm. Die so erhaltenen Werte für  $\tau_{n0}$  variieren nur schwach mit der Temperatur. b)  $DPSS - \tau_{n0}$ -Diagramm für  $FeB$  mit eingezeichneter Lösung des entsprechenden  $DPSS - k_\sigma$ -Diagrammes. Die Lösungen für  $\tau_{n0}$  variieren stark mit der Temperatur.

Abbildung 5.3 zeigt die resultierenden Einfangzeitkonstanten für Minoritäten für  $Fe_i$  (a) und  $FeB$  (b). Wie zu erkennen, ist die Einfangzeitkonstante für  $FeB$  stärker Temperaturabhängig als für  $Fe_i$ . Abbildung 5.4 a zeigt die anscheinenden Symmetriefaktoren für  $Fe_i$  und für  $FeB$  über der Temperatur. Erwartungsgemäß sinkt der anscheinende Symmetriefaktor für  $Fe_i$  durch die thermische Aktivierung des Trappings.

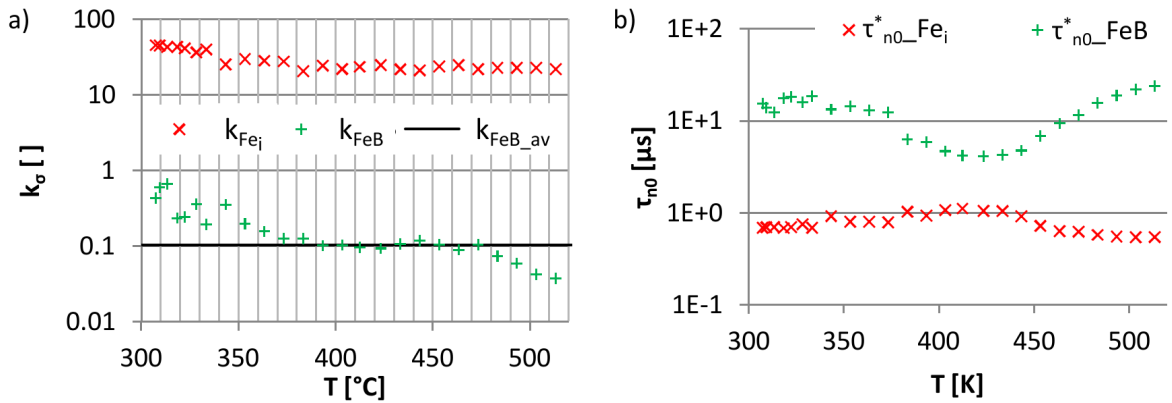


Abb. 5.4: a) Anscheinender Symmetrie-Faktor  $k_\sigma$  für die verschiedenen Defektkonfigurationen von Eisen als Funktion der Temperatur. Für  $FeB$  wurde zur weiteren Berechnung der eingezeichnete Mittelwert verwendet (schwarze Kurve) b) Einfangzeitkonstante für Majoritäten  $\tau_{p0}$  der beiden Defekte als Funktion der Temperatur. Wie zu erkennen, entsprechen die Maxima der einen Kurve den Minima der anderen Kurve.

Für Temperaturen größer 380 K ist der Symmetriefaktor für  $Fe_i$  nahezu konstant. Dies lässt

vermuten, dass das externe Trapping nur von extrem flachen Defekten ( $E_t < 100 \text{ meV}$ ) verursacht wird, da diese anscheinend bei Temperaturen größer  $350 \text{ K}$  vollständig aktiviert sind. Die Defektidentifikation für  $FeB$  wurde bei niedrigen Temperaturen durchgeführt. Hier findet der Übergang von einem tiefen zu einem flachen Defekt statt, weswegen sich ein kleiner Energiebereich für die Lösung ergibt. Jedoch ist der Anstieg der  $DPSS-k_\sigma$ -Kurven in diesem Bereich sehr steil. Daher streuen die Werte des anscheinenden Symmetriefaktors sehr stark. Zur Bestimmung des anscheinenden Symmetriefaktors wurde ein Mittelwert aus den Werten des Temperaturbereiches zwischen  $383$  und  $473 \text{ K}$  ausgewählt, da der Symmetriefaktor hier nahezu konstant ist.

Dieser Wert von  $0,1$  stimmt sehr gut mit dem von Istratov publizierten Wert von  $0,08$  überein, weswegen die folgende Konzentrationsbestimmung mit Hilfe der von Istratov [IHW99] publizierten Wirkungsquerschnitte durchgeführt wurde. Abbildung 5.4 b zeigt die ermittelten anscheinenden Einfangzeitkonstanten für Majoritäten  $\tau_{p0}^*$  als Funktion der Temperatur. Diese wurden aus den  $DPSS-\tau_{n0}$ -Diagrammen für die aus den  $DPSS-k_\sigma$ -Diagrammen ermittelten Energieniveaus mittels Gleichung 4.28 bestimmt. Für die  $FeB$ -Paare wurde für  $k_\sigma$  der in Abbildung 5.4 a eingezeichnete Mittelwert verwendet, für  $Fe_i$  die Werte der jeweiligen Temperaturen. Es ist deutlich zu erkennen, dass sich die beiden Kurven zueinander ergänzen, da die Maxima der einen Kurve den Minima der anderen Kurve entsprechen. Die Auswertung der Defektkonzentration erfolgte unter Verwendung des Einfangquerschnittes des interstitiellen Eisens für Majoritäten nach Istratov von  $\sigma_p = 7 \times 10^{-17} \text{ cm}^{-3}$  bei  $T = 300 \text{ K}$ . Es wurde ein Modell aufgestellt, nach dem die Summe der Konzentrationen von  $FeB$  und  $Fe_i$  konstant über der Temperatur ist. In diesem Modell wird der Einfangquerschnitt der beiden Spezies über eine exponentielle Temperaturabhängigkeit mit der Variablen  $E_\infty$  simuliert.

$$\sigma_p = \sigma_\infty \cdot \exp\left(-\frac{E_\infty}{k_B T}\right). \quad (5.2)$$

Dabei wurde  $\sigma_\infty$  für  $Fe_i$  so angepasst, dass  $\sigma_p(300 \text{ K})$  immer dem Literaturwert entspricht.  $\sigma_\infty$  für  $FeB$  wurde in diesem Modell als Variable verwendet. Unter Verwendung von Gleichung 4.29 lässt sich die temperaturabhängige Defektkonzentration berechnen.

$$N_t^*(T) = \frac{1}{\tau_{p0}^*(T) \cdot \sigma_p(T) \cdot v_{th,h}(T)}. \quad (5.3)$$

Der nicht Trapping behaftete Symmetriefaktor für  $Fe_i$  ist durch DLTS Messungen bekannt ( $k_\sigma^{corr} = 571$  nach Istratov [IHW99]). Daher kann mittels Gleichung 4.31 der Einfluss des Trappings auf die Einfangzeitkonstante für Majoritäten für  $Fe_i$  korrigiert werden, um einen genaueren Wert für die Defektkonzentration zu erhalten:

$$N_t^{corr}(T) = N_t^*(T) \cdot \left(\frac{v_{th,e}(T) + \frac{1}{k_\sigma^{corr}}}{v_{th,h}(T) + \frac{1}{k_\sigma^*(T)}}\right). \quad (5.4)$$

Diese Korrektur ist für  $FeB$  nicht notwendig, da  $FeB$  die Lebensdauer unter Hochinjektion dominiert. Wie in Abbildung 5.5 a zu sehen, kann das Modell so angepasst werden, dass sich beide temperaturabhängige Konzentrationsverläufe zu einer nahezu konstanten Konzentration ergänzen. Ein ähnlicher Verlauf der temperaturabhängigen Konzentrationen von  $Fe_i$  und  $FeB$  kann in einer Arbeit von Wijaranakula gefunden werden [Wij93]. Die gemittelte gesamte Eisenkonzentration beträgt nach diesem Modell  $(2,32 \pm 0,10) \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ . Außerdem lassen sich mit diesem Modell die Temperaturabhängigkeiten der Einfangquerschnitte beider Spezies bestimmen. Für  $Fe_i$  ergibt sich nach diesem Modell eine Aktivierungsenergie  $E_\infty$  von  $44 \pm 3 \text{ meV}$ , was gut mit den von Istratov und Graff [IHW99, Gra00] publizierten Werten übereinstimmt. Für  $FeB$  ergibt sich ein Wert von  $0,15 \pm 3 \text{ meV}$ , weswegen davon ausgegangen werden kann, dass, wie in der Literatur bekannt, der Einfangquerschnitt von  $FeB$  nicht temperaturabhängig ist. Es sei angemerkt, dass die Annahme einer konstanten Gesamtkonzentration ein Modell ist. Die gute Übereinstimmung mit den Aktivierungsenergien aus den genannten DLTS-Messungen zeigt jedoch, dass das

in dieser Arbeit verwendete Modell die thermischen Abhängigkeiten akkurat wiedergibt. Als Absolutwert für den Einfangquerschnitt von  $FeB$  ergibt sich  $\sigma_{p,FeB} = (1,1 \pm 0,1) \times 10^{-14} \text{ cm}^2$ . Dieser Wert beträgt nur rund ein Drittel des von Istratov publizierten Wertes [IHW99]. Diese Diskrepanz kann einerseits durch zufällige Messfehler entstehen, so wird der relative Fehler für Wirkungsquerschnitte ausgiebig untersuchter Defekte gern mit 30 % abgeschätzt [Gra00]. Andererseits können auch systematische Fehler dafür verantwortlich sein.

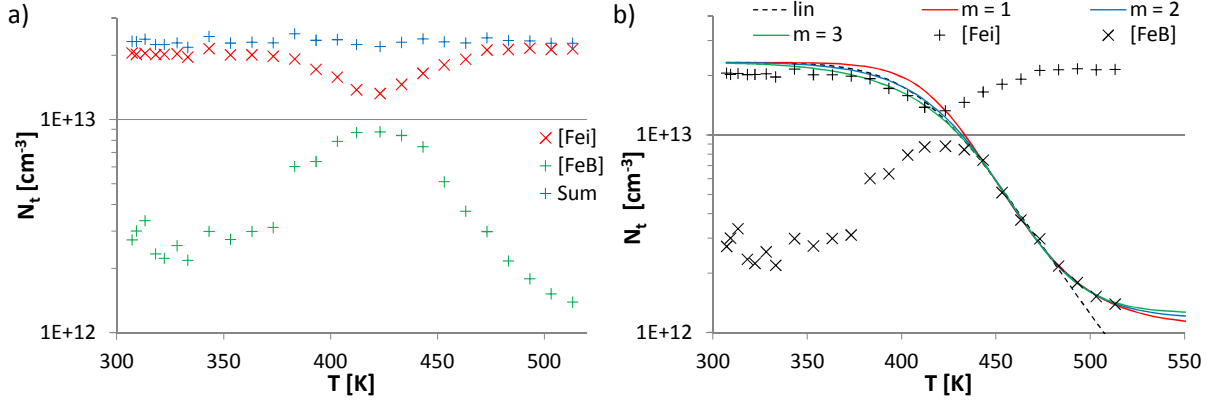


Abb. 5.5: a) Temperaturabhängiger Konzentrationsverlauf der beiden Eisen-Spezies, sowie die berechnete Gesamtkonzentration. b) Thermodynamische Fit-Funktionen des berechneten Konzentrationsverlaufes. Der Konzentrationsabfall von  $FeB$  bei Temperaturen größer 433 K lässt sich mit Gleichgewichtsreaktionen unterschiedlicher Ordnungen anpassen.

Neben  $FeB$  Akzeptoren kann  $Fe_i$  auch in eine schwach rekombinationsaktive Spezies, wie zum Beispiel  $FeB$  Donatoren umgewandelt werden, welche in dem angewandten Injektionsbereich nicht dominant und damit nicht detektierbar wäre. Es ist auch möglich, dass die Annahme des stöchiometrischen Verhältnisses von Eisen zu Bor in den  $FeB$  Paaren nicht 1:1 ist. Eine alternative Reaktionsgleichung könnte wie folgt aussehen:



Hierbei wäre das stöchiometrische Verhältnis der einzelnen Defektconfigurationen  $x$ , welches eine natürliche Zahl darstellt. Für  $x > 1$  ist es daher sinnvoll, von einem  $FeB$  Komplex zu sprechen anstatt von  $FeB$  Paaren. Aufgrund der geringen Mobilität von Bor wurde angenommen, dass  $FeB$  Komplexe durch Diffusion von  $Fe_i$  zu Bor entstehen und daher nur ein Bor-Ion im  $FeB$  Komplex vorhanden ist. Diese Annahme ist mit den verwendeten Methoden nicht falsifizierbar, da das Verhältnis von  $Fe_i$  und  $FeB$  nicht von der Anzahl an Bor Ionen im  $FeB$  Komplex abhängt. Die Konzentration an Eisen ist außerdem zwei Größenordnungen geringer als die Borkonzentration, so dass sich diese bei der Komplexbildung wenig ändert. In Abbildung 5.5 a ist zu erkennen, dass die Konzentration an  $Fe_i$  durch die optische Dissoziation nahezu konstant über den gesamten Temperaturbereich ist. Zusammen mit der thermischen Aktivierung des Einfangquerschnittes erklärt dies den kontinuierlichen Anstieg der Lebensdauer mit steigender Temperatur in Niederinjektion. Die Konzentration an  $FeB$  hingegen ist stark temperaturabhängig und erklärt damit den komplizierten Verlauf der Lebensdauer in Hochinjektion. Es lassen sich drei Bereiche bestimmen. Im Niedertemperaturbereich ist die  $FeB$  Konzentration durch optische Dissoziation erniedrigt. Im Bereich moderater Temperaturen ist die Paarungsgeschwindigkeit von  $FeB$  stark erhöht, wodurch sich in der kurzen Zeit von rund 10 s zwischen Dissoziation und Messung, eine signifikant gestiegene  $FeB$  Konzentration einstellen kann [MRD<sup>+</sup>05]. Dieser Effekt kann auch den temperaturabhängigen Verlauf der TDLS Spektren aus der Arbeit von Rein erklären, wo trotz optischer Dissoziation die Lebensdauer unter Niederinjektion bei moderaten Temperaturen leicht erhöht ist. [Rei05]. Bei moderaten Temperaturen ist die Lebensdauer unter Niederinjektion leicht erhöht, da sich vermehrt  $FeB$  Paare gebildet haben und somit die Konzentration

an  $Fe_i$  leicht reduziert ist. Im Hochtemperaturbereich ist die thermische Dissoziation von  $FeB$  Paaren dominant. Diese lässt sich für ein stöchiometrisches Verhältnis von  $x = 1$  durch einen exponentiellen Abfall der Konzentration an  $FeB$  mit steigender Temperatur mit

$$K_C(T) = K_C^0(T) \cdot \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right) \text{ und} \quad (5.6)$$

$$[Fe_i]_{\text{eq}} = [Fe]_{\text{total}} \cdot \left(1 + (K_C(T))^{-1}\right)^{-1} \text{ beschreiben.} \quad (5.7)$$

Die Gleichgewichtskonzentration an  $FeB$  Komplexen lässt sich wie folgt berechnen:

$$x \cdot [Fe_x B]_{\text{eq}} = [Fe]_{\text{total}} - [Fe_i]_{\text{eq}}. \quad (5.8)$$

Wobei für eine Reaktion erster Ordnung  $x = 1$  ist. Wie zu erkennen, fällt in Abbildung 5.5 b die  $FeB$  Konzentration im Hochtemperaturbereich stark ab. Versucht man den Hochtemperatur-Teil durch eine Gerade anzupassen, so führt dies zu einer geringen Anpassungsgüte. Das Resultat für eine lineare Anpassung dieser Messwerte in einem reduzierten Temperaturbereich ist  $E_{\text{diss}} = 0,68 \pm 0,04 \text{ eV}$ . Dieses Ergebnis entspricht der Bindungsenergie  $E_b$  von Eisen-Bor-Paaren, welche in der Literatur durch verschiedene Autoren zu  $0,55 \pm 0,10 \text{ eV}$  angegeben ist [IHW99]. Bessere Ergebnisse lassen sich erzielen, indem man einen nicht dissoziierbaren Anteil an  $FeB$  Paaren  $[FeB]_c$  annimmt:

$$[Fe_i]_{\text{eq}} = ([Fe]_{\text{total}} - [FeB]_c) \cdot \left(1 + (K_C(T))^{-1}\right)^{-1}. \quad (5.9)$$

Die Ergebnisse dieser Anpassung sind in Abbildung 5.5 b als rote Kurve dargestellt. Die Variablen in diesem Modell sind  $[FeB]_c$ ,  $E$  und  $K_C^0$ . Interessanterweise lässt sich der Konzentrationsabfall an  $FeB$  bei hohen Temperaturen auch durch höhere Ordnungen beschreiben. Für den Fall einer zweiten Ordnung ergibt sich:

$$[Fe_i]_{\text{eq}} = \frac{\left[(K_C(T))^2 + 8K_C(T) ([Fe]_{\text{total}} - x \cdot [Fe_2 B]_c)\right]^{1/2} - K_C(T)}{4}. \quad (5.10)$$

Die Anpassungsergebnisse für eine Reaktion zweiter Ordnung sind in Abbildung 5.5 b als blaue Kurve dargestellt. Für den Fall einer dritten Ordnung ergibt sich:

$$[Fe_i]_{\text{eq}} = \left[ \frac{K_C(T)}{54} \left( \sqrt{4K_C(T) + (9([Fe]_{\text{total}} - x \cdot [Fe_3 B]_c))^2 + 9([Fe]_{\text{total}} - x \cdot [Fe_3 B]_c)} \right) \right]^{\frac{1}{3}} \quad (5.11)$$

$$- \frac{K_C(T)}{9} \left[ \frac{K_C(T)}{54} \left( \sqrt{4K_C(T) + (9([Fe]_{\text{total}} - x \cdot [Fe_3 B]_c))^2 + 9([Fe]_{\text{total}} - x \cdot [Fe_3 B]_c)} \right) \right]^{-\frac{1}{3}}.$$

Die Anpassungsergebnisse für eine Reaktion dritter Ordnung sind in Abbildung 5.5 b als grüne Kurve dargestellt. Interessanter Weise ist die Anpassungsgüte unabhängig von der Ordnung der chemischen Reaktion. Tabelle 5.3 fasst die Ergebnisse der unterschiedlichen Modelle zusammen. Und es ist zu erkennen, dass der nicht dissoziierbare  $FeB$  Anteil, sowie die  $FeB$  Gleichgewichtskonzentration bei Raumtemperatur nahezu nicht von der Reaktionskinetik abhängen. Die thermodynamische Auswertung der Defektreaktion konnte somit keinen Aufschluss über die Stöchiometrie der  $FeB$  Donatoren geben. Obwohl die Energie nach dem ersten Modell sehr gut der experimentell bestimmten Bindungsenergie der  $FeB$ -Paare entspricht, so ist die Anpassungsgüte eher gering. Interessant ist, dass die Dissoziationsenergie laut Istratov [IHW99] bisher nur durch Feichtinger [Fei79] zu  $E_{\text{diss}} = 1,18 \pm 0,02 \text{ eV}$  bestimmt wurde. Dies stimmt gut mit den Ergebnissen der dritten Ordnung von  $E_{\text{diss}} = 1,24 \pm 0,04 \text{ eV}$  überein. Eine vollständige Dis-

m	$E_{\text{diss}}$ [meV]	$K_{\text{C}}^0$	$[K_{\text{C}}^0]$	$x \cdot [Fe_xB]_{\text{c}}$ [cm <sup>-3</sup> ]	$x \cdot \frac{[Fe_xB]_{\text{c}}}{[Fe]_{\text{tot}}}$ [%]	$x \cdot \frac{[Fe_xB]_{\text{eq}}}{[Fe]_{\text{tot}}}$ [%] (@ RT)
1	$0,68 \pm 0,04$	$1,72 \times 10^8$	[ ]	0	0	99,96
1	$0,92 \pm 0,04$	$7,20 \times 10^{10}$	[ ]	$(1,06 \pm 0,24) \times 10^{12}$	$4,56 \pm 1,03$	99,99
2	$1,09 \pm 0,04$	$1,87 \times 10^{26}$	cm <sup>-3</sup>	$(1,17 \pm 0,24) \times 10^{12}$	$5,01 \pm 1,03$	99,85
3	$1,24 \pm 0,04$	$3,13 \times 10^{41}$	cm <sup>-6</sup>	$(1,24 \pm 0,24) \times 10^{12}$	$5,33 \pm 1,03$	99,41

Tab. 5.3: Fitergebnisse unterschiedlicher Modelle für die thermische Dissoziation von FeB Akzeptoren

soziation von *FeB* Akzeptoren ist nach diesem Modell folglich weder optisch noch thermisch möglich. Dies erklärt auch, warum es selbst bei Dissoziation mit intensiven Lichtpulsen und einer anschließenden Auger-Korrektur der injektionsabhängigen Lebensdauerkurve immer noch einen Injektionsbereich mit negativem Anstieg der Lebensdauer geben kann. Obwohl bei vollständiger Dissoziation von FeB bei moderaten Dotierstoffkonzentrationen die Auger-korrigierte Lebensdauer in Hochinjektion gegen einen oberen Grenzwert konvergieren sollte.

Um die Ergebnisse zu überprüfen, wurde die Probe für DLTS Messungen vorbereitet. Die Messungen wurden an der TU Dresden durchgeführt. Es wurde die Konzentration an *FeB* Donatoren gemessen, da eine Dissoziation von *FeB* Paaren, aufgrund der geringen Diffusionsgeschwindigkeit des interstitiellen Eisens, bei tiefen Temperaturen erschwert ist.

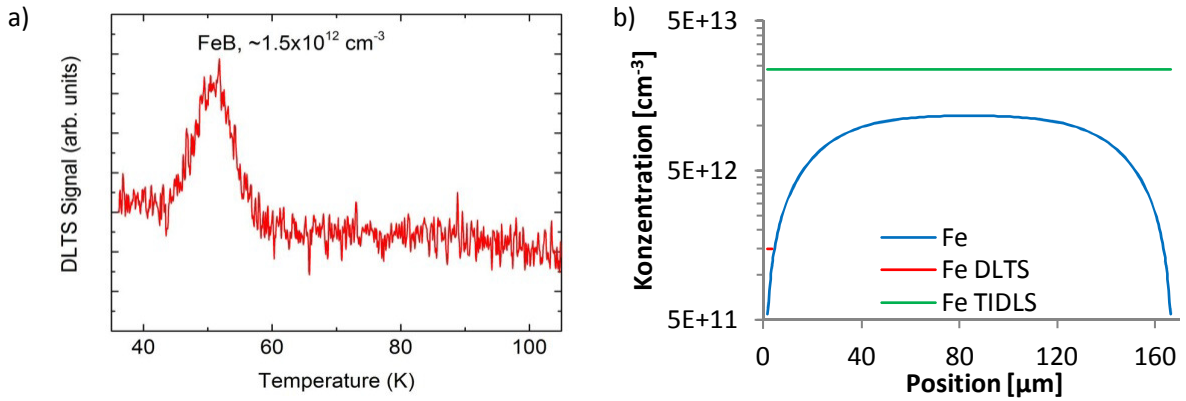


Abb. 5.6: a) DLTS Signal als Funktion der Temperatur. Der Peak bei rund 50 K konnte als *FeB* Donatoren identifiziert werden, mit einer Konzentration von  $[FeB] = 1,5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ . b) simulierter Konzentrationsverlauf über die Waferdicke (blau), sowie ermittelte Konzentrationen nach T-IDLS (grün) und DLTS (schwarz).

Abbildung 5.6 a zeigt das DLTS Spektrum für die mit Eisen kontaminierte Probe. Die Linie bei 50 K identifiziert die *FeB*-Donatoren eindeutig. Die durch DLTS ermittelte Defektkonzentration liegt bei  $[FeB] = 1,5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ . Dieser Wert ist ein Sechzehntel der mittels T-IDLS bestimmten Defektkonzentration. Dies ist zu erwarten, da die DLTS eine oberflächensensitive Methode ist. Für diese Probe lag die Breite der Raumladungszone (und damit die Eindringtiefe) bei etwa 2-3  $\mu\text{m}$ . Die Konzentrationsbestimmung mittels Photoleitfähigkeit hingegen entspricht einem Mittelwert über die gesamte Probendicke. Vergleicht man beide Werte mit den Simulationsrechnungen für die Diffusion von Eisen aus Kapitel 2 in Abbildung 5.6 b so stellt man fest, dass sowohl T-IDLS als auch DLTS den doppelten Betrag der simulierten Defektkonzentration aufweisen. Das Verhältnis von oberflächennaher Konzentration und Volumenkonzentration der Simulation ist jedoch identisch mit dem Verhältnis der Defektkonzentrationen aus den DLTS und T-IDLS Messungen. Dies zeigt, dass es mittels T-IDLS Messungen möglich ist die Defektkonzentration kontaminierter Proben präzise zu bestimmen. Außerdem zeigt es, dass der verwendete Einfangquerschnitt für  $Fe_i$  sehr gut zu den Messergebnissen passt. Andererseits bedeutet die

höhere gemessene Defektkonzentration, dass die verwendete Löslichkeit für die Simulation der Diffusion etwas zu niedrig angenommen wurde.

### 5.2.2. Dissoziations-Spektrum der mit Eisen kontaminierten p-Typ Silicium Probe mit Siliciumnitrid Passivierung

Die Ergebnisse aus den T-IDLS Spektren lassen sich auf die Identifikation und Quantifizierung von Eisen durch Dissoziation von  $FeB$  Akzeptoren (bzw. für die folgende Analyse besser geeignet  $Fe_xB$ ) bei Raumtemperatur übertragen. Dazu wurde die Probe (vor der DLTS Präparation) am WCT 120 vermessen. Die Probe wurde eine Woche im Dunkeln gelagert, um vollständige Assoziation der  $Fe_xB$  Akzeptoren zu gewährleisten. In diesem Zustand wurde die Injektionsabhängige Lebensdauer (IDLS) der Probe bei einer Temperatur von  $300\text{ K}$  gemessen und anschließend mittels einer Hochleistungs-Blitzlichtlampe optisch dissoziiert. Die Probe wurde dann direkt nach Dissoziation und in kontinuierlich steigenden Zeitintervallen vermessen. Daraus ergibt sich ein Dissoziationsspektrum, welches in Abbildung 5.7 a dargestellt ist.

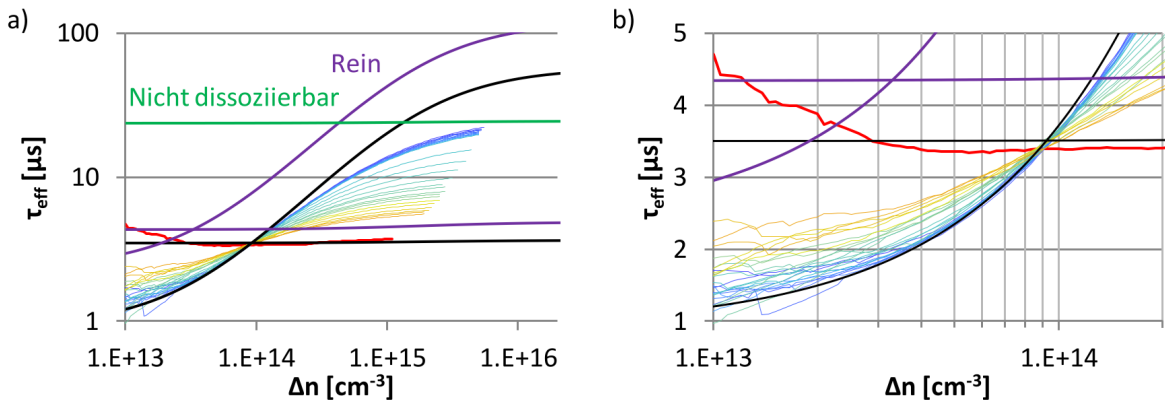


Abb. 5.7: a) Dissoziationsspektrum für die gezielt Eisen kontaminierte Probe. Die rote Kurve entspricht dem assoziierten Zustand. Die dunkelblauen Kurven entsprechen nahezu vollständiger Dissoziation. Mit der Zeit bilden sich  $Fe_xB$  Akzeptoren neu, wodurch sich die Lebensdauerkurven wieder der roten Kurve annähern. Die schwarzen Kurven beschreiben das in dieser Arbeit verwendete Modell zur Auswertung der Spektren. Die grüne Kurve beschreibt die Lebensdauer der nicht dissoziierten  $Fe_xB$  Akzeptoren. Die violetten Kurven beschreiben das Modell von Rein [Rei05]. b) Detailansicht des Dissoziationsspektrums. Der Schnittpunkt der IDLS Kurven bei  $\Delta n = 9 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$  wird vom verwendeten Modell sehr gut beschrieben.

Wie in Abbildung 5.7 a zu sehen liegen alle IDLS-Kurven des Dissoziationsspektrums innerhalb der Grenzen des verwendeten Modells. Die schwarzen Kurven stellen dabei die Grenzwerte für vollständige Assoziation und Dissoziation dar. Die grüne Kurve beschreibt die Lebensdauer nicht dissoziierter  $Fe_xB$  Akzeptoren. Die rote Kurve beschreibt die gemessene IDLS-Kurve nach einer Woche Assoziation. Abbildung 5.7 b zeigt eine Detailansicht des Dissoziationsspektrums. Der Schnittpunkt bei einer Injektionsdichte von  $\Delta n = 9 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$  wird sehr gut wiedergegeben.

Ebenfalls dargestellt sind die Ergebnisse nach dem Modell von Rein [Rei05] (violette Kurven). Bei dem Modell nach Rein wird eine geringfügig andere Parametrisierung der Defekte verwendet. Außerdem wird der Einfluss der thermischen effektiven Massen nicht berücksichtigt und es wird angenommen, dass alle  $Fe_xB$  Akzeptoren initial dissoziiert wurden. Die  $Fe_i$  Konzentration lässt sich bei dieser Methode nach MacDonald [MGA04] über die Differenz der inversen Lebensdauer zwischen dissoziierten und assoziierten Zustand berechnen:

$$[Fe_i](t) = C(\Delta n) (\tau_{\text{diss}}^{-1}(\Delta n, t) - \tau_{\text{ass}}^{-1}(\Delta n, t)) . \quad (5.12)$$

Die Konstante  $C(\Delta n)$  ergibt sich hierbei aus der Parametrisierung der SRH-Gleichung 4.1 für die Grenzfälle von vollständiger Dissoziation (nur  $Fe_i$ ) bzw. vollständiger Assoziation (nur  $Fe_xB$ ).



Die Konzentration an  $Fe_i$  ist damit eine Funktion der Zeit. Für die Simulation wurde der Wirkungsquerschnitt, der durch die T-IDLS Spektren zu  $\sigma_p(Fe_xB) = 1,1 \times 10^{-14} \text{ cm}^{-3}$  bestimmt wurde, verwendet. Die aktuelle  $Fe_xB$  Konzentration ergibt sich aus der Differenz zwischen aktueller  $Fe_i$  Konzentration  $[Fe_i](t)$  und maximaler  $Fe_i$  Konzentration  $[Fe_i]_{\max}$  dividiert durch das stöchiometrische Verhältnis  $x$ . Wie bei den temperaturabhängigen Messungen ist es möglich, dass die  $Fe_xB$  Akzeptoren unvollständig dissoziiert wurden. Berücksichtigt man diesen Konzentrationsanteil  $[Fe_xB]_c$  so ergibt sich folgende Gleichung:

$$[Fe_xB](t) = [Fe_xB]_c + \frac{1}{x} ([Fe_i]_{\max} - [Fe_i](t)) . \quad (5.13)$$

Die Paarung von  $Fe_i$  und  $B$  zu  $Fe_xB$  (Assoziation) ist eine chemische Reaktion, deren Ordnung als unbekannt angenommen wird:



Wie in 2.8.1 erläutert kann die Reaktion in Teilschritten ablaufen, wodurch nur die Analyse des geschwindigkeitsbestimmenden Schrittes möglich ist [AP09]. Da nur rekombinationsaktive Defektkonfigurationen mittels Lebensdauerspektroskopie analysierbar sind, ist die Defektkonzentration des möglichen Zwischenschrittes unbekannt. Wie bereits beschrieben, ist die Konzentrations-Zeit-Funktion abhängig von der Ordnung  $m$  der Hinreaktion bezüglich  $[Fe_i]$ . Die Ordnung dieser chemischen Reaktion bezüglich der Bor Konzentration (und damit auch die Stöchiometrie von  $B$  bezüglich  $Fe_xB$ ) ist in diesem Experiment vernachlässigbar, da die Borkonzentration in der untersuchten Probe rund 100 mal größer ist als die Eisenkonzentration und sich damit im Verlauf der chemischen Reaktion nahezu nicht ändert. Da es sich, wie bereits bei den T-IDLS-Spektren gezeigt wurde, um eine Gleichgewichtsreaktion handelt, müssen sowohl die Kinetik der Assoziation als auch der Dissoziation berücksichtigt werden.

Unter der Annahme, dass die Rückreaktion (thermische Dissoziation) eine Reaktion erster Ordnung ist, kann diese wie folgt beschrieben werden:

$$[Fe_xB](t) = [Fe_xB]_c + [Fe_xB]_{\text{diss}}(t_0) \cdot \exp(-k_{\text{diss}}(t - t_0)) , \quad (5.15)$$

hierbei ist  $[Fe_xB]_{\text{diss}}$  die Konzentration an dissoziierbarem  $Fe_xB$ . Dies ist konsistent zu einer Arbeit von Zhu et. al., welche die Dissoziationskinetik von FeB Paaren unter starker Bestrahlung mit Licht untersucht hatten [ZYY<sup>+</sup>13]. Dabei wurde eine Reaktionsordnung von 1 für Dissoziation festgestellt. Die Nettoassoziationsrate von  $Fe_i$  ist damit, wie in 2.8.1 beschrieben, eine Funktion der Konzentrationen beider Spezies. Der zeitliche Verlauf der Konzentration an  $Fe_i$  lässt sich durch Kombinationen von Gleichung 2.68 bis 2.70 mit Gleichung 5.15 berechnen. Während die  $Fe_xB$  Konzentration sich als Funktion der Zeit mittels Gleichung 5.13 berechnen lässt. Tabelle 5.4 fasst die Kinetik der interstitiellen Eisenkonzentration für Reaktionen unterschiedlicher Ordnungen zusammen. Die Reaktionskonstanten  $k_{\text{ass}}$  und  $k_{\text{diss}}$  beschreiben dabei die Wahrscheinlichkeiten der Teilreaktionen bei einer gegebenen Konzentration. Ihre Einheiten sind dabei vom Reaktionstyp abhängig.

m	$[Fe_i](t) =$
1	$[Fe_i](t_0) \cdot \exp(-k_{\text{ass}}(t - t_0)) + x \cdot [Fe_xB](t_0) \cdot (1 - \exp(-k_{\text{diss}}(t - t_0)))$
2	$\left( \frac{1}{[Fe_i](t_0)} - k_{\text{ass}}(t - t_0) \right)^{-1} + x \cdot [Fe_xB](t_0) \cdot (1 - \exp(-k_{\text{diss}}(t - t_0)))$
3	$\left( \frac{1}{([Fe_i](t_0))^2} - 2 \cdot k_{\text{ass}}(t - t_0) \right)^{-\frac{1}{2}} + x \cdot [Fe_xB](t_0) \cdot (1 - \exp(-k_{\text{diss}}(t - t_0)))$

Tab. 5.4: Interstitielle Eisenkonzentration als Funktion der Zeit für chemische Reaktionen unterschiedlicher Ordnungen

Bei Kenntnis der Defektparameter lässt sich der zeitliche Verlauf der Lebensdauer durch die SRH-Gleichung 4.1 simulieren. Da die Messung des Dissoziationsspektrums mittels QSS-PC durch Trapping beeinflusst wird, wurde für  $Fe_i$  der anscheinende Symmetriefaktor für Raumtemperatur von  $k_\sigma^* = 51$  verwendet, wie er auch mit den anderen Defektparametern in Tabelle 5.2 dargestellt ist. Die Simulation wurde für eine Injektionsdichte von  $\Delta n = 10^{15} \text{cm}^{-3}$  durchgeführt. Fitparameter sind dabei  $k_{\text{ass}}$ ,  $k_{\text{diss}}$  und  $[Fe_xB]_c$ . Der Anteil an in nicht dissoziierbarem  $Fe_xB$  gebundenen Eisenatomen beträgt nach diesem Modell etwa 15% und entspricht damit in guter Näherung dem nicht dissoziierbaren Eisen-Bor Anteil im Niedertemperaturbereich der T-IDLS Messungen. Je nach Stöchiometrie ( $n = 1, 2, 3$ ) ergibt sich dadurch die Konzentration an nicht dissoziiertem Eisen-Bor  $[Fe_xB]_c$ . Durch  $x \times [Fe_xB]_c + [Fe_i]_{\text{max}}$  ergibt sich die Eisen Gesamtkonzentration  $[Fe]_{\text{total}}$ . Tabelle 5.5 fasst die Simulationsergebnisse zusammen.

m	$k_{\text{ass}}$	$[k_{\text{ass}}]$	$k_{\text{diss}}$	$[k_{\text{diss}}]$	$x \times [Fe_xB]_c$ [%]	$[Fe]_{\text{total}}$ [ $\text{cm}^{-3}$ ]
1	$1,98 \times 10^{-4}$	$\text{s}^{-1}$	$2,16 \times 10^{-9}$	$\text{s}^{-1}$	15,74	$1,52 \times 10^{13}$
2	$3,27 \times 10^{-6}$	$\text{cm}^3 \text{s}^{-1}$	$2,16 \times 10^{-9}$	$\text{s}^{-1}$	15,22	$1,51 \times 10^{13}$
3	$5,21 \times 10^{-8}$	$\text{cm}^6 \text{s}^{-1}$	$2,16 \times 10^{-9}$	$\text{s}^{-1}$	14,79	$1,51 \times 10^{13}$

Tab. 5.5: Simulationsergebnisse für den zeitabhängigen Konzentrationsverlauf

Aus der Tabelle 5.5 ist zu entnehmen, dass sowohl die Gesamtkonzentration an Eisen  $[Fe]_{\text{total}}$ , als auch die Konzentration von in nicht dissoziiertem  $Fe_xB$  gebundenem Eisen  $x \times [Fe_xB]_c$  nahezu unabhängig von der zugrunde liegenden Reaktionskinetik sind. Auch die Reaktionskonstante für die Rückreaktion erster Ordnung bleibt konstant bei  $k_{\text{diss}} = 2,16 \times 10^{-9} \text{s}^{-1}$ . Abbildung 5.8 zeigt den zeitlichen Verlauf der gemessenen Lebensdauer sowie die der Simulationsergebnisse. Durch die Simulation der Rückreaktion kann für alle Reaktionskinetiken der Hinreaktion eine gute Übereinstimmung mit der gemessenen Lebensdauer erreicht werden.

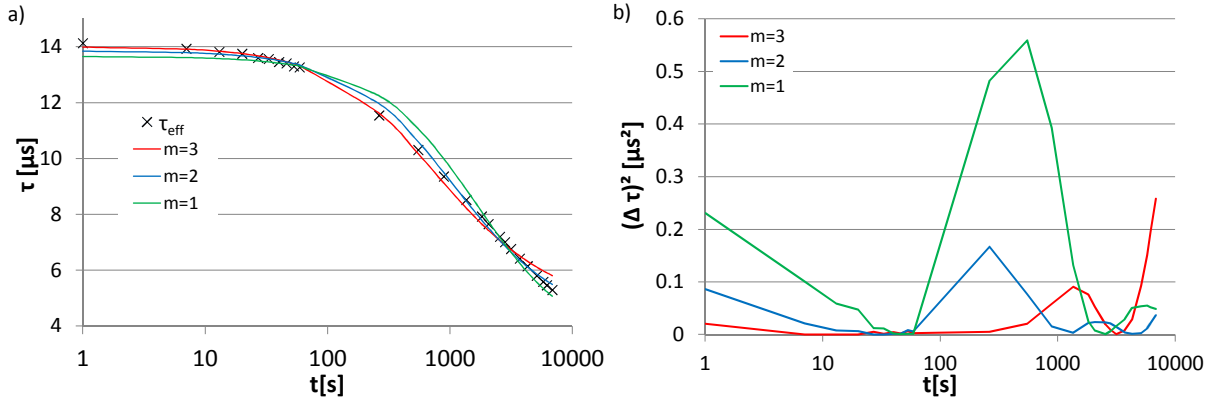


Abb. 5.8: a) zeitlicher Verlauf der Lebensdauer für ein Injektionsniveau von  $\Delta n = 10^{15} \text{cm}^{-3}$  sowie Simulationsergebnisse für unterschiedliche Reaktionsordnungen b) Fehlerquadrate zwischen gemessenen und simulierten Lebensdauern als Funktion der Zeit. Für Zeiten kleiner 100 Sekunden lässt sich die Kinetik der Paarung von  $Fe_xB$  durch eine dritte Ordnung beschreiben. Für größere Zeiten geht die Kinetik in niedrigere Ordnungen über.

In Abbildung 5.8 b) sind deswegen die Fehlerquadrate zwischen effektiver und simulierter Lebensdauer dargestellt. Ein geringerer Wert der Fehlerquadrate bedeutet eine bessere Übereinstimmung zwischen Messung und Simulation. Es zeigt sich, dass die Reaktionskinetik für Zeiten zwischen 1 und 100s nach Dissoziation am besten durch eine Reaktion dritter Ordnung beschrieben wird. Dies ist konsistent mit einer Arbeit von Lauer et. al., welche ebenfalls für kurze Zeiten nach Dissoziation eine im Vergleich zur ersten Ordnung beschleunigte Reaktionskinetik festgestellt hatten [LMD<sup>+</sup>15]. Für größere Zeiten ( $t > 1000 \text{s}$ ), also kleineren Konzentrationen an  $Fe_i$ , lässt sich die Kinetik am besten durch eine Reaktion zweiter Ordnung beschreiben. Dies ist

plausibel, wenn sowohl die direkte Reaktion, als auch die Reaktion über einen Zwischenschritt parallel ablaufen können. Da die Wahrscheinlichkeit für einen Drei-Teilchen-Stoß in der dritten Potenz von der Konzentration der Reaktanden abhängt, würde dann die Reaktion der dritten Ordnung mit fortschreitender Assoziation immer unwahrscheinlicher. Dadurch ginge die Reaktionskinetik in eine zweite Ordnung über. Für extrem große Zeiten ( $t > 10000$  s) nach Dissoziation ist deswegen zu erwarten, dass die Reaktionskinetik in eine erste Ordnung übergeht. Da für die Reaktionsordnung  $m$  und das stöchiometrische Verhältnis  $x$  immer  $m \leq x$  gilt, sollte das stöchiometrische Verhältnis  $x$  in  $Fe_xB_y$  mindestens drei sein. Dies stimmt gut mit dem stöchiometrischen Verhältnis, welches über die Auswertung der T-IDLS Spektren zu 3 ermittelt wurde überein. Dies ist ein weiteres Indiz dafür, dass es sich bei  $FeB$  Akzeptoren um ein  $Fe_xB$  Komplex handelt. Mithilfe der Gleichungen 4.12 und 4.13 lassen sich die zeitlichen Konzentrationsverläufe der beiden Spezies berechnen. Die aus dem Dissoziationsspektrum berechneten Konzentrationen sind für  $x = 1$  in Abbildung 5.9 dargestellt. Ebenfalls eingezeichnet sind die Modelle von MacDonald et. al. [MRD<sup>+</sup>05] (durchgezogene schwarze Linie) und Lauer et. al. [LMD<sup>+</sup>15] (gestrichelte schwarze Linie).

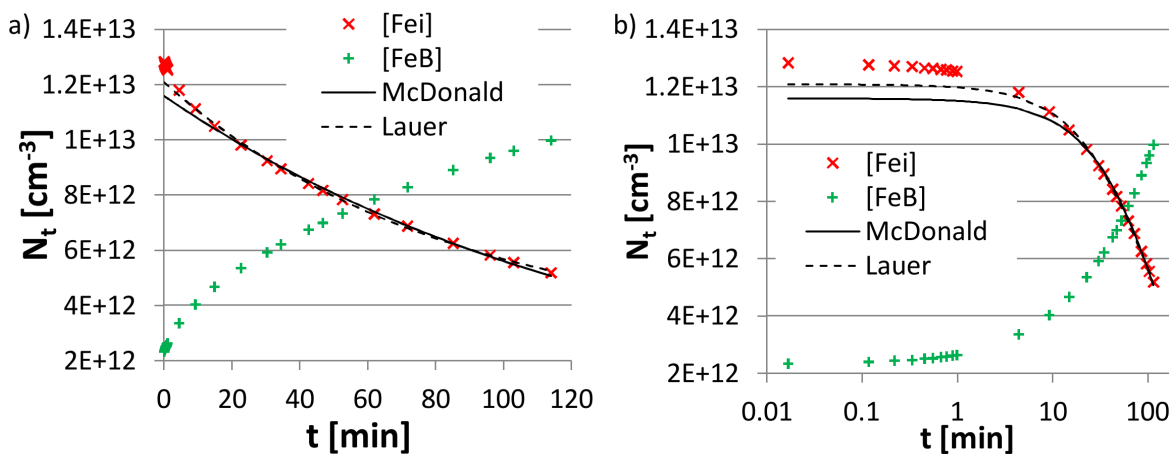


Abb. 5.9: a) Zeitlicher Konzentrationsverlauf der beiden Defektkonfigurationen. Die durchgezogene Linie entspricht dem Modell von MacDonald et. al. und die gestrichelte Linie dem Modell von Lauer et. al., welche Reaktionskinetiken erster Ordnung beschreiben. Für kurze Zeiten ist die Defektkonzentration höher, als es eine Reaktionskinetik erster Ordnung erwarten lässt. b) Zeitlicher Konzentrationsverlauf der beiden Defektkonfigurationen in doppeltlogarithmischer Darstellung. Eine Kinetik der Ordnung  $n=3$  kann den Verlauf für kurze Zeiten sehr gut beschreiben. Für lange Zeiten nach Dissoziation lässt sich der Verlauf am besten durch das Modell von Lauer beschreiben.

Beide Modelle beschreiben eine Reaktionskinetik erster Ordnung. Das Modell von MacDonald et. al. geht von einer im Vergleich zur ionisierten Dotierstoffkonzentration geringen Eisenkonzentration aus. Für diesen Fall wird in diesem Modell die Assoziation über eine strikte exponentielle Funktion von der Zeit beschreiben:

$$\frac{Fe_i(t)}{Fe_{total}} = \exp\left(-\frac{t}{\tau_{assoc}}\right). \quad (5.16)$$

Interessanterweise lässt sich die charakteristische Zeitkonstante  $\tau_{assoc}$  für das exponentielle Abklingen der interstitiellen Eisenkonzentration nach Reiss et. al. [RFM56] unter anderem durch wesentliche Materialeigenschaften des Siliziums beschreiben:

$$\tau_{assoc} = \frac{\varepsilon_r \varepsilon_0 k_B T}{4\pi q^2 D_0 N_A} \times \left(\frac{H_M}{k_B T}\right), \quad (5.17)$$

hierbei sind  $\varepsilon_0$  die Permittivität des Vakuums,  $\varepsilon_r$  die relative Dielektrizitätskonstante des Siliziums,  $k_B$  die Boltzmann-Konstante,  $T$  die Temperatur,  $q$  die Elementarladung,  $D_0$  der Grenzwert

der Diffusionskonstante des interstitiellen Eisens für unendlich hohe Temperaturen,  $N_A$  die Dotierstoffkonzentration und  $H_M$  die für die Diffusion notwendige Enthalpie.

Das Modell von Lauer et. al. [LMD<sup>+</sup>15] beschreibt die Assoziation von  $Fe_i$  zu  $FeB$  durch Ratengleichungen für die Assoziation und Dissoziation:

$$\frac{Fe_i(t)}{Fe_{total}} = \frac{\{R_D + R_A \times \exp((R_A + R_D) \times t)\}}{R_A + R_D}. \quad (5.18)$$

Dieses Modell geht ebenfalls davon aus, dass für eine exakte Beschreibung der Dissoziationskinetik sowohl die Dissoziationsrate  $R_D$ , als auch die Assoziationsrate  $R_A$  berücksichtigt werden muss, da es sich um eine Gleichgewichtsreaktion handelt. Dieses Modell ist rein empirischer Natur und kann an einen gemessenen zeitlichen Konzentrationsverlauf angepasst werden. Es zeigt sich in Abbildung 5.9 a, dass für beide Modelle die Konzentrationsverläufe für große Zeiten nach Dissoziation akkurat wiedergegeben werden. In Abbildung 5.9 b ist die Zeitachse logarithmisch dargestellt, sodass sich die Konzentrationsverläufe für kurze Zeiten besser darstellen lassen. Es zeigt sich dadurch, dass beide Modelle die  $Fe_i$ -Konzentration bei kurzen Zeiten nach Dissoziation unterschätzen, wobei das Modell von Lauer eine bessere Übereinstimmung ergibt, da es auch die den Dissoziationsanteil bei dieser Gleichgewichtsreaktion berücksichtigt. In der Arbeit von Lauer et. al. kann aus den Diagrammen ebenfalls entnommen werden, dass der Konzentrationsverlauf für kurze Zeiten durch deren Modell nicht akkurat wiedergegeben wird. Dies könnte daran liegen, dass sich während der Assoziation die Reaktionsordnung ändert. Ebenfalls ist das Ergebnis dieser Arbeit für eine Reaktion dritter Ordnung eingezeichnet. Wie zu erkennen, wird der Konzentrationsverlauf für kurze Zeiten akkurat wiedergegeben. Warum die Modelle für kurze oder lange Zeiten nicht akkurat an die Messwerte angepasst werden konnte ist damit nicht abschließend geklärt.

### 5.2.3. T-IDLS Spektrum der mit Eisen kontaminierten n-Typ Silicium Probe mit Siliciumnitrid Passivierung

Die Lebensdauermessungen bei verschiedenen Temperaturen an der mit Eisen kontaminierten n-Typ-Probe wurde nach der Nitridbeschichtung mit dem WCT 120 bis zu einer Temperatur von 413 K durchgeführt. Da in n-Typ Material keine dissoziierbaren Spezies von Eisen bekannt sind, wurde auf eine optische Dissoziation verzichtet. Es wurden wiederum 10 Messungen für jede Temperatur durchgeführt und die Ergebnisse gemittelt.

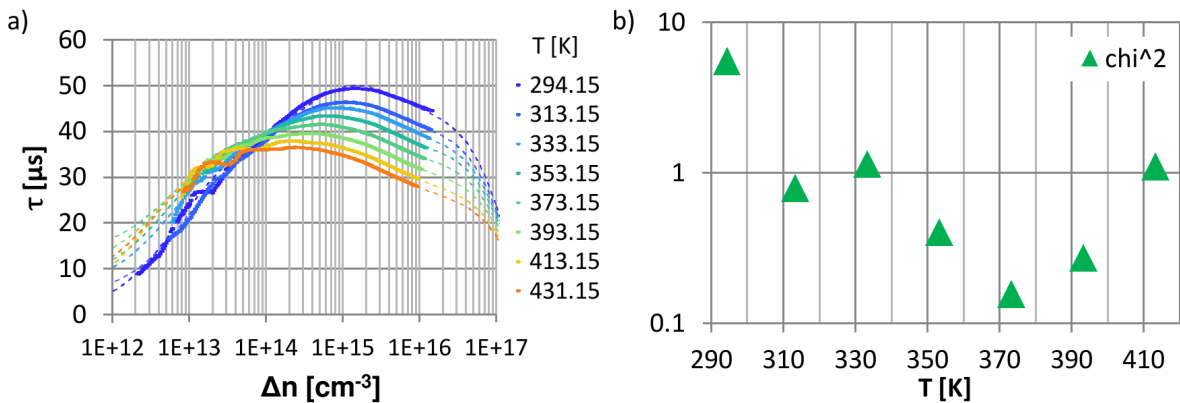


Abb. 5.10: a): T-IDLS-Spektrum der mit Eisen kontaminierten n-Typ Probe. Die Messwerte sind als Punkte, die Simulationsergebnisse als gestrichelte Linien dargestellt, während die Temperatur über die Farbe codiert ist. Der Abfall der Lebensdauer mit der Temperatur in Hochinjektion ist ungewöhnlich. Der steile Anstieg in Niederinjektion deutet auf einen stark asymmetrischen Defekt hin, weswegen eine 3 Defekt-Anpassung durchgeführt wurde. b) Anpassungsgüte  $\chi^2$  als Funktion der Temperatur.

Die einzelnen Temperaturschritte wurden am WCT 120 gezielt angefahren und gewartet, bis

die Regelung der beiden Heizer die gewünschte Temperatur auf  $\pm 0.5 K$  konstant hielten. Durch die geringe Leistung der Heizer wird das laterale Temperaturprofil über den Wafer kaum beeinflusst. Jedoch sind deswegen nur Messungen bei geringeren Temperaturen möglich. Es wurden Photoleitfähigkeitsmessungen von  $413 K$  bis  $293 K$  in Schritten von  $20 K$  durchgeführt. Das daraus berechnete T-IDLS-Spektrum ist in Abbildung 5.10 a zu sehen. Aufgrund des steilen Anstieges der Lebensdauer in Niederinjektion wurde eine 3-Defekt-Anpassung mit einem tiefen, einem flachen und einem asymmetrischen Defekt, durchgeführt. Abbildung 5.10 b zeigt die Anpassungsgüte  $\chi^2$  für die einzelnen Temperaturen. Man erkennt, dass die Anpassungsgüte geringer als bei der p-Typ Probe ist. Grund hierfür ist ein erhöhter Injektionsbereich, sowie starkes Rauschen in Niederinjektion. Dadurch ist es schwierig den Bereich anzupassen, in dem sowohl asymmetrischer als auch tiefer Defekt dominant sind. Mit steigender Temperatur wird die Anpassungsgüte besser, da der Einfluss des asymmetrischen Defektes, wie zu erwarten, schwächer wird. Interessanterweise tritt bei der n-Typ Probe kein negativer Anstieg der Lebensdauer unter Niederinjektion auf. Es wurde angenommen, dass nahezu alle durch Trapping in das Band abgegebenen Minoritätsladungsträger instantan von den stark rekombinationsaktiven asymmetrischen Defekten eingefangen werden. Möglich ist auch die Ausbildung einer Inversionsschicht durch ein entsprechendes elektrisches Feld an der Oberfläche. Da die Prozesse der Abgabe von Ladungsträgern durch Trapping und das Einfangen durch asymmetrische Defekte miteinander konkurrieren, ist ein vermehrtes Rauschen unter Niederinjektion zu erwarten.

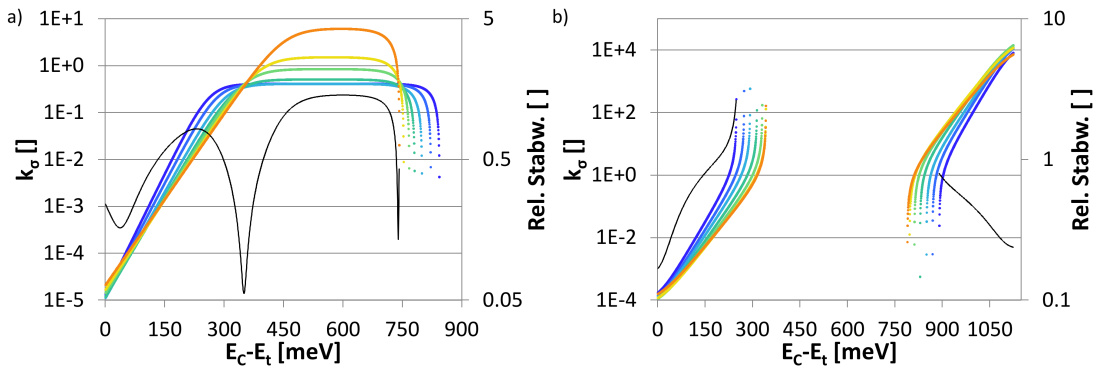


Abb. 5.11: a)  $DPSS - k_\sigma$ -Diagramm des tiefen Defektes mit zwei äquivalenten Lösungen bei  $E_C - E_t = 350 \pm 10 meV$  und  $E_t - E_V = 385 \pm 2 meV$ . Eine Trapping-Korrektur wurde aufgrund des steilen Abfalls der Lebensdauer in Niederinjektion nicht angewandt. Das zweite Niveau entspricht sehr gut dem Niveau von  $Fe_i$ . b)  $DPSS - k_\sigma$ -Diagramm des flachen Defekts ohne eindeutige Lösungen.

Es wurden wieder  $DPSS - k_\sigma$ -Diagramme aus den Anpassungsergebnissen erstellt. Diese sind in Abbildung 5.11 a für den tiefen Defekt und in Abbildung 5.11 b für den flachen Defekt dargestellt. Es zeigt sich, dass aufgrund der geringen Variation der Temperatur zwei äquivalente Lösungen vorhanden sind. Die erste liegt bei  $E_C - E_t = 350 \pm 10 meV$  und die zweite bei  $E_t - E_V = 385 \pm 2 meV$ , welche den tiefen Defekt eindeutig als  $Fe_i$  charakterisiert. Für den flachen Defekt ergibt sich keine sinnvolle Lösung. Interessanterweise sinkt die Lebensdauer in Hochinjektion mit steigender Temperatur. Die mit Eisen kontaminierte n-Typ Probe war die einzige in dieser Arbeit, welche dieses Verhalten zeigte. Da sich jedoch keine sinnvollen Lösungen im  $DPSS - k_\sigma$ -Diagramm des flachen Defektes ergeben, kann dieses Verhalten nicht ausgewertet werden. Das  $DPSS - k_\sigma$ -Diagramm für den asymmetrischen Defekt ist in 5.12a dargestellt. Wie zu erkennen, ergibt sich kein Schnittpunkt, was daran liegen könnte, dass der Injektionsbereich in Niederinjektion nicht ausreichend für eine eindeutige Identifikation war (siehe Anhang G). Abbildung 5.12b zeigt den Temperaturverlauf der Symmetriefaktoren für beide Lösungen des tiefen Defektes. Interessanterweise liegt der anscheinende Symmetriefaktor für das Energieniveau von  $Fe_i$  bei einem extrem niedrigen Wert von  $k_\sigma = 0,4 \pm 0,16$ . Da der asymmetrische Defekt das Trapping kompensiert, ist der Wert des Symmetriefaktors für  $Fe_i$  nur schwach durch Trapping

beeinflusst.

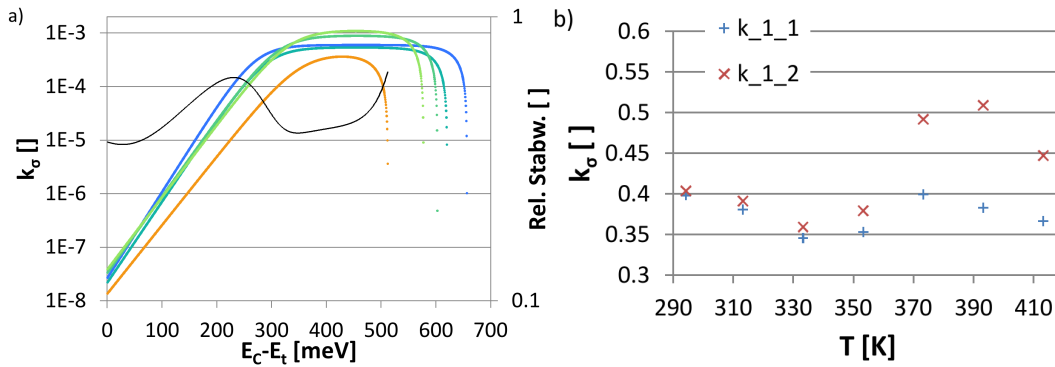


Abb. 5.12: a)  $DPSS - k_\sigma$ -Diagramme für den asymmetrischen Defekt. Es lässt sich kein Schnittpunkt finden. b) Symmetriefaktoren für beide Lösungen des tiefen Defektes als Funktion der Temperatur.

Der Grund für diesen niedrigen Wert konnte nicht geklärt werden. Möglich wäre, dass das interstitielle Eisen aufgrund des Überschusses an Elektronen im n-Typ Material nicht mehr als positiv geladenes Ion, sondern als neutrales Atom, vorliegt, was den Symmetriefaktor von nahezu eins erklären könnte. Andererseits ist die Bestimmung hoher Werte für Symmetriefaktoren in n-Typ Material generell schwierig, da für alle tiefen Defekte mit Symmetriefaktor größer 10 die injektionsabhängige Lebensdauer bei niedrigen Temperaturen nahezu konstant ist. Des Weiteren ist der tiefe Defekt nicht der limitierende Defekt. Der flache und der asymmetrische Defekt dominieren in den T-IDLS-Spektren unabhängig von Temperatur und Injektion die effektive Lebensdauer. Dies kann dazu führen, dass der Symmetriefaktor des tiefen Defektes unterschätzt wird.

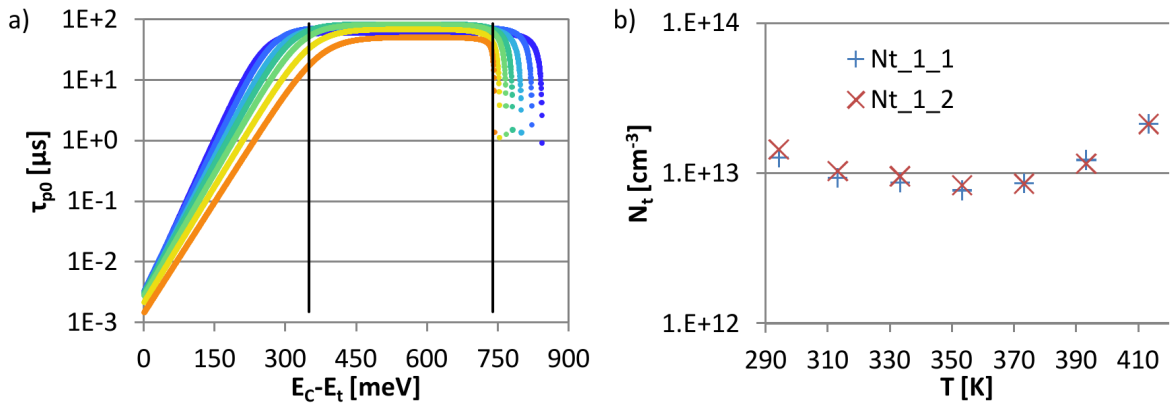


Abb. 5.13: a)  $DPSS - \tau_{p0}$ -Diagramm für den tiefen Defekt mit eingezeichneten Lösungen des  $DPSS - k_\sigma$ -Diagramms. Es ergibt sich eine leichte Abhängigkeit der Einfangzeitkonstante für Majoritäten  $\tau_{p0}$ . b) Konzentrationsverläufe als Funktion der Temperatur für den tiefen Defekt. Es wurde eine Aktivierungsenergie  $E_\infty = 44 \text{ meV}$  angenommen. Die so ermittelte Konzentration an  $Fe_i$  ( $Nt_{1_2}$ ) entspricht in guter Näherung der Konzentration an Eisen in der p-Typ Probe. Die Änderung der Konzentration lässt auf eine Defektreaktion schließen, welche aufgrund der gescheiterten Auswertung der  $DPSS - k_\sigma$ -Diagramme für den flachen und den asymmetrischen Defekt nicht weiter ausgewertet werden kann.

Abbildung 5.13 a zeigt das  $DPSS - \tau_{p0}$ -Diagramm für den tiefen Defekt, sowie die sich aus den  $DPSS - k_\sigma$ -Diagrammen ergebenden Lösungen für das Energieniveau. Da durch den asymmetrischen Defekt Trapping effektiv unterdrückt wird, wurde die Einfangzeitkonstante für Minoritäten ausgewertet. Für die Berechnung der Defektkonzentration wurde wiederum der Einfangquerschnitt für Löcher des interstitiellen Eisens bei  $T = 300 \text{ K}$  nach Istratov [IHW99] von

$\sigma_p = 7 \times 10^{-17} \text{ cm}^2$  verwendet. Wirkungsquerschnitt und Defektkonzentration lassen sich nach den folgenden Formeln berechnen:

$$\sigma_p = \sigma_\infty \cdot \exp\left(-\frac{E_\infty}{k_B T}\right) \text{ und} \quad (5.19)$$

$$N_t^* = \frac{1}{\tau_{p0}^* \cdot \sigma_p \cdot v_{th,p}}, \quad (5.20)$$

wobei für  $E_\infty$  der Wert von  $44 \text{ meV}$  aus der Auswertung der p-Typ Probe verwendet wurde. Abbildung 5.13 b zeigt das Resultat der Auswertung der Einfangzeitkonstanten. Die so ermittelte maximale Defektkonzentration von  $N_t=2,15 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$  entspricht in guter Näherung der Defektkonzentration für die nach demselben Prozess kontaminierte p-Typ Probe. Der temperaturabhängige Verlauf der Defektkonzentration lässt eine Defektreaktion vermuten. Da sich jedoch keine sinnvollen Lösungen für den flachen und asymmetrischen Defekt ergeben kann diese Reaktion nicht ausgewertet werden.

### 5.3. Kupfer-Kontamination

Kupfer ist eine häufig anzutreffende Metallkontamination in Silicium, da beim Slurry-Drahtsägen der Wafer die Beschichtung des Drahtes aus Messing, einer Kupfer-Zink-Legierung besteht. Der mechanische Kontakt des Wafers mit der Beschichtung bietet die Möglichkeit einer oberflächlichen Kontamination des Wafers mit Kupfer. Ungünstigerweise ist Kupfer das am schnellsten diffundierende Übergangsmetall. Jedoch kann mittels entsprechender Reinigungssequenzen nach dem Sägeprozess die oberflächliche Kontamination mit Kupfer größtenteils beseitigt werden. Ein anschließender Hochtemperaturschritt führt wie in Abschnitt 3.1 zu einer Eindiffusion des Kupfers innerhalb weniger Minuten. Die Löslichkeit für Kupfer kann während der in dieser Arbeit verwendeten thermischen Oxidation Konzentrationen von  $10^{17} \text{ cm}^{-3}$  überschreiten. Während des Abkühlens sollte die im Volumen des Siliciumwafers vorhandene Konzentration durch Ausdiffusion um mehrere Größenordnungen sinken. In Abschnitt 3.1 ergab sich eine residuelle Volumenkonzentration kleiner  $10^{14} \text{ cm}^{-3}$ . Dies bedeutet zugleich, dass sich die Grenzfläche zwischen  $\text{SiO}_x$  und  $\text{Si}$  in der untersuchten Probe während der thermischen Oxidation auf Oberflächenkonzentrationen von bis zu  $5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$  anreichert. Diese hohen Konzentrationen machen es plausibel, dass an der Grenzfläche zum Siliciumoxid massive Präzipitatbildung stattfindet. Interessanterweise ist im Silicium gelöstes Kupfer trotz dieser hohen Konzentrationen nahezu nicht rekombinationsaktiv, was sich entweder durch einen extrem kleinen Wirkungsquerschnitt oder eine geringe Konzentration an elektrisch aktiven Defektkonfigurationen erklären lässt. Es ist bekannt, dass eine Kupferkontamination in, bzw. an der Grenzfläche zur Passivierschicht die Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeit drastisch erhöht. Die Rekombinationsaktivität dieser Präzipitate ist in der Literatur bekannt [HOT84]. Die mit Kupfer kontaminierten Proben wurden deshalb sowohl mit  $\text{SiO}_x$  Passivierung, als auch mit  $\text{SiN}_x$  Passivierung untersucht. Bei dem gewachsenen thermischen Oxid sollten erwartungsgemäß die oberflächlichen Kupferpräzipitate die Lebensdauer dominieren. Es ist also zu erwarten, dass die Lebensdauer der gereinigten Probe nicht durch Präzipitate nahe der Oberfläche beeinflusst wird. Tabelle 5.6 zeigt einige bekannte Energieniveaus für Kupfer nach verschiedenen Autoren. Bemerkenswert sind die Ergebnisse von Yarykin und Knack [YW11, YW13b, YW13a, KWLR01, KWLR02, Kna04] welche nicht nur die Defektparameter einzelnen Defektkonfigurationen zuordnen, sondern auch Wirkungsquerschnitte mit engen Fehlergrenzen angeben konnten. Es sei angemerkt, dass von Knack selbst keine Wirkungsquerschnitte, sondern nur Einfangraten bei konkreten Temperaturen publiziert wurden. Die in der Tabelle dargestellten Wirkungsquerschnitte wurden mithilfe des in Abschnitt 2.4.2 gezeigten effektive Massen-Modells und den ebenfalls publizierten Aktivierungsenergien der Wirkungsquerschnitte berechnet. Es zeigt sich, dass bei Anwesenheit von Wasserstoff sich Kupfer-Wasserstoff-Komplexe  $\text{Cu}_s\text{H}_x$  bilden können. Da bei der thermischen Oxidation kein

Wasserstoffeintrag stattfindet, sollten sich vor allem Defektkonfigurationen ohne Wasserstoff bilden.

Defekt	$E_t - E_V$	$E_C - E_t$	$k_\sigma$	$\sigma_p$	$\sigma_n$	Quelle
	[meV]	[meV]	[ ]	[cm <sup>2</sup> ]	[cm <sup>2</sup> ]	
<i>Cu</i>		580	10			[MCR <sup>+</sup> 03]
<i>Cu</i>		200	0,015			[MCR <sup>+</sup> 03]
<i>Cu</i>	200			$4 \times 10^{-16}$		[PT82]
<i>Cu</i>	350			$1 \times 10^{-18}$		[PT82]
<i>Cu</i>	530			$2 \times 10^{-16}$		[PT82]
$Cu_s^{0/+}$	$225 \pm 4$			$1,4 \times 10^{-13}$		[YW13a]
$Cu_s^{0/+}$	207			$2,5 \times 10^{-12} *$		[Kna04]
$Cu_s^{-/0}$	$430 \pm 4$			$2,0 \times 10^{-15}$		[YW13a]
$Cu_s^{-/0}$	478			$2,1 \times 10^{-14} \#$		[Kna04]
$Cu_s^{-/-}$		167	$4,0 \times 10^{-5}$	$3,9 \times 10^{-12} \sim$	$1,6 \times 10^{-16}$	[Kna04]
$Cu_s H_1^{0/+}$	$104 \pm 7$			$8,0 \times 10^{-15}$		[YW13a]
$Cu_s H_1^{-/0}$	$491 \pm 8$			$1,0 \times 10^{-14}$		[YW13a]
$Cu_s H_1^{-/0}$	540			$9,2 \times 10^{-15} \circ$		[Kna04]
$Cu_s H_1^{-/-}$		360	$4,7 \times 10^{-6}$	$3,4 \times 10^{-12} >$	$1,6 \times 10^{-17}$	[Kna04]
$Cu_s H_2^{0/+}$	$194 \pm 4$			$7,4 \times 10^{-15}$		[YW13a]
$Cu_s H_2^{-/0}$	$462 \pm 7$			$4,5 \times 10^{-14}$		[YW13a]
$Cu_s H_2^{-/0}$	270					[Kna04]
$Cu_s H_2^{-/-}$		254	$5,3 \times 10^{-6}$	$5,1 \times 10^{-12} <$	$2,7 \times 10^{-16}$	[Kna04]
$Cu_i Cu_s$	100					[YW13b]
$Cu_i Cu_s$	100					[Kna04]
$CuSi_x$		150 – 400				[IHS <sup>+</sup> 98]

Tab. 5.6: Defektparameter für verschiedene mit Kupfer in Verbindung gebrachte Defekte

Legende: \* bei 97 K; # bei 202 K; ° bei 248 K;  $\sim$ :  $E_\infty = 25 meV$ ;  $>$ :  $E_\infty = 50 meV$ ;  $<$ :  $E_\infty = 25 meV$

Es ist also zu erwarten, dass die Lebensdauer nach thermischer Oxidation von Defekten wie substitutionellem Kupfer  $Cu_s$ , Kupfer-Kupfer-Paaren  $Cu_i Cu_s$ , sowie Kupfer-Präzipitaten  $CuSi_x$  limitiert wird. Durch die Reinigungsschritte sollte die Gesamtkonzentration an Kupfer im Wafer sinken. Und durch den Wasserstoffeintrag bei der  $SiN_x$ -Passivierung besteht die Möglichkeit, dass Kupfer-Wasserstoff-Komplexe die Lebensdauer limitieren. Eine angemessene Probenpräparation ist damit der entscheidende Faktor um auswertbare Lebensdauerproben zu generieren, da sich allein durch die schiere Anzahl an Defektkonfigurationen die Rekombinationsraten im jeweiligen Injektionsbereich überlagern können.

### 5.3.1. T-IDLS Spektrum der mit Kupfer kontaminierten p-Typ Silicium Probe mit Siliciumoxid Passivierung

Für die Lebensdauermessungen bei verschiedenen Temperaturen wurde die mit Kupfer kontaminierte Probe nach der thermischen Oxidation mit dem BCT 400 bis zu einer Temperatur von 483 K aufgeheizt. Es wurden Photoleitfähigkeitsmessungen von 483 K bis 323 K in Schritten von 5 K durchgeführt. Das daraus berechnete T-IDLS-Spektrum ist in Abbildung 5.14 a dargestellt. Die Temperatur der jeweiligen Messung wurde wiederum über die Farbe codiert. Die gestrichelten Linien mit der gleichen Farbcodierung entsprechen den Simulationsergebnissen einer 2-Defekt-Anpassung mit einem tiefen und einem flachen Defekt. Es sei an dieser Stelle angemerkt, dass



es aufgrund der Diffusivität von Kupfer und der möglichen Bildung rekombinationsaktiver Präzipitate an der Oberfläche zu einer anisotropen Defektverteilung im Wafer kommen kann. Das verwendete Modell ist jedoch, soweit bekannt nur für isotrop verteilte Punktdefekte gültig. In Ermangelung eines entsprechenden Modells, welches die genannten Effekte abbildet, wurde jedoch das Modell für Punktdefekte aus Abschnitt 4 verwendet. Abbildung 5.14 b zeigt die Anpassungsgüte  $\chi^2$  für die einzelnen Temperaturen. Man erkennt, dass die Anpassung mit steigender Temperatur eine geringere Güte aufweist, was daran liegt, dass bei tieferen Temperaturen nahezu keine Injektionsabhängigkeit der Lebensdauer vorhanden ist. Generell war die Messung, bedingt durch das Messgerät, nur in einem sehr kleinen Injektionsbereich von ungefähr zwei Größenordnungen in der Injektionsdichte möglich, wodurch die  $\chi^2$ -Werte entsprechend klein sind. Die resultierenden  $DPSS - k_\sigma$ -Diagramme sind in Abbildung 5.15 a für den tiefen Defekt und in Abbildung 5.15 b für den flachen Defekt dargestellt.

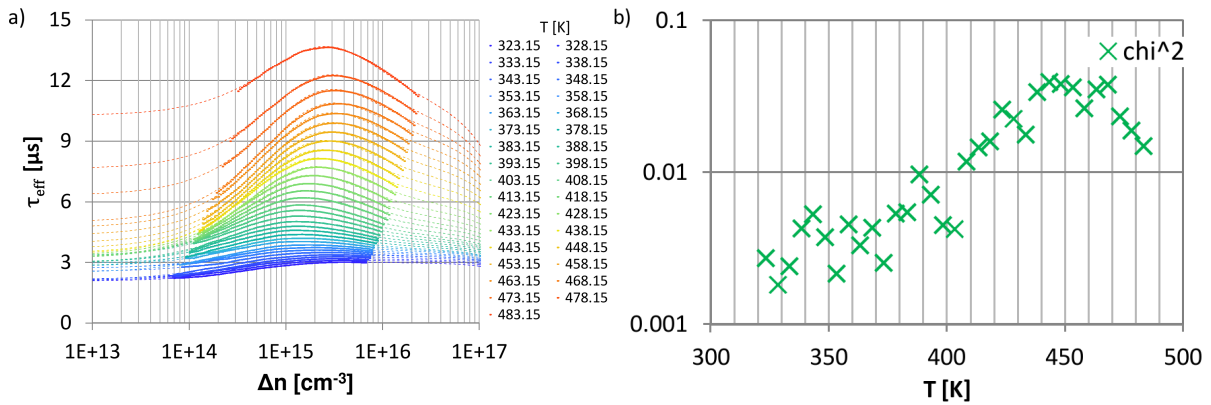


Abb. 5.14: a) T-IDLS-Spektrum einer mit Kupfer kontaminierten Probe nach thermischer Oxidation. Messwerte sind durch Punkte und die Simulationsergebnisse als gestrichelte Linien dargestellt. Die Temperatur wird über die Farbe codiert. Wie zu erkennen ist die Übereinstimmung zwischen Messung und Simulation im gesamten Temperaturbereich exzellent. b) Anpassungsgüte  $\chi^2$  als Funktion der Temperatur für eine 2-Defekt-Anpassung.

Trotz der sehr guten Anpassungsgüte ergibt sich kein scharfer Schnittpunkt für den tiefen Defekt. Vielmehr existiert ein Bereich in der Bandmitte, in dem die relative Standardabweichung annähernd gleich ist.

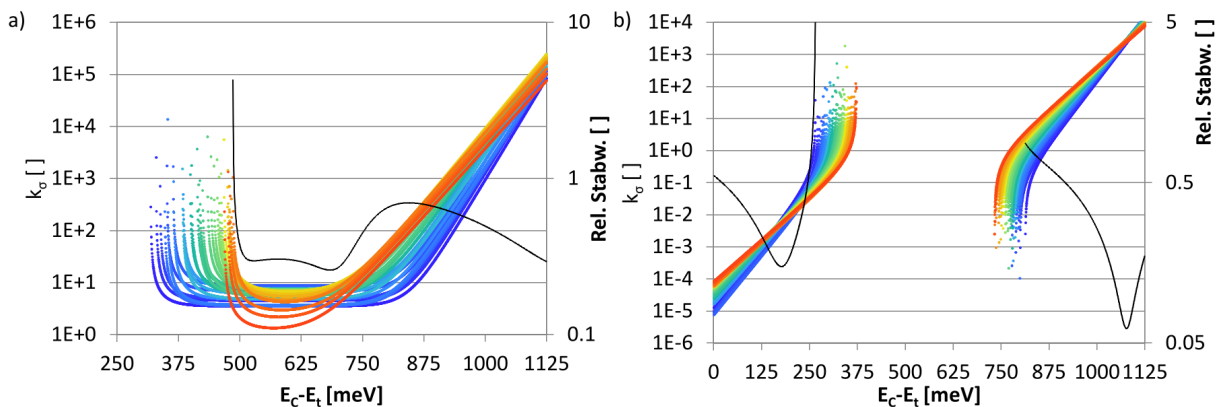


Abb. 5.15: a)  $DPSS - k_\sigma$ -Diagramm für den tiefen Defekt. Der Lösungsbereich ist im gesamten Temperaturbereich kontinuierlich. Es ergeben sich zwei lokale Minima in der relativen Standardabweichung bei  $E_C - E_t = 528_{-37}^{+72} \text{ meV}$  und  $E_t - E_V = 440_{-84}^{+80} \text{ meV}$ . b)  $DPSS - k_\sigma$ -Diagramm für den flachen Defekt mit einer Lösung bei  $E_C - E_t = 177_{-78}^{+50} \text{ meV}$ .

Dies ist bei einem tiefen Defekt mit einem mittleren Symmetriefaktor von 6 zu erwarten. Es lassen sich jedoch zwei lokale Minima in der relativen Standardabweichung bei  $E_C - E_t =$

$528_{-37}^{+72} \text{ meV}$  mit  $k_\sigma = 6,1_{-4,8}^{+22,4}$  und  $E_t - E_V = 440_{-84}^{+80} \text{ meV}$  mit  $k_\sigma = 6,5_{-2,8}^{+18,3}$  identifizieren. Für den flachen Defekt existiert ein scharfer Schnittpunkt bei  $E_t - E_V = 48 \pm 31 \text{ meV}$  mit  $k_\sigma = 2,8_{-2,0}^{+5,8} \times 10^3$  und ein lokales Minimum bei  $E_C - E_t = 177_{-78}^{+50} \text{ meV}$  mit  $k_\sigma = 5,7_{-5,5}^{+54,6} \times 10^{-3}$ . Theoretisch sollte der scharfe Schnittpunkt das wahrscheinliche Energieniveau des flachen Defektes repräsentieren. Eine genaue Analyse der in Tabelle 5.6 gelisteten Defektparameter zeigt jedoch, dass mittels DLTS keine Defekte mit ähnlichen Energieniveaus gefunden wurden. Für den flachen Defekt ist es daher wahrscheinlicher, dass es sich um substitutionelles Kupfer  $\text{Cu}_s^{-/-}$  handelt, welches von Knack mit  $E_C - E_t = 167 \text{ meV}$  identifiziert wurde [Kna04]. Es sei angemerkt, dass auch der für diesen Defekt durch Knack mittels Minoritätsladungsträger-DLTS bestimmte Symmetriefaktor ähnlich ist. Für den tiefen Defekt kommen das Niveau von MacDonald [MCR<sup>+</sup>03] von  $E_C - E_t = 580 \text{ meV}$  und das von Yarykin [YW13a] für  $\text{Cu}_s^{-/0}$  von  $E_t - E_V = 430 \pm 4 \text{ meV}$  in Frage, wobei letzteres die bessere Übereinstimmung liefert. Damit können die dominanten Defekte als substitutionelles Kupfer mit den Konfigurationen  $\text{Cu}_s^{-/0}$  und  $\text{Cu}_s^{-/-}$  identifiziert werden. Dies bedeutet, dass entgegen der eingangs erwähnten Vermutung die Kupferpräzipitate in der mit Kupfer kontaminierten Probe nach thermischer Oxidation nicht die dominante Defektconfiguration darstellen. Ebenfalls konnten bei dieser Messung keine Kupfer-Kupfer-Paare detektiert werden. Tabelle 5.7 zeigt die Ergebnisse der Auswertung des T-IDLS-Spektrums für die mit Kupfer kontaminierte Probe nach thermischer Oxidation.

Defektniveau	$E_C - E_t$ [meV]	$E_t - E_V$ [meV]	$k_\sigma$ []	$\sigma_p$ [cm <sup>2</sup> ]	$\sigma_n^*$ [cm <sup>2</sup> ]	$E_\infty$ [meV]
$\text{Cu}_s^{-/0}$		$440_{-84}^{+80}$	$6,5_{-2,8}^{+18,3}$	$2,0 \times 10^{-15}$	$1,31_{-0,56}^{+3,65} \times 10^{-14}$	$16 \pm 3$
$\text{Cu}_s^{-/-}$	$177_{-78}^{+50}$		$5,7_{-5,5}^{+54,6} \times 10^{-3}$	$3,9 \times 10^{-12}$	$2,2_{-1,42}^{+21,3} \times 10^{-14}$	$148 \pm 3$

Tab. 5.7: Ergebnisse der Auswertung des T-IDLS Spektrums der mit  $\text{SiO}_x$ -passivierten, mit Kupfer kontaminierten p-Typ Probe. Die Wahrscheinlichste Parametrisierung des T-IDLS-Spektrums ergibt, dass es sich bei dem tiefen Defekt um substitutionelles Kupfer mit dem Ladungszustand  $\text{Cu}_s^{-/0}$  handelt. Das Energieniveau des flachen Defektes stimmt recht gut mit den publizierten Werten von substitutionellem Kupfer mit dem Ladungszustand  $\text{Cu}_s^{-/-}$  überein.

Die Einfangzeitkonstanten für Minoritäten sind in Abbildung 5.16 a für den tiefen Defekt und in Abbildung 5.16 b für den flachen Defekt dargestellt.

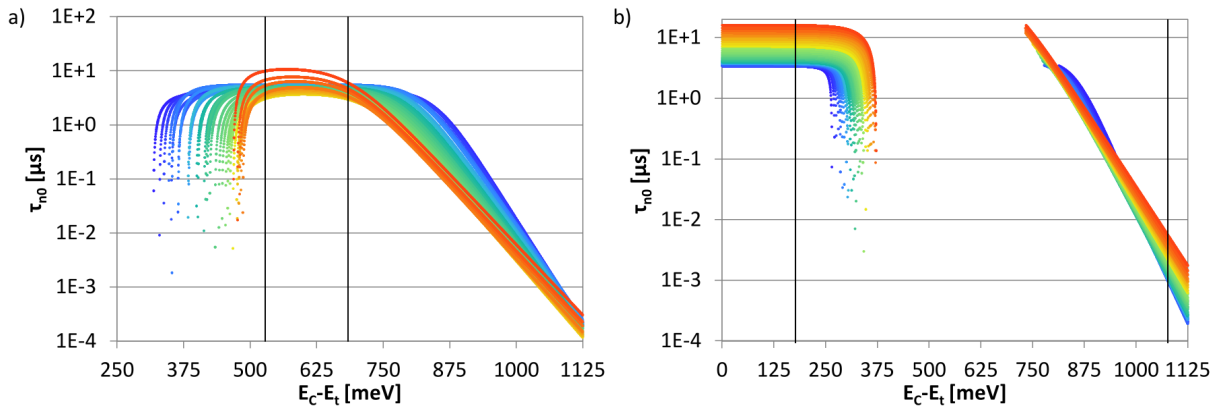


Abb. 5.16: a)  $DPSS - \tau_{n0}$ -Diagramm für den tiefen Defekt. b)  $DPSS - \tau_{n0}$ -Diagramm für den flachen Defekt. Die schwarzen Linien in beiden Diagrammen entsprechen den Lösungen des jeweiligen  $DPSS - k_\sigma$ -Diagrammes. Es ist in beiden Diagrammen eine starke Temperaturabhängigkeit der Einfangzeitkonstante für Minoritäten  $\tau_{n0}$  zu erkennen, was auf eine Defektreaktion schließen lässt.

Die aus den  $DPSS - k_\sigma$ -Diagrammen ermittelten Energieniveaus sind ebenfalls eingezeichnet. Aufgrund der starken Streuung der Defektparameter sowohl für den tiefen als auch für den flachen Defekt wurde keine Mittelung des Symmetriefaktors vorgenommen. Es wurde eine strikt

exponentielle Temperaturabhängigkeit der Wirkungsquerschnitte und eine konstante Gesamtkonzentration angenommen. Die Konzentrationen ergeben sich aus der Einfangzeitkonstanten für Majoritäten durch folgende Gleichungen:

$$\sigma_p = \sigma_\infty \cdot \exp\left(-\frac{E_\infty}{k_B T}\right) \text{ und} \quad (5.21)$$

$$N_t^* = \frac{1}{k_\tau^* \cdot \tau_{n0}^* \cdot \sigma_p \cdot v_{\text{th,h}}} . \quad (5.22)$$

Abbildung 5.17 a zeigt die Ergebnisse der Konzentrationsbestimmung durch Auswertung der Einfangzeitkonstante für Majoritäten. Es sei angemerkt, dass sich die Konzentrationen für beide Lösungen des tiefen Defektes nahezu nicht unterscheiden, was für den niedrigen Symmetriefaktor zu erwarten ist. Die sich ergebenden Konzentrationsverläufe sind unstetige Funktionen, was nahelegt, dass sich flacher und tiefer Defekt ineinander umwandeln können. Dies ist plausibel, da beide Defektkonfigurationen als substitutionelles Kupfer mit unterschiedlichen Ladungszuständen identifiziert wurden. Das Modell kann so angepasst werden, dass die Summe der Konzentrationen von tiefem und flachem Defekt nahezu konstant ist. Die Ausnahme bildet ein Messwert bei 353 K, welcher für die Auswertung der Einfangquerschnitte verworfen wurde. Hierbei wird  $\sigma_\infty$  für den flachen Defekt als Variable verwendet, während für den tiefen Defekt auf den Literaturwert von Yarykin von  $\sigma_p(300\text{ K}) = 2 \times 10^{-15} \text{ cm}^2$  zurückgegriffen wurde. Es sei angemerkt, dass sich durch die Anpassung ein Wirkungsquerschnitt für den flachen Defekt von  $\sigma_p(300\text{ K}) = 3,88 \times 10^{-12} \text{ cm}^2$  ergibt, was eine exzellente Übereinstimmung mit dem von Knack publizierten Wert für  $\text{Cu}_s^{--/-}$  ist [Kna04]. Die so ermittelte Defektkonzentration liegt deutlich unterhalb der in Abschnitt 3.1 berechneten maximal zu erwartenden Konzentration an Kupfer, was bedeutet dass es wahrscheinlich ist, dass ein Großteil der Kupferkonzentration nicht in der Form dieser beiden dominanten Defektkonfigurationen vorliegt.

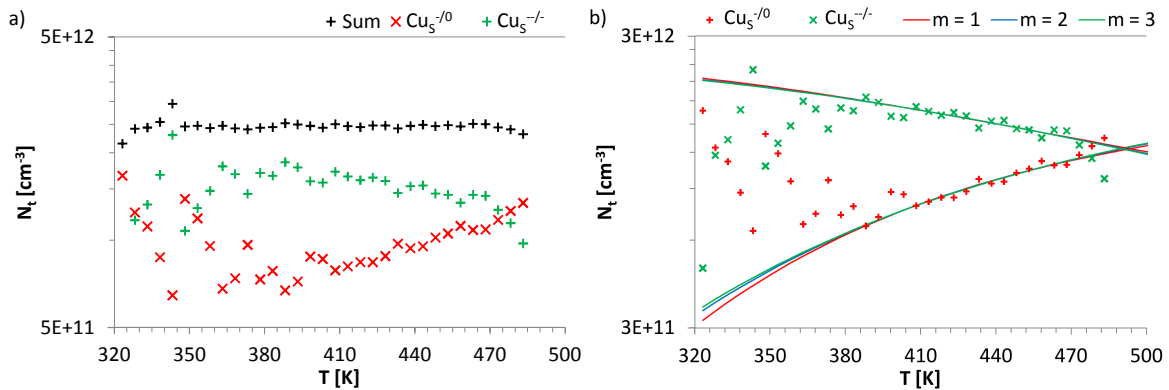


Abb. 5.17: a)  $N_t(T)$  –Diagramm als Ergebnis der Simulation durch Gleichung 5.22 . Im Niedertemperaturbereich lässt sich kein klarer Trend in der Defektkonzentration feststellen. Für hohe Temperaturen ist ein eindeutiger Anstieg der Konzentration des tiefen Defektes ( $\text{Cu}_s^{/0}$ ) zu verzeichnen. b) thermodynamische Auswertung der Defektreaktion. Für hohe Temperaturen lässt sich die Konzentrationsänderung des tiefen Defektes durch unterschiedliche Reaktionsordnungen anpassen.

In Abbildung 5.17 b sind die Ergebnisse der thermodynamischen Auswertung dargestellt. Hierfür wurde der Temperaturbereich zwischen 420 und 480 K ausgewertet, da hier ein eindeutiger Trend zu erkennen ist. Interessanterweise lässt sich der Konzentrationsverlauf des tiefen Defektes in diesem Temperaturbereich mit den Ordnungen 1, 2 und 3 anpassen (Gleichungen 2.77 bis 2.79), ohne dass sich die Anpassungsgüte stark verändert. Die so erhaltenen Energien für die Umwandlung von flachem Defekt zu tiefem Defekt beträgt für die erste Ordnung 154 meV, für die zweite Ordnung 252 meV und für die dritte Ordnung 351 meV. Die resultierenden Parameterkombinationen für die Auswertung der Defektreaktion sind in folgender Tabelle dargestellt.

Es sei angemerkt dass für die chemische Reaktion von  $Cu^0 + e^- \rightarrow Cu^-$  nur eine Reaktion erster Ordnung in Frage kommt.

m	E	$K_C^0$
	[meV]	[cm <sup>-3</sup> ] <sup>m-1</sup>
1	154 ± 10	37,6
2	252 ± 20	9,8 × 10 <sup>14</sup>
3	351 ± 30	1,9 × 10 <sup>28</sup>

Tab. 5.8: Ergebnisse der thermodynamischen Auswertung der Defektreaktion in der mit Kupfer kontaminierten und SiO<sub>x</sub> passivierten Siliciumprobe. Die Einheit der Gleichgewichtskonstante  $K_C^0$  ist von der Ordnung der chemischen Reaktion abhängig.

### 5.3.2. T-IDLS Spektrum der mit Kupfer kontaminierten p-Typ Silicium Probe mit Siliciumnitrid Passivierung

Die Lebensdauermessungen an der gereinigten und mit Siliciumnitrid passivierten Probe wurden mit dem BCT 400 im Temperaturbereich zwischen 298 und 553 K in Schritten von 5 K durchgeführt. Die Probe wurde aufgeheizt und anschließend bei ausgeschaltetem Heizer ohne definiertes Temperaturregime vermessen. Vor jeder Messung wurde eine optische Dissoziation durchgeführt, da in vorangegangenen Experimenten festgestellt wurde, dass sich die Lebensdauer der Probe unter Beleuchtung ändert. Dies war bei der Messung derselben Probe mit thermischen Oxid nicht beobachtet worden. Der Grund dafür konnte in dieser Arbeit nicht vollständig geklärt werden. Abbildung 5.18 a zeigt das berechnete T-IDLS Spektrum. Die Temperatur wurde wieder über die Farbe der Kurven codiert. Die durchgezogenen Linien stellen die Messwerte dar, während die Anpassungsergebnisse eines 2-Defekt-Fittes als gestrichelte Linien dargestellt sind. Das Auger-Limit ist ebenfalls als schwarze Linie eingezeichnet. Die Lebensdauer ist im Vergleich zum T-IDLS-Spektrum mit Siliciumoxidpassivierung um eine Größenordnung höher. Dies zeigt, dass durch das Rückätzen und Reinigen der Probe vor der Siliziumnitridabscheidung ein Großteil der Kontamination entfernt wurde. In Niederinjektion steigt die Lebensdauer kontinuierlich an. Unter Hochinjektion ist die Lebensdauer bei tiefen Temperaturen maximal und nimmt bis zu einer Temperatur von 422 K ab. Bei höheren Temperaturen steigt die Lebensdauer unter Hochinjektion wieder an. Dies ist wieder ein deutliches Anzeichen für eine Defektreaktion und erinnert stark an den Lebensdauerungsverlauf der mit Eisen kontaminierten p-Typ Probe. Dies verdeutlicht, dass für eine eindeutige Defektidentifikation die Defektparameter bestimmt werden müssen, da es sich auch um Defekte handeln kann, welche ähnliche Eigenschaften besitzen können.

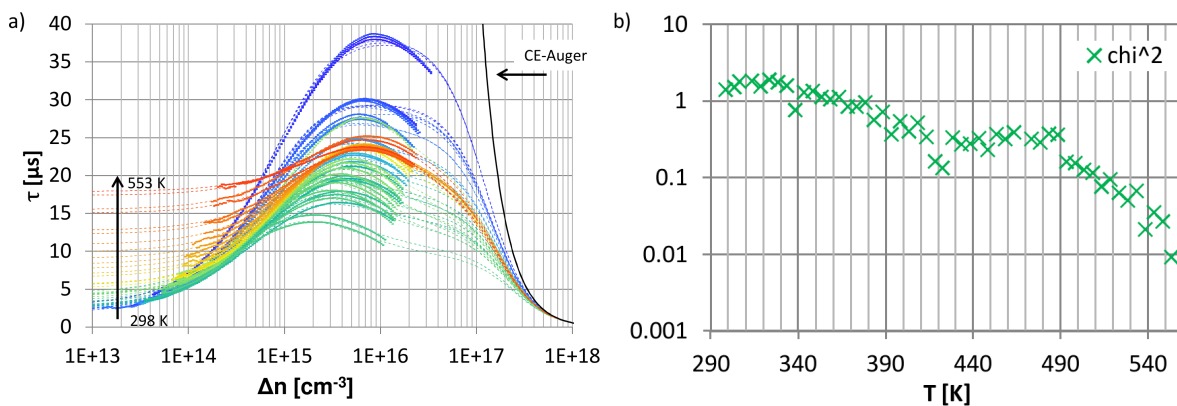


Abb. 5.18: a) T-IDLS-Spektrum der mit Kupfer kontaminierten Probe mit SiN<sub>x</sub> Passivierung b)  $\chi^2$ -Werte als Funktion der Temperatur

Abbildung 5.18 b zeigt den Verlauf der Anpassungsgüte  $\chi^2$  als Funktion der Temperatur. Es ist deutlich zu erkennen, dass die Anpassungsgüte mit steigender Temperatur besser wird. Dies ist einerseits auf die geringe Übereinstimmung der Lebensdauer in Hochinjektion bei tiefen Temperaturen, andererseits auf die schwächere Injektionsabhängigkeit der Lebensdauer bei hohen Temperaturen zurückzuführen. Wie in Abbildung 5.18 a zu erkennen, wird die Lebensdauer unter Niederinjektion durch die Anpassung sehr gut wiedergegeben, während vor allem bei tiefen Temperaturen die simulierte Lebensdauer unter Hochinjektion stark von den Messwerten abweicht. Dies kann dadurch erklärt werden, dass es zwei flache Defekte gibt, welche die Lebensdauer unter Hochinjektion beeinflussen. Durch eine 3-Defekt-Anpassung lässt sich theoretisch der Einfluss der flachen Defekte trennen. Dies war bei dem gezeigten Spektrum aufgrund des begrenzten Injektionsbereiches nicht möglich. Die Auswertung des Spektrums erfolgt deshalb unter der Annahme, dass die Lebensdauer nur von einem tiefen und einem flachen Defekt beeinflusst wird. Da die Lebensdauer unter Niederinjektion durch Trapping beeinflusst wird, wurde der Temperaturbereich für die Bestimmung des Energieniveaus des tiefen Defektes auf den Bereich zwischen 380 und 560 K reduziert, da die relative Standardabweichung hier den kleinsten Wert annimmt und das Minimum der relativen Standardabweichung einen maximalen Abstand von der Bandkante besitzt. Der zweite Defekt wurde ebenfalls in demselben reduzierten Temperaturbereich ausgewertet. Es ergeben sich die  $DPSS - k_\sigma$ -Diagramme in Abbildung 5.19.

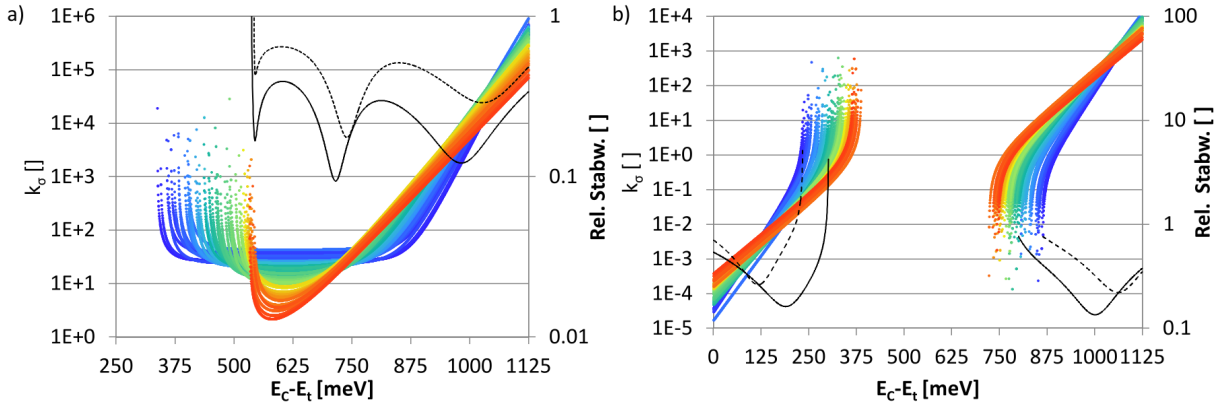


Abb. 5.19: a)  $DPSS - k_\sigma$ -Diagramm für den tiefen Defekt mit einem scharfen Schnittpunkt bei  $E_t - E_V = 409 \pm 33$  meV b)  $DPSS - k_\sigma$ -Diagramm für den flachen Defekt mit zwei lokalen Minima bei  $E_C - E_t = 190 \pm 70$  meV und  $E_t - E_V = 123 \pm 85$  meV. In beiden Diagrammen kann durch eine Trapping-Korrektur (durchgezogene schwarze Linien) die relative Standardabweichung reduziert werden.

Wie in Abbildung 5.19 a zu sehen ergibt, sich für den tiefen Defekt ein scharfer Schnittpunkt bei  $E_t - E_V = 409 \pm 33$  meV für die durchgezogene schwarze Linie. Die gestrichelte schwarze Linie beschreibt die relative Standardabweichung für den kompletten Temperaturbereich und besitzt ein globales Minimum bei  $E_t - E_V = 385 \pm 32$  meV. Der mittlere Symmetriefaktor für das globale Minimum des tiefen Defektes beträgt  $k_\sigma = 21 \pm 13$ . Dies verdeutlicht wie ähnlich das Spektrum dem der mit Eisen kontaminierten Probe ist. Aufgrund dieser Ähnlichkeit kann eine Kreuzkontamination mit Eisen und eine Überlagerung der Lebensdauern durch beide Defekte nicht ausgeschlossen werden. Energieniveaus, welche für den tiefen Defekt in Frage kommen sind  $E_t - E_V = 430 \pm 4$  meV für substitutionelles Kupfer  $Cu_s^{-/0}$ , sowie  $E_t - E_V = 390 \pm 25$  meV für interstitielles Eisen  $Fe_i$ . Für den flachen Defekt ergibt sich, ebenfalls im Temperaturbereich von 380 K bis 650 K, ein Schnittpunkt nahe dem Leitungsband bei  $E_C - E_t = 190 \pm 70$  meV und einem mittleren Symmetriefaktor von  $k_\sigma = (1,51 \pm 1,48) \times 10^{-2}$ . In der Literatur sind ähnliche Niveaus publiziert worden, wie  $E_C - E_t = 167$  meV für substitutionelles Kupfer  $Cu_s^{-/-}$ , bzw. dem nicht näher identifizierten Niveau für Kupfer von  $E_C - E_t = 200$  meV und  $k = 1,5 \times 10^{-2}$  von MacDonald et. al. [MCR<sup>+</sup>03]. Ein zweiter Schnittpunkt liegt nahe dem Valenzband bei  $E_t - E_V = 123 \pm 85$  meV mit einem mittleren Symmetriefaktor von  $k_\sigma = 237 \pm 235$ . Dieses Niveau

ähnelt dem Niveau für Kupfer-Wasserstoffkomplexe  $Cu_sH_1^{0/+}$  von  $E_t - E_V = 104 \pm 7 \text{ meV}$  oder aber dem Niveau von  $E_t - E_V = 100 \text{ meV}$  für Kupfer-Kupfer-Paare  $Cu_iCu_s$ . Es sei angemerkt, dass das Energieniveau für den tiefen Defekt dem von  $Fe_i$  sehr ähnlich ist. Auch die bemerkenswerte Ähnlichkeit der Spektren der mit Kupfer kontaminierten und der mit Eisen kontaminierten p-Typ Siliciumprobe, sowie die optische Dissoziation lässt auf eine nicht gewollte Eisenkontamination der mit Kupfer kontaminierten Probe schließen. Zusätzlich ist eine Interpretation der Ergebnisse angesichts der Fülle an möglichen Niveaus recht schwierig. Es sei jedoch darauf hingewiesen, dass in dieser gezielt mit Kupfer kontaminierten Probe nach Siliciumoxidpassivierung kein Eisen nachgewiesen wurde. Eine nachträgliche Kontamination mit Eisen während des Rückätzens der Siliciumoxidpassivierung kann zwar nicht ausgeschlossen werden, jedoch müsste die Probe, damit eine signifikante Menge an Eisen in das Volumen der Probe gelangt, auf eine entsprechend hohe Temperatur aufgeheizt werden. Der dafür in Frage kommende Prozessschritt ist die  $SiN_x$ -Abscheidung, welche bei Temperaturen über  $400 \text{ }^\circ\text{C}$  stattfindet. Diese Temperaturen sind aber dennoch zu niedrig, um eine ausreichende Löslichkeit für Eisen in der Probe zu erreichen. Eine weitere Möglichkeit ist, dass diese Probe, die auch in Abschnitt 5.3.1 vorgestellt wurde, bereits während der thermischen Oxidation mit Eisen kontaminiert wurde. Wenn  $Fe_i$  und  $FeB$  nicht die dominanten Defekte waren, sondern  $Cu_s$ , so sind die durch Eisen induzierten Defekte nicht mittels Lebensdauerspektroskopie nachweisbar. Durch die  $SiN_x$ -Passivierung wird die Probe mit Wasserstoff angereichert, welcher wie in Tabelle 5.6 gezeigt die Defektkonfiguration von Kupfer durch Komplexbildung ändern kann. Dadurch kann sich bei gleicher Defektkonzentration die Lebensdauer erhöhen, wodurch die Eisen induzierten Defekte zu den Lebensdauer limitierenden Defekten werden können. Die Dissoziierbarkeit des flachen Defektes kann auf die Anwesenheit von  $FeB$  deuten oder aber, dass eine weitere dissoziierbare Verbindung vorhanden ist. Die optische Dissoziierbarkeit ist bisher jedoch nur für  $FeB$  nachgewiesen worden. Abbildung 5.20 zeigt die berechneten Einfangzeitkonstanten  $\tau_{n0}$  für b) den flachen und a) den tiefen Defekt. Es sind jeweils die Niveaus aus den  $DPSS - k_\sigma$ -Diagrammen eingezeichnet.

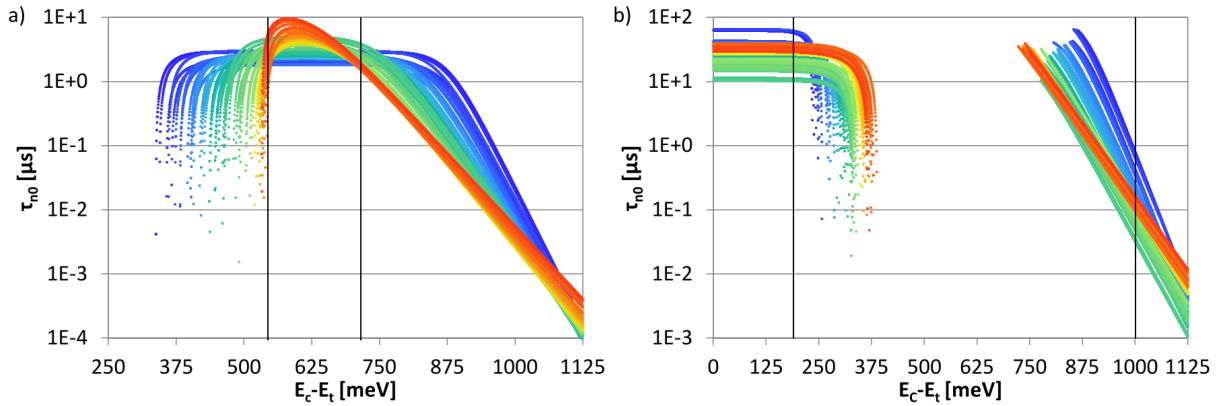


Abb. 5.20: a)  $DPSS - \tau_{n0}$ -Diagramm für den tiefen Defekt. b)  $DPSS - \tau_{n0}$ -Diagramm für den flachen Defekt. Die Lösungen aus den zugehörigen  $DPSS - k_\sigma$ -Diagrammen sind als schwarze Linien eingezeichnet. Es ergeben sich eine schwache Temperaturabhängigkeit für die Einfangzeitkonstante  $\tau_{n0}$  für den tiefen Defekt und eine starke Temperaturabhängigkeit bei dem flachen Defekt.

Die  $DPSS - k_\sigma$  und  $DPSS - \tau_{n0}$ -Diagramme wurden des Weiteren so behandelt, als würden sie durch jeweils einen Defekt repräsentiert. Für die Bestimmung der Defektkonzentration wurde die Einfangzeitkonstante für Majoritäten berechnet:

$$\tau_{p0} = \tau_{n0} \cdot k_\sigma \cdot \frac{v_{th,e}}{v_{th,h}}. \quad (5.23)$$

Aufgrund des Trappings wurde für den tiefen Defekt der Symmetriefaktor  $k_\sigma$  bei der jeweiligen Temperatur verwendet. Für den flachen Defekt wurde aufgrund der starken Streuung des

Symmetriefaktors ebenfalls der Symmetriefaktor  $k_\sigma$  bei der jeweiligen Temperatur verwendet. Abbildung 5.21 a zeigt den Symmetriefaktor  $k_\sigma$  als Funktion der Temperatur für beide Defekte. Es ist deutlich zu erkennen, dass der Symmetriefaktor für beide Defekte oberhalb einer Temperatur von  $400\text{ K}$  nahezu konstant ist. Die starke Abweichung des Symmetriefaktors für das Leitungsbandnahe Niveau des tiefen Defektes  $k_{\sigma-1-1}$  zeigt deutlich, dass dieses Niveau nicht der gesuchte Defekt ist. Die Abweichungen der Symmetriefaktoren für beide Niveaus des flachen Defektes resultieren maßgeblich durch die schlechte Übereinstimmung in Hochinjektion zwischen der gemessenen und der gefitteten Lebensdauerkurve. Dies legt nahe, dass zumindest bei niedrigen Temperaturen ein weiterer Defekt in Hochinjektion rekombinationsaktiv ist.

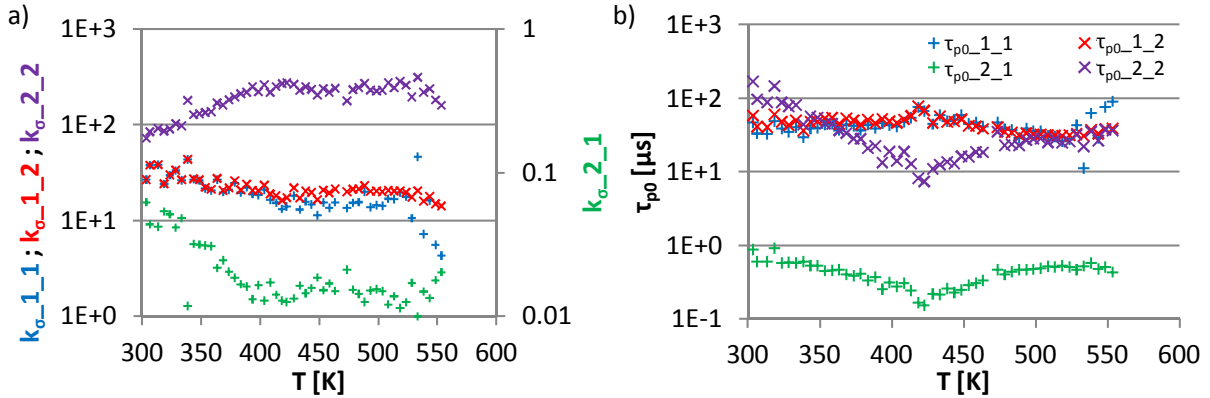


Abb. 5.21: a)  $k_\sigma(T)$ -Diagramm für alle vier Lösungen der  $DPSS-k_\sigma$ -Diagramme. Die Temperaturabhängigkeit des (anscheinenden) Symmetriefaktors ist für den tiefen Defekt ( $k_{\sigma-1-2}$ ) und den flachen Defekt ( $k_{\sigma-2-2}$ ) bei Temperaturen kleiner  $T = 400\text{ K}$  zu beobachten. b)  $\tau_{p0}(T)$ -Diagramm für alle vier Lösungen der  $DPSS-k_\sigma$ -Diagramme. Das Maximum in der Einfangzeitkonstante für Majoritäten  $\tau_{p0}$  des tiefen Defektes bei  $T = 433\text{ K}$  entspricht dem Minimum von  $\tau_{p0}$  für den flachen Defekt.

Abbildung 5.21 b zeigt die berechnete Einfangzeitkonstante für Majoritäten  $\tau_{n0}$  als Funktion der Temperatur. Es ist zu erkennen, dass das Minimum des flachen Defektes bei  $430\text{ K}$  dem lokalen Maximum des tiefen Defektes entspricht. Die Defektkonzentration wurde wie bei der mit  $\text{SiO}_x$  beschichteten Probe nach folgenden Formeln berechnet:

$$\sigma_p(T) = \sigma_\infty \cdot \exp\left(-\frac{E_\infty}{k_B T}\right) \text{ und} \quad (5.24)$$

$$N_t^* = \frac{1}{k_\tau^* \cdot \tau_{n0}^* \cdot \sigma_p \cdot v_{th,h}}. \quad (5.25)$$

Der Wirkungsquerschnitt für substitutionelles Kupfer bei Raumtemperatur von  $\sigma_p(300\text{ K}) = 2,0 \times 10^{-15}\text{ cm}^2$  von Yarykin [YW13a] wurde für den tiefen Defekt als fest angenommen. Während der Wirkungsquerschnitt des flachen Defektes sowie die Aktivierungsenergien der Wirkungsquerschnitte  $E_\infty$  beider Defekte als Variablen gesetzt wurden. Das Modell wurde dadurch gelöst, dass die Summe der Defektkonzentrationen konstant über der Temperatur sein sollte. Abbildung 5.22 a zeigt das Ergebnis der Auswertung der Einfangzeitkonstanten für Majoritäten.

Die Gesamtdefektkonzentration beträgt nach diesem Modell  $9 \times 10^{12}\text{ cm}^{-3}$ . Es ist deutlich zu erkennen, dass die Konzentration des flachen Defektes unabhängig von der Temperatur kleiner ist als die des tiefen Defektes. Außerdem ist die Defektkonzentration bei tiefen Temperaturen durch optische Dissoziation, sowie bei hohen Temperaturen durch thermische Dissoziation erniedrigt. Bei moderaten Temperaturen herrscht anscheinend eine erhöhte Paarungsgeschwindigkeit des flachen Defektes vor. Diese drei Effekte erinnern stark an das chemische Verhalten von  $FeB$ . Darüber hinaus sind die Aktivierungsenergien für den tiefen Defekt von  $E_\infty = 45 \pm 4,5\text{ meV}$  und den flachen Defekt von  $E_\infty = 0 \pm 4,5\text{ meV}$  eindeutige Indikatoren für die Defekte  $Fe_1$  und

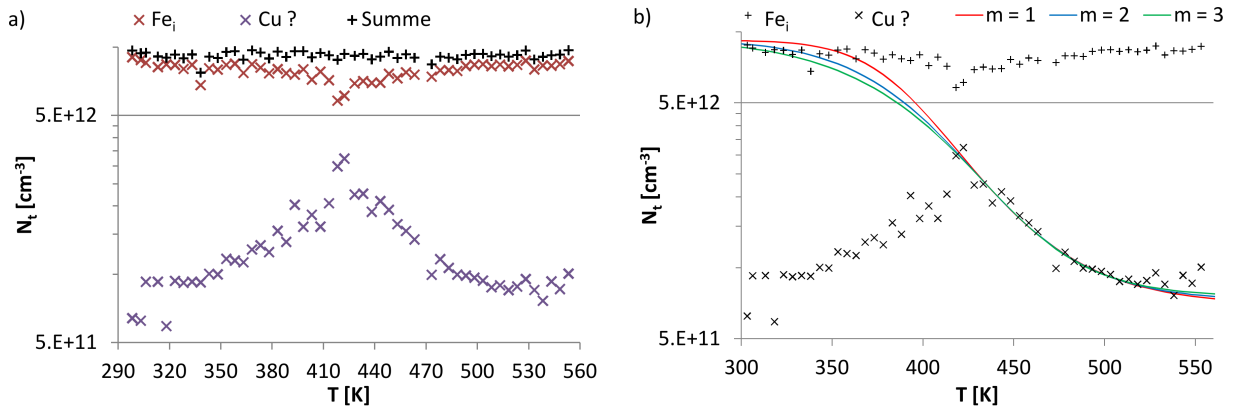


Abb. 5.22: a)  $N_t(T)$ -Diagramm für den tiefen Defekt ( $N_{t\_1\_2}$ ) sowie für den flachen Defekt ( $N_{t\_2\_2}$ ). b) Thermodynamische Auswertung des Konzentrationsabfalls des flachen Defektes ( $N_{t\_2\_2}$ ) bei Temperaturen größer  $T = 433 \text{ K}$ . Der Konzentrationsverlauf kann durch unterschiedliche Reaktionsordnungen gefittet werden.

*FeB*. Es konnte also gezeigt werden, dass für die mit Kupfer kontaminierte Siliciumprobe eine ungewollte Kontamination mit Eisen stattgefunden hat. Für Temperaturen größer  $430 \text{ K}$  wurde eine thermodynamische Auswertung vorgenommen. Die Ergebnisse sind in Abbildung 5.22 b dargestellt. Es ist wieder möglich den Konzentrationsverlauf mit Reaktionsordnungen von eins bis drei anzupassen. Für die erste Ordnung ergibt sich eine Energie von  $E = 0,57 \text{ eV}$ , für eine zweite Ordnung ergibt sich  $E = 0,66 \text{ eV}$  und für eine dritte Ordnung ergibt sich  $E = 0,75 \text{ eV}$ . Der Wert für die zweite Ordnung stimmt recht gut mit den Dissoziationsenergien für Eisen nach Istratov von  $E_{diss} = 0,68 \text{ eV}$  überein. Folgende Tabelle zeigt die Ergebnisse der thermodynamischen Auswertung des T-IDLS-Spektrums.

m	E	$K_C^0$
	[meV]	[ $\text{cm}^{-3}$ ] $^{m-1}$
1	$570 \pm 50$	$1,8 \times 10^7$
2	$660 \pm 60$	$2,6 \times 10^{21}$
3	$750 \pm 70$	$3,4 \times 10^{35}$

Tab. 5.9: Ergebnisse der thermodynamischen Auswertung der Defektreaktion von Eisen in der mit Kupfer kontaminierten und  $\text{SiN}_x$  passivierten Siliciumprobe. Die Einheit der Gleichgewichtskonstante  $K_C^0$  ist von der Ordnung  $m$  der chemischen Reaktion abhängig.

Die mit Kupfer kontaminierte p-Typ Probe nach Nitridabscheidung wurde ebenfalls für DLTS Messungen präpariert. Die Messungen wurden an der TU Dresden durchgeführt. Die Ergebnisse sind in Abbildung 5.23 a dargestellt. Es zeigt sich, dass in der Tat Kupfer-Komplexe in der Probe vorhanden sind. Die Linie bei  $T = 50 \text{ K}$  wurde als Kupfer-Kupfer Komplex  $\text{Cu}_3\text{Cu}_i$  identifiziert. Da diese Linie bei derselben Temperatur auftritt, bei der auch die *FeB* Donatoren nachgewiesen wurden (siehe Abbildung 5.6), kann auch mittels DLTS nicht ausgeschlossen werden, dass diese Probe auch mit Eisen kontaminiert ist. Ebenfalls zu sehen sind zwei weitere Linien bei  $T = 140 \text{ K}$  und  $T = 260 \text{ K}$ . Diese lassen sich eindeutig Kupfer zuordnen und lassen auf Kupfer Komplexe schließen. Abbildung 5.23 b zeigt die aus Kapitel 3.1 berechnete maximal zu erwartende Kupferkonzentration als Funktion der Probtiefe (schwarze Linie). Ebenfalls eingezeichnet sind die gemessenen Konzentrationen durch TIDLS Messung nach thermischer Oxidation, sowie durch DLTS Messungen nach Nitridabscheidung. Bei den Messwerten handelt es sich um Mittelwerte und keine Konzentrationsprofile. Es zeigt sich, dass DLTS eine leicht niedrigere Konzentration als TIDLS bestimmt, was darauf zurück geführt werden kann, dass DLTS eine oberflächensensitive Methode ist. Dies ist in Abbildung 5.23 b daran zu erkennen, dass die blaue Linie nur



bis ungefähr 3  $\mu\text{m}$  in die Probe hineinreicht. Die berechnete Konzentration hingegen ist deutlich überschätzt. Auch das Verhältnis von oberflächennaher Konzentration und Volumenkonzentration ist deutlich kleiner als erwartet. Dies kann an einer Homogenisierung des Konzentrationsprofils durch die erhöhte Temperatur bei der Nitridabscheidung liegen. Es ist aber auch möglich, dass die Bildung von Präzipitaten die messbare Konzentration an rekombinationsaktiven Defekten drastisch reduziert. Da die Triebkraft für die Präzipitatbildung die Übersättigung, also die lokale Konzentration an Kupfer im Siliciumkristall, ist, kann auch die Präzipitatbildung zu einer Homogenisierung des Konzentrationsprofils rekombinationsaktiver Defekte führen.

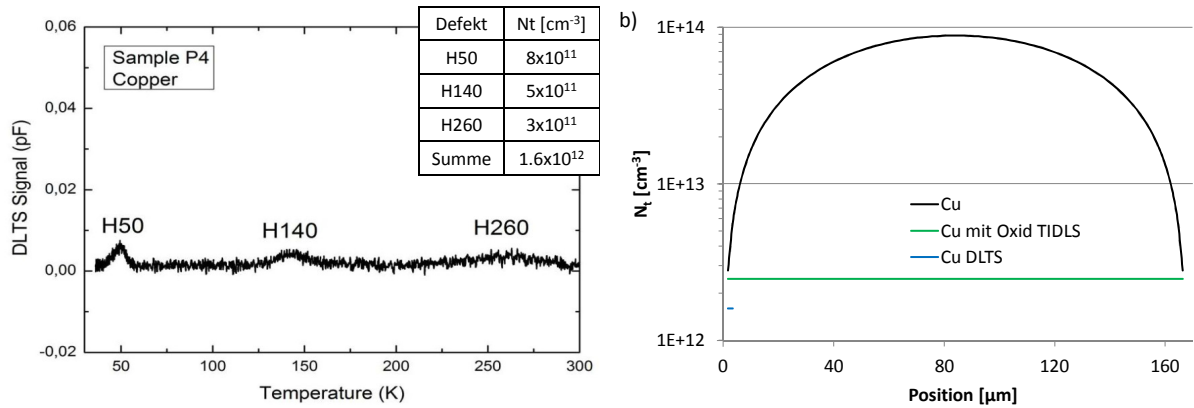


Abb. 5.23: a) DLTS-Signal für die mit Kupfer kontaminierte p-Typ Silicium Probe. Es lassen sich drei elektrisch aktive Defekte ausmachen. Der Peak H50 ist dem der mit Eisen kontaminierten p-Typ Silicium Probe recht ähnlich, sodass nicht ausgeschlossen werden kann, dass die mit Kupfer kontaminierte Probe auch mit Eisen kontaminiert ist. Die beiden Peaks H140 und H260 könnten Kupfer-Komplexen zugeordnet werden. b) Berechnetes Konzentrationsprofil nach thermischer Oxidation schwarz, sowie Messwerte (Mittelwerte) für die Kupferkonzentration durch TIDLs Messungen nach thermischer Oxidation, sowie durch DLTS nach Nitridabscheidung. Die hohe erwartete Volumenkonzentration konnte nicht nachgewiesen werden. Mögliche Gründe dafür sind, dass die Annahme der Diffusion aus unendlicher Quelle nicht erfüllt ist, bzw. eine nachträglich Homogenisierung durch weitere Temperaturschritte, sowie Präzipitatbildung stattgefunden hat.

## 5.4. Nickel-Kontamination

Nickel kann als Bestandteil von Stahl häufig als Metallkontamination beobachtet werden. Außerdem ist Nickel beim Diamantdrahtsägen Bestandteil des Drahtes. Mechanischer Kontakt zu Nickelhaltigen Komponenten führt zu oberflächlicher Nickelkontamination, welche durch einen Hochtemperaturschritt in das Volumen des Siliciumwafers eingebracht werden kann. Nickel diffundiert ähnlich schnell wie Kupfer durch den Wafer. Die Löslichkeit für Nickel kann bei dem in dieser Arbeit verwendeten thermischen Oxidationsprozess Konzentrationen von  $10^{16} \text{ cm}^{-3}$  überschreiten. Es ist in der Literatur bekannt, dass Nickel dazu neigt beim Abkühlen Präzipitate im Volumen zu bilden, da die Löslichkeit bei Raumtemperatur um mehrere Größenordnungen kleiner ist. Da die Abkühlrate in dem verwendeten thermischen Oxidationsprozess sehr langsam war, sollte ein Großteil des bei hohen Temperaturen gelösten Nickels zur Oberfläche ausdiffundieren können. Die Simulation aus Abschnitt 3.1 hat gezeigt, dass sich nach dem Abkühlen trotz Ausdiffusion immer noch rund  $3 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$  an Nickel im Volumen befinden sollten. Da die Löslichkeit von Nickel bei Raumtemperatur kleiner  $3 \times 10^6 \text{ cm}^{-3}$  ist, existiert folglich eine hohe Triebkraft für die Bildung von Präzipitaten im Volumen. Sofern Nickel bei ausreichend hoher Temperatur noch mobil ist, werden sich die Nickelsilicid  $Ni_2Si$  Präzipitate bilden [Gra00]. Dadurch kann die im Silicium gelöste Konzentration an Nickel stark sinken. Sofern aus der Literatur bekannt sind Nickelpräzipitate im Volumen nicht rekombinationsaktiv. Jedoch ist es bekannt, dass oberflächliche Nickelpräzipitate die Passiviereigenschaften beeinträchtigen können [HSSF89]. So dass es a priori nicht klar ist, ob sich die Nickelpräzipitate auf die Messung der Lebensdauer auswirken. Somit sollte die mittels Lebensdauerspektroskopie nachweisbare Nickelkonzentration deutlich unterhalb des Simulationsergebnisses liegen. Rein beschrieb bei seinen TDLS Messungen (Temperaturabhängige Lebensdauerspektroskopie), dass sich die gemessene Lebensdauer unter Niederinjektion beim ersten Aufheizen der Probe stark von der Lebensdauer beim Abkühlen unterschied [Rei05]. Er führte die Erhöhung der Lebensdauer auf eine während des Aufheizens stattfindende Präzipitatbildung zurück. Beim erneuten Aufheizen der Probe war die Lebensdauer nahezu identisch mit der Lebensdauer beim Abkühlen. Für die injektionsabhängigen Lebensdauerermessungen bei unterschiedlichen Temperaturen, wurden die mit Nickel kontaminierten Proben deshalb zuerst aufgeheizt und anschließend, während des Abkühlens gemessen. Die Defekteigenschaften von Nickel wurden von verschiedenen Autoren untersucht. Es zeigte sich, dass vor allem substitutionelles Nickel rekombinationsaktiv ist. Dieses kann in Silizium je nach Ladungszustand als Donator  $Ni_s^d$ , Akzeptor  $Ni_s^a$  oder Doppelakzeptor  $Ni_s^{aa}$  vorliegen und dementsprechend unterschiedliche Defektniveaus ausbilden. Tabelle 5.10 fasst die Ergebnisse aus der Literatur zusammen. Wie zu erkennen ist, wurden für substitutionelles Nickel verschiedene Defektenergieniveaus von verschiedenen Autoren ermittelt. Für die Nickelpräzipitate wurde von Istratov [IW98] ein Energieniveau von  $E_C - E_t = 580 \text{ meV}$  publiziert. Herausragend ist eine Arbeit von Scheffler [Sch15], in welcher bekannte Defektenergieniveaus von Nickel den einzelnen Defektkonfigurationen von substitutionellem Nickel und Nickel-Wasserstoff-Komplexen  $NiH_x$  zugeordnet werden. Nennenswert ist auch die Arbeit von Shiraishi [SSLW99], welcher ebenfalls mittels DLTS eine extensive Untersuchung von Nickel-Wasserstoff-Komplexen durchgeführt hat. Die Ergebnisse von Shiraishi sind aus Gründen der Übersichtlichkeit nicht mit dargestellt. Die Tabelle macht deutlich, dass sich in Abhängigkeit von der Probenherstellung unterschiedliche Defektkonfigurationen bilden können. Gerade für Nickel-Wasserstoff-Komplexe ist bekannt, dass diese Zustände mittels einer Temperaturbehandlung eingestellt werden können. Da auch bei der Siliciumnitrid-Deposition Wasserstoff in die Passivierschicht bei erhöhter Temperatur eingebaut wird, ist es möglich, dass ein Teil des Wasserstoffs in das Volumen der Probe diffundiert und sich Nickel-Wasserstoff-Komplexe bilden. Es ist damit zu erwarten, dass sich die Ergebnisse der T-IDLS-Spektren der mit Nickel-kontaminierten Probe bezüglich der jeweils verwendeten Passivierung unterscheiden.

Defekt	$E_C - E_t$ [meV]	$E_t - E_V$ [meV]	$k_\sigma$ [ ]	$\sigma_p$ [cm <sup>2</sup> ]	$\sigma_n$ [cm <sup>2</sup> ]	Methode	Quelle
$Ni_s^d$		150		$4,3 \times 10^{-15}$		DLTS	[SSLW99]
		160		$1,1 \times 10^{-14}$		DLTS	[Sch15]
		$170 \pm 10$		$1,1 \times 10^{-15}$		DLTS	[Gra00]
		$189 \pm 50$	3500	$1,1 \times 10^{-15}$	$4,0 \times 10^{-12}$	TDLS	[Rei05]
$Ni_s^a$	450				$1,4 \times 10^{-15}$	DLTS	[Sch15]
	$400 \pm 30$		0,7	$8,0 \times 10^{-17}$	$5,6 \times 10^{-17}$	TDLS	[Rei05]
	390				$2,2 \times 10^{-16}$	DLTS	[SSLW99]
	$390 \pm 20$				$5,6 \times 10^{-17}$	DLTS	[Gra00]
$Ni_s^{aa}$	$70 \pm 10$				$5,4 \times 10^{-18}$	DLTS	[Gra00]
	70				$1,2 \times 10^{-15}$	DLTS	[Sch15]
	80				$4,2 \times 10^{-14}$	DLTS	[SSLW99]
$Ni_2Si$	$580 \pm 60$					DLTS	[IW98]
$NiH$	170				$2,2 \times 10^{-15}$	DLTS	[Sch15]
$NiH$		490		$1,5 \times 10^{-14}$		DLTS	[Sch15]
$NiH?$		290		$4 \times 10^{-15}$		DLTS	[Sch15]
$NiH_2$	600				$2,7 \times 10^{-14}$	DLTS	[Sch15]
$NiH_2$		580		$2 \times 10^{-14}$		DLTS	[Sch15]
$NiH_3$		460		$2 \times 10^{-11}$		DLTS	[Sch15]

Tab. 5.10: Ergebnisse der Störstellenniveaus für unterschiedliche Defektkonfigurationen von Nickel nach verschiedenen Autoren.

#### 5.4.1. T-IDLS Spektrum der mit Nickel kontaminierten p-Typ Silicium Probe mit Siliciumoxid Passivierung

Die temperaturabhängigen Lebensdauermessungen der mit Nickel kontaminierten und mit  $SiO_x$  passivierten Siliciumprobe wurden mit dem BCT 400 durchgeführt. Dazu wurde die Probe zuerst auf eine Temperatur von 483 K aufgeheizt und anschließend bei ausgeschaltetem Heizer ohne definiertes Temperaturregime bis 323 K abgekühlt und dabei in Schritten von 10 K vermessen. Eine optische Dissoziation wurde nicht durchgeführt. Abbildung 5.24 a zeigt das T-IDLS-Spektrum der mit Nickel kontaminierten Siliciumprobe nach thermischer Oxidation. Die Temperatur wurde wiederum über die Farbe codiert. Die Punkte stellen die gemessene Lebensdauer dar, während die gestrichelten Linien das numerische Lebensdauermodell für einen tiefen und einen flachen Defekt wiedergeben.

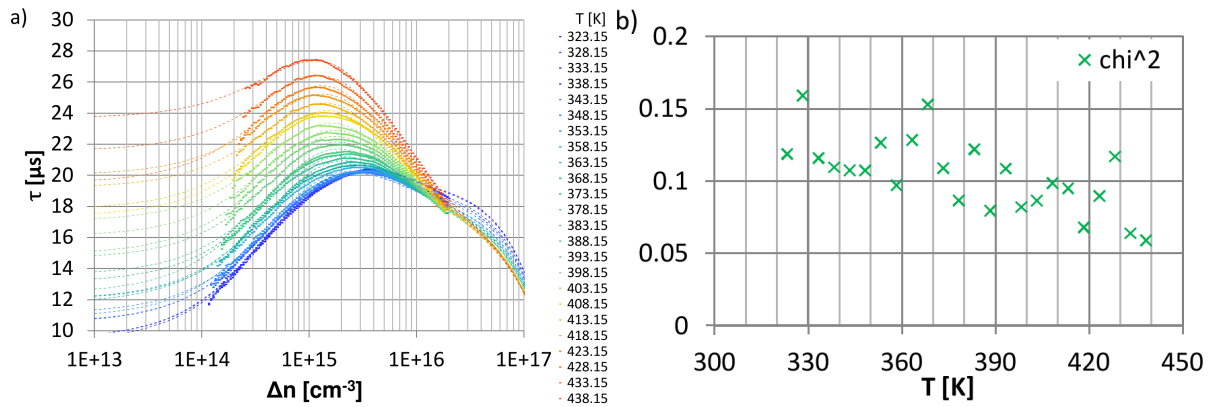


Abb. 5.24: a) T-IDLS Spektrum der mit Nickel kontaminierten p-Typ Probe nach thermischer Oxidation, b) Anpassungsgüte nach Simulation des Spektrums mit 2 Defekten

In Niederinjektion steigt die Lebensdauer mit der Temperatur kontinuierlich an, wie es von einem tiefen Defekt zu erwarten ist. Bei Injektionsdichten größer  $10^{15} \text{ cm}^{-3}$  steigt die Lebensdauer ebenfalls kontinuierlich mit der Temperatur an und lässt sich durch einen flachen Defekt modellieren. Bei Injektionsdichten größer  $10^{16} \text{ cm}^{-3}$  sinkt die Lebensdauer mit erhöhter Temperatur. Ein typisches Indiz für eine Defektreaktion lässt sich aus dem „elektrischen Fingerabdruck“ nicht erkennen. Das T-IDLS-Spektrum wurde mit einer 2 Defekt SRH-Anpassung modelliert. Abbildung 5.24 b zeigt die aus der Anpassungsprozedur resultierende Fitgüte  $\chi^2$ . Es lässt sich anhand der geringen  $\chi^2$ -Werte erkennen, dass sich das Spektrum, welches sich über einen Injektionsbereich von 2 Größenordnungen erstreckt, sehr gut mit 2 Defekten anpassen lässt.

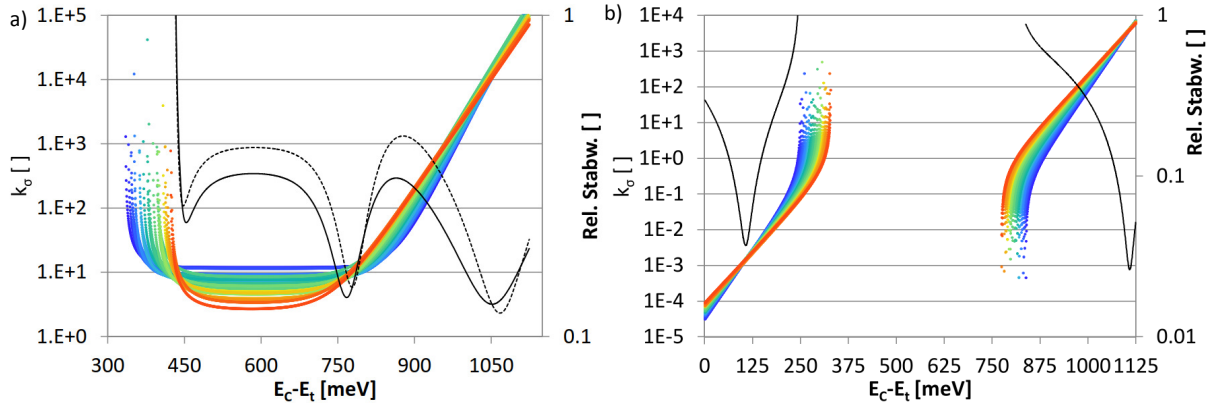


Abb. 5.25: a) Ergebnisse der Fitprozedur a:  $DPSS-k_\sigma$ -Diagramm des tiefen Defektes, b)  $DPSS-k_\sigma$ -Diagramm des flachen Defektes

Die Simulation der injektionsabhängigen Lebensdauer dieser Probe führt im  $DPSS-k_\sigma$ -Diagramm des tiefen Defektes zu einer eindeutigen Lösung bei einem Energie-Niveau von  $E_t - E_V = 357_{-54}^{+69} \text{ meV}$  und einem Symmetriefaktor von  $k_\sigma = 9,05_{-5,53}^{+26,6}$ . Ein unscharfer Schnittpunkt ergibt sich in diesem Diagramm bei einem Defektenergieniveau von  $E_C - E_t = 454_{-16}^{+147} \text{ meV}$  und einem Symmetriefaktor von  $k_\sigma = 7,24_{-5,53}^{+26,6}$ . Die schwarze gestrichelte Linie stellt dabei die relative Standardabweichung über den kompletten Temperaturbereich dar. Eine Trapping-Korrektur, wie sie bei der mit Eisen kontaminierten Probe durchgeführt wurde, bringt keine merkliche Veränderung. Das Minimum der relativen Standardabweichung (schwarze durchgezogene Kurven) für einen reduzierten Temperaturbereich von 383 bis 483 K ist nur leicht (5 meV) zur Bandmitte verschoben. Das leitungsbandnahe Niveau stimmt recht gut mit dem Niveau von  $Ni_s^a$  überein. Aufgrund der geringeren relativen Standardabweichung sollte das valenzbandnahe Niveau den tiefen Defekt am besten beschreiben. Jedoch sind keine Energieniveaus für das valenzbandnahe Niveau bekannt, weshalb die Auswertung für das leitungsbandnahe Niveau durchgeführt wird. Ein Pseudoschnittpunkt ergibt sich bei  $E_t - E_V < 100 \text{ meV}$ , dieser hat jedoch keine physikalische Relevanz. Das  $DPSS-k_\sigma$ -Diagramm des flachen Defektes hingegen hat zwei scharfe Schnittpunkte, einen bei  $E_C - E_t = 107 \pm 22 \text{ meV}$  und einen bei  $E_t - E_V = 16 \pm 16 \text{ meV}$ , welche sich kaum in der relativen Standardabweichung unterscheiden. Die zugehörigen Symmetriefaktoren unterscheiden sich je nach Bandhälfte mit  $k_\sigma = 1,49_{-0,83}^{+1,77} \times 10^{-3}$  für das Niveau nahe der Leitungsbandkante und  $k_\sigma = 4,19_{-1,91}^{+2,84} \times 10^3$  für das Niveau nahe der Valenzbandkante.

Aufgrund des hohen relativen Fehlers in der Energietiefe des Niveaus des flachen Defektes nahe des Valenzbandes, wurde die Auswertung der  $DPSS-\tau_{n0}$ -Diagramme mit dem Niveau nahe dem Leitungsband durchgeführt. Dieses Niveau ähnelt stark den Werten für  $Ni_s^{aa}$ . Abbildung 5.26 a zeigt das  $DPSS-\tau_{n0}$ -Diagramm des tiefen Defektes der mit Nickel kontaminierten Probe. Die schwarzen Linien deuten die Lage der aus dem  $DPSS-k_\sigma$ -Diagramm bestimmten Energieniveaus an. Es zeigt sich, dass die Einfangzeitkonstante für Majoritäten nur schwach von der Temperatur abhängig ist. Abbildung 5.26 b zeigt das zugehörige Diagramm für den

flachen Defekt. Die schwarzen Linien markieren, die aus den  $DPSS - k_\sigma$ -Diagramm bestimmten Energieniveaus. Auch bei dem flachen Defekt ist nahezu keine Temperaturabhängigkeit der Einfangzeitkonstante zu erkennen.

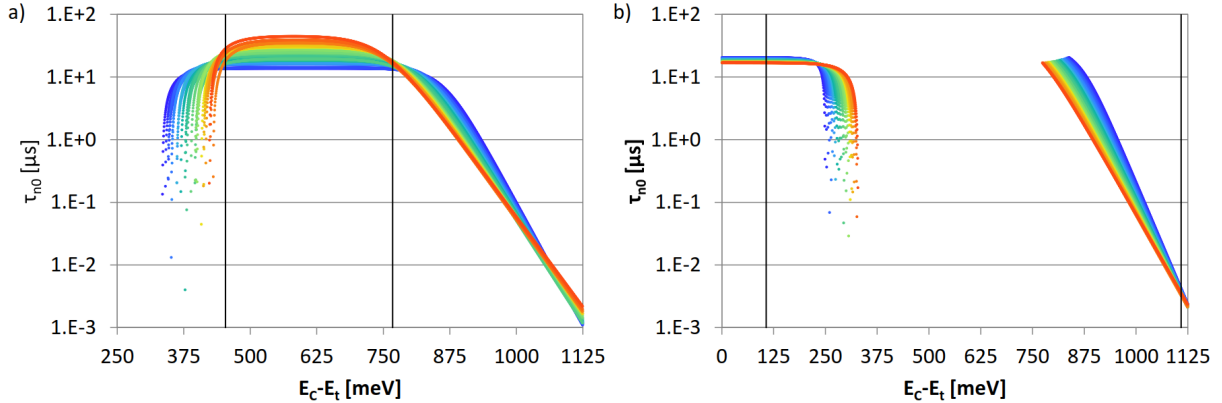


Abb. 5.26: Ergebnisse der Fitprozedur a)  $DPSS - \tau_{n0}$ -Diagramm des tiefen Defektes, b)  $DPSS - \tau_{n0}$ -Diagramm des flachen Defektes.

Die Auswertung der Defektkonzentrationen wurde über die berechneten Einfangzeitkonstanten  $\tau_{n0}$  für Minoritäten für die leitungsbandnahen Defektenergieniveaus von  $Ni_s^a$  und  $Ni_s^{aa}$  durchgeführt. Die  $\tau_{n0}$ -Werte für alle Defektenergieniveaus sind, wie in Abbildung 5.26 dargestellt, nahezu unabhängig von der Temperatur. Rechnet man die schwache Temperaturabhängigkeit der thermischen Geschwindigkeit  $v_{th}(T)$  heraus so ergibt sich das  $\sigma_n \cdot N_t$ -Diagramm, welches in Abbildung 5.27 a dargestellt ist. Die Auswertung der Defektkonzentrationen wurde mit den von Scheffler publizierte Absolutwerten für die Wirkungsquerschnitte durchgeführt, da sie die aktuellsten Daten darstellen. Es wurden dazu folgende Gleichungen verwendet.

$$\sigma_n = \sigma_\infty \cdot \exp\left(-\frac{E_\infty}{k_B T}\right) \quad (5.26)$$

$$N_t^* = \frac{1}{\tau_{n0}^* \cdot \sigma_n \cdot v_{th,e}} \quad (5.27)$$

Dabei wurde wieder die einfache Annahme getroffen, dass die Summe der Konzentrationen beider Defekte konstant ist und dass die Wirkungsquerschnitte über den Multiphonon-Emission-Prozess thermisch aktiviert sind. Das resultierende  $N_t(T) - Diagramm$  ist in 5.27 b dargestellt.

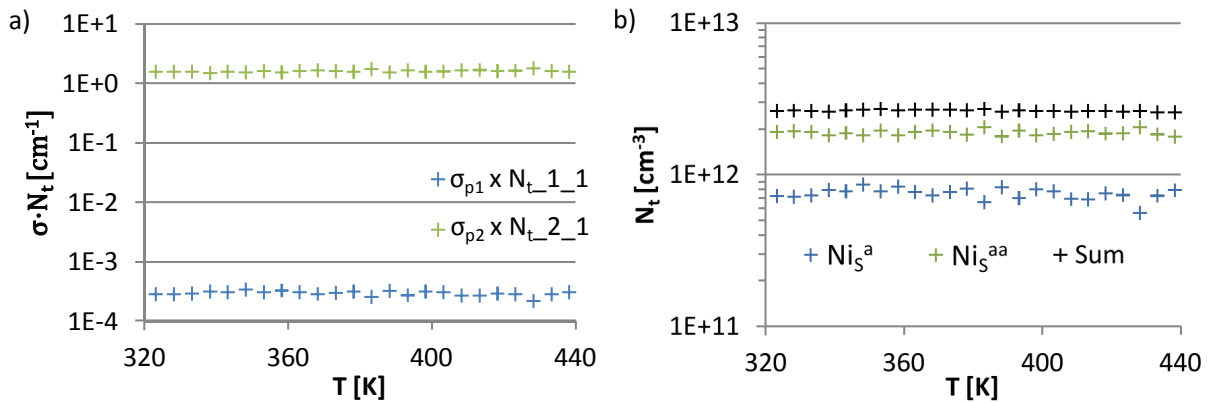


Abb. 5.27: Ergebnisse der Fitprozedur a)  $\sigma_n \cdot N_t - Diagramm$  der beiden Defektniveaus, b) zugehöriges  $N_t(T) - Diagramm$  der beiden Defektniveaus.

Wie aus dem  $\sigma_n \cdot N_t - \text{Diagramm}$  zu erwarten war, ändern sich die Konzentrationen der beiden Defektkonfigurationen kaum mit der Temperatur. Die aus der Anpassung resultierenden Aktivierungsenergien sind im Vergleich zum Fehler verschwindend gering. Das heißt, dass in der mit Nickel kontaminierten und mit  $\text{SiO}_x$  passivierten p-Typ Probe keine nachweisbare temperaturinduzierte Defektreaktion stattfindet. Dies ist überraschend, da laut Literatur der Unterschied zwischen  $N_i^a$  und  $N_i^{aa}$  der Ladungszustand des substitutionellen Nickels ist. Die Ergebnisse legen also nahe, dass sich das Konzentrationsverhältnis von unterschiedlich geladenem substitutionellem Nickel in der untersuchten Probe nahezu nicht mit der Temperatur ändert. Sie zeigen außerdem, dass die Wirkungsquerschnitte des substitutionellen Nickels nicht thermisch aktiviert sind.

#### 5.4.2. T-IDLS Spektrum der mit Nickel kontaminierten p-Typ Silicium Probe mit Siliciumnitrid Passivierung

Wie in Abschnitt 3.1 erläutert, wurde die Oberfläche der Probe mit Siliciumoxidpassivierung rückgeätzt und mit einem qualitativ hochwertigem Siliciumnitrid beschichtet. Die Messung der Lebensdauer wurde wiederum mit dem BCT 400 durchgeführt. Dazu wurde die Probe auf eine Temperatur von  $493\text{ K}$  aufgeheizt und anschließend ohne definiertes Temperaturregime bis zu einer Temperatur von  $297\text{ K}$  abgekühlt. Dabei wurde die Probe in Schritten von  $10\text{ K}$  vermessen. Abbildung 5.28 a zeigt die gemessene Temperatur- und Injektionsabhängige Lebensdauer für die mit Nickel kontaminierte und mit  $\text{SiN}_x$  passivierte Probe. Wie auch beim vorherigen T-IDLS-Spektrum sind die gemessenen Lebensdauern durch Punkte dargestellt, wobei die Temperatur wieder über die Farbe codiert ist. Es fällt auf, dass die Lebensdauer im Vergleich zur Messung mit  $\text{SiO}_x$  Passivierung deutlich erhöht ist. Der generelle Trend, dass sich die Lebensdauer sowohl in Hochinjektion als auch in Niederinjektion stetig mit der Temperatur erhöht bleibt nach der  $\text{SiN}_x$  Passivierung erhalten. Jedoch hat sich die charakteristische Form des „elektrischen Fingerabdrucks“ geändert. Ebenfalls geändert hat sich der messbare Injektionsbereich. Da die Lebensdauer höher ist, kann nach  $\Delta n = \tau \times G$  bei gleicher Lichtintensität eine höhere Injektionsdichte erreicht werden. Andererseits wurde eine verbesserte Blitzlampensteuerung verwendet. Dadurch klingt die Lichtintensität des Lichtpulses länger ab, wodurch Messungen bei einer geringeren Lichtintensität und damit geringen Injektionsdichte durchgeführt werden konnten. Beide Effekte ermöglichten es, mittels QSS-PC ein T-IDLS-Spektrum aufzunehmen, welches sich über mehr als drei Größenordnungen in der Injektionsdichte erstreckt.

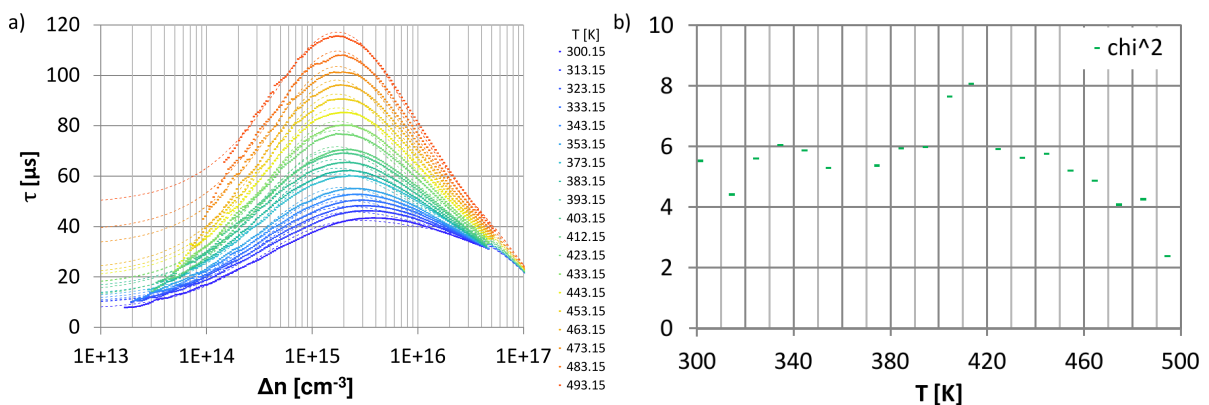


Abb. 5.28: a) T-IDLS Spektrum der mit Nickel kontaminierten Probe nach  $\text{SiN}_x$  Passivierung, b) Anpassungsgüte nach Simulation des Spektrums mit 2 Defekten.

Die Ergebnisse einer Zwei-Defekt-Anpassung, bestehend aus einem tiefen und einem flachen Defekt, sind durch gestrichelte Linien dargestellt, wobei die Zuordnung zur Messkurve durch die gleiche Farbe erfolgt. In Abbildung 5.28 b ist die Anpassungsgüte für diese Zwei-Defekt-

Anpassung als Funktion der Temperatur dargestellt. Es fällt auf, dass die Anpassungsgüte um mindestens eine Größenordnung schlechter ist. Eine Einflussgröße für die Anpassungsgüte ist der bei der Messung mit Siliciumnitrid deutlich erhöhte Injektionsbereich. Die Modellierung einer Lebensdauerkurve mit einem großen Injektionsbereich scheint generell schwieriger. Die folgende Auswertung, zeigt die Ergebnisse der beschriebenen Zwei-Defekt-Anpassung.

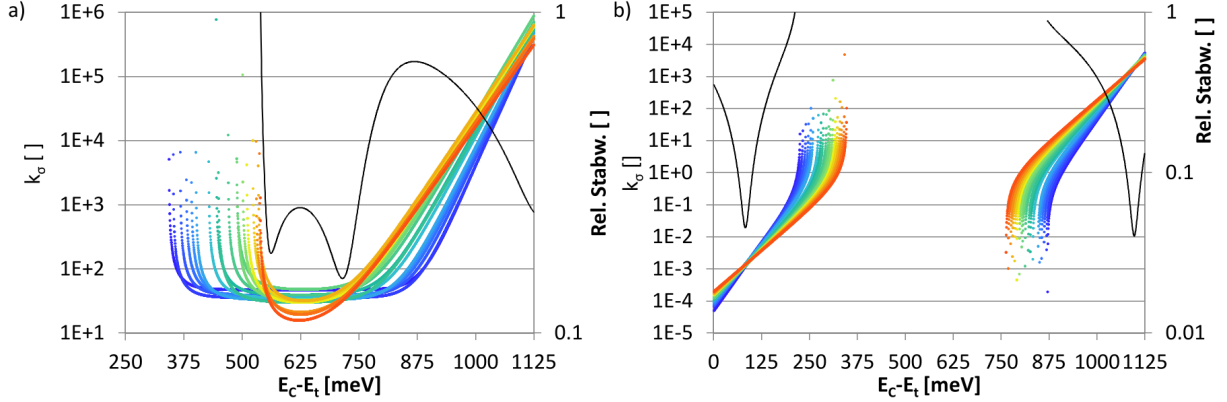


Abb. 5.29: Ergebnisse der Fitprozedur a)  $DPSS - k_\sigma$ -Diagramm des tiefen Defektes, b)  $DPSS - k_\sigma$ -Diagramm des flachen Defektes.

Abbildung 5.29 a zeigt das resultierende  $DPSS - k_\sigma$ -Diagramm für den tiefen Defekt. Es lassen sich zwei äquivalente Schnittpunkte nahe der Bandmitte durch die Minimas der relativen Standardabweichung (durchgezogene schwarze Linien) ausfindig machen. Der erste Schnittpunkt liegt bei einem Energieniveau von  $E_C - E_t = 562^{+62}_{-16} \text{ meV}$  und einem Symmetriefaktor von  $k_\sigma = 38,8^{+59,8}_{-22,2}$ , der zweite bei einem Energieniveau von  $E_t - E_V = 410^{+90}_{-42} \text{ meV}$  und einem Symmetriefaktor von  $k_\sigma = 40,5^{+49,3}_{-24,6}$ . Das Leitungsbandnahe Niveau lässt sich entweder als Nickelpräzipitat  $Ni_2Si$  oder aber als Nickel Wasserstoff-Komplex  $NiH_2$  identifizieren. Das Valenzbandnahe Niveau kann entweder als  $NiH_3$  oder  $NiH$  identifiziert werden. Eine Trapping-Korrektur wurde ebenfalls versucht, die relative Standardabweichung für einen reduzierten Temperaturbereich von  $383 \text{ K}$  bis  $493 \text{ K}$  ist jedoch aufgrund der starken Streuung der Defektparameter erhöht. Möglich ist auch die Überlagerung mehrerer tiefer Defekte in Niedereinjektion. Die Defektidentifikation für den tiefen Defekt ist deshalb durch die starke Streuung der Defektparameter limitiert. Abbildung 5.29 b zeigt das  $DPSS - k_\sigma$ -Diagramm für den flachen Defekt. Es ergeben sich zwei Lösungen nahe den Bandkanten. In der Minoritätsbandhälfte bei  $E_C - E_t = 83 \pm 16 \text{ meV}$  und einem Symmetriefaktor von  $k_\sigma = 1,39^{+1,26}_{-0,75} \times 10^{-3}$ .

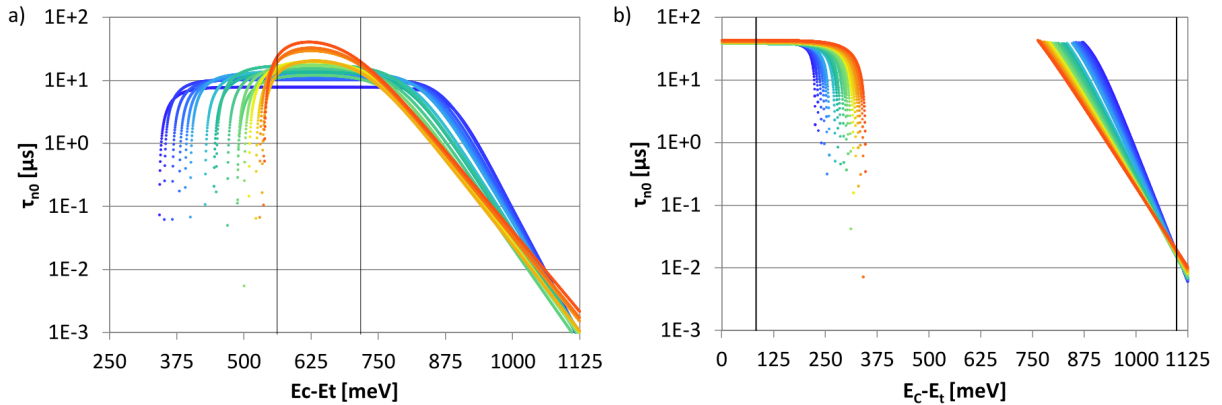


Abb. 5.30: Ergebnisse der Fitprozedur a)  $DPSS - \tau_{n0}$ -Diagramm des tiefen Defektes, b)  $DPSS - \tau_{n0}$ -Diagramm des flachen Defektes.

Innerhalb der Majoritätsbandhälfte findet sich eine Lösung bei  $E_t - E_V = 27 \pm 16 \text{ meV}$  und  $k_\sigma = 1,98_{-0,94}^{+1,48} \times 10^3$ . Beide Lösungen sind scharf und die Positionen innerhalb der Bandlücke, sowie die Werte der relativen Standardabweichung sind ähnlich wie bei der Messung Siliciumoxidpassivierung. Dies legt den Schluss nahe, dass die Defektkonfiguration des flachen Defektes wie bei der Messung mit  $\text{SiO}_x$ -Passivierung substitutionelles Nickel  $\text{Ni}_s^{aa}$  ist. Abbildung 5.30 a zeigt das resultierende  $DPSS - \tau_{n0}$ -Diagramm für den tiefen Defekt, die zuvor im  $DPSS - k_\sigma$ -Diagramm ermittelten Energieniveaus sind durch schwarze Linien gekennzeichnet. Es zeigt sich, dass für den tiefen Defekt eine schwache Temperaturabhängigkeit für die Einfangzeitkonstante besteht. Abbildung 5.30 b zeigt das entsprechende Diagramm für den flachen Defekt. Die ermittelten Energieniveaus sind wieder durch schwarze Linien angedeutet. Das daraus berechnete  $\sigma_p \times N_t$ -Diagramm ist in Abbildung 5.31 a zu sehen.

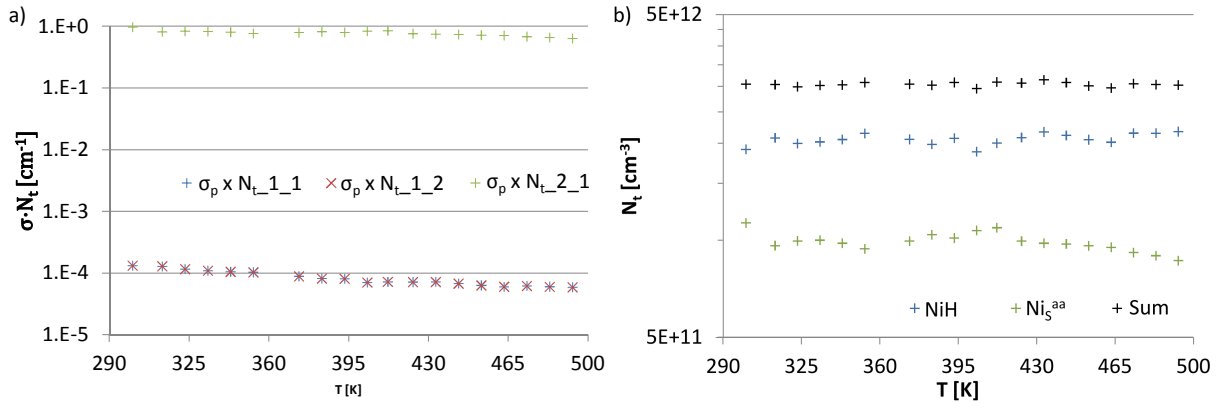


Abb. 5.31: a) berechnete temperaturabhängige Produkte von Defektkonzentration  $N_t(T)$  und Wirkungsquerschnitt für Majoritäten  $\sigma_p(T)$ . b)  $N_t(T)$ -Diagramm der mit Nickel kontaminierten und  $\text{SiN}_x$  passivierten p-Typ Silicium-Probe. Die Defektkonzentration beider Defekte ändert sich nahezu nicht.

Wie bei den Messungen mit  $\text{SiO}_x$ Passivierung ist die Temperaturabhängigkeit der Einfangzeitkonstante für den flachen Defekt sehr schwach, wodurch sich auch im  $\sigma_p \times N_t$ -Diagramm nur eine schwache Temperaturabhängigkeit ergibt. Mittels Gleichung 5.26 und 5.27 lässt sich wiederum die temperaturabhängige Defektkonzentration beider Defekte ermitteln. Das resultierende  $N_t(T)$ -Diagramm ist in Abbildung 5.31 dargestellt. Es zeigt sich, dass sich beide Defektkonzentrationen nahezu nicht ändern.

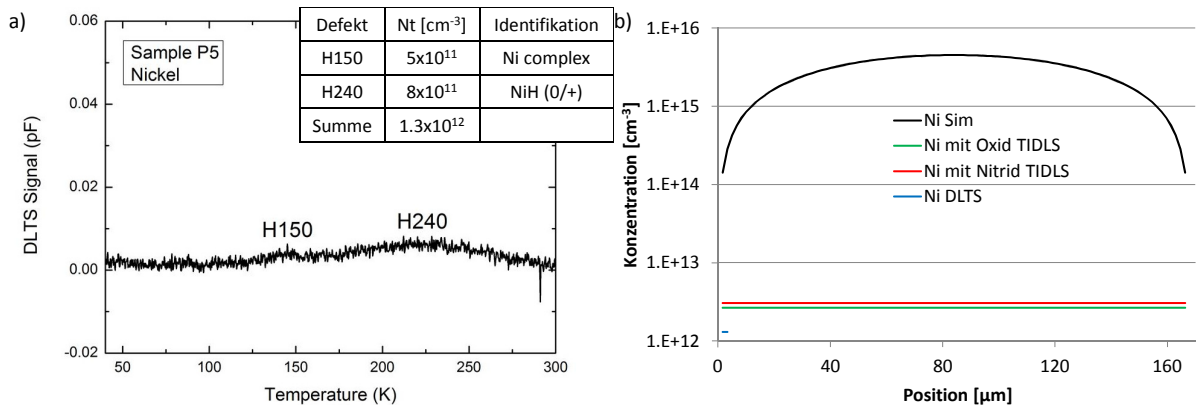


Abb. 5.32: a) DLTS-Signal für die mit Nickel kontaminierte p-Typ Silicium Probe. Es lassen sich zwei elektrisch aktive Defekte ausmachen. Diese lassen sich eindeutig Nickelverbindungen zuordnen. b) berechnetes Konzentrationsprofil nach thermischer Oxidation schwarz, sowie Messwerte (Mittelwerte) für die Nickelkonzentration durch TIDLs Messungen nach thermischer Oxidation, sowie durch DLTS nach Nitridabscheidung. Die hohe erwartete Volumenkonzentration konnte nicht nachgewiesen werden.



Die mit Nickel kontaminierte p-Typ Probe wurde nach Nitridabscheidung ebenfalls für DLTS Messungen präpariert. Die Messungen wurden an der TU Dresden durchgeführt. Die Ergebnisse sind in Abbildung 5.32 a dargestellt. Es konnten zwei rekombinationsaktive Defekte nachgewiesen werden (H150 und H240), welche sich eindeutig Nickel zuordnen lassen. Diese Ergebnisse legen nahe, dass es sich bei dem tiefen Defekt um  $NiH$  handelt. Da keine Linie bei  $T = 50 K$  detektiert wurde, kann davon ausgegangen werden, dass keine Eisenkontamination stattgefunden hat. Folgende Tabelle fasst die Ergebnisse der T-IDLS-Untersuchung der mit Nickel-kontaminierten Probe mit  $SiN_x$  und  $SiO_x$ - Passivierung zusammen. Abbildung 5.32 b zeigt die aus Kapitel 3.1 berechnete maximal zuerwartende Nickelkonzentration als Funktion der Probentiefe (schwarze Linie). Ebenfalls eingezeichnet sind die gemessenen Konzentrationen (Mittelwerte) durch TIDLS Messung nach thermischer Oxidation und nach Nitridabscheidung, sowie durch DLTS Messungen nach Nitridabscheidung. Wie auch bei den vorherigen Konzentrationsvergleichen ist die mittels DLTS bestimmte Konzentration leicht niedriger als die durch TIDLS bestimmte. Dies kann wiederum darauf zurück geführt werden, dass DLTS eine oberflächensensitive Methode ist. Dies ist in Abbildung 5.32 b daran zu erkennen, dass die blaue Linie nur bis ungefähr  $3 \mu m$  in die Probe hineinreicht. Wie auch bei der mit Kupfer kontaminierten Probe, ist die berechnete Konzentration deutlich höher als die gemessene. Da es aus der Literatur bekannt ist, dass bei hohen Nickelkonzentrationen massive Präzipitatbildung stattfindet, ist dieser hohe Unterschied nicht verwunderlich. Ebenfalls kann an eine Homogenisierung des Konzentrationsprofils durch den Temperatureintrag bei der Nitridabscheidung auftreten. Tabelle 5.11 zeigt die durch Lebensdauerspektroskopie erhaltenen Ergebnisse für die Defektparametrisierung der unterschiedlichen Defektkonfigurationen von Nickel.

Defektniveau	$E_C-E_t$	$E_t-E_V$	$k_\sigma^*$	$\sigma_p$	$\sigma_n^*$	$E_\infty$
	[meV]	[meV]	[ ]	[ $cm^2$ ]	[ $cm^2$ ]	[meV]
mit $SiO_x$						
$Ni_s^a$	$454_{-16}^{+147}$		$7,2_{-5,5}^{+26,6}$	$1,4 \times 10^{-15}$	$1,0_{-0,76}^{+3,7} \times 10^{-14}$	$0 \pm 3$
$Ni_s^{aa}$	$107 \pm 22$		$1,5_{-0,83}^{+1,77} \times 10^{-3}$	$1,2 \times 10^{-15}$	$1,8_{-1,0}^{+2,12} \times 10^{-17}$	$0 \pm 3$
mit $SiN_x$						
$NiH$		$410_{-42}^{+90}$	$40,5_{-24,6}^{+49,3}$	$1,5 \times 10^{-14}$	$6,0_{-3,7}^{+7,4} \times 10^{-13}$	$0 \pm 3$
$Ni_s^{aa}$	$83 \pm 16$		$1,4_{-0,75}^{+1,26} \times 10^{-3}$	$1,2 \times 10^{-15}$	$1,7_{-0,9}^{+1,5} \times 10^{-17}$	$0 \pm 3$

Tab. 5.11: Ergebnisse der Auswertung des T-IDLS Spektrums der mit mit Nickel kontaminierten p-Typ Probe, mit  $SiO_x$ - und  $SiN_x$ -Passivierung.

#### 5.4.3. T-IDLS Spektrum der mit Nickel kontaminierten n-Typ Silicium Probe mit Siliciumnitrid Passivierung

Die temperaturabhängigen Lebensdauermessungen an der mit Nickel kontaminierten n-Typ Siliciumprobe wurden mit dem WCT 120 durchgeführt. Dazu wurde die Probe auf eine Temperatur von  $430 K$  aufgeheizt und dann gezielt in  $20 K$  Schritten abgekühlt. Bei jeder angefahrenen Temperatur wurde eine gewisse Zeit gewartet bis die zeitliche Schwankung des Temperatursensors über einige Minuten kleiner  $\pm 1 K$  war. War der stabile Zustand erreicht, so wurde die Messung durchgeführt. Eine optische Dissoziation der Probe wurde nicht durchgeführt. Abbildung 5.33 a zeigt das resultierende T-IDLS-Spektrum für die ähnlich zu den p-Typ Proben prozessierte n-Typ Probe. Die Messwerte sind durch Punkte dargestellt, während die Farbe die Temperatur codiert. Es zeigt sich, dass externes Trapping im Gegensatz zu den p-Typ Proben nahezu nicht auftritt, da die Lebensdauer zuverlässig bis zu einer Injektionsdichte von  $10^{11} cm^{-3}$  gemessen werden kann. Dies war dadurch möglich, da der Lichtpuls am WCT 120 auf sehr geringe Lichtintensitäten abklingt. Dadurch ergibt sich ein recht großer messbarer Injektionsbereich von über 4 Größenordnungen. Der Anstieg in Niederinjektion ist sehr steil, was auf die Anwesen-

heit eines asymmetrischen Defektes, bzw. einer Inversionsschicht hinweist. Im Injektionsbereich zwischen  $10^{13}$  bis  $10^{14} \text{ cm}^{-3}$  tritt starkes Rauschen auf. Da sich in diesem Bereich auch der Anstieg der Lebensdauer stark ändert, besteht die Vermutung dass die durch Trapping emittierten Ladungsträger durch den asymmetrischen Defekt, bzw. durch die Inversionsschicht eingefangen werden und rekombinieren. Da die Prozesse der thermischen Emission von Ladungsträgern aus Trappingzentren und deren Einfang konkurrieren, kann dies das starke Rauschen erklären. In Hochinjektion ist die gemessene Lebensdauerkurve nicht verrauscht.

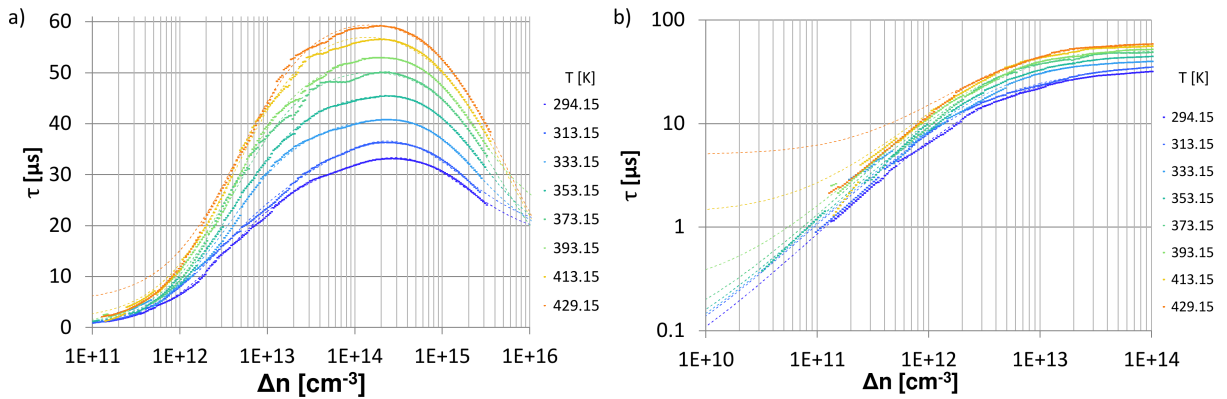


Abb. 5.33: a) T-IDLS Spektrum der mit Nickel kontaminierten Probe nach  $\text{SiN}_x$  Passivierung. b) Fitgüte nach Simulation des Spektrums mit 3 Defekten.

Das Spektrum wurde mit einem 3-Defekt-Fit bestehend aus einem tiefen Defekt, einem flachen Defekt und einem asymmetrischen Defekt simuliert. Die resultierenden Lebensdauerkurven sind in Abbildung 5.33 a als gestrichelte Linien dargestellt. Es zeigt sich, dass der generelle Verlauf der Lebensdauerkurve gut mit 3 Defekten modellieren lässt. Es fällt jedoch auf, dass der steile Anstieg in Niederinjektion bei hohen Temperaturen nicht durch einen asymmetrischen Defekt beschreiben lässt. Abbildung 5.33 b zeigt den Niederinjektionsteil des T-IDLS-Spektrums in doppelt-logarithmischer Darstellung. In Niederinjektion steigt die gemessene Lebensdauer, unabhängig von der Temperatur um eine Größenordnung pro Größenordnung in der Injektionsdichte an.

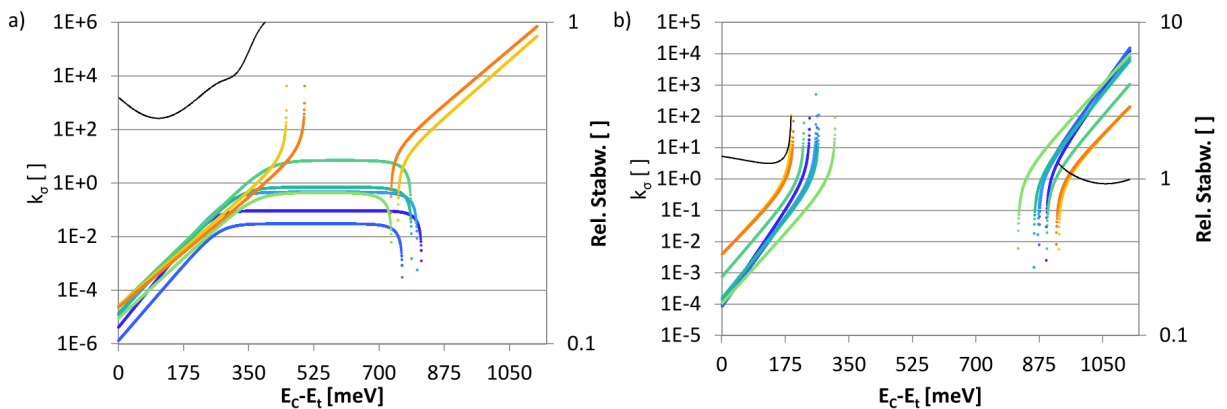


Abb. 5.34: Ergebnisse der Fitprozedur a)  $DPSS - k_\sigma$ -Diagramm des tiefen Defektes, b)  $DPSS - k_\sigma$ -Diagramm des flachen Defektes.

Da auch asymmetrische Defekte mit einem großen Einfangquerschnitt für Minoritäten thermisch aktiviert ist, müsste dann, wie durch die Anpassungsergebnisse angedeutet, die Lebensdauer unter Niederinjektion stark mit der Temperatur ansteigen. Dies lässt darauf schließen, dass es sich bei dem dominanten Rekombinationskanal in Niederinjektion um eine Inversionsschicht

handelt. Der Lebensdauererlauf unter Hochinjektion ließ sich dagegen sehr gut anpassen. Es sei angemerkt, dass der tiefe Defekt in der Simulation nicht den dominanten Rekombinationskanal darstellte. Abbildung 5.34 a zeigt das resultierende  $DPSS - k_\sigma$ -Diagramm des tiefen Defektes. Es lässt sich kein klarer Schnittpunkt in diesem Diagramm erkennen, wodurch die Defektidentifikation des tiefen Defektes scheitert. Dies kann daran liegen, dass der tiefe Defekt durch den flachen Defekt und den Rekombinationskanal der Inversionsschicht überlagert ist. Abbildung 5.34 b zeigt das  $DPSS - k_\sigma$ -Diagramm des flachen Defektes. Es ergeben sich auch hier keine Schnittpunkte.

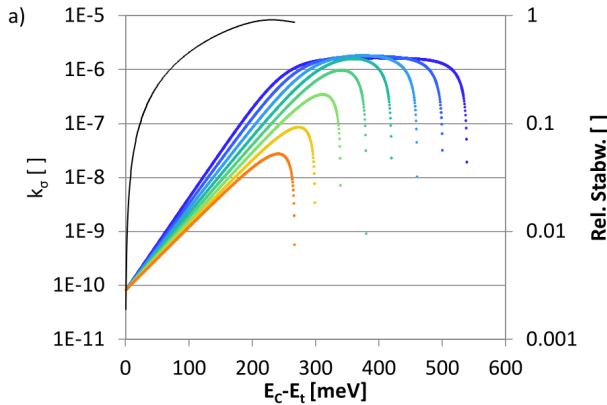


Abb. 5.35:  $DPSS - k_\sigma$ -Diagramm des asymmetrischen Defektes.

Abbildung 5.35 zeigt das aus der Simulation resultierende  $DPSS - k_\sigma$ -Diagramm für den asymmetrischen Defekt. Es ist deutlich zu erkennen, dass der Energiebereich, in welchem Lösungen der SRH-Gleichung möglich wären mit der Temperatur abnimmt. Jedoch ergibt sich nur ein Schnittpunkt exakt bei der Leitungsbandkante mit einem Symmetriefaktor von  $k_\sigma = 10^{-10}$ . Dieses Niveau kann jedoch die starke Rekombinationsaktivität unter Niederinjektion nicht erklären. Es ist vielmehr ein Artefakt, welches sich durch den Versuch ergibt den steilen Anstieg der Lebensdauerkurve in Niederinjektion mit der SRH-Gleichung zu simulieren. Da bei erhöhten Temperaturen die Konzentration an Minoritäten erhöht ist, müsste für den Fall dass ein asymmetrischer Defekt die Lebensdauer unter Niederinjektion limitiert, die Lebensdauer unter Niederinjektion stark ansteigen. Dies ist in Abbildung 5.33 durch die rote gestrichelte Linie angedeutet. Da die experimentellen Ergebnisse dieses Verhalten nicht bestätigen, ist es eher wahrscheinlich, dass die Prozessierung des n-Typ Wafers mit einem Siliciumnitrid zu einer Inversionsschicht an der Oberfläche geführt hat, da das Rekombinationsverhalten über eine Inversionsschicht schwächer von der Temperatur abhängig ist.

## 6. Zusammenfassung und Ausblick

Es konnte gezeigt werden, dass die Lebensdauerspektroskopie eine extrem sensitive Methode der Materialcharakterisierung von Halbleitern ist. Gerade die gemeinsame Variation von Injektionsdichte und Temperatur bei der Temperatur- und Injektionsabhängigen Lebensdauerspektroskopie (T-IDLS) führt zu einer großen Menge an Information über eine Probe, welche bei der Materialcharakterisierung hilfreich sein kann. Dabei wurde der Ansatz verfolgt, einen möglichst großen Wertebereich von Temperatur und Injektionsdichte auszuwerten. Dies bringt einerseits eine höhere statistische Genauigkeit bei der Bestimmung des Energieniveaus der rekombinationsaktiven Defekte und andererseits ermöglicht es erst die thermodynamische Auswertung von Defektreaktionen. Grundlage der Auswertung eines Lebensdauerspektrums stellt das verwendete Ladungsträgergleichgewicht dar. Bei der Auswertung der Lebensdauer nach der Shockley-Read-Hall-Gleichung mittels DPSS-Diagrammen (Defect Parameter Solution Surface) konnte eine leichte Verbesserung der Anpassungsergebnisse durch Anwendung eines Modells für die thermischen effektiven Massen  $m_{th,e/h}^*$  erreicht werden. Eine deutliche Verbesserung der Lösungen der DPSS-Diagramme konnte durch die Anwendung einer neuartigen Trapping-Korrektur erreicht werden. Im Gegensatz zu herkömmlichen Methoden, werden bei dieser Methode die experimentell bestimmten Messwerte verwendet, sodass die zugrunde liegende Physik des Trapping-Prozesses besser abgebildet wird. Die Einsicht, dass leitfähigkeitsbasierte Methoden immer durch Trapping beeinflusst sind führte zu der Auswertung der Einfangzeitkonstante für Majoritäten, um die Defektkonzentration zu bestimmen. Diese Methode hat den Vorteil, dass die Lebensdauer unter Hochinjektion, und damit auch die Einfangzeitkonstante für Majoritäten, kaum durch Trapping beeinflusst wird. Den Hinweis darauf lieferten Vergleichsmessungen zwischen Photolumineszenz und Photoleitfähigkeitsmessungen [BTSR06]. Mit diesen Methoden war es möglich, aus den so erhaltenen DPSS-Diagrammen Defektkonzentrationen zu berechnen. Es zeigte sich für die mit Kupfer und die mit Eisen kontaminierten Proben, dass die Defektkonzentrationen nicht konstant sind. Vielmehr finden in kontaminierten Proben häufig Defektreaktionen statt, welche sich thermodynamisch und kinetisch beschreiben lassen. Diese Defektreaktionen sind für Eisen sehr gut untersucht. Es zeigte sich, dass sich das Defektenergieniveau und die Defektkonzentration von Eisen sehr gut bestimmen ließen. Ein Vergleich zu DLTS Messungen zeigte, dass die gemessenen Konzentration vergleichbar sind, wenn man berücksichtigt, dass DLTS eine oberflächensensitive Methode ist. Für die mit Kupfer kontaminierten Proben konnten gute Ergebnisse bei Passivierung mit thermischen Oxid generiert werden. Die Energieniveaus stimmen sehr gut mit den publizierten Werten überein. Jedoch hatte sich nach Abscheidung eines Siliciumnitrids gezeigt, dass die Proben mit Eisen kontaminiert waren. DLTS Messungen konnten diesen Befund nicht widerlegen. Dies zeigt zugleich einen Nachteil der Methode, da sich immer nur der dominante rekombinationsaktive Defekt nachweisen lässt. Der zweite Nachteil der Methode ist, dass man zur Bestimmung der Defektkonzentration eine zweite Methode, wie zum Beispiel DLTS, benötigt um die Wirkungsquerschnitte der Defekte zu bestimmen. Im Gegensatz zu DLTS ist diese Methode auch sensitiv für Minoritäten, wodurch sich das Verhältnis der Einfangquerschnitte bestimmen lässt. Bemerkenswert sind die Ergebnisse für die mit Nickel kontaminierten Proben. Obwohl sich die unterschiedlichen nachgewiesenen Defektkonfigurationen von Nickel nur durch den Ladungszustand unterscheiden, sind diese thermodynamisch stabil. Die Zugabe von Wasserstoff durch Abscheidung einer Siliciumnitridschicht nach dem Rückätzen der Oxidschicht führte zu einer Defektreaktion unter Bildung von Nickel-Wasserstoff-Komplexen. Diese Komplexe waren ebenfalls thermodynamisch stabil. Daher eignete sich Nickel besonders für die Validierung der verwendeten Modelle. Es zeigte sich, dass durch das Trapping bei leitfähigkeitsbasierten Lebensdauerermessungen nur ein anscheinender Symmetriefaktor bestimmt werden kann. Dieses Problem kann durch die Anwendung lumineszenzbasierter Methoden gelöst werden. Interessant wäre auch die gleichzeitige Messung mittels lumineszenz- und leitfähigkeitsbasierten Methoden. Da die Photolumineszenz insensitive für Trapping ist, könnte man mit einem geeigneten Modell die Differenz in den injektionsabhängigen Lebensdauern nach beiden Methoden modellieren, um

die Trapping-Zentren zu charakterisieren. Für die mit Eisen kontaminierte Probe zum Beispiel konnte gezeigt werden, dass ab einer gewissen Temperatur das Trapping nicht mehr stärker wird, was bedeutet dass alle Trapping Zentren thermisch aktiviert sind.

Die Lebensdauerspektroskopie kann zu einer sehr gefragten Methode werden, da sich gerade die Defektreaktionen, in dem für Solarmodule relevanten Temperaturbereich von 300 bis 350 K, nachweisen und quantifizieren lassen, welche die elektrischen Eigenschaften des Bauteils limitieren. Ebenfalls können mit der in dieser Arbeit vorgestellten Methode die Thermodynamik und Kinetik von Defektreaktionen in Siliciumsolarzellen berechnet werden, was eine Abschätzung für die zu erwartende Degradation einer Solarzelle ermöglicht. Tabelle 6.1 fasst die wahrscheinlichsten Parametrisierungen für die Defekte in den untersuchten Proben zusammen.

Defekt	$E_C-E_t$ [meV]	$E_t-E_V$ [meV]	$k_\sigma^*$ [ ]	$\sigma_p$ [cm <sup>2</sup> ]	$\sigma_n^*$ [cm <sup>2</sup> ]	$E_\infty$ [meV]
mit $SiN_x$						
$Fe_i$		$390_{-25}^{+25}$	$51 \pm 5$	$7,0 \times 10^{-17}$	$3,6_{-0,35}^{+0,35} \times 10^{-15}$	$44 \pm 3$
$FeB$	$260_{-0,5}^{+0,5}$		$0,1_{-0,025}^{+0,025}$	$1,1_{-0,1}^{+0,1} \times 10^{-14}$	$1,1_{-0,28}^{+0,28} \times 10^{-15}$	$0,15 \pm 3$
mit $SiO_x$						
$Cu_s^{-/0}$		$440_{-84}^{+80}$	$6,5_{-2,8}^{+18,3}$	$2,0 \times 10^{-15}$	$1,3_{-0,56}^{+3,65} \times 10^{-14}$	$16 \pm 3$
$Cu_s^{-/-}$	$177_{-78}^{+50}$		$5,7_{-5,5}^{+54,6} \times 10^{-3}$	$3,9 \times 10^{-12}$	$2,2_{-1,42}^{+21,3} \times 10^{-14}$	$148 \pm 3$
mit $SiO_x$						
$Ni_s^a$	$454_{-16}^{+147}$		$7,2_{-5,5}^{+26,6}$	$1,4 \times 10^{-15}$	$1,0_{-0,76}^{+3,7} \times 10^{-14}$	$0 \pm 3$
$Ni_s^{aa}$	$107_{-22}^{+22}$		$1,5_{-0,83}^{+1,77} \times 10^{-3}$	$1,2 \times 10^{-15}$	$1,8_{-1,0}^{+2,12} \times 10^{-18}$	$0 \pm 3$
mit $SiN_x$						
$NiH$		$410_{-42}^{+90}$	$40,5_{-24,6}^{+49,3}$	$1,5 \times 10^{-14}$	$6,0_{-3,7}^{+7,4} \times 10^{-13}$	$0 \pm 3$
$Ni_s^{aa}$	$83_{-16}^{+16}$		$1,4_{-0,75}^{+1,26} \times 10^{-3}$	$1,2 \times 10^{-15}$	$1,7_{-0,9}^{+1,5} \times 10^{-18}$	$0 \pm 3$

Tab. 6.1: Ergebnisse der T-IDLS Untersuchungen der unterschiedlich kontaminierten Proben.

Abschließend wurden mittels der Software PC1Dmod6.2 [HG16] Simulationen der Solarzelleffizienz einer PERC Solarzelle [BZMF13] bei unterschiedlichen Defektkonzentrationen mit den in dieser Arbeit ermittelten Defektparametern durchgeführt. Folgende Diagramme zeigen deren Ergebnis.

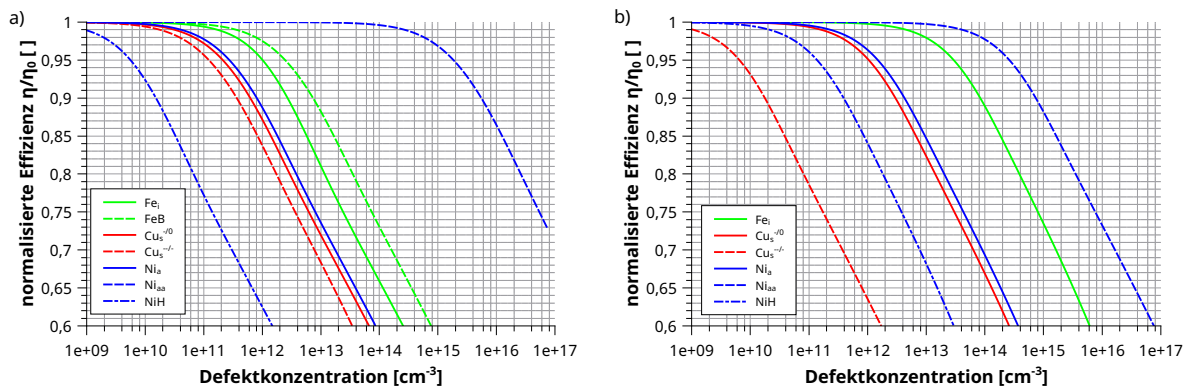


Abb. 6.1: simulierte, normalisierte Solarzelleffizienz in Abhängigkeit der Defektkonzentration für a) p-Typ und b) n-Typ Silicium.

In beiden Diagrammen sinkt die Solarzelleffizienz bei steigender Defektkonzentration. In Abbildung 6.1 a sind die Ergebnisse für p-Typ Silicium dargestellt. Hierbei ist  $Fe_i$  rekombinationsaktiver als  $FeB$ . Beide Konfigurationen an substitutionellem Kupfer  $Cu_s^{-/0}$  und  $Cu_s^{-/-}$  sind

rekombinationsaktiver als die des Eisens. Nickel spielt eine ambivalente Rolle. Während Nickel-Akzeptoren  $Ni_a$  in der Rekombinationsaktivität zwischen Kupfer und Eisen liegen, so haben die Nickel-Doppelakzeptoren  $Ni_{aa}$  einen deutlich geringeren Einfluss auf die Solarzelleffizienz. Die  $NiH$  Komplexe hingegen senken drastisch die Solarzelleffizienz. In n-Typ Material (Abbildung 6.1 b) sieht das Verhalten anders aus. Hier sind die  $Cu_s^{--/-}$  Defekte am rekombinationsaktivsten gefolgt von den  $NiH$  Komplexen. Nickel-Akzeptoren  $Ni_a$  und  $Cu_s^{-/0}$  sind die am nächst rekombinationsaktivsten Spezies gefolgt von  $Fe_i$  und schließlich den Nickel Doppel-Akzeptoren  $Ni_{aa}$ .

## 7. Referenzen

### Literatur

- [AP09] ATKINS, P. ; PAULA, J. de: *Physical Chemistry*. 9th. W. H. Freeman, 2009
- [Bat01] BATEMAN, et. a.: High quality ion implanted boron emitters in an interdigitated back contact solar cell with 20In: *Energy Procedia* Bd. 8, Elsevier, 2001, S. 509–514
- [Ber98] BERGE, C.: *Vergleich transienter und quasistatischer Photoleitfähigkeitsmessungen an kristallinem Silicium*, Universität Hannover, Diplomarbeit, 1998
- [BG13] BREYER, C. ; GERLACH, A.: Global Overview on Grid-Parity. In: *ResearchGate* (2013)
- [BMU14] BMUB: Klimaschutz in Zahlen. (2014), S. 6
- [BMU18] BMU: Klimaschutz in Zahlen. (2018), S. 29
- [BMW16] BMWI: Erneuerbare Energie in Zahlen. (2016), S. 12
- [BSS05] BOTHE, K. ; SINTON, R. ; SCHMIDT, J.: Fundamental Boron-Oxygen-related Carrier Lifetime Limit in Mono- and Multicrystalline Silicon. In: *Prog. Photovolt: Res. Appl.* 13 (2005), S. 287 – 296
- [BTSR06] BARDOS, R. A. ; TRUPKE, T. ; SCHUBERT, M. C. ; ROTH, T.: Trapping artifacts in quasi-steady-state photoluminescence and photoconductance lifetime measurements on silicon wafers. In: *APPLIED PHYSICS LETTERS* 88 (2006), Nr. 5, S. 053504
- [BZMF13] BLAKERS, A. ; ZIN, Ngwe ; MCINTOSH, Keith R. ; FONG, Kean: High Efficiency Silicon Solar Cells. In: *Energy Procedia* 33 (2013), S. 1–10
- [Cue03] CUEVAS, A.: Measuring and interpreting the lifetime of silicon wafers. In: *Solar Energy* 76 (2003), S. 255 – 262
- [Die09] DIEZ, S.: *Lebensdauerspektroskopie metallischer Defekte in Silicium und Analyse monokristalliner Materialalternativen*, Universität Konstanz, Diss., 2009
- [DL81] DORKEL, J.M. ; LETURCQ, P.: Carrier mobilities in silicon semi-empirical related to temperature, doping and injection level. In: *Solid State Electronics* 24 (1981), Nr. 9, S. 821 – 825
- [Fei79] FEICHTINGER, H.: Defects and Radiation Effects in Semiconductors. In: *Inst. Phys. Conf.* Bd. 46, 1979
- [GHB10] GOGOLIN, R. ; HARDER, N. ; BRENDEL, R.: Trapping-related recombination of charge carrier in silicon. In: *Applied Physics Letters* 97 (2010), S. 443 – 446
- [Gö94] GÖTZBERGER, A.: *Sonnenenergie: Photovoltaik*. B.G. Teubner, 1994
- [Gra00] GRAFF, K.: *Metal impurities in Silicon-Device Fabrication*. Springer Verlag, 2000
- [Gre90] GREEN, M.A.: Intrinsic concentration, effective densities of states, and effective mass in silicon. In: *Journal of Applied Physics* 67 (1990), Nr. 6, S. 2944
- [Gre98] GREEN, M.A.: *Solar Cells - Operating Principles, Technology and System Applications*. 1st. University of New South wales, 1998

- [Hal52] HALL, R. N.: Electron-Hole Recombination in Germanium. In: *Phys. Rev.* 87 (1952), S. 387
- [HG16] HAUG, Halvard ; GREULICH, Johannes: PC1Dmod 6.2 Improved simulation of c-Si devices with updates on device physics and user interface. In: *Energy Procedia* 92 (2016), S. 60–68
- [HOT84] HONDA, K. ; OHSAWA, A. ; TOYOKURA, N.: Breakdown in silicon oxides-correlation with Cu precipitates. In: *Applied Physics Letters* 45 (1984), Nr. 3, S. 270–271
- [HR97] HENLEY, W.B. ; RAMAPPA, D.A.: Iron precipitation in float zone grown silicon. In: *Journal of Applied Physics* 82 (1997), Nr. 2, S. 589–594
- [HSSF89] HIRAMOTO, K. ; SANO, M. ; S.SADAMITSU ; FUJINO, N.: Degradation of Gate Oxide Integrity by Metal impurities. In: *Japanese Journal of Applied Physics* 28 (1989), Nr. Part 2, No. 12, S. L2109–L2111
- [IHS<sup>+</sup>98] ISTRATOV, A.A. ; HEDEMANN, H. ; SEIBT, M. ; VYVENKO, O.F. ; SCHRÖTER, W. ; HEISER, T. ; FLINK, C. ; HEISER, H. ; HIESLMAIR, H. ; WEBER, E.R.: Electrical and Recombination Properties of Copper Silicide Precipitates in Silicon. In: *Journal of Electrochemical Society* 145 (1998), S. 3889–3898
- [IHW99] ISTRATOV, A.A. ; HIESLMAIR, H. ; WEBER, J.: Iron and its complexes in silicon. In: *Applied Physics* 69 (1999), S. 13–44
- [ISE14a] ISE, Fraunhofer: Aktuelle Fakten zur Photovoltaik in Deutschland. (2014)
- [ISE14b] ISE, Fraunhofer: Photovoltaics Report. (2014)
- [IW98] ISTRATOV, A.A. ; WEBER, J.: Electrical properties and recombination activity of copper, nickel and cobalt in silicon. In: *Applied Physical Letters A* 66 (1998), S. 123–136
- [Kna04] KNACK, S.: Copper related defects in silicon. In: *Materials Science in Semiconductor Processing* 7 (2004), S. 125–141
- [KWLR01] KNACK, S. ; WEBER, J. ; LEMKE, H. ; RIEMANN, H.: Evolution of copper hydrogen related defects in silicon. In: *Physica B: Condensed Matter* 308-310 (2001), S. 404–407
- [KWLR02] KNACK, S. ; WEBER, J. ; LEMKE, H. ; RIEMANN, H.: Copper hydrogen complexes in silicon. In: *Physical Review B* 65 (2002), S. 165203
- [Lam77] LAMMERT, M.D.: The Interdigitated Back Contact Solar Cell: A Silicon Solar Cell for Use in Concentrated Sunlight. In: *IEEE Transactions on Electron Devices* 24 (1977), S. 337 – 342
- [Lan74] LANG, D.V.: Deep-level transient spectroscopy: A new method to characterize traps in semiconductors. In: *Journal of Applied Physics* 45 (1974), Nr. 7, S. 3023 – 3032
- [LMD<sup>+</sup>15] LAUER, K. ; MÖLLER, C. ; DEBBIH, D. ; AUGE, M. ; SCHULZE, D.: Determination of Activation Energy of the Iron Acceptor Pair Association and Dissociation Reaction. In: *Solid State Phenomena* Bd. 242, 2015, S. 230–235
- [Mä99] MÄCKEL, H.: *Herstellung und Charakterisierung von Siliziumnitridschichten zur Passivierung von Silicioberflächen*, Universität Freiburg, Diss., 1999



- [MCR<sup>+</sup>03] MACDONALD, D. ; CUEVAS., A. ; REIN, S. ; LICHTNER, P. ; GLUNZ, S.W.: Temperature and Injection dependent lifetime spectroscopy of copper related defects in silicon. In: *3rd World Conference on Photovoltaic Energy Conversion* Bd. 1, 2003, S. 87–90
- [MGA04] MACDONALD, D. ; GEERLINL.J. ; AZZIZI, A.: Iron detection in crystalline silicon by carrier lifetime measurements for arbitrary injection and doping. In: *Applied Physics* 95 (2004), S. 1021–1028
- [MRC<sup>+</sup>4 ] MULLIGAN, W. P. ; ROSE, D.H. ; CUDZINOVIC, M.J. ; CEUSTER, D.M. D. ; MCINTOSH, K.R. ; SMITH, D. D. ; SWANSON, R.M.: Manufacture of solar cells with 21 In: *19th European Photovoltaic Solar Energy Conference*, 2004 ., S. pp. 387–90
- [MRD<sup>+</sup>05] MACDONALD, D. ; ROTH, T. ; DEENAPANRAY, P. N. K. ; BOTHE, K. ; POHL, P. ; SCHMIDT, J.: Formation rates of iron-acceptor pairs in crystalline silicon. In: *Journal of Applied Physics* 98 (2005), Nr. 8, S. 083509
- [MRG<sup>+</sup>12] MICHL, B. ; RÜDIGER, M. ; GIESECKE, J.A. ; HERMLE, M. ; WARTA, W. ; SCHUBERT, M.C.: Efficiency limiting bulk recombination in multicrystalline silicon solar cells. In: *Solar Energy Materials & Solar Cells* 98 (2012), S. 441 – 447
- [MWAT13] MITCHELL, Bernhard ; WAGNER, Hannes ; ALTERMATT, Pietro P. ; TRUPKE, Thorsten: Predicting solar cell efficiencies from bulk lifetime images of multicrystalline silicon bricks. In: *Energy Procedia* Bd. 38, 2013, S. 147 – 152
- [Pap03] PAPULA, Lothar: *Mathematische Formelsammlung für Ingenieure und Naturwissenschaftler*. Vieweg, 2003
- [PT82] PEARTON, S. J. ; TAVENDALE, A. J.: The electrical properties of deep copper and nickel related centers in silicon. In: *Journal of Applied Physics* 54 (1982), Nr. 3, S. 1375–1379
- [RBD10] RAPPAZ, M. ; BELLET, M. ; DEVILLE, M.: *Numerical Modelling in Materials Science and Engineering*. Springer Verlag, 2010
- [Rei05] REIN, S.: *Lifetime Spectroscopy - A Method of Defect Characterization in Silicon for Photovoltaic Applications*. Springer Verlag, 2005
- [RFM56] REISS, H. ; FULLER, C. S. ; MORIN, F. J.: Chemical interactions among defects in germanium and silicon. In: *Bell System Technical Journal* 35 (1956), S. 535–636
- [Rot08a] ROTH, T.: *Analysis of electrically active defects in silicon for solar cells*, Universität Konstanz, Diss., 2008
- [Rot08b] ROTH, T.: Comparison of photoconductance- and photoluminescence-based lifetime measurement techniques. In: *Optoelectronic and Microelectronic Materials and Devices* (2008)
- [RRR<sup>+</sup>12] RÜHLE, K. ; RAUER, M. ; RÜDIGER, M. ; GIESECKE, J. ; NIEWELT, T. ; SCHMIGA, C. ; GLUNZ, S.W. ; KASEMANN, M.: Passivation Layers for Indoor Solar Cells at low Irradiation Intensities. In: *Energy Procedia* 27 (2012), S. 406–411
- [Sch03] SCHMIDT, Jan: Temperature- an injection-dependent lifetime spectroscopy for characterization of defect centers in semiconductors. In: *Applied Physical Letters* 82 (2003), Nr. 13, S. 2178–2180

- [Sch06] SCHRODER, D.K.: *Semiconductor Material and Device Characterization*. Wiley Interscience, 2006
- [Sch15] SCHEFFLER, L.: *Electrical characterization of transition metals in silicon: a study on titanium, cobalt, and nickel and their interaction with hydrogen*, TU Dresden, Diss., 2015
- [Spr91] SPROUL, A.B.: Improved value for the silicon intrinsic carrier concentration. In: *Journal of Applied Physics* 70 (1991), S. 846
- [SR52] SHOCKLEY, W. ; READ, W.T.: Statistics of the Recombinations of Holes and Electrons. In: *Physical Review* 87 (1952), Nr. 5, S. 835 – 842
- [SS03] SCHMIDT, J. ; SINTON, R.: Defect Characterization by Temperature an injection-dependent Lifetime Spectroscopy. In: *3rd World Conference on Photovoltaic Energy Conversion* Bd. 1, 2003, S. 947 – 950
- [SSLW99] SHIRAIISHI, M. ; SACHSE, J.-U. ; LEMKE, H. ; WEBER, J.: DLTS analysis of nickel hydrogen complex defects in silicon. In: *Materials Science and Engineering B* 58 (1999), S. 130–133
- [Sze85] SZE, S.M.: *Semiconductor Devices - Physics and technology*. John Wiley and Sons, 1985
- [TB05] TRUPKE, T. ; BARDOS, R.A.: Photoluminescence: A versatile characterization technique for crystalline silicon. In: *15th Workshop on Crystalline Silicon Solar Cells and Modules: Materials and Processes*, 2005, S. 166 – 169
- [Wij93] WIJARANAKULA, W.: The Reaction Kinetics of Iron-Boron Pair Formation and Dissociation in P-Type Silicon. In: *Journal of Electrochemical Society* 140 (1993), S. 275–281
- [YW11] YARYKIN, N. ; WEBER, J.: Copper related deep level centers in irradiated p type silicon. In: *Physical Review B* 83 (2011), S. 125207
- [YW13a] YARYKIN, N. ; WEBER, J.: Deep levels of copper-hydrogen complexes in silicon. In: *Physical Review B* 83 (2013), S. 085205
- [YW13b] YARYKIN, N. ; WEBER, J.: Identification of Copper-Copper and Copper-Hydrogen Complexes in Silicon. In: *Semiconductors* Bd. 47, 2013, S. 275–278
- [ZYY+13] ZHU, X. ; YANG, D. ; YU, X. ; HE, J. ; WU, Y. ; VANHELLEMONT, J. ; QUE, D.: Iron-boron pair dissociation in silicon under strong illumination. In: *AIP Advances* 3 (2013), S. 082124

## A. Verwendete Parameter

Bezeichnung	Elektronen	Löcher	Einheit
Temperaturabhängigkeit der Bandlücke			
$E_g (0 K)$	1170		$meV$
$\alpha$	0,473		$meV K^{-1}$
$\beta$	636		$K$
Effektive Massen Modell			
	$m_{th,e}$ und $m_{de,e}$	$m_{de,h}$	Erweiterung $m_{th,h}$
$N$	$2,540933 \times 10^{19}$		$cm^{-3}$
$m_t^0/m_0$	0,1905		$[\ ]$
$m_l/m_0$	0,9163		$[\ ]$
a		0,4435870	0,6019730
b		$3,609528 \times 10^{-3}$	0,2134957
c		$1,173515 \times 10^{-4}$	$6,6290973 \times 10^{-2}$
d		$1,263218 \times 10^{-6}$	0,7705816
e		$3,025581 \times 10^{-9}$	$1,2269252 \times 10^{-2}$
f		$4,683382 \times 10^{-3}$	0,1463224
g		$2,286895 \times 10^{-4}$	$3,1056744 \times 10^{-2}$
h		$7,469271 \times 10^{-7}$	1,0720653
i		$1,727481 \times 10^{-9}$	$1,4579803 \times 10^{-2}$
j			$1,3432933 \times 10^{-4}$
k			0,3681965
Mobilitätsmodell			
$T_0$	300		$K$
$\alpha$	2,2		$[\ ]$
$\mu_{L0}$	1430	495	$cm^2 V^{-1} s^{-1}$
A	$4,61 \times 10^{17}$	$1,00 \times 10^{17}$	$cm^{-1} V^{-1} s^{-1} K^{-3/2}$
B	$1,52 \times 10^{15}$	$6,25 \times 10^{14}$	$cm^{-3} K^{-2}$
$C_1$	$2 \times 10^{10}$		$cm^5 V^{-1} s^{-1} K^{-3/2}$
$C_2$	$8,28 \times 10^8$		$cm^2 K^{-2}$
Auger-Modell			
$C_n$	$2,8 \times 10^{-31}$		$cm^6 s^{-1}$
$C_p$		$9,9 \times 10^{-32}$	$cm^6 s^{-1}$
Naturkonstanten			
$k_B$	$8,6173303 \times 10^{-5}$		$eV K^{-1}$
q	$1,6021766208 \times 10^{-19}$		$A s$

Tab. A.1: Übersicht über die verwendeten Parameter in den einzelnen Modellen, sowie den verwendeten Absolutwerten der physikalischen Naturkonstanten

## B. Details des Mobilitätsmodells nach Dorkel und Leturcq

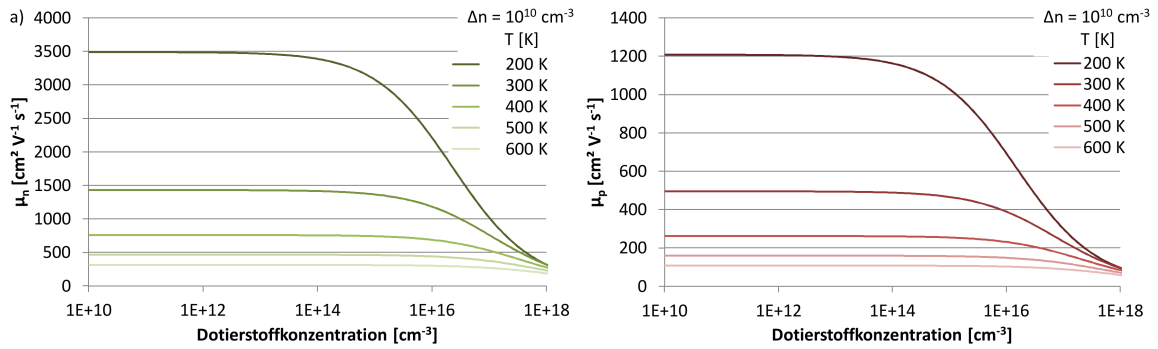


Abb. B.1: Einfluss der Dotierstoffkonzentration auf die Mobilitäten bei verschiedenen Temperaturen

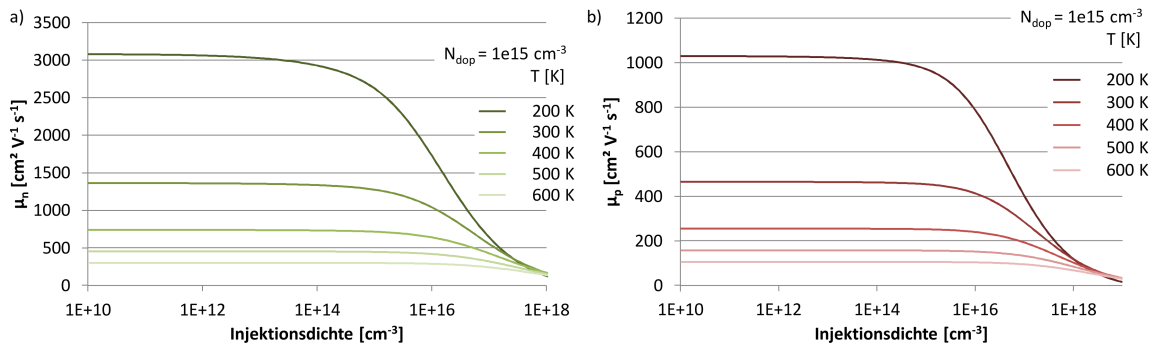


Abb. B.2: Einfluss der Injektionsdichte auf die Mobilitäten bei verschiedenen Temperaturen

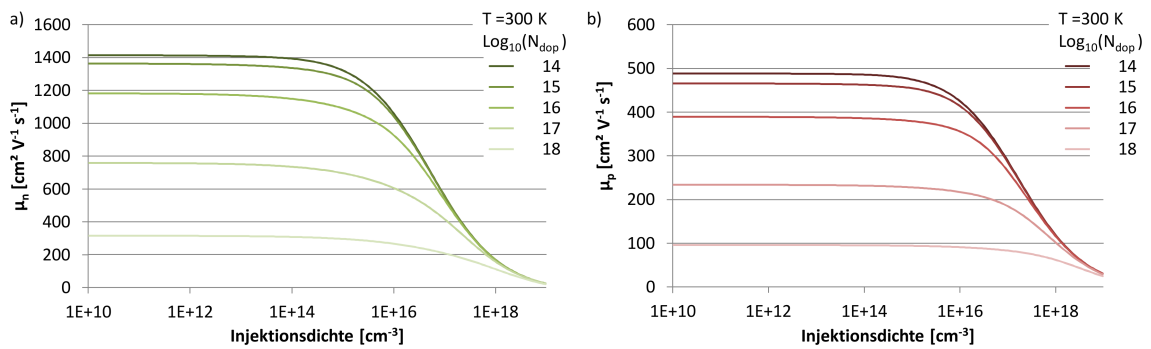


Abb. B.3: Einfluss der Injektionsdichte auf die Mobilitäten bei verschiedenen Dotierstoffkonzentrationen

## C. Einfluss der Lebensdauer auf die Funktionsweise von Solarzellen

Die prinzipielle Funktionsweise einer Solarzelle beruht auf den bereits erläuterten Grundlagen. Licht wird absorbiert, wodurch frei bewegliche Ladungsträger erzeugt werden. Eine Solarzelle ist ein Bauteil, welches die erzeugten Ladungsträger räumlich nach ihrer Ladung trennt, wodurch ein elektrisches Potential entsteht. Das dazu notwendige elektrochemische Potential wird meist durch Erzeugung einer Grenzschicht zwischen p-Typ und n-Typ Material erreicht, dem so genannten p-n-Übergang. Durch die unterschiedliche Konzentration an Ladungsträgern im thermodynamischen Gleichgewicht, diffundieren diese in das gegenüberliegende Gebiet und rekombinieren. Dadurch bleiben die ionisierten Dotierstoffatome zurück und erzeugen somit eine ortsfeste Ladung (Raumladung). Die Fermi-Energie in n- und p-Typ Material ist auf demselben Niveau, jedoch ist dessen Lage innerhalb der Bandlücke unterschiedlich. Der Konzentrationsgradient an Ladungsträgern innerhalb der so genannten Raumladungszone führt zu einer Bandverbiegung in der Nähe des p-n-Übergangs. Diese Bandverbiegung entspricht einem elektrochemischen Potential  $\psi_0$ , welches in Solarzellen dazu dienen kann Ladungsträger mit unterschiedlicher Polarität voneinander zu trennen [Gö94]:

$$\psi_0 = \frac{k_B T}{q} \ln \left( \frac{N_A N_D}{n_i^2} \right) \quad (\text{C.1})$$

Mit  $k_B$  der Boltzmannkonstante,  $T$  der Temperatur, der Elementarladung  $q$ , der intrinsischen Ladungsträgerkonzentration  $n_i$ , sowie den Dotierstoffkonzentrationen  $N_A$  im p-Gebiet und  $N_D$  im n-Gebiet. Die Strom-Spannungs-Charakteristik eines p-n-Übergangs lässt sich mit der Diodengleichung beschreiben [Gö94]:

$$I = I_0 \cdot \exp \left( \frac{qU}{k_B T} - 1 \right) - I_L \quad (\text{C.2})$$

Mit  $I_0$ , der Sättigungssperrstromdichte,  $U$  der angelegten Spannung und  $I_L$  der induzierten Photostromdichte. Der Halbleiter befindet sich unter Beleuchtung im thermodynamischen Ungleichgewicht. Während die Konzentration an Majoritäten unter Beleuchtung kaum höher ist als ohne Beleuchtung, ist die Konzentration an Minoritäten um Größenordnungen erhöht. Das elektrische Potential entsteht deswegen hauptsächlich durch die Diffusion der Minoritäten über den p-n-Übergang. Da die Überschussladungsträger durch das elektrochemische Potential des p-n-Übergangs in Sperrrichtung fließen, ist der Beitrag von  $I_L$  negativ. Der auf die Fläche  $A$  normierte Sättigungsstrom  $I_0$ , auch Sättigungssperrstromdichte  $j_0$  genannt, hängt seinerseits von dem Diffusionskoeffizienten  $D_{e/h}$  der Minoritätsladungsträger, deren Konzentration  $p_0 \approx n_i^2/N_D$ ,  $n_0 \approx n_i^2/N_A$  und deren Lebensdauern  $\tau$  ab [Gö94].

$$j_0 = \frac{I_0}{A} = q \cdot \left( \sqrt{\frac{D_n}{\tau}} \cdot \frac{n_i^2}{N_A} + \sqrt{\frac{D_h}{\tau}} \cdot \frac{n_i^2}{N_D} \right) \quad (\text{C.3})$$

Die Photostromdichte  $j_L = I_L/A$  ist abhängig von der Generationsrate  $G$ , der Dicke des Wafers  $W$ , sowie den Diffusionslängen  $L_{e/h}$ . Für den idealisierten Fall, dass keine weiteren Verlustmechanismen auftreten, ist sie gleich der Kurzschlussstromdichte  $j_{SC} = j_L$  [Gö94]:

$$j_L = \frac{I_L}{A} = q \cdot G \left( \sqrt{D_n \cdot \tau} + \sqrt{D_h \cdot \tau} + W \right) \quad (\text{C.4})$$

Die Leerlaufspannung  $U_{OC}$  einer Solarzelle lässt sich durch Umstellen von Gleichung C.2 berechnen zu:

$$U_{OC} = \frac{k_B T}{q} \ln \left( \frac{j_L}{j_0} + 1 \right) \quad (\text{C.5})$$

Der Füllfaktor  $FF$  beschreibt das Verhältnis von maximal abnehmbarer Leistung zu dem Produkt aus Kurzschlussstrom  $I_{SC}$  und Leerlaufspannung  $U_{OC}$  [Gö94]:

$$FF = \frac{P_{MPP}}{U_{OC} \cdot I_{SC}} = \frac{U_{MPP} \cdot I_{MPP}}{U_{OC} \cdot I_{SC}} \quad (C.6)$$

Der Wirkungsgrad  $\eta$  einer Solarzelle ergibt sich durch das Verhältnis von eingestrahelter Leistung  $P_{Licht}$  zu abnehmbarer Leistung [Gö94]:

$$\eta = \frac{P_{MPP}}{P_{Licht}} = \frac{U_{MPP} \cdot I_{MPP}}{P_{Licht}} = \frac{FF \cdot U_{OC} \cdot I_{SC}}{P_{MPP}} \quad (C.7)$$

Mechanismen, die den Wirkungsgrad einer Solarzelle beeinflussen, sind Widerstandsverluste über den Serienwiderstand  $R_S$  und den Parallelwiderstand  $R_P$ , sowie die Annahme einer weiteren Diode, welche Rekombination in der Raumladungszone berücksichtigt. Die Strom-Spannungs-Charakteristik realer Solarzellen lässt sich in guter Näherung mit dem Zwei-Dioden-Modell beschreiben [Gö94]:

$$I(U) = I_{01} \cdot \left( \exp \left( \frac{U - I \cdot R_S}{n_1} - 1 \right) \right) + I_{02} \cdot \left( \exp \left( \frac{U - I \cdot R_S}{n_2} - 1 \right) \right) + \frac{U - I \cdot R_S}{R_P} - I_L \quad (C.8)$$

Mit den Diodenidealitätsfaktoren  $n_1$  und  $n_2$ . Der Einfluss der Lebensdauer auf die Performance einer Solarzelle ist dementsprechend komplex. Es lässt sich jedoch festhalten, dass eine höhere Lebensdauer in der Regel eine höhere Ausbeute der eingestrahelten Leistung bewirkt. Während der Kurzschlussstrom hauptsächlich von den Majoritäten getragen wird, sind die Leerlaufspannung und der Füllfaktor stärker abhängig von der Konzentration an Minoritäten und damit von der Lebensdauer. Viele Hocheffizienz-Solarzell-Konzepte versuchen, unter anderem die Rekombination an den Solarzellkontakten durch eine kleinere Kontaktfläche (wenige Punktkontakte) zu reduzieren. Dadurch werden die Strecken, welche die Ladungsträger zu den Kontakten zurücklegen müssen größer. Die erhoffte Wirkungsgradsteigerung kann also nur dann eintreten, wenn die Diffusionslänge und damit die Lebensdauer der Ladungsträger ein hohes Niveau besitzen.

## D. Das Referenzierungsproblem

In dieser Arbeit wurden alle DPSS Diagramme unabhängig von der Temperatur im Energieintervall von  $E_C - E_t = 0 - 1124,5 \text{ meV}$  gelöst. Dies ist zwar der Übersichtlichkeit dienlich, widerspricht jedoch der Annahme einer temperaturabhängigen Bandlücke aus Abschnitt 2.4. Nimmt man bei  $T = 300 \text{ K}$  einen Defekt mit einem Bandabstand von  $E_t - E_V = 300 \text{ meV}$  an, so ergibt sich der Bandabstand zur gegenüberliegenden Bandkante durch  $E_C - E_t = E_g - (E_t - E_V) = 824,5 \text{ meV}$ . Erhöht man die Temperatur auf  $500 \text{ K}$ , so ergibt sich nach dem verwendeten Modell eine Bandlücke von  $1065,9 \text{ meV}$ . Damit  $(E_C - E_t) + (E_t - E_V) = E_g$  auch bei  $500 \text{ K}$  erfüllt wird, muss sich mindestens ein Bandabstand verändert haben. Es ergibt sich damit das fundamentale Problem, dass der temperaturabhängige Verlauf eines Störstellenniveaus innerhalb der Bandlücke a priori nicht bekannt ist. Dieses Problem ist äquivalent dazu, dass unbekannt ist, durch welche temperaturabhängige Funktion der Bandabstand eines Defektes beschrieben wird und soll in dieser Arbeit als Referenzierungsproblem bezeichnet werden.

Die „Best Known Method“ dieses Dilemma zu lösen, besteht nun genau darin, die Temperaturabhängigkeit der Bandlücke zu ignorieren und die DPSS Spektren für eine konstante Bandlücke auszuwerten. Diese Methode soll in dieser Arbeit als Standardreferenzierung bezeichnet werden, da sie in der einschlägigen Literatur am häufigsten anzutreffen ist. Das Modell lässt sich durch die analytischen DPSS Gleichungen beschreiben. Für die Variablen SRH Dichten  $n_1^{DPSS}$  und  $p_1^{DPSS}$  ergibt sich:

$$p_1^{DPSS}(T) = N_V(T) \cdot \exp\left(\frac{(E_t - E_V)(300 \text{ K})}{k_B T}\right) \quad (\text{D.1})$$

$$n_1^{DPSS}(T) = N_C(T) \cdot \exp\left(\frac{(E_C - E_t)(300 \text{ K})}{k_B T}\right) \quad (\text{D.2})$$

Wie aus den Gleichungen ersichtlich, werden die Zustandsdichten und die thermische Energie  $k_B T$  korrekt für die jeweilige Temperatur berechnet. Die Verwendung von  $E_g(300 \text{ K})$  jedoch führt dazu, dass das Produkt aus  $n_1^{DPSS}$  und  $p_1^{DPSS}$  bei hohen Temperaturen kleiner ist als das Quadrat der intrinsischen Ladungsträgerkonzentration, was physikalisch nicht konsistent ist:

$$n_1^{DPSS}(T > 300 \text{ K}) \cdot p_1^{DPSS}(T > 300 \text{ K}) < n_i^2(T) \quad (\text{D.3})$$

Die Auswertung der DPSS Gleichungen für eine konstante Bandlücke induziert eine Verzerrung des  $DPSS - k_\sigma$ -Diagrammes. Diese lässt sich für eine Änderung der Temperatur von 300 auf 500 K mittels folgender Gleichung abschätzen:

$$\frac{\Delta(E_C - E_t)(\Delta T)}{(E_C - E_t)(300 \text{ K})} = \frac{\Delta E_g(\Delta T)}{2 \cdot (E_C - E_t)(300 \text{ K})} \quad (\text{D.4})$$

Hierbei wird angenommen, dass sich das intrinsische Energieniveau  $E_i$  nicht verschiebt. Die reale Verzerrung des DPSS Diagrammes kann aufgrund der unbekanntenen Lage des Defektenergieniveaus mit dieser Methode nicht bestimmt werden. Es lässt sich jedoch zeigen, dass die Verzerrung für tiefe Defekte recht schwach ist, da die geringe Temperaturabhängigkeit der Bandlücke zu einer geringen Verschiebung des Defektenergieniveaus führt. Anders ist es für extrem flache Defekte ( $< 100 \text{ meV}$  Bandabstand), hier reicht eine geringe Änderung der Bandlücke aus, um eine starke Verschiebung des Defektenergieniveaus im  $DPSS - k_\sigma$ -Diagramm zu erreichen. Abbildung D.1 a zeigt die nach Gleichung D.4 berechneten Verzerrungen der  $DPSS - k_\sigma$ -Diagramme für eine Änderung der Temperatur von 300 auf 500 K. Es ist deutlich zu erkennen, dass die Standardreferenzierung immer fehlerbehaftet ist. Für tiefe Defekte und moderate Temperaturänderungen ist dieser Fehler jedoch tolerierbar. Es soll an dieser Stelle bemerkt werden, dass die Verzerrung maßgeblichen Einfluss auf die relative Standardabweichung im  $DPSS - k_\sigma$ -Diagramm besitzt. Dies bedeutet, dass selbst bei fehlerfreier Messung der Lebensdauer die Unschärfe in den Schnitt-

punkten des  $DPSS - k_\sigma$ -Diagramms erhöht sein kann, wenn die exakte Referenzierungsfunktion nicht bekannt ist. Für extrem flache Defekte kann die Verzerrung der Standardreferenzierung dazu führen, dass sich keine Schnittpunkte im  $DPSS - k_\sigma$ -Diagramm ausbilden.

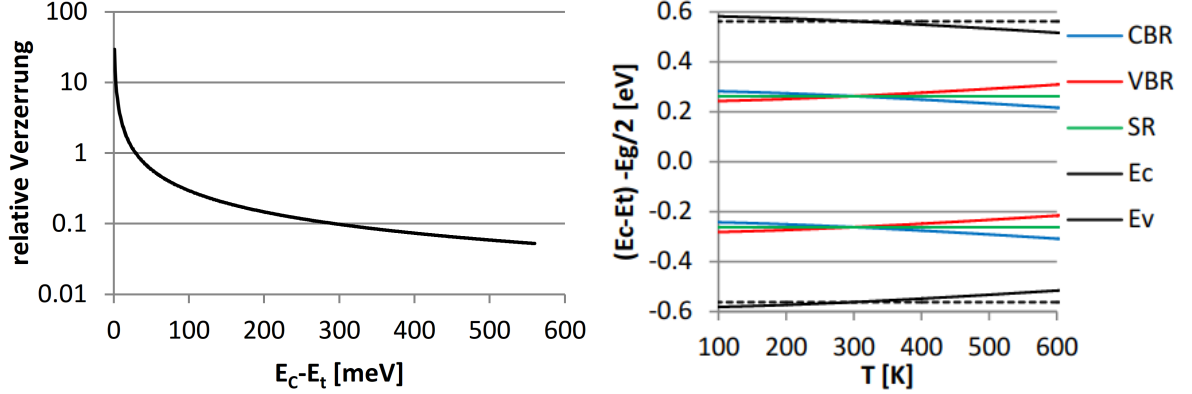


Abb. D.1: a) Verzerrung in Abhängigkeit des Defektenergieniveaus berechnet nach G.4 für die Standardreferenzierung b) unterschiedliche Referenzierungsfunktionen für zwei Defekte mit  $(E_C - E_t)(300 K) = 300 meV$  und  $(E_t - E_V)(300 K) = 300 meV$ . SR - Standardreferenzierung; CBR - Leitungsbandreferenzierung; VBR - Valenzbandreferenzierung. Die Lage der Leitungsbandkante wird durch die schwarzen Kurven angezeigt. Im Falle der Standardreferenzierung sind diese gestrichelt dargestellt.

Es bietet sich daher an, für extrem flache Defekte eine alternative Referenzierung anzunehmen. Zwei triviale Lösungen des Referenzierungsproblems ergeben sich über die Annahme, dass der Abstand zu einer Bandkante konstant ist. Für  $(E_C - E_t)(T) = konst.$  ergeben sich die variablen SRH-Dichten zu:

$$p_1^{DPSS}(T) = N_V(T) \cdot \exp\left(-\frac{E_g(T) - (E_C - E_t)(300 K)}{k_B T}\right) \quad (D.5)$$

$$n_1^{DPSS}(T) = N_C(T) \cdot \exp\left(-\frac{(E_C - E_t)(300 K)}{k_B T}\right) \quad (D.6)$$

Hierbei ist zu berücksichtigen, dass für den Bereich  $(E_C - E_t)(300 K) > E_g(T)$  keine Lösungen möglich sind, da die Valenzbandkante schon erreicht wurde. Diese Methode soll in dieser Arbeit als Leitungsbandreferenzierung (CBR) bezeichnet werden. Die zweite Möglichkeit ist es  $(E_t - E_V)(T) = konst.$  anzusetzen. Es ergeben sich dann folgende Gleichungen für die variablen SRH-Dichten:

$$p_1^{DPSS}(T) = N_V(T) \cdot \exp\left(-\frac{E_g(300 K) - (E_C - E_t)(300 K)}{k_B T}\right) \quad (D.7)$$

$$n_1^{DPSS}(T) = N_C(T) \cdot \exp\left(-\frac{(E_C - E_t)(300 K) - (E_g(300 K) - E_g(T))}{k_B T}\right) \quad (D.8)$$

Diese Methode soll als Valenzbandreferenzierung (VBR) bezeichnet werden. Äquivalent zur Leitungsbandreferenzierung existieren für  $(E_C - E_t)(300 K) < E_g(300 K) - E_g(T)$  keine Lösungen. Für beide Methoden gilt:

$$n_1^{DPSS}(T) \cdot p_1^{DPSS}(T) = n_i^2(T) \quad (D.9)$$

Vergleicht man die Ergebnisse dieser beiden Referenzierungsmethoden mit der Standardreferenzierung, so zeigt sich, dass die Ergebnisse der benachbarten Bandhälfte nahezu identisch mit der Standardreferenzierung sind. Dies zeigt, dass die Standardreferenzierung trotz ihrer physikalischen Ungenauigkeit sinnvolle Ergebnisse generieren kann. Betrachtet man hingegen die



gegenüberliegende Bandhälfte, so sind die Schnittpunkte stark verschoben. Die Anwendung der Bandkantenreferenzierungen kann also dann hilfreich sein, wenn ein flacher Defekt einen konstanten Abstand zur gegenüberliegenden Bandkante besitzt. Dies scheint auf den ersten Blick nicht plausibel, da eine starke Verringerung der Bandlücke bei konstantem Abstand zur gegenüberliegenden Bandkante zu einer Verschiebung des Defektenergieniveaus in das jeweilige Band bewirken würde. Jedoch ist es von vielen Dotierstoffen mit extrem geringen Bandabständen bekannt, dass sich das Energieniveau von der gegenüberliegenden Bandkante aus mit unterschiedlichen Methoden konsistent bestimmen lässt. Deswegen kann die Möglichkeit einer Referenzierung des Defektenergieniveaus über die gegenüberliegende Bandkante a priori nicht ausgeschlossen werden. Eine weitere triviale Lösung des Referenzierungsproblems ist die Annahme, dass der Abstand zum intrinsischen Energieniveau konstant bleibt, wie es in der Simulationssoftware PC1Dmod6.2 [HG16] hinterlegt ist. Es ergeben sich dann folgende Gleichungen für die variablen SRH-Dichten:

$$p_1^{DPSS}(T) = N_V(T) \cdot \exp\left(-\frac{(E_g(300K) + E_g(T))/2 - (E_C - E_t)(300K)}{k_B T}\right) \quad (\text{D.10})$$

$$n_1^{DPSS}(T) = N_C(T) \cdot \exp\left(-\frac{(E_C - E_t)(300K) - (E_g(300K) - E_g(T))/2}{k_B T}\right) \quad (\text{D.11})$$

Auch in diesem Fall gilt Gleichung G.9. Die Lösungen stimmen für tiefe Defekte gut mit den Lösungen der Standardreferenzierung überein. Allerdings ist der Lösungsbereich beschränkt auf:

$$\frac{E_g(300K) - E_g(T)}{2} < (E_C - E_t)(300K) < \frac{E_g(300K) + E_g(T)}{2} \quad (\text{D.12})$$

Abbildung D.1 b zeigt schematisch den temperaturabhängigen Verlauf des Defektenergieniveaus nach verschiedenen Referenzierungsmethoden.

## E. Herleitung der SRH-Gleichung

Einfangraten für Ladungsträger

$$c_n^* = c_n \cdot n = (\sigma_n \cdot v_{th,e}) \cdot n; c_p^* = c_p \cdot p = (\sigma_p \cdot v_{th,h}) \cdot p \quad (E.1)$$

Aufstellen der Ratengleichungen

$$\left(\frac{dn}{dt}\right) = e_n \cdot N_t \cdot f_t - c_n \cdot n \cdot N_t (1 - f_t); \left(\frac{dp}{dt}\right) = e_p \cdot N_t (1 - f_t) - c_p \cdot p \cdot N_t \cdot f_t \quad (E.2)$$

Mit  $e_{n/p}$  den Emissionsraten  $c_{n/p}$  den Einfangraten,  $f_t$  der Besetzungswahrscheinlichkeit des Defektes und  $N_t$  der Defektkonzentration

Berechnung der Emissionsraten für stationäre Bedingungen  $dn/dt = 0$ ;  $dp/dt = 0$

$$0 = \left(\frac{dn}{dt}\right) = e_n \cdot N_t \cdot f_t - c_n \cdot n \cdot N_t (1 - f_t); 0 = \left(\frac{dp}{dt}\right) = e_p \cdot N_t (1 - f_t) - c_p \cdot p \cdot N_t \cdot f_t \quad (E.3)$$

$$c_n \cdot n \cdot N_t (1 - f_t) = e_n \cdot N_t \cdot f_t \rightarrow e_n = c_n \cdot n \cdot \frac{1 - f_t}{f_t} = c_n \cdot n_1 \quad (E.4)$$

$$e_p \cdot N_t (1 - f_t) = c_p \cdot p \cdot N_t \cdot f_t \rightarrow e_p = c_p \cdot p \cdot \frac{f_t}{1 - f_t} = c_p \cdot p_1 \quad (E.5)$$

$$p_1 = N_V \cdot \exp\left(-\frac{E_t - E_V}{k_B T}\right); n_1 = N_C \cdot \exp\left(-\frac{E_C - E_t}{k_B T}\right) \quad (E.6)$$

Einsetzen der Emissionsraten in Ratengleichung

$$\left(\frac{dn}{dt}\right) = c_n \cdot n_1 \cdot N_t \cdot f_t - c_n \cdot n \cdot N_t (1 - f_t) \quad (E.7)$$

$$\left(\frac{dp}{dt}\right) = c_p \cdot p_1 \cdot N_t (1 - f_t) - c_p \cdot p \cdot N_t \cdot f_t \quad (E.8)$$

Besetzungswahrscheinlichkeit für Steady-state Bedingungen:  $dn/dt = dp/dt$

$$c_n \cdot n_1 \cdot N_t \cdot f_t - c_n \cdot n \cdot N_t (1 - f_t) = c_p \cdot p_1 \cdot N_t (1 - f_t) - c_p \cdot p \cdot N_t \cdot f_t \quad (E.9)$$

$$c_n \cdot n_1 \cdot N_t \cdot f_t + c_p \cdot p \cdot N_t \cdot f_t = c_p \cdot p_1 \cdot N_t (1 - f_t) + c_n \cdot n \cdot N_t (1 - f_t) \quad (E.10)$$

$$(c_n \cdot n_1 + c_p \cdot p) \cdot N_t \cdot f_t = (c_p \cdot p_1 + c_n \cdot n) \cdot N_t (1 - f_t) \quad (E.11)$$

$$(c_n \cdot n_1 + c_p \cdot p) \cdot f_t = (c_p \cdot p_1 + c_n \cdot n) - f_t \cdot (c_p \cdot p_1 + c_n \cdot n) \quad (E.12)$$

$$(c_n \cdot n_1 + c_p \cdot p + c_p \cdot p_1 + c_n \cdot n) \cdot f_t = (c_p \cdot p_1 + c_n \cdot n) \quad (E.13)$$

$$f_t = \frac{(c_p \cdot p_1 + c_n \cdot n)}{(c_n \cdot (n_1 + n) + c_p \cdot (p_1 + p))} \quad (E.14)$$

Einsetzen der Besetzungswahrscheinlichkeit in Ratengleichung

$$\left(\frac{dn}{dt}\right) = \frac{c_n \cdot n_1 \cdot N_t \cdot (c_p \cdot p_1 + c_n \cdot n) - c_n \cdot n \cdot N_t \cdot (c_n \cdot n_1 + c_p \cdot p)}{(c_n \cdot (n_1 + n) + c_p \cdot (p_1 + p))} \quad (\text{E.15})$$

$$\left(\frac{dn}{dt}\right) = \frac{c_n \cdot N_t \cdot (c_p \cdot p_1 \cdot n_1 + c_n \cdot n \cdot n_1 - c_n \cdot n_1 \cdot n - c_p \cdot p \cdot n)}{(c_n \cdot (n_1 + n) + c_p \cdot (p_1 + p))} \quad (\text{E.16})$$

$$\left(\frac{dn}{dt}\right) = \frac{c_p \cdot c_n \cdot N_t \cdot (p_1 \cdot n_1 - p \cdot n)}{(c_n \cdot (n_1 + n) + c_p \cdot (p_1 + p))}; p_1 \cdot n_1 = n_i^2 \quad (\text{E.17})$$

$$\left(\frac{dn}{dt}\right) = \frac{c_p \cdot c_n \cdot N_t \cdot (n_i^2 - p \cdot n)}{(c_n \cdot (n_1 + n) + c_p \cdot (p_1 + p))} = \frac{c_p \cdot c_n \cdot N_t \cdot (n_i^2 - p \cdot n)}{c_p \cdot c_n \cdot \left(\frac{n_1+n}{c_p} + \frac{p_1+p}{c_n}\right)} = \frac{(n_i^2 - p \cdot n)}{\left(\frac{n_1+n}{c_p \cdot N_t} + \frac{p_1+p}{c_n \cdot N_t}\right)} \quad (\text{E.18})$$

Ersetzen der Einfangraten

$$U_{\text{SRH}} = -\left(\frac{dn}{dt}\right) = -\left(\frac{dp}{dt}\right) = \frac{(p \cdot n - n_i^2)}{[\sigma_p \cdot v_{\text{th,h}} \cdot N_t]^{-1} \cdot (n_1 + n) + [\sigma_n \cdot v_{\text{th,e}} \cdot N_t]^{-1} \cdot (p_1 + p)} \quad (\text{E.19})$$

Rekombinationsrate zu Lebensdauer

$$\Delta n = \Delta p; p = p_0 + \Delta p; n = n_0 + \Delta n \quad (\text{E.20})$$

$$U_{\text{SRH}} = \frac{(p_0 \cdot n_0 - n_i^2 + n_0 \cdot \Delta p + p_0 \cdot \Delta n + \Delta n \cdot \Delta p)}{[\sigma_p \cdot v_{\text{th,h}} \cdot N_t]^{-1} \cdot (n_1 + n_0 + \Delta n) + [\sigma_n \cdot v_{\text{th,e}} \cdot N_t]^{-1} \cdot (p_1 + p_0 + \Delta p)} \quad (\text{E.21})$$

$$U_{\text{SRH}} = \frac{\Delta n \cdot (n_0 + p_0 + \Delta n)}{[\sigma_p \cdot v_{\text{th,h}} \cdot N_t]^{-1} \cdot (n_1 + n_0 + \Delta n) + [\sigma_n \cdot v_{\text{th,e}} \cdot N_t]^{-1} \cdot (p_1 + p_0 + \Delta n)} \quad (\text{E.22})$$

$$\tau_{n0} = [\sigma_n \cdot v_{\text{th,e}} \cdot N_t]^{-1}; \tau_{p0} = [\sigma_p \cdot v_{\text{th,h}} \cdot N_t]^{-1} \quad (\text{E.23})$$

$$\tau_{\text{SRH}} = \frac{\Delta n}{U_{\text{SRH}}} = \frac{\tau_{n0} \cdot (p_0 + p_1 + \Delta n) + \tau_{p0} \cdot (n_0 + n_1 + \Delta n)}{(n_0 + p_0 + \Delta n)} \quad (\text{E.24})$$

## F. Variationen der SRH-Gleichung

$$\tau_{\text{SRH}} = \tau_{\text{n0}} \cdot \frac{(p_0 + p_1 + \Delta n) + k_\tau \cdot (n_0 + n_1 + \Delta n)}{(n_0 + p_0 + \Delta n)} \quad (\text{F.1})$$

$$\tau_{\text{SRH}}^{\text{LLI}} = \tau_{\text{n0}} \cdot \frac{(p_0 + p_1) + k_\tau \cdot (n_0 + n_1)}{(n_0 + p_0)}; \tau_{\text{SRH}}^{\text{HLI}} = \tau_{\text{n0}} \cdot \frac{\Delta n + k_\tau \cdot \Delta n}{\Delta n} = \tau_{\text{n0}} \cdot (1 + k_\tau) \quad (\text{F.2})$$

Injektionsabhängiger Lebensdauerhub

$$\Delta \tau_{\text{SRH}} = \tau_{\text{n0}} \cdot \frac{(p_0 + n_0 + k_\tau \cdot p_0 + k_\tau \cdot n_0) - ((p_0 + p_1) + k_\tau \cdot (n_0 + n_1))}{(n_0 + p_0)} \quad (\text{F.3})$$

$$\Delta \tau_{\text{SRH}} = \tau_{\text{n0}} \cdot \frac{n_0 - p_1 + k_\tau \cdot (p_0 - n_1)}{n_0 + p_0} \quad (\text{F.4})$$

### Herleitung der $DPSS - k_\tau$ -Gleichung

$$\Delta \tau_{\text{SRH}} = \tau_{\text{n0}}^{\text{DPSS}} \cdot \frac{n_0 - p_1^{\text{DPSS}} + k_\tau^{\text{DPSS}} (p_0 - n_1^{\text{DPSS}})}{(n_0 + p_0)} \quad (\text{F.5})$$

$$\tau_{\text{SRH}}^{\text{LLI}} = \tau_{\text{n0}}^{\text{DPSS}} \cdot \frac{(p_0 + p_1^{\text{DPSS}}) + k_\tau^{\text{DPSS}} (n_0 + n_1^{\text{DPSS}})}{(n_0 + p_0)} \quad (\text{F.6})$$

$$\frac{\Delta \tau_{\text{SRH}}}{\tau_{\text{SRH}}^{\text{LLI}}} = C = \frac{\tau_{\text{n0}}^{\text{DPSS}}}{\tau_{\text{n0}}^{\text{DPSS}}} \cdot \frac{\frac{n_0 - p_1^{\text{DPSS}} + k_\tau^{\text{DPSS}} (p_0 - n_1^{\text{DPSS}})}{n_0 + p_0}}{\frac{(p_0 + p_1^{\text{DPSS}}) + k_\tau^{\text{DPSS}} (n_0 + n_1^{\text{DPSS}})}{n_0 + p_0}} = \frac{n_0 - p_1^{\text{DPSS}} + k_\tau^{\text{DPSS}} (p_0 - n_1^{\text{DPSS}})}{(p_0 + p_1^{\text{DPSS}}) + k_\tau^{\text{DPSS}} (n_0 + n_1^{\text{DPSS}})} \quad (\text{F.7})$$

Kürzen und mit Nenner multiplizieren

$$(p_0 + p_1^{\text{DPSS}} + k_\tau^{\text{DPSS}} (n_0 + n_1^{\text{DPSS}})) \cdot C = n_0 - p_1^{\text{DPSS}} + k_\tau^{\text{DPSS}} (p_0 - n_1^{\text{DPSS}}) \quad (\text{F.8})$$

Umstellen nach  $k_\tau^{\text{DPSS}}$

$$(p_0 + p_1^{\text{DPSS}}) \cdot C - n_0 + p_1^{\text{DPSS}} = k_\tau^{\text{DPSS}} (p_0 - n_1^{\text{DPSS}}) - C \cdot k_\tau^{\text{DPSS}} (n_0 + n_1^{\text{DPSS}}) \quad (\text{F.9})$$

$$k_\tau^{\text{DPSS}} ((p_0 - n_1^{\text{DPSS}}) - C (n_0 + n_1^{\text{DPSS}})) = (p_0 + p_1^{\text{DPSS}}) \cdot C - n_0 + p_1^{\text{DPSS}} \quad (\text{F.10})$$

$$k_\tau^{\text{DPSS}} (p_0 - C \cdot n_0 - n_1^{\text{DPSS}} \cdot (1 + C)) = (C \cdot p_0 - n_0 + p_1^{\text{DPSS}} \cdot (1 + C)) \quad (\text{F.11})$$

Quotient bilden und Zusammenfassen

$$k_\tau^{\text{DPSS}} = \frac{C \cdot p_0 - n_0 + p_1^{\text{DPSS}} \cdot (1 + C)}{p_0 - C \cdot n_0 - n_1^{\text{DPSS}} \cdot (1 + C)} \cdot \frac{p_0 - p_0}{p_0 + n_0 - (n_0 + n_1^{\text{DPSS}}) \cdot (1 + C)} = \frac{-(p_0 + n_0) + (p_0 + p_1^{\text{DPSS}}) \cdot (1 + C)}{(p_0 + n_0) - (n_0 + n_1^{\text{DPSS}}) \cdot (1 + C)} \quad (\text{F.12})$$

Ermitteln von  $(1 + C)$  für eine Parametrisierung

$$(1 + C) = \frac{n_0 - p_1 + k_\tau \cdot (p_0 - n_1)}{p_0 + p_1 + k_\tau \cdot (n_0 + n_1)} + \frac{p_0 + p_1 + k_\tau \cdot (n_0 + n_1)}{p_0 + p_1 + k_\tau \cdot (n_0 + n_1)} = \frac{(p_0 + n_0) \cdot (1 + k_\tau)}{p_0 + p_1 + k_\tau \cdot (n_0 + n_1)} \quad (\text{F.13})$$

Einsetzen in DPSS-Gleichung

$$k_\tau^{\text{DPSS}} = \frac{-(p_0 + n_0) + (p_0 + p_1^{\text{DPSS}}) \cdot \frac{(p_0 + n_0) \cdot (1 + k_\tau)}{p_0 + p_1 + k_\tau \cdot (n_0 + n_1)}}{(p_0 + n_0) - (n_0 + n_1^{\text{DPSS}}) \cdot \frac{(p_0 + n_0) \cdot (1 + k_\tau)}{p_0 + p_1 + k_\tau \cdot (n_0 + n_1)}} \quad (\text{F.14})$$

Ausmultiplizieren

$$k_{\tau}^{DPSS} = \frac{\frac{-(p_0+n_0) \cdot (p_0+p_1+k_{\tau} \cdot (n_0+n_1)) + (p_0+p_1^{DPSS}) \cdot (p_0+n_0) \cdot (1+k_{\tau})}{p_0+p_1+k_{\tau} \cdot (n_0+n_1)}}{\frac{(p_0+n_0) \cdot (p_0+p_1+k_{\tau} \cdot (n_0+n_1)) - (n_0+n_1^{DPSS}) \cdot (p_0+n_0) \cdot (1+k_{\tau})}{p_0+p_1+k_{\tau} \cdot (n_0+n_1)}} \quad (F.15)$$

$$k_{\tau}^{DPSS} = \frac{-(p_0+n_0) \cdot (p_0+p_1+k_{\tau} \cdot (n_0+n_1)) + (p_0+p_1^{DPSS}) \cdot (p_0+n_0) \cdot (1+k_{\tau})}{(p_0+n_0) \cdot (p_0+p_1+k_{\tau} \cdot (n_0+n_1)) - (n_0+n_1^{DPSS}) \cdot (p_0+n_0) \cdot (1+k_{\tau})} \quad (F.16)$$

$$k_{\tau}^{DPSS} = \frac{-(p_0+p_1+k_{\tau} \cdot (n_0+n_1)) + (p_0+p_1^{DPSS}) \cdot (1+k_{\tau})}{(p_0+p_1+k_{\tau} \cdot (n_0+n_1)) - (n_0+n_1^{DPSS}) \cdot (1+k_{\tau})} \quad (F.17)$$

Zusammenfassen

$$k_{\tau}^{DPSS} = \frac{k_{\tau} \cdot (p_0-n_0) - (p_1+k_{\tau} \cdot n_1) + p_1^{DPSS} \cdot (1+k_{\tau}) \cdot -1}{(p_0-n_0) + (p_1+k_{\tau} \cdot n_1) - n_1^{DPSS} \cdot (1+k_{\tau}) \cdot -1} \quad (F.18)$$

$$k_{\tau}^{DPSS} = \frac{k_{\tau} \cdot (-p_0+n_0) + (p_1+k_{\tau} \cdot n_1) - p_1^{DPSS} \cdot (1+k_{\tau})}{(-p_0+n_0) - (p_1+k_{\tau} \cdot n_1) + n_1^{DPSS} \cdot (1+k_{\tau})} \quad (F.19)$$

### Herleitung der $DPSS - \tau_{n0}$ -Gleichung für p-Typ

$$\tau_{SRH}^{HLI} = \Delta\tau_{SRH} + \tau_{SRH}^{LLI} = \tau_{n0}^{DPSS} \cdot (1+k_{\tau}^{DPSS}) \quad (F.20)$$

$$k_{\tau}^{DPSS} = \frac{-(p_0+n_0) + (p_0+p_1^{DPSS}) \cdot (1+C)}{(p_0+n_0) - (n_0+n_1^{DPSS}) \cdot (1+C)} \quad (F.21)$$

$$\tau_{SRH}^{HLI} = \tau_{n0}^{DPSS} \cdot \left( \frac{-(n_0+n_1^{DPSS}) \cdot (1+C) + (p_0+p_1^{DPSS}) \cdot (1+C)}{(p_0+n_0) - (n_0+n_1^{DPSS}) \cdot (1+C)} \right) \quad (F.22)$$

Kürzen und anschließend dividieren durch  $(1+C)$

$$(1+C) = \frac{\tau_{SRH}^{HLI}}{\tau_{SRH}^{LLI}} = \frac{\tau_{SRH}^{LLI} + \Delta\tau_{SRH}}{\tau_{SRH}^{LLI}} \quad (F.23)$$

$$\tau_{SRH}^{LLI} = \tau_{n0}^{DPSS} \cdot \left( \frac{-(n_0+n_1^{DPSS}) + (p_0+p_1^{DPSS})}{(p_0+n_0) - (n_0+n_1^{DPSS}) \cdot (1+C)} \right) \quad (F.24)$$

Mit Nenner Multiplizieren

$$\tau_{SRH}^{LLI} \cdot ((p_0+n_0) - (n_0+n_1^{DPSS}) \cdot (1+C)) = \tau_{n0}^{DPSS} \cdot ((p_0+p_1^{DPSS}) - (n_0+n_1^{DPSS})) \quad (F.25)$$

$(1+C)$  auflösen

$$\tau_{SRH}^{LLI} \cdot (p_0+n_0) - (n_0+n_1^{DPSS}) \cdot (\tau_{SRH}^{LLI} + \Delta\tau_{SRH}) = \tau_{n0}^{DPSS} \cdot ((p_0+p_1^{DPSS}) - (n_0+n_1^{DPSS})) \quad (F.26)$$

Kürzen

$$\tau_{SRH}^{LLI} \cdot (p_0-n_1^{DPSS}) - (n_0+n_1^{DPSS}) \cdot \Delta\tau_{SRH} = \tau_{n0}^{DPSS} \cdot ((p_0+p_1^{DPSS}) - (n_0+n_1^{DPSS})) \quad (F.27)$$

Quotient bilden

$$\tau_{n0}^{DPSS} = \frac{\tau_{SRH}^{LLI} \cdot (p_0 - n_1^{DPSS}) - (n_0 + n_1^{DPSS}) \cdot \Delta\tau_{SRH} \cdot -1}{p_0 + p_1^{DPSS} - n_0 - n_1^{DPSS}} \cdot -1 \quad (F.28)$$

Zusammenfassen

$$\tau_{n0}^{DPSS} = \frac{(n_0 + n_1^{DPSS}) \cdot \Delta\tau_{SRH} - \tau_{SRH}^{LLI} \cdot (p_0 - n_1^{DPSS})}{n_0 + n_1^{DPSS} - p_0 - p_1^{DPSS}} \quad (F.29)$$

Zähler umstellen

$$\tau_{n0}^{DPSS} = \frac{\Delta\tau_{SRH} \cdot n_0 - \tau_{SRH}^{LLI} \cdot p_0 + n_1^{DPSS} (\Delta\tau_{SRH} + \tau_{SRH}^{LLI})}{n_0 + n_1^{DPSS} - p_0 - p_1^{DPSS}} \quad (F.30)$$

Ausmultiplizieren und Einsetzen einer Parametrisierung

$$\tau_{n0}^{DPSS} = \frac{\tau_{n0} \cdot \left[ \frac{n_0 \cdot (n_0 - p_1 + k_\tau (p_0 - n_1)) - p_0 \cdot (p_0 + p_1 + k_\tau (n_0 - n_1))}{p_0 + n_0} \right] + n_1^{DPSS} \cdot \tau_{SRH}^{HLI}}{n_0 + n_1^{DPSS} - p_0 - p_1^{DPSS}} \quad (F.31)$$

$$\tau_{n0}^{DPSS} = \frac{\tau_{n0} \cdot \left[ \frac{n_0^2 - n_0 \cdot p_1 + k_\tau \cdot n_0 \cdot p_0 - k_\tau \cdot n_0 \cdot n_1 - p_0^2 - p_0 \cdot p_1 - k_\tau \cdot n_0 \cdot p_0 - k_\tau \cdot p_0 \cdot n_1}{p_0 + n_0} \right] + n_1^{DPSS} \cdot \tau_{SRH}^{HLI}}{n_0 + n_1^{DPSS} - p_0 - p_1^{DPSS}} \quad (F.32)$$

$$\tau_{n0}^{DPSS} = \frac{\tau_{n0} \cdot \left[ \frac{n_0^2 - p_0^2 - n_0 \cdot p_1 - p_0 \cdot p_1 - k_\tau \cdot n_0 \cdot n_1 - k_\tau \cdot p_0 \cdot n_1}{p_0 + n_0} \right] + n_1^{DPSS} \cdot \tau_{n0} (1 + k_\tau)}{n_0 + n_1^{DPSS} - p_0 - p_1^{DPSS}} \quad (F.33)$$

$$\tau_{n0}^{DPSS} = \frac{\tau_{n0} \cdot \left[ \frac{(p_0 + n_0) \cdot (n_0 - p_0 - p_1 - k_\tau \cdot n_1)}{p_0 + n_0} \right] + n_1^{DPSS} \cdot \tau_{n0} \cdot (1 + k_\tau)}{n_0 + n_1^{DPSS} - p_0 - p_1^{DPSS}} \quad (F.34)$$

$$\tau_{n0}^{DPSS} = \frac{\tau_{n0} \cdot (n_0 - p_0 - p_1 - k_\tau \cdot n_1) + n_1^{DPSS} \cdot \tau_{n0} \cdot (1 + k_\tau)}{n_0 + n_1^{DPSS} - p_0 - p_1^{DPSS}} \quad (F.35)$$

$$\tau_{n0}^{DPSS} = \tau_{n0} \cdot \frac{(n_0 - p_0 - p_1 - k_\tau \cdot n_1) + n_1^{DPSS} \cdot (1 + k_\tau) \cdot -1}{n_0 + n_1^{DPSS} - p_0 - p_1^{DPSS}} \cdot -1 \quad (F.36)$$

Zusammenfassen

$$\tau_{n0}^{DPSS} = \tau_{n0} \cdot \frac{(p_0 - n_0) + (p_1 + k_\tau \cdot n_1) - n_1^{DPSS} \cdot (1 + k_\tau)}{(p_0 + n_0) + (p_1^{DPSS} - n_1^{DPSS})} \quad (F.37)$$

**Herleitung der  $DPSS - \tau_{p0}$ -Gleichung für n-Typ**

$$k_\tau^{DPSS} = \frac{-(p_0 + n_0) + (p_0 + p_1^{DPSS}) \cdot (1 + C)}{(p_0 + n_0) - (n_0 + n_1^{DPSS}) \cdot (1 + C)} \quad (F.38)$$

$$\tau_{SRH}^{HLI} = \Delta\tau_{SRH} + \tau_{SRH}^{LLI} = \tau_{p0}^{DPSS} \cdot \left( 1 + \frac{1}{k_\tau^{DPSS}} \right) \quad (F.39)$$

$$\Delta\tau_{SRH} + \tau_{SRH}^{LLI} = \tau_{p0}^{DPSS} \cdot \left( \frac{-(n_0 + n_1^{DPSS}) \cdot (1 + C) + (p_0 + p_1^{DPSS}) \cdot (1 + C)}{-(p_0 + n_0) + (p_0 + p_1^{DPSS}) \cdot (1 + C)} \right) \quad (F.40)$$

Kürzen und anschließend dividieren durch  $(1 + C)$

$$(1 + C) = \frac{\tau_{\text{SRH}}^{\text{HLI}}}{\tau_{\text{SRH}}^{\text{LLI}}} = \frac{\tau_{\text{SRH}}^{\text{LLI}} + \Delta\tau_{\text{SRH}}}{\tau_{\text{SRH}}^{\text{LLI}}} \quad (\text{F.41})$$

$$\tau_{\text{SRH}}^{\text{LLI}} = \tau_{\text{p0}}^{\text{DPSS}} \cdot \left( \frac{-(n_0 + n_1^{\text{DPSS}}) + (p_0 + p_1^{\text{DPSS}})}{-(p_0 + n_0) + (p_0 + p_1^{\text{DPSS}}) \cdot (1 + C)} \right) \quad (\text{F.42})$$

$$\tau_{\text{SRH}}^{\text{LLI}} \cdot (-(p_0 + n_0) + (p_0 + p_1^{\text{DPSS}}) \cdot (1 + C)) = \tau_{\text{p0}}^{\text{DPSS}} \cdot ((p_0 + p_1^{\text{DPSS}}) - (n_0 + n_1^{\text{DPSS}})) \quad (\text{F.43})$$

(1 + C) auflösen

$$-\tau_{\text{SRH}}^{\text{LLI}} \cdot (p_0 + n_0) + (p_0 + p_1^{\text{DPSS}}) \cdot (\tau_{\text{SRH}}^{\text{LLI}} + \Delta\tau_{\text{SRH}}) = \tau_{\text{p0}}^{\text{DPSS}} \cdot ((p_0 + p_1^{\text{DPSS}}) - (n_0 + n_1^{\text{DPSS}})) \quad (\text{F.44})$$

$$\tau_{\text{SRH}}^{\text{LLI}} \cdot (p_1^{\text{DPSS}} - n_0) + \Delta\tau_{\text{SRH}} \cdot (p_0 + p_1^{\text{DPSS}}) = \tau_{\text{p0}}^{\text{DPSS}} \cdot ((p_0 + p_1^{\text{DPSS}}) - (n_0 + n_1^{\text{DPSS}})) \quad (\text{F.45})$$

Quotient bilden

$$\tau_{\text{p0}}^{\text{DPSS}} = \frac{\tau_{\text{SRH}}^{\text{LLI}} \cdot (p_1^{\text{DPSS}} - n_0) + \Delta\tau_{\text{SRH}} \cdot (p_0 + p_1^{\text{DPSS}})}{p_0 + p_1^{\text{DPSS}} - n_0 - n_1^{\text{DPSS}}} \quad (\text{F.46})$$

Zusammenfassen

$$\tau_{\text{p0}}^{\text{DPSS}} = \frac{\Delta\tau_{\text{SRH}} \cdot (p_0 + p_1^{\text{DPSS}}) - \tau_{\text{SRH}}^{\text{LLI}} \cdot (n_0 - p_1^{\text{DPSS}})}{p_0 + p_1^{\text{DPSS}} - n_0 - n_1^{\text{DPSS}}} \quad (\text{F.47})$$

Zähler umstellen

$$\tau_{\text{p0}}^{\text{DPSS}} = \frac{\Delta\tau_{\text{SRH}} \cdot p_0 - \tau_{\text{SRH}}^{\text{LLI}} \cdot n_0 + p_1^{\text{DPSS}} \cdot (\tau_{\text{SRH}}^{\text{LLI}} + \Delta\tau_{\text{SRH}})}{p_0 + p_1^{\text{DPSS}} - n_0 - n_1^{\text{DPSS}}} \quad (\text{F.48})$$

Ausmultiplizieren und Einsetzen einer Parametrisierung

$$\tau_{\text{p0}}^{\text{DPSS}} = \frac{\tau_{\text{p0}} \cdot \left[ \frac{p_0 \cdot (k_\tau^{-1} \cdot (n_0 - p_1) + p_0 - n_1) - n_0 \cdot (k_\tau^{-1} \cdot (p_0 + p_1) + n_0 + n_1)}{p_0 + n_0} \right] + p_1^{\text{DPSS}} \cdot \tau_{\text{SRH}}^{\text{HLI}}}{p_0 + p_1^{\text{DPSS}} - n_0 - n_1^{\text{DPSS}}} \quad (\text{F.49})$$

Umstellen

$$\tau_{\text{p0}}^{\text{DPSS}} = \frac{\tau_{\text{p0}} \cdot \left[ \frac{k_\tau^{-1} \cdot p_0 \cdot n_0 - k_\tau^{-1} \cdot p_0 \cdot p_1 + p_0^2 - p_0 \cdot n_1 - k_\tau^{-1} \cdot p_0 \cdot n_0 - k_\tau^{-1} \cdot n_0 \cdot p_1 - n_0^2 - n_0 \cdot n_1}{p_0 + n_0} \right] + p_1^{\text{DPSS}} \cdot \tau_{\text{SRH}}^{\text{HLI}}}{p_0 + p_1^{\text{DPSS}} - n_0 - n_1^{\text{DPSS}}} \quad (\text{F.50})$$

$$\tau_{\text{p0}}^{\text{DPSS}} = \frac{\tau_{\text{p0}} \cdot \left[ \frac{p_0^2 - n_0^2 - k_\tau^{-1} \cdot n_0 \cdot p_1 - k_\tau^{-1} \cdot p_0 \cdot p_1 - p_0 \cdot n_1 - n_0 \cdot n_1}{p_0 + n_0} \right] + p_1^{\text{DPSS}} \cdot \tau_{\text{p0}} \cdot (1 + k_\tau^{-1})}{p_0 + p_1^{\text{DPSS}} - n_0 - n_1^{\text{DPSS}}} \quad (\text{F.51})$$

$$\tau_{\text{p0}}^{\text{DPSS}} = \frac{\tau_{\text{p0}} \cdot \left[ \frac{(p_0 + n_0) \cdot (p_0 - n_0 - k_\tau^{-1} \cdot p_1 - n_1)}{(p_0 + n_0)} \right] + p_1^{\text{DPSS}} \cdot \tau_{\text{p0}} \cdot (1 + k_\tau^{-1})}{p_0 + p_1^{\text{DPSS}} - n_0 - n_1^{\text{DPSS}}} \quad (\text{F.52})$$

$$\tau_{\text{p0}}^{\text{DPSS}} = \frac{\tau_{\text{p0}} \cdot (p_0 - n_0 - k_\tau^{-1} \cdot p_1 - n_1) + p_1^{\text{DPSS}} \cdot \tau_{\text{p0}} \cdot (1 + k_\tau^{-1})}{p_0 + p_1^{\text{DPSS}} - n_0 - n_1^{\text{DPSS}}} \quad (\text{F.53})$$

Zusammenfassen

$$\tau_{\text{p0}}^{\text{DPSS}} = \tau_{\text{p0}} \cdot \frac{(p_0 - n_0) - (k_\tau^{-1} \cdot p_1 + n_1) + p_1^{\text{DPSS}} \cdot (1 + k_\tau^{-1})}{(p_0 - n_0) + (p_1^{\text{DPSS}} - n_1^{\text{DPSS}})} \quad (\text{F.54})$$

## G. Grenzfälle der SRH-Rekombination

Bildet man die Ableitung des Logarithmus der SRH-Lebensdauer nach dem Logarithmus der Injektionsdichte so erhält man eine Gleichung, welche den Anstieg der Lebensdauer mit der Injektion beschreibt (siehe Anhang I). Bei gleicher Basis des Logarithmus ist dieses Ergebnis unabhängig von dem Wert der Basis:

$$\frac{d \ln(\tau_{\text{SRH}}(\Delta n))}{d \ln(\Delta n)} = \frac{(k_{\tau} + 1) \cdot \Delta n}{(k_{\tau} + 1) \cdot \Delta n + (p_0 + p_1) + k_{\tau} \cdot (n_0 + n_1)} - \frac{\Delta n}{(p_0 + n_0 + \Delta n)} \quad (\text{G.1})$$

Für den Fall von extremer Hochinjektion und Niederinjektion ist diese Ableitung 0. Für Defekte innerhalb der Bandhälfte der Majoritäten ergibt sich der maximal erreichbare Anstieg von eins, wenn erstens  $\Delta n \ll p_0 + n_0$  ist, zweitens  $(k_{\tau} + 1) \times \Delta n \gg (p_0 + p_1)$  ist und drittens  $(k_{\tau}^{-1} + 1) \times \Delta n \gg (n_0 + n_1)$  ist.

$$\frac{d \ln(\tau_{\text{SRH}}(\Delta n))}{d \ln(\Delta n)} = \frac{1}{1 + \frac{(p_0 + p_1) + k_{\tau} \cdot (n_0 + n_1)}{(k_{\tau} + 1) \cdot \Delta n}} - 0 \quad (\text{G.2})$$

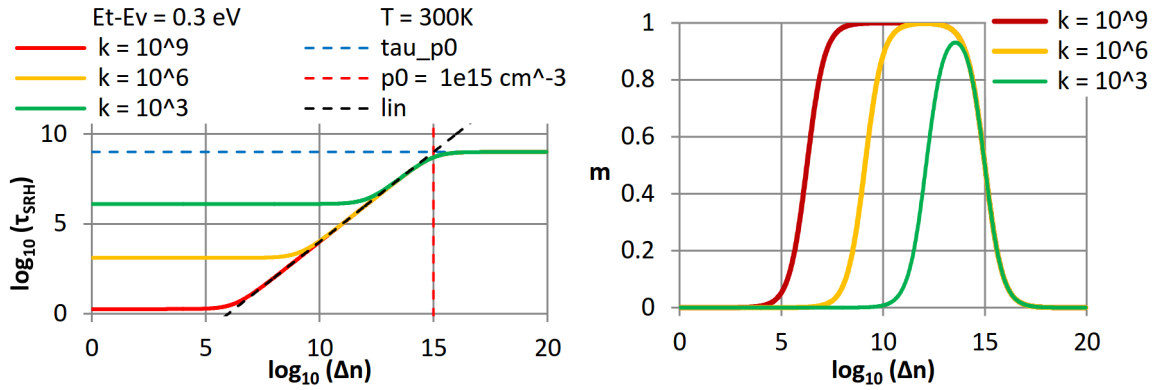


Abb. G.1: a) Verlauf der Lebensdauer stark asymmetrischer Defekte b) Anstieg in doppelt logarithmischer Darstellung

Dieses Kriterium wird dann erreicht, wenn es sich um einen stark asymmetrischen Defekt (p-Typ:  $k_{\tau} > 1000$ ; n-Typ:  $k_{\tau} < 0,001$ ) innerhalb der Bandhälfte der Majoritäten handelt. Abbildung G.1 a stellt das Verhalten von asymmetrischen Defekten mit unterschiedlichen Symmetriefaktoren dar. Es ist klar zu erkennen dass mit steigendem Symmetriefaktor der Unterschied in der Lebensdauer zwischen Hoch- und Niederinjektion ansteigt. Ebenfalls zu erkennen ist der Injektionsbereich, in dem der Anstieg der injektionsabhängigen Lebensdauer eins ist. Dies bedeutet, dass für eine Steigerung der Injektionsdichte um eine Größenordnung die Lebensdauer um eine Größenordnung steigt. Eine eindeutige Defektcharakterisierung asymmetrischer Defekte kann also nur dann erfolgen, wenn in der gemessenen injektionsabhängigen Lebensdauerkurve der Bereich enthalten ist, in dem die Lebensdauer gegen  $\tau_{\text{LLI}}$  konvergiert. Der Wendepunkt in den injektionsabhängigen Lebensdauerkurven ergibt sich für doppelt logarithmische Darstellung durch das Nullsetzen der zweiten Ableitung (siehe Anhang H) allgemein zu:

$$\Delta n_w = \sqrt{\frac{(p_0 + n_0) \cdot (p_0 + p_1 + k_{\tau} (n_0 + n_1))}{(k_{\tau} + 1)}} \quad (\text{G.3})$$

Unter der Annahme, dass die Lebensdauerkurve punktsymmetrisch zum Wendepunkt ist, ergibt



sich das Injektionsniveau  $\Delta n_{min}$ , ab dem ein asymmetrischer Defekt gegen  $\tau_{LLI}$  konvergiert zu:

$$\Delta n_{min} = \frac{\Delta n_w^2}{(p_0 + n_0)} = \frac{p_0 + p_1 + k_\tau (n_0 + n_1)}{(k_\tau + 1)} \quad (G.4)$$

Dieses niedrige Injektionsniveau muss in der Lebensdauerkurve mindestens enthalten sein, um einen asymmetrischen Defekt zu charakterisieren. Als Näherungen ergeben sich:

$$\Delta n_{min}^{p-Typ} \approx n_0 + n_1 + \frac{p_0 + p_1}{k_\tau}; \quad \Delta n_{min}^{n-Typ} \approx p_0 + p_1 + \frac{n_0 + n_1}{k_\tau^{-1}} \quad (G.5)$$

Ein weiteres Merkmal stark asymmetrischer Defekte ist, dass für sie die Lebensdauer in Hochinjektion gegen die Einfangzeitkonstante für Majoritäten konvergiert. Dies folgt unmittelbar aus der SRH-Gleichung unter Hochinjektion:

$$\tau_{SRH}^{HLI, p-Typ} = \tau_{p0} \cdot (k_\tau^{-1} + 1); \quad \tau_{SRH}^{HLI, n-Typ} = \tau_{n0} \cdot (k_\tau + 1) \quad (G.6)$$

Dies ist in Abbildung G.1 a zu sehen, da der lineare Anstieg von eins exakt bei  $p_0 + n_0$  die Einfangzeitkonstante für Majoritäten  $\tau_{p0}$  schneidet.  $n_0$  ist bei der gegebenen Dotierstoffkonzentration und Temperatur vernachlässigbar klein. Für extrem flache Defekte welche in Hochinjektion maximal rekombinationsaktiv sind ergibt sich der maximal erreichbare Anstieg der injektionsabhängigen Lebensdauer zu minus eins, wenn erstens entweder  $p_1$  oder  $(k_\tau \times n_1) \gg (1 + k_\tau) \times \Delta n$  ist und zweitens  $\Delta n \gg (p_0 + n_0)$  ist.

$$\frac{d \ln (\tau_{SRH} (\Delta n))}{d \ln (\Delta n)} = 0 - \frac{1}{1 + \frac{(p_0 + n_0)}{\Delta n}} \quad (G.7)$$

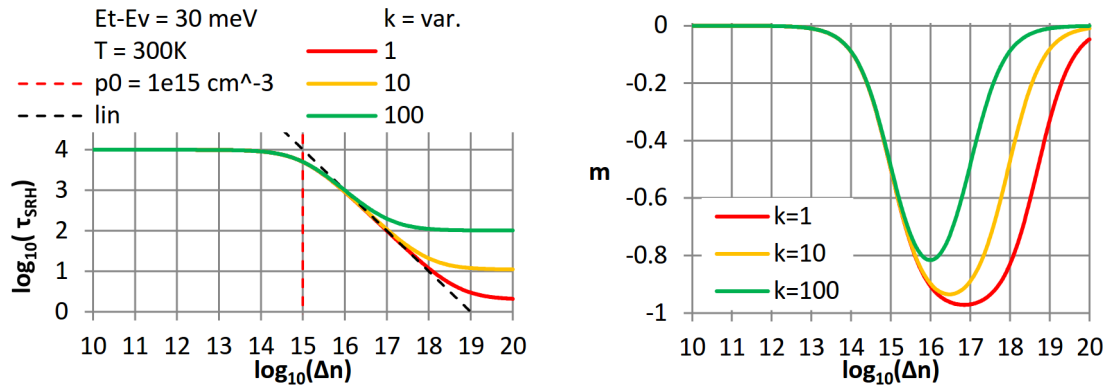


Abb. G.2: a) Verlauf der Lebensdauer extrem flacher Defekte b) Anstieg flacher Defekte

Abbildung G.2 stellt das Verhalten von flachen Defekten mit unterschiedlichen Symmetriefaktoren dar. Es ist klar zu erkennen, dass mit steigendem Symmetriefaktor der Unterschied in der Lebensdauer zwischen Hoch- und Niederinjektion sinkt. Ebenfalls zu erkennen ist der Injektionsbereich, in dem der Anstieg der injektionsabhängigen Lebensdauer nahe minus eins ist.

## H. Ableitungen der SRH-Gleichung in doppelt-logarithmischer Darstellung

### Erste Ableitung

$$\tau_{SRH} = \tau_{n0} \cdot \left( \frac{p_0 + p_1 + \Delta n + k_\tau \cdot (n_0 + n_1 + \Delta n)}{n_0 + p_0 + \Delta n} \right) \quad (\text{H.1})$$

$$\ln(\tau_{SRH}(\Delta n)) = \ln \left( \tau_{n0} \cdot \left( \frac{p_0 + p_1 + \Delta n + k_\tau \cdot (n_0 + n_1 + \Delta n)}{n_0 + p_0 + \Delta n} \right) \right) \quad (\text{H.2})$$

Substitution mit  $u = \ln(\Delta n)$  und  $z = \tau_{SRH}(\Delta n)$

$$\ln(z) = \ln(\tau_{n0}) + \ln \left( \frac{p_0 + p_1 + e^u + k_\tau \cdot (n_0 + n_1 + e^u)}{n_0 + p_0 + e^u} \right) \quad (\text{H.3})$$

$$\frac{d \log_{10}(z)}{d \log_{10}(\Delta n)} = \frac{d \ln(z)}{du} = \frac{d}{du} \ln \left( \frac{p_0 + p_1 + e^u + k_\tau \cdot (n_0 + n_1 + e^u)}{n_0 + p_0 + e^u} \right) \quad (\text{H.4})$$

$$\frac{d \ln(z)}{du} = \frac{d}{du} \ln(p_0 + p_1 + e^u + k_\tau \cdot (n_0 + n_1 + e^u)) - \frac{d}{du} \ln(n_0 + p_0 + e^u) \quad (\text{H.5})$$

$$\frac{d \ln(z)}{du} = \frac{dz}{z} = \frac{\frac{d}{du}(p_0 + p_1 + e^u + k_\tau \cdot (n_0 + n_1 + e^u))}{p_0 + p_1 + e^u + k_\tau \cdot (n_0 + n_1 + e^u)} - \frac{\frac{d}{du}(n_0 + p_0 + e^u)}{n_0 + p_0 + e^u} \quad (\text{H.6})$$

$$\frac{d \ln(z)}{du} = \frac{(1 + k_\tau) \cdot e^u}{p_0 + p_1 + e^u + k_\tau \cdot (n_0 + n_1 + e^u)} - \frac{e^u}{n_0 + p_0 + e^u} \quad (\text{H.7})$$

Rücksostituieren

$$\frac{d \ln(\tau_{SRH}(\Delta n))}{d \ln(\Delta n)} = \frac{(1 + k_\tau) \cdot \Delta n}{p_0 + p_1 + \Delta n + k_\tau \cdot (n_0 + n_1 + \Delta n)} - \frac{\Delta n}{n_0 + p_0 + \Delta n} \quad (\text{H.8})$$

Zusammenfassen

$$\frac{d \ln(\tau_{SRH}(\Delta n))}{d \ln(\Delta n)} = \frac{(1 + k_\tau) \cdot \Delta n}{(1 + k_\tau) \cdot \Delta n + (p_0 + p_1) + k_\tau \cdot (n_0 + n_1)} - \frac{\Delta n}{(n_0 + p_0) + \Delta n} \quad (\text{H.9})$$

$$\frac{d \ln(\tau_{SRH}(\Delta n))}{d \ln(\Delta n)} = \frac{1}{1 + \frac{(p_0 + p_1) + k_\tau \cdot (n_0 + n_1)}{(1 + k_\tau) \cdot \Delta n}} - \frac{1}{1 + \frac{(n_0 + p_0)}{\Delta n}} \quad (\text{H.10})$$

$$\text{HLI: } \lim_{\Delta n \rightarrow \infty} \frac{d \ln(\tau_{SRH}(\Delta n))}{d \ln(\Delta n)} = \frac{(1 + k_\tau) \cdot \Delta n}{(1 + k_\tau) \cdot \Delta n} - \frac{\Delta n}{\Delta n} = 1 - 1 = 0$$

$$\text{LLI: } \lim_{\Delta n \rightarrow 0} \frac{d \ln(\tau_{SRH}(\Delta n))}{d \ln(\Delta n)} = \frac{0}{(1 + k_\tau) \cdot \Delta n + (p_0 + p_1) + k_\tau \cdot (n_0 + n_1)} - \frac{0}{(n_0 + p_0) + \Delta n} = 0$$

## Zweite Ableitung

$$\frac{d^2 \ln(z)}{du^2} = \frac{d}{du} \left( \frac{(1+k_\tau) \cdot e^u}{p_0 + p_1 + e^u + k_\tau (n_0 + n_1 + e^u)} - \frac{e^u}{n_0 + p_0 + e^u} \right) \quad (\text{H.11})$$

$$\frac{d^2 \ln(z)}{du^2} = (1+k_\tau) \cdot \frac{d}{du} \left( \frac{e^u}{p_0 + p_1 + e^u + k_\tau \cdot (n_0 + n_1 + e^u)} \right) - \frac{d}{du} \left( \frac{e^u}{n_0 + p_0 + e^u} \right) \quad (\text{H.12})$$

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \ln(z)}{du^2} &= (1+k_\tau) \cdot \frac{d}{du} \left( \frac{e^u}{(1+k_\tau) \cdot e^u + p_0 + p_1 + k_\tau \cdot (n_0 + n_1)} \right) \\ &\quad - \frac{(n_0 + p_0 + e^u) \cdot \frac{d}{du}(e^u) - e^u \cdot \frac{d}{du}(n_0 + p_0 + e^u)}{(n_0 + p_0 + e^u)^2} \end{aligned} \quad (\text{H.13})$$

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \ln(z)}{du^2} &= (1+k_\tau) \cdot \left( \frac{((1+k_\tau) \cdot e^u + p_0 + p_1 + k_\tau \cdot (n_0 + n_1)) \cdot \frac{d}{du}(e^u) - e^u \cdot \frac{d}{du}((1+k_\tau) \cdot e^u)}{((1+k_\tau) \cdot e^u + p_0 + p_1 + k_\tau \cdot (n_0 + n_1))^2} \right) \\ &\quad - \frac{(n_0 + p_0 + e^u) \cdot e^u - e^{2u}}{(n_0 + p_0 + e^u)^2} \end{aligned} \quad (\text{H.14})$$

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \ln(z)}{du^2} &= (1+k_\tau) \cdot \left( \frac{((1+k_\tau) \cdot e^u + p_0 + p_1 + k_\tau \cdot (n_0 + n_1)) \cdot e^u - (1+k_\tau) \cdot e^{2u}}{((1+k_\tau) \cdot e^u + p_0 + p_1 + k_\tau \cdot (n_0 + n_1))^2} \right) \\ &\quad - \frac{(n_0 + p_0) \cdot e^u}{(n_0 + p_0 + e^u)^2} \end{aligned} \quad (\text{H.15})$$

$$\frac{d^2 \ln(z)}{du^2} = \frac{(p_0 + p_1 + k_\tau \cdot (n_0 + n_1)) \cdot (1+k_\tau) \cdot e^u}{((1+k_\tau) \cdot e^u + p_0 + p_1 + k_\tau \cdot (n_0 + n_1))^2} - \frac{(n_0 + p_0) \cdot e^u}{(n_0 + p_0 + e^u)^2} \quad (\text{H.16})$$

Rücksubstituieren

$$\frac{d^2 \ln(\tau_{\text{SRH}}(\Delta n))}{d(\ln(\Delta n))^2} = \frac{(p_0 + p_1 + k_\tau \cdot (n_0 + n_1)) \cdot (1+k_\tau) \cdot \Delta n}{((1+k_\tau) \cdot \Delta n + p_0 + p_1 + k_\tau \cdot (n_0 + n_1))^2} - \frac{(n_0 + p_0) \cdot \Delta n}{(n_0 + p_0 + \Delta n)^2} \quad (\text{H.17})$$

Die Bestimmung des Wendepunkts durch Nullsetzen der zweiten Ableitung ist nicht trivial und wurde mit der Software „wxMaxima“ durchgeführt. Es ergeben sich die folgenden drei Lösungen:

$$\Delta n_{w\_1} = -\sqrt{\frac{(p_0 + n_0) \cdot (p_0 + p_1 + k_\tau \cdot (n_0 + n_1))}{1 + k_\tau}} \quad (\text{H.18})$$

$$\Delta n_{w\_2} = \sqrt{\frac{(p_0 + n_0) \cdot (p_0 + p_1 + k_\tau \cdot (n_0 + n_1))}{1 + k_\tau}} \quad (\text{H.19})$$

$$\Delta n_{w\_3} = 0 \quad (\text{H.20})$$

Lösung  $\Delta n_{w\_3}$  ist trivial, während Lösung  $\Delta n_{w\_1}$  und  $\Delta n_{w\_2}$  denselben Betrag, aber ein anderes Vorzeichen haben. Da nur positive Konzentrationen physikalisch sinnvoll erscheinen, ist  $\Delta n_{w\_2}$  die gesuchte Wendestelle der injektionsabhängigen Lebensdauer in doppelt logarithmischer Darstellung.

## Danksagung

Hiermit möchte ich Allen danken, die direkt oder indirekt zu dem Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben. Ich freue mich sehr, dass ich Teil des Forschungs- und Entwicklungsteams von Bosch Solar Energy, bzw. später bei Solarworld sein durfte. Es war für mich eine sehr schöne und aufregende Zeit.

Allen voran danke ich Dr. Daniel Stichtenoth, für seine Geduld und seine Fähigkeit mich zu motivieren. Er hat den Löwenanteil bei der Betreuung dieser Doktorarbeit geleistet. Hiermit möchte ich Dr. Hans-Joachim Krokoszinski für die freundliche Aufnahme in diese Abteilung danken. Auch möchte ich Professor Carsten Ronning danken, welcher die universitäre Betreuung dieser Industriepromotion übernommen hatte. Die Gruppentreffen und Diskussionen an der Universität Jena waren für mich eine angenehme Bereicherung. Dr. Karsten Meyer möchte ich danken, welcher mir oft einen guten Rat geben konnte (und die knackigsten Abteilungssitzungen halten konnte). Auch danke ich Dr. Thomas Roth, Daniela Grote, Anke van Brakel und Daniel Wichmann für die Einarbeitung in die Messsysteme und viele Tipps und Hilfestellungen. Auch danke ich Dr. Robert Carl und seinem Team für die vielen Probenpräparationen und die gepflegten Diskussionen am Mittagstisch. Eine sehr große Hilfe waren die Kollegen vom CiS Forschungsinstitut für Mikrosensorik. Dr. Uta Stürzebecher danke ich für die gezielte Kontamination der Proben. Dr. Kevin Lauer für seine Diskussionen zur Reaktionskinetik von Eisen-Bor-Paaren. Außerdem danke ich für den stets freundlichen Umgang mit der Arbeitsgruppe. Auch möchte ich Ron Sinton und Adrienne Blum danken. Einerseits für die Bereitstellung der Lebensdauermeßgeräte, andererseits auch für die vielen Tipps zur Lebensdauermeßtechnik. Des Weiteren möchte ich Professor Jörg Weber von der TU Dresden für die DLTS Untersuchungen und die hilfreichen Diskussionen über Defektreaktionen danken. Ebenso danke ich Dr. Frank Machalet für die spannenden Diskussionen über Thermodynamik. An dieser Stelle möchte ich auch Martina Helmerich für ihre hilfreichen Ideen zur Thermodynamik chemischer Reaktionen höherer Ordnungen danken. Des Weiteren danke ich Michael Menkö, Claus Schöllhorn, Reik Jesswein, Pascal Fastnacht, Matthias Weiss, Matthias Braun, Jan Lossen, Dr. Andreas Grohe, Oliver Rüger und Martin Dupke für eine gute Zeit. Ebenfalls möchte ich Dietmar Güttler danken für sein unermüdliches Korrekturlesen. Vor allem möchte ich jedoch meinen Eltern für ihre moralische Unterstützung danken. Ohne diese hätte ich die Erstellung dieser Arbeit nicht geschafft.

## Veröffentlichungen

Iron detection in crystalline silicon by different lifetime measurement techniques - M Rost, D Stichtenoth, K Meyer - Energy Procedia, August 2015 - Elsevier, Volume 77, Pages 159-169

## Selbständigkeitserklärung

Hiermit erkläre ich Matthias Rost ehrenwörtlich, dass ich diese Arbeit selbständig, ohne unzulässige Hilfe Dritter und ohne Benutzung anderer als der angegebenen Hilfsmittel und Literatur angefertigt habe. Die aus anderen Quellen direkt oder indirekt übernommenen Daten und Konzepte sind unter Angabe der Quelle gekennzeichnet.

Bei der Auswahl und Auswertung folgenden Materials haben mir die nachstehend aufgeführten Personen in der jeweils beschriebenen Weise unentgeltlich geholfen:

1. Dr. Uta Stürzebecher hat bei der Probenpräparation die Aufgabe der gezielten Kontamination durchgeführt lassen und mir die Proben zur weiteren Bearbeitung übergeben.
2. Prof. Dr. Jörg Weber hat die DLTS Analyse samt Probenpräparation an der TU Dresden durchführen und mir die Ergebnisse zukommen lassen.

Weitere Personen waren an der inhaltlich-materiellen Erstellung der vorliegenden Arbeit nicht beteiligt. Insbesondere habe ich hierfür nicht entgeltliche Hilfe von Vermittlungs- bzw. Beratungsdiensten (Promotionsberater oder andere Personen) in Anspruch genommen. Niemand hat von mir unmittelbar oder mittelbar geldwerte Leistungen für Arbeiten erhalten, die im Zusammenhang mit den Inhalten der vorgelegten Dissertation stehen.

Die Arbeit wurde bisher weder im In- noch Ausland in gleicher oder ähnlicher Form einer anderen Prüfungsbehörde vorgelegt.

Die geltende Promotionsordnung der Physikalisch-Astronomischen Fakultät ist mir bekannt.

Ich versichere ehrenwörtlich, dass ich nach bestem Wissen die reine Wahrheit gesagt und nichts verschwiegen habe.

Leipzig, den 30. September 2018

## Lebenslauf

ab 7 / 2016	Prozesstechnologe bei Hanwha Q-Cells GmbH, Bitterfeld-Wolfen
3 / 2016 - 6 / 2016	Ingenieur für Linienoptimierung bei Calyxo, Bitterfeld-Wolfen
11 / 2013 - 3 / 2014	Weiterführung der Promotion bei Solarworld AG, Arnstadt
1 / 2011 – 4 / 2012	Doktorand bei Bosch Solar Energy AG, Erfurt und Arnstadt
8 / 2009 – 12 / 2010	Prozessingenieur für Layup und Stringer bei aleo Dritte Solar GmbH, Prenzlau
4 / 2009 – 7 / 2009	wissenschaftlicher Mitarbeiter für optische Spektroskopie Otto-Schott-Institut Jena
4 / 2009	Abschluss als Diplomingenieur für Materialwissenschaften
2008 - 2009	Diplomarbeit über Schnelltest für Epitaxie von III-/V-er-Solarzellen bei Azur Space Heilbronn
1 -3 / 2008	Praktikum über Solarzellenherstellung/Prozessentwicklung bei Azur Space Heilbronn
ab 10 / 2007	Praktikum über Solarzellen/Schichtherstellung bei CIS-Lab
ab 2 / 2007	Studienarbeit über Glasrecycling am OSI
2006 - 2007	Hilfswissenschaftler am Otto-Schott-Institut für Glaschemie (OSI)
2003 - 2009	Friedrich Schiller Universität Jena Studienrichtung: Materialwissenschaften/Werkstoffwissenschaften