

Detektion von infraroter Strahlung zur Beurteilung der Materialqualität von Solar-Silizium

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades
des Doktors der Naturwissenschaften
(Dr. rer. nat.)

an der Universität Konstanz
Fakultät für Physik

angefertigt am
Fraunhofer Institut für Solare Energiesysteme
Freiburg im Breisgau

Tag der mündlichen Prüfung: 4. Juni 2008

1. Referent: Prof. Dr. Gerhard Willeke
2. Referent: Prof. Dr. Paul Leiderer

vorgelegt von
Martin Schubert

Titelbild: Photonenenergieverteilung einer Kathodolumineszenz-Messung auf multikristallinem Silizium. Zu Details s. Abbildung 7.35.

Inhaltsverzeichnis

1	EINLEITUNG	7
2	GRUNDLAGEN FREIER LADUNGSTRÄGER IN SILIZIUM	9
2.1	EIGENSCHAFTEN EINES HALBLEITERS	9
2.2	FREIE ELEKTRONEN UND LÖCHER IM THERMISCHEN GLEICHGEWICHT	10
2.3	GENERATION UND REKOMBINATION VON FREIEN LADUNGSTRÄGERN	12
2.3.1	<i>Optische Generation von Elektron-Loch-Paaren.....</i>	<i>12</i>
2.3.2	<i>Strahlende Rekombination</i>	<i>13</i>
2.3.3	<i>Auger-Rekombination</i>	<i>15</i>
2.3.4	<i>Rekombination über Störstellen.....</i>	<i>15</i>
2.3.5	<i>Ladungsträger-Rekombination an Oberflächen.....</i>	<i>17</i>
2.4	LADUNGSTRÄGERVERTEILUNGEN UND DIE LADUNGSTRÄGER-LEBENSDAUER.....	18
2.5	ABSORPTIONS- UND EMISSIONSSPEKTRUM VON SILIZIUM	21
3	MESSUNG DER STRAHLENDEN REKOMBINATION - PHOTOLUMINESCENCE IMAGING	29
3.1	PHOTOLUMINESZENZ UND LEBENSDAUER	29
3.2	EXPERIMENTELLER AUFBAU DES PHOTOLUMINESCENCE IMAGING MESSPLATZES.....	30
3.3	KALIBRIERUNG DES PHOTOLUMINESZENZSIGNALS	33
3.3.1	<i>Selbstkonsistente Lebensdauer-Kalibrierung.....</i>	<i>34</i>
3.3.2	<i>Kalibrierung des Messsignals durch Vergleich mit einer alternativen Messtechnik</i>	<i>42</i>
3.3.3	<i>Kalibrierung mit Hilfe von selektiv gefilterten Messungen.....</i>	<i>47</i>
3.3.4	<i>Bewertung der vorgestellten Kalibrierverfahren</i>	<i>51</i>
4	MESSUNG DER EMISSION AN FREIEN LADUNGSTRÄGERN - CARRIER DENSITY IMAGING	55
4.1	CDI IM ABSORPTIONS- UND EMISSIONSVERFAHREN	56
4.1.1	<i>Experimenteller Aufbau</i>	<i>56</i>
4.1.2	<i>CDI-Messsignal</i>	<i>57</i>

4.2	EMISSIONS-CDI MIT SPIEGEL	60
5	HAFTSTELLEN.....	65
5.1	HAFTSTELLENMODELL NACH HORNBECK UND HAYNES	66
5.2	HAFTSTELLENBEEINFLUSSTE LEBENSDAUERMESSUNG.....	70
5.2.1	<i>Statische Methoden</i>	70
5.2.2	<i>Transiente Methoden</i>	72
5.3	KORREKTURMÖGLICHKEITEN	72
5.3.1	<i>Modellierung von injektionsabhängigen Lebensdauermessungen</i>	73
5.3.2	<i>Konzept der „bias-light correction“</i>	74
5.3.3	<i>Zusätzliche Bestrahlung der Probe mit Photonen</i>	76
5.3.4	<i>Experimentelle Ergebnisse zu korrigierten Lebensdauermessungen</i>	80
5.4	ABBILDUNG DER HAFTSTELLENVERTEILUNG MIT CARRIER DENSITY IMAGING.....	83
5.5	KORRELATION VON HAFTSTELLEN UND SOLARZELLENERGEBNISSEN	87
5.5.1	<i>Höhenabhängigkeit des Haftstelleneffekts in multikristallinem Silizium</i>	89
5.5.2	<i>Höhenabhängige Haftstellendichte an Czochralski-Silizium</i>	95
5.5.3	<i>Haftstellendichte an multikristallinem und Floatzone-Silizium mit kontrollierter Kontamination einzelner Verunreinigungen</i>	97
5.6	PHYSIKALISCHER URSPRUNG DES HAFTSTELLENEFFEKTS	98
5.6.1	<i>Bisherige Ergebnisse</i>	98
5.6.2	<i>Korrelation der Verteilungen von Haftstellen- und Versetzungsdichte</i>	101
5.6.3	<i>Korrelation der Haftstellendichte mit Verunreinigungen</i>	103
5.7	KONKURRIERENDE MODELLE.....	107
5.7.1	<i>Störstellenrekombination bei hoher Defektdichte</i>	107
5.7.2	<i>Raumladungszonen-Modulation</i>	109
5.7.3	<i>Beurteilung der Erklärungsmodelle</i>	111
5.7.4	<i>Grenzen des Haftstellenmodells</i>	118
6	OPTISCHE GRENZFLÄCHENEFFEKTE UND REABSORPTION	121
6.1	EINFLUSS DER GRENZFLÄCHENEFFEKTE AUF DAS MESSIGNAL	121
6.1.1	<i>Detektion von Strahlungsquellen durch eine raue Oberfläche</i>	122
6.1.2	<i>Analytische Bestimmung der Transformation einer Punktquelle</i>	125
6.2	REABSORPTION	130
6.3	ANWENDUNG DER OBERFLÄCHENKORREKTUREN AUF REALE PROBEN.....	133
6.3.1	<i>Reale Oberflächen</i>	133
6.3.2	<i>Emissivitätskorrektur</i>	135
6.3.3	<i>Räumliche Entfaltung des Messsignals</i>	138
6.3.4	<i>Experimentelle Ergebnisse</i>	139
7	ORTSAUFGELÖSTE LUMINESZENZSPEKTROSKOPIE.....	147
7.1	STAND DER FORSCHUNG.....	147
7.2	PHOTOLUMINESZENZSPEKTROSKOPIE	156
7.2.1	<i>Photolumineszenzuntersuchungen bei Raumtemperatur</i>	157

7.2.2	<i>Temperaturabhängige Photolumineszenzuntersuchungen</i>	160
7.2.3	<i>Injektionsabhängige Photolumineszenzmessungen</i>	165
7.3	KATHODOLUMINESZENZSPEKTROSKOPIE	167
7.3.1	<i>Kathodolumineszenz und Haftstellendichte entlang von Versetzungslinien</i>	168
7.3.2	<i>Kathodolumineszenz in versetzten Bereichen</i>	173
7.3.3	<i>Kathodolumineszenz auf großen Flächen</i>	176
7.4	BEWERTUNG DER LUMINESZENZERGEBNISSE.....	179
8	ZUSAMMENFASSUNG	181
	LITERATURVERZEICHNIS.....	185
	PUBLIKATIONEN	196
	VERÖFFENTLICHUNGEN IN WISSENSCHAFTLICHEN JOURNALEN.....	196
	VERÖFFENTLICHUNGEN BEI INTERNATIONALEN KONFERENZEN.....	198
	DANKSAGUNG	203

1 Einleitung

Im letzten Jahr (2007) wurden weltweit Photovoltaikmodule mit einer Leistung von 2.3 GWp¹ installiert [1]. Das ist das Ergebnis eines Marktwachstums von 40% gegenüber 2006. Insgesamt sind jetzt Module mit einer Leistung von 9 GWp installiert. 3 000 000 Haushalte in Europa können so mit Strom aus solarer Energiekonversion versorgt werden. Die *European Photovoltaic Industry Association* EPIA erwartet, dass ab 2015 Strom aus in Südeuropa aufgestellten Photovoltaikanlagen wirtschaftlich konkurrenzfähig ist, so dass ein weiteres starkes Wachstum des Marktes wahrscheinlich ist. Der Hauptanteil der solaren Stromproduktion liegt dabei auf kristallinen Silizium-Solarzellen. Durch die stark erhöhte Nachfrage nach Silizium, welches für die Herstellung von Solarzellen geeignet ist, stieg der Rohstoffpreis in den letzten Jahren stark an. Um die Nachfrage nach Silizium zu stillen, werden neue Wege der preisgünstigen Herstellung beschritten [2-5]. Wesentlich für die erfolgreiche Implementierung neuer sowie die Ausschöpfung des Potentials herkömmlicher Materialien ist die Charakterisierung des Einflusses verschiedener Prozesse der Solarzellenproduktion auf die Materialqualität. Typischerweise werden multikristalline Siliziummaterialien verwandt, so dass auf Grund der heterogenen Eigenschaften orts aufgelöste Charakterisierungsmethoden grundlegend sind. Zu diesem Zweck bieten sich Infrarotverfahren an, die in der Lage sind, mit hoher Ortsauflösung und in kurzer Zeit entscheidende Informationen über die Leistungsfähigkeit des untersuchten Materials zu liefern.

Diese Arbeit beschäftigt sich mit der Entwicklung und Anwendung sowohl kamerabasierter als auch abstrahierender Infrarot-Verfahren zur Materialcharakterisierung. Zu diesem Zweck wird das Emissionsspektrum von angeregtem Silizium interpretiert. Neben der strahlenden Rekombination über die Bandlücke sowie zwischen Defektniveaus in

¹ Gigawatt-Peak, eine übliche Einheit der Leistung, die Solarzellen unter Normbedingungen liefern.

der Bandlücke wird die Infrarot-Emission durch freie Ladungsträger zur Messung herangezogen.

Die Arbeit gliedert sich dabei in folgende Abschnitte:

In KAPITEL 2 werden für die späteren Kapitel benötigte Grundlagen zu Ladungsträgern in Halbleitern vorbereitet. Zusätzlich werden Grundlagen zur Emission und Absorption von Infrarotstrahlung in Silizium in unterschiedlichen Wellenlängenbereichen bereitgestellt.

KAPITEL 3 widmet sich dem von Trupke et al. entwickelten *Photoluminescence Imaging*-Verfahren für Wafer. Die in diesem Kapitel vorgestellten Arbeiten beschäftigen sich mit neuen Möglichkeiten zur quantitativen Kalibrierung des Messsignals, um die Rekombinationslebensdauer aus dem Kamerasignal zu berechnen.

KAPITEL 4 stellt der *Photoluminescence Imaging*-Methode das *Carrier Density Imaging*-Verfahren gegenüber. Auf früheren Arbeiten zu diesem Thema am Fraunhofer ISE aufbauend beschäftigt sich dieses Kapitel in grundlegender Weise mit der quantitativen Beschreibung des Messsignals. Insbesondere dient dieses Thema als Vorbereitung für

KAPITEL 5, welches sich der Theorie der Haftstellen und der Anwendung von *Carrier Density Imaging*-Messungen zur Bestimmung von orts aufgelösten Haftstellenverteilungen widmet. Es wird untersucht, welchen Einfluss Kristallfehler und Verunreinigungen auf die Haftstellendichte haben und welche Schlüsse aus Haftstellenmessungen an Ausgangsmaterial für eine auf diesem Material prozessierte Solarzelle zu ziehen sind. Es werden außerdem alternative Theorien zur Erklärung des den Haftstellen zugeschriebenen Messeffekts diskutiert und bewertet.

KAPITEL 6 widmet sich einem für den praktischen Nutzen wesentlichen Aspekt optischer Messungen: Der Einfluss rauer Oberflächen auf die Signalhöhe und die erreichbare Ortsauflösung wird untersucht. Wesentlicher Gesichtspunkt dieses Kapitels ist die Entwicklung einer geeigneten mathematischen Korrektur der Messwerte.

KAPITEL 7 erweitert die Anwendung der Charakterisierung emittierter infraroter Strahlung auf spektral aufgelöste Messungen. *Photolumineszenz*- und *Kathodolumineszenzspektroskopie*-Messungen geben einen detaillierteren und komplexeren Zugang zur Beurteilung der Materialqualität. Neben einer Analyse der Band-Band-Lumineszenz widmet sich das Kapitel dem Defektlinienspektrum von multikristallinem Silizium. Mit Hilfe der Ergebnisse aus Kapitel 5 wird die Korrelation von Haftstellendichte und Defektlinienspektrum untersucht.

In KAPITEL 8 schließlich werden die in dieser Arbeit erreichten Ergebnisse zusammengefasst.

2 Grundlagen freier Ladungsträger in Silizium

In diesem Kapitel werden für die Themen der Dissertation wesentliche theoretische Grundlagen behandelt. Es werden grundlegende elektrische Eigenschaften des Halbleiters Silizium beschrieben. Hierzu zählen im Besonderen die Generation und die Rekombination von Überschussladungsträgern. Für eine detailliertere Betrachtung sei auf die einschlägige Fachliteratur [6-11] verwiesen, auf den sich auch der allgemeine Teil über Halbleiter stützt. Im zweiten Teil werden optische Aspekte von freien Ladungsträgern in Silizium betrachtet. Hierzu zählen die Absorption und die Emission niederenergetischer infraroter Strahlung sowie optische Übergänge in Silizium. Schließlich wird auf den Einfluss der Ladungsträgereigenschaften in der Solarzelle eingegangen.

2.1 Eigenschaften eines Halbleiters

Elektronen in Festkörpern können bei entsprechender Anregung verschiedene Energien annehmen. Diese werden durch quantenmechanisch erlaubte Zustände der Atome in Wechselwirkung mit der Gesamtheit der periodisch angeordneten Atome definiert. Je nach Lage dieser Energieniveaus sind die elektrischen Eigenschaften des Festkörpers sehr verschieden. Typischerweise bilden sich quasi-kontinuierliche Bänder erlaubter Energien aus. Zwischen Bändern können Energielücken auftreten, die nicht von Elektronen besetzt werden können. Es gibt verschiedene numerische Verfahren zur Berechnung der Bänderdiagramme. Für Silizium ist ein solches Bänderdiagramm in Abbildung 2.1 gezeigt.

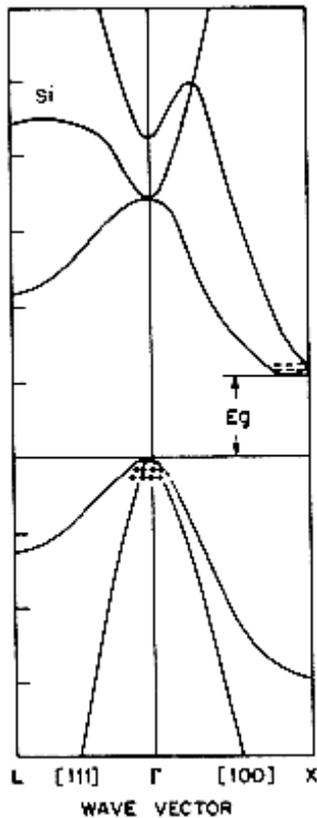


Abbildung 2.1: Bänderdiagramm von Silizium. Aufgetragen ist die Energie gegen den Wellenvektor entlang zweier Kristallrichtungen. Der Punkt Γ stellt den Punkt dar, an dem der Wellenvektor verschwindet. Der Abstand E_g zwischen höchstem besetztem und niedrigstem unbesetztem Band wird als Bandlücke bezeichnet. Aus [6], nach [12].

Unbeleuchtete, ungestörte Halbleiter, d.h. Halbleiter ohne Verunreinigungen und Kristallfehler, zeichnen sich unter den Festkörpern durch eine bestimmte Konfiguration dieser Energiebänder aus. Das höchste von Elektronen besetzte Band ist bei einer Temperatur von 0 K vollständig besetzt, während das nächsthöhere Band nicht mit Elektronen besetzt ist. Der Energieunterschied zwischen dem höchsten besetzten Zustand und dem niedrigsten unbesetzten Zustand heißt Bandlücke E_g . Diese liegt bei Halbleitern in der Größenordnung von 1 eV.

2.2 Freie Elektronen und Löcher im thermischen Gleichgewicht

Im thermischen Gleichgewicht kann die Dichte n_0 von Elektronen besetzter Energiezustände im Leitungsband durch

$$n_0 = \int_{E_C}^{E_{top}} N(E) F(E) dE \quad (2.1)$$

ausgedrückt werden. Hierbei bezeichnen E_C und E_{top} die Unterkante und Oberkante des Leitungsbands, $N(E)$ die Zustandsdichte und $F(E)$ die Besetzungswahrscheinlichkeit. $N(E)$ lässt sich für kleine Ladungsträgerdichten und Temperaturen zu

$$N(E) = 4\pi \left(\frac{2m_e^*}{h^2} \right)^{3/2} (E - E_C)^{1/2} \quad (2.2)$$

bestimmen.

Elektronen in Festkörpern verhalten sich gemäß der Fermi-Dirac-Statistik. Daraus ergibt sich die Besetzungswahrscheinlichkeit $F(E)$ zu

$$F(E) = \frac{1}{1 + e^{(E - E_F)/kT}}. \quad (2.3)$$

k ist die Boltzmann-Konstante und T die Temperatur. Die Größe E_F heißt Fermi-Energie. Es gilt

$$F(E_F) = \frac{1}{2}. \quad (2.4)$$

Für Fermi-Energien, deren Abstand zum Leitungsband groß gegenüber kT ist, lässt sich die Besetzungswahrscheinlichkeit aus Gleichung (2.3) mit der Boltzmann-Statistik nähern. In diesem Fall kann die über die Energie verteilte Zustandsdichte in Gleichung (2.1) durch eine effektive Zustandsdichte N_C bei $E = E_C$ ausgedrückt werden:

$$n_0 = N_C e^{-(E_C - E_F)/kT}. \quad (2.5)$$

N_C lässt sich zu

$$N_C = 2 \left(\frac{2\pi m_n^* kT}{h^2} \right)^{3/2} \quad (2.6)$$

bestimmen. m_n^* bezeichnet die effektive Elektronenmasse und h die Planck-Konstante.

In ähnlicher Weise ergibt sich die Dichte der Löcher im Valenzband p_0

$$p_0 = N_V e^{-(E_F - E_V)/kT}. \quad (2.7)$$

N_V ist die effektive Zustandsdichte für das Valenzband und beträgt

$$N_V = 2 \left(\frac{2\pi m_p^* kT}{h^2} \right)^{3/2}. \quad (2.8)$$

m_p^* bezeichnet analog die effektive Löchermasse.

Die Gleichungen (2.5) und (2.7) gelten auch für dotierte Halbleiter.

Als Dotierung bezeichnet man die gezielte Verunreinigung des Halbleiters mit Atomen, die mehr oder weniger Valenzelektronen besitzen als die Atome, deren Gitterplätze die Fremdatome besetzen. Für Silizium bieten sich fünfwertige Atome wie Phosphor zur n-Dotierung und dreiwertige wie Bor zur p-Dotierung an. Durch Dotierung kann die Dich-

te freier Elektronen oder Löcher erhöht werden. Unabhängig von der Dotierung gilt jedoch

$$n_0 p_0 = \sqrt{N_C N_V} e^{-E_g/2kT} = n_i^2. \quad (2.9)$$

n_i ist die Dichte freier Elektronen im intrinsischen Halbleiter. Typische Dotierkonzentrationen von $10^{13} - 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ übertreffen die intrinsischen Ladungsträgerkonzentrationen um Größenordnungen. Es können deshalb folgende Näherungen gemacht werden:

$$\begin{aligned} p_0 = N_A, \quad n_0 = \frac{n_i^2}{N_A} \quad (\text{für p-Dotierung}), \\ n_0 = N_D, \quad p_0 = \frac{n_i^2}{N_D} \quad (\text{für n-Dotierung}). \end{aligned} \quad (2.10)$$

N_A und N_D bezeichnen jeweils den ionisierten Anteil der Dotieratome (Akzeptoren und Donatoren). Für die Fermi-Energie ergibt sich eine Abhängigkeit von der Dotierung

$$\begin{aligned} E_F - E_V = kT \ln\left(\frac{N_V}{N_A}\right) \quad (\text{für p-Dotierung}), \\ E_C - E_F = kT \ln\left(\frac{N_C}{N_D}\right) \quad (\text{für n-Dotierung}). \end{aligned} \quad (2.11)$$

2.3 Generation und Rekombination von freien Ladungsträgern

Durch thermische oder optische Anregung kann die Konzentration von freien Elektronen und Löchern erhöht werden. Diese Anregung wird als Generation von Ladungsträgern bezeichnet. Der zur Generation gegenläufige Prozess ist die Rekombination von Ladungsträgern. Im thermischen Gleichgewicht gleichen sich beide Prozesse aus. Verschiedene Rekombinationsmechanismen treten dabei auf, die je nach Halbleiter, Dotierung und Verunreinigungen verschieden stark ausgeprägt sein können.

2.3.1 Optische Generation von Elektron-Loch-Paaren

Um ein Elektron-Loch-Paar zu erzeugen, muss einem Elektron im Valenzband ein Energiebetrag zugeführt werden, der mindestens der Bandlücke entspricht. Im Fall von Silizium als Halbleiter ist zusätzlich ein Impulsübertrag von einem oder auf ein Phonon notwendig, wenn die übertragene Energie zwar größer als die Bandlücke, jedoch nicht ausreichend für einen direkten Übergang ohne wesentliche Impulsänderung ist (s. Bänderdiagramm in Abbildung 2.1). Mehr-Phononen-Prozesse und die Generation über Exzitonen führen dazu, dass mit geringerer Wahrscheinlichkeit auch Photonen mit geringfügig kleineren Energien als die Bandlücke zur Generation beitragen können. Au-

Berdem kann eine mehrstufige Generation über Störstellen erfolgen. Dieser Effekt soll aber hier wegen seiner sehr geringen Wahrscheinlichkeit vernachlässigt werden.

Nach der Absorption eines Photons findet innerhalb von ca. 10^{-12} s eine Thermalisierung des angeregten Ladungsträgers durch Stöße mit dem Gitter statt. Die sich daraufhin einstellende Energieverteilung lässt sich nicht mehr durch eine einzige Fermi-Energie gemäß Gleichung (2.3) beschreiben. Sowohl die Elektronendichte als auch die Löcherdichte sind größer als im Dunkeln und es gilt $\Delta n \cdot \Delta p > n_i^2$. Man definiert in diesem Fall zwei Fermi-Verteilungen zur Beschreibung der Energieverteilungen, eine für Elektronen im Leitungsband, eine für Löcher im Valenzband. Mit den entsprechenden Fermi-Energien $E_{F,e}$ und $E_{F,h}$, den sogenannten Quasi-Ferminiveaus, ergeben sich für die Elektronen- und Löcherdichten getrennt

$$\begin{aligned} n &= N_C e^{-(E_C - E_{F,e})/kT}, \\ p &= N_V e^{-(E_{F,h} - E_V)/kT}. \end{aligned} \quad (2.12)$$

Analog zu Gleichung (2.9) gilt dann

$$n p = n_i^2 e^{(E_{F,e} - E_{F,h})/kT}. \quad (2.13)$$

Die Annahme, dass für jede Wellenlänge die Absorptionsrate einfallender Photonen proportional zum Photonenfluss ist, führt auf das Lambert-Beer-Bouguer-Gesetz, das einen exponentiellen Abfall der Photonenflussdichte $J_{ph}(z, \lambda)$ beim Durchdringen des Halbleiters beschreibt:

$$J_{ph}(z, \hbar\omega) = J_{ph}(z_0, \hbar\omega) e^{-\alpha(\hbar\omega)(z-z_0)}. \quad (2.14)$$

$\alpha(\hbar\omega)$ bezeichnet den spektralen Absorptionskoeffizienten, z den Abstand zum Bezugspunkt z_0 (z.B. der Oberfläche der Probe). Anstatt des Absorptionskoeffizienten wird häufig dessen Kehrwert, die Eindringtiefe, angegeben. Sie beschreibt, nach welcher Länge die Photonenflussdichte auf $1/e$ abgefallen ist.

Es gibt weitere Absorptionsmechanismen, die aber nicht zur Ladungsträgergeneration beitragen, z.B. die Absorption an freien Ladungsträgern. Auf diese wird in Kapitel 2.5 näher eingegangen.

2.3.2 Strahlende Rekombination

Der zur optischen Generation gegenläufige Prozess ist die strahlende Rekombination. Ein Elektron im Leitungsband rekombiniert in diesem Fall mit einem Loch im Valenzband unter Emission eines Photons. Dieser Rekombinationskanal ist bei direkten Halbleitern dominant. Obwohl im Fall von Silizium die strahlende Rekombination typischerweise wesentlich schwächer ist als die Rekombination über Störstellen oder die Auger-Rekombination (siehe unten), spielt sie für die später in dieser Arbeit beschriebene Photolumineszenz-Messtechnik eine wesentliche Rolle.

Die Rekombinationsrate ist proportional zur Konzentration freier Elektronen und freier Löcher:

$$R_{rad} = B n p . \quad (2.15)$$

B ist eine noch zu bestimmende Materialkonstante und beträgt für Silizium $3 \cdot 10^{-15} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ [11]. Für die Netto-Rekombinationsrate, die auch den umgekehrten Prozess berücksichtigt, gilt

$$U_{rad} = B(np - n_i^2) = B((n_0 + p_0)\Delta n + \Delta n^2) . \quad (2.16)$$

$\Delta n = n - n_0$ bezeichnet dabei die Überschussladungsträgerdichte der Elektronen. Die entsprechende Dichte für Löcher ist $\Delta p = p - p_0$. Da bei der Generation von Überschussladungsträgern Elektron-Loch-Paare generiert werden, ist hier zunächst angenommen, dass $\Delta n = \Delta p$ gilt. Im Gleichgewicht mit der Umgebungsstrahlung ist die Rekombinationsrate R_{rad}^0 gleich der Generationsrate der emittierten Photonen G_{rad}^0 und der Generationsrate freier Elektronen oder Löcher. Grundlage dieser Annahme ist das Prinzip des detaillierten Gleichgewichts, nach dem jedem einzelnen Generationsprozess ein entsprechender Rekombinationsprozess gleicher Größe gegenübersteht. Mit Hilfe der energieabhängigen Absorptionskonstanten $\alpha(\hbar\omega)$ lässt sich G_{rad}^0 ausdrücken:

$$\begin{aligned} G_e^0 = G_h^0 = R_{rad}^0 = G_{rad}^0 &= \int_0^\infty \alpha(\hbar\omega) dj_{rad}(\hbar\omega) \\ &= \frac{\Omega}{4\pi^3 \hbar^3 c^2} \int_0^\infty \frac{\alpha(\hbar\omega) (\hbar\omega)^2}{e^{\hbar\omega/kT_0} - 1} d\hbar\omega . \end{aligned} \quad (2.17)$$

Ω bezeichnet den entsprechenden Raumwinkelbereich. Bei Annahme einer isotropen Strahlungsverteilung gilt $\Omega = 4\pi$. Bei bekannter Absorptionskonstante $\alpha(\hbar\omega)$ ergibt sich für Silizium

$$G_{rad}^0 = 3 \cdot 10^5 \frac{\gamma}{\text{cm}^3 \text{ s}} = B_{Si} n_i^2 \quad (2.18)$$

und damit für B_{Si}

$$B_{Si} = 3 \cdot 10^{-15} \frac{\gamma \text{ cm}^3}{\text{s}} . \quad (2.19)$$

Unter Nichtgleichgewichtsbedingungen, insbesondere bei zusätzlicher Ladungsträger-Generation durch Beleuchtung, ändert sich die Rate emittierter Photonen:

$$G_{rad} = G_{rad}^0 \frac{n p}{n_i^2} = G_{rad}^0 e^{E_{F,e} - E_{F,h}/kT} . \quad (2.20)$$

Die Energieverteilung ändert sich dabei nicht, weil Elektronen und Löcher weiterhin durch die Fermi-Verteilung mit einer mittleren kinetischen Energie von $3/2 kT$ bestimmt sind.

2.3.3 Auger-Rekombination

Als Umkehrprozess der Stoßionisation ist die Auger-Rekombination ein Drei-Teilchen-Prozess. Die bei der Rekombination freiwerdende Energie wird zunächst entweder an ein freies Elektron oder ein freies Loch abgegeben. Schließlich wird die so abgegebene Energie durch Thermalisierung an das Kristallgitter übertragen. Je nach Art des am Rekombinationsprozess beteiligten dritten Teilchens ergeben sich die Rekombinationsraten

$$\begin{aligned} R_{Aug,e} &= C_e n^2 p \quad \text{und} \\ R_{Aug,h} &= C_h n p^2, \end{aligned} \quad (2.21)$$

wobei C_e und C_h die Augerkoeffizienten bezeichnen. Ihre Werte für Silizium betragen nach [13] $C_n = 2.8 \cdot 10^{-31} \text{ cm}^6 \text{ s}^{-1}$ und $C_h = 9.9 \cdot 10^{-32} \text{ cm}^6 \text{ s}^{-1}$.

Um gegenüber der Theorie signifikant erhöhte experimentelle Rekombinationsraten für Dotierungen unter $1 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ zu erklären, schlugen Hangleiter und Häcker [14] eine Korrektur vor, die Interaktionen der beteiligten Teilchen über Coulomb-Wechselwirkungen berücksichtigt. Hierfür werden von der Ladungsträgerdichte abhängige Korrekturfaktoren g_{eh} und g_{hh} eingeführt.

Die Netto-Rekombinationsrate ergibt sich zu

$$U_{Aug} = g_{eh} C_e (n^2 p - n_0^2 p_0) + g_{hh} C_h (n p^2 - n_0 p_0^2). \quad (2.22)$$

Der Mechanismus der Auger-Rekombination spielt in den späteren Kapiteln eine untergeordnete Rolle und ist hier zur Vollständigkeit aufgenommen. Für weitere Details sei auf [14] verwiesen.

2.3.4 Rekombination über Störstellen

Fremdatome und Kristallfehler können Energieniveaus in der Bandlücke eines Halbleiters erzeugen. Über diese Störstellen können freie Ladungsträger in einem Zwei- (oder Mehr-) Stufen-Prozess rekombinieren. In Solarsilizium ist die Rekombinationsrate über Störstellen meist hoch gegenüber strahlender und Auger-Rekombination. Lediglich bei sehr hohen Injektionen kann letztere die Störstellen-Rekombinationsrate übertreffen. W. Shockley und W.T. Read haben den Rekombinationsmechanismus über Störstellen in [15] beschrieben. Hall [16] untersuchte die Rekombination speziell in Germanium. Da diese sogenannte Shockley-Read-Hall-(SRH)-Rekombination für einige spätere Betrachtungen in dieser Arbeit wesentlich ist, ist hier eine vereinfachte Behandlung ihrer Theorie aus [17] vorgestellt.

Zuerst wird die Elektron-Einfangrate aus dem Leitungsband berechnet. Diese ist proportional zur Dichte der freien Elektronen n und zu $1-f_t$, wobei f_t den Anteil von mit Elektronen besetzten Zuständen im Störstellenniveau bezeichnet:

$$R_c = C_n n (1 - f_t). \quad (2.23)$$

C_n bezeichnet die Einfangrate pro Elektron, wenn alle Störstellen unbesetzt sind. C_n ist proportional zur Störstellendichte N_t . Der Umkehrprozess, die Emission eines Elektrons ins Leitungsband, ist proportional zu f_t :

$$R_e = C_n' f_t. \quad (2.24)$$

Im Gleichgewicht gilt $R_c = R_e$, und damit

$$C_n' = C_n n_0 (1 - f_{t0}) / f_{t0}. \quad (2.25)$$

n_0 und f_{t0} sind die Werte im Gleichgewicht für n und f_t . Man erhält f_{t0} aus der Fermi-Verteilung (Gleichung (2.3)). Damit gilt

$$C_n' = C_n n_0 \exp((E_t - E_F) / kT), \quad (2.26)$$

wobei E_t die Energie der Störstelle bezeichnet. Mit Gleichung (2.5) ergibt sich

$$C_n' = n_1 C_n \quad (2.27)$$

mit der SRH-Dichte für Elektronen

$$n_1 = N_c \exp(-(E_c - E_t) / kT). \quad (2.28)$$

Die Netto-Einfangrate U_n für Elektronen in die Störstelle lässt sich schließlich schreiben als

$$U_n = C_n ((1 - f_t)n - n_1 f_t). \quad (2.29)$$

Analog zu dieser Betrachtung ergibt sich für die Netto-Einfangrate für Löcher aus dem Valenzband in die Störstelle

$$U_p = C_p (f_t p - p_1 (1 - f_t)) \quad (2.30)$$

mit der SRH-Dichte für Löcher p_1 mit

$$p_1 = N_v \exp(-(E_t - E_v) / kT). \quad (2.31)$$

In einem stationären Zustand, in dem die Gleichgewichtskonzentrationen von Elektronen und Löchern durch eine konstante Generationsrate G gestört ist, und unter der Annahme, dass keine anderen Rekombinationskanäle existieren, muss

$$G = U_n = U_p = U_{SRH} \quad (2.32)$$

gelten, da Elektronen und Löcher stets paarweise rekombinieren. U_{SRH} bezeichnet die Rekombinationsrate über die Störstelle. Aus den Gleichungen (2.29), (2.30) und (2.32) lässt sich die Besetzungswahrscheinlichkeit der Störstelle unter Nicht-Gleichgewichtsbedingungen errechnen:

$$f_i = \frac{nC_n + p_1C_p}{C_n(n+n_1) + C_p(p+p_1)}. \quad (2.33)$$

Schließlich gilt mit $n_1 p_1 = n_i^2$ für U_{SRH}

$$U_{SRH} = \frac{C_n C_p (pn - n_i^2)}{C_n(n+n_1) + C_p(p+p_1)} \quad (2.34)$$

und mit $n = n_0 + \Delta n$, $p = p_0 + \Delta n$

$$U_{SRH} = \frac{n_0 \Delta p + p_0 \Delta n + \Delta p^2}{C_p^{-1}(n_0 + n_1 + \Delta n) + C_n^{-1}(p_0 + p_1 + \Delta n)}. \quad (2.35)$$

Die Konstanten C_n und C_p lassen sich mit Hilfe der Einfangquerschnitte σ_n , σ_p und der thermischen Geschwindigkeit v_{th} ausdrücken:

$$\begin{aligned} C_n &= N_t \sigma_n v_{th}, \\ C_p &= N_t \sigma_p v_{th}. \end{aligned} \quad (2.36)$$

2.3.5 Ladungsträger-Rekombination an Oberflächen

An den Oberflächen des Halbleiters wird die Periodizität des Gitters gestört. Randatome mit nicht abgesättigten Bindungen induzieren Störstellen in der Bandlücke, die typischerweise eine kontinuierliche Verteilung aufweisen. Analog zur Störstellen-Rekombination im Volumen lässt sich die Rekombination an Oberflächen durch ein erweitertes SRH-Modell beschreiben, in dem die Zustands-Defektdichte durch eine Verteilung $D_{it}(E_t)$ mit ebenfalls energieabhängigen Einfangquerschnitten $\sigma_n(E_t)$ und $\sigma_p(E_t)$ ausgedrückt wird. Die Netto-Rekombinationsrate ergibt sich damit zu [18, 19]

$$U_s = \int_{E_V}^{E_C} D_{it}(E_t) v_{th} \frac{n_s p_s - n_i^2}{\sigma_n^{-1}(E_t)(n_s + n_1(E_t)) + (p_s + p_1(E_t))}. \quad (2.37)$$

n_s und n_p sind die Elektronen- und Löcherkonzentrationen an der Oberfläche. $D_{it}(E_t)$ und $\sigma_{n,p}(E_t)$ sind experimentell schwer zugänglich. Eine einfache Beschreibung der Oberflächenrekombination lässt sich analog zur weiter unten eingeführten Lebensdauer (siehe Gleichung (2.43)) durch die Einführung der Oberflächenrekombinations-Geschwindigkeit (ORG)

$$S = \frac{U_s}{\Delta n} \quad (2.38)$$

erreichen. Durch geeignete Passivierungsschichten lässt sich die Oberflächenrekombination stark unterdrücken. Hierzu kann durch eine sogenannte Feldeffektpassivierung die Konzentration von Minoritätsladungsträgern an der Oberfläche verringert werden oder es kann die Defektzustandsdichte z.B. durch eine Absättigung von unabsättigten

Bindungen verringert werden. Die Feldpassivierung spielt z.B. bei einer Passivierung von p-dotiertem Silizium mit Siliziumnitrid eine dominierende Rolle, die Verringerung der Defektzustandsdichte kann z.B. durch Oxidation der Probenoberfläche erreicht werden. Während unpassivierte Oberflächen eine ORG bis zu 10^7 cm/s aufweisen, kann diese bei geeigneter Passivierung je nach Dotierung auf unter 1 cm/s -100 cm/s gesenkt werden.

2.4 Ladungsträgerverteilungen und die Ladungsträger-Lebensdauer

Allgemein lassen sich Stromdichten für Elektronen und Löcher im Halbleiter beschreiben durch [8]

$$\begin{aligned}\vec{J}_n &= q \mu_n n \vec{E} + q D_n \vec{\nabla} n \quad \text{und} \\ \vec{J}_p &= q \mu_p p \vec{E} - q D_p \vec{\nabla} p.\end{aligned}\tag{2.39}$$

q bezeichnet hierbei die Elementarladung, \vec{E} das elektrische Feld und $D_{n,p}$ die Diffusionskoeffizienten für Elektronen und Löcher. Zur Interpretation dieses Zusammenhangs mit Hilfe einer Formulierung von Quasi-Fermi-niveaus sei auf [11] verwiesen. Aus Kontinuitätsbedingungen folgt für die Ladungsträgerdichten n und p

$$\begin{aligned}\frac{\partial n}{\partial t} &= \frac{1}{q} \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_n - U_n + G_n \quad \text{und} \\ \frac{\partial p}{\partial t} &= -\frac{1}{q} \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_p - U_p + G_p.\end{aligned}\tag{2.40}$$

$U_{n,p}$ und $G_{n,p}$ bezeichnen die Rekombinations- und Generationsrate für Elektronen und Löcher. Im eindimensionalen Fall gelten damit die Transportgleichungen

$$\begin{aligned}\frac{\partial n}{\partial t} &= D_n \frac{\partial^2 n}{\partial z^2} + \mu_n E_z \frac{\partial n}{\partial z} + \mu_n n \frac{\partial E_z}{\partial z} - U_n(z) + G_n(z) \quad \text{und} \\ \frac{\partial p}{\partial t} &= D_p \frac{\partial^2 p}{\partial z^2} + \mu_p E_z \frac{\partial p}{\partial z} + \mu_p p \frac{\partial E_z}{\partial z} - U_p(z) + G_p(z).\end{aligned}\tag{2.41}$$

Für vernachlässigbar kleine elektrische Felder E_z und im stationären Zustand unter Niederinjektionsbedingungen mit $\partial n / \partial t = 0$, $G_n = G_p = G$ und $U_n = U_p = U$ ergibt sich im Beispielfall von p-dotiertem Material

$$D_n \frac{\partial^2 \Delta n(z)}{\partial z^2} - U(z) + G(z) = 0.\tag{2.42}$$

In erster Näherung wird die Rekombinationsrate U proportional zur Überschussladungsträgerdichte Δn angesetzt und man definiert die absolute Minoritätsladungsträger-Lebensdauer unter Niederinjektionsbedingungen τ_n mit

$$U = \frac{\Delta n}{\tau_n}. \quad (2.43)$$

Analoge Gleichungen zu (2.42) und (2.43) gelten für n-dotiertes Material.

Im Fall einer homogenen Ladungsträgerverteilung ist die Rekombinationsrate gleich der Generationsrate. Diese hängt von der Wellenlänge des Anregungslichts und des Absorptionskoeffizienten ab:

$$G(z) = \int J_{ph}(\lambda)(1 - R(\lambda))\alpha(z) \exp(-\alpha(z)z) d\lambda. \quad (2.44)$$

Einige Messverfahren zur Bestimmung der Ladungsträger-Lebensdauer detektieren das Abklingen der Überschussladungsträgerdichte nach einer kurzen Lichtanregung anstatt der Dichte in einem stationären Zustand. Aus diesen Messungen lässt sich eine zunächst von der Definition (2.43) unabhängige, differentielle Lebensdauer τ_{diff} bestimmen:

$$\tau_{diff}(\Delta n) = \left(\frac{\partial U(\Delta n)}{\partial \Delta n} \right)^{-1}. \quad (2.45)$$

Differentielle und absolute Lebensdauer sind nur dann gleich, wenn die Rekombinationslebensdauer nicht von der Überschussladungsträgerdichte abhängt. Im Fall einer injektionsabhängigen Rekombinationslebensdauer gilt die Beziehung

$$\tau_{abs}(\Delta n) = \frac{1}{\Delta n} \int_0^{\Delta n} \tau_{diff}(\Delta \tilde{n}) d\Delta \tilde{n} \quad (2.46)$$

zwischen absoluter und differentieller Lebensdauer.

Nagel et al. [20] schlugen eine generalisierte Form der Lebensdauer-Auswertung vor, die statische und transiente Effekte berücksichtigt. Diese wird für die in Kapitel 3 beschriebene quantitative Lebensdauerermessung mit *Photoluminescence Imaging* benötigt und deshalb hier genannt:

$$\tau_{gen}(\Delta n) = \frac{\Delta n(t)}{G(t) - \frac{d\Delta n(t)}{dt}}. \quad (2.47)$$

Um die Rekombination in Silizium zu beschreiben, wird häufig anstatt der Lebensdauer die mittlere Diffusionslänge L , die Ladungsträger während ihrer Lebensdauer zurücklegen, angegeben. Die Diffusionslänge ist

$$L = \sqrt{D_n \tau}. \quad (2.48)$$

Über die Einstein-Relation hängt die Diffusionskonstante D_n mit der Mobilität der Ladungsträger μ_n zusammen:

$$D_n = \frac{kT}{q} \mu_n. \quad (2.49)$$

Der Einfluss der Oberflächenrekombination lässt sich mit Hilfe einer effektiven Lebensdauer angeben. Im Folgenden sei angenommen, dass die Oberflächenrekombinations-Geschwindigkeit auf beiden Seiten gleich ist. Für gut passivierte Oberflächen lässt sich die effektive Lebensdauer mit folgendem Ausdruck nähern [21], [19]:

$$\frac{1}{\tau_{eff}} = \frac{1}{\tau_{bulk}} + \frac{2S}{d}; \quad \text{Bedingung: } \frac{Sd}{D_n} < \frac{1}{4}. \quad (2.50)$$

Ist die Bedingung für S nicht erfüllt, gilt im Fall besonders hoher Oberflächenrekombination

$$\frac{1}{\tau_{eff}} = \frac{1}{\tau_{bulk}} + D_n \left(\frac{\pi}{d} \right)^2; \quad \text{Bedingung: } \frac{Sd}{D_n} > 100. \quad (2.51)$$

Für beliebige Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeiten lässt sich eine Näherungsformel [22] angeben, die die Gleichungen (2.50) und (2.51) als Grenzwerte enthält:

$$\frac{1}{\tau_{eff}} = \frac{1}{\tau_{bulk}} + \left(\frac{d}{2S} + \frac{1}{D_n} \left(\frac{d}{\pi} \right)^2 \right)^{-1}. \quad (2.52)$$

Für genauere Betrachtungen zur Gültigkeit der Gleichungen sei auf [19] verwiesen.

Etablierte Verfahren zur Messung der Lebensdauer sind das *MicroWave Photoconductance Decay* (MW-PCD)-Verfahren [23, 24] und die *Quasi Steady-state PhotoConductance* (QSSPC)-Methode [25, 26]. Beim MW-PCD-Verfahren wird die zeitabhängige Leitfähigkeit der Probe nach einer kurzen Lichtanregung mittels Mikrowellen-Reflexion gemessen. Durch eine Analyse des Abfalls der Leitfähigkeit kann auf die transiente Lebensdauer geschlossen werden (siehe Gleichung (2.45)). Durch Abrastern ist eine orts aufgelöste Messung der Lebensdauer möglich. Bei der QSSPC-Methode sind sowohl transiente als auch quasi-statische Messungen möglich. Die Beleuchtung wird durch einen großflächigen Lichtblitz realisiert, dessen Abklingzeit je nach Messmodus eingestellt werden kann. Die Detektion der Ladungsträger in der Probe erfolgt mittels einer induktiven Leitfähigkeitsmessung. Weitere Verfahren zur Lebensdauerermessung, die im Bereich der Silizium-Photovoltaik weniger Verbreitung gefunden haben, sind das *Surface-PhotoVoltage* (SPV)-Verfahren [27, 28] und das *Electrolytical Metal Tracer* (ELYMAT)-Verfahren [29]. Auf Zellebene bietet sich das *Spectrally Resolved Light Beam Induced Current* (SR-LBIC)-Verfahren [30, 31] als ortsauflösendes Verfahren zur Bestimmung der Diffusionslänge in Solarzellen an. Der globale Strom der Solarzelle wird bei dieser Methode in Abhängigkeit einer lokalen Beleuchtung mit monochromati-

schem Licht verschiedener Wellenlängen analysiert. Aus den durch die unterschiedlichen Eindringtiefen des Lichts verschiedenen Beiträge zum gemessenen Strom kann dann auf die Diffusionslänge geschlossen werden.

2.5 Absorptions- und Emissionsspektrum von Silizium

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit der Detektion des Absorptions- und insbesondere des Emissionsspektrums von beleuchtetem Silizium, um Rückschlüsse auf die Materialqualität ziehen zu können. Hierfür werden verschiedene Bereiche des infraroten Spektrums untersucht. Da Silizium für Photonen mit Wellenlängen von ca. $1\ \mu\text{m}$ und mehr eine hohe Transmission aufweist, können Informationen aus dem Volumen der Siliziumprobe gewonnen werden. Im Folgenden werden für die Arbeit wesentliche Eigenschaften des Silizium-Spektrums vorgestellt.

Bei der Betrachtung dieser Eigenschaften ist es nützlich, die Beziehung zwischen Absorptions- und Emissionseigenschaften des Materials näher zu untersuchen.

Ein kleines Volumenelement dV mit vernachlässigbarer Reabsorptionseigenschaft sei im thermischen Gleichgewicht mit seiner Umgebung. Nach dem Prinzip des detaillierten Gleichgewichts gilt, dass für jede Wellenlänge genauso viel Energie emittiert wie absorbiert wird. Daraus folgt, dass Emissionskoeffizient und Absorptionskoeffizient für alle Wellenlängen gleich sind. Diese Gleichheit ist Inhalt des Kirchhoff'schen Gesetzes und für die Detektion von Ladungsträgern durch freie Ladungsträger-Emission grundlegend.

In dieser Arbeit wird hauptsächlich die Emission von Silizium genutzt, um verschiedene Materialparameter zu bestimmen. Für die Diskussion des Einflusses freier Ladungsträger auf das Siliziumspektrum im mittleren Infrarot werden jedoch auch Messungen des Absorptionskoeffizienten herangezogen, die für die Beschreibung des Spektrums nach obiger Überlegung geeignet sind. In Abbildung 2.2 sind der Realteil n und Imaginärteil k des komplexen Brechungsindex für Silizium über einen größeren Wellenlängenbereich dargestellt [32].

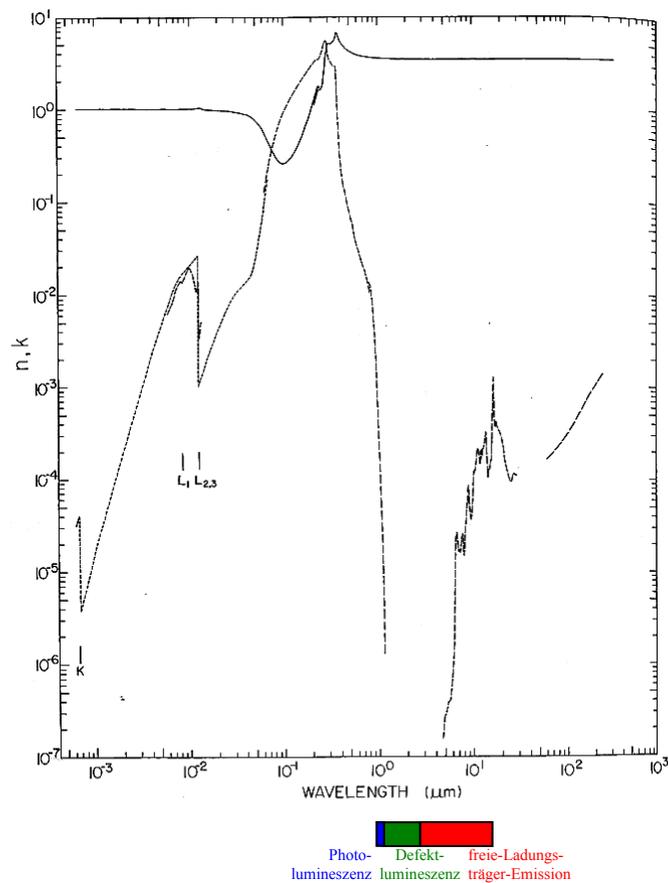


Abbildung 2.2: Doppellogarithmische Darstellung von n -Werten (durchgezogene Linie) und k -Werten (gestrichelte Linie). Aus [32]. Unter dem Diagramm sind die Wellenlängenbereiche für Photolumineszenz-, Defektlumineszenz- und Freie-Ladungsträger-Emissionsmessungen skizziert.

Der wellenlängenabhängige Absorptionskoeffizient lässt sich direkt aus k bestimmen:

$$\alpha(\lambda) = \frac{4\pi k}{\lambda}. \quad (2.53)$$

Im Fall der Freie-Ladungsträger-Emission bestimmt der Absorptionskoeffizient die Intensität der emittierten Strahlung gemäß dem Planck'schen Strahlungsgesetz. Die optimale Wahl des Detektionsbereichs hängt sowohl vom Absorptionskoeffizienten als auch von der Planck'schen Strahlungsverteilung bei Proben temperatur ab. Weitere Kriterien sind die Transmissionseigenschaften von Luft sowie die Quanteneffizienz verfügbarer Detektoren.

Lumineszenzstrahlung ist in dieser Theorie nicht berücksichtigt. In [11, 33, 34] findet sich eine Erweiterung der Theorie, die Lumineszenzstrahlung berücksichtigt. Das verallgemeinerte Planck-Gesetz beschreibt die emittierte Strahlung eines Körpers inklusive seiner Lumineszenz mit Hilfe der Annahme eines nicht verschwindenden chemischen Potentials für Photonen, die verbreiteten Annahmen zu Photonen [35] entgegensteht. Der Vorteil einer die Lumineszenz einschließenden Beschreibung mit einem endlichen chemischen Potential liegt darin, dass virtuelle Effektivtemperaturen, die ansonsten zur Beschreibung des Lumineszenzeffekts herangezogen werden, überflüssig sind [33]. Weil diese Betrachtung für das in dieser Arbeit behandelte *Photoluminescence Imaging* (Kapitel 3) von grundlegender Bedeutung ist, wird die Herleitung dieses Gesetzes hier

skizziert [33, 34]. Auf die Ausformulierung des chemischen Potentials, insbesondere die Beziehung der Quasi-Ferminiveaus zu den chemischen Potentialen für Elektronen, Löcher und Photonen, wird an dieser Stelle aber verzichtet, denn die für spätere Betrachtungen wichtige Größe für das Lumineszenzsignal ist, wie sich später zeigt, die Aufspaltung der Quasi-Ferminiveaus.

Aus der Fermistatistik folgen die Ausdrücke

$$n_0(E) = D(E)f(E) = \frac{D(E)}{e^{(E-E_{F,e})/kT} + 1} \quad \text{und} \quad (2.54)$$

$$n_u(E) = D(E)(1-f(E)) = D(E) \left(1 - \frac{1}{e^{(E-E_{F,h})/kT} + 1} \right) \quad (2.55)$$

für die Konzentration besetzter und unbesetzter Zustände $n_0(E)$ bzw. $n_u(E)$ eines beleuchteten Halbleiters. Drei fundamentale Prozesse beschreiben die Wechselwirkung der Photonen mit den Ladungsträgern: Absorption, stimulierte Emission und spontane Emission.

Im thermischen und chemischen Gleichgewicht lässt sich die Photonen-Absorptionsrate pro Volumen und Energieintervall mit Hilfe ihrer Proportionalität zur Dichte besetzter und unbesetzter Zustände sowie der Photonendichte $n_\gamma(\hbar\omega)$ darstellen:

$$r_a(\hbar\omega) = n_\gamma(\hbar\omega) \int_0^\infty M(E, \hbar\omega) n_0(E) n_u(E + \hbar\omega) dE. \quad (2.56)$$

$M(E, \hbar\omega)$ beschreibt die Übergangswahrscheinlichkeit. Es wird hier und im Folgenden davon ausgegangen, dass das chemische Potential der Phononen vernachlässigt werden kann. Diese Näherung ist gültig, solange die Erzeugung bzw. Vernichtung von Phononen durch Photonen klein gegenüber dem Gesamtbeitrag an erzeugten Phononen ist. Die Rate stimulierter Emission hängt ebenfalls von $n_\gamma(\hbar\omega)$ ab:

$$r_{st}(\hbar\omega) = n_\gamma(\hbar\omega) \int_0^\infty M(E, \hbar\omega) n_u(E) n_0(E + \hbar\omega) dE. \quad (2.57)$$

Die Rate spontaner Emission hängt im Gegensatz zur stimulierten Emission nicht von der Photonendichte, sondern von der Zustandsdichte für Photonen, $D_\gamma(\hbar\omega)$ ab. Es ergibt sich damit

$$r_{sp}(\hbar\omega) = D_\gamma(\hbar\omega) \int_0^\infty M(E, \hbar\omega) n_u(E) n_0(E + \hbar\omega) dE, \quad (2.58)$$

wobei für D_γ gilt:

$$D_\gamma(\hbar\omega) = \frac{n^3(\hbar\omega)^2}{\pi^2 \hbar^3 c^3}. \quad (2.59)$$

n bezeichnet den Realteil des Brechungsindex.

Im Gleichgewicht kompensieren sich die Absorptionsrate und die Summe aus spontaner und stimulierter Emission:

$$r_{sp}(\hbar\omega) + r_{st}(\hbar\omega) = r_a(\hbar\omega). \quad (2.60)$$

Aus den genannten Ausdrücken für die Absorptions- und Emissionsraten sowie mit Hilfe der Gleichungen (2.54) und (2.55) lässt sich mit einigen Umformungen ein Ausdruck für die Photonendichte im Gleichgewicht finden:

$$n_\gamma(\hbar\omega) = \frac{n^3(\hbar\omega)^2}{\pi^2 \hbar^3 c^3} \left(\exp\left(\frac{\hbar\omega - (E_{F,e} - E_{F,h})}{kT}\right) - 1 \right)^{-1}. \quad (2.61)$$

Der Absorptionskoeffizient $\alpha(\hbar\omega)$ lässt sich über die Divergenz des Photonstroms $j_\gamma(\hbar\omega)$ einführen [34]:

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot j_\gamma(\hbar\omega) &= \alpha(\hbar\omega) j_\gamma(\hbar\omega) \\ &= r_a(\hbar\omega) - r_{st}(\hbar\omega) \\ &= r_{sp}(\hbar\omega). \end{aligned} \quad (2.62)$$

Der Photonstrom in ein Raumwinkelelement hinein ist

$$j_\gamma(\hbar\omega) = \frac{c_0}{n} n_\gamma(\hbar\omega) d\hbar\omega d\Omega \quad (2.63)$$

und damit gilt für die Rate spontaner Photonenemission unter Berücksichtigung von Gleichung (2.61)

$$dr_{sp}(\hbar\omega) = \alpha(\hbar\omega) \frac{n^2(\hbar\omega)^2}{\pi^2 \hbar^3 c_0^2} \left(\exp\left(\frac{\hbar\omega - (E_{F,e} - E_{F,h})}{kT}\right) - 1 \right)^{-1} d\hbar\omega. \quad (2.64)$$

Dabei wurde die Integration über den gesamten Raumwinkel mit einem Faktor 4π berücksichtigt. Falls $\hbar\omega - (E_{F,e} - E_{F,h}) \gg kT$ angenommen werden kann, vereinfacht sich Gleichung (2.64) schließlich zu

$$dr_{sp}(\hbar\omega) = \alpha(\hbar\omega) \frac{n^2(\hbar\omega)^2}{\pi^2 \hbar^3 c_0^2} \exp\left(\frac{-\hbar\omega}{kT}\right) \exp\left(\frac{\Delta\eta}{kT}\right) d\hbar\omega. \quad (2.65)$$

Unter Beachtung von Gleichung (2.13) ergibt sich so

$$\begin{aligned} dr_{sp}(\hbar\omega) &= \alpha(\hbar\omega) \frac{n^2(\hbar\omega)^2}{\pi^2 \hbar^3 c_0^2} \exp\left(\frac{-\hbar\omega}{kT}\right) \frac{n p}{n_i^2} d\hbar\omega \\ &= B(\hbar\omega, T) n p d\hbar\omega. \end{aligned} \quad (2.66)$$

Integriert über alle Energien folgt damit der Zusammenhang (2.15). Der Proportionalitätsfaktor $B(\hbar\omega, T)$ ist nach dieser Definition gegeben durch

$$B(\hbar\omega, T) = \alpha(\hbar\omega) \frac{n^2 (\hbar\omega)^2}{\pi^2 \hbar^3 c_0^2 n_i^2} \exp\left(\frac{-\hbar\omega}{kT}\right). \quad (2.67)$$

Es ist nützlich, die letzten beiden Ausdrücke auch in Abhängigkeit der Wellenlänge statt der Energie zu formulieren. Durch Substitution erhält man

$$\begin{aligned} dr_{sp,\lambda}(\lambda) &= \alpha_\lambda(\lambda) \frac{n^2 h^3 c^3}{\pi^2 \hbar^3 c_0^2 \lambda^4} \exp\left(\frac{-hc}{\lambda kT}\right) \frac{n p}{n_i^2} d\lambda \\ &= B_\lambda(\lambda, T) n p d\lambda \end{aligned} \quad (2.68)$$

und

$$B_\lambda(\lambda, T) = \alpha_\lambda(\lambda) \frac{n^2 h^3 c^3}{\pi^2 \hbar^3 c_0^2 \lambda^4 n_i^2} \exp\left(\frac{-hc}{\lambda kT}\right). \quad (2.69)$$

Obwohl die strahlende Rekombination in Silizium für Solarzellen typischerweise keinen Einfluss auf die Lebensdauer hat, weist das Emissionsspektrum von Silizium zwischen etwa 950 nm und 1200 nm ein ausgeprägtes Maximum aus, welches auf den Band-Band-Übergang von Ladungsträgern zurückzuführen ist. Da die Intensität dieser Lumineszenz als Funktion der Überschussladungsträgerdichte streng monoton steigend verläuft, lässt sie sich zur Bestimmung der Rekombinationslebensdauer heranziehen (siehe Kapitel 3).

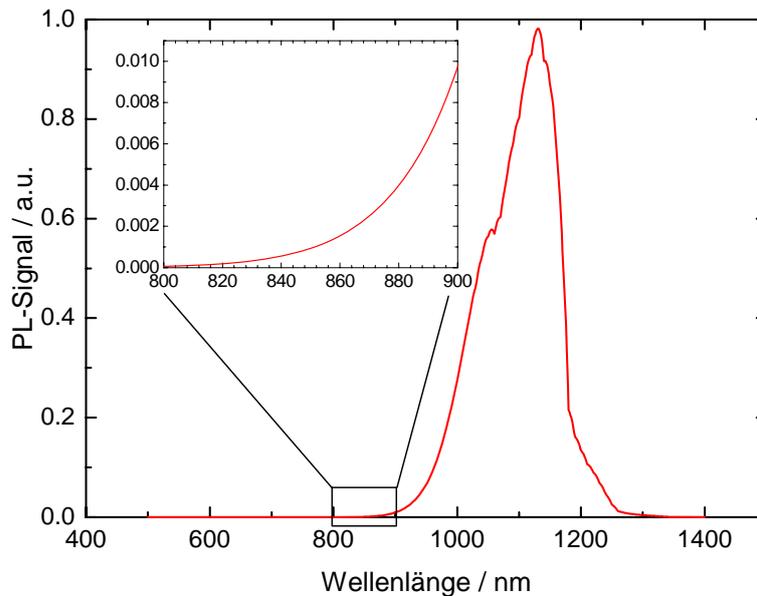


Abbildung 2.3: Photolumineszenzspektrum ohne Berücksichtigung von Reabsorption gemäß Gleichung (2.66).

Für Photonen mit Wellenlängen kleiner als $1 \mu\text{m}$ ist die Photonenabsorption an freien Ladungsträgern im Vergleich zur Band-Band-Absorption vernachlässigbar. Für größere Wellenlängen wird der Einfluss von photoneninduzierten Intradbandübergängen freier Ladungsträger aber bestimmend für das Silizium-Spektrum. Einerseits sinkt die Wahrscheinlichkeit der Band-Band-Absorption in diesem Bereich und ist für Wellenlängen oberhalb etwa $1.1 \mu\text{m}$ vernachlässigbar, andererseits steigt der Absorptionskoeffizient der freien Ladungsträgerabsorption quadratisch mit der Wellenlänge λ (siehe Abbildung 2.4). Dieser Zusammenhang wurde in [17] aus Leitfähigkeitsbetrachtungen bei elektromagnetischen Wechselfeldern theoretisch hergeleitet. Für den Absorptionskoeffizienten α_{FC} ergibt sich danach:

$$\alpha_{FC}(\lambda, N) = \frac{q^3}{4\pi\epsilon_0 c^3 n_r m^{*2} \mu} \lambda^2 N. \quad (2.70)$$

q bezeichnet hierbei die Elementarladung, ϵ_0 die Dielektrizitätskonstante im Vakuum, c die Lichtgeschwindigkeit, n_r den Brechungsindex von Silizium, m^* die effektive Masse und μ die Beweglichkeit der freien Ladungsträger. N hängt mit den Überschussladungsträgerdichten Δn , Δp und N_{dot} wie folgt zusammen:

$$\frac{N}{m^{*2}} = \frac{\Delta n}{m_e^{*2}} + \frac{\Delta p}{m_h^{*2}} + \frac{N_{dot}}{m_D^{*2}}, \quad (2.71)$$

wobei m_D^* je nach Dotierung gleich der effektiven Masse für Elektronen m_e^* oder Löcher m_h^* ist.

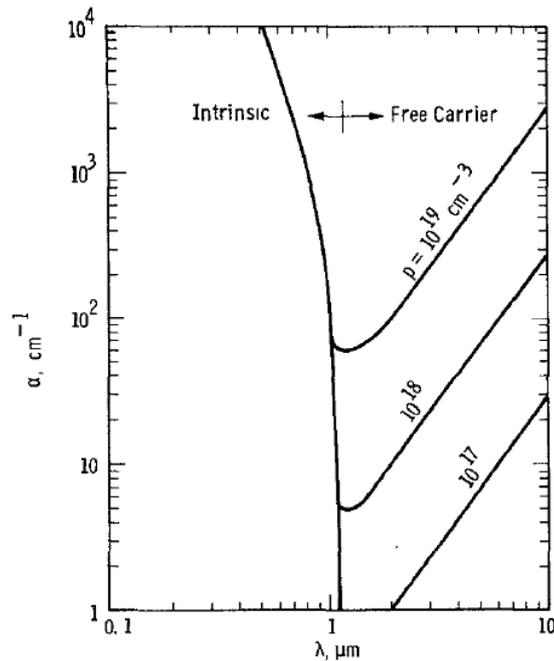


Abbildung 2.4: Band-Band-Absorptionskoeffizient und Absorptionskoeffizient der freien Ladungsträger von Silizium. Nach [36].

Schroder et al. [37] verglichen den theoretischen Zusammenhang aus [17] mit Messdaten von Schumann et al. [38] (siehe Abbildung 2.5).

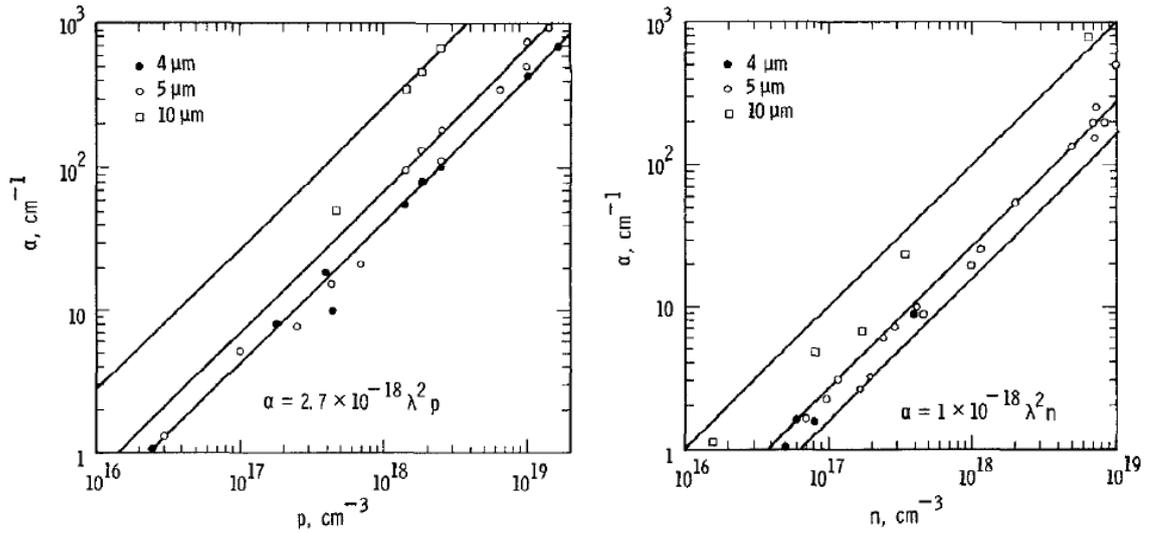


Abbildung 2.5: Absorptionskoeffizient der freien Ladungsträger in Silizium in Abhängigkeit der Wellenlänge und der Ladungsträgerkonzentration für Löcher (links) und Elektronen (rechts) bei Raumtemperatur. Aus [37].

Für geeignete Zahlenwerte für die Konstanten aus Gleichung (2.70) ergeben sich nach Smith folgende Werte für die Absorptionskoeffizienten freier Elektronen bzw. Löcher [37]:

$$\alpha_n \approx 2 \cdot 10^{-10} \lambda^2 n, \quad \alpha_p \approx 1.5 \cdot 10^{-10} \lambda^2 p. \quad (2.72)$$

Die experimentellen Werte aus Abbildung 2.5 betragen

$$\alpha_n \approx 1 \cdot 10^{-10} \lambda^2 n, \quad \alpha_p \approx 2.7 \cdot 10^{-10} \lambda^2 p. \quad (2.73)$$

Der Ansatz von Smith (Gleichung (2.70)) sowie dessen empirische Anpassung an experimentelle Daten (Gleichungen (2.73)) nehmen ein lineares Verhalten des Absorptionskoeffizienten von der Dotierung an. Diese Annahme ist aber insbesondere wegen der Abhängigkeit der Mobilität von der Ladungsträgerdichte ungerechtfertigt, wenn die Ladungsträgerdichte einen Wert von etwa $3 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ übersteigt [39, 40]. Dort wird für den Absorptionskoeffizienten ein verbessertes Modell vorgeschlagen:

$$\alpha_{FC}(\lambda, N) = \zeta_{FCA} \frac{N \lambda^2}{\mu(N)} L(D); \quad (2.74)$$

$$L(D) = \int_0^{\infty} \frac{x^3 e^{-x}}{x^3 + D} dx; \quad D = \frac{N^2 q^4 \lambda^2 \rho_0^2 [\Gamma(4)]^2}{4\pi^2 c^2 m^{*2} [\Gamma(\frac{5}{2})]^2}.$$

r_0 bezeichnet hierbei den spezifischen Widerstand und Γ die Gamma-Funktion. ζ_{FCA} ist eine experimentell zu bestimmende Konstante. Für p-Silizium wurde diese in [39] zu $\zeta_{FCA,p} = 4.97 \cdot 10^{-8} \text{ cm}^3 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ bestimmt, für n-Silizium zu $\zeta_{FCA,n} = 5.63 \cdot 10^{-8} \text{ cm}^3 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$. In dieser Arbeit wird bei den betrachteten Proben eine Dotierung von $3 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ nicht überschritten. Gleichung (2.70) findet deshalb ohne die beschriebene Korrektur Anwendung.

3 Messung der strahlenden Rekombination - Photoluminescence Imaging

Obwohl der Einfluss der strahlenden Rekombination in Silizium für Solarzellen auf die Minoritäts-Lebensdauer vernachlässigbar ist, erlaubt die Messung der strahlenden Rekombination die Bestimmung der Überschussladungsträgerdichte, die den Rückschluss auf die Lebensdauer nach Gleichung (2.43) zulässt. Die strahlende Rekombinationsrate ist bei indirekten Halbleitern um einige Größenordnungen kleiner als die Rekombination über Störstellen. Da die strahlende Rekombination aber von der Ladungsträgerdichte abhängt, lassen sich aus deren Detektion Rückschlüsse auf die Materialqualität ziehen. In diesem Kapitel werden Möglichkeiten zur quantitativen Messung der Ladungsträger-Lebensdauer vorgestellt und deren Potential diskutiert.

3.1 Photolumineszenz und Lebensdauer

Die Intensität der Lumineszenzstrahlung hängt über die strahlende Rekombinationsrate von der Dichte freier Elektronen und Löcher ab. Das Lumineszenzsignal, welches aus einem Volumenelement dV emittiert wird, bestimmt sich nach Gleichung (2.15) zu

$$I_{PL,dV} = A_{i,dV} R_{sp}(T) = A_{i,dV} \int_0^{\infty} r_{sp}(\hbar\omega, T) d\hbar\omega = A_{i,dV} B n p. \quad (3.1)$$

$A_{i,dV}$ ist ein noch zu bestimmender Proportionalitätsfaktor, der die Geometrie des Aufbaus beinhaltet. Für p-dotiertes Silizium gilt

$$\begin{aligned} n &\approx \Delta n \\ p &= N_A + \Delta p. \end{aligned} \quad (3.2)$$

Im Folgenden wird aus Gründen der Übersichtlichkeit grundsätzlich der Fall von p-dotiertem Material betrachtet. Der Fall von n-dotiertem Silizium lässt sich leicht analog formulieren.

Ohne einen Einfluss von Haftstellen (Details über diesen Effekt finden sich in Kapitel 5) gilt zudem $\Delta n = \Delta p$. Damit lässt sich das Lumineszenzsignal schreiben als

$$I_{PL,dV} = A_{i,dV} B(\Delta n N_A + \Delta n^2). \quad (3.3)$$

Aus dieser Gleichung ist zu erkennen, dass das Lumineszenzsignal aus einem Volumenelement und ohne Berücksichtigung der Reabsorption unter Niedereinjektionsbedingungen signifikant, unter Hochinjektionsbedingungen aber nur sehr schwach von der Basisdotierung abhängt (s. Abbildung 3.1). Die Minoritätsträger-Lebensdauer lässt sich für den statischen Fall aus dem Lumineszenzsignal mit Hilfe von Gleichung (2.43) bestimmen. Δn im Volumenelement dV bestimmt sich aus Gleichung (3.3) zu

$$\Delta n = -\frac{N_A}{2} + \sqrt{\left(\frac{N_A}{2}\right)^2 + \frac{I_{PL,dV}}{A_{i,dV} B}}. \quad (3.4)$$

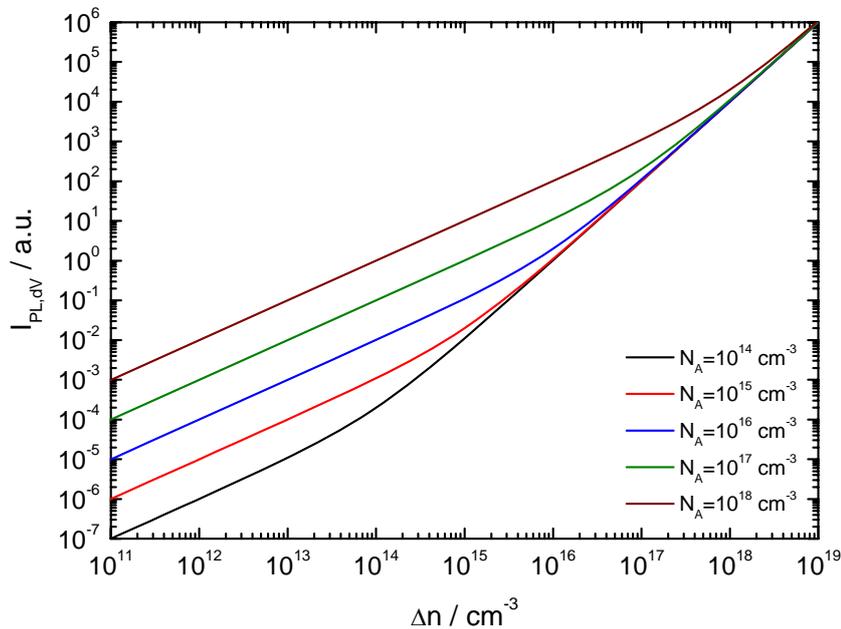
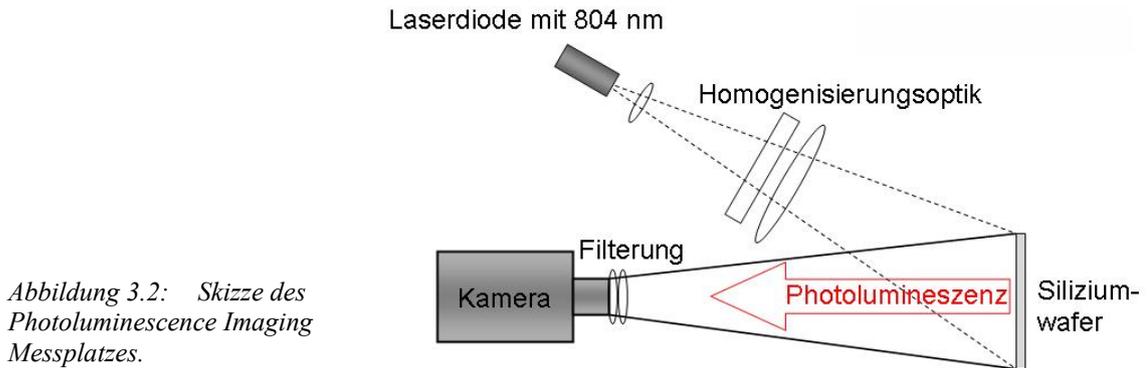


Abbildung 3.1: Photolumineszenzsignal aus einem Volumen dV in Abhängigkeit der Überschussladungsträgerdichte und der Dotierung.

3.2 Experimenteller Aufbau des Photoluminescence Imaging Messplatzes

In dieser Arbeit wurde in Zusammenarbeit mit M. The [41] im Rahmen einer Diplomarbeit ein Messplatz zur Bestimmung der Rekombinationslebensdauer konzipiert und realisiert. Wesentliche Bestandteile sind eine Silizium-Kamera zur Detektion der Lumineszenzstrahlung sowie eine lateral homogene Laserbeleuchtung zur Generation von Überschussladungsträgern. In Abbildung 3.2 ist der schematische Aufbau des Messplatzes gezeigt.



Zur Charakterisierung von Siliziumproben werden diese auf einem Messblock positioniert, der von einem aufgeweiteten Diodenlaser mit einer Wellenlänge von 804 nm mit einer Homogenität von $\pm 6\%$ auf einer Fläche von $100 \times 100 \text{ mm}^2$ beleuchtet wird. Die vom Laser emittierten und nicht von der Probenoberfläche reflektierten Photonen werden in guter Näherung vollständig in der Siliziumprobe absorbiert und erzeugen Elektron-Loch-Paare. Je nach Rekombination im Volumen und an den Oberflächen stellt sich bei statischer Beleuchtung ein Ladungsträgerdichteprofil ein, welches die Intensität emittierter Lumineszenzstrahlung bestimmt. Filter vor dem Kameraobjektiv bewirken eine selektive Detektion des Lumineszenzsignals und unterdrücken reflektierte Laserstrahlung. Eine kurze Übersichtsrechnung zeigt, dass diese Filterung essentiell ist: Angenommen sei ein Silizium-Wafer mit einer Basisdotierung von $N_A = 1.5 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ und einer Lebensdauer von $\tau_{eff} = 10 \text{ }\mu\text{s}$. Unter Niedereinjektionsbedingungen ergibt sich bei vernachlässigter Reabsorption ein relatives Lumineszenzsignal nach Gleichung (3.3) von

$$I_{PL,rel} = \int_0^d B \Delta n N_A dz \approx d B \Delta n N_A = B \tau J_{ph} (1 - R) N_A. \quad (3.5)$$

Bei einer angenommenen Reflektivität der Laserstrahlung an der Oberfläche von $R = 10\%$ beträgt so das Verhältnis der Intensitäten von reflektierter Laserstrahlung und Lumineszenzsignal

$$\frac{I_{Laser,refl}}{I_{PL,rel}} = \frac{1/9 J_{ph}}{B \tau J_{ph} N_A} \approx 370. \quad (3.6)$$

Bei kleineren Rekombinationslebensdauern erhöht sich dieser Anteil entsprechend. Aus dieser Abschätzung lässt sich schließen, dass eine Filterung der reflektierten Laserstrahlung um mindestens vier Größenordnungen notwendig ist, um den Einfluss der reflektierten Laserstrahlung zu minimieren.

Verschiedene Kameras wurden getestet, um das Photolumineszenzsignal zu detektieren. Die hier vorgestellten Messungen wurden mit einer Silizium-CCD und einer InGaAs-Kamera durchgeführt. Je nach verwendeter Kamera sind verschiedene Spektralbereiche der Lumineszenzstrahlung zugänglich.

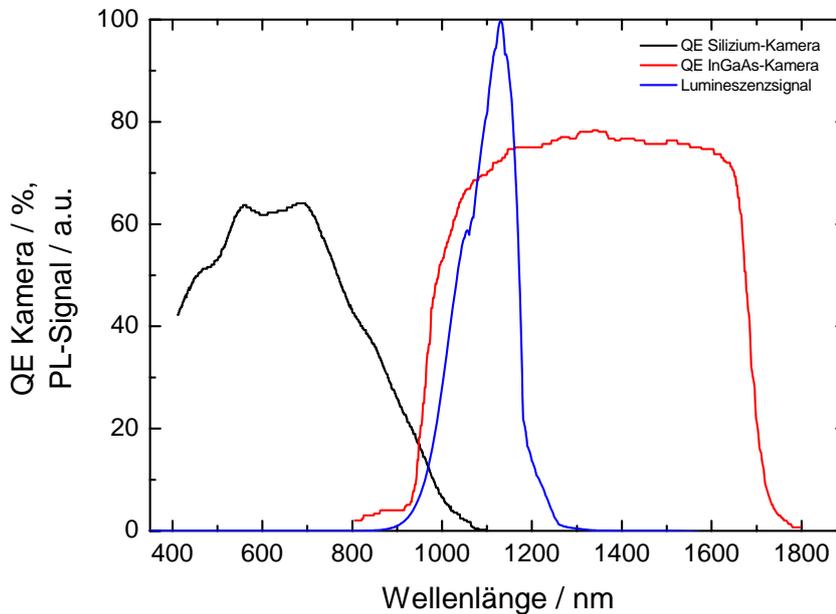


Abbildung 3.3: Quanteneffizienzen von Silizium- und InGaAs-Kamera im Vergleich zum Lumineszenzspektrum.

Die Siliziumkamera ist insbesondere geeignet, den kurzwelligen Anteil des Lumineszenzspektrums zu detektieren. Vorteile sind die hohen erreichbaren lateralen Auflösungen im Megapixel-Bereich sowie die langjährige Erfahrung in der Silizium-Kameratechnologie.

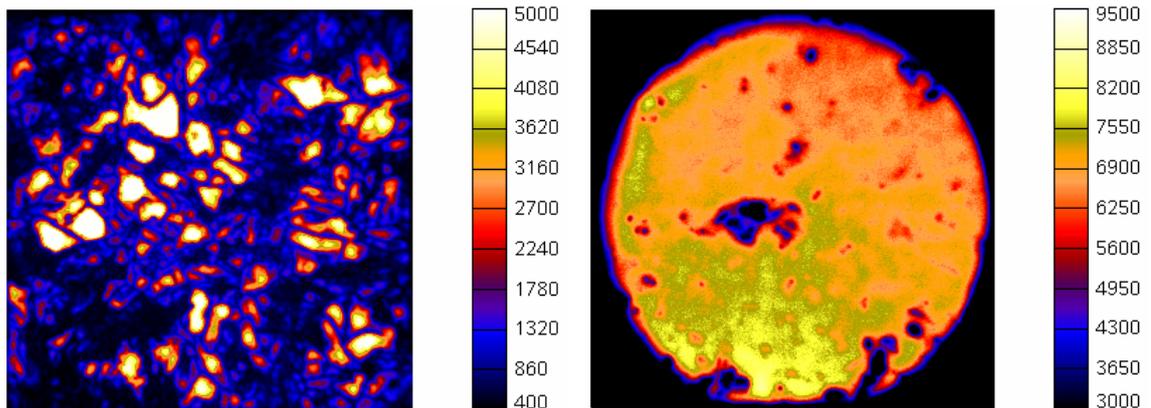


Abbildung 3.4: Beispielmessungen des Photolumineszenzsignals mit einer Siliziumkamera. Links ist ein multikristalliner, $100 \times 100 \text{ mm}^2$ großer Wafer, rechts ein Float-Zone-Silizium Wafer mit einem Durchmesser von 4 Zoll gezeigt. Die Oberflächen der Proben wurden mit einer SiN-Schicht passiviert. Die Messdauer betrug 0.5 s. Skala in Kameraeinheiten.

Zur Detektion des langwelligen Teils des Spektrums ist eine InGaAs-Kamera gut geeignet. Dem Vorteil einer hohen Quanteneffizienz im Bereich des Lumineszenzsignals steht eine geringere laterale Auflösung gegenüber. Während die für diese Arbeit verfügbare Silizium-Kamera über 1000×1000 Bildpunkte verfügt, gilt für die InGaAs-Kamera eine Auflösung von 320×256 Bildpunkten. Die Anforderungen an die Filterung der Laserreflexion nach Gleichung (3.6) sind wegen der Wellenlängenabhängigkeit der Quanteneffizienz für die Siliziumkamera wesentlich höher als für die InGaAs-Kamera. Abbildung 3.4 zeigt Beispielmessungen des Lumineszenzsignals bei Verwendung der Siliziumkamera.

3.3 Kalibrierung des Photolumineszenzsignals

Es wurden drei prinzipiell verschiedene Ansätze zur quantitativen Kalibrierung des Kamerasignals zur Messung absoluter Werte der Minoritätsträger-Lebensdauer entwickelt. Das erste Verfahren überträgt eine von Trupke et al. [42] vorgestellte, selbstkonsistente Methode auf den orts aufgelösten Fall, das zweite beschreibt die einmalige Kalibrierung des Systems gegen eine weitere, orts aufgelöste Lebensdauer-Messmethode. Als Beispiel wurde hierfür das *Carrier Density Imaging*-Verfahren (siehe Kapitel 4) angewandt. In einem dritten Verfahren werden Messungen mit verschiedenen Kurzpassfiltern zur Kalibrierung herangezogen. Durch die Abhängigkeit von Reabsorption emittierter Photonen von der Wellenlänge können Informationen über das Ladungsträgerprofil gewonnen werden.

3.3.1 Selbstkonsistente Lebensdauer-Kalibrierung

Für den Fall von nicht-ortsaufgelösten Photolumineszenzmessungen wurde in [42] ein Verfahren vorgestellt, mit dem sich Absolutwerte für die Minoritätsträger-Lebensdauer bestimmen lassen. Die grundsätzliche Idee dieser Methode liegt in der Messung der Phasenverschiebung zwischen einer modulierten Generation von Überschussladungsträgern und des Lumineszenzsignals. Die Anregungsfrequenz wird dabei möglichst so gewählt, dass der statische und der transiente Anteil der Lebensdauer nach Gleichung (2.47) in der gleichen Größenordnung liegen.

Die generalisierte Lebensdauer lässt sich nach den Gleichungen (2.47) und (3.4) ausdrücken:

$$\tau_{gen,dV}(\Delta n) = \frac{-\frac{N_A}{2} + \sqrt{\left(\frac{N_A}{2}\right)^2 + \frac{I_{PL,dV}}{A_{i,dV} B}}}{G(t) - \frac{d\Delta n(t)}{dt}}. \quad (3.7)$$

Der Übergang zu Proben endlicher Dicke lässt sich bei Annahme eines homogenen Ladungsträgerprofils und vernachlässigbarer Reabsorption durch Integration erreichen:

$$I_{PL} = \int_0^d I_{PL,dV} dz = A_{i,dV} d B (\Delta n N_A + \Delta n^2). \quad (3.8)$$

Mithilfe eines neuen Kalibrierfaktors $A_i = A_{i,dV} d$ ergibt sich für die Lebensdauer einer Probe mit endlicher Dicke

$$\tau_{gen}(\Delta n) = \frac{-\frac{N_A}{2} + \sqrt{\left(\frac{N_A}{2}\right)^2 + \frac{I_{PL}}{A_i B}}}{G(t) - \frac{d\Delta n(t)}{dt}}. \quad (3.9)$$

In [42] wird implizit von einer vernachlässigbaren Reabsorption ausgegangen. Bei Berücksichtigung der Reabsorption lässt sich das Photolumineszenzsignal wie folgt ausdrücken:

$$I_{PL} = A_{i,dV} \int_{\hbar\omega=0}^{\infty} \int_{z=0}^d B(\hbar\omega, T) (\Delta n(z) N_A + \Delta n^2(z)) \exp(-\alpha(\hbar\omega) z) dz d\hbar\omega. \quad (3.10)$$

Drei verschiedene Fälle sollen unterschieden werden:

1. Die Ladungsträgerdichte hängt nicht von der Tiefe z ab. Diese Näherung ist für hohe Volumenlebensdauern und geringe Oberflächenrekombinations-Geschwindigkeiten gültig. Dann vereinfacht sich Gleichung (3.10) zu

$$\begin{aligned}
I_{PL} &= (\Delta n N_A + \Delta n^2) A_{i,dV} \int_{\hbar\omega=0}^{\infty} \int_{z=0}^d B(\hbar\omega, T) \exp(-\alpha(\hbar\omega)z) dz d\hbar\omega \\
&= (\Delta n N_A + \Delta n^2) C_i \quad \text{mit} \\
C_i &= A_{i,dV} \int_{\hbar\omega=0}^{\infty} \int_{z=0}^d B(\hbar\omega, T) \exp(-\alpha(\hbar\omega)z) dz d\hbar\omega .
\end{aligned} \tag{3.11}$$

Durch diese Definition von C_i lässt sich analog zu Gleichung (3.9) die Lebensdauer bestimmen:

$$\tau_{gen}(\Delta n) = \frac{-\frac{N_A}{2} + \sqrt{\left(\frac{N_A}{2}\right)^2 + \frac{I_{PL}}{C_i}}}{G(t) - \frac{d\Delta n(t)}{dt}} . \tag{3.12}$$

Mit $A_{i,\Delta n} = const = C_i / B$ lässt sich Gleichung (3.12) in analoger Weise zu Gleichung (3.9) ausdrücken.

2. Es wird unter Niedriginjektionsbedingungen gemessen und das normierte Profil von $\Delta n(z)$ ändert sich nur schwach mit der Lebensdauer. Diese Bedingungen sind in guter Näherung für Materialien mit kleiner Rekombinationslebensdauer erfüllt. In diesem Fall folgt das Ladungsträgerprofil näherungsweise dem Generationsprofil, welches durch die Wellenlänge des verwendeten Lasers bestimmt wird. Der Beitrag $\Delta n^2(z)$ in Gleichung (3.10) kann vernachlässigt werden und es gilt näherungsweise:

$$\begin{aligned}
I_{PL} &= A_{i,dV} \int_{\hbar\omega=0}^{\infty} \int_{z=0}^d B(\hbar\omega, T) \Delta n_{mittel} \Delta n_{norm}(z) N_A \exp(-\alpha(\hbar\omega)z) dz d\hbar\omega \\
&= \Delta n_{mittel} C_i \quad \text{mit} \\
C_i &= A_{i,dV} \int_{\hbar\omega=0}^{\infty} \int_{z=0}^d B(\hbar\omega, T) \Delta n_{norm}(z) N_A \exp(-\alpha(\hbar\omega)z) dz d\hbar\omega .
\end{aligned} \tag{3.13}$$

Analog zu Gleichung (3.9) lässt sich die generalisierte Lebensdauer berechnen:

$$\tau_{gen}(\Delta n) = \frac{\frac{I_{PL}}{C_i}}{G(t) - \frac{d\Delta n(t)}{dt}} . \tag{3.14}$$

3. Die Näherungen, die in 1. und 2. gemacht wurden, sind nicht gültig. Unter diesen Umständen lässt sich Gleichung (3.9) durch einen Korrekturparameter $\xi_i(\tau, T)$ erweitern:

$$\tau_{gen}(\Delta n) = \frac{-\frac{N_A}{2} + \sqrt{\left(\frac{N_A}{2}\right)^2 + \frac{I_{PL}}{A_i \xi_i(\tau_{gen}, T) B}}}{G(t) - \frac{d\Delta n(t)}{dt}}. \quad (3.15)$$

Details zu dieser Korrektur finden sich für Photolumineszenzmessungen ohne Ortsauflösung in [43].

In Abbildung 3.5 ist eine aus [44] entnommene Abbildung einer Simulation zur Phasenverschiebung von Ladungsträgergeneration und Ladungsträgerdichte zu sehen. Bei Anwendung von Gleichung (3.9) zur Bestimmung der injektionsabhängigen Lebensdauer aus dem zeitlichen Verlauf von Generation und Photolumineszenzsignal ergeben sich für den aufsteigenden und absteigenden Ast der Generation Hystereseeffekte im berechneten Lebensdauerverlauf, wenn der Kalibrierfaktor A_i nicht korrekt gewählt ist. Simulierte und gemessene Verläufe der Lebensdauer sind in Abbildung 3.6 dargestellt (aus [42]).

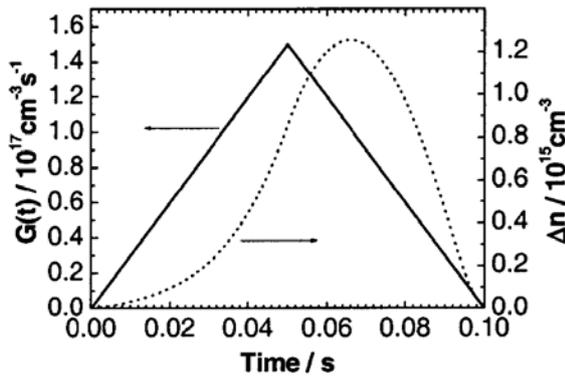


Abbildung 3.5: Zeitlicher Verlauf von Generationsrate (durchgezogene Linie) und Überschussladungsträgerdichte (gepunktete Linie). Angenommen ist eine linear von der Überschussladungsträgerdichte abhängige Lebensdauer mit $\tau(\Delta n=0) = 1 \text{ ms}$ und $\tau(\Delta n=10^{15} \text{ cm}^{-3}) = 10 \text{ ms}$. Aus [44].

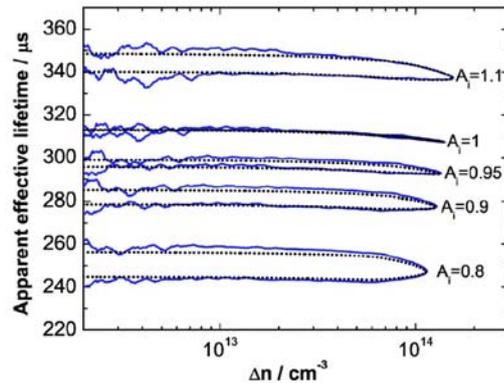


Abbildung 3.6: Simulierter (gepunktet) und experimenteller Verlauf (durchgezogen) der nach Gleichung (3.9) berechneten generalisierten Lebensdauer für verschiedene Kalibrierfaktoren A_i . Nur für den korrekten Kalibrierfaktor (normiert auf 1) verschwindet der Hystereseeffekt. Für die Simulation wurde eine von Δn linear abhängige Lebensdauer angenommen mit $\tau(\Delta n=0) = 314 \mu\text{s}$ und $\tau(\Delta n=10^{14} \text{ cm}^{-3}) = 309 \mu\text{s}$. Aus [42].

Der Übertrag dieser Methode zur Bestimmung des Absolutwerts der Lebensdauer auf die ortsaufgelösten PL-Imaging-Messungen wirft zwei wesentliche Probleme auf: (i) Die Detektion erfolgt über einen Kamerachip, der wesentlich längere Auslesezeiten aufweist als der einfache Silizium-Detektor. Die Anzahl von Einzelmessungen pro Modulationszyklus ist deshalb beschränkt. (ii) Die Kalibrierung muss für jeden Bildpunkt analog zum oben vorgestellten Verfahren realisiert werden und erfordert deshalb eine automatisierte Auswertung statt der manuellen Bestimmung des Kalibrierfaktors durch

einfaches Ausprobieren. Hierfür muss ein geeigneter Minimierungs-Parameter gefunden werden.

Abbildung 3.7 zeigt mögliche Positionen für die Ausleseintervalle der Kamerabilder. Die Generationsrate wird in diesem Fall mit 62.5 Hz dreiecksförmig moduliert. Die Kamera nimmt während einer Modulationsperiode vier Bilder mit einer Integrationszeit von je 2 ms auf. Die Zeitintervalle der Bildaufnahmen liegen dabei symmetrisch zum Maximum der Generation.

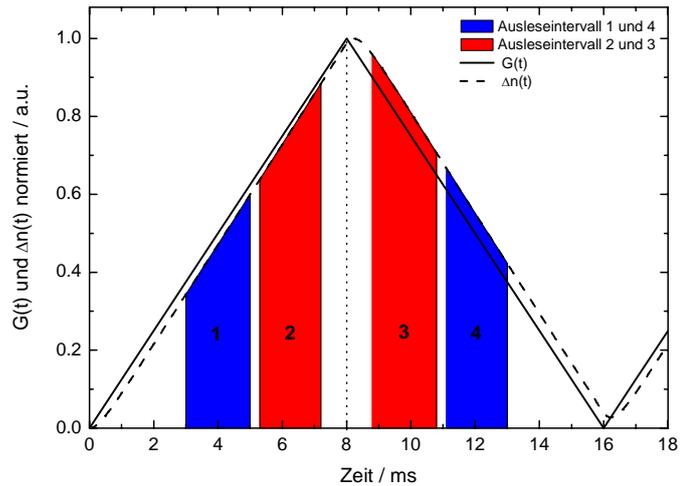


Abbildung 3.7: Ausleseintervalle für die selbstkonsistente Kalibrierung des Kamerasignals. Gezeigt sind zusätzlich die Generationsrate (durchgezogen), die Überschussladungsträgerdichte (gestrichelt). Die Breite der Balken zeigt die Integrationszeit für ein Kamerabild.

In diesem Beispiel wird dieselbe Injektionsabhängigkeit der Lebensdauer wie in Abbildung 3.6 und eine Basisdotierung von $N_A = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ angenommen. Es wird eine Anregungswellenlänge von 804 nm mit einem maximalen Photonenfluss von $2.5 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ gewählt. Reflexionen an der Oberfläche werden vernachlässigt.

Um die Funktionsweise des Verfahrens zu illustrieren, werden die zu erwartenden PL-Signale nach Gleichung (3.8) und einem Kalibrierfaktor $A_i = 1$ simuliert. In einem zweiten Schritt werden die simulierten PL-Werte benutzt, um wiederum den jetzt als unbekannt angenommenen Kalibrierfaktor zu bestimmen.

Die von A_i abhängige simulierte Überschussladungsträgerdichte berechnet sich bei Vernachlässigung der Reabsorption zu

$$\Delta n = -\frac{N_A}{2} + \sqrt{\left(\frac{N_A}{2}\right)^2 + \frac{I_{PL}}{A_i B}}. \quad (3.16)$$

Die Ableitung der Überschussladungsträgerdichte nach der Zeit wird durch den Differenzenquotienten der Messwerte 1 und 2 sowie 3 und 4 genähert:

$$\frac{d\Delta n_{\text{steigend}}}{dt} = \frac{\Delta n_2 - \Delta n_1}{t_2 - t_1}, \quad \frac{d\Delta n_{\text{fallend}}}{dt} = \frac{\Delta n_4 - \Delta n_3}{t_4 - t_3}. \quad (3.17)$$

Mit Gleichung (3.9) ergibt sich die simulierte Lebensdauer. In ähnlicher Weise wie in Abbildung 3.6 lassen sich für verschiedene Werte des Kalibrierfaktors die berechneten Werte für die Überschussladungsträgerdichte und die Lebensdauer auftragen (siehe Abbildung 3.8).

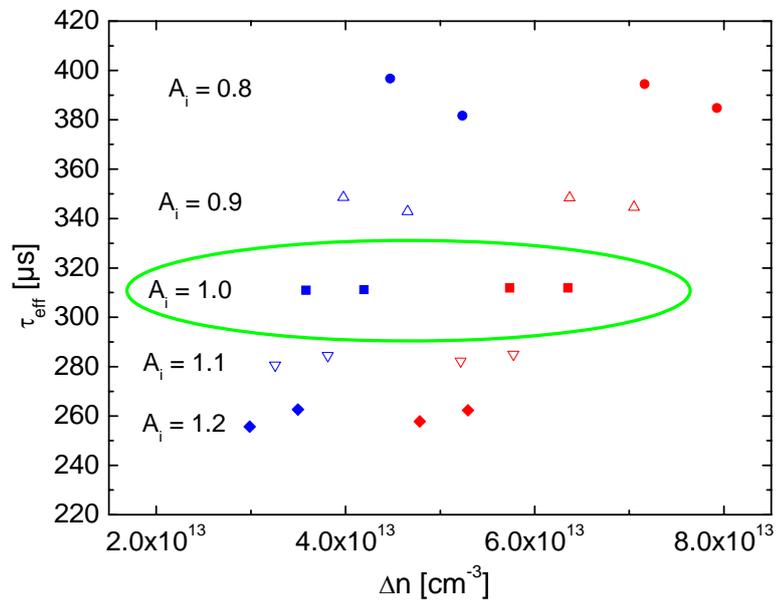


Abbildung 3.8: Simulierte Lebensdauer aufgetragen über die simulierte Überschussladungsträgerdichte für verschiedene angenommene Kalibrierfaktoren. Nur für $A_i=1$ ergibt sich der erwartete lineare Verlauf der Lebensdauer.

Es zeigt sich, dass nur für $A_i = 1$ der angenommene lineare Verlauf der Lebensdauer zu erkennen ist.

An diesem Beispiel zeigt sich die prinzipielle Schwierigkeit gegenüber dem nicht ortsaufgelösten Verfahren: Es ist auf Grund der wenigen für die Analyse zur Verfügung stehenden Punkte nicht ohne Weiteres möglich, den richtigen Wert für A_i zu bestimmen, wenn kein linearer Verlauf der injektionsabhängigen Lebensdauer angenommen werden kann. Dieser Verlauf ist in typischen Siliziumproben durch Störstellen-Rekombination (s. Kapitel 2.3.2) bestimmt und häufig nichtlinear. Die Annahme der Linearität kann durch die Wahl eines kleinen Intervalls von Δn verbessert werden. Wenn der Einfluss von Auger-Rekombination vernachlässigt werden kann, können unabhängig von der Linearität Annahmen über die Ableitung der Lebensdauer nach der Überschussladungsträgerdichte gemacht werden. So gilt typischerweise bei Raumtemperatur, dass die SRH-Lebensdauer monoton mit der Überschussladungsträgerdichte steigt. Für höhere Proben Temperaturen oder geringe Dotierungen kann sich diese Monotonie für flache Störstellen umkehren (s. [19]). Dieser Fall soll hier aber nicht diskutiert werden. Wird die Monotonie der Lebensdauer vorausgesetzt (wobei es für dieses Beispiel unerheblich ist, ob die Lebensdauer fällt oder steigt), kann der korrekte Kalibrierfaktor in Abbildung 3.8 ohne die Annahme eines linearen Verlaufs der Lebensdauer zu $A_i = 1$ bestimmt werden.

Für die automatisierte Auswertung muss ein Parameter definiert werden, der den Hystereseeffekt in Abhängigkeit von A_i beschreibt. Als günstig erwiesen hat sich für diesen

Zweck die von den Messpunkten eingeschlossene Fläche. Zwei Beispiele sind in Abbildung 3.9 dargestellt.

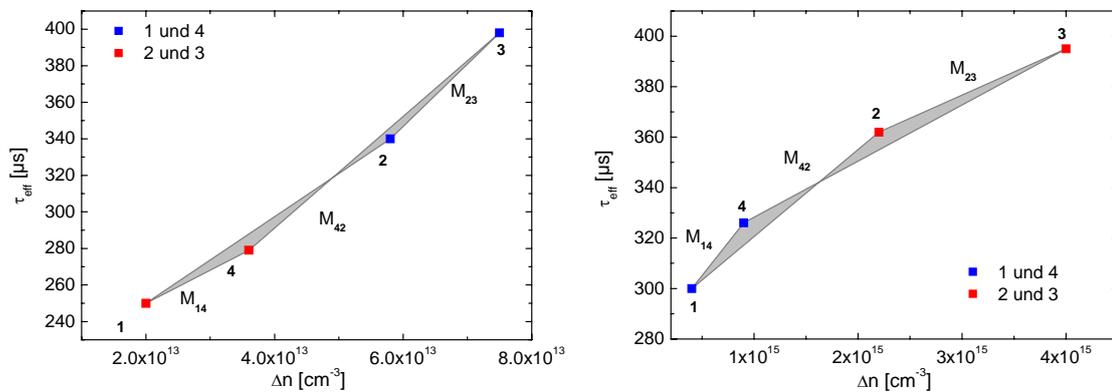


Abbildung 3.9: Mögliche Verläufe der Messwerte für die selbstkonsistente Kalibrierung. Die Minimierung der von den Messpunkten 1 bis 4 aufgespannten Fläche entspricht der Minimierung des Hystereseeffekts und führt auf den besten Kalibrierfaktor.

Die in Abbildung 3.7 skizzierten PLI-Messungen wurden aus Gründen der einfacheren Triggerung und Datenaufnahme hintereinander aufgenommen. Insbesondere wurde die minimale Auslesezeit der Kamera von 31.25 ms berücksichtigt, die Bildaufnahmen während zwei aufeinanderfolgenden Perioden unmöglich macht. Es wurden deshalb einzelne Messungen mit einer Mittelung von je 200 Bildern und den in Abbildung 3.7 skizzierten Phasenverschiebungen aufgenommen. Hierzu wurden die Kamera und die Laserbeleuchtung mit Hilfe eines Triggersignals synchronisiert (s. Abbildung 3.10). Apparaturbedingte Verzögerungen wurden dabei berücksichtigt.

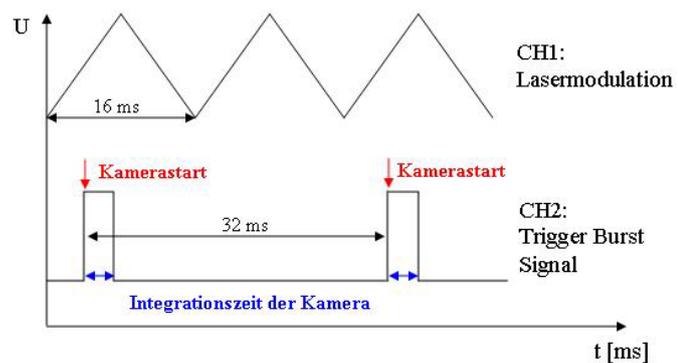


Abbildung 3.10: Aufnahme von PL-Kamerabildern mit fester Phasenbeziehung zur dreiecksförmigen Anregungsbeleuchtung.

Die Messergebnisse an einer multikristallinen, SiN-passivierten Siliziumprobe mit einem spezifischen Widerstand von $1 \Omega\text{cm}$ sind in Abbildung 3.11 dargestellt. Die Anregung der Laserbeleuchtung von 880 nm wurde gemäß Abbildung 3.10 dreiecksförmig zwischen 0 und $2.16 \cdot 10^{17}$ Photonen / cm^2 moduliert.

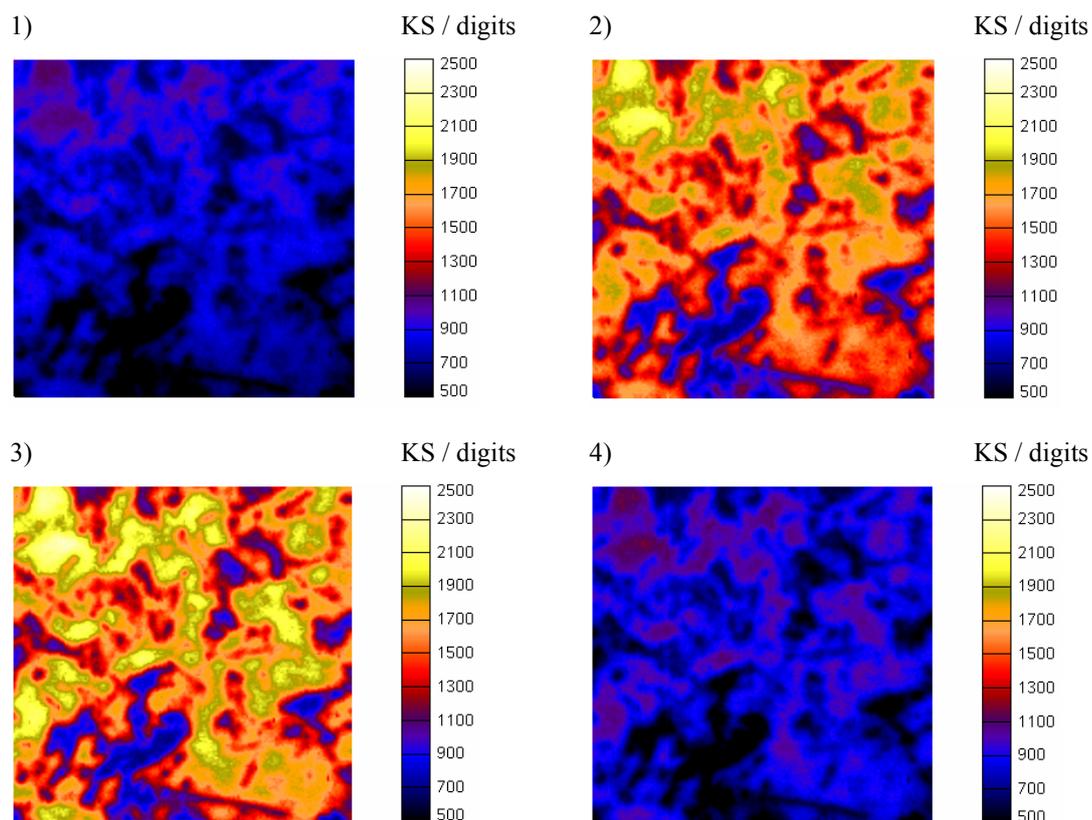


Abbildung 3.11: PL-Kamerabilder mit verschiedenen Phasenverschiebungen gemäß Abbildung 3.7. Die Belichtungsintervalle wurden von 3-5 ms (1), 5.2-7.2 ms (2), 8.8-10.8 ms (3) und 11-13 ms (4) nach dem Minimum der Lasermodulation gewählt. Es ist ein Probenausschnitt von $50 \times 50 \text{ mm}^2$ gezeigt. Auf Grund der gegenüber der Laseranregung phasenverschobenen Ladungsträgerdichte ist der Mittelwert von Kamerabild 4 höher als von Kamerabild 1 und von Kamerabild 3 höher als von Kamerabild 2.

Die Mittelwerte der in Abbildung 3.11 dargestellten Messungen betragen:

Bild 1: 762 digits, Bild 2: 1461 digits, Bild 3: 1562 digits und Bild 4: 812 digits.

Die zur Verfügung stehende Kamera erlaubte auf Grund ihres Signal-zu-Rausch-Verhältnisses keine ortsaufgelöste Bestimmung des Kalibrierparameters A_i . Stattdessen wurde zur prinzipiellen Demonstration der Methode eine integrale Bestimmung des Kalibrierparameters vorgenommen. Aus den Messungen aus Abbildung 3.11 lässt sich mit Hilfe der Gleichungen (3.9), (3.17) und der oben beschriebenen Methode der Flächenminimierung ein mittleres A_i bestimmen. Für $A_i = 7.59 \cdot 10^{-14} \text{ digits cm}^3 \text{ s}^{-1}$ ist die von den Messdaten aufgespannte Fläche minimal. Mit diesem Faktor kann das Kamerasignal einer *Photoluminescence Imaging*-Messung auf eine absolute Skala der Rekombinationslebensdauer kalibriert werden. Das Ergebnis und ein Vergleich zu einer CDI-Lebensdauerermessung sind in Abbildung 3.12 dargestellt.

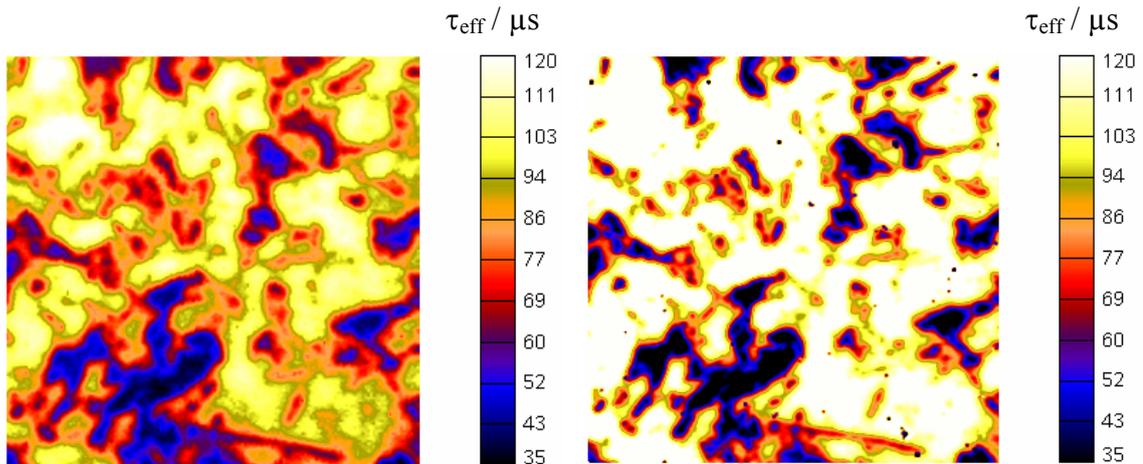


Abbildung 3.12: Messung der Rekombinationslebensdauer mit Photoluminescence Imaging, ausgewertet mit der selbstkonsistenten Kalibrierung (links), und Vergleichsmessung mit Carrier Density Imaging (rechts).

In diesem Vergleich fällt auf, dass Bereiche hoher Lebensdauer in der PLI-Messung im Vergleich zur CDI-Messung niedriger, Bereiche niedriger Lebensdauer aber höher gemessen werden. Die Mittelwerte betragen $88 \mu\text{s}$ für die PL-Messung und $99 \mu\text{s}$ für die CDI-Messung. Diese Beobachtung lässt sich im Vergleich der Histogramme dieser beiden Messungen verdeutlichen (siehe Abbildung 3.12).

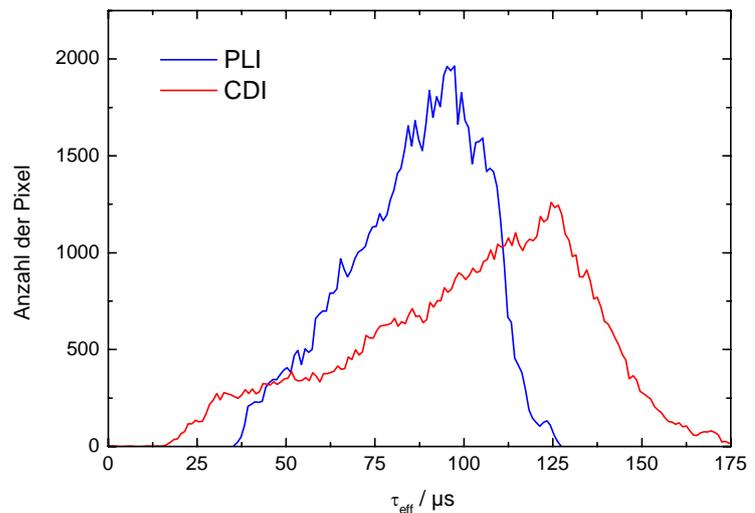


Abbildung 3.13: Histogramme der Lebensdaueremessungen aus Abbildung 3.12.

Der Grund für die Abweichungen liegt in der integralen Bestimmung von A_i . Für Bereiche hoher Rekombinationslebensdauer ist der mittlere Kalibrierfaktor zu hoch, für Bereiche kleiner Lebensdauer zu klein. Bereiche geringer Lebensdauer werden durch die oberflächennahe Überschussladungsträgerverteilung weniger von Reabsorption beeinflusst als Bereiche höhere Lebensdauer, deren Tiefenprofil der Überschussladungsträger homogener ist. Durch die Bestimmung eines Kalibrierfaktors kann diesem Unterschied nicht Rechnung getragen werden. Mit Hilfe einer empfindlicheren Kamera ließe sich die Bestimmung des Kalibrierfaktors auch orts aufgelöst realisieren. In diesem Fall ist eine bessere Übereinstimmung der PL-Messung mit der Referenzmessung zu erwarten.

3.3.2 Kalibrierung des Messsignals durch Vergleich mit einer alternativen Messtechnik

Eine weitere Möglichkeit zur Kalibrierung bietet der Vergleich des Photolumineszenzsignals mit einer alternativen Messmethode. Ziel dieses Vergleichs ist eine Bestimmung der apparaturbedingten Einflüsse auf das Messsignal. Reabsorptionseffekte und die nichtlineare Abhängigkeit des Photolumineszenzsignals von der Ladungsträgerdichte werden mit Hilfe eines mathematischen Modells berücksichtigt.

Als alternative Messtechnik wurde in dieser Arbeit das *Carrier Density Imaging*-Verfahren herangezogen. Wie das PLI-Verfahren beruht auch die CDI-Methode auf einer homogenen und monochromatischen Laseranregung. Für Vergleichsmessungen kann aus diesem Grund dieselbe Anregungsquelle eingesetzt werden, um in beiden Messverfahren gleiche Ladungsträgerprofile zu gewährleisten. Außerdem handelt es sich bei der CDI um ein quasi-statisches Verfahren, was die Bestimmung einer absoluten Lebensdauer nach Gleichung (2.43) zulässt. PLI-Messungen lassen sich ebenfalls unter stationären Bedingungen realisieren. Ein Vergleich mit z.B. einer orts aufgelösten MW-PCD-Messung bietet diese Vorteile der unmittelbaren Vergleichbarkeit nicht.

Das von der Kamera detektierte Photolumineszenzsignal hängt neben der Ladungsträgerdichte von der Geometrie des Aufbaus, insbesondere vom Abstand der Kamera zur Probe und von der Apertur der Linse, aber auch vom Transmissionsgrad der verwendeten Filter und der Optik sowie der Quanteneffizienz des CCD-Detektors ab. Das PL-Signal lässt sich ausdrücken durch

$$I_{PL} = K_{cal} \int_0^{\infty} \eta_{Kamera}(\hbar\omega) T_{LP-Filter}(\hbar\omega) B(\hbar\omega) \cdot \int_0^d (\Delta n^2(z) + N_A \Delta n(z)) \exp(-\alpha(\hbar\omega)z) dz d\hbar\omega. \quad (3.18)$$

K_{cal} ist ein Proportionalitätsfaktor, der die Geometrie des Aufbaus berücksichtigt. Eingang finden insbesondere der Raumwinkel, der durch den Abstand der Kamera und die Apertur des Objektivs gegeben ist, sowie die Abschwächung der Strahlung durch Streuung und Totalreflexion an der Oberfläche. $\eta_{Kamera}(\hbar\omega)$ ist die Quanteneffizienz der Kamera (siehe Abbildung 3.3), $T_{LP-Filter}(\hbar\omega)$ ist der energieabhängige Transmissionsgrad der verwendeten Langpass-Filter und der Kameraoptik, d die Dicke der Probe und $B(\hbar\omega)$ ist in Gleichung (2.67) definiert.

Mit simulierten Ladungsträgerprofilen, die in Abhängigkeit der Volumen-Lebensdauer und der Oberflächenrekombinations-Geschwindigkeit aus der Kontinuitätsgleichung (2.42) oder aus einer Halbleitersimulationssoftware gewonnen werden können, lässt sich für bekannte $\eta_{Kamera}(\hbar\omega)$, $T_{LP-Filter}(\hbar\omega)$, $B(\hbar\omega)$ und $\alpha(\hbar\omega)$ das in der Kamera detektierte Photolumineszenzsignal berechnen. Hierzu wird zunächst $K_{cal} = 1$ gesetzt. Entsprechend den späteren experimentellen Bedingungen sind eine p-Dotierung von 1.25

Ω_{cm} und eine Laserbeleuchtung mit $\lambda = 804 \text{ nm}$ und einer Photonenflussdichte von $1.79 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ angenommen.

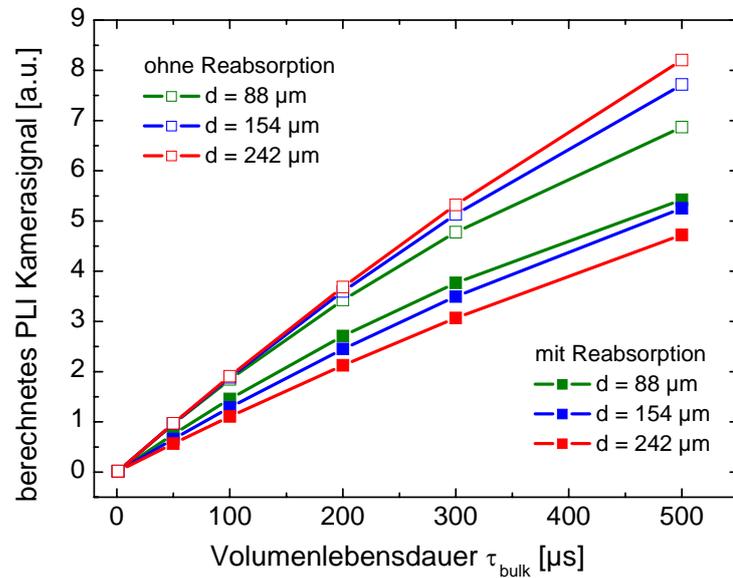


Abbildung 3.14: Simulation des von der Kamera detektierten Photolumineszenzsignals in Abhängigkeit der Volumen-Lebensdauer. Es ist eine Oberflächenrekombinations-Geschwindigkeit von $S = 10 \text{ cm/s}$ angenommen.

Die Simulation zeigt, dass der Effekt der Reabsorption signifikant ist. Je nach Probendicke beträgt der Anteil reabsorbierter Strahlung etwa die Hälfte des Gesamtsignals. Je dicker die Probe ist, desto stärker schwächt die Reabsorption erwartungsgemäß das Messsignal. Reabsorption hat für kleine Lebensdauern einen kleineren relativen Einfluss auf das Messsignal, weil in diesem Fall die Ladungsträgerdichteverteilung gegen das Generationsprofil strebt. Durch die geringe Eindringtiefe der Laserstrahlung bei 804 nm von $12 \mu\text{m}$ wird ein Großteil der Ladungsträger sehr oberflächennah erzeugt und ist deshalb von Reabsorption schwächer beeinflusst. Außerdem zu beachten ist, dass der Einfluss der Oberflächenrekombinations-Geschwindigkeit von der Probendicke abhängt. Je dünner die Probe ist, desto größer ist der Anteil der Oberflächenrekombination. Schließlich ist die integrale Ladungsträgerdichte bei konstanter Beleuchtung ebenfalls dickenabhängig. Da die Rekombinationslebensdauer von der Ladungsträgerdichte abhängig sein kann, ändert sich die Lebensdauer möglicherweise mit der Dicke der Probe. Die Kurven in Abbildung 3.14 sind von diesem Effekt aber nicht abhängig.

Zur experimentellen Bestimmung der Rekombinationslebensdauer dienen CDI-Messungen. Es muss dabei Sorge getragen werden, dass einerseits die experimentellen Bedingungen wie Intensität und Wellenlänge der Generationsbeleuchtung zu den PLI-Messungen gleich gewählt werden, andererseits ein Einfluss von Haftstellen (siehe Kapitel 5) auf die mit CDI gemessenen Lebensdauern ausgeschlossen werden kann.

CDI-Messungen liefern wie die meisten Lebensdauerermesstechniken effektive Lebensdauern, die aus einer Kombination von Volumen- und Oberflächenrekombination bestimmt werden. Für den Fall gut passivierter Oberflächen lässt sich Gleichung (2.50) zur Bestimmung der effektiven Lebensdauer heranziehen.

Das Photolumineszenzsignal in Abhängigkeit der effektiven Lebensdauer ist in Abbildung 3.15 dargestellt. Zusätzlich zu den simulierten Daten sind für verschiedene Dicken Parametrisierungen der Form

$$I_{PL,sim}(\tau_{eff}) = a_{sim} \tau_{eff}^2 + b_{sim} \tau_{eff} \quad (3.19)$$

ingezeichnet. Die Wahl der Beschreibung als quadratische Gleichung berücksichtigt die linearen und quadratischen Anteile von Δn in Gleichung (3.18).

Abbildung 3.15: Simuliertes Photolumineszenzsignal in Abhängigkeit der effektiven Rekombinationslebensdauer. Zur Parametrisierung sind zusätzlich polynomische Kurvenanpassungen durchgeführt.

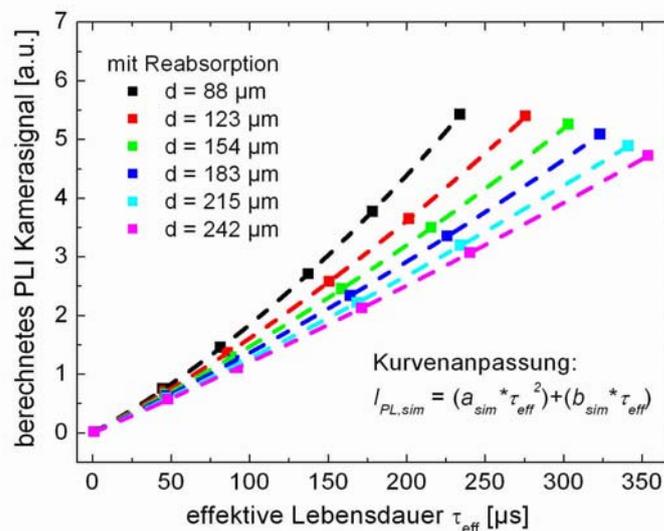
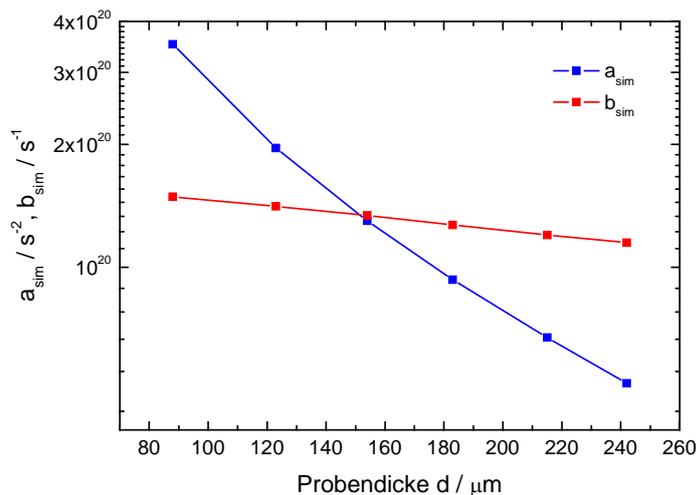


Abbildung 3.16: Abhängigkeit der Parametrisierung a_{sim} und b_{sim} von der Probendicke. Angenommen ist in diesem Beispiel eine Dotierung von $1.25 \Omega\text{cm}$.



Die simulierte Abhängigkeit des Photolumineszenzsignals von der effektiven Lebensdauer soll im Folgenden mit experimentellen Daten verglichen werden, um den Proportionalitätsfaktor K_{cal} der PLI-Apparatur für einen gegebenen Abstand von Kamera und Probe und für eine gegebene Oberflächenqualität zu bestimmen. Um die Unabhängig-

keit von K_{cal} von der Probendicke zu überprüfen, wurde ein Probensatz aus verschiedenen abgedünnten multikristallinen, $100 \times 100 \text{ mm}^2$ großen Proben untersucht. Die Oberflächen wurden nach einem mechanischen Abdünnen chemisch poliert und mit einer passivierenden Siliziumnitridschicht versehen. Die Oberflächenrekombinations-Geschwindigkeit dieser Schicht ist in [45] detailliert untersucht worden. Für das verwendete Material mit einer p-Dotierung von $1.25 \Omega\text{cm}$ kann für den hier betrachteten Injektionsbereich eine Oberflächenrekombinations-Geschwindigkeit von $S = 10 \text{ cm/s}$ angenommen werden. Es wird außerdem angenommen, dass die Basisdotierung lateral nicht variiert.

CDI-Messungen und PLI-Messungen wurden unter identischen Beleuchtungsbedingungen ($\lambda = 804 \text{ nm}$, $J_{ph} = 1.79 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}$) durchgeführt. Um die Messdaten punktwise vergleichen zu können, wurde zunächst die ursprünglich höheraufgelösten PLI-Messdaten auf die Auflösung der CDI-Messung durch geeignete Interpolation verkleinert. Die so entstandenen 288×288 Pixel großen Matrizen lassen sich dann softwareseitig durch entsprechende Translation und Rotation anpassen, um eine orts aufgelöste Vergleichbarkeit der Messungen zu erreichen.

Nach dieser Anpassung können dann die einzelnen Messpunkte gegeneinander aufgetragen werden (siehe Abbildung 3.17). In Abweichung zu Gleichung (3.19) wurde zur Kurvenanpassung eine Nullpunktverschiebung eingeführt, die berücksichtigt, dass trotz einer sorgfältigen Filterung der Laserwellenlänge ein schwacher Einfluss der reflektierten Laserstrahlung auf das PL-Kamerasignal zu verzeichnen ist. Die dickenabhängigen Parameter a_{sim} und b_{sim} , die zur Parametrisierung der simulierten Abhängigkeiten bestimmt wurden, wurden der Simulation (Abbildung 3.15) entnommen. Außer der Nullpunktverschiebung wird demnach nur K_{cal} den Messdaten angepasst.

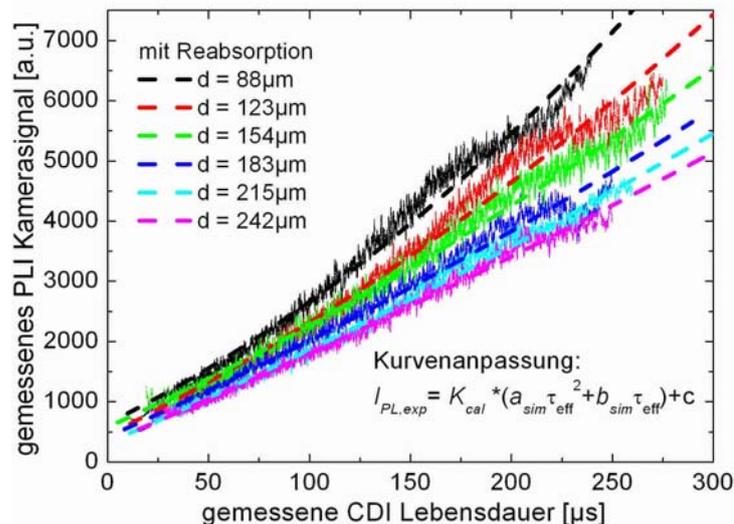


Abbildung 3.17: Punktwise Auftragung von unkalibrierten PLI-Messungen gegen CDI-Lebensdauer-Messungen und Kurvenanpassungen mit einem parametrischen Modell.

Die Tabelle in Abbildung 3.18 fasst die Ergebnisse der Kurvenanpassung zusammen.

$d / \mu\text{m}$	$a_{sim} / 1/\text{s}^2$	$b_{sim} / 1/\text{s}$	K_{cal} / digits	c / digits
88	$3.52 \cdot 10^{17}$	$1.49 \cdot 10^{20}$	$1.09 \cdot 10^{-19}$	643
123	$1.96 \cdot 10^{17}$	$1.41 \cdot 10^{20}$	$1.16 \cdot 10^{-19}$	449
154	$1.30 \cdot 10^{17}$	$1.34 \cdot 10^{20}$	$1.15 \cdot 10^{-19}$	578
183	$9.33 \cdot 10^{16}$	$1.27 \cdot 10^{20}$	$1.17 \cdot 10^{-19}$	418
215	$6.73 \cdot 10^{16}$	$1.20 \cdot 10^{20}$	$1.22 \cdot 10^{-19}$	319
242	$5.20 \cdot 10^{16}$	$1.15 \cdot 10^{20}$	$1.23 \cdot 10^{-19}$	322

Abbildung 3.18: Parameter der Kurvenanpassung aus Abbildung 3.17. Freie Parameter für die Anpassung sind ausschließlich der Proportionalitätsfaktor K_{cal} und der Parameter für die Nullpunktverschiebung c .

Aus diesen Messdaten lassen sich die Kalibrierparameter der *Photoluminescence Imaging*-Apparatur und ihre Unsicherheit bestimmen. Für den Kalibrierparameter K_{cal} ergibt sich nach diesen Messungen

$$K_{cal} = (1.17 \pm 0.05) \cdot 10^{-19} \text{ digits} . \quad (3.20)$$

Der Parameter für die Nullpunktverschiebung c weist eine größere Schwankung auf. Er wird zu

$$c = (460 \pm 130) \text{ digits} \quad (3.21)$$

bestimmt.

Für den in der Kalibrierung verwendeten Abstand und die Kameraeinstellungen (Blende, Fokus, Verstärkung) sowie den Oberflächeneigenschaften der Kalibrierproben lassen sich mit den bestimmten Kalibrierparametern quantitative Messungen der Rekombinationslebensdauer aus dem Photolumineszenzsignal der Kamera berechnen.

Zur Demonstration wurde die Lebensdauerverteilung einer multikristallinen Siliziumprobe mit einer p-Dotierung von $1 \Omega\text{cm}$ mit glanzgeätzten und SiN-passivierten Oberflächen und einer Dicke von $295 \mu\text{m}$ aus einer PLI Messung bestimmt. Analog zu Abbildung 3.16 werden die Parameter a_{sim} und b_{sim} für die entsprechende Dotierung bestimmt. Mit den Kalibrierkonstanten K_{cal} und c aus den Gleichungen (3.20) und (3.21) ergibt sich die in Abbildung 3.19 dargestellte Lebensdauerverteilung. Zum Vergleich ist eine CDI-Lebensdauerermessung dargestellt, die unter identischen Beleuchtungsbedingungen aufgenommen wurde.

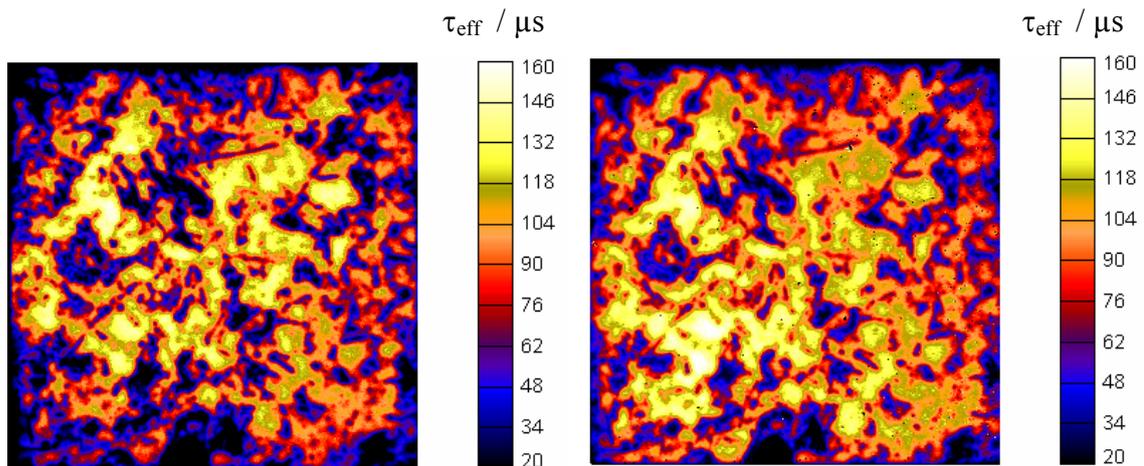


Abbildung 3.19: Ortsaufgelöste Verteilung der Rekombinationslebensdauer mit dem PLI-Verfahren (links) und dem CDI-Verfahren (rechts). Die dargestellte Fläche beträgt $100 \times 100 \text{ mm}^2$.

Die Messzeit der Photolumineszenzmessung betrug 0.5 s , die der CDI-Messung 120 s . Die quantitative Übereinstimmung lässt sich mit einer histogrammischen Auftragung der Messwerte aus Abbildung 3.19 überprüfen (siehe Abbildung 3.20). Der Mittelwert der mit PLI gemessenen Lebensdauer beträgt $73 \mu\text{s}$, für die CDI-Messwerte ergibt sich ein Mittelwert von $84 \mu\text{s}$.

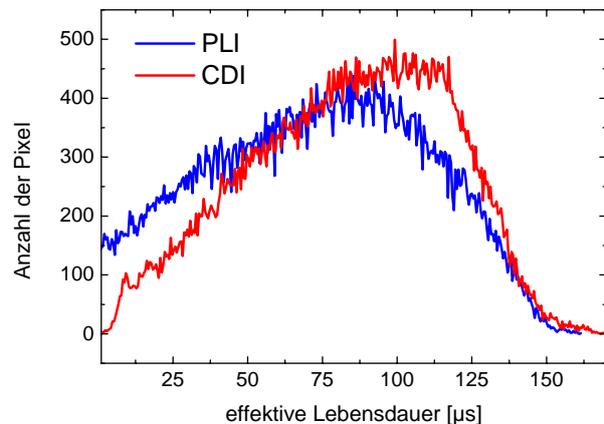


Abbildung 3.20: Histogrammische Auftragung der gemessenen Lebensdauern aus Abbildung 3.19.

Die Übereinstimmung der Lebensdauerverteilung ist sowohl für die laterale Variation als auch für die Häufigkeitsverteilung der Absolutwerte zufriedenstellend.

3.3.3 Kalibrierung mit Hilfe von selektiv gefilterten Messungen

Eine weitere Möglichkeit, Absolutwerte der Lebensdauerverteilung aus Photolumineszenzmessungen zu gewinnen, liegt im Vergleich von Messdaten aus unterschiedlichen Spektralbereichen. Aus der Wellenlängen-Abhängigkeit der Reabsorption können bei mindestens zwei Messungen mit unterschiedlichem Detektionsintervall Rückschlüsse auf das Tiefenprofil der Ladungsträgerdichte gezogen werden. Dieses wiederum ist charakteristisch für die Diffusionslänge und damit für die Rekombinationslebensdauer. Das

hier beschriebene Verfahren kann als Fortführung einer von Würfel et al. [46, 47] vorgestellten Methode für quantitative Diffusionslängenmessungen mit Elektrolumineszenz verstanden werden. Die folgenden Überlegungen resultieren aus einer Zusammenarbeit mit Prof. Peter Würfel und Martin Kasemann und sind Gegenstand der aktuellen Forschung am Fraunhofer ISE. Zur Vollständigkeit der Diskussion über quantitative PL-Messungen werden an dieser Stelle Simulationen gezeigt, die das Potential der neuen Methode aufzeigen. Experimentelle Ergebnisse werden in späteren Arbeiten [48, 49] präsentiert.

Die analytische Beschreibung des Photolumineszenzsignals in Abhängigkeit der Lebensdauer erfordert die Kenntnis der Beziehung zwischen Lebensdauer und Ladungsträger-Tiefenprofil. Mit Hilfe der Kontinuitätsgleichung (2.42) und Randbedingungen, die die Rekombination an den Probenoberflächen berücksichtigen sowie der genauen Kenntnis des Anregungsprofils, lässt sich ein analytischer Ausdruck für die Ladungsträgerdichte-Verteilung formulieren. Die Kontinuitätsgleichung bei konstanter und monochromatischer Beleuchtung wird zu

$$D_n \frac{\partial^2 \Delta n}{\partial z^2} = \frac{\Delta n}{\tau_{bulk}} - \alpha(\lambda) J_{ph} \exp(-\alpha(\lambda) z). \quad (3.22)$$

Die Randbedingungen an der Vorder- und Rückseite der Probe lassen sich mit Hilfe der Oberflächenrekombinations-Geschwindigkeiten S_f und S_b (siehe Gleichung (2.38)) ausdrücken:

$$\frac{\partial \Delta n(0)}{\partial z} = \frac{\Delta n(0)}{D_n} S_f; \quad \frac{\partial \Delta n(d)}{\partial z} = -\frac{\Delta n(d)}{D_n} S_b. \quad (3.23)$$

D_n ist die Diffusionskonstante aus Gleichung (2.49), d die Dicke der Probe. Für den Fall der Elektrolumineszenz an einer Zelle ergeben sich von Gleichung (3.23) verschiedene Randbedingungen, die von der am pn-Übergang angelegten Spannung abhängen:

$$\Delta n(z_0) = \frac{n_i^2}{N_A} \left(\exp\left(\frac{qV}{kT}\right) - 1 \right); \quad \frac{\partial \Delta n(d)}{\partial z} = -\frac{\Delta n(d)}{D_n} S_b. \quad (3.24)$$

Der Generationsterm in Gleichung (3.22) entfällt in diesem Fall. z_0 bezeichnet die Tiefe des pn-Übergangs und kann für den hier besprochenen Fall zu 0 genähert werden.

Anstatt zur Berechnung des PL-Signals den aus der Lösung der Gleichungen (3.22) und (3.23) gewonnenen Ausdruck von $\Delta n(z)$ wie in Kapitel 3.3.2 unter Berücksichtigung der Reabsorption und der Kamera-Quanteneffizienz über den gesamten Wellenlängenbereich zu integrieren, werden zusätzliche Kurzpassfilter berücksichtigt. Analog zu Gleichung (3.18) lässt sich das Photolumineszenz-Signal berechnen:

$$I_{PL} = K_{cal} \int_0^{\infty} \eta_{Kamera}(\hbar\omega) T_{KP-Filter}(\hbar\omega) T_{LP-Filter}(\hbar\omega) B(\hbar\omega) \cdot \int_0^d (\Delta n^2(z) + N_A \Delta n(z)) \exp(-\alpha(\hbar\omega)z) dz d\hbar\omega. \quad (3.25)$$

Der Quotient zweier PL-Messungen mit unterschiedlichen Kurzpassfiltern hängt von der Rekombinationslebensdauer ab. In Anlehnung an [47] wird an dieser Stelle die Diffusionslänge anstatt der Lebensdauer in den folgenden Simulationen berücksichtigt, die sich bei Kenntnis der Diffusionskonstanten ohne Schwierigkeiten in die Lebensdauer nach Gleichung (2.48) umrechnen lässt. Im Gegensatz zur Elektrolumineszenz, bei der die Ladungsträger am pn-Übergang injiziert werden, werden bei der Anregung durch Licht Ladungsträger auch tiefer in der Probe erzeugt. Je tiefer dabei das Generationsprofil reicht, desto weniger sensitiv ist der Quotient von PL-Messungen mit unterschiedlichen Kurzpassfiltern auf die Diffusionslänge. Für verschiedene Wellenlängen des Anregungslichts ergibt sich für den Quotienten der in Abbildung 3.21 gezeigte Verlauf. Angegeben sind die Eindringtiefen, die sich aus der Wellenlänge ergeben. Dargestellt sind 1 μm Eindringtiefe ($\lambda = 520 \text{ nm}$), 12 μm ($\lambda = 804 \text{ nm}$), 55 μm ($\lambda = 940 \text{ nm}$) und 100 μm ($\lambda = 978 \text{ nm}$).

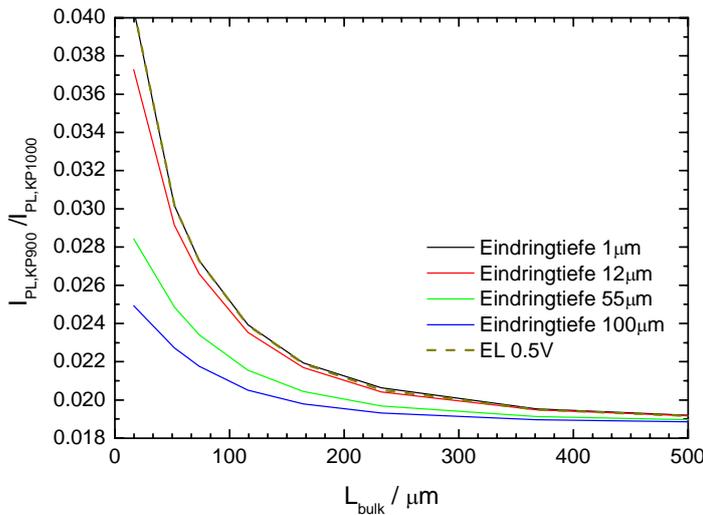


Abbildung 3.21: Simulation des Quotienten von PL-Signalen mit verschiedenen Kurzpassfiltern in Abhängigkeit der Diffusionslänge. Als Kantenwellenlängen wurden 900 nm bzw. 1000 nm gewählt. Der Einfluss von Oberflächenrekombination ist vernachlässigt.

Aus der Grafik ist ersichtlich, dass eine kleine Eindringtiefe von 1 μm vom Fall der ebenfalls simulierten Elektrolumineszenz kaum zu unterscheiden ist. Für größere Wellenlängen sinkt der berechnete Quotient im unteren Bereich der Diffusionslänge. Bei Diffusionslängen von mehr als 500 μm spielt die Eindringtiefe des Anregungslichts keine Rolle mehr, weil das Ladungsträgerprofil nur von Ladungsträgerdiffusion bestimmt ist. Bei perfekt passivierten Oberflächen ergibt sich in diesem Fall eine näherungsweise konstante Ladungsträgerverteilung.

Ein großer Quotient bei kleinen Diffusionslängen und damit eine kurze Anregungswellenlänge ist aus zwei Gründen anzustreben: (i) Der zur Verfügung stehende dynamische

Bereich ist besonders hoch. Das bedeutet eine maximale Sensitivität des Quotienten auf die Diffusionslängen bis hin zu relativ hohen Werten von L_{bulk} . (ii) Das Absolutsignal der Messung mit 900 nm-Kurzpassfilter ist höher als bei längerwelliger Anregung. Die Intensität mit diesem Filter beträgt bei Wahl einer kurzen Anregungswellenlänge und einer Diffusionslänge von etwa $100\ \mu\text{m}$ etwa $1/40$ der Intensität der Messung bei Verwendung des $1000\ \text{nm}$ -Kurzpassfilters. Um bei der Messung mit $900\ \text{nm}$ -Filter das gleiche Signal-zu-Rausch-Verhältnis wie bei der Messung mit $1000\ \text{nm}$ -Filter zu erreichen, ist deshalb eine wesentliche Erhöhung der Messzeit notwendig. Je nach Oberflächenpassivierung kann die Wahl der Wellenlänge den Einfluss der Oberfläche auf das Ladungsträgerprofil verändern.

Neben der Optimierung der Signalstärke und der Sensitivität sind zwei weitere Randbedingungen beschränkend: (i) Zur Unterdrückung der reflektierten Laserstrahlung wird ein zusätzliches Langpassfilter bei einer Wellenlänge, die größer als die Wellenlänge des Lasers ist, benötigt. Je nach Kantensteilheit muss die LP-Kantenwellenlänge deutlich oberhalb der Laserwellenlänge liegen. (ii) Je tiefer die Anregung in der Probe geschieht, desto größer ist die Empfindlichkeit des PL-Quotienten auf die Oberflächenrekombination an der Vorderseite.

Der Einfluss der Vorderseitenrekombination auf den PL-Quotienten ist in Abbildung 3.22 für Rekombinationslebensdauern zwischen $1\ \mu\text{s}$ und $50\ \mu\text{s}$ und Eindringtiefen der Laserbeleuchtung von $1\ \mu\text{m}$ bis $100\ \mu\text{m}$ simuliert.

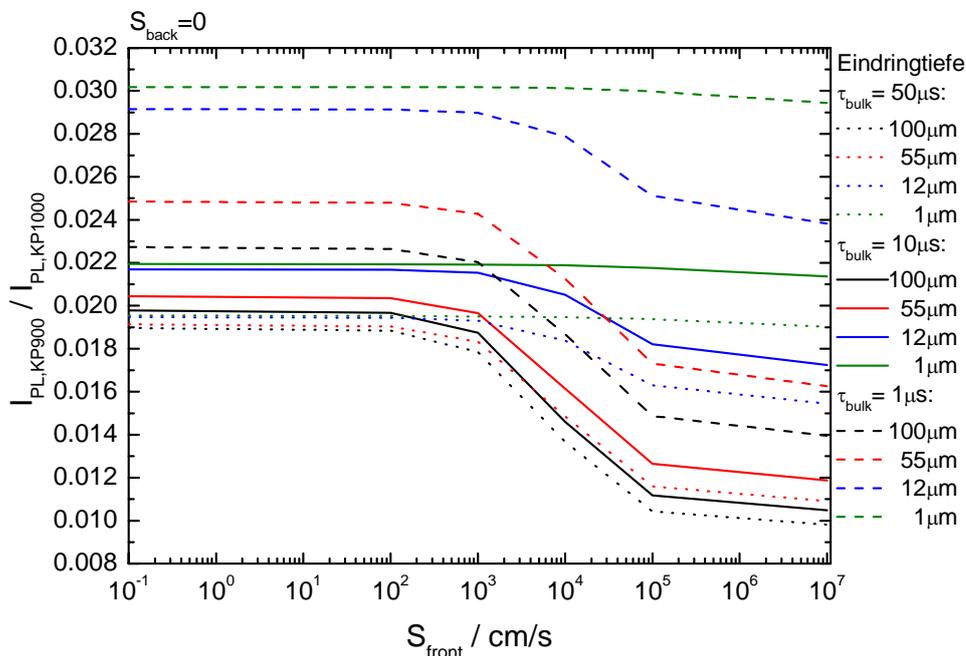


Abbildung 3.22: Simulation der Abhängigkeit des PL-Quotienten von der Vorderseitenpassivierung. Die Rekombination an der Rückseite ist hier zunächst vernachlässigt.

Bei Oberflächenrekombinations-Geschwindigkeiten von $S_{front} < 100\ \text{cm s}^{-1}$ ist kein wesentlicher Einfluss der Oberfläche zu beobachten, wohingegen für Werte von

$S_{front} > 1000 \text{ cm s}^{-1}$ der Quotient je nach Anregungswellenlänge signifikant von der Oberflächenrekombination abhängt. Bei einer Eindringtiefe von $1 \mu\text{m}$ ist diese Abhängigkeit auch für große Werte von S_{front} schwach. Wenn die Rekombination an der Rückseite mitberücksichtigt wird, zeigt sich eine Abhängigkeit von der Oberfläche auch bei kleinen Eindringtiefen des Anregungslichts (siehe Abbildung 3.23).

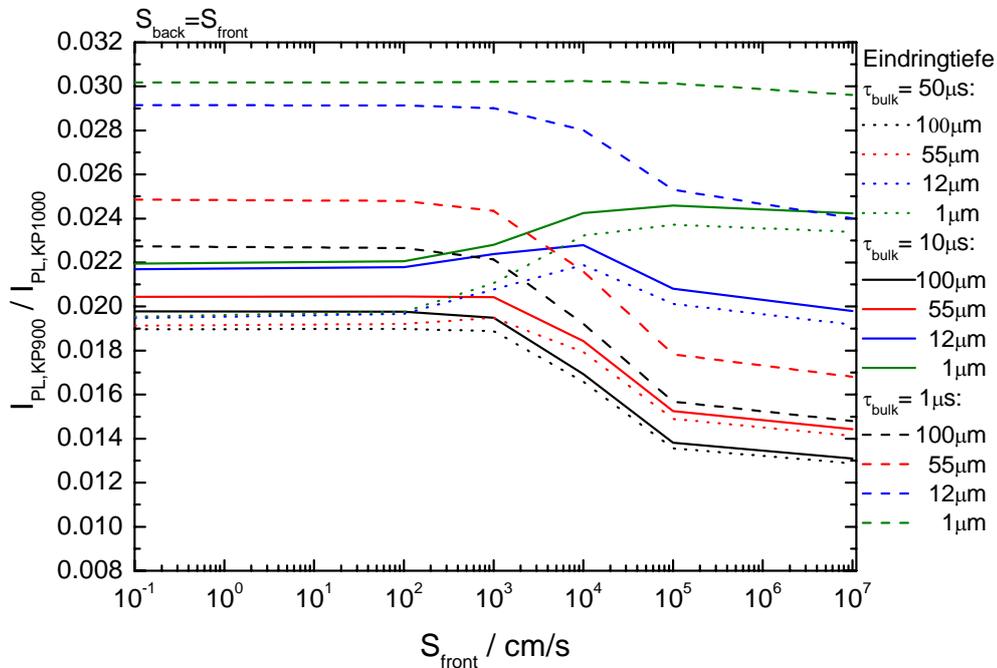


Abbildung 3.23: Simulation der Abhängigkeit des PL-Quotienten von der Vorderseitenpassivierung. Die Rekombination an der Rückseite ist gleich der Vorderseitenrekombination.

Grundsätzlich führt eine fehlende Berücksichtigung der Oberflächenrekombination zu einer *effektiven* Diffusionslänge bzw. *effektiven* Lebensdauer. Diese Aussage gilt prinzipiell auch für die anderen vorgestellten Kalibrierungsmethoden (Kapitel 3.3.1 und 3.3.2). Eine Modifikation dieser Methode zur Bestimmung der Volumendiffusionslänge wird derzeit entwickelt.

3.3.4 Bewertung der vorgestellten Kalibrierverfahren

Im vorangehenden Kapitel wurden drei prinzipiell unterschiedliche Kalibrierverfahren zur quantitativen und orts aufgelösten Messung mit *Photoluminescence Imaging* vorgeschlagen. Die selbstkonsistente Kalibrierung bietet als direkte logische Fortführung der ursprünglich für integrale Messungen entwickelten Methode zunächst einen Ansatz, der ohne die Unterstützung einer anderen Messtechnik auskommt. Es muss jedoch ein gewisser apparativer Aufwand betrieben werden, um eine modulierte Laserbeleuchtung sowie eine präzise einstellbare Phasenverschiebung zwischen Anregungsbeleuchtung und Kamerabildern zu ermöglichen. Die Methode erfordert bestimmte Annahmen zur Reabsorption. Diese kann für sehr kleine Lebensdauern und kurze Anregungswellenlängen vernachlässigt oder über eine entsprechend angepasste Berechnung (Gleichung

(3.14)) berücksichtigt werden. Für näherungsweise homogene Ladungsträgerprofile wird der Einfluss der Reabsorption implizit mitberücksichtigt (Gleichung (3.12)). Für mittlere Lebensdauerwerte oder hohe Volumen-Lebensdauern mit schlecht passivierten Oberflächen erlaubt die Methode nur eine näherungsweise Bestimmung der Lebensdauer, wenn keine zusätzlichen Korrekturen nach Gleichung (3.15) zur Verfügung stehen. Die Übertragung auf den orts aufgelösten Fall erfordert zudem die Beschränkung auf wenige Messpunkte pro Messintervall, weil die Aufnahmezeiten der Kamera nicht klein gegenüber der benötigten Modulationsperiode sind. Die Beschränkung im vorgestellten Fall auf vier Messpunkte ist die minimale Anzahl, um die im Formalismus benötigten zeitlichen Ableitungen der Ladungsträgerdichte näherungsweise zu bestimmen. Die für den praktischen Fall bedeutendste Einschränkung stellt jedoch das Signal-zu-Rausch-Verhältnis dar, welches die orts aufgelöste Bestimmung für A_i mit der zur Verfügung stehenden Kamera nicht erlaubt. Ein stattdessen bestimmter integraler Wert unterschätzt hohe und überschätzt niedrige Rekombinationslebensdauern. Es ist zu erwarten, dass die Qualität der erreichbaren Ergebnisse steigt, wenn eine empfindlichere Kamera zur PL-Messung zur Verfügung steht.

Ein einmaliger Vergleich des unkalibrierten PL-Kamerabildes mit der bekannten Lebensdauerverteilung einer Kalibrierprobe bietet eine weitere Kalibriermöglichkeit. Ein Vergleich mit anderen Messverfahren zur Bestimmung quantitativer Lebensdauern aus PL-Bildern wurde schon in [50, 51] mit integralen QSSPC- und integralen PL-Messungen durchgeführt. In diesem Fall wurde aber von einer linearen Abhängigkeit des PL-Signals von der Lebensdauer ausgegangen. Dass diese Annahme eine nur grobe Näherung ist, lässt sich in Abbildung 3.15 abschätzen. Es wurde in diesem Kapitel jedoch gezeigt, dass die Nichtlinearität sowie der Einfluss von Dicke und Dotierung auf das Messsignal prinzipiell mathematisch berücksichtigt werden kann. In diesem Fall ist für eine bestimmte Einstellung der Kameraparameter sowie der speziellen Geometrie des Aufbaus eine einmalige Kalibrierung mit einer bekannten Kalibrierprobe ausreichend. Im Gegensatz zur selbstkonsistenten Kalibrierung, die Einflüsse der Oberflächenrauheit auf das Messsignal implizit berücksichtigt, muss bei dieser Kalibrierung jedoch darauf geachtet werden, dass die Oberflächenrauheit der zu untersuchenden Proben der der Kalibrierprobe entspricht. Heterogen raue Proben können ohne Fehler nicht ohne weitere Korrekturen (siehe Kapitel 6) vermessen werden.

Die Bestimmung der Lebensdauer bzw. Diffusionslänge aus der Analyse zweier PL-Bilder mit unterschiedlichen Kurzpassfiltern hängt nicht von der optischen Qualität der Oberfläche ab, wenn angenommen werden kann, dass der Oberflächeneinfluss auf das Messsignal im betrachteten Wellenlängenbereich von 800 nm bis 1000 nm näherungsweise wellenlängenunabhängig ist. Für kalibrierte Messungen nach dieser Methode müssen stets zwei Messungen aufgenommen werden, die auf Grund der zusätzlichen Filterung längere Messzeiten erfordern. Zur Kalibrierung von Messwerten, die mit einer InGaAs-Kamera aufgenommen wurden, ist diese Methode auf Grund der niedrigen spektralen Empfindlichkeit unterhalb von 950 nm schlecht geeignet. Die Fortführung

dieser Untersuchung in späteren Arbeiten [48, 49] wird Aufschluss über erreichbare quantitative Ergebnisse liefern.

Für die meisten Messanforderungen ist nach dieser Bewertung die Kalibrierung mit einer Probe bekannter Lebensdauer, Dotierung und Dicke inklusive einer analytischen Berücksichtigung von Einflüssen der Reabsorption und den Probenparametern Dicke und Dotierung zunächst am besten geeignet. Bei heterogen rauen Proben ist diese Methode jedoch nur bedingt anwendbar. In diesem Fall können die anderen beiden diskutierten Methoden Alternativen darstellen.

4 Messung der Emission an freien Ladungsträgern - Carrier Density Imaging

Das *Carrier Density Imaging* (CDI) / *Infrared Lifetime Mapping* (ILM) Verfahren basiert auf der Detektion der Infrarotabsorption und -emission an freien Ladungsträgern mit Hilfe einer Kamera. In verschiedenen Arbeiten wurde das Prinzip zu einer schnellen Messtechnik zur orts aufgelösten Bestimmung der Ladungsträger-Lebensdauer weiterentwickelt [52-59]. Auf Grund von Parallelentwicklungen entstanden zwei Bezeichnungen für das Verfahren, das nach den jeweils neuesten Weiterentwicklungen in wesentlichen Komponenten identisch ist. Im Folgenden wird aus Gründen der Lesbarkeit das Verfahren CDI genannt. Gemeint ist jedoch grundsätzlich auch ILM.

In [60] finden sich Betrachtungen zur experimentellen Durchführung des CDI-Verfahrens. Dort finden sich Untersuchungen zur Messunsicherheit und zur experimentellen Realisierung der Lock-In-Rauschunterdrückung. In [61, 62] findet sich eine ausführliche Bestimmung der „Noise Equivalent Temperature Difference“ NETD sowie der „Noise Equivalent Lifetime“ NEL, die als Maße zur Bestimmung des Signal-zu-Rausch-Verhältnisses dienen. Diese Ergebnisse sollen hier nicht aufgegriffen werden. Stattdessen folgt eine grundsätzlichere Betrachtungsweise der in den einzelnen Modi zu erwartenden Messsignale. Neben der Messung der Rekombinationslebensdauer wird das Verfahren in dieser Arbeit vor allem für die orts aufgelöste Detektion von Haftstellen herangezogen (siehe Kapitel 5).

4.1 CDI im Absorptions- und Emissionsverfahren

4.1.1 Experimenteller Aufbau

Es existieren für den Aufbau des Verfahrens zwei prinzipiell unterschiedliche Konzepte (siehe Abbildung 4.1). Die Probe kann entweder vor einem nach dem Planck'schen Strahlungsgesetz emittierenden Hintergrund frei gehalten werden (Aufbau A) oder steht in direktem Kontakt mit einem verspiegelten Probenstisch, dessen Temperatur ebenfalls kontrolliert werden kann (Aufbau B). In Aufbau A ist die Probertemperatur typischerweise gleich der Raumtemperatur. Es ist jedoch auch möglich, mit Hilfe einer umschließenden Kammer mit entsprechenden Sichtfenstern die Probertemperatur zu variieren [63]. In Aufbau B gleicht die Probertemperatur näherungsweise der des Messblocks.

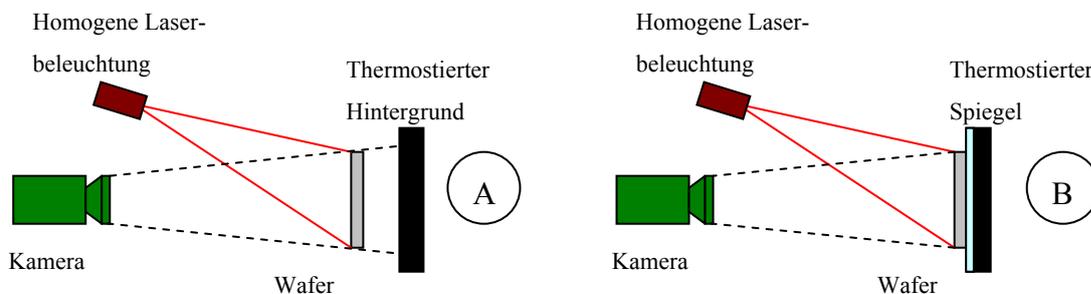


Abbildung 4.1: Verschiedene Konzepte zur Realisierung des CDI-Verfahrens. In Aufbau A ist die Probe vor einem thermostierten Hintergrund frei gehalten, in Aufbau B liegt die Probe auf einem Spiegel auf, dessen Temperatur ebenfalls eingestellt werden kann.

Die Kamera misst in beiden Fällen die Emission von thermischer Strahlung der Probe, die reflektierte Strahlung der Umgebung und die transmittierte Strahlung des Hintergrunds durch die Probe. Der Messbereich der Kamera liegt bei $3.5\ \mu\text{m}$ bis $5\ \mu\text{m}$. Typischerweise besteht ein Netto-Messsignal aus der Differenz zwischen dem Kamerasignal bei beleuchteter Probe und im unbeleuchteten Zustand. Dadurch wird der Beitrag der Überschussladungsträger auf das Messsignal isoliert: Während Anteile, die sich durch Beleuchtung nicht ändern, durch Subtraktion verschwinden (hierzu gehört z.B. die Basisdotierung), tragen beleuchtungsinduzierte Änderungen zum Signal bei. Das Differenzsignal ist deshalb von der Emission und Absorption infraroter Strahlung durch Überschussladungsträger geprägt. Da diese beiden Effekte naturgemäß einen gegensätzlichen Einfluss auf das Messergebnis haben, ist es nötig, die experimentellen Bedingungen so zu wählen, dass einer der Effekte groß gegenüber dem anderen ist. Die experimentell beeinflussbaren Einstellgrößen sind dabei die Temperaturen der Probe und des Hintergrunds. Je größer der Unterschied dieser Temperaturen, desto höher ist das zu erwartende Messsignal. Experimentelle Grenzen sind durch die Empfindlichkeit der Kamera und durch Kondensation bzw. Vereisung der Probe oder des Hintergrunds ge-

geben. Zusätzlich ist die Temperaturabhängigkeit der Rekombinationslebensdauer bei der Wahl der Proben temperatur zu berücksichtigen (siehe Abbildung 4.4).

4.1.2 CDI-Messsignal

Ein Teil der folgenden Ergebnisse findet sich in [60], der hier kurz zusammen mit weiterführenden Ergebnissen wiedergegeben wird. Das zu erwartende Messsignal setzt sich aus einem Emissions- und einem Absorptionsanteil zusammen. Sekundäre Effekte, d.h. Reemission absorbiertes Strahlung und Reabsorption emittierter Strahlung bleiben hier unberücksichtigt. Das Messsignal lässt sich näherungsweise mit Hilfe der Planck'schen Strahlungstheorie beschreiben. Das Kamerasignal ist in guter Näherung proportional zur Photonenflussdichte. Damit ergibt sich unter Berücksichtigung der Beziehung zwischen Energie und Photonenfluss $E = J_{ph} \cdot hc/\lambda$ für das Kamerasignal in Abhängigkeit der Proben temperatur T_w und der Hintergrundtemperatur T_b

$$S_{CDI}(T_w, T_b) \propto \int_{\lambda_{\min}}^{\lambda_{\max}} \frac{\varepsilon_{fc}(\lambda, \Delta n)}{\lambda^4 (e^{hc/k\lambda T_w} - 1)} d\lambda - \int_{\lambda_{\min}}^{\lambda_{\max}} \frac{\alpha_{fc}(\lambda, \Delta n)}{\lambda^4 (e^{hc/k\lambda T_b} - 1)} d\lambda. \quad (4.26)$$

ε_{fc} und α_{fc} beschreiben den Emissions- und Absorptionskoeffizienten der freien Ladungsträger. Diese Größen sind nach dem Kirchhoff'schen Gesetz gleich und können durch Gleichung (2.70) ausgedrückt werden. Auf Grund des näherungsweise linearen Zusammenhangs zwischen Absorptionskoeffizient und Ladungsträgerdichte ist das Signal ein direktes Maß für die Ladungsträgerdichte. Unter Berücksichtigung der quadratischen Abhängigkeit von der Wellenlänge ergibt sich schließlich für das CDI-Signal

$$S_{CDI}(T_w, T_b) \propto \Delta n \cdot \int_{\lambda_{\min}}^{\lambda_{\max}} \left(\frac{1}{\lambda^2 (e^{hc/k\lambda T_w} - 1)} - \frac{1}{\lambda^2 (e^{hc/k\lambda T_b} - 1)} \right) d\lambda. \quad (4.27)$$

In Abbildung 4.2 ist die relative Höhe des CDI-Signals für den Empfindlichkeitsbereich der verwendeten Kamera simuliert. Es zeigt sich, dass zur effektiven Signalsteigerung im Emissions-Modus die Proben temperatur gesteigert werden muss. Die Senkung der Hintergrundtemperatur steigert das Messsignal zwar ebenfalls, durch ein asymptotisches Verhalten sind der Signalsteigerung aber Grenzen gesetzt. Um ein hohes Signal im Fall der Absorptions-CDI zu erreichen, muss die Hintergrundtemperatur erhöht werden. Eine Senkung der Proben temperatur hat einen ebenfalls positiven Effekt auf die Signalthöhe, der sich aber wiederum asymptotisch auf das Signal auswirkt.

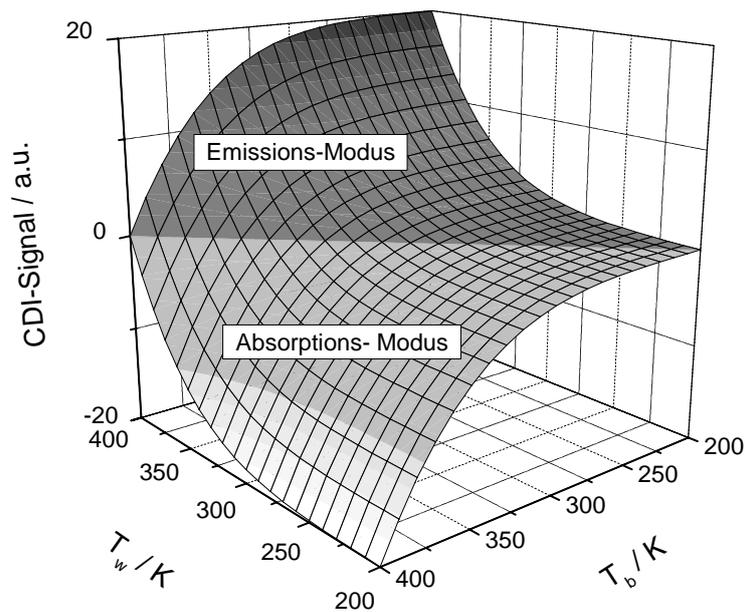


Abbildung 4.2: Relatives CDI-Signal nach Gleichung (4.27) in Abhängigkeit der Proben­temperatur T_w und Hintergrundtemperatur T_b . Für $T_w = T_b$ ist das CDI-Signal null.

Eine experimentelle Bestätigung der Gleichung (4.27) findet sich in Abbildung 4.3. Experimentell wurde das CDI-Signal in Abhängigkeit der Hintergrundtemperatur (links) und der Proben­temperatur (rechts) bestimmt. In diesem Beispiel wurde das Differenzsignal zwischen beleuchteter und un­beleuchteter Probe aufgetragen, um nur die Überschussladungsträgerdichte zu bestimmen.

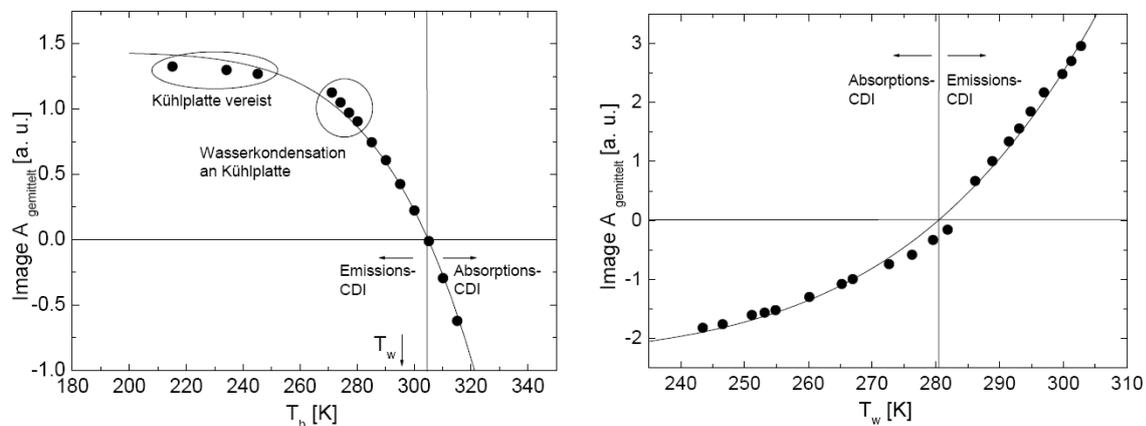
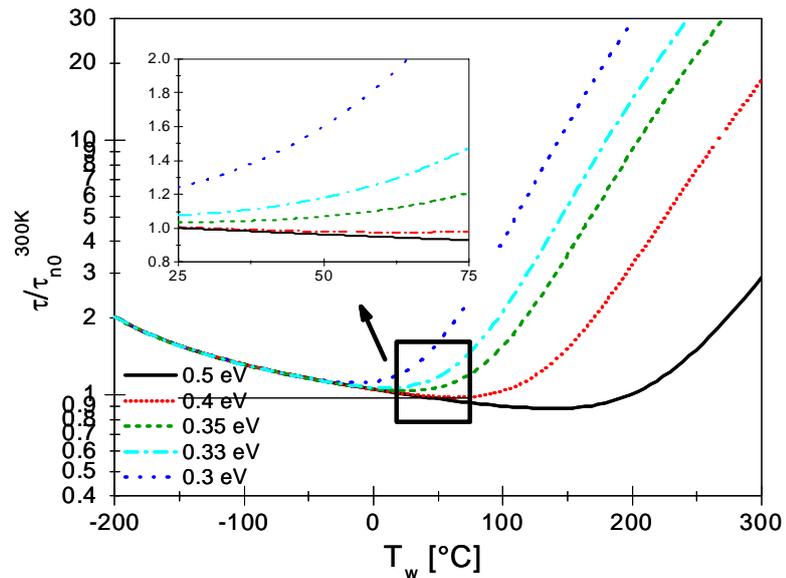


Abbildung 4.3: Experimentelle und theoretische Abhängigkeit des CDI-Differenzsignals von der Hintergrundtemperatur (links) und der Proben­temperatur (rechts). Im ersten Fall betrug die Proben­temperatur 296 K, im anderen betrug die Hintergrundtemperatur 280 K. Aus [60].

Im Emissionsfall limitiert die Temperaturabhängigkeit der Rekombinations­lebensdauer die praktische Wahl der Proben­temperatur (Gleichung (2.35)). Eine Abschätzung hierzu ist in Abbildung 4.4 gezeigt, in der der Temperatureinfluss auf die Lebensdauer für verschiedene Energieabstände des dominierenden Rekombinations­niveaus von der Band­kante simuliert wird.

Abbildung 4.4: Simulierte Temperaturabhängigkeit der Shockley-Read-Hall-Lebensdauer für verschiedene Abstände des dominierenden rekombinationsaktiven Defektniveaus von der Bandkante. τ_{n0}^{300K} ist die Elektroneneinfangzeit bei einer Temperatur von 300 K.



Typischerweise haben die in Solar-Silizium dominierenden Rekombinationsniveaus einen großen Abstand von den Bandkanten, so dass bei einer gewählten Proben temperatur von 55 °C die Abweichung vom Wert bei 25 °C kleiner als 10 % ist.

Die Hintergrundtemperatur im Absorptions-Modus kann ebenfalls nur in Grenzen erhöht werden. Durch das prinzipbedingt hohe Hintergrundsignal der Kamera tritt bei zu großen Hintergrundtemperaturen eine Sättigung des Kamerasignals ein. Außerdem erschwert eine hohe Hintergrundtemperatur die Herstellung stationärer Temperaturbedingungen im Aufbau.

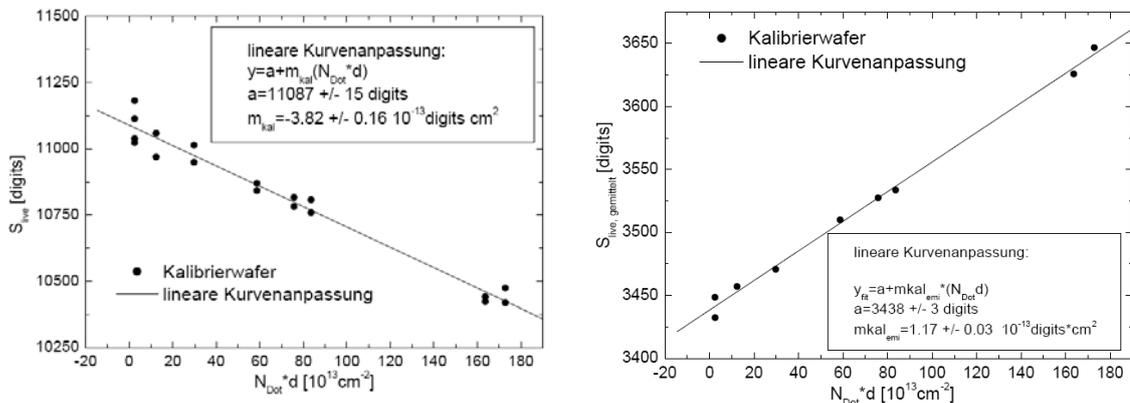


Abbildung 4.5: Kalibriergeraden zur Berechnung quantitativer Ladungsträgerdichten aus dem CDI-Signal. Aufgetragen ist das CDI-Signal in Abhängigkeit der Ladungsträgerflächendichte (integrierte Dotierkonzentration). Im Absorptionsmodus (links) ergibt sich eine negative Steigung, im Emissionsmodus (rechts) eine positive.

Um aus dem Kamerasignal schließlich die Ladungsträgerdichte errechnen zu können, wird das Signal unterschiedlich dotierter Proben mit bekannter Dotierkonzentration ohne Beleuchtung bestimmt. In Abbildung 4.5 sind experimentell bestimmte Kalibriergeraden für den Absorptionsmodus (links) und den Emissionsmodus (rechts) dargestellt.

Aus der Abhängigkeit des Signals von der Ladungsträgerdichte (in diesem Beispiel Löcherdichte) kann mit Hilfe eines Korrekturfaktors, der die unterschiedlichen Absorptionskoeffizienten für Elektronen und Löcher berücksichtigt, die Überschussladungsträgerdichte berechnet werden. Aus dieser kann schließlich bei bekannter Beleuchtungsintensität nach Gleichung (2.51) die Rekombinationslebensdauer bestimmt werden.

4.2 Emissions-CDI mit Spiegel

Im Standardaufbau des Emissions-CDI-Verfahrens liegt die Probe auf einem Spiegel mit einer Reflektivität von r_{Spiegel} und einer Emissivität von e_{Spiegel} auf (Aufbau B in Abbildung 4.1). Es soll angenommen werden, dass Proben- und Spiegeloberfläche ideal plan sind. Außerdem angenommen ist ein großer Abstand der Kamera von der Probe, so dass nur zur Oberfläche senkrechte Strahlen betrachtet werden. Quellen von Infrarotstrahlung, die von der Kamera detektiert werden können sind: (i) die Umgebungsstrahlung, (ii) die IR-Eigenemission des Spiegels, (iii) die IR-Emission der freien Ladungsträger in Richtung der Kamera und (iv) in entgegengesetzte Richtung. In Abbildung 4.6 sind die genannten Quellen und entsprechende Reflexionen schematisch dargestellt. Zur besseren Übersicht sind einige Strahlen in einem Winkel zur Oberflächennormalen eingezeichnet, stellen aber senkrecht verlaufende Strahlen dar.

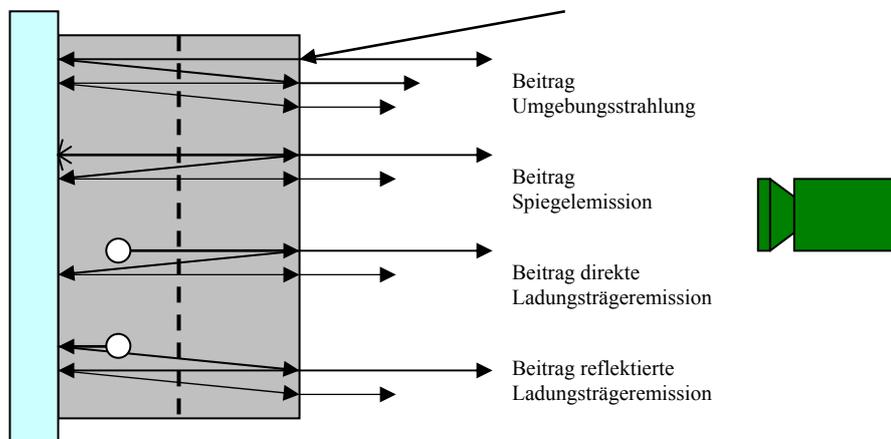


Abbildung 4.6: Schematische Strahlengänge für die verschiedenen Beiträge zum Kamerasignal. Es werden nur senkrechte Strahlen betrachtet. Aus Gründen der Übersichtlichkeit sind jedoch einige Strahlen unter einem Winkel eingetragen. Das Kamerasignal besteht aus Beiträgen der Umgebungsstrahlung, des Spiegels und der freien Ladungsträgern. Mehrfachreflexionen sind berücksichtigt.

Innerhalb der Probe wird die IR-Strahlung zum Teil reabsorbiert. Reemissionseffekte werden nicht betrachtet, da angenommen wird, dass angeregte Ladungsträger instantan thermalisieren und die Emission durch freie Ladungsträger nur durch die Proben temperatur bestimmt wird. Der Beitrag von der Umgebungsstrahlung zum Kamerasignal lässt sich ausdrücken durch:

$$\begin{aligned}
J_{ph,Umgebung} &= P(T_{Umgebung}) \left(r_{Wafer} + (1-r_{Wafer})^2 t_{Wafer}^2 r_{Spiegel} \sum_{k=0}^{\infty} (t_{Wafer}^2 r_{Wafer} r_{Spiegel})^k \right) \\
&= \frac{P(T_{Umgebung}) (r_{Wafer} + (1-r_{Wafer})^2 t_{Wafer}^2 r_{Spiegel})}{1 - t_{Wafer}^2 r_{Wafer} r_{Spiegel}}.
\end{aligned} \tag{4.28}$$

r_{Wafer} ist die Reflektivität an der Probenoberfläche, t_{Wafer} ist die Transmissivität der Probe. P ist der senkrecht auf die Probenoberfläche einfallende Teil der Photonenflussdichte, der durch die Umgebungsstrahlung gegeben ist. Letztere ist durch das Planck'sche Strahlungsgesetz bei Umgebungstemperatur $T_{Umgebung}$ gegeben. Zur Berechnung von Gleichung (4.28) wurde die Konvergenz der geometrischen Reihe ausgenutzt. Ihr Grenzwert ist für $|x| < 1$:

$$\sum_{k=0}^{\infty} x^k = \frac{1}{1-x}. \tag{4.29}$$

Entsprechend gilt für den Beitrag der Spiegelemission zum Kamerasignal

$$\begin{aligned}
J_{ph,Spiegel} &= P(T_{Spiegel}) t_{Wafer} e_{Spiegel} (1-r_{Wafer}) \sum_{k=0}^{\infty} (t_{Wafer}^2 r_{Wafer} r_{Spiegel})^k \\
&= \frac{P(T_{Spiegel}) t_{Wafer} e_{Spiegel} (1-r_{Wafer})}{1 - t_{Wafer}^2 r_{Wafer} r_{Spiegel}}.
\end{aligned} \tag{4.30}$$

Der Beitrag zur Ladungsträgeremission in Kamerarichtung ist bei gleichförmiger Ladungsträgerverteilung

$$\begin{aligned}
J_{ph,Träger,vor} &= P(T_{Wafer}) \left[\int_0^d 1 - e^{-\alpha_{Träger} w} dw \right] e_{Träger} (1-r_{Wafer}) \sum_{k=0}^{\infty} (t_{Wafer}^2 r_{Wafer} r_{Spiegel})^k \\
&= \frac{P(T_{Wafer}) e_{Träger} (1-r_{Wafer}) \left(d + \frac{e^{-\alpha_{Träger} d}}{\alpha_{Träger}} \right)}{t_{Wafer}^2 r_{Wafer} r_{Spiegel}}.
\end{aligned} \tag{4.31}$$

$e_{Träger}$ ist die Emissivität der Ladungsträger. w ist der Abstand der Ladungsträger von der Oberfläche der Probe mit der Dicke d . Für den Beitrag der Ladungsträgeremission entgegen der Kamerarichtung gilt:

$$\begin{aligned}
J_{ph,Träger,rück} &= P(T_{Wafer}) \left[\int_0^d 1 - e^{-\alpha_{Träger}(d-w)} dw \right] e_{Träger} (1 - r_{Wafer}) r_{Spiegel} \sum_{k=0}^{\infty} (t_{Wafer}^2 r_{Wafer} r_{Spiegel})^k \\
&= \frac{P(T_{Wafer}) e_{Träger} (1 - r_{Wafer}) r_{Spiegel} \left(d - \frac{e^{-\alpha_{Träger}d}}{\alpha_{Träger}} \right)}{t_{Wafer}^2 r_{Wafer} r_{Spiegel}}.
\end{aligned} \tag{4.32}$$

Die Annahme einer gleichförmigen Ladungsträgerverteilung ist unter Niederinjektion gerechtfertigt, da diese näherungsweise von der Basisdotierung bestimmt wird. Es bereitet in diesem Modell keine Schwierigkeiten, einen zusätzlichen Einfluss eines Emitters zu berücksichtigen. In diesem Fall müssen zwei weitere, den Gleichungen (4.31) und (4.32) ähnliche Gleichungen zur Berücksichtigung der Emission der zusätzlichen Ladungsträger berücksichtigt werden. Außerdem wird die Transmissivität des Emitters analog zur Transmissivität der Probe eingeführt. Je nachdem, ob sich der Emitter an der Vorder- oder Rückseite der Probe befindet, muss dieser Faktor entsprechend berücksichtigt werden.

Das Kamerasignal ergibt sich bei einem Wafer mit homogener Ladungsträgerverteilung zu

$$J_{ph,Kamera} = J_{ph,Umgebung} + J_{ph,Spiegel} + J_{ph,Träger,vor} + J_{ph,Träger,rück}. \tag{4.33}$$

Die Transmissivität und die Emissivität hängen von der Ladungsträgerdichte ab. Die Differenz aus dem Kamerasignal unter Beleuchtung, d.h. mit erhöhter Ladungsträgerdichte, und im Dunkeln ergibt schließlich das Signal einer CDI-Messung. In Abbildung 4.7 ist das CDI-Signal in Abhängigkeit der Emissivität des Spiegels und der Proben-temperatur berechnet.

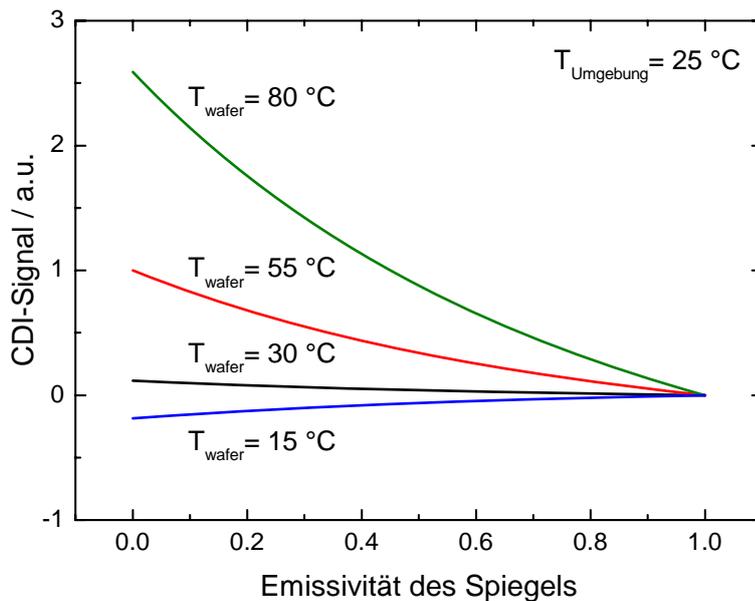


Abbildung 4.7: CDI-Signal für Aufbau B (siehe Abbildung 4.1), bei der die Probe auf einem thermostierten Spiegel liegt, in Abhängigkeit der Emissivität des Spiegels. Je nach Proben-temperatur ergibt sich ein positives oder negatives Signal. Je kleiner die Spiegel-Emissivität, d.h. je höher die Reflektivität, desto höher ist der Betrag des CDI-Signals.

Ein aluminiumbeschichteter Spiegel weist eine Emissivität von etwa 0.04 [64] auf. In Abbildung 4.8 ist eine typische, kalibrierte CDI-Messung an multikristallinem Silizium abgebildet. Die Proben temperatur betrug 55 °C.

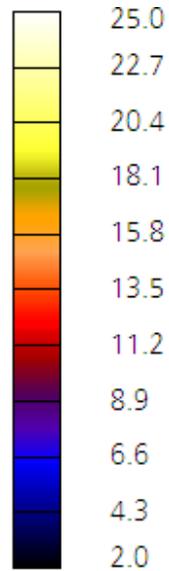
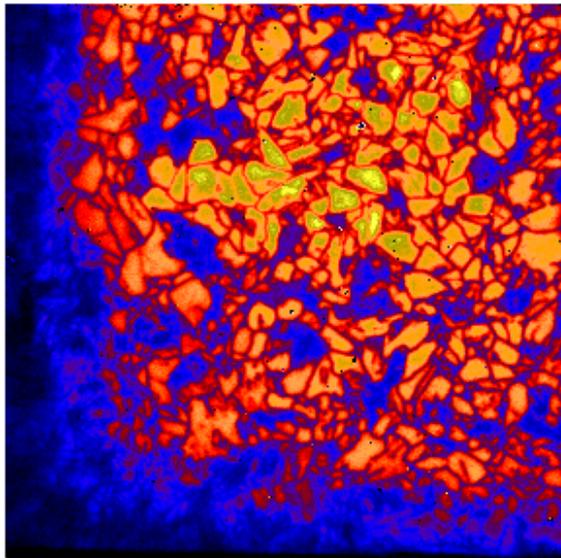


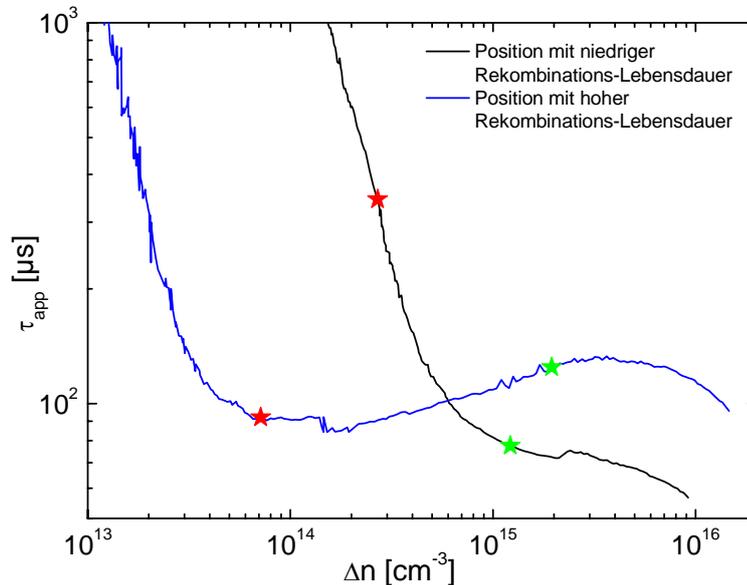
Abbildung 4.8: Carrier Density Imaging-Messung der Rekombinationslebensdauer an einem multikristallinen und oberflächenpassivierten Siliziumwafer. Die Probe stammt aus einer Ecksäule. Im rechten und unteren Bereich ist eine signifikante Reduktion der Materialqualität festzustellen. Werte in μs .

5 Haftstellen

Die Rekombinationslebensdauer in Silizium für Solarzellen ist typischerweise von Störstellen-Rekombination dominiert. Nach der Shockley-Read-Hall-Theorie ist ein konstanter Wert für die Lebensdauer bei niedriger Injektion nach Gleichung (2.35) zu erwarten. In der Praxis findet man jedoch häufig signifikante Abweichungen von dieser Theorie. In QSSPC-Lebensdauer-messungen ist bei einer Vielzahl unterschiedlicher Siliziummaterialien bei abnehmender Injektion ein deutliches Ansteigen der gemessenen Lebensdauer zu verzeichnen. Dieser in der Literatur häufig als „anomal“ bezeichnete Anstieg der Messwerte zu geringeren Injektionsdichten wird meist als Artefakt behandelt und bestimmt die untere Injektions-Grenze belastbarer Werte für die gemessene Rekombinationslebensdauer. Üblicherweise werden nur Messwerte jenseits dieser Grenze betrachtet. Dieses Vorgehen ist aus zwei Gründen unbefriedigend: Erstens ist für viele Bereiche der Charakterisierung und Modellierung der eventuell nicht zugängliche Niedereinjektionswert der Rekombinationslebensdauer von besonderem Interesse, zweitens muss zur Beurteilung der Belastbarkeit der Messwerte die Injektionsabhängigkeit der gemessenen Lebensdauer betrachtet werden. Typischerweise können aus Zeitgründen orts aufgelöste Lebensdauer-messungen bei nur einer konstanten Generationsrate Messwerte aufnehmen. Es steht dann für jeden Bildpunkt nur ein Messwert bei einer bestimmten Injektionsdichte zur Verfügung. Zusätzlich hängt die Injektionsdichte selbst von der Lebensdauer ab, so dass erstere lateral variiert. Abbildung 5.1 zeigt ein Beispiel zweier QSSPC-Lebensdauer-messungen, deren anomale Lebensdauer-erhöhung verschieden ist. Ist wie bei dieser Messung der Verlauf des gesamten Injektionsbereichs bekannt, kann der Einfluss des Artefakts zumindest erkannt werden. Andere Methoden, die im Standardfall keine Injektionsabhängigkeiten detektieren können, wie z.B. das CDI/ILM Verfahren, können zu Fehlinterpretationen der Materialqualität führen. In den Messdaten aus Abbildung 5.1 sind die Messwerte für beide Beispielkurven bei zwei verschiedenen Werten für die Generationsrate markiert (rote und grüne

Sternchen). Eine Messung bei der niedrigeren Generationsrate (rote Sternchen) führt zum Schluss, das Material mit den schwarzen Messwerten übertreffe das mit den blauen Messwerten hinsichtlich der Lebensdauer. Die Messung bei höherer Generationsrate (grüne Sternchen) führt zum umgekehrten Schluss.

Abbildung 5.1: Injektionsabhängige Messungen der scheinbaren Lebensdauer an zwei verschiedenen Proben mit dem QSSPC-Verfahren. Zu kleinen Injektionsdichten steigt die gemessene Lebensdauer stark an. Die mit roten und grünen Sternchen markierten Punkte sind Paare mit gleicher Generationsrate.



Dieses Kapitel widmet sich diesem bekannten Problem. Nach der Einführung eines von Hornbeck und Haynes [65] eingeführten Modells zur Erklärung des Effekts wird der Einfluss auf verschiedene Lebensdauermethoden beurteilt. Es werden Lösungsvorschläge zur mathematischen Berücksichtigung und zur experimentellen Unterdrückung des störenden Effekts bereitgestellt, die den Niederinjektionsbereich der Rekombinationslebensdauer zugänglich machen.

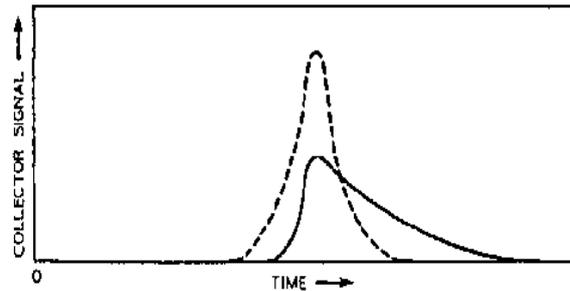
In einem weiteren Teil des Kapitels wird die genaue Detektion des Effekts statt dessen Unterdrückung behandelt. Es wird gezeigt, wie der Anstieg der gemessenen, „scheinbaren“ Lebensdauer mit entsprechenden Parametern charakterisiert werden kann und wie diese mit Solarzellenergebnissen zusammenhängen. Diese prinzipiell einfache und sensitive Detektion bietet einen Zugang zur Materialcharakterisierung schon am Ausgangsmaterial, der der Rekombinationslebensdauer-Messung meist verschlossen ist. Schließlich werden die physikalischen Ursachen des Effekts untersucht und Zusammenhänge zu Kristallstruktur und –verunreinigungen hergestellt. Dieser Teil des Kapitels bereitet das Thema des Kapitels 6 vor, das den in diesem Kapitel untersuchten Effekt in Zusammenhang mit spektroskopischen Ergebnissen stellt.

5.1 Haftstellenmodell nach Hornbeck und Haynes

Das Konzept temporärer Haftstellen für freie Ladungsträger wurde in den 1950er Jahren erstmals zur Erklärung von Driftexperimenten nach Haynes und Shockley [66] verwen-

det [65, 67, 68]. In einem dieser Experimente wurde einem Stab aus Silizium ein elektrisches Feld eingepreßt. Auf der einen Seite wurden mit einem kurzen Puls Ladungsträger injiziert, die nach der Drift durch den Halbleiter an der anderen Seite detektiert wurde. Es zeigte sich im Gegensatz zum selben Experiment mit Germanium, dass die Ladungsträger mit unterschiedlicher Verzögerung detektiert wurden. Wurde der Siliziumstab zusätzlich beleuchtet, wurde keine Verzögerung mehr detektiert.

Abbildung 5.2: Schematische Abbildung des Ladungsträgersignals nach einer Drift durch einen Siliziumstab. Unter Beleuchtung (gestrichelte Kurve) zeigt sich die erwartete Signalform, wohingegen ohne Beleuchtung (durchgezogene Kurve) die Ladungsträger mit unterschiedlicher Verzögerung eintreffen. Aus [65].



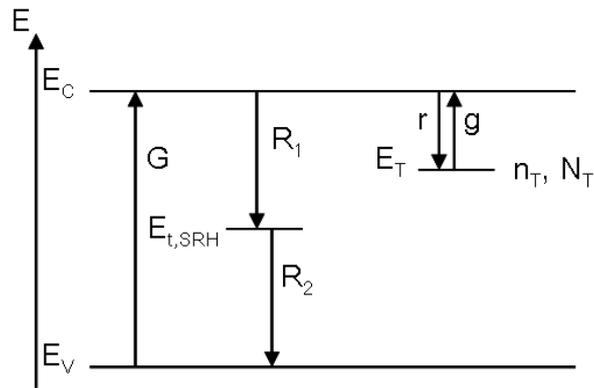
Diese Beobachtung lässt sich durch ein an die Theorie der Störstellen-Rekombination angelehntes Modell [65, 68, 69] erklären. Während bei der Rekombination über eine Störstelle sowohl ein freies Elektron als auch ein freies Loch eingefangen werden muss, wird im Hornbeck-Haynes Modell von einer verschwindenden Übergangswahrscheinlichkeit der Majoritäten ausgegangen. Untersucht wurde sowohl p-dotiertes [65] als auch n-dotiertes [70] Material. Im Folgenden wird der Fall für p-dotiertes Silizium erklärt.

Es werden Störstellen postuliert, die eine endliche Übergangswahrscheinlichkeit für Elektronen des Leitungsbandes und eine verschwindende Übergangswahrscheinlichkeit für Löcher des Valenzbandes haben (siehe Abbildung 5.3). Unter stationären Bedingungen, z.B. im Fall einer konstanten Beleuchtung, ist ein Teil der Elektronen in diesen Störstellen lokalisiert. Die Dichte der Elektronen in den Haftstellen lässt sich aus der Kontinuitätsgleichung berechnen. Sie beschreibt die zeitliche Änderung der Überschuss-Elektronendichte:

$$\frac{d\Delta n}{dt} = G(t) - \frac{\Delta n}{\tau_{rec}} + \frac{n_T}{\tau_g} - \frac{\Delta n \left(1 - \frac{n_T}{N_T}\right)}{\tau_t} \quad (5.1)$$

τ_t ist dabei die mittlere Zeit, die ein Elektron unter Annahme von ungefüllten Haftstellenniveaus im Leitungsband vor dem Übergang in ein Haftstellenniveau verbringt. Entsprechend beschreibt τ_g die mittlere Zeit, die ein Elektron im Haftstellenniveau vor der Reemission in das Leitungsband verbringt.

Abbildung 5.3: Elektronenübergänge bei Generation und Rekombination von freien Ladungsträgern (linker Teil) und bei Haftstellen (rechter Teil). Elektronenübergänge sind zwischen Leitungsband und dem Haftstellenniveau E_T möglich. Es findet über dieses Niveau jedoch auf Grund der fehlenden Wechselwirkung mit dem Valenzband keine Rekombination statt. Im stationären Zustand resultiert eine Dichte n_T von Elektronen bei einer Haftstellendichte N_T .



Für die Änderung der Elektronendichte in den Haftstellen gilt analog

$$\frac{dn_T}{dt} = -\frac{n_T}{\tau_g} + \frac{\Delta n \left(1 - \frac{n_T}{N_T}\right)}{\tau_t}. \quad (5.2)$$

Unter stationären Bedingungen sind die Überschusselektronendichte und die Dichte der Elektronen in den Haftstellen konstant. Daraus ergeben sich

$$\Delta n = \tau_{rec} G \quad (5.3)$$

und

$$n_T = \frac{N_T \Delta n}{\Delta n + N_T \frac{\tau_t}{\tau_g}}. \quad (5.4)$$

Die Überschusselektronendichte hängt nach Gleichung (5.3) nur von der Rekombinationslebensdauer und der Generation ab und ist unabhängig von der Haftstellendichte. Auf Grund der Ladungsneutralität gilt für die Überschusslöcherdichte

$$\Delta p = \Delta n + n_T. \quad (5.5)$$

Die Ungleichheit zwischen Δp und Δn führt bei den meisten Methoden zur Messung der Rekombinationslebensdauer zu Artefakten (siehe Kapitel 5.2).

Aus Gleichung (5.2) lässt sich die Energietiefe einer idealen (d.h. $\sigma_p = 0$) Haftstelle unter Annahme eines injektionsunabhängigen Quotienten τ_t / τ_g abschätzen. Im thermischen Gleichgewicht ohne Bestrahlung gilt

$$\frac{n_{T,dunkel}}{\tau_g} = \frac{n_{dunkel}}{\tau_t}. \quad (5.6)$$

In diesem Gleichgewicht gilt ebenfalls

$$n_{\text{dunkel}} = N_C \exp\left(\frac{-(E_C - E_F)}{kT}\right) \quad (5.7)$$

sowie

$$n_{T,\text{dunkel}} = N_T \exp\left(\frac{-(E_T - E_F)}{kT}\right). \quad (5.8)$$

Für den Energieabstand eines Haftstellenniveaus von der Leitungsbandkante ergibt sich der folgende Zusammenhang zu den zugehörigen Zeitkonstanten τ_g und τ_t :

$$E_C - E_T = kT \ln\left(\frac{N_C \tau_g}{N_T \tau_t}\right). \quad (5.9)$$

Unter der Annahme der Injektionsunabhängigkeit von τ_g/τ_t lässt sich dieser Koeffizient in Gleichung (5.4) durch die Energie des Haftstellenniveaus ersetzen:

$$n_T = \frac{N_T \Delta n}{\Delta n + N_C \exp\left(\frac{-(E_C - E_T)}{kT}\right)}. \quad (5.10)$$

Der Parameter Energietiefe E_T hat gegenüber τ_t/τ_g den Vorteil, von N_T unabhängig zu sein.

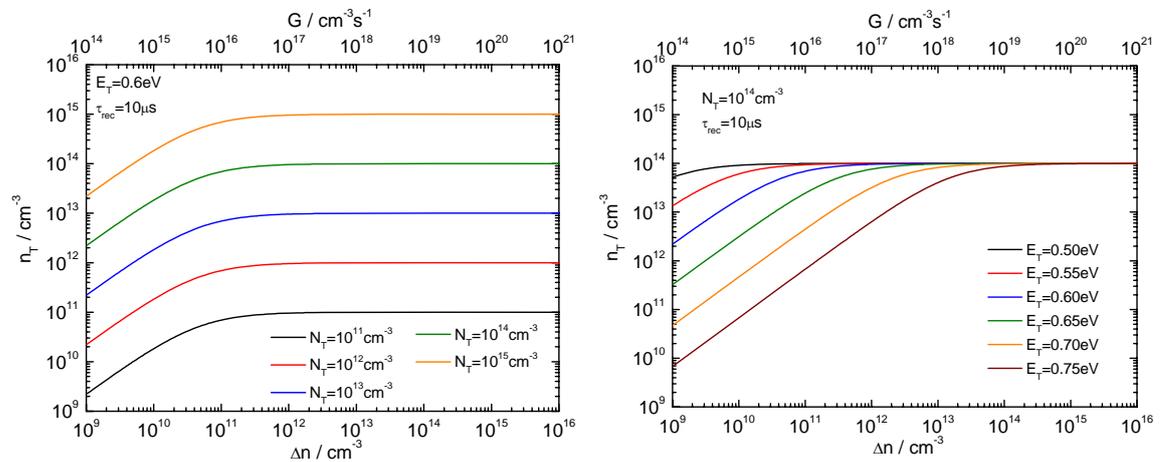


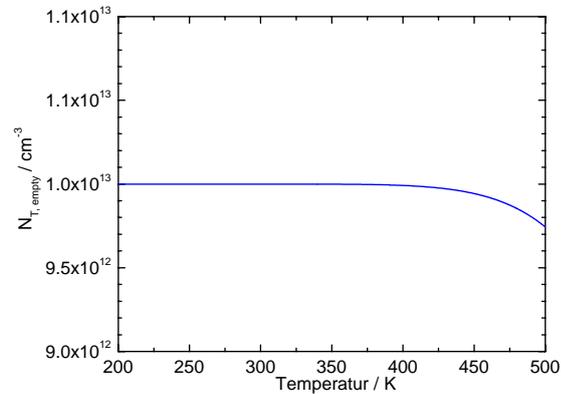
Abbildung 5.4: Abhängigkeit der Dichte besetzter Haftstellen von der Überschussladungsträgerdichte für verschiedene Haftstellendichten (links) und variierendes Energieniveau der Haftstelle (rechts).

Im Modell nicht berücksichtigt ist der Beitrag der thermischen Besetzung zu n_T . Dieser kann mit Hilfe der Fermistatistik (die Boltzmann-Näherung wurde schon in Gleichung (5.8) verwandt) und der Gleichungen (2.8) und (2.11) abgeschätzt werden:

$$n_{T,therm} = \frac{N_T}{1 + \exp\left(\frac{E_T - E_F}{kT}\right)}. \quad (5.11)$$

Abbildung 5.5 zeigt diese Abhängigkeit graphisch.

Abbildung 5.5: Simulation der temperaturabhängigen Dichte thermisch unbesetzter Haftstellen im thermischen Gleichgewicht $N_{T,empty} = N_T - n_{T,therm}$. Bei der Berechnung wurde angenommen, dass im betrachteten Temperaturbereich näherungsweise alle Dotieratome ionisiert sind.



5.2 Haftstellenbeeinflusste Lebensdauerermessung

Die Rekombinationslebensdauer in Silizium für Solarzellen ist unter Niederinjktionsbedingungen durch Störstellen-Rekombination bestimmt. Das diesen Prozess beschreibende Shockley-Read-Hall-Modell (siehe Kapitel 2.3.4) sagt für den Niederinjktionsbereich eine konstante Lebensdauer voraus. Es ist jedoch bei einer Vielzahl von Lebensdauer-Messverfahren eine signifikante Erhöhung der gemessenen Werte auszumachen. Diese Erhöhung kann durch den Einfluss von Haftstellen erklärt werden.

5.2.1 Statische Methoden

Einige statische Messmethoden wie QSSPC (siehe Kapitel 2.4) oder CDI/ILM (siehe Kapitel 4) detektieren sowohl Überschusselektronen als auch –löcher. Löcher tragen bei QSSPC-Messungen in ähnlicher Weise zur Leitfähigkeit und damit zum Messsignal bei wie Elektronen. Ebenso erhöhen Elektronen wie auch Löcher die Infrarotemission einer Probe und bestimmen das Messsignal. Der Unterschied im Beitrag zur Leitfähigkeit wird bei der QSSPC-Methode mit Hilfe der bekannten Mobilitäten für Elektronen und Löcher berücksichtigt. Die CDI-Methode trägt ebenfalls leichten Unterschieden des Einflusses von Elektronen und Löchern mit Hilfe von experimentell bestimmten Absorptionskoeffizienten Rechnung. Beiden Methoden zu Grunde liegt jedoch die Annahme, dass bei der Generation von Überschussladungsträgern genauso viele Elektronen wie Löcher generiert werden. Gilt diese Gleichheit in Folge von in Haftstellen gefangener Elektronen nicht mehr (siehe Gleichung (5.5)), wird die Überschusselektro-nendichte und damit die Rekombinationslebensdauer überschätzt. Injektionsabhängige

QSSPC-Messungen an Proben mit signifikanter Haftstellendichte zeigen typischerweise das in Abbildung 5.6 dargestellte Verhalten.

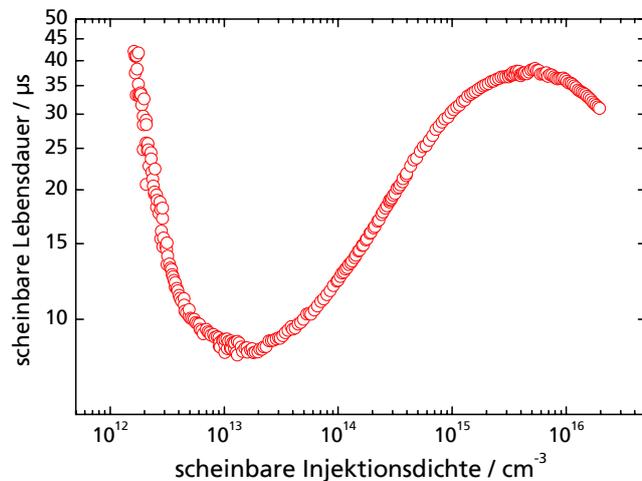
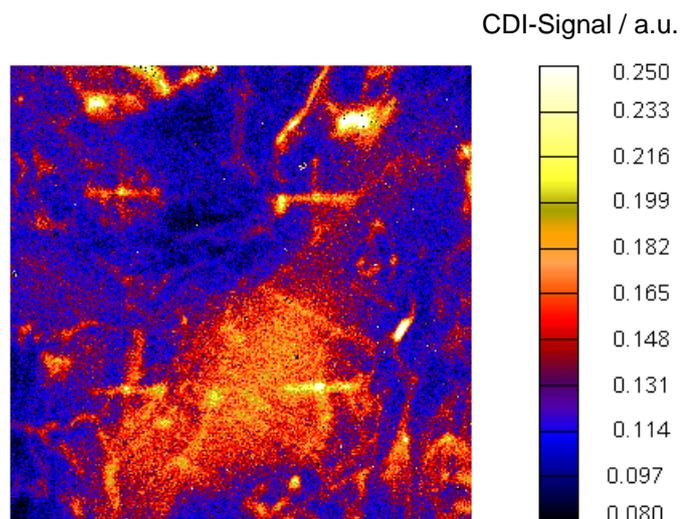


Abbildung 5.6: QSSPC-Messung an Probe mit signifikanter Haftstellendichte. Im Gegensatz zur erwarteten konstanten Lebensdauer im Niederinjektionsbereich sind die Messwerte stark erhöht.

Genauere Untersuchungen zum Einfluss von Haftstellen auf QSSPC-Messungen finden sich in [71-73].

Carrier Density Imaging reagiert in sehr ähnlicher Weise auf die Präsenz von Haftstellen. Im Gegensatz zu QSSPC-Messungen, deren Form der Messkurve häufig eindeutig auf Messartefakte hinweist, ist der Haftstelleneinfluss bei CDI-Messungen nicht direkt zu erkennen, weil keine injektionsabhängige Lebensdauerinformation zur Verfügung steht. Da CDI-Messungen bei konstanter Generationsrate durchgeführt werden, variiert die Injektionsdichte zudem lateral. Das bedeutet, dass durch Haftstellen induzierte Artefakte in Bereichen niedriger Materialqualität auftreten, in guten Bereichen möglicherweise aber nicht vorhanden sein können. Ein Beispiel einer CDI-Messung mit lateral unterschiedlichem Haftstelleneinfluss ist in Abbildung 5.7 gezeigt.

Abbildung 5.7: CDI-Messung an SiN-passivierter, multikristalliner Siliziumprobe (ca. 12×12 mm²) unter Niederinjektionsbedingungen. Der größere orange-farbene Bereich im unteren Teil der Messung zeigt eine erhöhte Rekombinationslebensdauer an, während z.B. die hellen Strukturen am oberen Bildrand auf Haftstellen zurückzuführen sind. Die vier kreuzförmigen Konturen rühren von Probenmarkierungen her.



Aus injektionsabhängigen CDI-Messungen kann der Effekt von Haftstellen identifiziert werden. Ein signifikantes Ansteigen der Messwerte zu niedrigen Injektionsdichten zeigt den Einfluss von z.B. Haftstellen an.

5.2.2 Transiente Methoden

Transiente Lebensdauermethoden können ebenso wie statische Methoden von Haftstellen beeinflusst sein. Obwohl der Schwerpunkt dieser Arbeit nicht auf transienten Methoden beruht, soll kurz auf Haftstelleneinflüsse bei transienten Photoleitfähigkeits-Abklingmessungen eingegangen werden. Die ersten Veröffentlichungen zu Haftstellen [65] beruhten auf dieser Messmethode.

Im Gegensatz zu statischen Methoden wird typischerweise der Abfall der Ladungsträgerdichte nach einem kurzen Anregungspuls detektiert. Je nach Reemissionszeit der in den Haftstellen gefangenen Ladungsträger wird die Rekombination zeitlich verzögert. Typischerweise führt dies zu einem multiexponentiellen Abfall der Ladungsträgerdichte. Ein Beispiel einer MW-PCD-Messung (siehe Kapitel 2.4) ist in Abbildung 5.8 dargestellt.

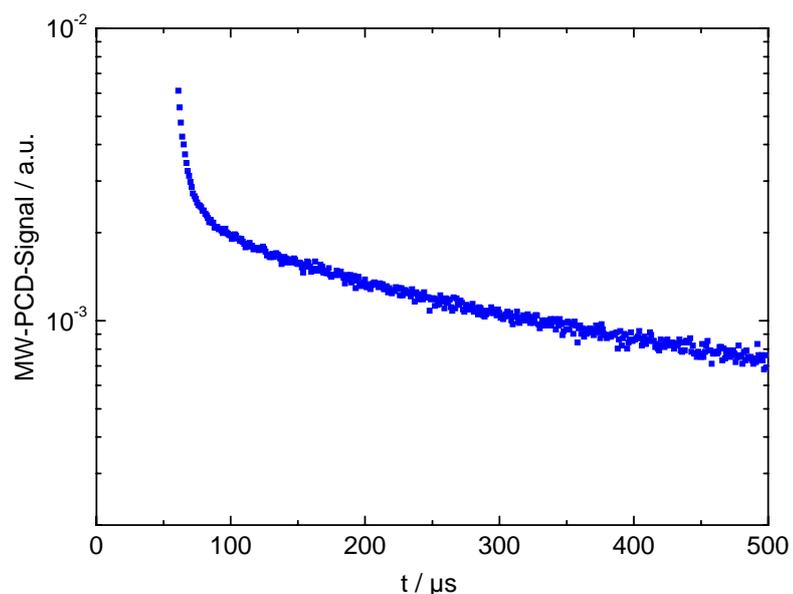


Abbildung 5.8: Typisches Signal einer transienten Photoleitfähigkeitsabklingmessung an einer Probe mit hoher Haftstellendichte. Der steile anfängliche Abfall ist der Rekombination von Ladungsträgern zuzuordnen, während der flache Abfall auf den Einfluss von Haftstellen zurückgeführt wird.

Nach dem Abschalten der Anregungs-Lichtquelle ist ein steiler Abfall des Messsignals, welches näherungsweise linear zur Überschussladungsträgerdichte ist, zu verzeichnen.

5.3 Korrekturmöglichkeiten

Der Effekt von Haftstellen auf die Messung der Rekombinationslebensdauer dominiert in vielen Fällen die Messwerte im Niedrinjektionsbereich. Bisher wird zur Bestimmung der Rekombinationslebensdauer mit statischen Messmethoden die Injektionsdich-

te bei der Messung hoch genug gewählt, um den Einfluss von Haftstellen klein zu halten. Für die QSSPC-Methode wurde in [74] eine mathematische Korrektur der Messwerte vorgeschlagen, die hier in Kapitel 5.3.2 auf CDI-Messungen übertragen wird. Das Konzept einer zweiten, konstanten Bestrahlungsquelle wird für CDI-Messungen in Kapitel 5.3.3.2. realisiert.

Zunächst wird auf die Möglichkeit der mathematischen Modellierung von injektionsabhängigen CDI-Messungen eingegangen. Als Alternative wird eine einfachere mathematische Methode zur Korrektur von injektionsabhängigen Messungen diskutiert. Schließlich werden Möglichkeiten zur prinzipiellen Vermeidung des Haftstelleneffekts vorgestellt, die auf der zusätzlichen Bestrahlung der Probe mit Photonen basieren.

5.3.1 Modellierung von injektionsabhängigen Lebensdauer-messungen

Die von der CDI-Apparatur detektierte, scheinbare Minoritätsträgerdichte Δn_{app} lässt sich ausdrücken durch

$$\Delta n_{app} = const (\alpha_n \Delta n + \alpha_p \Delta p). \quad (5.12)$$

α_n und α_p sind die mittleren Absorptionskoeffizienten für Elektronen und Löcher im Wellenlängen-Messintervall der Kamera. Mit Hilfe von Gleichung (5.5) lässt sich Δn_{app} als Funktion der tatsächlichen (unbekannten) Minoritätsträgerdichte darstellen:

$$\Delta n_{app}(\Delta n) = \frac{1}{\alpha_n + \alpha_p} \Delta n \left[\alpha_n + \alpha_p \left(1 + \frac{n_T(\Delta n)}{\Delta n} \right) \right]. \quad (5.13)$$

Für die scheinbare Rekombinationslebensdauer ergibt sich damit

$$\tau_{app}(\Delta n) = \frac{\Delta n_{app}}{G} = \frac{1}{\alpha_n + \alpha_p} \tau_{rec} \left[\alpha_n + \alpha_p \left(1 + \frac{n_T(\Delta n)}{\Delta n} \right) \right]. \quad (5.14)$$

Die Gleichungen (5.13) und (5.14) führen durch Eliminieren der experimentell unzugänglichen tatsächlichen Minoritäts-Ladungsträgerdichte mit Hilfe von Gleichung (5.4) auf einen analytischen Ausdruck für die gemessene Größe $\tau_{app}(\Delta n_{app})$, die Parameter zur Beschreibung des Haftstelleneffekts N_T , τ_t und τ_g sowie die Rekombinationslebensdauer τ_{rec} enthält. Durch Anpassung des Modells an die Messdaten kann für jeden Bildpunkt die Rekombinationslebensdauer bestimmt werden. Eine wesentliche Annahme bei der Bestimmung dieses Parameters ist seine Invarianz gegenüber der Injektionsdichte im Niederinjektionsbereich. Diese Annahme entspricht der Theorie der Störstellen-Rekombination (Kapitel 2.3.4), die eine in diesem Bereich konstante Lebensdauer postuliert.

Alternativ zur Darstellung und Kurvenanpassung von $\tau_{app}(\Delta n_{app})$ kann die Auftragung $\tau_{app}(G)$ sein. Der Vorteil dieser Auftragung liegt in der direkten Zugänglichkeit der

Messgrößen. In Abbildung 5.9 und Abbildung 5.10 sind in dieser Auftragsung die Einflüsse der Parameter Haftstellendichte N_T , Energieniveau der Haftstelle E_T und Rekombinationslebensdauer unter Niederinjektion τ_{rec} dargestellt.

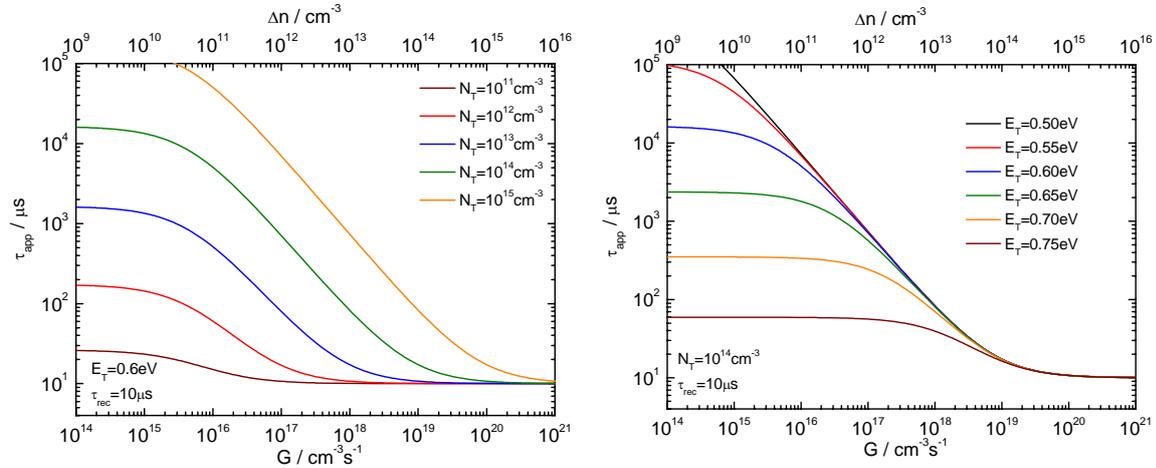
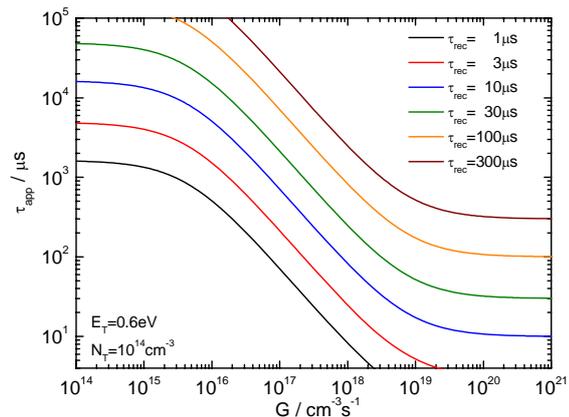


Abbildung 5.9: Simulation der scheinbaren, mit der CDI messbaren Lebensdauer in Abhängigkeit der Generationsrate für verschiedene Haftstellendichten (links) und variierendes Energieniveau (rechts).

Abbildung 5.10: Simulation der scheinbaren, mit der CDI messbaren Lebensdauer in Abhängigkeit der Generationsrate für verschiedene Niederinjektions-Rekombinationslebensdauern.



5.3.2 Konzept der „bias-light correction“

Injektionsabhängige CDI-Messungen können alternativ zu der in Kapitel 5.3.1 beschriebenen Modellierung mit einer Methode korrigiert werden, die einem Konzept von Macdonald et al. [74] folgt und als „bias-light correction“ bekannt ist. In [74] für die QSSPC-Methode entwickelt, soll diese Korrektur hier auf CDI-Messungen übertragen werden. Die grundlegende Idee dieser empirischen Korrektur ist die mathematische Berücksichtigung einer virtuellen zusätzlichen Bestrahlung („bias“). Gesättigte Haftstellen wirken auf das Messsignal in ähnlicher Weise wie eine konstante zusätzliche Bestrahlung geringer Intensität, in dem diese das Messsignal um einen konstanten Betrag verschieben. Diese Beobachtung ist in Abbildung 5.11 verdeutlicht. Die gemessene scheinbare Überschusselektronendichte ist gegen die optische Generationsrate aufgetra-

gen. Es ist bei kleiner Generationsrate ein steiler Anstieg von Δn_{app} zu verzeichnen, der auf Haftstellen zurückgeführt wird: Elektronen aus dem Leitungsband werden zunächst zum großen Teil in Haftstellen gebunden. Das führt nach Gleichung (5.5) zu einem Überschuss an Löchern und erhöht Δn_{app} . Nachdem die Haftstellen näherungsweise gefüllt sind, ist das erwartete lineare Verhalten zwischen Δn_{app} und G zu beobachten. Bei hohen Generationsraten ist eine Abweichung festzustellen, die auf die Nichtlinearität der dominierenden Störstellen-Rekombination zurückzuführen ist (siehe Kapitel 2.3.4).

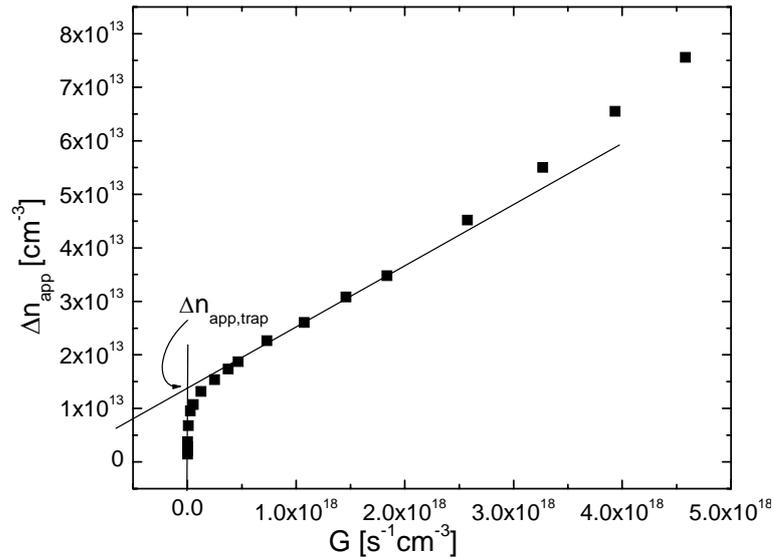


Abbildung 5.11: Gemessene scheinbare Überschussladungsträgerdichte Δn_{app} in Abhängigkeit der Generationsrate G . Infolge des Einflusses von Haftstellen ist ein starker Anstieg von Δn_{app} bei kleiner Generationsrate zu verzeichnen. Nach diesem Anstieg sind die Haftstellen näherungsweise gefüllt und die Daten folgen einem näherungsweise linearen Verlauf. Die Daten bei $G > 2 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$ weichen auf Grund der Injektionsabhängigkeit der Rekombinationslebensdauer vom linearen Verhalten ab.

Der lineare Bereich der Kurve lässt sich für $G = 0$ extrapolieren und liefert einen y-Achsenabschnitt $\Delta n_{app,trap}$. Wird der Einfluss der Haftstellen nun näherungsweise wie der Einfluss einer zusätzlichen, schwachen Generationsrate behandelt, lassen sich folgende Gleichungen für eine korrigierte Lebensdauer und Überschussladungsträgerdichte aufstellen. Für die Lebensdauer ergibt sich

$$\tau_{corr}(\Delta n_{app}) = \frac{\Delta n_{app} - \Delta n_{app,bias}}{G - G_{bias,virtuell}}. \quad (5.15)$$

$\Delta n_{app,bias}$ ist der zur angenommenen (und virtuellen) zusätzlichen Generationsrate $G_{bias,virtuell}$ entsprechende Wert der scheinbaren Überschussladungsträgerdichte.

Die korrigierte Überschussladungsträgerdichte ist

$$\Delta n_{corr}(\Delta n_{app}) = \Delta n_{app} - \Delta n_{app,trap}. \quad (5.16)$$

$\Delta n_{app,trap}$ ist der in Abbildung 5.11 eingezeichnete extrapolierte Wert für die durch Haftstellen bedingte, scheinbare Überschusselektronendichte.

Um den Wert für $G_{bias,virtuell}$ zu finden, der die beste Korrektur liefert, kann ein empirisches Verfahren angewandt werden, das dem von Macdonald et al. [74] für QSSPC-Messungen vorgeschlagenen gleicht: $G_{bias,virtuell}$ wird solange erhöht, bis das lokale Minimum für $\tau_{corr}(\Delta n_{corr})$ seinen kleinsten Wert erreicht. Dieses Vorgehen soll analog zur QSSPC-Korrektur dafür Sorge tragen, dass $G_{bias,virtuell}$ gerade groß genug ist, um den Haftstelleneffekt zu korrigieren, aber die Messdaten nicht auf Grund der unwahren mathematischen Annahme einer realen Zusatzbeleuchtung verfälscht werden [74]. Die Wahl des optimalen Parameters $G_{bias,virtuell}$ lässt sich in Abbildung 5.12 nachvollziehen.

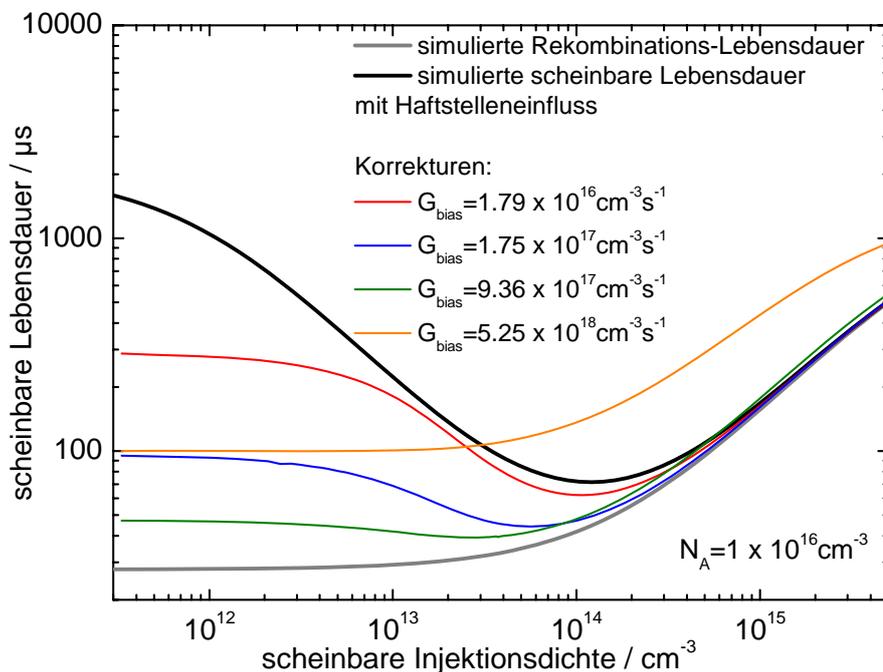


Abbildung 5.12: Exemplarisch berechnete Injektionsabhängigkeit der scheinbaren Lebensdauer mit und ohne Berücksichtigung des Haftstellen-Effekts für CDI-Messungen. Zusätzlich eingezeichnet sind Korrekturen für verschiedene Werte für G_{bias} gemäß den Gleichungen (5.15) und (5.16). Der optimale Wert für G_{bias} ist in diesem Beispiel $9.36 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$.

5.3.3 Zusätzliche Bestrahlung der Probe mit Photonen

Eine grundlegend von den Kapiteln 5.3.1 und 5.3.2 verschiedene Herangehensweise zur Vermeidung von durch Haftstellen gestörten Messdaten ist eine direkte Unterdrückung dieses Effekts während der Messung. Im Gegensatz zu den vorangegangenen Kapiteln, die injektionsabhängige Daten nach der Messung analysieren, wird hier dargestellt, welche Möglichkeiten sich durch eine reale zusätzliche Bestrahlung mit Photonen während der Messung ergeben. Prinzipiell werden zwei verschiedene Optionen untersucht. Die Bestrahlung der Probe mit Photonen mit Energien kleiner als die Bandlücke wird in

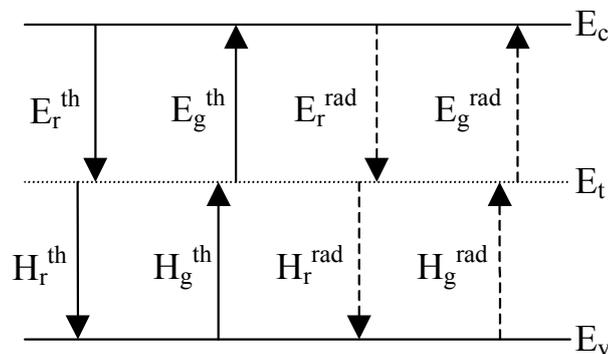
Kapitel 5.3.3.1 behandelt. Eine zusätzliche Bestrahlung mit Photonen mit ausreichender Energie zur Generation von Elektron-Loch-Paaren wird in Kapitel 5.3.3.2 untersucht.

5.3.3.1 Entleerung von Haftstellenniveaus mit niederenergetischen Photonen

Photonen mit Energien kleiner als die Bandlücke¹ tragen nicht zur Ladungsträgergeneration bei. Es ist prinzipiell jedoch möglich, Übergänge zwischen Defektniveaus in der Bandlücke und dem Leitungsband zu induzieren. In dieser Weise könnte die Reemission von Elektronen aus Haftstellen ins Leitungsband gegenüber dem Einfang in solche Niveaus begünstigt und so der Haftstelleneinfluss auf Lebensdauermessungen minimiert werden.

Theoretisch lassen sich optisch induzierte Übergänge mit einer erweiterten Shockley-Read-Hall-Theorie beschreiben [75]. In dieser werden außer den in Kapitel 2.3.4 beschriebenen Übergänge weitere, optisch angeregte Übergänge eingeführt (siehe Abbildung 5.13).

Abbildung 5.13: Thermische und optische Übergänge zwischen Defektniveau und Leitungs- bzw. Valenzband. Die thermischen Übergänge entsprechen den in der Shockley-Read-Hall-Theorie beschriebenen. Zusätzlich werden die optisch induzierten (gestrichelten) Übergänge eingeführt. Die Pfeile zeigen die Elektronenübergänge an. Nach [75].



Im Folgenden wird diese Theorie auf den Fall einer externen Bestrahlung angewandt. Strahlende Übergänge hängen sowohl von optischen Einfangquerschnitten als auch von der eingestrahelten Photonenflussdichte ab. Die optischen Rekombinationsprozesse² für Elektronen E_r^{rad} und Löcher H_r^{rad} hängen nur von der Photonenflussdichte gemäß der Schwarzkörperstrahlung bei Proben temperatur ab. Im Gegensatz dazu sind die entsprechenden Generationsprozesse für Elektronen E_g^{rad} und Löcher H_g^{rad} zusätzlich vom externen Photonenfluss abhängig.

Für die Beschreibung der Interaktion von Strahlung mit Ladungsträgern in Haftstellenniveaus sind insbesondere die Übergänge zwischen Defektniveau und Leitungsband grundlegend, in die nun zusätzlich zu den in [75] vollzogenen Überlegungen der Ein-

¹ Eine solche Photonenquelle wird häufig als Subband-Licht bezeichnet.

² Die Ausdrücke „Rekombination“ und „Generation“ werden in diesem Zusammenhang der Veröffentlichung von Beaucarne et al. 75. Beaucarne, G. and M.A. Green, *A modified Shockley-Read-Hall theory including radiative transitions*. Solid-State Electronics, 2003. 47: p. 685-9. folgend benutzt, um Elektronenübergänge zu benennen, die in ein energetisch tiefergelegenes respektive höhergelegenes Niveau übergehen.

fluss einer externen Subband-Photonenquelle mit berücksichtigt wird. Für die Generationsrate aus dem Defektniveau gilt

$$E_g^{rad} = n_r \int_0^{\lambda_{max}} \sigma_n^{opt}(\lambda) (\phi_{blackbody}(\lambda) + \phi_{sub}(\lambda)) d\lambda. \quad (5.17)$$

λ_{max} ist die maximale Wellenlänge, für die noch Übergänge möglich sind, $\sigma_n^{opt}(\lambda)$ ist der optische Einfangquerschnitt für Elektronen und $\phi_{blackbody}(\lambda)$, $\phi_{sub}(\lambda)$ sind die Photonflussdichten der Schwarzkörperstrahlung bzw. der externen Subband-Photonenquelle.

Der zu Gleichung (5.17) umgekehrte Rekombinationsprozess lässt sich folgendermaßen ausdrücken:

$$E_r^{rad} = n(N_t - n_t) \frac{1}{n_l} \int_0^{\lambda_{max}} \sigma_n^{opt}(\lambda) \phi_{blackbody}(\lambda) d\lambda. \quad (5.18)$$

n beschreibt die Elektronenkonzentration im Leitungsband und n_l ist die SRH-Dichte nach Gleichung (2.28). Im Gegensatz zum Generationsprozess hängt die Rekombinationsrate E_r^{rad} nicht vom externen Photonfluss ϕ_{sub} ab.

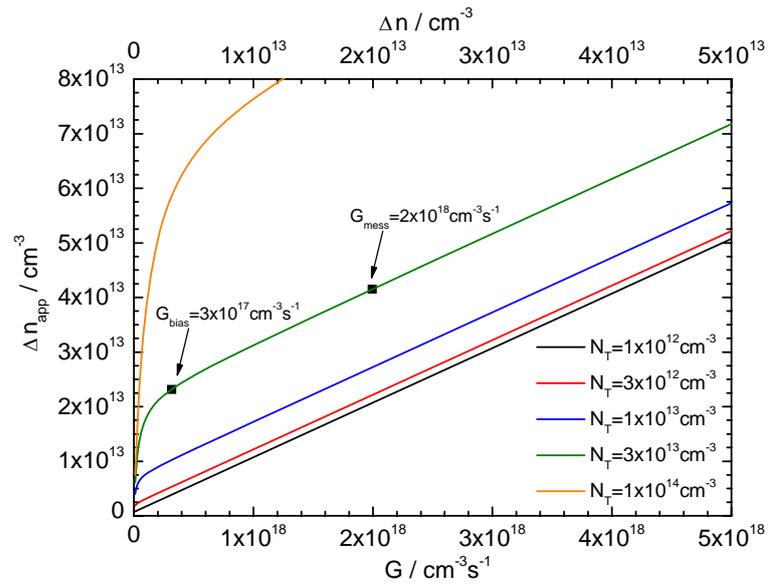
Falls angenommen werden kann, dass der optische Einfangquerschnitt für Löcher ebenso wie der thermische klein gegenüber dem optischen Einfangquerschnitt für Elektronen ist, gilt $E_g^{rad} \gg H_g^{rad}$. In diesem Fall ist es prinzipiell möglich, eine Erhöhung von E_g^{rad} gegenüber E_r^{rad} und damit eine effektive Entleerung der Haftstellen zu erreichen.

5.3.3.2 Bestrahlung der Probe mit höherenergetischen Photonen

Eine weitere Möglichkeit, den Einfluss von Haftstellen auf Lebensdauermessungen zu minimieren, ist die zusätzliche Bestrahlung der Probe mit Photonen ausreichender Energie, um zusätzlich Ladungsträger zu generieren. Im Gegensatz zur „bias-light correction“ (Kapitel 5.3.2), bei der eine zusätzliche virtuelle Bestrahlung nur angenommen wurde, werden bei diesem Verfahren tatsächlich zusätzliche freie Ladungsträger erzeugt.

Bei CDI-Messungen wird die Infrarotemission der Probe unter Bestrahlung mit der im Dunkeln verglichen, ebenso wie bei QSSPC-Messungen die Leitfähigkeiten der Probe mit und ohne Beleuchtung verglichen werden. Die Differenz dieser beiden Zustände ist durch eventuelle Haftstellen stark beeinflusst. Eine Verbesserung des Messergebnisses kann durch eine zusätzliche Bestrahlung erreicht werden. Es wird in diesem Fall die Differenz zwischen einer Messung mit einer Generationsrate von $G = G_{mess} + G_{bias}$ und einer Messung mit einer Generationsrate $G = G_{bias}$ aufgenommen (siehe Abbildung 5.14).

Abbildung 5.14: Scheinbare Überschussladungsträgerdichte in Abhängigkeit der Generationsrate und der Überschuss-Elektronendichte für eine angenommene Rekombinationslebensdauer von $10 \mu\text{s}$. Der Quotient τ_v/τ_g ist als 0.01 angenommen. In der Beispielkurve für $N_T=3 \cdot 10^{13} \text{cm}^{-3}$ sind die im Text diskutierten Intensitäten der modulierten und der zusätzlichen Bestrahlung, G_{mess} und G_{bias} , markiert.



Zur Bestimmung der Lebensdauer wird dann berechnet:

$$\tau_{\text{corr,bias}}(G_{\text{mess}} + G_{\text{bias}}) = \frac{\Delta n_{\text{app}}(G_{\text{mess}} + G_{\text{bias}}) - \Delta n_{\text{app}}(G_{\text{bias}})}{G_{\text{mess}}} \quad (5.19)$$

Der Einfluss dieser Korrektur kann mit Abbildung 5.15 beurteilt werden.

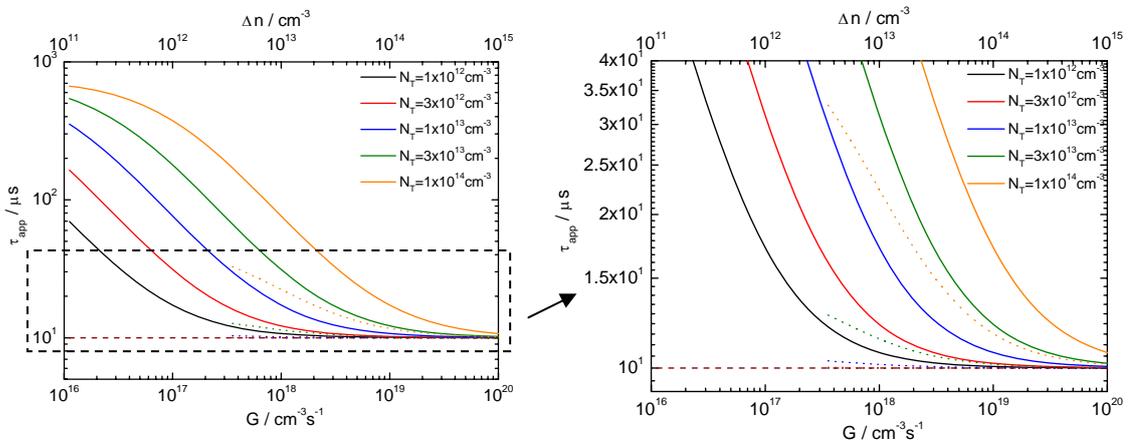


Abbildung 5.15: Einfluss der Haftstellendichte auf die Injektionsabhängigkeit der scheinbaren Lebensdauer. Gepunktet dargestellt sind die simulierten Kurven mit einer zusätzlichen Generationsrate von $G_{\text{bias}}=3 \cdot 10^{17} \text{cm}^{-3} \text{s}^{-1}$. Für die Rekombinationslebensdauer ist $\tau_{\text{rec}}=10 \mu\text{s}$ angenommen (gestrichelte Linie). τ_v/τ_g ist 0.01 .

Es zeigt sich, dass der Haftstelleneinfluss für alle angenommenen Haftstellendichten unter Zuhilfenahme von zusätzlicher Bestrahlung mit z.B. $G_{\text{bias}} = 3 \cdot 10^{17} \text{cm}^{-3} \text{s}^{-1}$ abnimmt. Für $N_T \leq 1 \cdot 10^{13} \text{cm}^{-3}$ kann der Haftstelleneffekt fast vollständig unterdrückt werden. Für höhere Haftstellendichten muss zur besseren Unterdrückung eine entsprechend höhere Intensität für die zusätzliche Bestrahlungsquelle gewählt werden. Die Wahl von G_{bias} schränkt aber den zugänglichen Messbereich ein. Es ist naturgemäß nicht möglich, die Lebensdauer für kleinere Generationsraten als G_{bias} zu bestimmen.

5.3.4 Experimentelle Ergebnisse zu korrigierten Lebensdauermessungen

In Abbildung 5.16 ist links eine CDI-Messung an einer SiN-passivierten, multikristallinen Siliziumprobe dargestellt. Die verwendete Generationsrate betrug etwa $G = 2.75 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$ (0.033 Sonnen). Auf der rechten Seite ist das Ergebnis für die Rekombinationslebensdauer nach einer Modellierung injektionsabhängiger CDI-Messungen gemäß Kapitel 5.3.1 zu sehen. Der Vergleich zwischen beiden Ergebnissen zeigt wesentliche Unterschiede. So ist z.B. die feine Linienstruktur im linken Bild in der Darstellung der modellierten Rekombinationslebensdauer nicht zu sehen und wird auf den Effekt von Haftstellen zurückgeführt. Ebenfalls den Haftstellen zugeschrieben werden die insgesamt im Vergleich zum rechten Bild erhöhten Messwerte. Angedeutete Linien im rechten Bild haben ihren Ursprung vermutlich in Unsicherheiten der Kurvenanpassungen. Die Struktur der Rekombinationslebensdauer ist im linken Bild zusätzlich zu sehen.

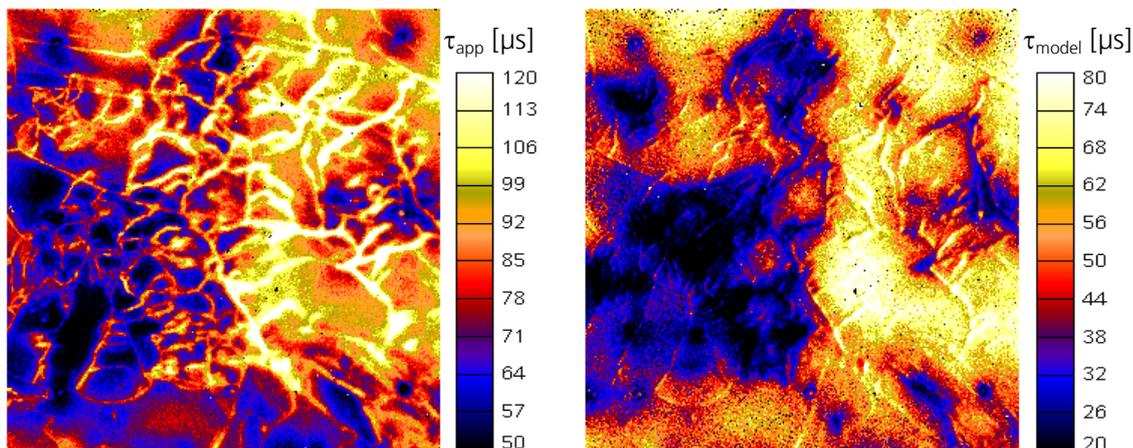
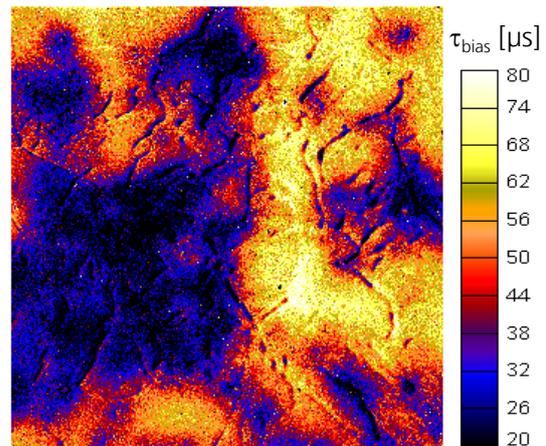


Abbildung 5.16: CDI-Messung bei schwacher Generationsrate (links) und aus injektionsabhängigen CDI-Messungen modellierte Rekombinationslebensdauer (rechts). Die feine, linienartige Struktur sowie die insgesamt höheren Messwerte im linken Bild werden auf Haftstellen zurückgeführt.

Mit Hilfe der injektionsabhängigen Messungen wurde alternativ zu obiger Modellierung das Konzept der „bias-light correction“ angewandt. Gemäß Kapitel 5.3.2 wurde automatisiert für jedes Pixel der optimale Wert der virtuellen Generationsrate $G_{\text{bias,virtuell}}$ ermittelt und ein korrigierter Wert für die Rekombinationslebensdauer berechnet. Das Ergebnis der orts aufgelösten Auswertung ist in Abbildung 5.17 abgebildet.

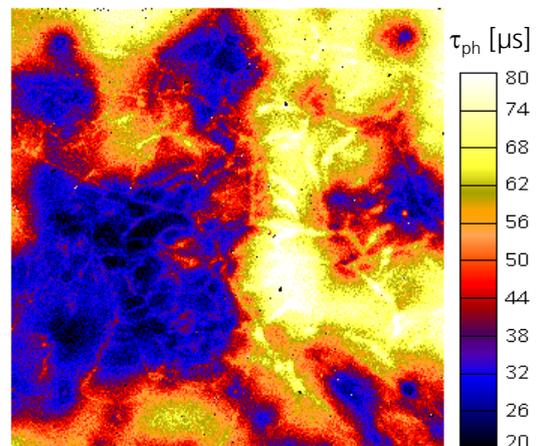
Die so korrigierte Lebensdauer entspricht in guter Näherung der mit Hilfe des Hornbeck-Haynes-Modells gewonnenen Werte. Ähnlich zu dieser Messung sind geringe Artefakte in Bereichen besonders hoher Haftstellendichte auszumachen. Diese werden nach der „bias-light correction“-Methode unterbewertet, während die Modellierung etwas zu hohe Werte voraussagt. Insgesamt ergibt sich aber ein sowohl qualitativ als auch quantitativ zufriedenstellendes Ergebnis für die Bestimmung der Lebensdauerverteilung.

Abbildung 5.17: Korrigierte CDI-Messung nach dem Konzept der „bias-light correction“ aus injektionsabhängigen Daten. Der Effekt von Haftstellen auf das Messsignal wird mathematisch wie eine zusätzliche Bestrahlung der Probe behandelt. Die so korrigierte Lebensdauerermessung entspricht in guter Näherung der modellierten Rekombinationslebensdauer aus Abbildung 5.16.



Im Kontrast zu diesen Methoden, die aus einer Reihe injektionsabhängiger Messungen die Rekombinationslebensdauer extrahieren, steht die Methode der zusätzlichen Bestrahlung der Probe während der Messung. Ein wesentlicher Vorteil dabei ist, dass anstatt einer injektionsabhängigen Messreihe nur eine einzelne CDI-Messung gemacht werden muss. Ein Beispiel einer solchen Messung ist in Abbildung 5.18 gezeigt. Mit Hilfe eines Siliziumfilters und einer Glasscheibe vor einer Halogenlampe wurde die Probe bei dieser Messung einer Strahlung mit einem hohen Infrarotanteil zusätzlich zur Bestrahlung mit dem ladungsträgergenerierenden Laser ausgesetzt. Die Generationsrate durch den Laser betrug wie bei der von Haftstellen beeinflussten Vergleichsmessung $G = 2.75 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$.

Abbildung 5.18: CDI-Messung mit zusätzlicher, kontinuierlicher infraroter Bestrahlung. Die Messbedingungen entsprechen ansonsten den für die Vergleichsmessung in Abbildung 5.16, linke Seite, gewählten. Das Messresultat entspricht in guter Näherung der modellierten Rekombinationslebensdauer aus derselben Abbildung, rechte Seite.



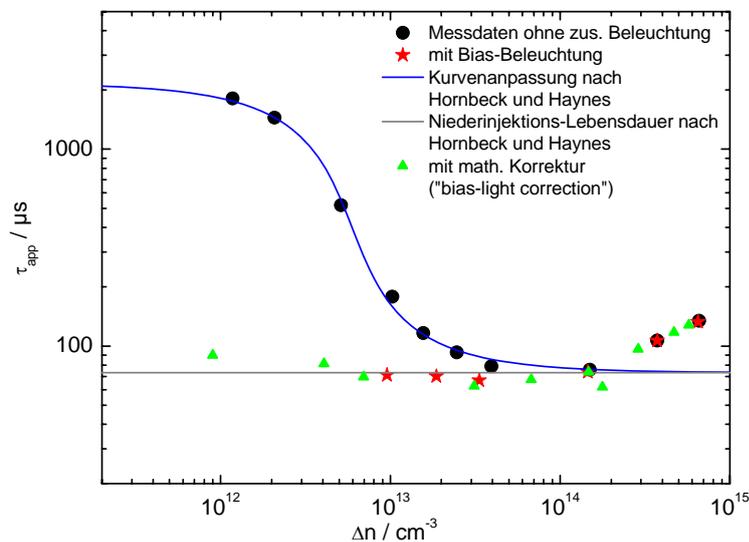
Zunächst lässt sich feststellen, dass durch die zusätzliche Bestrahlung eine gute Unterdrückung der den Haftstellen zugeschriebenen, linienartigen Strukturen aus der linken Messung der Abbildung 5.16 erreicht wurde. Des Weiteren entspricht die gemessene Verteilung in guter Näherung der modellierten Rekombinationslebensdauer. Als Erklärung für die Funktionsweise der zusätzlichen Beleuchtung bieten sich die in den Kapiteln 5.3.3.1 und 5.3.3.2 behandelten Mechanismen an. Die Energieverteilung der gefilterten Photonen der externen Strahlungsquelle liegt zwischen $1.1 \mu\text{m}$ und $3.5 \mu\text{m}$. Damit liegt es zunächst nahe, die Theorie der strahlungsunterstützten Entleerung der Haftstellenniveaus nach Kapitel 5.3.3.1 zur Erklärung heranzuziehen. Detailliertere Unter-

suchungen der zusätzlichen Lichtquelle haben aber ergeben, dass ein geringer Teil höherenergetischer Photonen im Spektrum vorhanden ist. Aus Messungen konnte dieser Betrag abgeschätzt werden. Als sichere obere Grenze der Generationsrate kann danach ein Wert von $G = 5 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$ gelten. Das entspricht bei einer Rekombinationslebensdauer von $73 \text{ } \mu\text{s}$ (siehe Abbildung 5.19) einer Injektionsdichte von $\Delta n = 3.7 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-3}$. Aufgrund der zusätzlichen Generationsrate eine Erklärung nach Kapitel 5.3.3.2 nicht ausgeschlossen werden.

Zur Funktionsweise der optischen Haftstellenentleerung wurden weitere Experimente durchgeführt. Dickere Siliziumfilter verringerten die Unterdrückung des Haftstelleneffekts signifikant. Schließlich wurde ein monochromatischer Laser mit einer Wellenlänge von 1550 nm auf eine Probenstelle mit hoher Haftstellendichte fokussiert, um eine von Rest-Generationslicht freie Bestrahlung sicherzustellen. Da kein messbarer Unterschied zwischen einer Lebensdauermessung mit dieser und ohne diese zusätzliche Bestrahlung auszumachen war, wird als Erklärung der Unterdrückung des Haftstelleneffekts eine zusätzliche Generationsrate favorisiert. Der Grund für eine nicht messbare Entleerung der Haftstellen kann an sehr kleinen optischen Einfangquerschnitten liegen. Es ist außerdem möglich, dass die Annahme eines gegenüber dem optischen Einfangquerschnitt der Löcher höheren Einfangquerschnitts der Elektronen unzutreffend ist.

Zusammenfassend sind die Ergebnisse der verschiedenen Korrekturen in Abbildung 5.19 beispielhaft für einen Bildpunkt dargestellt.

Abbildung 5.19: Injektionsabhängige CDI-Messungen für einen Bildpunkt ohne (schwarze Punkte) und mit zusätzlicher Beleuchtung (rote Sterne). An die Messdaten wurde das Hornbeck-Haynes-Modell (blaue Linie) angepasst. Die aus dem Hornbeck-Haynes-Modell bestimmte, konstante Rekombinationslebensdauer unter Niedriginjektion von $73 \text{ } \mu\text{s}$ ist ebenfalls eingezeichnet (graue Linie). Mit der „bias-light correction“ korrigierte Messdaten sind mit grünen Dreiecken gekennzeichnet.



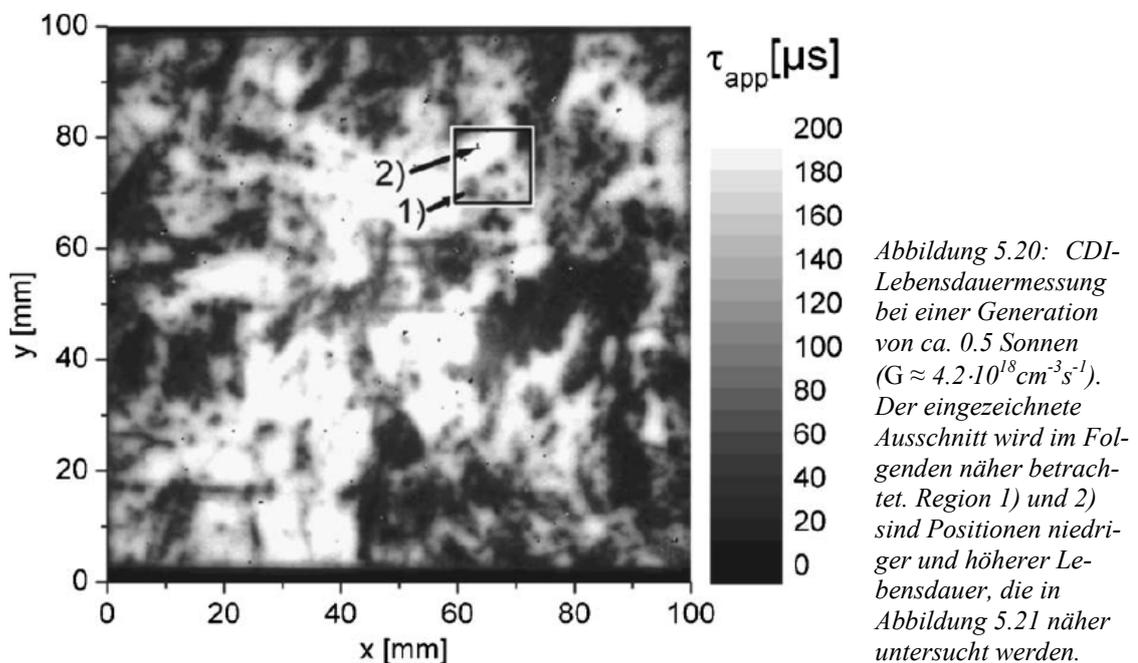
Die Messwerte der scheinbaren Lebensdauer zeigen erwartungsgemäß einen Anstieg bei kleinen Injektionsdichten (schwarze Kreise), die sich gut mit dem Haftstellenmodell (blaue Linie) beschreiben lässt. Die gestrichelte Linie zeigt die als konstant angenommene Rekombinationslebensdauer an. Die mit Hilfe der „bias-light correction“ (grüne Dreiecke) erhaltenen Messwerte stimmen näherungsweise mit der modellierten Rekombinationslebensdauer überein. Die mit Hilfe einer zusätzlichen, konstanten Bestrahlung erhaltenen Messwerte (rote Sterne) stehen ebenfalls mit dem Ergebnis der Modellierung

in Einklang. Der zusätzlichen Beleuchtung in dieser Messung mit einem Beitrag zur Injektionsdichte von $< 3.6 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ wurde Rechnung getragen und es wurden nur Messpunkte berücksichtigt, deren Injektionsdichte signifikant über dieser Grenze liegen.

5.4 Abbildung der Haftstellenverteilung mit Carrier Density Imaging

Im letzten Kapitel wurden Methoden zur Unterdrückung des Haftstelleneffekts auf Rekombinationslebensdauer-Messungen unter Niederinjktionsbedingungen mit dem Ziel einer von Artefakten befreiten CDI-Messung diskutiert. Aus der Verteilung des Haftstelleneffekts alleine lässt sich aber schon vermuten, dass die Messung von Haftstellen eine wertvolle zusätzliche Materialinformation darstellen kann. Im Gegensatz zum letzten Kapitel soll deshalb jetzt der Fokus auf dem Haftstelleneffekt selbst liegen. In den folgenden Kapiteln wird dann auf die Korrelation zu Materialeigenschaften und Solarzellenergebnissen eingegangen und schließlich werden Hinweise zum physikalischen Ursprung des Effekts gegeben.

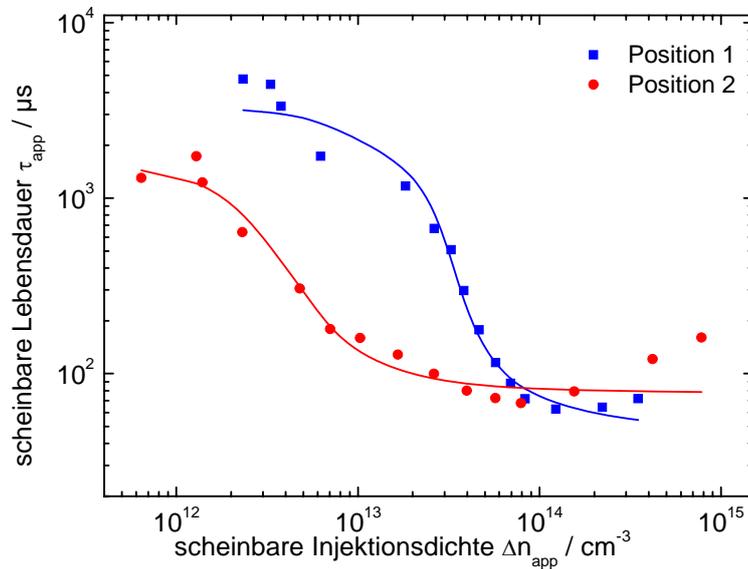
Die Modellierung der Haftstellendichte wird am Beispiel eines SiN-passivierten, multi-kristallinen Siliziumwafers gezeigt (siehe Abbildung 5.20).



Injektionsabhängige CDI-Messungen an zwei Positionen mit unterschiedlicher Lebensdauer werden in Abbildung 5.21 dargestellt. Mit Hilfe des Hornbeck-Haynes-Modells wurde die Haftstellendichte N_T durch Kurvenanpassungen gemäß den Gleichungen

(5.4), (5.13) und (5.14) durchgeführt. Position 1) zeigt in diesem Beispiel eine niedrigere Niederinjektions-Rekombinationslebensdauer von $49 \mu\text{s}$ als Position 2) mit $78 \mu\text{s}$, weist aber eine höhere Haftstellendichte von $N_T = 4.5 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ auf (für Position 2 gilt $N_T = 5.8 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-3}$).

Abbildung 5.21: Injektions-abhängigkeit der Positionen 1) und 2) aus Abbildung 5.20. Mit Hilfe des Hornbeck-Haynes Modells können die Messdaten angepasst werden. Das Modell liefert für die beiden Punkte unterschiedliche Haftstellendichten. Die angepassten Parameter im Einzelnen sind:
 $N_{T,1} = 4.51 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$;
 $(\tau/\tau_g)_1 = 0.0107$; $\tau_{\text{rec},1} = 49 \mu\text{s}$;
 $N_{T,2} = 5.79 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-3}$;
 $(\tau/\tau_g)_2 = 0.0083$; $\tau_{\text{rec},2} = 78 \mu\text{s}$.



Automatisiert lässt sich die Haftstellendichte orts aufgelöst aus den in diesem Beispiel 15 CDI-Messungen bei unterschiedlicher Beleuchtung extrahieren. Die modellierte Haftstellendichteverteilung ist in Abbildung 5.22 gezeigt.

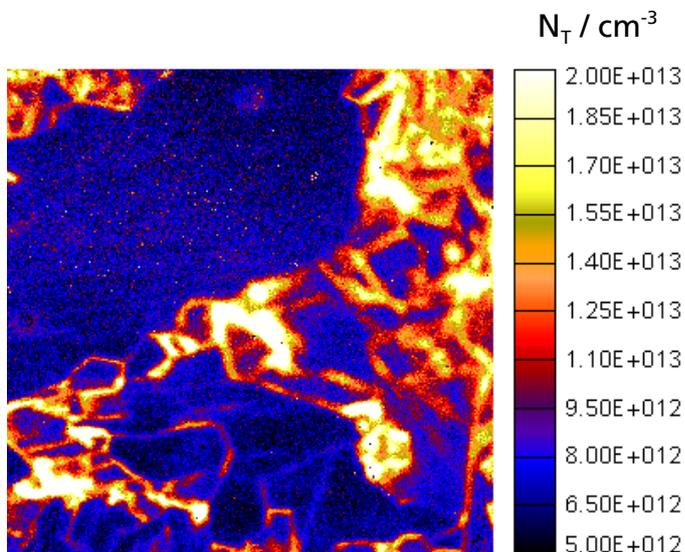


Abbildung 5.22: Ortsaufgelöste Darstellung der Haftstellendichte aus einer für jeden Bildpunkt automatisierten Kurvenanpassung nach dem Hornbeck-Haynes-Modell. Der gezeigte Ausschnitt hat eine Größe von $12 \times 12 \text{ mm}^2$ und eine Auflösung von etwa $50 \mu\text{m}$.

Der optische Vergleich mit dieser Messung und der Kornstruktur der Probe zeigt, dass der größere Bereich niedriger Haftstellendichte im oberen, linken Teil des Bildes einem Korn zugeordnet werden kann. Die Bereiche erhöhter Haftstellendichte (gelbe Bereiche) sind aber mit Korngrenzen nicht eindeutig verknüpft. Eine detailliertere Betrachtung hierzu wird später vorgenommen. Zunächst sei noch zum Vergleich die modellierte

Niederinjektions-Lebensdauerverteilung dargestellt (Abbildung 5.23). In einigen Bereichen mit erhöhter Haftstellendichte lässt sich eine reduzierte Rekombinationslebensdauer feststellen. Diese Antikorrelation gilt aber nicht für alle Bereiche der Probe.

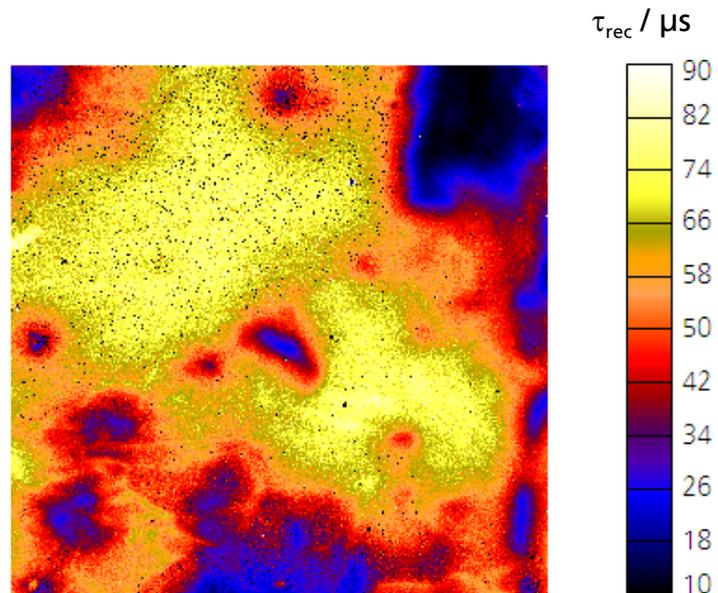


Abbildung 5.23: Modellierter Rekombinationslebensdauer des untersuchten Probenausschnitts nach Kapitel 5.3.1.

Die benötigte Zeit zur Bestimmung absoluter Haftstellendichteverteilungen liegt auf Grund der Anzahl benötigter CDI-Messungen im Stundenbereich. Für einige Betrachtungen ist ein qualitatives Bild der Haftstellenverteilung ausreichend. In diesem Fall genügt es, eine CDI-Messung bei sehr schwacher Injektionsdichte durchzuführen. Dies lässt sich z.B. durch eine sehr schwach eingestellte Laserbestrahlung erreichen. Für die Messung unpassivierter Proben ist die Niederinjektionsbedingung wegen der hohen Oberflächenrekombinations-Geschwindigkeit typischerweise auch bei normaler Bestrahlung (1 Sonne) erreicht. Die Oberflächenpassivierung selbst ist nicht die bestimmende Ursache für die qualitative Verteilung der gemessenen Haftstellen: In Abbildung 5.24 sind zum Beleg dieser Aussage zwei CDI-Messungen unter Niederinjektionsbedingungen gezeigt. Die links gezeigte Messung wurde mit einer passivierenden SiN-Schicht gemessen, während die rechts gezeigte Messung nach Entfernen der Passivierungsschicht erfolgte. Auf Grund einer erhöhten effektiven Lebensdauer zeigt die linke Messung zwar geringfügig höhere Werte für die scheinbare Lebensdauer, die Struktur der Verteilung ändert sich jedoch erwartungsgemäß nicht.

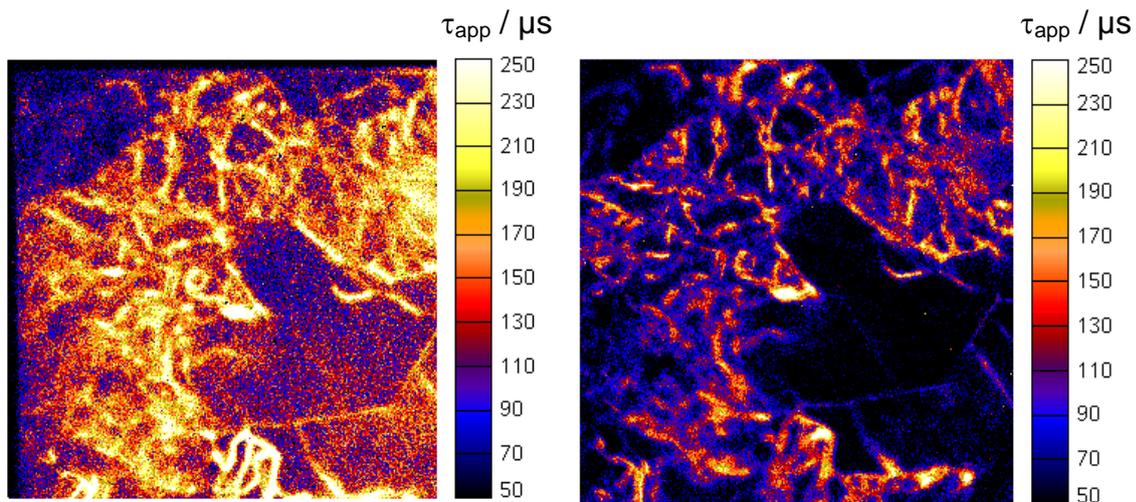


Abbildung 5.24: CDI-Messung unter Niederinjektionsbedingungen an einer zur Oberflächenpassivierung mit Siliziumnitrid beschichteten Probe (links) und CDI-Messung an derselben Probe nach Entfernen der Passivierung. Die qualitative Verteilung ändert sich erwartungsgemäß nicht.

Von besonderem technologischem Interesse ist die Detektion von Haftstellen an Ausgangsmaterial, d.h. unpassivierten Wafern mit infolge des Sägeprozesses rauen Oberflächen. Ortsaufgelöste Methoden zur Messungen der Rekombinationslebensdauer sind in diesem frühen Stadium im Allgemeinen auf Grund hoher Oberflächenrekombination nicht möglich, wohingegen die Haftstellenverteilung mit Hilfe einer CDI-Messung zugänglich ist. In Abbildung 5.25 ist ein Vergleich von CDI-Messungen an Ausgangsmaterial zur Detektion der Haftstellenverteilung für verschiedene Messzeiten gezeigt.

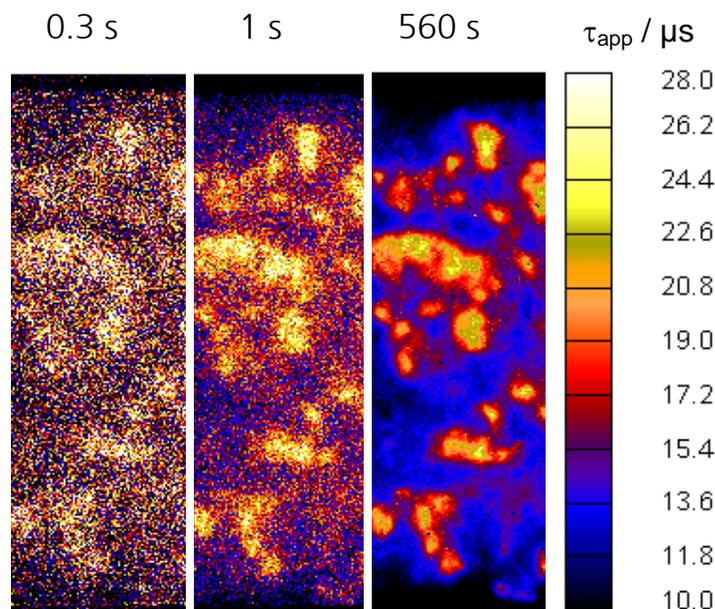


Abbildung 5.25: Vergleich von CDI-Messungen an Ausgangsmaterial zur Haftstellendetektion für verschiedene Messzeiten. Die erreichbare Ortsauflösung ist durch die Rauheit der Oberfläche limitiert.

Je nach Haftstellendichte kann eine kurze Messzeit von etwa 1 s zur Detektion ausreichend sein. Die Ortsauflösung ist auf Grund optischer Effekte an den rauen Oberflächen reduziert. Details zum Einfluss rauer Probenoberflächen auf das Messsignal finden sich in Kapitel 6.

5.5 Korrelation von Haftstellen und Solarzellenergebnissen

Dieses Kapitel beschäftigt sich in einer zunächst empirischen Weise mit der Verbindung zwischen der mit der CDI-Methode messbaren Haftstellendichteverteilungen und der aus den untersuchten Materialien hergestellten Solarzellen. Zur orts aufgelösten Messung des erreichten Solarzellenergebnisses bietet sich insbesondere das *Spectrally Resolved Light-Beam Induced Current* (SR-LBIC)-Verfahren (siehe Kapitel 2.4) an. Die mit diesem Verfahren bestimmbare Diffusionslängenverteilung in einer prozessierten Solarzelle ist in Abbildung 5.26 einer CDI-Messung an einem Parallelwafer gegenübergestellt. Die Höhe der gemessenen, scheinbaren Lebensdauer von teilweise über 20 μs zeigt an, dass die Messung durch Haftstellen dominant beeinflusst wird. Die effektive Rekombinationslebensdauer ist durch die hohen Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeiten bestimmt und beträgt bei einer Probendicke von ca. 300 μm nicht mehr als etwa 3 μs . Es handelt sich bei dem betrachteten Material um blockgegossenes, multikristallines Silizium aus dem Bodenbereich.

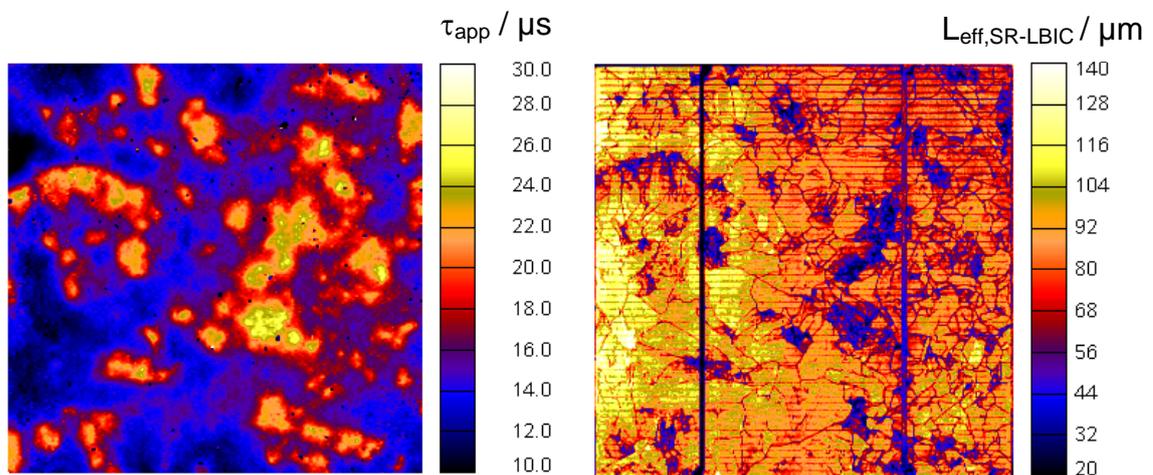


Abbildung 5.26: Mit dem CDI-Verfahren gemessene, qualitative Verteilung der Haftstellendichte an einer multikristallinen, unpassivierten Probe (Ausgangsmaterial, links) und Diffusionslängenverteilung einer auf einer Parallelprobe prozessierten Solarzelle, gemessen mit SR-LBIC (rechts).

Berücksichtigt man die durch die raue Oberfläche reduzierte Ortsauflösung, ist eine hohe Korrelation zwischen Haftstellendichte im Ausgangsmaterial und reduzierter Diffusionslänge erkennbar. Abbildung 5.27 zeigt einen quantitativen Vergleich der beiden Messgrößen für einige Bildpunkte. Im linken Teil der Abbildung ist der Vergleich der

Korrelationen für Material aus verschiedenen Höhen eines Blocks, im rechten Bild der Vergleich mit verschiedenen prozessierten Solarzellen gezeigt. Während die Solarzellen im linken Bild eine Gasphasen-Diffusion bei 875 °C erfahren haben, wurde diese Temperatur im rechten Bild variiert.

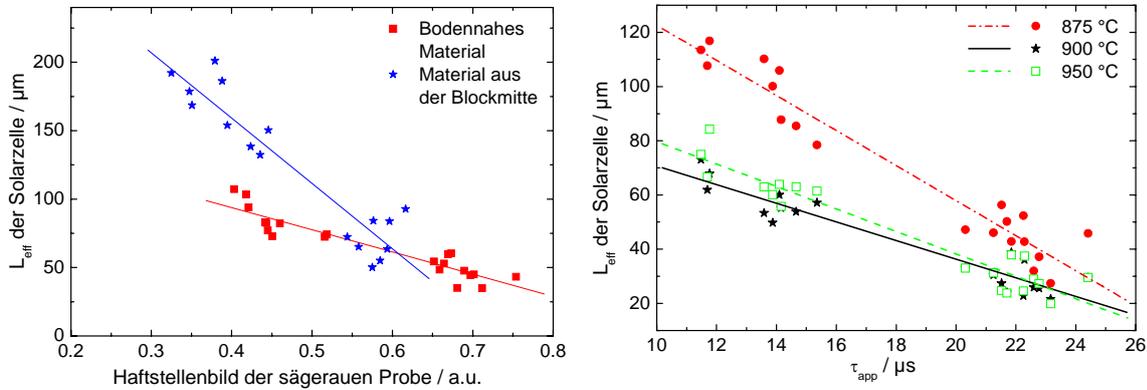


Abbildung 5.27: Punktwiser Vergleich der Abhängigkeit der Diffusionslänge in einer Solarzelle und des Haftstellenbildes des Ausgangsmaterials. Links werden zwei Materialien aus unterschiedlichen Höhen eines Blocks, rechts unterschiedliche Diffusionstemperaturen verglichen.

Es zeigt sich in diesem Beispiel, dass die Korrelation von Material und Prozess abhängt. Allgemein lässt sich aber feststellen, dass Regionen hoher Haftstellendichte eine niedrige Diffusionslänge in der Zelle aufweisen. Bereiche hoher Haftstellendichte korrelieren in diesem Beispiel unabhängig vom untersuchten Material und Prozess mit einer niedrigen Materialqualität.

Für das in Abbildung 5.26 dargestellte Material mit hoher Haftstellendichte lässt sich aus der in Abbildung 5.27 gefundenen Abhängigkeit (rote Kurve) aus der CDI-Messung die Diffusionslängenverteilung in der Solarzelle für jeden Bildpunkt berechnen (Abbildung 5.28).

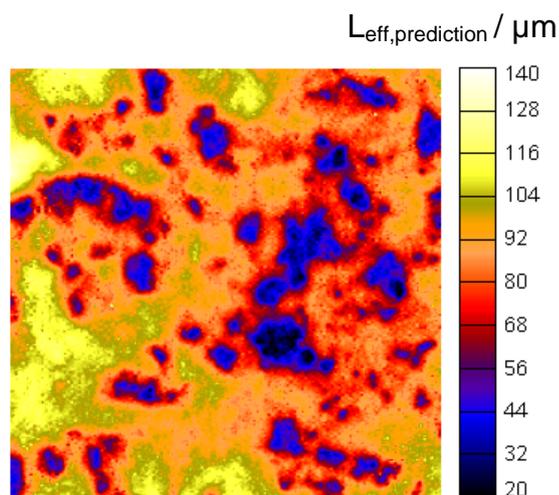


Abbildung 5.28: Ortsaufgelöste Bestimmung der Diffusionslänge aus einer von Haftstellen dominierten CDI-Messung mit Hilfe der Korrelation aus Abbildung 5.27 (links, rote Kurve). Die Übereinstimmung zur Diffusionslängenmessung aus Abbildung 5.26 (rechts) ist für alle Regionen gut.

Die errechneten Diffusionslängen stimmen mit Rücksicht auf die durch raue Oberflächen verminderte Auflösung der CDI-Messung mit der Diffusionslängenmessung an der Solarzelle gut überein.

Eine umfassendere Untersuchung des Einflusses von Haftstellen auf die Solarzelle wurde in Zusammenarbeit mit der Diplomarbeit von Paul Gundel [76] an Proben eines multikristallinen Blocks in Abhängigkeit der Blockhöhe sowie an monokristallinen Proben durchgeführt. Untersuchungsgegenstand war sauerstoffreiches, nach dem Czochralski-Verfahren hergestelltes Material und kontrolliert kontaminiertes Floatzone-Silizium.

5.5.1 Höhenabhängigkeit des Haftstelleneffekts in multikristallinem Silizium

In Abbildung 5.29 sind Mittelwerte injektionsabhängiger CDI-Messungen an Proben desselben multikristallinen Blocks aus verschiedenen Höhen dargestellt. Aus dem Block wurden 590 Wafer mit einer Größe von $125 \times 125 \times 0.27 \text{ mm}^3$ gesägt und von unten her nummeriert. Teilweise zu Solarzellen prozessiert, werden diese im Folgenden mit Ausgangsmaterial ähnlicher Höhe verglichen. An die Messdaten wurde jeweils das Hornbeck-Haynes-Modell angepasst.

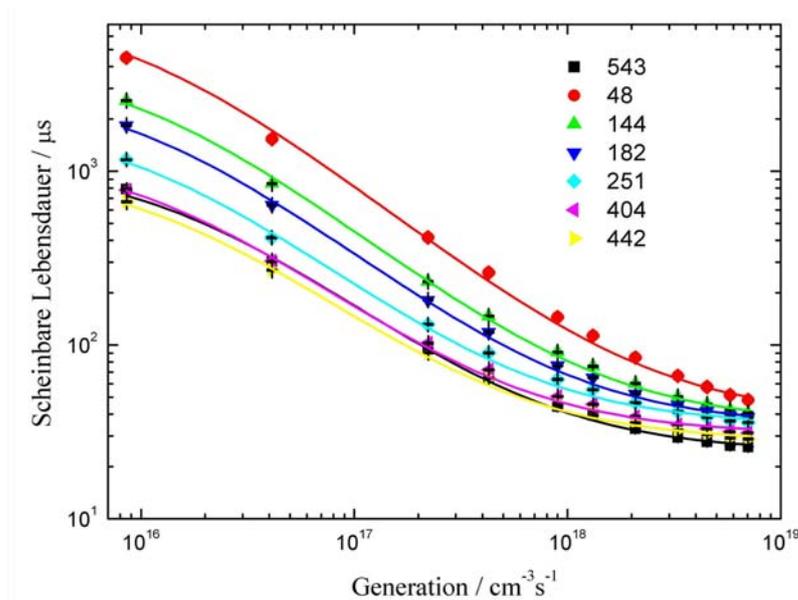
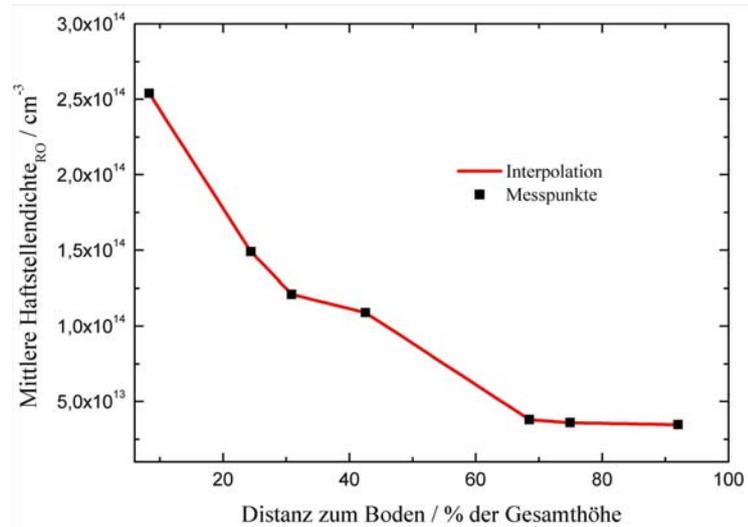


Abbildung 5.29: Mittelwerte injektionsabhängiger CDI-Messungen für Wafer im Ausgangszustand. An die Messdaten wurde für jeden Wafer das Hornbeck-Haynes-Modell angepasst.

Es zeigt sich ein für alle Proben übereinstimmendes modelliertes Energieniveau von $E_T \approx 0.53 \text{ eV}$. Dieser Wert wird im Folgenden für die orts aufgelösten Modellierungen als fest angenommen.

Die aus Abbildung 5.29 ermittelte Haftstellendichte ist, wie in Abbildung 5.30 gezeigt, mit der Blockhöhe korreliert.

Abbildung 5.30: Modellierte gemittelte Haftstellendichte auf multikristallinem Ausgangsmaterial in Abhängigkeit der Blockhöhe. Da die zu Grunde liegenden CDI-Messungen mit rauen Probenoberflächen erfolgten (siehe Text), ist zur Kennzeichnung für die erhöht gemessene Haftstellendichte der Index „RO“ eingeführt.



Auf Grund der rauen Oberflächen der Proben im Ausgangszustand sind die CDI-Messwerte gegenüber glatten Proben erhöht. In Kapitel 6 wird auf diesen Effekt detailliert eingegangen und es werden Möglichkeiten zur Korrektur diskutiert. In diesem Kapitel werden stets Proben gleicher Oberfläche verglichen, die in gleichem Maße von der Erhöhung der Messwerte betroffen sind. Da die den Haftstelleneffekt betreffenden physikalischen Aussagen nicht von dessen Absolutwert abhängen und zudem zur praktischen Anwendung der Haftstellencharakterisierung typischerweise von Proben mit rauen Oberflächen ausgegangen wird, wird auf eine aufwändigere Korrektur der Messwerte verzichtet. Die an rauen Oberflächen ermittelte Haftstellendichte ist deshalb zur Eindeutigkeit mit dem Index „RO“ versehen.

Die ortsaufgelöste Analyse des Materials zeigt eine über die Blockhöhe signifikant verschiedene Abhängigkeit zwischen Materialqualität und Haftstellendichte. Deshalb wird im Folgenden die Korrelation an Material aus dem Boden- und aus dem Kappenbereich untersucht. In Abbildung 5.31 ist für das bodennahe Material ein Vergleich der Haftstellendichte mit der Diffusionslänge einer parallel prozessierten Solarzelle analog zu Abbildung 5.26 gezeigt.

Die Haftstellendichte ist in diesem Fall mit der reziproken Lebensdauer stark korreliert. Die reziproke Lebensdauer ist hierbei ein Maß für die Rekombinationsrate. Unterschiede in der Struktur werden auf den Abstand im Block zurückgeführt. Die geringere Ortsauflösung im Haftstellenbild ist auf den Einfluss der rauen Oberfläche zurückzuführen (siehe Kapitel 6).

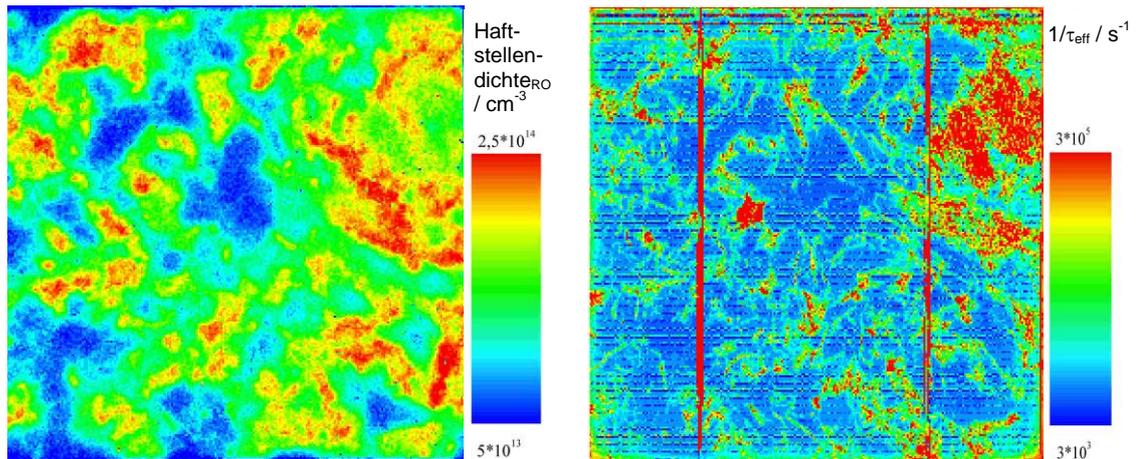


Abbildung 5.31: Haftstellendichte am rauhen Ausgangswafer aus dem Bodenbereich (links) und reziproke Lebensdauer, berechnet aus einer Diffusionslängenmessung an der fertigen Solarzelle (rechts) mit SR-LBIC. Der Abstand der beiden Proben im Block betrug 12 Wafer.

Vergleicht man Haftstellendichte und reziproke Lebensdauer an Material aus dem Kapfenbereich des Blocks (Abbildung 5.32), ergibt sich ein völlig anderes Bild. In Teilen lässt sich weiterhin eine positive Korrelation zwischen beiden Messungen ausmachen (z.B. weiß markierte Bereiche), in anderen Bereichen jedoch ist eine eindeutig negative Korrelation auszumachen (z.B. schwarz markierte Bereiche).

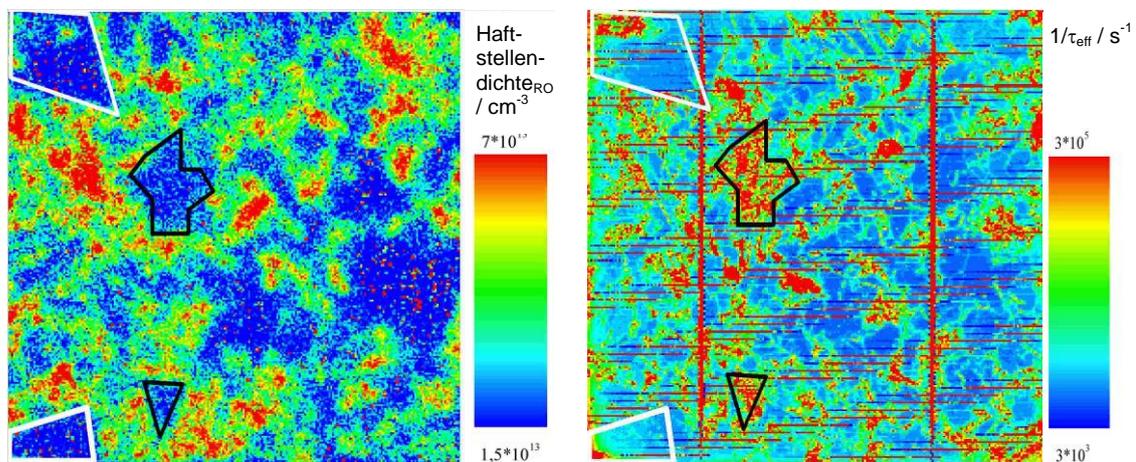


Abbildung 5.32: Haftstellendichte am rauhen Ausgangswafer aus dem Kapfenbereich (links) und reziproke Lebensdauer an der fertigen Solarzelle (rechts). Es handelt sich beim verglichenen Material um direkte Parallelproben.

Ein Maß für die quantitative Beschreibung der höhenabhängigen Korrelation zwischen Haftstellendichte und Diffusionslänge stellt der empirische Korrelationskoeffizient r dar [77]. Aus den Messwerten $N_{T,i}$, $L_{eff,i}$ und deren Mittelwerten $\overline{N_T}$, $\overline{L_{eff}}$ lässt sich so

$$r = \frac{\sum_{i=1}^n (N_{T,i} - \overline{N_T})(L_{eff,i} - \overline{L_{eff}})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (N_{T,i} - \overline{N_T})^2 \sum_{i=1}^n (L_{eff,i} - \overline{L_{eff}})^2}} \quad (5.20)$$

bestimmen. Eine perfekte lineare Korrelation führt zu $r = +1$, eine perfekte lineare inverse Korrelation zu $r = -1$. Unkorrelierte Messdaten resultieren in $r = 0$. In Abbildung 5.33 sind die Messwerte aus Abbildung 5.31 und Abbildung 5.32 für jeden Bildpunkt gegeneinander aufgetragen.

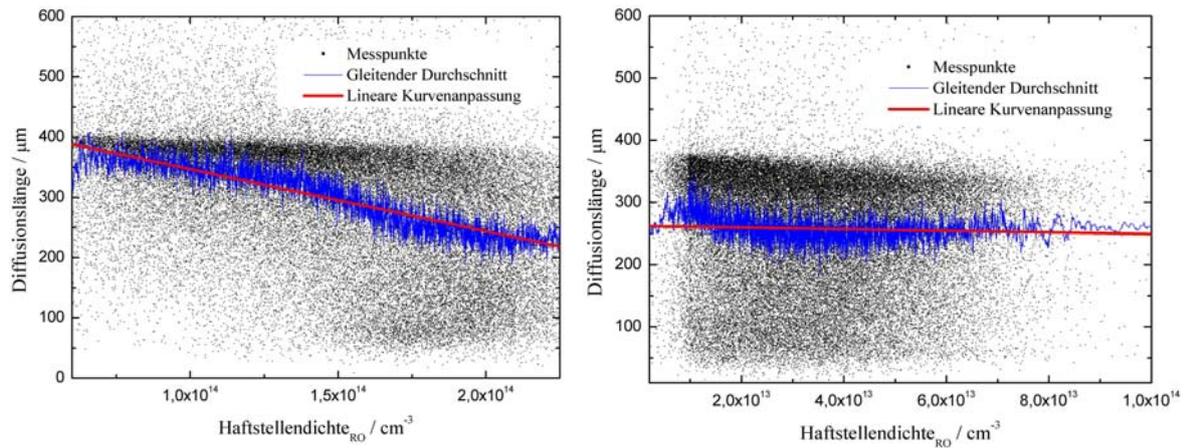


Abbildung 5.33: Auftragung der Diffusionslänge in der Zelle gegen die im Ausgangswafer gemessene Haftstellendichte für den Bodenbereich (links) und den Kappenbereich (rechts) für jeden Bildpunkt. Zur besseren Visualisierung der Abhängigkeit sind zusätzlich der über 50 Messpunkte gleitende Durchschnittswert (blaue Kurve) und eine lineare Kurvenanpassung (rote Gerade) angeben.

Die quantitative Beschreibung der Abhängigkeit der Messwerte vom empirischen Korrelationskoeffizienten ist in Abbildung 5.34 dargestellt. Es ergibt sich ein näherungsweise linearer Verlauf des Korrelationskoeffizienten mit der Blockhöhe. Im oberen Blockbereich führt die Überlagerung von positiver und negativer Korrelation (Abbildung 5.32) zu einem verschwindenden Korrelationskoeffizienten.

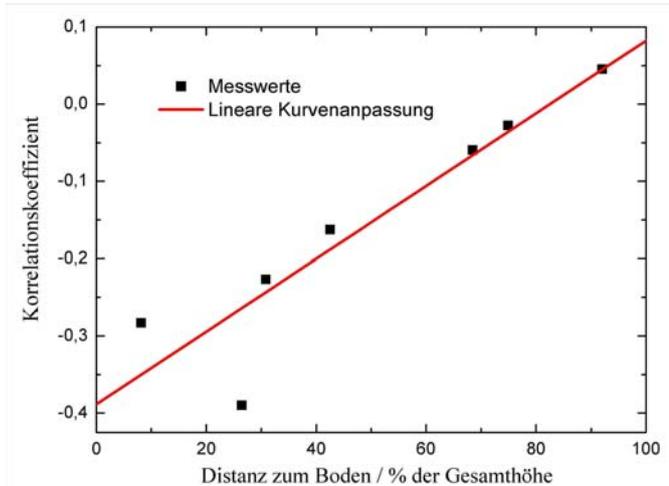


Abbildung 5.34: Verlauf des empirischen Korrelationskoeffizienten für Haftstellendichte und Diffusionslänge in Abhängigkeit der Blockhöhe.

Der Mittelwert der Diffusionslänge lässt sich im Allgemeinen nicht aus der Messung der Haftstellendichte vorhersagen. Die Diffusionslänge ist sowohl im Bodenbereich als auch im Kappenbereich reduziert (Abbildung 5.35), obwohl die Haftstellendichte im Kappenbereich klein ist. Neben Prozessschwankungen werden in diesem Bereich Materialdefekte verantwortlich gemacht, die sich nicht über eine Haftstellensignatur nachweisen lassen.

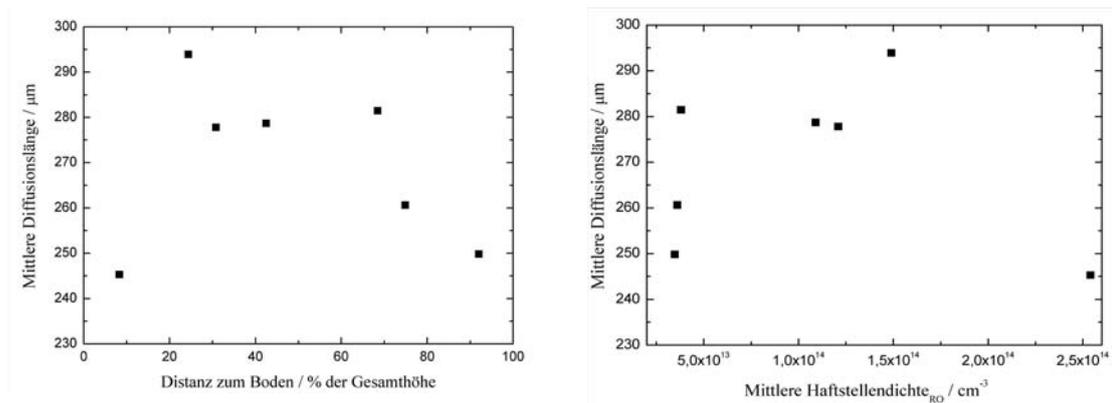


Abbildung 5.35: Vergleich zwischen Diffusionslänge und Blockhöhe (links) bzw. Haftstellendichte (rechts). Boden- und Kappenbereich zeichnen sich durch eine reduzierte mittlere Diffusionslänge aus.

Ein weiteres Beispiel zur Höhenabhängigkeit des Haftstelleneffekts und der Diffusionslänge bietet die Untersuchung einer senkrecht geschnittenen Probe aus dem unteren Teil eines multikristallinen Silizium-Blocks. Es ist hierbei vorteilhaft, dass Prozessschwankungen, die die gesamte Solarzelle betreffen, keinen zusätzlichen Einfluss auf die Relation von Diffusionslänge und Haftstellendichte nehmen. In analoger Weise zu obiger Betrachtung sind die Haftstellendichte im Ausgangsmaterial und die mit SR-LBIC an der Zelle bestimmte, reziproke Lebensdauer dargestellt.

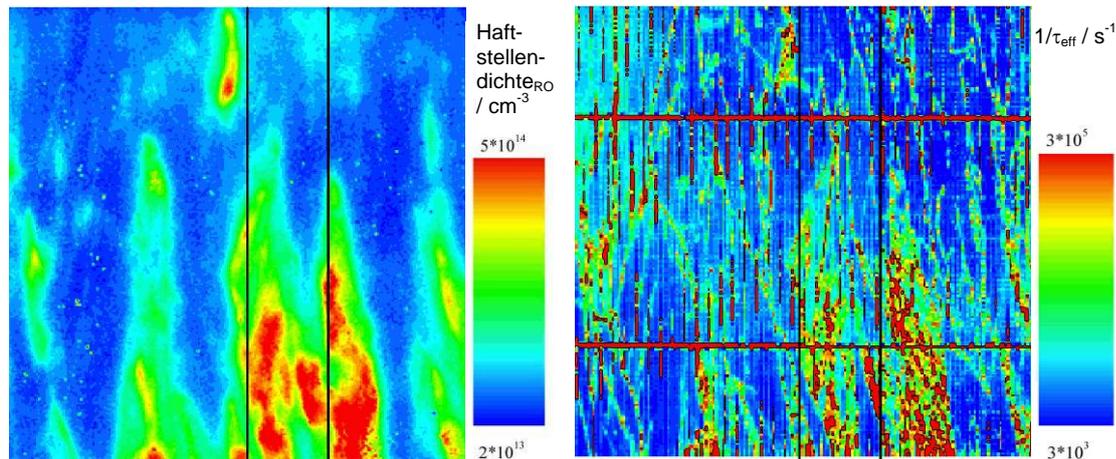
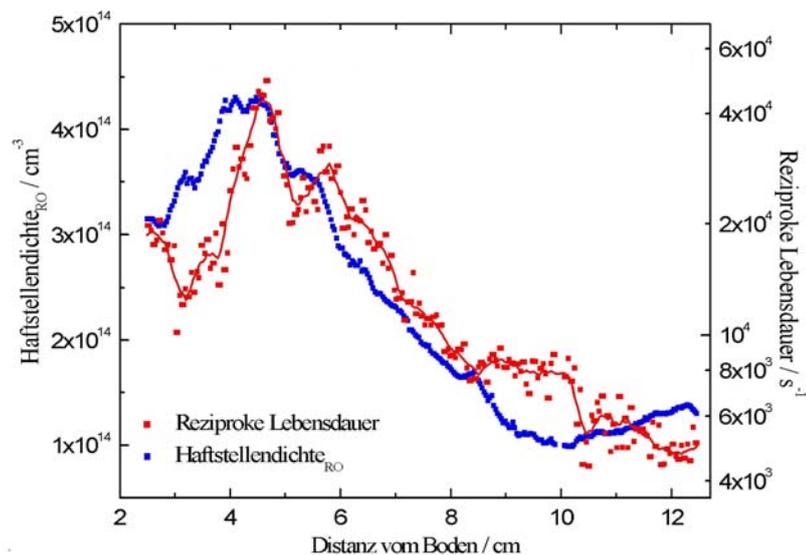


Abbildung 5.36: Haftstellendichte am rauen Ausgangswafer aus dem Kappenbereich (links) und reziproke Lebensdauer an der aus diesem Wafer gefertigten Solarzelle (rechts).

Die Haftstellendichte-Messung wurde an einem sägerauen Ausgangswafer durchgeführt, weshalb die erreichte Ortsauflösung reduziert ist. Deutlich zu sehen ist eine Korrelation der beiden in Abbildung 5.36 gezeigten Messungen im unteren Teil. Im oberen Teil ist die Korrelation weniger eindeutig. Einen quantitativen Vergleich zwischen beiden Messungen als Funktion der Höhe ist in Abbildung 5.37 gezeigt. Die jeweiligen Messwerte sind dabei im Bereich zwischen den in Abbildung 5.36 eingezeichneten, schwarzen Markierungen horizontal gemittelt und gegen die Höhe aufgetragen.

Abbildung 5.37: Vergleich zwischen der Haftstellendichte (blau) und der reziproken Lebensdauer (rot) als Funktion der Distanz vom Blockboden. Insgesamt ergibt sich eine gute Korrelation. Die Korrelation im unteren Bereich sowie im oberen Bereich niedriger Haftstellendichte ist eingeschränkt.



Insgesamt ist die beobachtete Korrelation gut. Sie ist jedoch im Bereich des Blockbodens und im oberen Bereich, der sich durch eine geringe Haftstellendichte auszeichnet, eingeschränkt. Aus dem Vergleich jeder Zeile der Messungen wurde für jede Höhe der Korrelationskoeffizient bestimmt und gegen die Höhe aufgetragen. Es wurde hierbei der gesamte Bereich (innerhalb und außerhalb der Markierung) zur Berechnung herangezogen. Es ist zu erkennen, dass die Korrelation im Bodenbereich sehr hoch ist und mit steigendem Abstand zum Boden abnimmt.

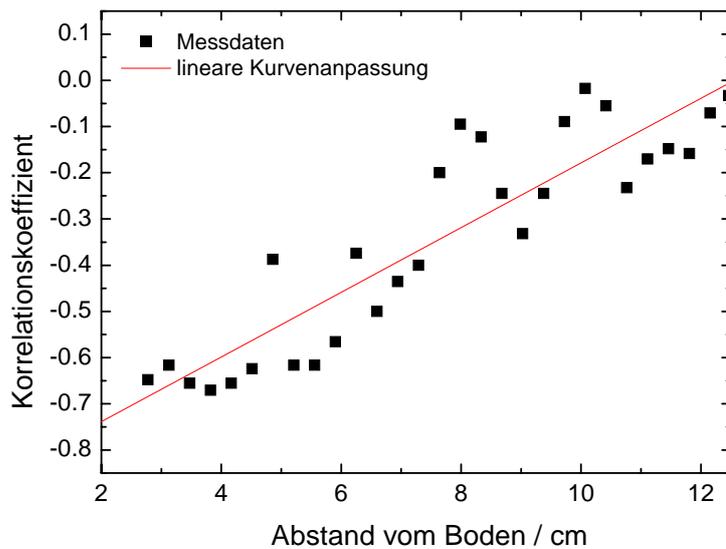


Abbildung 5.38: Verlauf des Korrelationskoeffizienten zwischen Haftstellendichte und Lebensdauer als Funktion des Abstandes zum Boden. Während der Korrelationskoeffizient in Bodennähe hohe negative Werte annimmt, sinkt dessen Betrag zu größeren Abständen.

Entsprechend dieser Beobachtungen ist der Betrag der Korrelation zwischen Materialqualität und Haftstellendichte besonders für hohe Haftstellendichten groß. Die Abhängigkeit des Korrelationskoeffizienten von der Haftstellendichte ist für die betrachtete Probe in Abbildung 5.39 dargestellt.

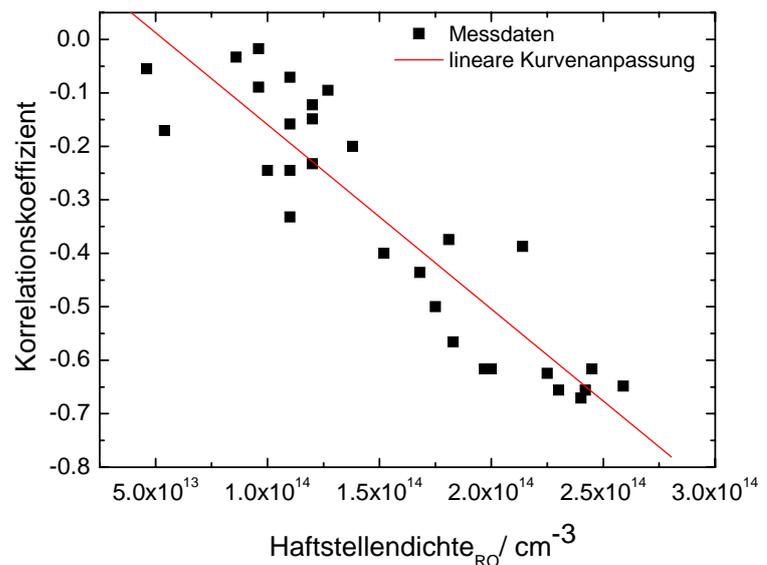
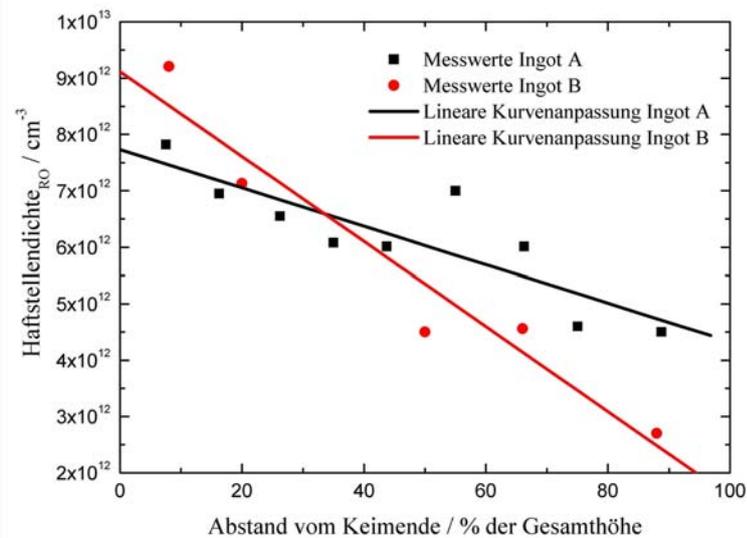


Abbildung 5.39: Abhängigkeit des Korrelationskoeffizienten zwischen Materialqualität und Haftstellendichte vom Absolutwert der Haftstellendichte.

5.5.2 Höhenabhängige Haftstellendichte an Czochralski-Silizium

Die Haftstellendichte von Gallium-dotiertem Czochralski-Silizium wurde an zwei verschiedenen Kristallstäben untersucht. Es wurden injektionsabhängige CDI-Messungen an regelmäßig über die Höhe verteilten Wafern gemacht und die Haftstellendichte bestimmt. Abbildung 5.40 fasst die Ergebnisse dieser Untersuchung zusammen. In beiden Fällen ist eine Abnahme der Haftstellendichte mit dem Abstand zum Keimende zu verzeichnen.

Abbildung 5.40: Gemittelte Haftstellendichte als Funktion des Abstandes vom Keimende zweier Gallium-dotierter Cz-Kristallstäbe. In beiden Fällen ist eine Abnahme der Haftstellendichte zu verzeichnen.



Zusätzlich zur Haftstellendichte wurde die Konzentration interstitieller Sauerstoffatome im Material mit FTIR [78] gemessen. Auf Grund des Segregationskoeffizienten für Sauerstoff in Silizium von 1.25 [79] hängt der Sauerstoffgehalt typischerweise von der Höhe im Stab ab. In Abbildung 5.41 ist dargestellt, wie die Haftstellendichte mit der interstitiellen Sauerstoffkonzentration korreliert.

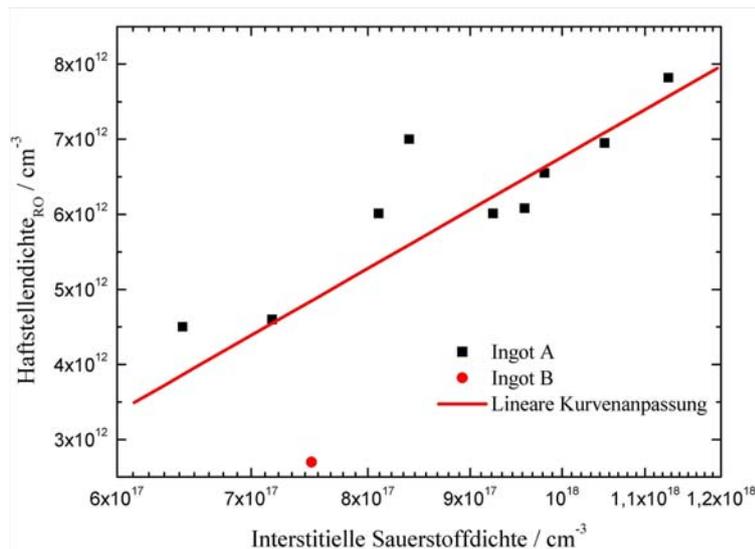


Abbildung 5.41: Haftstellendichte als Funktion der Dichte interstitiellen Sauerstoffs.

Es zeigt sich, dass die Haftstellendichte mit der Sauerstoffkonzentration signifikant steigt. Näherungsweise ergibt sich ein linearer Verlauf. Ein analoges Experiment mit Bor-dotierten Czochralski-Wafern ergab ein weniger eindeutiges Bild. Die zur Verfügung stehenden Proben stammten aus unterschiedlichen Stäben und konnten deshalb nicht direkt mit der Höhe korreliert werden. Die Abhängigkeit von der interstitiellen Sauerstoffdichte scheint zunächst ebenfalls schwach (siehe Abbildung 5.42).

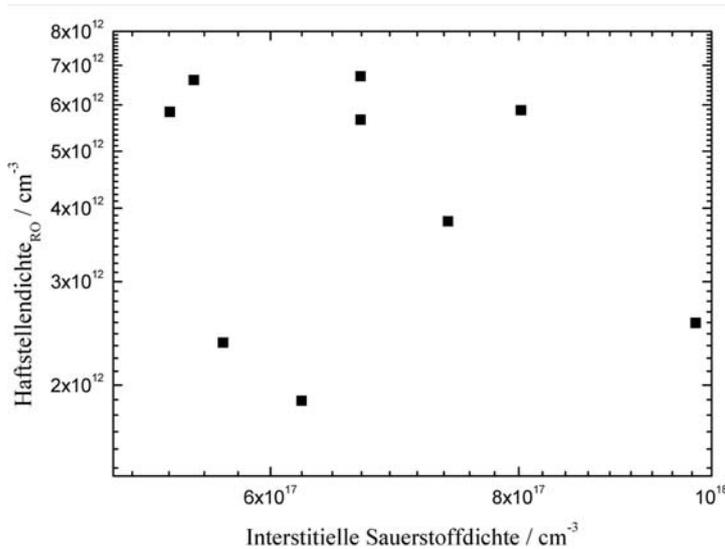


Abbildung 5.42: Abhängigkeit der Haftstellendichte von der interstitiellen Sauerstoffdichte bei Bor-dotierten Cz-Wafern aus unterschiedlichen Stäben gleicher Herstellungsart. Im Gegensatz zum Experiment mit Gallium-Dotierung ist zunächst keine Korrelation erkennbar.

5.5.3 Haftstellendichte an multikristallinem und Floatzone-Silizium mit kontrollierter Kontamination einzelner Verunreinigungen

Um den Einfluss metallischer Verunreinigungen auf die Haftstellendichte zu untersuchen, wurden injektionsabhängige Messungen an absichtlich kontaminiertem mono- und multikristallinem Silizium durchgeführt. Eisen, Molybdän, und Titan standen als Verunreinigungen für die Analyse zur Verfügung. In Abbildung 5.43 ist die aus injektionsabhängigen CDI-Messungen bestimmte, integrale Haftstellendichte gegen die Konzentration der verschiedenen, in die Schmelze eingebrachten Verunreinigungen aufgetragen. Die mit Eisen und Molybdän verunreinigten Proben wurden zur Reduzierung der Spannungen im Material einem Temperaturschritt unterzogen und anschließend nochmals vermessen. Eine Referenzmessung an hochreinem, multikristallinem Silizium ergab eine integrale Haftstellendichte von $< 2 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-3}$.

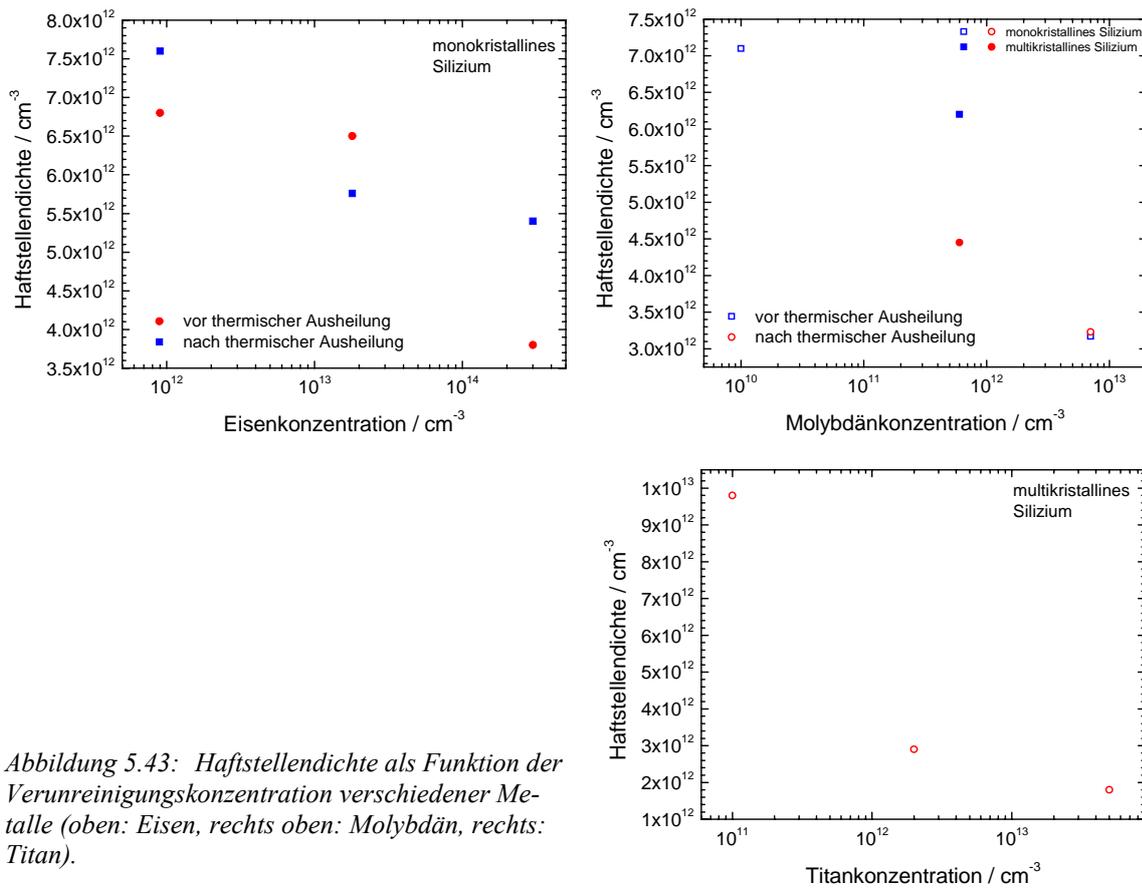


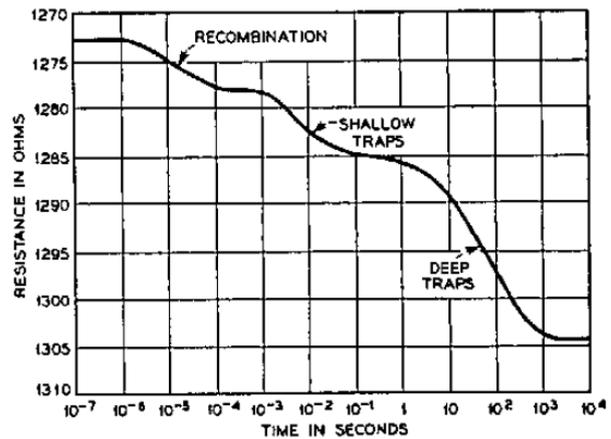
Abbildung 5.43: Haftstellendichte als Funktion der Verunreinigungskonzentration verschiedener Metalle (oben: Eisen, rechts oben: Molybdän, rechts: Titan).

5.6 Physikalischer Ursprung des Haftstelleneffekts

5.6.1 Bisherige Ergebnisse

Hornbeck und Haynes [65] untersuchten die Zeitabhängigkeit der Leitfähigkeitsänderung in einem Siliziumstab nach dem Abschalten einer starken Beleuchtungsquelle. Zwei unterschiedliche Haftstellenniveaus wurden gefunden. Die von ihnen gefundenen Zeitkonstanten zur Entleerung der Haftstellenniveaus lagen bei 10^{-2} s für das flache Haftstellenniveau und 260 s für das tiefere Niveau (siehe Abbildung 5.44).

Abbildung 5.44: Zeitabhängige Messung des Widerstandes eines Siliziumstabs nach Abschalten der Beleuchtungsquelle. Neben der Rekombination ist die Entleerung der Haftstellen zu sehen. Der Kurve werden zwei verschiedene Haftstellenniveaus zugeordnet. Aus [65].



Im Gegensatz zu dieser Beobachtung ergaben Untersuchungen in [73] Zeitkonstanten kürzer als 2.2 ms. Zu diesem Ergebnis führten Untersuchungen mit dem QSSPC-Verfahren mit unterschiedlichen Abklingzeiten der Beleuchtung.

In weiteren Arbeiten von D. Macdonald [71-73, 80] wurde die Haftstellentheorie von Hornbeck und Haynes auf Solarsilizium in nicht ortsaufgelöster Form angewandt. Die Messungen stützten sich dabei auf Ergebnisse des QSSPC-Verfahrens. Außer der qualitativen Bestätigung des Modells sowie der Extraktion der entsprechenden Parameter gelang es in [71], die mittlere Haftstellendichte mit der mittleren Versetzungsdichte zu korrelieren. Ein Auszug dieser Veröffentlichung ist in Abbildung 5.45 dargestellt. Eine weitere Untersuchung lieferte eine Korrelation zwischen Bor-Basisdotierung und Haftstellendichte in absichtlich kontaminiertem Floatzone-Silizium [80] (gleiche Abbildung). In unkontaminiertem Floatzone-Silizium ist hingegen keine Haftstellendichte detektierbar.

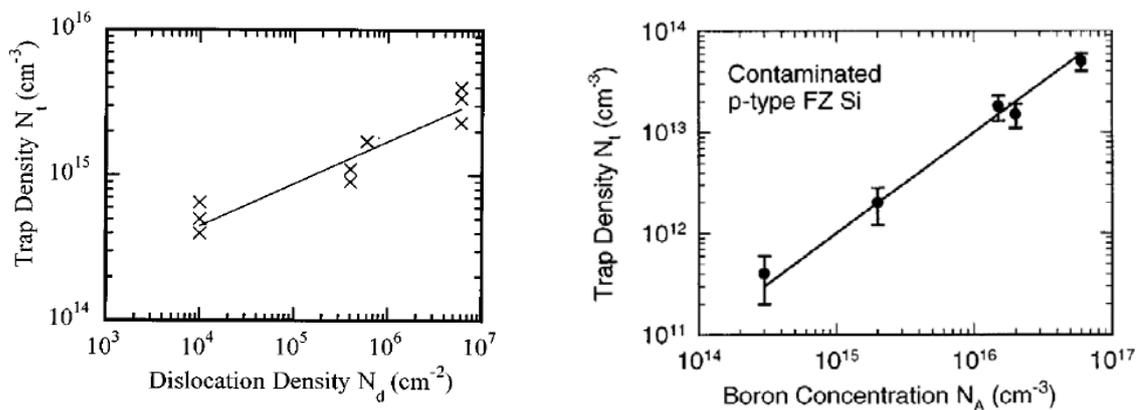


Abbildung 5.45: Korrelation zwischen mittlerer Haftstellendichte und mittlerer Versetzungsdichte in multikristallinem Silizium (links, aus [71]) sowie Korrelation zwischen Haftstellendichte und Bor-Basisdotierung in absichtlich kontaminiertem Floatzone-Silizium (rechts, aus [80]). Die Messungen wurden mit dem QSSPC-Verfahren aufgenommen.

D. Macdonald und A. Cuevas untersuchten den Ursprung des Haftstelleneffekts mit Hilfe von Getterexperimenten¹ [72]. Sie postulierten zwei unterschiedliche Formen von Haftstellen. Eine Form ist sensitiv auf den Getterprozess und wird mit Verunreinigungen im Zusammenspiel mit Bor in Verbindung gebracht, die andere ist mit der Versetzungsdichte korreliert.

Schmidt et al. [81] verglichen mit der QSSPC-Methode bestimmte Haftstellendichten an Czochralski-Silizium mit der interstitiellen Sauerstoffkonzentration und der Dotierung (Bor und Gallium). Neben einer Korrelation der interstitiellen Sauerstoffkonzentration und der Haftstellendichte in Cz-Silizium fanden die Autoren in beiden Fällen eine positive Korrelation zur Konzentration der Dotieratome.

Dekkers et al. [82] zeigten eine Korrelation der Haftstellendichte und der Wasserstoffpassivierung. Bei diesem Verfahren werden die Wafer mit einer wasserstoffreichen SiN-Passivierungsschicht versehen, deren Wasserstoffgehalt in einem kurzen Temperaturschritt eingetrieben wird. In diesen Experimenten sank die beobachtete Haftstellendichte mit zunehmendem Wasserstoffeintrag. Da durch die Wasserstoffpassivierung die Rekombinationslebensdauer erhöht wurde, vermuteten die Autoren, dass der für die Haftstellendichte sowie für die reduzierte Lebensdauer verantwortliche Defekt derselbe ist.

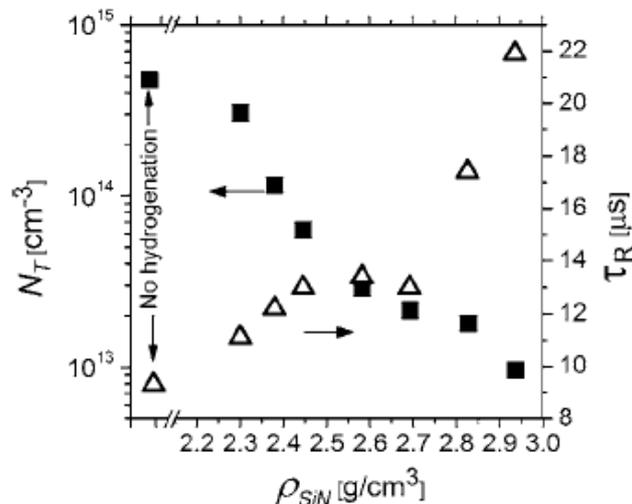


Abbildung 5.46: Abhängigkeit der Haftstellendichte und der Rekombinationslebensdauer von der Dichte der zur Wasserstoffpassivierung von multikristallinen Siliziumwafern verwendeten SiN-Passivierungsschicht. Aus [82].

¹ Als Gettern wird ein Material-Verbesserungsprozess bezeichnet, der typischerweise bei erhöhter Temperatur stattfindet. Dabei können Verunreinigungen aus dem Material entfernt werden (externes Gettern) oder im Material in Getterzentren gesammelt werden, um die Schädlichkeit der einzelnen Verunreinigungen zu reduzieren (internes Gettern).

5.6.2 Korrelation der Verteilungen von Haftstellen- und Versetzungsdichte

Zur Untersuchung des Ursprungs der Haftstellendichte wurde die Korrelation zwischen dieser und der Versetzungsdichteverteilung näher untersucht. Dabei konnten die integralen Ergebnisse von Macdonald (Abbildung 5.45) im Rahmen dieser Arbeit mit Messungen hoher Ortsauflösung für bodennahes Material bestätigt werden: In Abbildung 5.47 ist ein Vergleich zwischen einer Haftstellendichte-Messung mittels CDI und einer Versetzungsdichtemessung mit dem *Etch Pit Density* (EPD)-Verfahren zu sehen. Bei letzterem Verfahren wird eine polierte Probenoberfläche mit einer anisotrop wirkenden Ätze behandelt, die Material bevorzugt an Stellen mit Kristallfehlern, insbesondere Versetzungen, abträgt. An diesen Stellen entstehen Ätzgrübchen, die mit Hilfe eines Lichtmikroskopes auf einer Fläche von $50 \times 50 \mu\text{m}^2$ automatisch ausgezählt werden. Diese Anzahl wiederum ist als Messwert im rechten Bild der Abbildung 5.47 mit einer Ortsauflösung von $50 \mu\text{m}$ logarithmisch dargestellt.

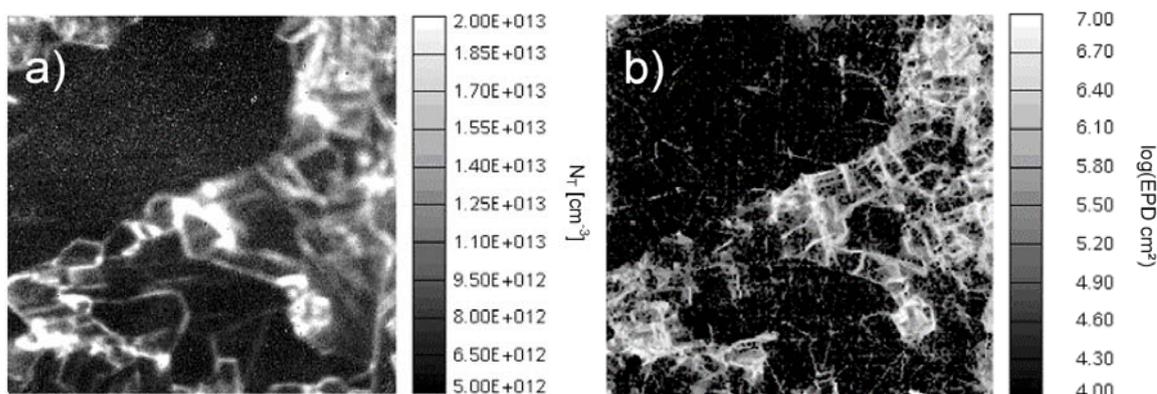


Abbildung 5.47: Haftstellendichte- (a) und Versetzungsdichte-Messung (b) einer $12 \times 12 \text{ mm}^2$ großen, multikristallinen Siliziumprobe aus bodennahem Standard-Industriematerial.

Es besteht in dieser Probe eine gute Übereinstimmung zwischen Regionen erhöhter Haftstellendichte und solchen hoher Versetzungsdichte.

Die Beziehung zwischen Haftstellendichte und Kristalldefektdichte wurde für die in Abbildung 5.31 und Abbildung 5.32 dargestellten Proben untersucht. In diesem Fall wurde zur Messung der qualitativen Kristalldefektdichteverteilung eine im Vergleich zum aufwändigen EPD-Verfahren einfachere Methode gewählt, die auch Analysen an größeren Proben zulässt: Die Probe wird nach einer Glanzätze oder einer Politur mit einer anisotropen Ätze behandelt (Secco-Ätze), die die Oberfläche insbesondere in Bereichen erhöhter Defektdichte aufraut. Daraufhin wird mit dem CDI-Aufbau ein Bild der Infrarotemission aufgenommen. An Stellen erhöhter Oberflächenrauheit ist die IR-Emission erhöht (siehe Kapitel 6). In Abbildung 5.48 und Abbildung 5.49 sind die Ergebnisse der Untersuchung gezeigt. Im untersuchten bodennahen Material (Abbildung 5.48) ist eine hohe Korrelation zwischen Haftstellen und Kristalldefekten zu verzeichnen, wohingegen bei Material aus dem Kappenbereich Gebiete hoher Kristalldefekt-

dichte, aber kleiner Haftstellendichte auszumachen sind (Abbildung 5.49). Insgesamt ist die Haftstellendichte im Kappenbereich signifikant kleiner als im betrachteten Bodenmaterial.

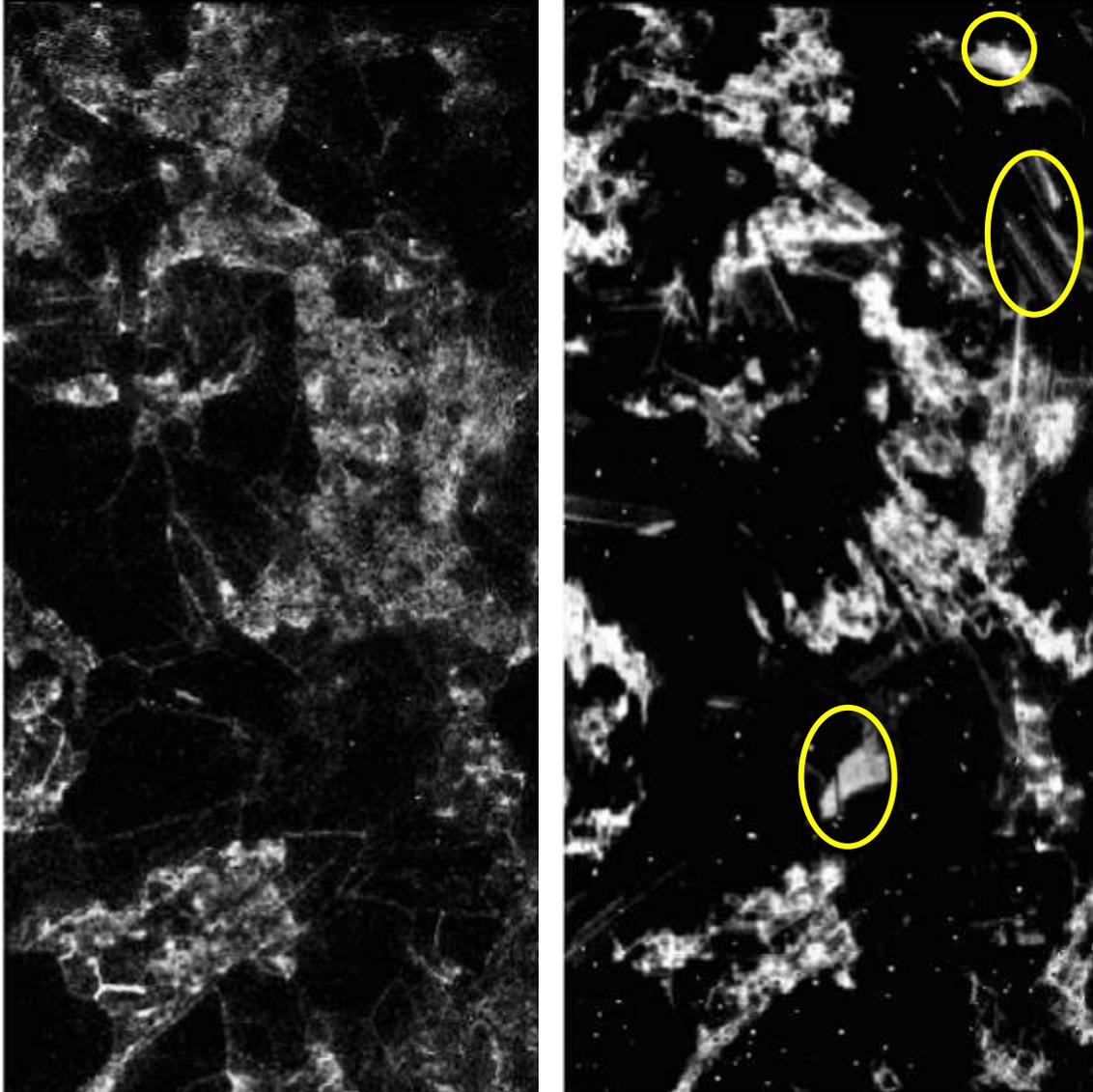


Abbildung 5.48: Qualitative Haftstellenverteilung (links) und qualitative Kristalldefektdichteverteilung (rechts) eines Ausschnitts des in Abbildung 5.31 dargestellten bodennahen Wafers. Die gelb markierten Bereiche im rechten Bild zeichnen sich durch eine hohe Dichte von Zwillingskorngrenzen aus. Diese Bereiche korrelieren nicht mit der Haftstellendichte. Die im Haftstellenbild sichtbaren Korngrenzen sind in der Kristalldefektdichteverteilung auf Grund der geringen Sensitivität nicht zu sehen.

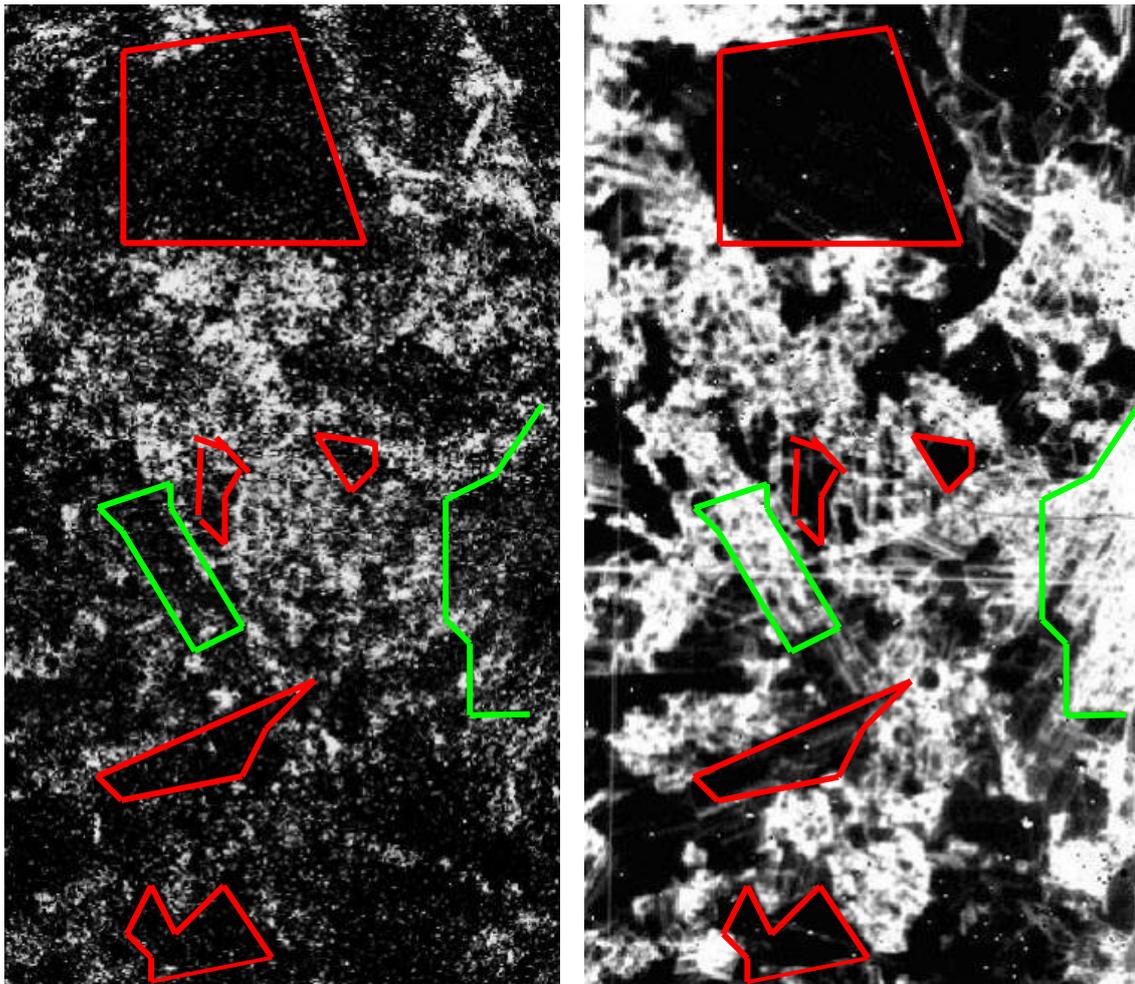


Abbildung 5.49: Vergleich zwischen Haftstellenverteilung (links) und Kristalldefektdichteverteilung (rechts) aus dem in Abbildung 5.32 dargestellten kappennahen Wafer. Insgesamt ist die Haftstellendichte signifikant kleiner als in Abbildung 5.48. Wie in jener Abbildung sind Bereiche erhöhter Haftstellendichte mit Bereichen erhöhter Kristalldefektdichte korreliert. Es existieren jedoch Bereiche mit hoher Versetzungsdichte, die keine erhöhte Haftstellendichte aufweisen (grüne Markierungen).

Die Beobachtungen zeigen, dass im betrachteten multikristallinen Standard-Siliziummaterial unterschiedlicher industrieller Hersteller die Kristalldefektdichte eine wichtige Rolle in der Ausbildung von Haftstellenniveaus spielt. Der Haftstelleneffekt kann umgekehrt jedoch nicht allein durch Kristalldefekte erklärt werden. Im folgenden Kapitel wird deshalb die Rolle von Kristallverunreinigungen zur Ausbildung von Haftstellenniveaus untersucht.

5.6.3 Korrelation der Haftstellendichte mit Verunreinigungen

5.6.3.1 Verunreinigung mit Sauerstoff

Für die untersuchten multikristallinen und nach dem Czochralski-Verfahren gezogenen monokristallinen, Gallium-dotierten Materialien ist der Haftstelleneffekt besonders in den Bereichen hoch, die bei der Kristallzucht zuerst erstarren. Diese Beobachtung legt einen Zusammenhang des Haftstelleneffekts mit einer Verunreinigung nahe, deren Seg-

regationskoeffizient¹ größer als eins ist. Die einzige bekannte solche Verunreinigung, die in messbaren Konzentrationen vorliegt, ist Sauerstoff mit einem Segregationskoeffizienten von $k = 1.25$. Für andere in Silizium detektierbare Verunreinigungen, insbesondere für Metalle, gilt $k < 1$. Einige Werte für den Segregationskoeffizienten typischer Fremdstoffe in Silizium können der Tabelle in Abbildung 5.50 entnommen werden [79].

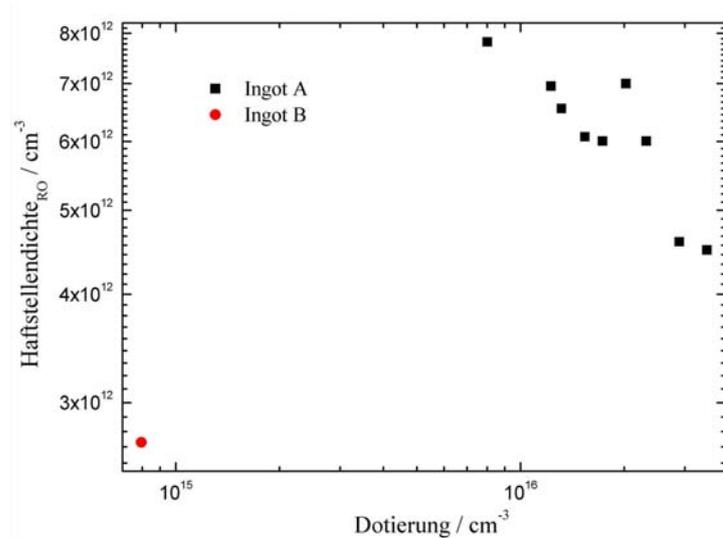
Material	Segregationskoeffizient	Material	Segregationskoeffizient
Al	0,002	As	0,3
Au	0,0025	B	0,8
C	0,07	Co	$8 \cdot 10^{-6}$
Cr	$< 10^{-8}$	Cu	$4 \cdot 10^{-4}$
Fe	$8 \cdot 10^{-6}$	Ga	0,008
Ge	0,33	Mg	$8 \cdot 10^{-6}$
Mn	$\sim 10^{-5}$	N	$\sim 10^{-7}$
Na	0,00165	Ni	$8 \cdot 10^{-6}$
O	1,25	P	0,35
S	10^{-5}	Sn	0,016

Abbildung 5.50: Segregationskoeffizienten für typische Fremdstoffe in Silizium [79]. Sauerstoff hat die Besonderheit eines Segregationskoeffizienten, der größer als 1 ist.

Insbesondere die Haftstellenuntersuchungen an sauerstoffreichem Czochralski-Silizium in Kapitel 5.5.2 legen einen funktionellen Zusammenhang mit der interstitiellen Sauerstoffkonzentration nahe. In Abbildung 5.41 ist für Gallium-dotiertes Czochralski-Silizium eine eindeutige Korrelation festzustellen. Neben einem Einfluss von Sauerstoff auf die Haftstellendichte kommt eine Variation der Gallium-Dotierung in Frage. Diese steigt gegen Ende des Ziehprozesses in Folge des kleinen Segregationskoeffizienten an. In Abbildung 5.51 ist die Haftstellendichte der in Abbildung 5.40 dargestellten Proben gezeigt. Für Ingot B war nur eine Messung der interstitiellen Sauerstoffkonzentration verfügbar. Die Borkonzentration in Ingot A ist mit der Haftstellendichte negativ korreliert. Gegen einen funktionellen Zusammenhang spricht der für Ingot B verfügbare Messpunkt, der bei geringer Gallium-Dotierung eine geringe Haftstellendichte anzeigt.

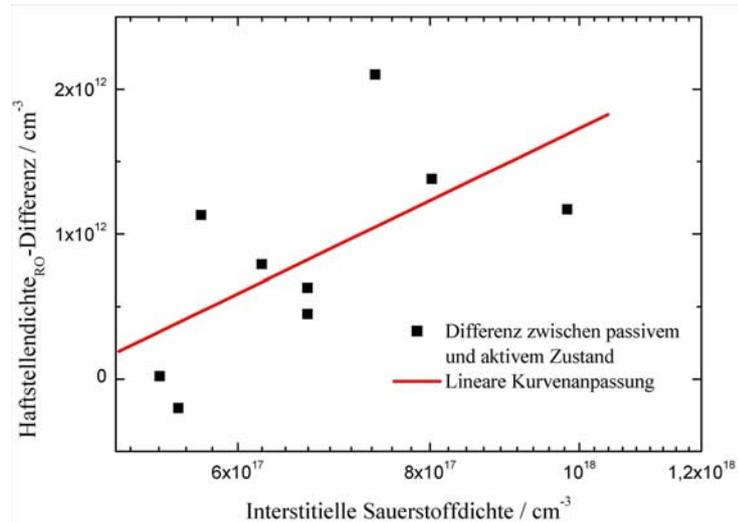
¹ Als Segregationskoeffizient bezeichnet man das Konzentrationsverhältnis an einer Phasengrenze zwischen Feststoff und Flüssigkeit.

Abbildung 5.51: Haftstellendichte, aufgetragen gegen die Konzentration der Gallium-Dotierung. Für Ingot A ist eine negative Korrelation vorhanden. Die geringe Haftstellendichte des Messwerts für eine Probe aus Ingot B mit geringer Dotierung macht einen funktionalen Zusammenhang unwahrscheinlich.



Die erwartete analoge Korrelation für Bor-dotiertes Czochralski-Silizium ist zunächst nicht sichtbar (Abbildung 5.42). Diese Beobachtung wird auf zwei Effekte zurückgeführt: (i) Die verfügbaren Proben stammen im Gegensatz zu den Gallium-dotierten aus verschiedenen Stäben. Diese könnten sich in ihrer Kristalldefektdichte unterscheiden. (ii) Die Bindung des Sauerstoffs kann auf Grund des Bor-Sauerstoff-Defekts verändert sein: In Bor-dotiertem Czochralski-Silizium existieren lichtinduzierte und reversible Defekte, die eine Reduzierung der Materialqualität verursachen [83]. Verschiedene Untersuchungen hierzu haben diese Beobachtung auf Bor-Sauerstoff-Verbindungen zurückgeführt [84-87]. In [86] werden metastabile Komplexe von BO_2 für den Effekt verantwortlich gemacht. Es ist bekannt, dass durch intensive Bestrahlung der Wafer (z.B. 14 h bei 1000 W/m^2) der Defekt aktiviert werden kann. Der umgekehrte Prozess vollzieht sich im Dunkeln bei zusätzlicher Erwärmung (z.B. 20 min bei 570 K). Vergleicht man die Haftstellendichte in passivem und aktiviertem Cz-Defekt, ergibt sich für die Differenz der in Abbildung 5.52 gezeigte Unterschied. Bis auf einen Messpunkt ist die Haftstellendichte im passiven Zustand höher als im aktiven. Diese Beobachtung steht den Ergebnissen von Schmidt et al. [81] entgegen, die Messungen veröffentlichten, die den umgekehrten Zusammenhang nahelegen.

Abbildung 5.52: Differenz der Haftstellendichte im passiven und aktiven Zustand. Bis auf einen Datenpunkt ist die Haftstellendichte im passiven Zustand gegenüber der im aktiven Zustand erhöht.



Die lichtinduzierte Bildung der Bor-Sauerstoff-Verbindung verringert sowohl die Konzentration des nicht gebundenen Bors als auch die Konzentration des interstitiellen Sauerstoffs. Wenn die Bor-Konzentration selbst einen entscheidenden Einfluss auf die Haftstellendichte hat, sollte die Haftstellendichte-Differenz mit der Bor-Dotierung steigen. In Abbildung 5.53 ist die Haftstellendichte-Differenz gegen die Bor-Dotierung aufgetragen. Es ergibt sich eine leicht negative Abhängigkeit, welche Bor-Atome, die nicht mit Sauerstoff gebunden sind, als Grund für den beobachteten Haftstelleneffekt unwahrscheinlich macht.

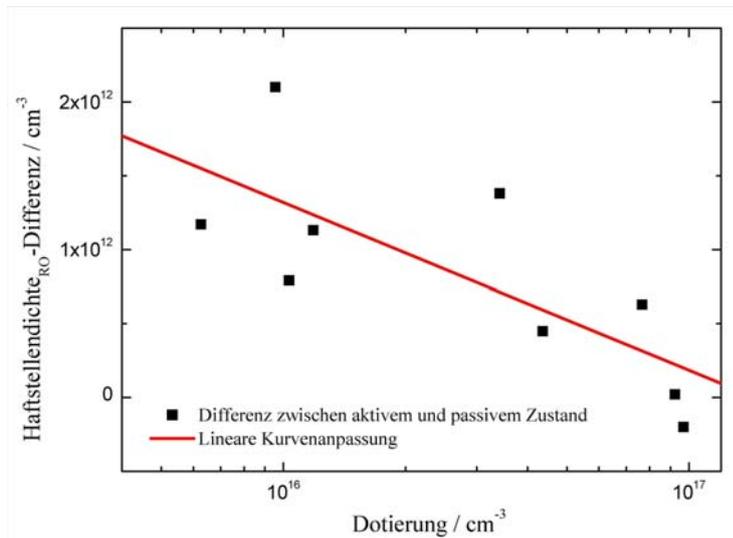


Abbildung 5.53: Differenz der Haftstellendichte zwischen passivem und aktiviertem Bor-Sauerstoff-Defekt in Abhängigkeit der Dotierung. Es zeigt sich eine schwache, negative Korrelation beider Parameter.

Alternativ bietet sich die Änderung der Sauerstoffkonzentration als Grund für die unterschiedliche Haftstellendichte an. Im passiven Zustand ist die Konzentration des interstitiellen Sauerstoffs höher als im aktiven. Unterstützt wird diese These durch die Beobachtung der Sauerstoffabhängigkeit des Haftstelleneffekts in Gallium-dotiertem Silizium (Abbildung 5.41).

5.6.3.2 Metallische Verunreinigungen

Die Haftstellendichtemessungen an absichtlich verunreinigten Proben aus Abschnitt 5.5.3 zeigt eine negative Korrelation der Haftstellendichte mit der Verunreinigungskonzentration. Diese Beobachtung tritt sowohl bei mono- als auch bei multikristallinen Proben und für alle betrachteten Metalle auf. Diese Beobachtung unterscheidet sich von aus der Literatur bekannten Ergebnissen [73, 88]. Aus der Referenzmessung an einer nicht kontaminierten, multikristallinen Probe mit hoher Materialqualität, die eine Haftstellendichte von unter $2 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-3}$ aufweist, lässt sich aber auch schließen, dass saubere Versetzungen nicht zur Ausbildung von Haftstellen ausreichen. Es ist daher zu vermuten, dass Metalle in kleiner Konzentration eine entscheidende Rolle bei der Bildung von Haftstellen spielen können. Bei höheren Konzentrationen senken metallische Verunreinigungen jedoch die Haftstellendichte signifikant.

5.7 Konkurrierende Modelle

Das Modell temporärer Haftstellen ist gut geeignet, die beobachteten Effekte in Lebensdauermessungen zu beschreiben. Alternativ zu dieser Beschreibung existieren andere Modelle, die ein Ansteigen der Lebensdauer im Niedereinjektionsbereich ebenfalls erklären können. Auf diese Ansätze soll an dieser Stelle eingegangen werden. Eine Bewertung der Modelle und insbesondere temperaturabhängige Untersuchungen des Effekts am Ende des Kapitels favorisieren das Haftstellenmodell.

5.7.1 Störstellenrekombination bei hoher Defektdichte

In der in Kapitel 2.3.4 beschriebenen Shockley-Read-Hall-Rekombination wird vernachlässigt, dass sich Ladungsträger je nach Einfangquerschnitten von Elektronen und Löchern eine endliche Zeit im Defektniveau aufhalten können, bevor sie rekombinieren oder in ihr Band reemittiert werden. Analog zum oben beschriebenen Haftstelleneffekt kann dieser Umstand zu einem Ungleichgewicht zwischen Δn und Δp führen.

Die allgemeingültige Form der Kontinuitätsgleichung für Elektronen und Löcher ist durch die folgenden Gleichungen beschrieben [89, 90]

$$\begin{aligned} G - \frac{d\Delta n}{dt} = \frac{\Delta n}{\tau_n} &= C_n \left[\frac{(n_0 + n_1 + \Delta n)(\Delta n - \Delta p)}{N_t} + \frac{\Delta n n_1}{n_0 + n_1} \right] \\ G - \frac{d\Delta p}{dt} = \frac{\Delta p}{\tau_p} &= C_p \left[\frac{(p_0 + p_1 + \Delta p)(\Delta p - \Delta n)}{N_t} + \frac{\Delta p p_1}{p_0 + p_1} \right]. \end{aligned} \quad (5.21)$$

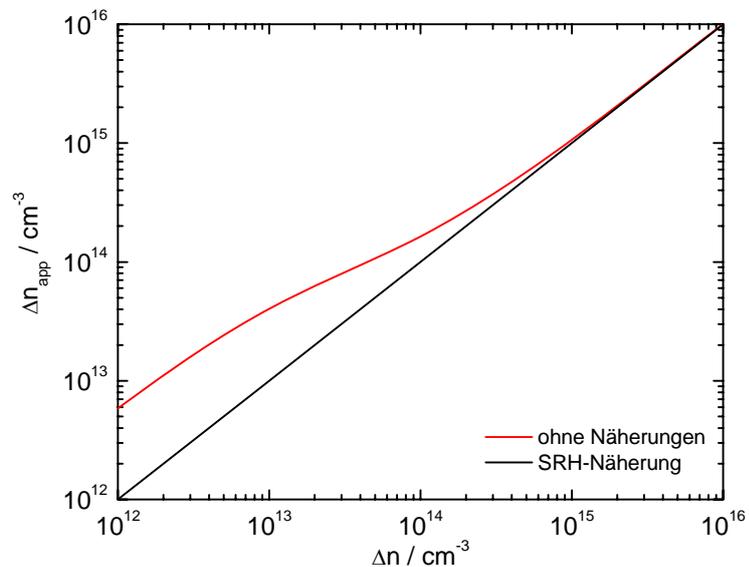
$C_{n,p}$, n_0 , p_0 , n_1 und p_1 sind durch die Gleichungen (2.36), (2.5), (2.7), (2.28) und (2.31) gegeben. Unter stationären Bedingungen verschwinden die Ableitungen von Δn und Δp nach der Zeit. Dann lässt sich eine Beziehung zwischen Δn und Δp angeben [89, 91]

$$\Delta n(\Delta p) = \sqrt{\frac{1}{4}(A + \Delta p(k+1))^2 - \Delta p N_t \left(\frac{p_0 - k p_1}{p_0 + p_1} \right)} - \frac{1}{2}(A + \Delta p(k-1)); \quad (5.22)$$

$$A = \frac{N_t p_0}{p_0 + p_1} + k(p_0 + p_1) + n_0 + n_1,$$

wobei $k = C_p/C_n$. Es lässt sich leicht überprüfen, dass für $p_0 = k p_1$ die Überschussladungsträgerdichten Δn und Δp gleich sind [89]. Im Allgemeinen führt der Unterschied zwischen beiden jedoch zu verfälschten Messwerten. Die Abhängigkeit der mit dem CDI-Verfahren detektierten, scheinbaren Injektionsdichte Δn_{app} von der tatsächlichen Injektionsdichte (siehe Gleichung (5.12)) ist in Abbildung 5.54 zu sehen.

Abbildung 5.54: Abhängigkeit der simulierten scheinbaren Injektionsdichte für das CDI-Verfahren von der tatsächlichen Überschuss-elektronendichte (rot). Im Vergleich dazu ist $\Delta n_{app}(\Delta n) = \Delta n$ eingezeichnet (gilt bei $\Delta n = \Delta p$). Für das Beispiel wurden die Defektparameter für interstitielles Eisen aus [92] angenommen ($\sigma_n = 5 \cdot 10^{-14} \text{ cm}^2$, $\sigma_p = 7 \cdot 10^{-17} \text{ cm}^2$, $E_T = E_V + 0.38 \text{ eV}$). Es ist eine p-Dotierung von $N_A = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ und eine Defektdichte von $N_t = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ angenommen.



Macdonald und Cuevas [89] schlossen aus diesen Rechnungen, dass bei der Verwendung der vereinfachten und weit verbreiteten SRH-Rekombinationsformel (Gleichung (2.35) mit der zusätzlichen Annahme von $\Delta n = \Delta p$) geprüft werden muss, dass die Defektdichte einen kritischen Wert nicht überschreiten darf, um Verfälschungen der Messwerte auf Grund der unterschiedlichen Überschussladungsträgerkonzentrationen (siehe Gleichung (5.24)) klein zu halten.

Karazhanov [93] hat auf Grund ähnlicher Überlegungen ein Modell zur Erklärung der anomalen Erhöhung der gemessenen Lebensdauern im Niederinjektionsbereich vorgeschlagen, das die Konzentration von Ladungsträgern, die sich in Defektniveaus aufhalten, berücksichtigt. Karazhanov passte dieses Modell an Messdaten von Cuevas und Macdonald [94] an und schlug vor, anstatt des postulierten Haftstellenmodells nur die Rekombinationsniveaus für den beobachteten Anstieg der scheinbaren Lebensdauer verantwortlich zu machen.

5.7.2 Raumladungszonen-Modulation

Ein vom Haftstellenmodell nach Hornbeck und Haynes sowie Karazhanovs Rekombinationsmodell grundsätzlich verschiedener Ansatz zur Beschreibung der anomalen Erhöhung der gemessenen Lebensdauer wurde von Bail et al. [95], Cousins et al. [96] und Neuhaus et al. [97] veröffentlicht. Grundlage dieses Modells ist die injektionsabhängige Ausdehnung von Raumladungszonen. Diese können ihren Ursprung in Oberflächenladungen in SiN-Beschichtungen [95] oder in diffundierten pn-Übergängen haben [96, 97]. Es ist aber auch denkbar, dass Defekte Raumladungszonen durch Bandverbiegungen erzeugen [62, 98]. Im Folgenden wird auf die bisherigen theoretischen und experimentellen Ergebnisse eingegangen.

5.7.2.1 Raumladungszonen-Modulation am pn-Übergang

Die Ausdehnung der Raumladungszone eines pn-Übergangs ist von der Spannung abhängig. Diese ändert sich außer durch von außen angelegte Potentialdifferenzen auch mit der Ladungsträgerdichte. Zur Erklärung wird vereinfachend ein idealer, stufenförmiger Verlauf der Dotierung angenommen: Die p-dotierte Basis ist homogen mit einer Ladungsträgerdichte N_A dotiert, die n-Dotierung im Emitter beträgt N_D . Durch Diffusion von Ladungsträgern in den jeweils anderen Bereich entsteht eine Raumladungszone der Breite w_0 , deren Konzentration von freien Ladungsträgern vernachlässigbar ist. Für die Breite der Raumladungszone ohne Beleuchtung und ohne angelegte Spannung gilt näherungsweise [6]

$$w_0 = \sqrt{\frac{2\epsilon_0\epsilon_s}{q} \left(\frac{N_A + N_D}{N_A N_D} \right)} V_{bi} . \quad (5.23)$$

V_{bi} ist dabei die Diffusionsspannung („built-in Potential“) mit

$$V_{bi} = \frac{kT}{q} \ln \left(\frac{N_A N_D}{n_i^2} \right) . \quad (5.24)$$

Unter Beleuchtung der Probe wird eine der Diffusionsspannung entgegen wirkende Potentialdifferenz V_A induziert:

$$V_A = \frac{kT}{q} \ln \left(\frac{\Delta n + n_0}{n_0} \right) . \quad (5.25)$$

In diesem Fall beträgt die Ausdehnung der Raumladungszone

$$w_{bel} = \sqrt{\frac{2\epsilon_0\epsilon_s}{q} \left(\frac{N_A + N_D}{N_A N_D} \right)} (V_{bi} - V_A) . \quad (5.26)$$

Die Raumladungszone ist in diesem Fall um

$$\Delta w = w_0 - w_{bel} = \sqrt{\frac{2\varepsilon_0\varepsilon_s}{q} \left(\frac{N_A + N_D}{N_A N_D} \right)} \left(\sqrt{V_{bi}} - \sqrt{V_{bi} - V_A} \right) \quad (5.27)$$

verkleinert. Zur Veranschaulichung ist in Abbildung 5.55 ein Schema eines pn-Übergangs gezeichnet.

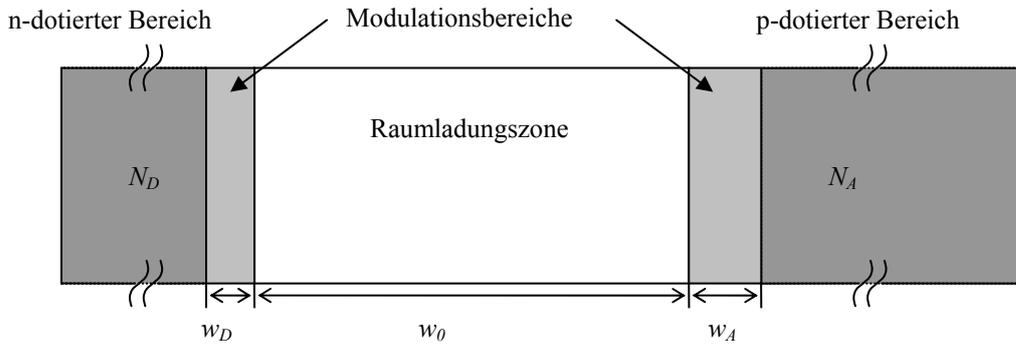


Abbildung 5.55: Schema eines pn-Übergangs. Im thermischen Gleichgewicht ist die Raumladungszone gegenüber des beleuchteten Falls um die Modulationsbereiche vergrößert.

Die Ausdehnungen der Modulationsbereiche w_D und w_A lassen sich unter Benutzung der Ladungserhaltung bestimmen. Es gilt

$$\begin{aligned} \Delta w &= w_D + w_A \\ w_D N_D &= w_A N_A \end{aligned} \quad (5.28)$$

Daraus ergibt sich für w_D und w_A

$$\begin{aligned} w_D &= \frac{\Delta w N_A}{N_D + N_A} \\ w_A &= \frac{\Delta w N_D}{N_D + N_A} \end{aligned} \quad (5.29)$$

Sowohl das QSSPC- als auch das CDI-Verfahren basieren im Wesentlichen auf der Differenzmessung zwischen beleuchtetem und unbeleuchtetem Zustand. Es wird in den jeweiligen Auswertungen typischerweise davon ausgegangen, dass diese Differenz nur durch die optisch generierte Überschussladungsträgerdichte bestimmt ist. Infolge einer Modulation der Raumladungszone in einer Probe mit pn-Übergang ist diese Annahme aber nicht mehr zutreffend: Zusätzlich zu den optisch generierten Ladungsträgern beeinflusst die unterschiedliche Ausdehnung der Raumladungszone die gemessene Differenz: Der Modulationsbereich der Probe trägt mit seiner Basisdotierungs-Konzentration zum Messsignal bei. Dieser Beitrag wird insbesondere bei kleinen Überschussladungsträgerdichten signifikant und führt bei einer Standard-Auswertung zu scheinbar erhöhten Lebensdauerwerten. Dieser Einfluss ist dem der Haftstellendichte damit sehr ähnlich. Für die gemessene, scheinbare Injektionsdichte $\Delta n_{app,DRM}$ gilt analog zu Gleichung (5.13)

$$\begin{aligned}\Delta n_{app,DRM}(\Delta n) &= \frac{1}{\alpha_n + \alpha_p} \left(\alpha_n \left(\Delta n + \frac{w_D N_D}{d} \right) + \alpha_p \left(\Delta p + \frac{w_A N_A}{d} \right) \right) \\ &= \Delta n + \frac{N_A N_D \Delta w(\Delta n)}{d (N_A + N_D)},\end{aligned}\quad (5.30)$$

wobei d die Dicke der Probe bezeichnet.

Die scheinbare Lebensdauer bestimmt sich mit Hilfe von (2.43) unter stationären Bedingungen zu

$$\tau_{app,DRM}(\Delta n) = \tau_{rec}(\Delta n) \left(1 + \frac{N_A N_D \Delta w(\Delta n)}{d \Delta n (N_A + N_D)} \right). \quad (5.31)$$

5.7.2.2 Raumladungszonen-Modulation an Defekten

Es ist denkbar, dass geladene Defekte die Bandstruktur in einer Weise modifizieren, dass lokal Raumladungszonen auftreten. Diese haben einen zu flächigen pn-Übergängen vergleichbaren Einfluss auf die gemessene Lebensdauer. Der genaue Verlauf hängt maßgeblich von der geometrischen Ausdehnung der Defekte ab. Pohl et al. [98] haben das Modell für die Fälle eines Punktdefekts und eines linear ausgedehnten Defekts angepasst. Für diese Fälle gilt analog zu Gleichung (5.30)

$$\Delta n_{app,DRM,sph}(\Delta n) = \Delta n + \frac{4 N_A N_S}{3} (r_d^3 - r_{d,ex}^3(\Delta n)) \quad (5.32)$$

für das sphärische Modell, sowie

$$\Delta n_{app,DRM,line} = \Delta n + \frac{4 N_A N_{dis}}{3} (r_d^2 - r_{d,ex}^2(\Delta n)) \quad (5.33)$$

für das lineare Modell. N_S ist die Volumendichte sphärischer Defekte und N_{dis} ist die Flächendichte der Versetzungen. r_d und $r_{d,ex}$ bezeichnen die das Außmaß der Raumladungszone beschreibende Radien im Dunkeln und unter Beleuchtung. Ihre Bestimmung bedarf der Lösung der Poisson-Gleichung zur Bestimmung des Potentialverlaufs um den geladenen Defekt. Für die genaue Ausführung sei an dieser Stelle auf [98] verwiesen.

5.7.3 Beurteilung der Erklärungsmodelle

5.7.3.1 Störstellenrekombination mit hohen Defektdichten

Als Reaktion auf das von Karazhanov [93] vorgeschlagene Modell haben Macdonald und Cuevas [99] einen Kommentar veröffentlicht, dessen für die Beurteilung der vorgestellten Erlärungsmodelle wichtigen Schlussfolgerungen hier auszugsweise beschrieben

werden. Zwei wichtige Beobachtungen sollen an dieser Stelle herausgegriffen werden, die belegen, dass die erhöhten Messwerte mittels eines einzigen Typs von Defekten nicht zureichend erklärt werden können.

Die Erklärung mittels eines einzigen Rekombinationsniveaus impliziert eine feste Korrelation zwischen Rekombinationslebensdauer und der Ausprägung der Erhöhung der gemessenen Lebensdauer. In [71] sind verschiedene multikristalline Proben gleicher Basisdotierung untersucht worden, die keine Korrelation der beiden Größen erkennen lassen.

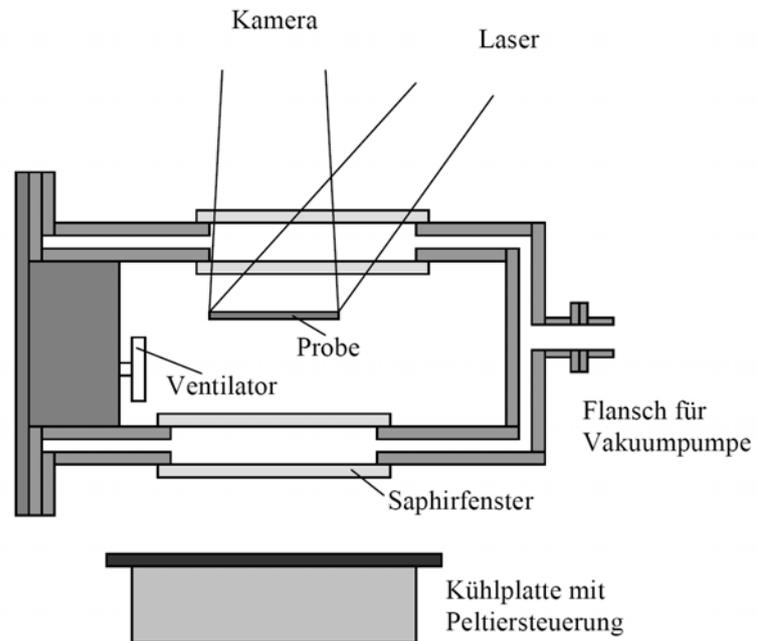
Weitere Experimente an multikristallinen Proben [72] haben den Einfluss einer thermischen Behandlung der Proben (200 °C) auf die Lebensdauer sowie auf die Ausprägung der Messwerterhöhung untersucht. Es hat sich gezeigt, dass die Lebensdauer nicht signifikant durch den Temperaturschritt verändert wurde, dass im Gegensatz dazu die Messwertserhöhung im Niederinjektionsbereich aber stark zurückging. Diese Beobachtung legt unterschiedliche physikalische Ursachen für beide Effekte nahe.

5.7.3.2 Unterscheidung mit Hilfe des Temperaturverhaltens

In [98] wurden die Temperaturabhängigkeiten des Haftstellenmodells und des Modells der Raumladungszonen-Modulation für Temperaturen oberhalb der Zimmertemperatur untersucht. Pohl et al. schlussfolgerten, dass eine Unterscheidung der Effekte mit Hilfe einer Temperaturvariation nicht einfach zu realisieren ist, weil beide Modelle ein Sinken des Effekts bei höheren Temperaturen vorhersagen. An dieser Stelle soll der Temperaturbereich unterhalb der Raumtemperatur untersucht werden. Wie sich in den nächsten Abschnitten zeigt, ermöglicht dieser Messbereich eine bessere Unterscheidung beider Effekte.

Zur Realisierung der temperaturabhängigen Messungen wurde der in [63] vorgestellte Messaufbau benutzt, der in Abbildung 5.56 skizziert ist.

Abbildung 5.56: Schematischer Aufbau für temperaturabhängige CDI-Messungen. Die Probe befindet sich in einem mit Sichtfenstern versehenen, vakuumisolierten Probenraum, der sowohl über eine Widerstandsheizung geheizt als auch mit Hilfe von gasförmigem, kaltem Stickstoff gekühlt werden kann. Hinter den rückwärtigen Sichtfenstern (Saphir) befindet sich eine Heizplatte, die die für die Absorptions-CDI benötigte infrarote Strahlung bereitstellt.



Für jede Messtemperatur wurde eine Kalibrierung gemäß Kapitel 4 durchgeführt. Die so erhaltene, temperaturabhängige Kalibrierkonstante m_{kal} ist in Abbildung 5.57 aufgetragen. Um Temperaturschwankungen zwischen Messungen verschiedener Kalibrierwafer auszuschließen, wurden nur zwei Proben unterschiedlicher Dotierung zur Kalibrierung benutzt, die gleichzeitig in die Probenhalterung eingespannt werden konnten. Dadurch war die parallele Datenaufnahme an beiden Proben möglich.

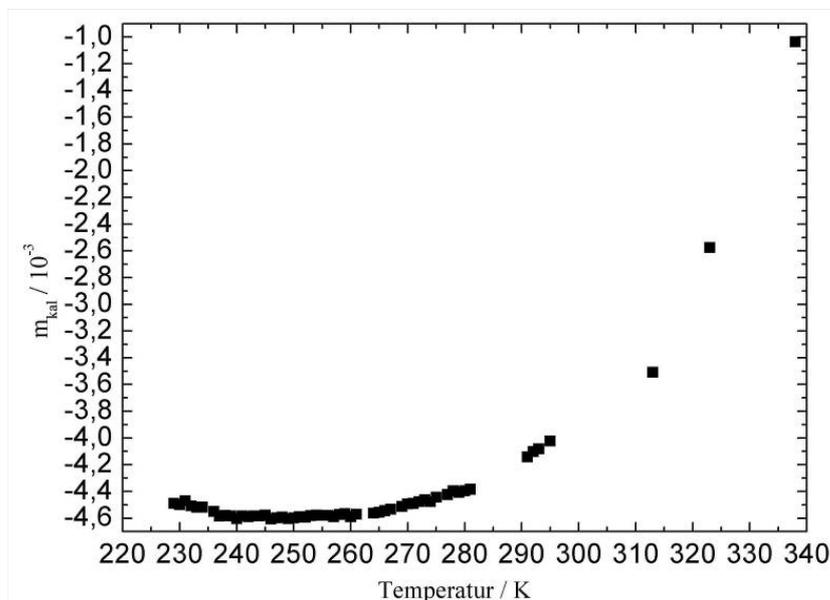


Abbildung 5.57: Temperaturabhängigkeit der Kalibrierkonstante für Absorptions-CDI-Messungen in der Probenkammer aus Abbildung 5.56.

Temperaturabhängigkeiten des Haftstellenmodells

Zur Beurteilung der Temperaturabhängigkeit der scheinbaren Lebensdauer nach dem Haftstellenmodell sollen die einzelnen Größen aus Gleichung (5.14) auf ihre Temperaturabhängigkeit geprüft werden. Diese Gleichung lässt sich ausdrücken durch

$$\begin{aligned}\tau_{app}(\Delta n) &= \frac{\Delta n_{app}}{G} \\ &= \frac{1}{1 + \alpha_n / \alpha_p} \tau_{rec} \left(1 + \alpha_n / \alpha_p + \frac{N_T}{\Delta n + N_C \exp\left(\frac{-(E_C - E_T)}{kT}\right)} \right).\end{aligned}\quad (5.34)$$

Neben der expliziten Temperaturabhängigkeit in Gleichung (5.34) muss die Temperaturabhängigkeit von N_C , der Rekombinationslebensdauer τ_{rec} , der Bandlücke und des Quotienten α_n / α_p berücksichtigt werden. Während für die Zustandsdichte im Leitungsband [6]

$$N_C(T) = N_C^{300K} \left(\frac{T}{300K} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (5.35)$$

und die Bandlücke

$$E_g(T) = E_g^{0K} - \frac{\alpha T^2}{T + \beta} \quad (5.36)$$

die Temperaturabhängigkeiten hinlänglich bekannt sind, muss diese Abhängigkeit für den Quotienten der Absorptionskoeffizienten genauer untersucht werden. Die Konstanten in den Gleichungen (5.35) und (5.36) betragen für Silizium $N_C^{300K} = 2.84 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ [19, 100], $E_g^{0K} = 1.170 \text{ eV}$, $\alpha = 4.73 \cdot 10^{-4} \text{ eV/K}$ und $\beta = 636 \text{ K}$ [6].

Die theoretischen Temperaturabhängigkeiten der Absorptionskoeffizienten von Elektronen und Löchern lassen sich aus Gleichung (2.70) unter Annahme von temperaturunabhängigen effektiven Massen auf die Temperaturabhängigkeiten der Mobilitäten zurückführen. Verschiedene Modelle existieren zur Beschreibung letzterer [6, 101-103]. Experimentelle Ergebnisse zu den Absorptionskoeffizienten selbst sind in [37] zu finden. Die Übereinstimmung experimenteller und theoretischer Werte z.B. in [37] ist nicht befriedigend, außerdem fehlen experimentelle Werte für tiefe Temperaturen. Das temperaturabhängige Verhältnis der Absorptionskoeffizienten für diese Arbeit wurde deshalb experimentell bestimmt. Zu diesem Zweck wurden Infrarotbilder der CDI-Kamera von n-dotierten und p-dotierten Wafern durchgeführt.

Mit Hilfe des Lambertschen Gesetzes kann aus den Kamerabildern K_S der Absorptionskoeffizient $\alpha_{n,p}$ berechnet werden:

$$K_S = K_{S,0} \exp(-\alpha_{n,p} d) + K_{S,offset} \approx K_{S,0}(1 - \alpha_{n,p} d) + K_{S,offset} \quad (5.37)$$

$K_{S,0}$ ist dabei das Kamerasignal, das sich bei gleichen optischen Bedingungen (inklusive der Oberflächen), aber ohne freie Ladungsträger ergäbe, $K_{S,offset}$ ist die Nullpunktverschiebung des als linear angenommenen Kamerasignals. Aus der Messung von je zwei Wafern mit verschiedener, bekannter p-Dotierung bzw. n-Dotierung lässt sich der Quotient der Absorptionskoeffizienten berechnen:

$$\frac{\alpha_n}{\alpha_p} = \frac{(K_{S,n1} - K_{S,n2})(K_{S,p2} d_{p1} N_{A1} - K_{S,p1} d_{p2} N_{A2})}{(K_{S,p1} - K_{S,p2})(K_{S,n2} d_{n1} N_{D1} - K_{S,n1} d_{n2} N_{D2})} \quad (5.38)$$

Die Parameter mit Index n (p) beziehen sich auf die n- (p-)dotierten Proben. Die Zahlen 1 und 2 bezeichnen die jeweilige Probe.

Aus temperaturabhängig aufgenommenen Kameradaten wurde der gesuchte Quotient mit Hilfe von Gleichung (5.38) berechnet. Die Ergebnisse sind in Abbildung 5.58 dargestellt.

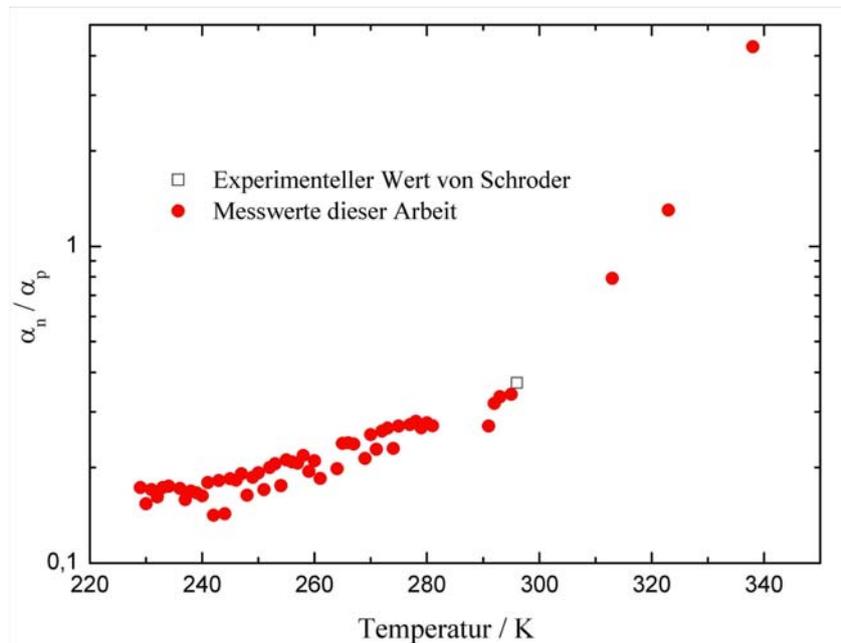


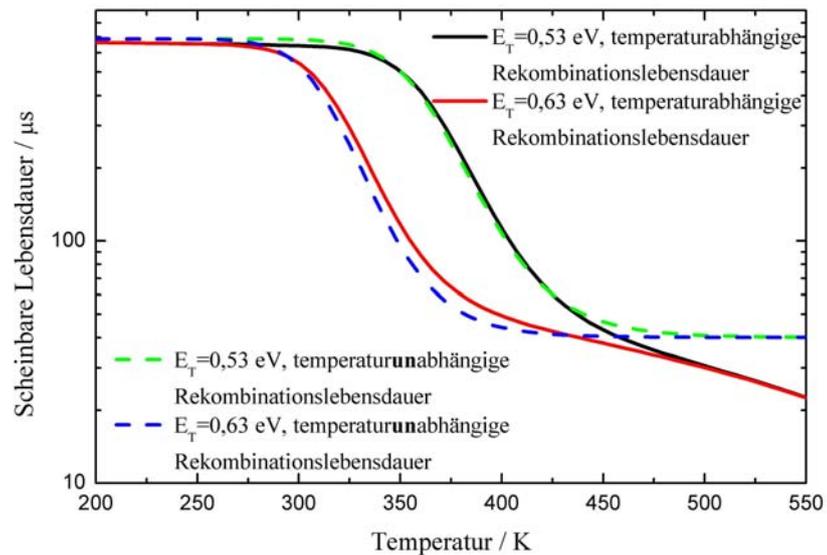
Abbildung 5.58: Quotient der Absorptionskoeffizienten als Funktion der Temperatur. Zusätzlich zu den gemessenen Werten ist der in [37] veröffentlichte experimentelle Wert von Schroder für Raumtemperatur eingezeichnet.

Der von Schroder [37] veröffentlichte experimentelle Wert bei Raumtemperatur ist zusätzlich eingezeichnet und weist eine gute Übereinstimmung auf. Die Messwerte oberhalb der Raumtemperatur sind mit einer höheren Unsicherheit behaftet, weil nicht ausgeschlossen werden kann, dass Reflexionen der Probenkammerheizung das Messsignal beeinflussen.

Die Temperaturabhängigkeit der Rekombinationslebensdauer wird im Bereich der Lebensdauerspektroskopie [19, 104-106] ausgenutzt, um den Abstand des dominierenden Defektniveaus von der Bandkante zu bestimmen. Es zeigt sich, dass die Lebensdauer je nach Größe der Defektparameter mit steigender Temperatur ebenfalls steigt. Der Ein-

fluss der Rekombinationslebensdauer auf den Haftstelleneffekt lässt sich aus Abbildung 5.59 abschätzen. In dem dargestellten Graphen sind Simulationen zur Temperaturabhängigkeit der scheinbaren, von Haftstellen beeinflussten Lebensdauer mit und ohne Berücksichtigung der Temperaturabhängigkeit der Rekombinationslebensdauer gezeigt. Für die energetische Lage des Defektniveaus der Haftstelle sind beispielhaft zwei verschiedene Werte angenommen. Als Energieniveau des dominierenden Rekombinationszentrums wurde die Bandmitte, als Basis-(p)-Dotierung eine Konzentration von $N_A = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ angenommen. Für die Generationsrate wurde ein Wert von $G = 8.5 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$ gewählt.

Abbildung 5.59: Simulation der Temperaturabhängigkeit der scheinbaren Lebensdauer für zwei exemplarische Haftstellenniveaus mit und ohne Berücksichtigung einer temperaturabhängigen Rekombinationslebensdauer (Parameter siehe Text).



Für Temperaturen unterhalb von 300 K ist die Temperaturabhängigkeit der Rekombinationslebensdauer für die gemessene scheinbare Lebensdauer unwesentlich. Zur Modellierung (siehe Abbildung 5.61) werden deshalb nur die Temperaturabhängigkeiten der Zustandsdichte, der Bandlücke (Gleichungen (5.35) und (5.36)) und insbesondere des Quotienten der Absorptionskoeffizienten (Gleichung (5.38)) berücksichtigt.

Temperaturabhängigkeiten des Modells der Raumladungszonen-Modulation

Im Gegensatz zum Haftstellenmodell ist das Modell der Raumladungszonen-Modulation nicht von der Temperaturabhängigkeit der Absorptionskoeffizienten beeinflusst (siehe Gleichung (5.31)). Die Temperaturabhängigkeiten ergeben sich aus den Abhängigkeiten von n_0 , n_i und τ_{rec} . In Abbildung 5.60 ist der simulierte Verlauf der Temperaturabhängigkeit der scheinbaren Lebensdauer unter Annahme einer Raumladungszonen-Modulation gezeigt.

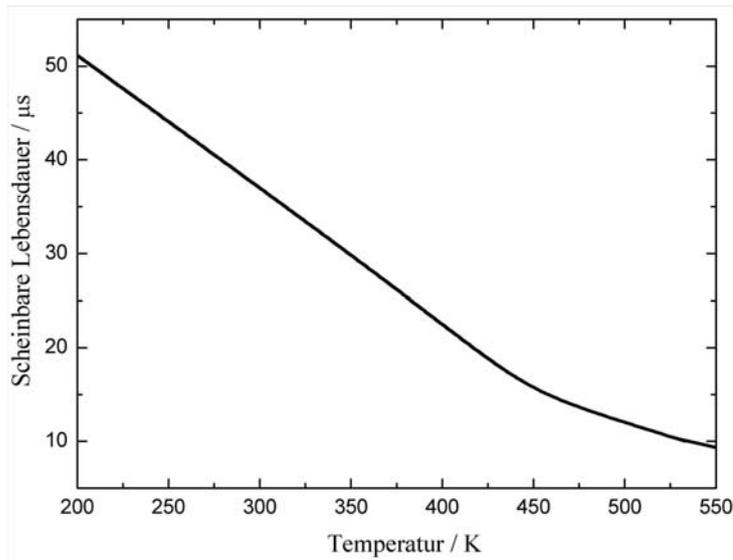


Abbildung 5.60: Temperaturabhängigkeit der scheinbaren Lebensdauer unter Annahme einer Raumladungszonen-Modulation. Wie im Haftstellenmodell steigt die scheinbare Lebensdauer zu kleinen Temperaturen, erfährt aber im Gegensatz zu letzterer keine Sättigung.

Eine wesentliche Eigenschaft dieser Abhängigkeit ist, dass zu kleinen Temperaturen keine Sättigung auszumachen ist. Diese Eigenschaft ist vom Haftstellenmodell verschieden und kann deshalb als Unterscheidungskriterium herangezogen werden.

Vergleich der Modelle mit experimentellen Daten

Mit Hilfe des in Abbildung 5.56 beschriebenen Aufbaus wurde eine multikristalline, SiN-passivierte Siliziumprobe aus Standard-Industriematerial auf 230 K gekühlt. Während einer langsamen Erwärmung von ca. 0.1 K/min wurden Absorptions-CDI-Messungen bei verschiedenen Temperaturen aufgenommen. Die Generationsrate betrug bei den Messungen $G = 8.5 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$. In einem Vorversuch wurde durch generationsabhängige Messungen sichergestellt, dass die gemessenen scheinbaren Lebensdauern durch den Haftstelleneffekt oder Raumladungszonen-Effekt dominiert sind. In Abbildung 5.61 sind die Mittelwerte der Messungen gegen die Temperatur aufgetragen. Das Haftstellenmodell nach Hornbeck und Haynes (rot) sowie das Modell der Raumladungszonen-Modulation (blau) ist an die Messdaten angepasst. Das in Kapitel 5.7.1 beschriebene Modell von Karazhanov wird auf Grund der in Kapitel 5.7.3.1 beschriebenen Argumente nicht weiter berücksichtigt.

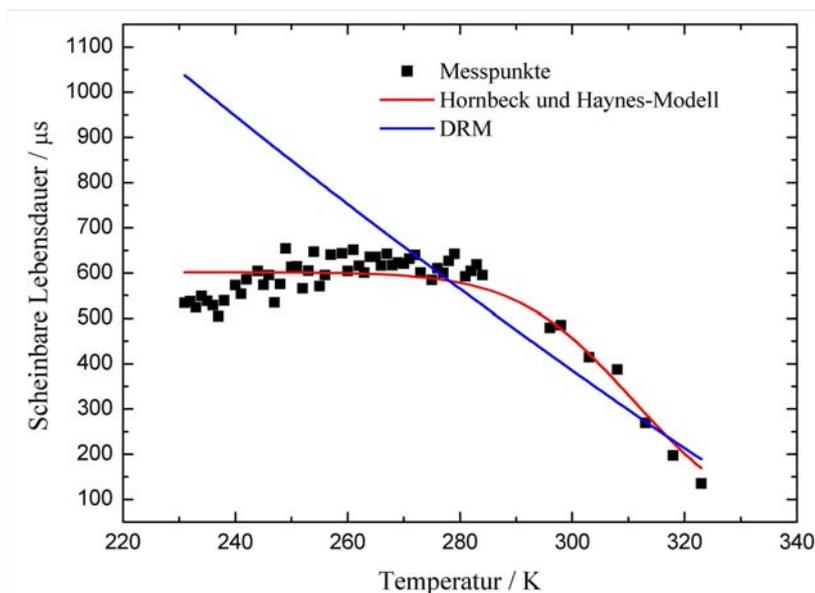


Abbildung 5.61: Experimentell bestimmte Temperaturabhängigkeit der scheinbaren Lebensdauer und Kurvenanpassungen für das Haftstellenmodell (rot) sowie das Modell der Raumladungszonen-Modulation (blau).

Die genauen Annahmen zu letzterem Modell haben keinen signifikanten Einfluss auf die qualitative Form der Anpassungskurve, insbesondere lässt sich keine Parameterkombination finden, die eine Sättigung zu niedrigen Temperaturen hin beschreiben kann. In diesem Vergleich lässt sich damit feststellen, dass das Haftstellenmodell die gemessenen Daten besser beschreibt.

Das Haftstellenmodell wird deshalb zur Erklärung der gegenüber der Rekombinationslebensdauer erhöhten scheinbaren Lebensdauer favorisiert. Es ist im Gegensatz zum Modell von Karazhanov von der Rekombination entkoppelt und beschreibt die Messdaten signifikant besser als das Modell der Raumladungszonen-Modulation.

5.7.4 Grenzen des Haftstellenmodells

Rekombinations-Defektniveaus zeigen typischerweise keine starke Abhängigkeit von der Proben temperatur. Aus diesem Grund wird im Haftstellenmodell das Energieniveau der Haftstelle als unabhängig von der Temperatur angenommen. Eine Messreihe zur Temperaturstabilität der Haftstellenparameter soll im Folgenden zeigen, inwieweit diese Annahme gerechtfertigt ist.

Zu diesem Zweck wurden injektionsabhängige CDI-Messungen an einer multikristallinen, SiN-passivierten Siliziumprobe durchgeführt. Für jede betrachtete Proben temperatur wurde das Haftstellenmodell an die experimentellen Ergebnisse angepasst. In Abbildung 5.62 sind die Parameter tabellarisch zusammengefasst.

Temperatur / K	Haftstellenniveau / eV	Haftstellendichte / 10^{13} cm^{-3}	Rekombinationslebensdauer / μs
303	0.636	2.2	9.9
318	0.585	2.1	7.1
333	0.564	1.9	8.4
343	0.545	1.8	9.7

Abbildung 5.62: Experimentell bestimmte Parameter des Haftstellenmodells für unterschiedliche Proben temperaturen.

Die Rekombinationslebensdauer zeigt keine klare Abhängigkeit von der Temperatur und schwankt mit dem statistischen Fehler. Die Haftstellendichte scheint ebenso wie das Haftstellenniveau mit zunehmender Temperatur zu sinken. Diese Temperaturabhängigkeiten sind zunächst unerwartet. Sie lassen sich nicht ausreichend mit bekannten temperaturabhängigen Effekten im Halbleiter wie z.B. der temperaturinduzierten Verkleinerung der Bandlücke erklären. Vielmehr deutet dieses Ergebnis an, dass das Haftstellenmodell selbst vereinfachende Annahmen macht. Insbesondere die Annahme einer idealen Haftstelle mit verschwindender Wechselwirkung mit dem Valenzband könnte unzutreffend sein. In Realität könnte ein Einfangquerschnitt für Löcher größer null der Grund für eine unvollständige Beschreibung des Effekts durch das Haftstellenmodell sein.

6 Optische Grenzflächeneffekte und Reabsorption

Messungen mit den in dieser Arbeit betrachteten infraroten optischen Verfahren hängen signifikant von Reflexions-, Beugungs- und Brechungseffekten von Infrarotstrahlung an der Probenoberfläche sowie von der Infrarot-Absorption im Probenmaterial ab. Zunächst wird in grundlegender Weise auf die Abbildung von Strahlungsquellen in einem Medium eingegangen und Einflüsse rauer Oberflächen diskutiert. Reabsorption wird im Hinblick auf die erreichbare Ortsauflösung der Kamerabilder behandelt. Es wird schließlich an experimentellen Ergebnissen gezeigt, wie Artefakte bei optischen Messungen an rauen Oberflächen mathematisch korrigiert werden können. Es wird gezeigt, dass diese Korrekturen quantitative Messungen des Absolutwerts erlauben und dass die durch die Rauheit der Oberflächen reduzierte Ortsauflösung wieder erhöht werden kann. Teile der vorgestellten Ergebnisse entstanden aus einer Zusammenarbeit mit den Diplomarbeiten von Sebastian Pingel [107] und Manuel The [41].

6.1 Einfluss der Grenzflächeneffekte auf das Messsignal

Die in den Kapiteln 3-5 vorgestellten Messverfahren haben die quantitative Abbildung von in der Probe vorhandenen freien Ladungsträgern zum Ziel. Die Detektion der Ladungsträger geschieht optisch. Je nach Methode wird ein unterschiedlicher infraroter Spektralbereich betrachtet. *Photoluminescence Imaging* detektiert die strahlende Rekombination freier Überschussladungsträger im nahen Infrarot. *Carrier Density Imaging* und verwandte Verfahren beruhen auf thermischer Emission und Absorption infraroter Strahlung. Der detektierte Spektralbereich hängt von der verwendeten Kamera ab

und liegt typischerweise im mittleren Infrarot (MWIR¹, LWIR²) bei ca. $3\ \mu\text{m} - 10\ \mu\text{m}$. Die im Folgenden beschriebenen Effekte treten in allen behandelten Methoden auf und werden hier allgemein behandelt. Stellvertretend für diese Methoden ist in Abbildung 6.1 die Situation im Fall der CDI-Methode skizziert.

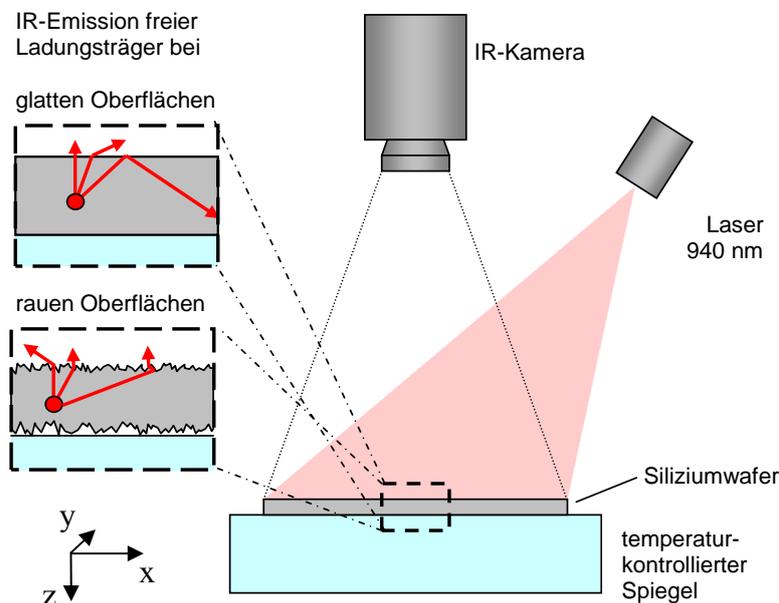


Abbildung 6.1: Schematischer Infrarot-Messaufbau (Beispiel CDI) und Einfluss glatter und rauher Oberflächen auf die Infrarotemission.

6.1.1 Detektion von Strahlungsquellen durch eine raue Oberfläche

Sei $q(x,y,z)$ die Verteilung isotrop abstrahlender, punktförmiger Infrarotquellen in einem vollständig transparenten Medium mit einem homogenen Brechungsindex n . Die im Medium auf die Grenzschicht (direkt oder nach internen Reflexionen) auftreffende winkelabhängige spektrale Photonenflussdichte sei $u(x,y,\theta,\varphi,\lambda)$. Die durch die Oberfläche des Mediums austretende Strahlung $b(x,y,\theta,\varphi,\lambda)$ trifft zu einem Teil auf den Detektor. Die Optik vor dem Detektor ist so beschaffen, dass die Oberfläche des Mediums auf den Detektor abgebildet wird.

Typischerweise wird bei der Interpretation der Kamerabilder für alle beschriebenen Kamera-basierten Messmethoden angenommen, dass für das (um eventuelle Abbildungsfehler korrigierte) Kamerasignal $B(x_0,y_0)$ eines Punktes (x_0,y_0) der Probenoberfläche unter Vernachlässigung von Reabsorption gilt:

¹ Mid Wavelength InfraRed

² Long Wavelength InfraRed

$$B(x_0, y_0) = C \int_{z=0}^d q(x_0, y_0, z) dz . \quad (6.1)$$

C ist dabei eine ortsunabhängige Konstante. Die Annahme impliziert, dass eine beliebige weitere Quelle $q(x_l, y_l, z_l)$ nicht zum Signal $B(x_0, y_0)$ beiträgt, wenn $x_l \neq x_0$ oder $y_l \neq y_0$, und dass $B(x, y)$ nicht von variierenden und möglicherweise sogar lateral verschiedenen Oberflächenqualitäten abhängt.

Allgemein gilt für das Kamerabild unter Annahme einer idealen Kameraoptik

$$B(x, y) = \int_{\lambda=\lambda_{\min}}^{\lambda_{\max}} \int_{\theta=0}^{\theta_{\max}} \int_{\varphi=0}^{2\pi} b(x, y, \theta, \varphi, \lambda) \eta(\lambda) \sin \theta d\theta d\varphi d\lambda . \quad (6.2)$$

λ_{\min} und λ_{\max} beschreiben den Messbereich des verwendeten Detektors mit einer spektralen Empfindlichkeit von $\eta(\lambda)$. Der Winkel θ_{\max} ist durch die Apertur des Objektivs und den Abstand zwischen Probe und Objektiv D bestimmt. Gleichung (6.2) gilt strenggenommen nur für einen Punkt direkt in der optischen Achse der Kamera und nur bei zur Probenoberfläche senkrechter Montierung der Kamera. Bei gegenüber der Apertur großem Abstand D lässt sich diese Beziehung aber näherungsweise für alle Bildpunkte anwenden. $b(x, y, \theta, \varphi, \lambda)$ ist durch $u(x, y, \theta, \varphi, \lambda)$ und die Natur der Probenoberfläche bestimmt. Die entsprechende Transformation

$$b(x, y, \theta, \varphi, \lambda) = T_{\text{Oberfl}}(u(x, y, \theta, \varphi, \lambda)) \quad (6.3)$$

ist im Fall einer planen Probenoberfläche durch Brechung der austretenden Strahlung bestimmt. Bei genügendem Kameraabstand bedeutet dies wegen des hohen Brechungsindex von Silizium, dass näherungsweise nur senkrecht austretende Strahlen von der Kamera detektiert werden. Die Bedingungen zur Gültigkeit von Gleichung (6.1) sind dann erfüllt. $u(x_0, y_0, \theta, \varphi, \lambda)$ ist durch die Verteilung der Quellen $q(x, y, z)$, durch deren Emissionsspektrum $S(\lambda)$ und durch einfache Reflexionen an den Grenzflächen gegeben. Die Transformation T_{Oberfl} ist durch den Brechungsindexunterschied an der Grenzfläche bestimmt. Eine wesentliche Eigenschaft dieser Transformation ist, dass der Winkel von einfallenden Strahlen durch Brechung nur vergrößert werden kann. Von den Quellen emittierte, schräg auftreffende Strahlen werden deshalb nicht detektiert.

Bei rauen Oberflächen ändert sich $u(x, y, \theta, \varphi, \lambda)$ durch unregelmäßige interne Reflexionen und Streuung. Die Transformation T_{Oberfl} ist ebenfalls durch Streuung verschieden. Im Extremfall maximal diffuser Oberflächen verliert $b(x, y, \theta, \varphi, \lambda)$ seine Winkelabhängigkeit und ist zur einfallenden Strahlungsintensität proportional. Ein bestimmter Anteil der austretenden Strahlung trifft auch dann auf den Detektor der Kamera, wenn sich die Quelle nicht näherungsweise auf der optischen Achse der Kamera befindet. Das hat eine Verschmierung des gemessenen Bildes zur Folge. Durch die Änderung von $u(x, y, \theta, \varphi, \lambda)$ und $b(x, y, \theta, \varphi, \lambda)$ ändert sich zudem die integrale, mit der Kamera detektier-

te Strahlungsintensität. Im Folgenden wird der Unterschied der Signalintensität bei planen und bei maximal diffusen Oberflächen untersucht.

Im Fall von Silizium als Medium und planen Oberflächen fällt nur ein sehr kleiner Teil der Strahlung auf den Detektor. Wegen des hohen Brechungsindexunterschieds zwischen Silizium und Luft wird Strahlung, die in einem Winkel von mehr als ca. 17° gegen die Oberflächennormale auf die Oberfläche trifft, totalreflektiert und kann die Probe nur am Probenrand verlassen. Von der Strahlung, die die Probe verlässt, fällt wiederum nur ein Teil auf den Detektor. Der Akzeptanzwinkel α_{glatt} (s. Abbildung 6.2) ergibt sich in guter Näherung zu¹

$$\alpha_{glatt} = \arcsin\left(\frac{\sin \beta}{n}\right) \quad \text{mit} \quad (6.4)$$

$$\beta = \arctan\left(\frac{s}{2D}\right).$$

Mit typischen Werten (Abstand Probe-Kamera: $D = 100$ cm, Durchmesser Kameralinse: $s = 5$ cm, Brechungsindex: $n = 3.4$) ergibt sich ein Akzeptanzwinkel von ca. 0.4° . Damit trifft näherungsweise ein Anteil von

$$\chi = \frac{\pi(w \tan \alpha)^2}{4\pi w^2} = \left(\frac{\tan \alpha}{2}\right)^2 \quad (6.5)$$

auf den Detektor. Im Beispielfall fällt also nur das ca. $1.3 \cdot 10^{-5}$ -fache der emittierten Strahlung auf den Detektor. Berücksichtigt man auch von der rückwärtigen Oberfläche (und einer eventuellen, reflektierenden Probenhalterung) reflektierte Strahlen, kann das Doppelte dieses Wertes als sichere obere Abschätzung des Signalanteils gelten.

Ist die Grenzfläche zwischen Medium und Luft rau, so ist sowohl der Absolutwert als auch die örtliche Verteilung des transformierten Bildes vom glatten Fall verschieden. Je nach gegebener Oberflächenstruktur wird ein auf die Grenzfläche treffender Strahl in eine bestimmte Raumrichtung gebrochen oder, je nach Größe der Struktur, gebeugt. Im Grenzfall einer maximal diffusen Oberfläche wird der einfallende Strahl mit gleichverteilter Wahrscheinlichkeit in eine Raumrichtung gelenkt. Das hat zur Folge, dass Strahlen innerhalb des Akzeptanzwinkels (s.o.) so abgelenkt werden können, dass sie den Detektor nicht mehr treffen. Im Gegenzug können aber Strahlen mit größeren Winkeln zum Lot der Oberfläche, die im Fall einer glatten Grenzfläche den Detektor nicht erreichen, auf die Detektorfläche abgelenkt werden. Weil sich die Auftreffwinkel nach jeder Reflexion ändern, wird auch die Totalreflexion stark unterdrückt.

¹ Im experimentellen Aufbau ist die Probe leicht gegen die optische Achse verkippt, um eine Reflexion der Kamera an der Probenoberfläche zu vermeiden. Für die hier gezeigte Betrachtung soll aber diese Verkipfung aus Gründen der Übersichtlichkeit vernachlässigt werden.

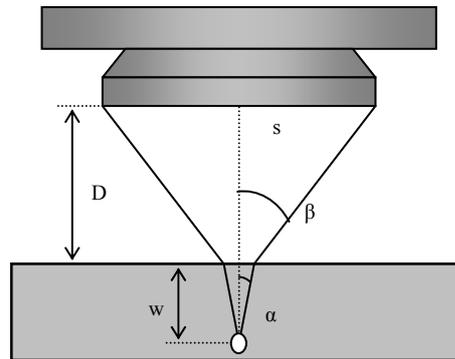


Abbildung 6.2: Schematische Darstellung des Strahlenganges. Die Höhe der Zeichnung ist im Vergleich zu ihrer Breite stark verkürzt dargestellt.

Als Abschätzung und Vergleich zum Fall glatter Grenzflächen sei eine maximal diffuse Oberfläche angenommen, die die auftreffende Strahlung in alle Raumrichtungen abstrahlt. Durch den gegenüber den Probedimensionen großen Abstand D des Detektors vom Medium ist es eine gute Näherung, nur Strahlen zu betrachten, die mit einem Akzeptanzwinkel kleiner als

$$\alpha_{\text{lambert}} = \arctan\left(\frac{s}{2D}\right) \quad (6.6)$$

von der Oberfläche abgestrahlt werden. Mit den gleichen Werten wie im vorherigen Absatz ergibt sich $\alpha_{\text{lambert}}=1.4^\circ$. Allerdings trifft, bei Vernachlässigung von internen Reflexionen, nur die Hälfte der von den Quellen emittierten Strahlung auf die Grenzfläche. Damit wird der detektierbare Anteil gemäß Gleichung (6.5) zu $1.5 / 2 \cdot 10^{-4} = 7.5 \cdot 10^{-5}$. Werden Reflexionen an der rückwärtigen Oberfläche und des Spiegels aus Abbildung 6.1 berücksichtigt, erhöht sich der errechnete Anteil. Vergleicht man den errechneten Wert als untere Abschätzung mit dem für den Fall glatter Grenzflächen errechneten Wert, ergibt sich im rauen Fall bei vernachlässigter Reabsorption eine Signal-erhöhung um mehr als einen Faktor 5. Wenn die Reabsorption nicht vernachlässigbar ist (etwa durch hohe Dotierung im Silizium), erniedrigt sich dieser Wert, weil nicht mehr die Hälfte der abgestrahlten Energie die Oberfläche trifft, sondern auf dem Weg dorthin absorbiert wird. Dies gilt zwar auch im glatten Fall, durch die im Mittel längeren Wege zur Oberfläche beeinflusst die Reabsorption den rauen Fall aber wesentlich stärker.

6.1.2 Analytische Bestimmung der Transformation einer Punktquelle

In sehr ähnlicher Weise, wie eine raue Glasscheibe dem Betrachter ein verzerrtes Bild der Dinge liefert, die hinter dieser Scheibe liegen, ändert sich durch eine raue Oberfläche der Probe das detektierte Bild der Ladungsträgerverteilung. Durch an der Grenzflä-

che abgelenkte Strahlen wird z.B. eine Punktquelle, die in der Probe durch die Oberfläche strahlt, auf den Detektor nicht mehr als Punkt, sondern als breitere Verteilung abgebildet. Da angenommen werden kann, dass sich die Strahlen untereinander nicht beeinflussen, kann die Transformation einer beliebigen Ladungsträgerverteilung als Superposition von Punktquellen behandelt werden.

Für den Grenzfall einer vollständig diffusen Oberfläche wird im Folgenden die Transformation einer Punktquelle berechnet. Betrachtet wird diese in einem transparenten Medium (siehe Abbildung 6.3).

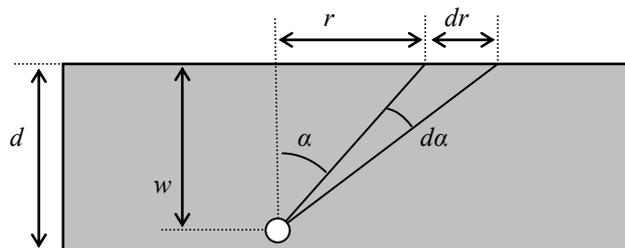


Abbildung 6.3: Querschnittsskizze einer Probe zur Bestimmung der Abbildung einer Punktquelle durch eine raue Oberfläche.

Eine vollständig diffuse Oberfläche zeichnet sich dadurch aus, dass auftreffende Photonen mit gleicher Wahrscheinlichkeit in eine beliebige Raumrichtung abgelenkt werden. Es wird wieder angenommen, dass sich die Kamera weit von der Probe entfernt befindet (siehe Abbildung 6.2). Photonen, die die Kamera erreichen, werden näherungsweise senkrecht zur Probenoberfläche emittiert. Wenn der betrachtete Probenausschnitt klein gegenüber dem Kameraabstand ist, gilt diese Näherung für den gesamten Bildbereich. In diesem Fall ist die Photonenflussdichteverteilung, die die betrachtete Punktquelle an der Probenoberfläche erzeugt, proportional zum Kamerabild.

Die Berechnung des Kamerabilds wird zunächst eindimensional behandelt. Im Anschluss wird der Übergang zur zweidimensionalen Behandlung gezeigt. Betrachtet wird eine punktförmige Strahlungsquelle in einem transparenten Medium. Der Brechungsindex des Materials geht wegen der Betrachtung des Grenzfalles vollständiger Diffusivität nicht in die Berechnung ein. Die Photonenflussliniendichte an der Oberfläche der Probe lässt sich für den in Abbildung 6.3 skizzierten Querschnitt bestimmen. Ein Winkelelement $d\alpha$ hängt mit einem Linienelement dr in folgender Weise zusammen:

$$\begin{aligned} dr &= w (\tan(\alpha + d\alpha) - \tan \alpha) \\ &= w \left(\frac{\left(\frac{r}{w} + \tan d\alpha\right)}{\left(1 - \frac{r}{w} \tan d\alpha\right)} - \frac{r}{w} \right). \end{aligned} \quad (6.7)$$

Auflösen auf $d\alpha$ liefert

$$d\alpha = \arctan\left(\frac{dr w}{dr r + r^2 + w^2}\right). \quad (6.8)$$

Aus Gleichung (6.8) lässt sich die Photonflussliniendichte $J_{ph, Linie}$ an der Oberfläche am Ort r bestimmen zu

$$\begin{aligned} J_{ph, Linie} &= \lim_{dr \rightarrow 0} \left[\frac{J_{ph, ges} d\alpha(dr)}{2\pi dr} \right] \\ &= \frac{J_{ph, ges} w}{2\pi (r^2 + w^2)}. \end{aligned} \quad (6.9)$$

$J_{ph, ges}$ bezeichnet die Gesamtdichte der emittierten Photonen in der Querschnittsfläche. Gleichung (6.9) ist ein Spezialfall der Lorentzfunktion. Je größer der Abstand der Punktquelle von der Probenoberfläche ist, desto breiter ist die Verteilung der Photonflussliniendichte auf dieser Oberfläche (siehe Abbildung 6.4).

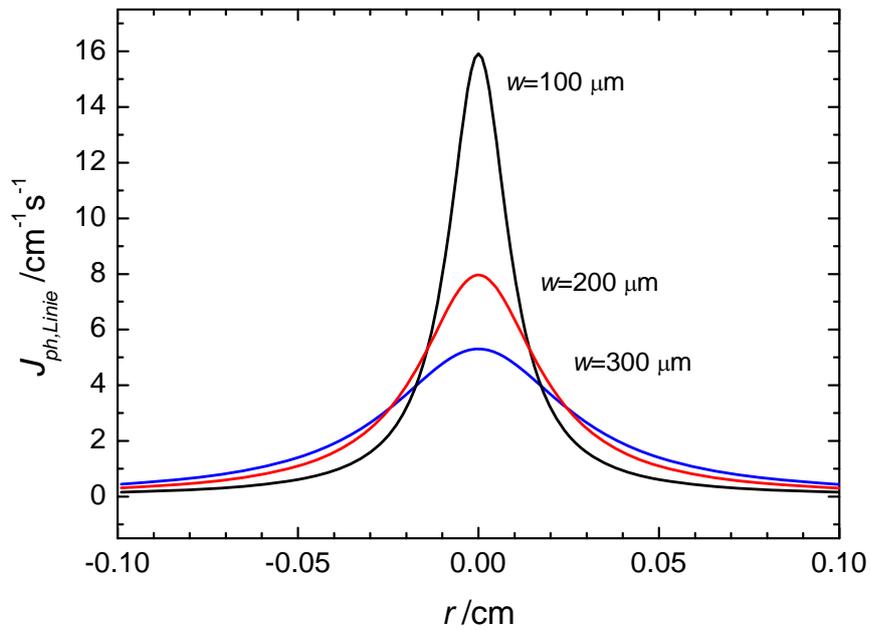


Abbildung 6.4: Photonflussliniendichte an der Oberfläche einer Probe für verschiedene Tiefen der Punktquelle. Die Geometrie entspricht Abbildung 6.3.

Für die Lösung des Problems in zwei Dimensionen wird der Anteil der Gesamtdichte emittierter Photonen, die auf einen Ring mit den Radien r und $r+dr$ treffen, berechnet. Es treffen diejenigen Photonen auf den Ring, die durch den Mantel einer Kugelschicht mit Radius R und Höhe h (siehe Abbildung 6.5) dringen.

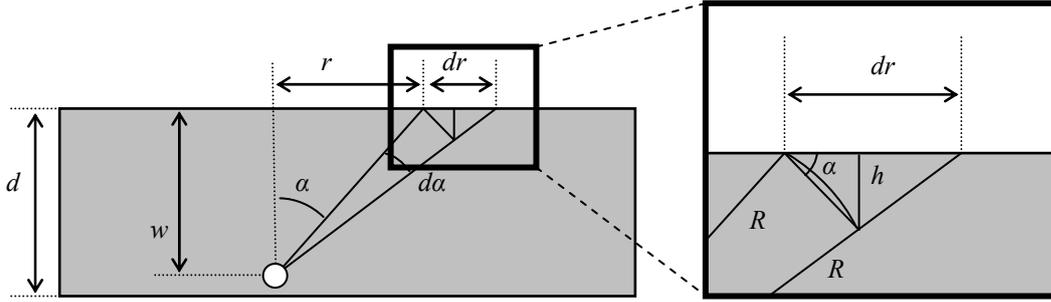


Abbildung 6.5: Querschnittsskizze einer Probe zur Bestimmung der Abbildung einer Punktquelle in zwei Dimensionen.

Die Fläche des Mantels bestimmt sich zu

$$M = 2\pi R h \quad (6.10)$$

mit der Höhe

$$h = R \left[\sin \left(\frac{\pi}{2} - \arctan \left(\frac{r}{w} \right) \right) - \sin \left(\frac{\pi}{2} - \arctan \left(\frac{r}{w} \right) - d\alpha \right) \right]. \quad (6.11)$$

Der Anteil der Fläche M an der Gesamtkugel beträgt

$$A_{Kugel} = \frac{M}{4\pi R^2} = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{\sqrt{1 + \frac{r^2}{w^2}}} - \cos \left(\arctan \left(\frac{r}{w} \right) + \arctan \left(\frac{dr w}{dr r + r^2 + w^2} \right) \right) \right]. \quad (6.12)$$

Dieser Anteil entspricht auch dem Anteil des Gesamtphotonenflusses, der auf die Ringfläche

$$A_{Ring} = \pi(r + dr)^2 - \pi r^2 \quad (6.13)$$

trifft. Teilt man den Gesamtphotonenfluss durch diese Ringfläche und berechnet den Grenzwert für dr gegen 0, so erhält man die Flächendichte des Photonensflusses am Ort der Oberfläche:

$$\begin{aligned} J_{ph,Fläche} &= \lim_{dr \rightarrow 0} \left[J_{ph,ges} \frac{M}{A_{Kugel} A_{Ring}} \right] \\ &= \frac{J_{ph,ges}}{4\pi \sqrt{1 + \frac{r^2}{w^2}} (r^2 + w^2)}. \end{aligned} \quad (6.14)$$

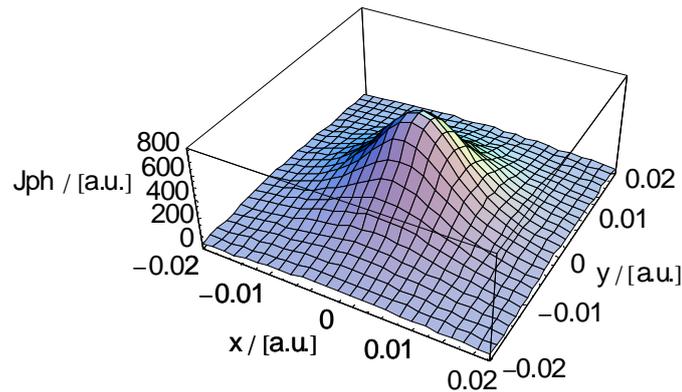


Abbildung 6.6: Photonenflussdichte an der Probenoberfläche, die von einer Punktquelle beleuchtet wird.

Die bisherige Berechnung berücksichtigt keine Reflexion an der Rückseite der Probe. Für eine diffuse Rückseite gilt für die Photonflussliniendichte $J_{ph,Fläche,rück}$:

$$J_{ph,Fläche,rück} = \frac{J_{ph,ges}}{4\pi \sqrt{1 + \frac{r^2}{(d-w)^2}} (r^2 + (d-w)^2)} \quad (6.15)$$

Gemäß dem Aufbau aus Abbildung 6.1 wird angenommen, dass der gesamte Photonfluss wieder reflektiert wird, d.h. die Reabsorption wird weiterhin vernachlässigt und die Reflexionseigenschaften des Spiegels werden als ideal angenommen. Um den Rückseiteneinfluss zu bestimmen, wird zusätzlich ein Winkel φ eingeführt, um einen Punkt auf der Oberfläche durch Polarkoordinaten zu beschreiben (siehe Abbildung 6.7).

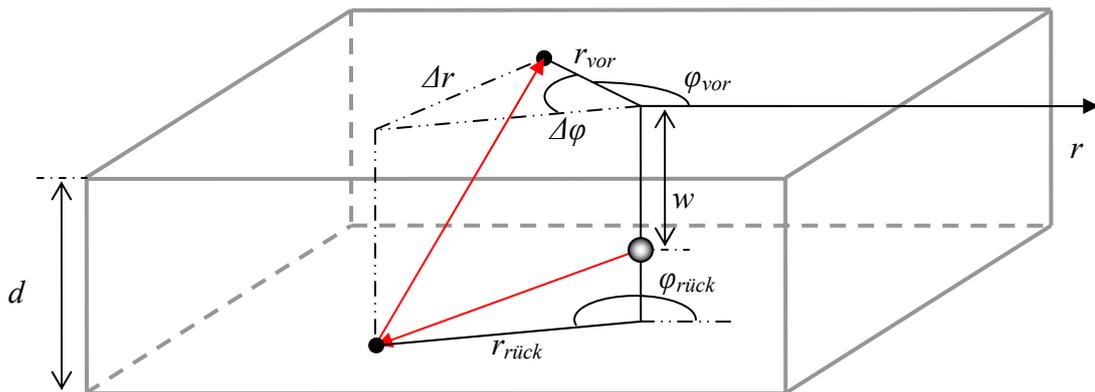


Abbildung 6.7: Skizze zur Berechnung des rückseitig reflektierten Anteils der von der Kamera detektierten Strahlung.

Eine Punktquelle auf der Rückseite bei $(r_{rück}, \varphi_{rück})$ erzeugt am Punkt (r_{vor}, φ_{vor}) auf der Vorderseite die Photonflussdichte

$$j_{ph,rück} = \frac{J_{ph,Fläche,rück}}{4\pi\sqrt{1+\frac{\Delta r^2}{d^2}}(\Delta r^2+d^2)}. \quad (6.16)$$

Integriert über alle Quellen auf der Rückseite bedeutet das für die durch die Rückseite erzeugte Gesamtphotonenflussdichte

$$J_{ph,ges,rück}(r_{vor}) = \int_{\varphi_{rück}=0}^{2\pi} \int_{r=-\infty}^{+\infty} \frac{J_{ph,ges}}{4\pi\sqrt{1+\frac{r_{rück}^2}{(d-w)^2}}(r_{rück}^2+(d-w)^2)} \times \frac{1}{4\pi\sqrt{1+\frac{\Delta r^2}{d^2}}(\Delta r^2+d^2)} r_{rück} dr_{rück} d\varphi_{rück}. \quad (6.17)$$

Dabei lässt sich Δr mit Hilfe des Kosinussatzes durch r_{vor} , $r_{rück}$, φ_{vor} und $\varphi_{rück}$ ausdrücken:

$$\begin{aligned} \Delta r &= \sqrt{r_{vor}^2 + r_{rück}^2 - 2r_{vor}r_{rück} \cos \Delta \varphi} \\ &= \sqrt{r_{vor}^2 + r_{rück}^2 - 2r_{vor}r_{rück} \cos(\varphi_{rück} - \varphi_{vor})}. \end{aligned} \quad (6.18)$$

Ohne Beschränkung der Allgemeingültigkeit lässt sich $\varphi_{vor} = 0$ setzen.

Die analytische Lösung des Integralausdrucks in Gleichung (6.17) ist mit einfachen Mitteln nicht möglich. Für ein weiteres Vorgehen müssten die Beiträge aus den Gleichungen (6.14) und (6.17) für eine kontinuierliche Verteilung der Ladungsträger gemäß einem Tiefenprofil $\Delta n(z)$ integriert werden. Zudem beeinflussen Reflexionen höherer Ordnung die Gesamtphotonenflussdichte auf der Vorderseite der Probe. In praktischen Fällen ist es darum unumgänglich, den genauen Einfluss einer Punkt- oder Linienquelle auf das Kamerasignal experimentell zu bestimmen. Dieses Vorgehen ist in Kapitel 6.3.4 näher beschrieben.

6.2 Reabsorption

Von Ladungsträgern emittierte, infrarote Strahlung kann wieder durch Ladungsträger reabsorbiert werden. Als Absorptionsmechanismen kommen die Band-Band-Absorption für Photonen ausreichender Energie und die Absorption an freien Ladungsträgern in Frage. In beiden Fällen kann genähert werden, dass aus einem Absorptionsprozess keine Reemission mehr stattfindet. Der Absorptionskoeffizient der IR-Absorption an freien Ladungsträgern hängt näherungsweise quadratisch von der Wellenlänge und linear von der Ladungsträgerdichte ab (siehe Gleichung (2.70)). Der Band-Band-Absorptionskoeffizient ist nur für energiereiche Photonen signifikant. Er nimmt für Energien oberhalb der Bandkante stark zu. Insgesamt ist festzustellen, dass Reabsorptionseffekte bei *Photoluminescence Imaging* im Vergleich zu *Carrier Density Imaging* verstärkt auftreten.

ten. Proben mit hoher Dotierung sind stärker von freier Ladungsträgerabsorption beeinflusst als Proben mit niedriger Dotierung.

Reabsorption hat zwei für die Berechnung der Ladungsträgerverteilung wesentliche Einflüsse auf das Messsignal: (i) Der Strahlungstransport durch Totalreflexion wird vermindert und (ii) das Messsignal hängt in nicht-linearer Weise von der Ladungsträgerdichte ab. Diese Faktoren werden im Folgenden untersucht.

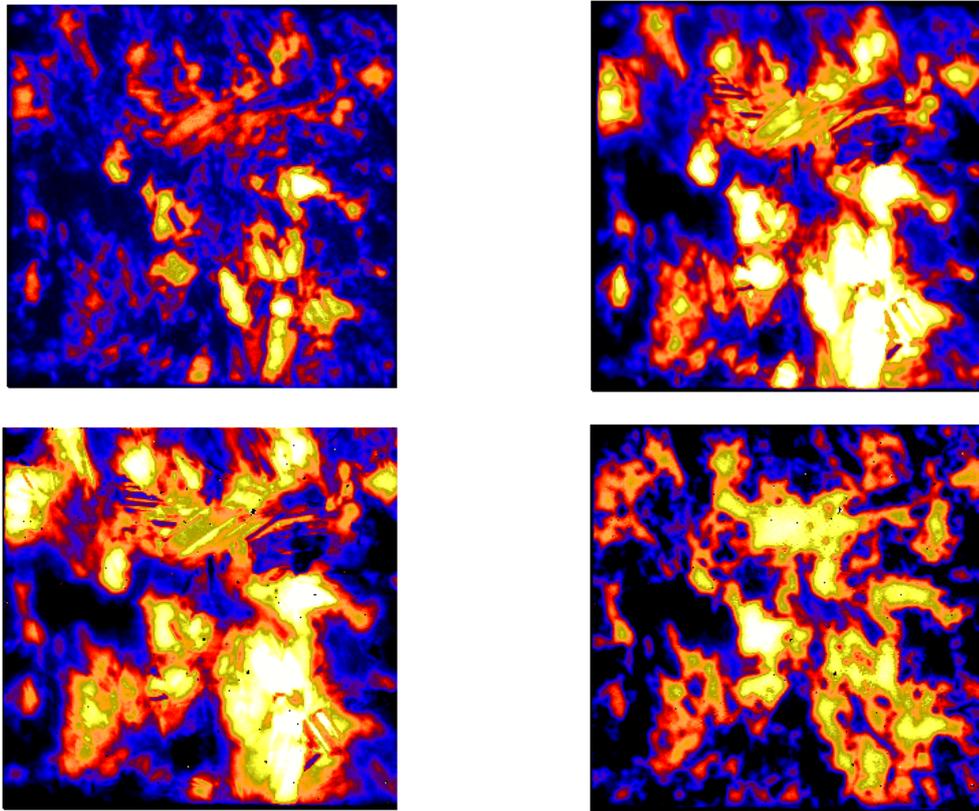


Abbildung 6.8: Unterschiedlicher Einfluss von Blurring, verursacht durch raue Oberflächen, für die Detektion der Photolumineszenz mit einer Si-Kamera (links oben) und einer InGaAs-Kamera (rechts oben) sowie der Detektion der IR-Emission freier Ladungsträger mit einer HgCdTe-Kamera (links unten). Rechts unten ist zum Vergleich eine CDI-Lebensdauermessung an einem Parallelwafer mit glatter Oberfläche gezeigt.

Bei planen Oberflächen ändert sich der Winkel eines reflektierten Strahls zur Oberfläche nicht. Wird Strahlung bei der ersten Reflexion totalreflektiert, gilt dies bis zum Austritt des Strahls am Rand der Probe. Bei rauen Oberflächen unterliegt der Reflexionswinkel einer statistischen Schwankung und der Strahlungstransport über Mehrfachreflexionen ist vermindert. Reabsorption vermindert die Reichweite mehrfach reflektierter Strahlen. Das hat z.B. zur Folge, dass *Photoluminescence Imaging* auf Grund der höheren Absorptionswahrscheinlichkeit im detektierten Energieintervall gegenüber der CDI-Methode in geringerem Maß von einer oberflächeninduzierten Unschärfe (Blurring) beeinflusst ist. Je nach detektierter Wellenlänge ist auch bei dieser Messmethode der Einfluss verschieden. Blurring ist bei der Verwendung einer Si-CCD Kamera deutlich geringer ausgeprägt als bei Verwendung einer InGaAs-Kamera. Wird im mittleren Inf-

rarot detektiert (z.B. CDI), ist der Blurringeffekt noch größer. In Abbildung 6.8 ist ein Vergleich von Ladungsträgerdichtemessungen mit verschiedenen Detektoren dargestellt.

Der Einfluss der Dotierung lässt sich an einem Experiment demonstrieren, das auf Siliziumwafern unterschiedlicher Basisdotierung einen Übergang von glatter zu texturierter Oberfläche untersucht. Abbildung 6.9 zeigt eine der untersuchten Proben und waagrechte Schnitte durch Proben verschiedener Basisdotierung.

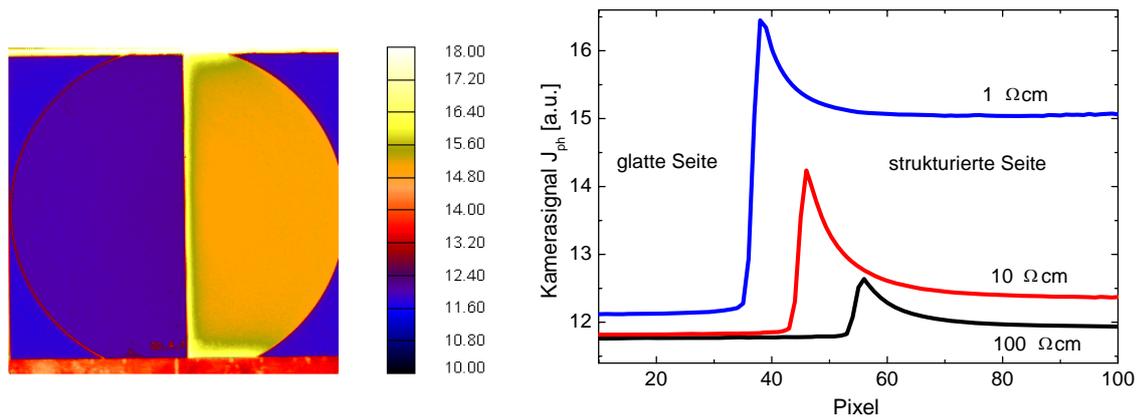


Abbildung 6.9: Infrarotbild einer erwärmten Siliziumprobe mit halbseitig texturierter Oberfläche (links) und Kurvenschar von waagrechten Schnitten durch Messungen an solchen Proben mit unterschiedlicher Basisdotierung (rechts).

Erwartungsgemäß ist auf der glatten Seite der Proben (linke Hälfte) das detektierte Signal signifikant kleiner als auf der mit *random pyramids* texturierten Seite (rechte Hälfte). Es ist in der Nähe der Grenze zwischen glatter und texturierter Oberfläche im texturierten Teil eine zusätzliche Erhöhung des Signals auszumachen, welches auf ein konstantes, tieferes Niveau abklingt. Diese Erhöhung erklärt sich durch den effektiven Strahlungstransport durch Totalreflexion im glatten Teil der Probe. Durch statistische Änderungen der Strahlrichtung nach jeder Reflexion im rauen Teil und durch Reabsorption, die von der Dotierung abhängt, sinkt das Messsignal in einigen Bildpunkten Entfernung von der Grenzlinie auf ein konstantes Niveau. In Abbildung 6.10 sind die Maxima relativ zum konstanten Signal auf der rauen Oberfläche und die Dämpfungskonstanten für verschieden dotierte Proben gezeigt, die durch Kurvenanpassungen eines exponentiellen Abfalls bestimmt wurden.

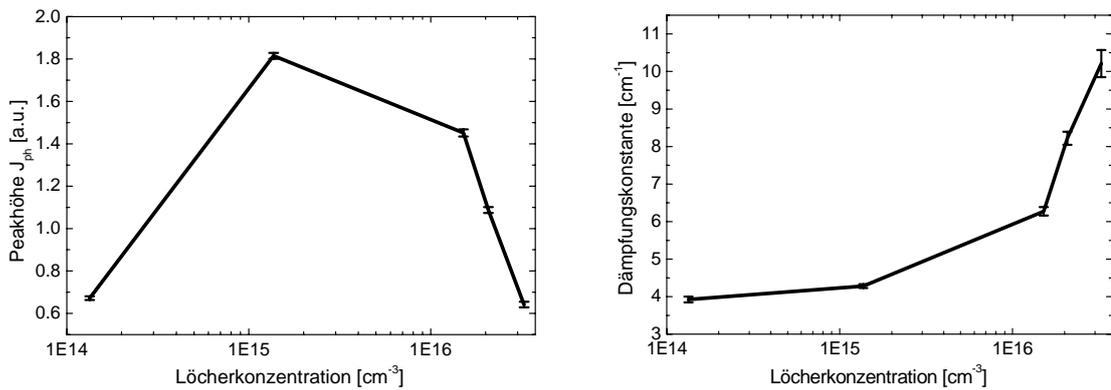


Abbildung 6.10: Abhängigkeit der relativen Höhe des Maximums (links) und der Dämpfungskonstanten (rechts) von der Basisdotierung. Die Werte wurden durch Kurvenanpassung mit einem monoexponentiellen Abfall an die Daten aus Abbildung 6.9 ermittelt.

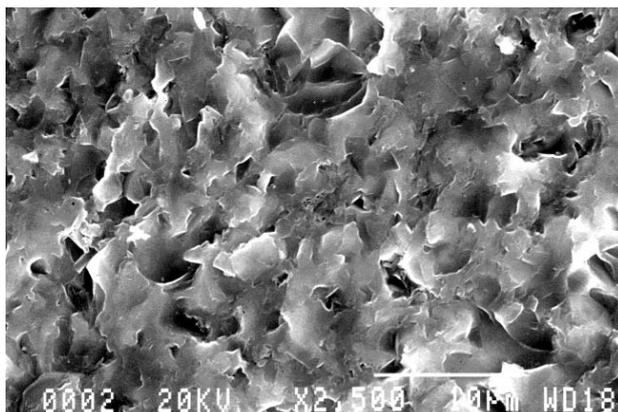
Die relative Höhe des Maximums steigt zunächst mit steigender Dotierung, weil die Dichte emittierender Quellen im glatten Bereich der Probe zunimmt und somit die Intensität totalreflektierter Strahlung erhöht ist. Da die Reabsorption aber mit der Dotierung steigt, sinkt die relative Höhe des Maximums für höhere Dotierungen wieder auf kleinere Werte. Die Dämpfungskonstante steigt erwartungsgemäß mit der Dotierung.

6.3 Anwendung der Oberflächenkorrekturen auf reale Proben

6.3.1 Reale Oberflächen

In der industriellen Herstellung von Silizium-Solarzellen müssen Messungen zur Materialcharakterisierung typischerweise an rauen Oberflächen durchgeführt werden. Zu Beginn der Zellprozessierung sind die Oberflächen der Wafer durch den Sägeprozess bedingt rau. Der sogenannte Sägeschaden ist im Vergleich zu späteren Texturen sehr homogen. Abbildung 6.11 zeigt eine Mikroskopaufnahme einer typischen Oberfläche mit Sägeschaden.

Abbildung 6.11: Rasterelektronenmikroskopaufnahme der Oberfläche eines Siliziumwafers mit Sägeschaden.



Später in der Prozesskette werden die Oberflächen texturiert. Dies geschieht typischerweise in einem nasschemischen Ätzverfahren. Verbreitet sind die alkalische Ätze mit Kaliumhydroxid oder Natriumhydroxid sowie saure Ätzen. Die genannten alkalischen Ätzprozesse führen zu einem Materialabtrag, der stark von der Kristallorientierung abhängt. In multikristallinem Material führt diese Abhängigkeit zu einer stark anisotropen Struktur der Oberfläche. Saure Ätzverfahren erreichen meist deutlich homogenere Texturergebnisse. Ein Vergleich zweier Mikroskopaufnahmen von alkalischer und saurer Textur auf multikristallinen Siliziumwafern ist in Abbildung 6.12 gezeigt.

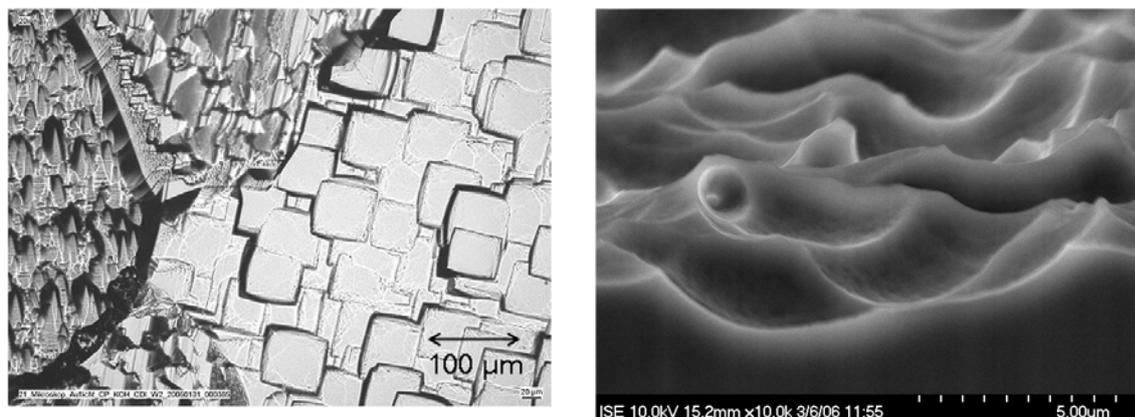
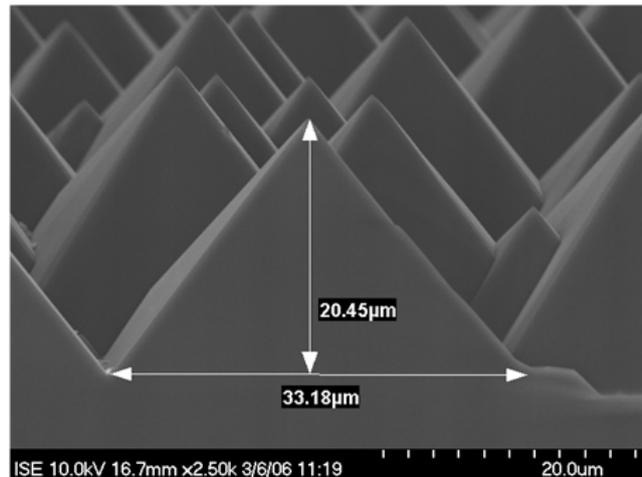


Abbildung 6.12: Lichtmikroskopaufnahme einer Siliziumoberfläche nach einer alkalischen, anisotropen Textur mit KOH (links) und Rasterelektronenmikroskopaufnahme einer Siliziumoberfläche nach industriell prozessierter isotropen Textur mit einer sauren Ätze (rechts).

Nasschemische Texturen auf monokristallinem Material erreichen auch bei alkalischen Ätzprozessen eine homogenere Struktur. Ein typisches Beispiel ist eine Textur mit sogenannten „random pyramids“ (Abbildung 6.13), einer pyramidenförmigen Struktur, die eine sehr effektive Einkopplung auftreffender Strahlung bewirkt.

Abbildung 6.13: Alkalische Oberflächentextur auf monokristalliner Waferoberfläche (random pyramids). Als Beispiel typischer Strukturgrößen ist eine pyramidenförmige Struktur ausgemessen.



Diese Aufnahmen zeigen, dass in der Praxis sehr unterschiedliche Oberflächen zu erwarten sind. Diese unterscheiden sich in der Strukturgröße, Winkelverteilung der Oberflächennormalen und Homogenität beträchtlich. In der folgenden Betrachtung wird die alkalisch geätzte Oberfläche als Beispiel mit größter Variation der Oberflächenqualität betrachtet.

6.3.2 Emissivitätskorrektur

Lebensdauermessungen an Siliziumproben mit unterschiedlicher Oberfläche, aber gleicher Basisdotierung und Dicke, können mit dem im Folgenden beschriebenen Verfahren verglichen werden. Ist eine Probe mit zu den bei der CDI-Kalibrierung verwendeten Proben vergleichbarer (glatter) Oberfläche verfügbar, kann so die Lebensdauer quantitativ bestimmt werden.

In einem für CDI üblicherweise verwendeten Kalibrierverfahren wird das Kamerasignal in Abhängigkeit verschieden dotierter Siliziumproben mit glatter Oberfläche bestimmt (siehe Kapitel 4). Aus dem linearen Verhalten wird daraus ein Umrechnungsfaktor bestimmt, der aus dem Kamerasignal die Berechnung der Überschussladungsträgerdichte ermöglicht.

Prinzipiell ist dieser Weg auch für raue Proben denkbar. In diesem Fall werden Proben mit unterschiedlicher Dotierung benötigt, deren Oberflächenstruktur der der rauhen Probe entspricht. Dieses Verfahren hat aber zwei entscheidende Nachteile: Erstens muss für jede benötigte Oberflächenstruktur ein eigener Kalibrierprobensatz mit den entsprechenden Oberflächeneigenschaften hergestellt werden. Schwankungen in der Oberflächenqualität wirken sich direkt als Messfehler bei der Bestimmung der Lebensdauer aus. Zweitens wird bei diesem Verfahren implizit eine homogene Oberfläche angenommen. Insbesondere bei multikristallinen Proben kann diese Annahme aber unzutreffend sein. Anisotrope Ätzen erzeugen je nach Kornorientierung sehr unterschiedliche Oberflächenstrukturen.

Aus diesen Gründen ist in dieser Arbeit ein Verfahren entwickelt worden, das eine Kalibrierung mit einer (in Grenzen) beliebigen Oberfläche erlaubt. Anstatt die Intensität der emittierten Infrarotstrahlung mit Hilfe von unterschiedlich dotierten Kalibrierproben für die Kalibrierung zu variieren, kann die Temperatur der Probe verändert werden. Im Gegensatz zu einer Variation der Basisdotierung, bei der die Konzentrationen der freien Ladungsträger bekannt sind, bewirkt eine Änderung der Temperatur einen a priori unbekanntem Unterschied der Strahlungsintensität. Deshalb ist es nicht möglich, den korrekten Kalibrierfaktor direkt zu bestimmen. Aus diesem Grund wird das für die Probe gemessene temperaturabhängige Kamerasignal mit Messungen eines schwarzen Körpers bei entsprechender Temperatur verglichen. Abbildung 6.14 zeigt das Kamerasignal einer Probe, aufgetragen gegen das Kamerasignal eines gleich temperierten, schwarzen Körpers für verschiedene Temperaturen. Die Abhängigkeit ist für Proben mit sägerauer, alkalisch geätzter und glanzgeätzter Oberfläche gezeigt.

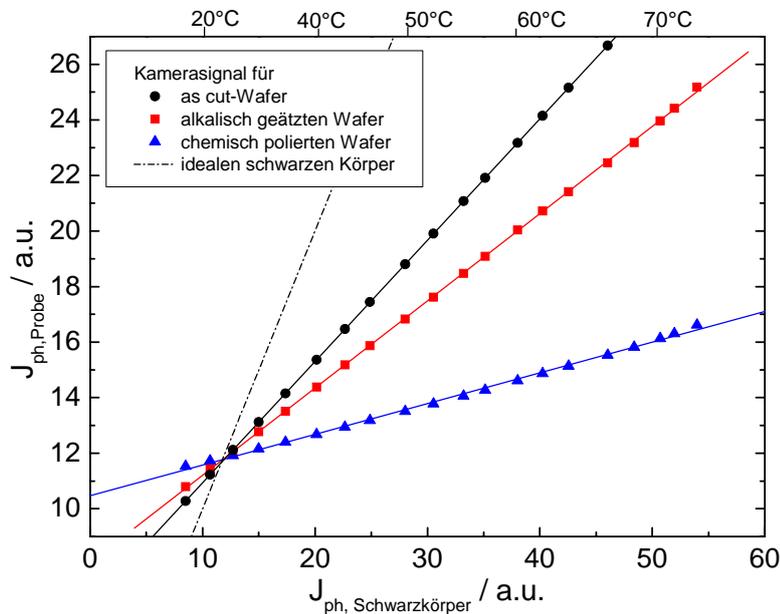


Abbildung 6.14: Photonflussdichte von Siliziumproben unterschiedlicher Oberflächenqualität gegen die Photonflussdichte eines schwarzen Körpers bei gleicher Temperatur. Jeder Datenpunkt entspricht einer bestimmten Temperatur.

In allen Fällen kann eine näherungsweise lineare Beziehung zwischen der Photonflussdichte der Probe und des schwarzen Körpers festgestellt werden (durchgezogene Linien in Abbildung 6.14). Diese Beziehung kann für jedes Kamerapixel getrennt aufgenommen werden und in dieser Weise eine Matrix der Steigungen $m_{Jph}(x,y)$ für raue Oberflächen bestimmt werden. Mit Hilfe der Steigung $m_{Jph,glatt}$ bei einer Probe mit glatter Oberfläche, aber gleicher Dotierung und Dicke, lässt sich die durch die raue Oberfläche verfälschte Lebensdauerermessung $\tau_{rau}(x,y)$ korrigieren:

$$\tau_{rau,korr}(x,y) = \frac{m_{Jph,glatt}}{m_{Jph,rau}(x,y)} \tau_{rau}(x,y). \quad (6.19)$$

Zur Bestimmung von $m_{Jph}(x,y)$ sind prinzipiell zwei Messpunkte ausreichend. Da sich alle Geraden bei Raumtemperatur schneiden (siehe Abbildung 6.14), kann $m_{Jph}(x,y)$ aus einer einzigen Messung über Zimmertemperatur bestimmt werden. Diese Messung wird bei jeder Standardmessung, bei der die Probe auf typischerweise 55 °C temperiert ist, routinemäßig mit abgespeichert, so dass zur Berechnung von $m_{Jph}(x,y)$ kein zusätzlicher Messaufwand notwendig ist.

Die Steigung m_{Jph} ist mit der Emissivität der Probe eng verwandt. Ausgedrückt durch die spektralen Photonendichten j_{Probe} und $j_{Schwarzkörper}$ ergibt sich für m_{Jph}

$$m_{Jph} = \frac{\int_{\lambda=\lambda_{min}}^{\lambda_{max}} \int_{\theta=0}^{\arctan(\frac{s}{D})} \int_{\varphi=0}^{2\pi} \eta(\lambda) j_{Probe}(\lambda, \theta, \varphi, T_{Probe}) \sin \theta d\varphi d\theta d\lambda}{\int_{\lambda=\lambda_{min}}^{\lambda_{max}} \int_{\theta=0}^{\arctan(\frac{s}{D})} \int_{\varphi=0}^{2\pi} \eta(\lambda) j_{Schwarzkörper}(\lambda, \theta, \varphi, T_{Schwarzkörper}) \sin \theta d\varphi d\theta d\lambda}, \quad (6.20)$$

wobei s die Apertur der Kamera im Abstand D beschreibt, θ und φ Polar- und Azimutwinkel. λ_{min} und λ_{max} sind die Grenzen des Empfindlichkeitsbereichs der Kamera, T_{Probe} ist die Proben temperatur. Die directionale spektrale Emissivität $\varepsilon'_{\lambda}(\lambda, \theta, \varphi, T_{Probe})$ ist definiert als Quotient der emittierten Energiedichte von Probe und schwarzem Körper bei der Temperatur T_{Probe} , Wellenlänge λ und Winkeln θ und φ [108].

Die directionale spektrale Photonendichte j_{Probe} kann mit Hilfe der directionalen spektralen Energiedichte i_{Probe} ausgedrückt werden:

$$\begin{aligned} j_{Probe}(\lambda, \theta, \varphi, T_{Probe}) &= \frac{\lambda}{h c} i_{Probe}(\lambda, \theta, \varphi, T_{Probe}) \\ &= \frac{\lambda}{h c} \varepsilon'_{\lambda}(\lambda, \theta, \varphi, T_{Probe}) i_{Schwarzkörper}(\lambda, \theta, \varphi, T_{Probe}). \end{aligned} \quad (6.21)$$

h ist das Planck'sche Wirkungsquantum und c die Lichtgeschwindigkeit. m_{Jph} wird so zu

$$m_{Jph} = \frac{\int_{\lambda=\lambda_{min}}^{\lambda_{max}} \int_{\theta=0}^{\arctan(\frac{s}{D})} \int_{\varphi=0}^{2\pi} \frac{\eta(\lambda) \lambda}{h c} \varepsilon'_{\lambda}(\lambda, \theta, \varphi, T_{Probe}) i_{Schwarzkörper}(\lambda, \theta, \varphi, T_{Probe}) \sin \theta d\varphi d\theta d\lambda}{\int_{\lambda=\lambda_{min}}^{\lambda_{max}} \int_{\theta=0}^{\arctan(\frac{s}{D})} \int_{\varphi=0}^{2\pi} \frac{\eta(\lambda) \lambda}{h c} i_{Schwarzkörper}(\lambda, \theta, \varphi, T_{Probe}) \sin \theta d\varphi d\theta d\lambda}. \quad (6.22)$$

Im Spezialfall, dass ε'_{λ} im betrachteten Intervall von λ , θ und φ unabhängig ist, reduziert sich Gleichung (6.22) auf

$$m_{Jph} = \varepsilon'_{\lambda}. \quad (6.23)$$

Im Folgenden wird aus diesem Grund die Steigung m_{Jph} vereinfacht als Emissivität bezeichnet.

6.3.3 Räumliche Entfaltung des Messsignals

Zusätzlich zu den erhöhten Absolutwerten verursachen raue Probenoberflächen eine durch Reflexion und Brechung bedingte Verzerrung des Messsignals. Dieser Effekt wurde in Kapitel 6.1.2 für eine Punktquelle analytisch bestimmt. Mathematisch lässt sich diese Transformation durch eine Faltung ausdrücken. Ein ähnliches Problem ist für den Fall von Infrarot-Thermographie-Messungen in [109] beschrieben. Die folgende Betrachtung ähnelt dem dort beschriebenen Verfahren.

Eine Oberflächentransformation einer beliebigen Lebensdauervertelung $\tau_{rec}(x,y)$ kann mit Hilfe einer Punkt-Antwort-Funktion oder „*Point Spread Function*“ $PSF(x,y)$ ausgedrückt werden. Diese beschreibt die Transformation einer Punktverteilung $\tau_{rec,Punkt}(x,y) = \delta(x-x_0,y-y_0)$. Es ergibt sich für die Transformation $\tau_{rau}(x,y)$:

$$\tau_{rau}(x,y) = \int \tau_{rec}(x-x',y-y') PSF(x',y') dx'dy' . \quad (6.24)$$

Um aus diesem Signal die unverzerrte Verteilung zu berechnen, muss die inverse mathematische Operation, die Entfaltung, durchgeführt werden. Ein übliches Verfahren ist deren Berechnung im Fourier-Raum, da sich Gleichung (6.24) zu

$$\hat{\tau}_{rau} = \hat{\tau}_{rec} \hat{PSF} \quad (6.25)$$

vereinfacht. Der Zirkumflex markiert dabei die jeweiligen Fouriertransformierten der Funktionen. Prinzipiell kann so aus Gleichung (6.25) $\hat{\tau}_{rec}$ direkt bestimmt werden und durch Fourier-Rücktransformation das gewünschte, unverzerrte Lebensdauersignal extrahiert werden. In Folge von Nullstellen von $\hat{\tau}_{rau}$ lässt sich diese Operation aber nicht ohne Weiteres durchführen. Eine mögliche Lösung des Problems ist die Anwendung eines Wiener Filters [109]). Hierbei wird ein reeller, positiver Korrekturparameter K eingeführt:

$$\hat{\tau}_{rec} = \frac{\hat{PSF}^* \hat{\tau}_{rau}}{|\hat{PSF}|^2 + K} , \quad (6.26)$$

wobei \hat{PSF}^* die komplex Konjugierte von \hat{PSF} ist. Für $K = 0$ wird Gleichung (6.26) zu Gleichung (6.25). Die optimale Wahl des Korrekturparameters K folgt zwei Regeln:

- (i) K soll möglichst klein sein, um den Einfluss auf die Transformation zu minimieren.
- (ii) K muss groß genug gewählt werden, um Singularitäten zu vermeiden.

Alternativ zum Konzept des Wiener Filters kann auch ein iteratives Verfahren eingesetzt werden, das in [109] beschrieben ist:

Idee dieses Konzeptes ist es, eine geeignete Schätzung des Urbilds, d.h. der gesuchten korrekten Lebensdauervertelung, zu falten und mit der Messung zu vergleichen. Daraus lässt sich eine Verbesserung der Schätzung ermitteln, die dann den beschriebenen Pro-

zess erneut durchläuft. Das Schema in Abbildung 6.15 verdeutlicht den zu Grunde liegenden Algorithmus:

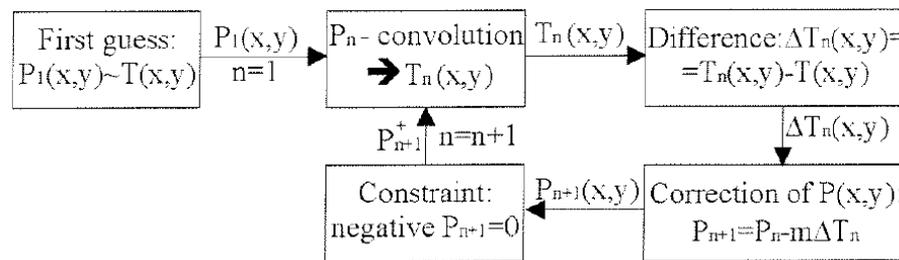


Abbildung 6.15: Iteratives Verfahren zur numerischen Entfaltung nach Breitenstein (aus [109]).

Nach diesem Verfahren wird als erste Schätzung des Urbilds $P_1(x,y)$ die Messung $T(x,y)$ gewählt. Die Faltung von P_1 wird mit T_1 bezeichnet. Die Differenz dieser Faltung und der Messung T wird von der Schätzung P_1 abgezogen. Dabei wird ein Dämpfungsparameter m eingeführt, der diese Korrektur skaliert. Schließlich können in einem optionalen Schritt negative Werte der neuen Schätzung null gesetzt werden. Die neue Schätzung des Urbilds wird wieder gefaltet, um eine weitere Iteration durchzuführen. Das Verfahren kann abgebrochen werden, wenn die Korrektur der Schätzung kleiner als ein zu wählender Grenzwert ist.

6.3.4 Experimentelle Ergebnisse

Die Emissivitätskorrektur wurde auf CDI-Messungen an rauen Proben getestet. Zum Vergleich wurden Parallelwafer mit glanzgeätzter und mit alkalisch geätzter Oberfläche hergestellt. Die glanzgeätzten Proben weisen eine glatte, mit den Kalibrierproben vergleichbare Oberfläche auf, wohingegen die alkalisch geätzte Oberfläche rau und stark inhomogen ist. Die Proben wurden mit einer SiN-Oberflächenbeschichtung elektrisch passiviert. Mit dieser Passivierung werden typischerweise Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeiten von $S < 25$ cm/s erreicht [110].

Unkorrigierte CDI-Messungen (Abbildung 6.16) an diesen Proben weisen starke Unterschiede sowohl im Absolutwert als auch in der örtlichen Verteilung auf.

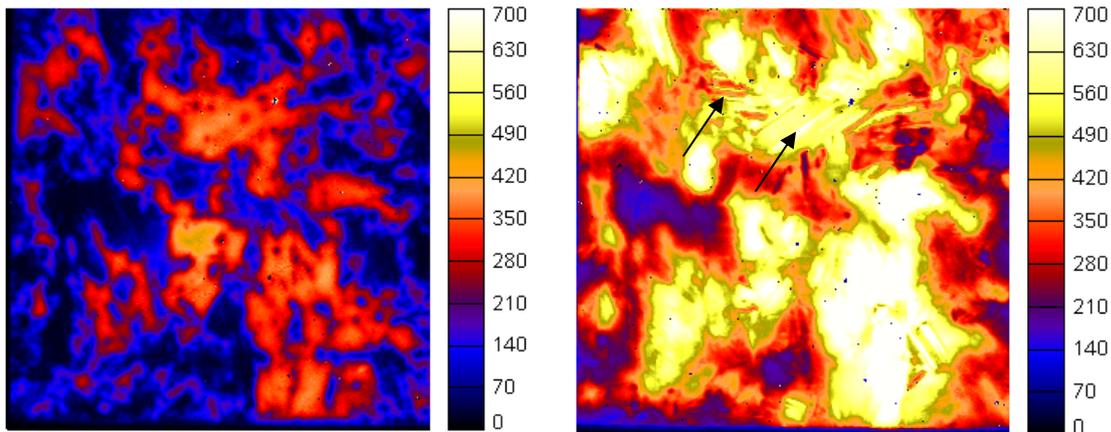


Abbildung 6.16: Unkorrigierte CDI-Lebensdauermessungen an einer chemisch polierten Probe (links) und einer alkalisch geätzten Probe (rechts). Die Probendimension beträgt jeweils $100 \times 100 \text{ mm}^2$. Messwerte in μs .

Die Erhöhung des Absolutwerts lässt sich durch die erhöhte Emissivität der Oberfläche erklären (siehe Kapitel 6.1, 6.3.2). Die Unterschiede in der qualitativen Verteilung sind auf Streuung an der Oberfläche und Mehrfachreflexionseffekte zurückzuführen (Kapitel 6.1, 6.3.3). Die Emissivität der Proben wurde der Beschreibung in Kapitel 6.3.2 folgend bestimmt und ist in Abbildung 6.17 dargestellt. Sie wurde aus einem Kamerabild der Probe bei einer Proben temperatur von etwa $55 \text{ }^\circ\text{C}$ berechnet.

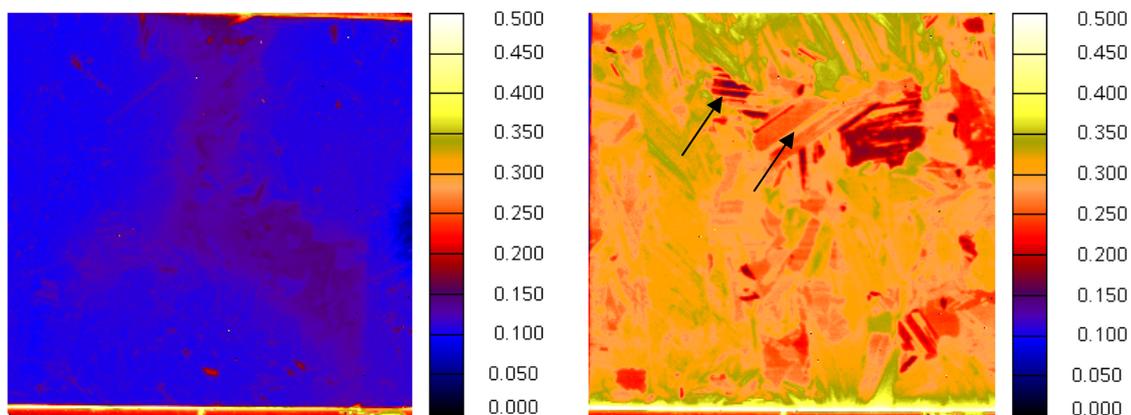


Abbildung 6.17: Emissivitätsverteilung der glanzgeätzten (links) und alkalisch geätzten Probe (rechts).

Die Pfeile in Abbildung 6.16 markieren Bereiche, in denen Inhomogenitäten der Emissivitätsverteilung (Pfeile in Abbildung 6.17) die Struktur der Lebensdauer messung verfälschen.

Diese Inhomogenitäten sind auf unterschiedliche Oberflächenstrukturen zurückzuführen. Im Lichtmikroskopbild (Abbildung 6.12) sind die Unterschiede in der Oberflächenqualität leicht zu erkennen. Eine orts aufgelöste Emissivitätskorrektur gemäß Gleichung (6.19) liefert das in Abbildung 6.16 dargestellte Ergebnis.

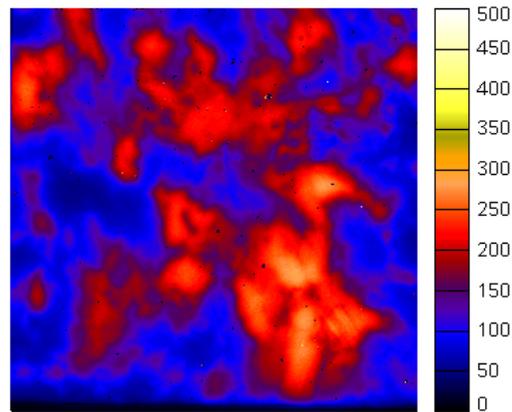


Abbildung 6.18: Mit Hilfe der Emissivitätskorrektur berechnete Lebensdauerverteilung aus einer CDI-Messung der alkalisch geätzten Probe. Lebensdauern in μs .

Die durch Emissivitätsunterschiede induzierten Artefakte in der unkorrigierten Messung sind im korrigierten Lebensdauerbild nicht mehr vorhanden. Außerdem entspricht der Mittelwert der korrigierten Messung in guter Näherung der Referenzmessung: Der Mittelwert der Referenzmessung beträgt $\tau_{\text{ref}} = 157 \mu\text{s}$, der Mittelwert der korrigierten Messung an der rauen Probe beträgt $\tau_{\text{rau,korr}} = 143 \mu\text{s}$. Unkorrigiert beträgt der Mittelwert $\tau_{\text{rau,unkorr}} = 448 \mu\text{s}$. Der Unterschied von etwa 10 % zwischen korrigierter Messung und Referenzmessung lässt sich durch Unterschiede der Passivierungsqualität erklären, die auf Grund der rauen Oberfläche reduziert sein kann. Die Ortsauflösung der korrigierten Messungen ist aber noch nicht befriedigend.

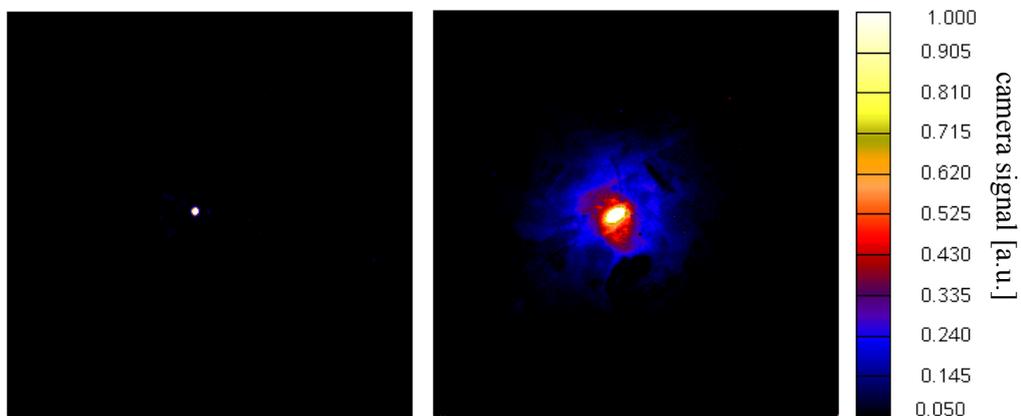


Abbildung 6.19: CDI-Messungen mit lokaler Laserbeleuchtung an einer chemisch polierten Probe (links) und einer alkalisch geätzten Probe (rechts). Es ist jeweils die gesamte Probenfläche von $100 \times 100 \text{ mm}^2$ zu sehen.

Um die tatsächliche Struktur der Lebensdauerverteilung aus der verzerrten Messung zu erhalten, wurde die in Kapitel 6.3.3 beschriebene Entfaltungsmethode eingesetzt. Zuerst wurde die Punkt-Antwort-Funktion experimentell bestimmt. Hierfür wurde statt der sonst im CDI-Aufbau benutzten homogenen Beleuchtung (siehe Kapitel 4.1.1) ein fokussierter Laser mit einer Wellenlänge von 991 nm zur lokalen Ladungsträgergenerati-

on in der Probe genutzt. Die so entstandenen CDI-Messungen sind in Abbildung 6.19 gezeigt.

Aus einer Referenzmessung an einer polierten Probe mit sehr kleiner Diffusionslänge konnte eine obere Grenze des Laserpunkt-Durchmessers von $d_{\max} = 250 \mu\text{m}$ bestimmt werden. In Abbildung 6.20 ist ein Schnitt durch die punktförmig beleuchtete Messung der rauhen Probe gezeigt.

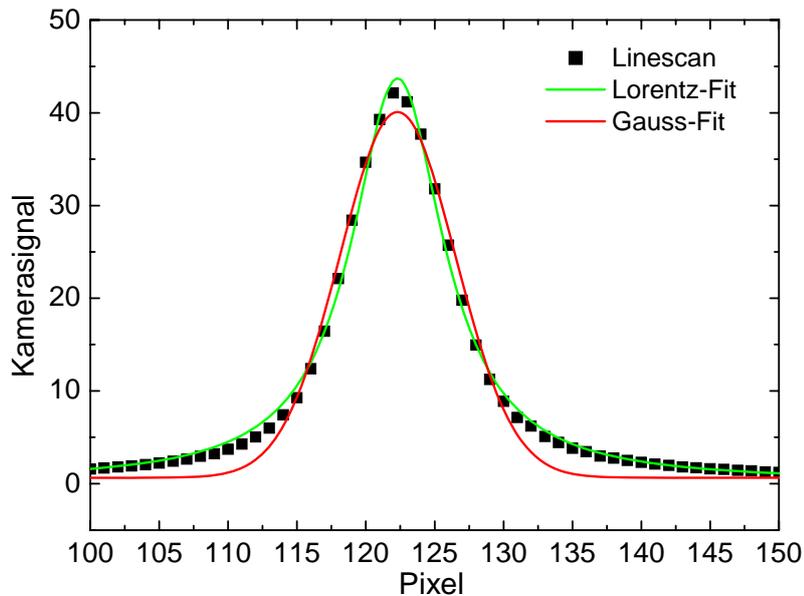


Abbildung 6.20: Horizontaler Schnitt durch die punktförmig beleuchtete Messung an rauher Probe aus Abbildung 6.19 (rechts). Die gezeigten Kurvenanpassungen wurden mit einer Lorentz-Funktion und einer Gauß-Funktion durchgeführt. Ein Pixel entspricht $350 \mu\text{m}$.

Empirisch hat sich eine Lorentz-Kurvenanpassung als hinreichend genau für die analytische Beschreibung der Messung herausgestellt. Dies ist konsistent mit dem in Kapitel 6.1.2 erhaltenen theoretischen Ergebnis. Die Kurvenanpassung wurde zur Bestimmung der Punkt-Antwort-Funktion herangezogen, um die in Kapitel 6.3.3 beschriebene Entfaltung durchzuführen. Obwohl die Oberflächenrauheit der Probe variiert, hat sich experimentell herausgestellt, dass die Breite der Lorentzfunktion nur schwach vom Ort der Beleuchtung abhängt. Deshalb wurde im Folgenden nur eine Punkt-Antwort-Funktion für die gesamte Entfaltungsprozedur benutzt.

Im ersten Schritt wurde geprüft, ob eine mathematische Faltung den Einfluss einer rauhen Oberfläche auf das Messsignal beschreiben kann. Dazu wurde die Referenzmessung gemäß Gleichung (6.24) und der in Abbildung 6.20 gezeigten Punkt-Antwort-Funktion transformiert. In Abbildung 6.21 ist das Ergebnis dieser Faltung (Mitte) dargestellt.

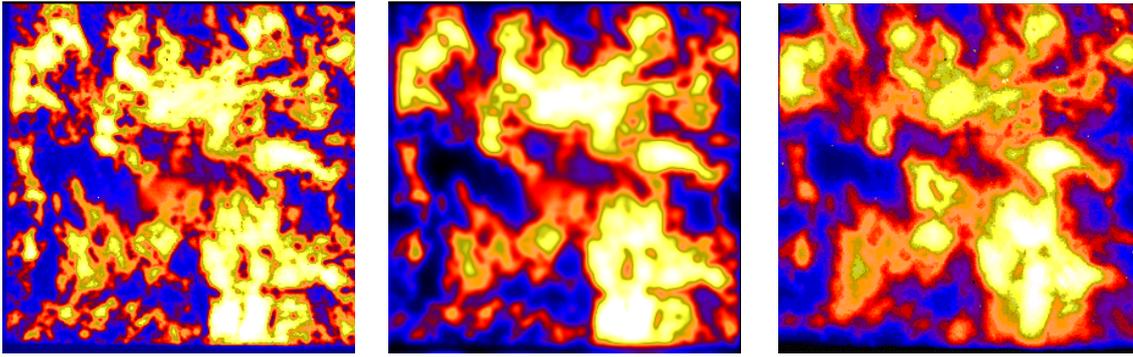


Abbildung 6.21: Referenzmessung (links), Referenzmessung nach Faltung (Mitte) und Messung an alkalisch geätzter Probe nach Emissivitätskorrektur (rechts).

Der Vergleich der Histogramme in Abbildung 6.22 zeigt, dass die Faltung der Referenzmessung mit der Messung der rauen Probe sehr ähnlich ist.

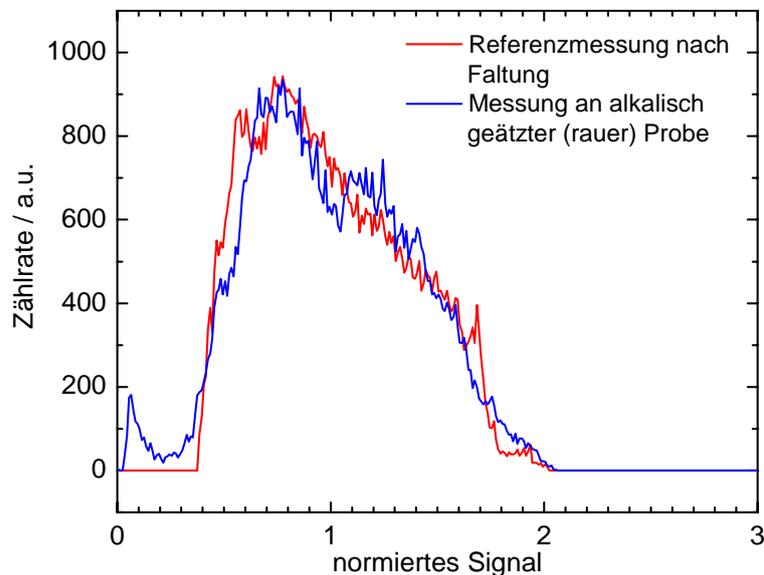


Abbildung 6.22: Normierte Histogramme der gefalteten Referenzmessung und der Messung an der alkalisch geätzten Probe (nach Emissivitätskorrektur).

Der inverse Schritt, die Entfaltung, sollte nach diesem Modell die korrekte Verteilung der Lebensdauer liefern. Für die hier beschriebenen Messungen wurden die in Kapitel 6.3.3 vorgestellten Verfahren angewandt. Um das Konzept des Wiener Filters umzusetzen, wurde für die numerische zweidimensionale Berechnung auf eine *Fast Fourier Transformation*-Routine [111] zurückgegriffen. Als optimaler Korrekturparameter in Gleichung (6.26) wurde $K = 10^{-10}$ bestimmt. Zum Vergleich wurde das beschriebene iterative Verfahren angewandt. Die Ergebnisse für die Entfaltung mit Hilfe des Wiener-Filters sind in Abbildung 6.23 gezeigt.

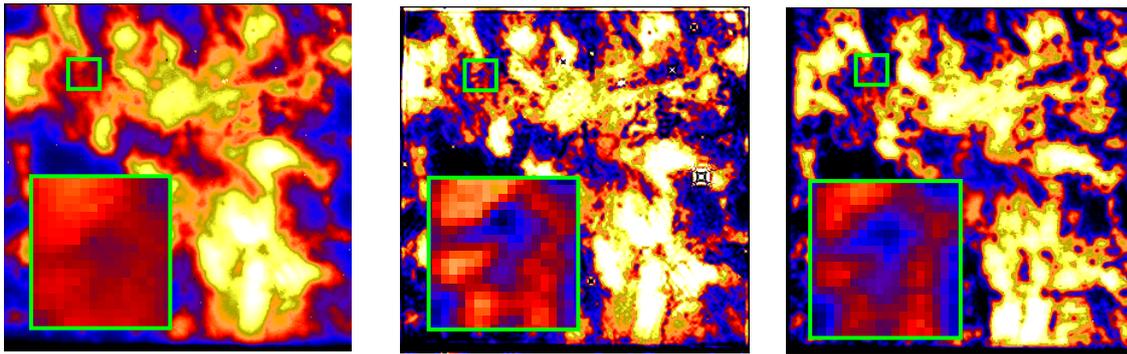


Abbildung 6.23: CDI-Messung an einer rauhen Probe nach der Emissivitätskorrektur (links) und Entfaltung mit Hilfe des Wiener Filters im Fourier-Raum (Mitte). Zum Vergleich ist die Referenzmessung gezeigt (rechts). Die kleinen kreuzartigen Strukturen im mittleren Bild haben ihren Ursprung in defekten Pixeln der Kamera: Nach Hin- und Rücktransformation in und aus dem Fourier-Raum sind benachbarte Bildpunkte beeinflusst.

Die korrigierte Messung an der alkalisch geätzten Probe (Mitte) ist gut mit der Referenzmessung an der chemisch polierten Probe (rechts) vergleichbar. In Abbildung 6.24 sind die Entfaltung nach dem iterativen Verfahren (links) und mit Hilfe des Wiener Filters (rechts) gegenübergestellt.

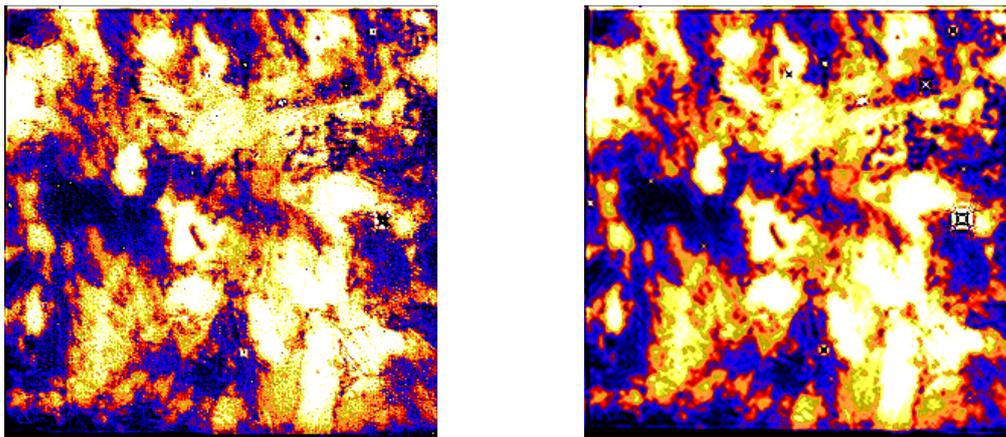


Abbildung 6.24: Vergleich der Entfaltung nach dem iterativen Verfahren (links) und der Methode mit Wiener Filter (rechts). Beide Wege ermöglichen die Wiederherstellung der durch die Rauheit der Oberflächen reduzierten Ortsauflösung.

Es zeigt sich, dass beide Verfahren sehr gut in der Lage sind, die Ortsauflösung gegenüber der unkorrigierten Messung signifikant zu erhöhen. In guter Näherung ist die Struktur der korrigierten Messungen gleich der Referenzmessung (Abbildung 6.23, rechts). Auch der Vergleich der Häufigkeitsverteilungen liefert eine zufriedenstellende Übereinstimmung mit der Referenzmessung. In Abbildung 6.25 sind beide diskutierten Entfaltungsverfahren mit der Referenzmessung und der unkorrigierten Messung verglichen. Die Unterschiede im vorderen Teil der Verteilungen lassen sich mit einem insgesamt erhöhten statistischen Rauschen erklären, das den bei der Referenzmessung steilen Anstieg abschwächt.

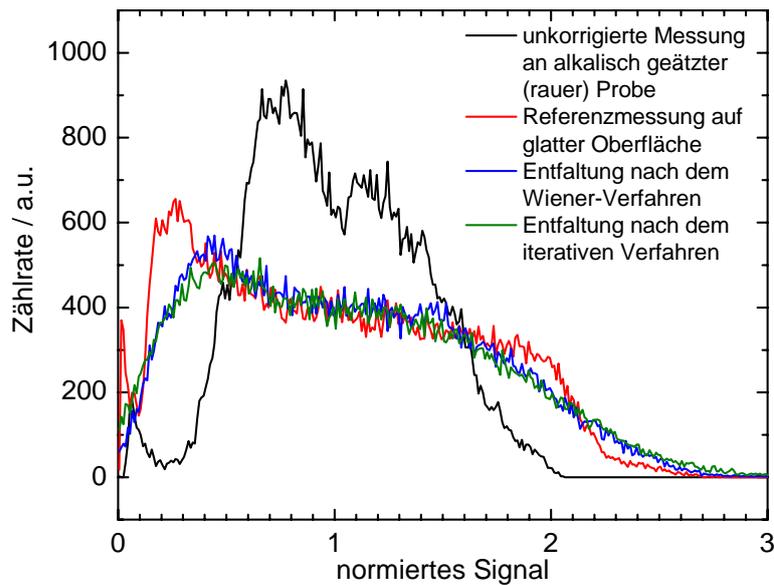


Abbildung 6.25: Häufigkeitsverteilungen der unkorrigierten Messung an rauher Probe (schwarz), der Referenzmessung an glatter Probe (rot) und der korrigierten Messungen nach dem Wiener Verfahren (blau) und dem iterativen Verfahren (grün). Beide Korrekturen liefern sehr ähnliche und zur Referenzmessung vergleichbare Ergebnisse.

Insgesamt lässt sich feststellen, dass das vorgestellte Verfahren zur Korrektur von Messwerten, die auf Grund rauher Oberflächen in Bezug auf Absolutwert und örtlicher Verteilung verfälscht sind, geeignet ist. Das hier vorgestellte Beispiel vergleicht zur Ermittlung des Absolutwerts die Emissivität der rauhen Probe mit einer Referenzemissivität einer glatten Probe gleicher Dotierung und Dicke. Prinzipiell ist es jedoch auch denkbar, aus der Dicke und der dann notwendigerweise bekannten Basisdotierung eine Referenzemissivität zu berechnen, die zur Korrektur verwandt werden kann.

7 Ortsaufgelöste Lumineszenzspektroskopie

Im Vergleich zur integralen Detektion infraroter Strahlung mittels Kameras liefern spektroskopische Verfahren detailliertere Informationen über die Wellenlängenverteilung emittierter Strahlung. Diese Verteilung gibt neben der Information der Rekombinationslebensdauer zusätzlichen Aufschluss über Defekte im Halbleiter. Unter Verlust der hohen Messgeschwindigkeit, die kamerabasierte Systeme typischerweise aufweisen, bieten die in diesem Kapitel behandelten Methoden eine höhere Informationstiefe und in einigen Fällen eine höhere Ortsauflösung. Es werden sowohl Photo- als auch Kathodolumineszenz-Messungen vorgestellt. Der Schwerpunkt dieses Kapitels liegt auf Probenuntersuchungen, die im Rahmen eines Forschungsaufenthalts in den USA durchgeführt wurden. Die Photolumineszenzmessungen wurden in Zusammenarbeit mit Prof. Ostapenko an der University of South Florida in Tampa realisiert. Die Kathodolumineszenzmessungen sowie Kristallorientierungs-Messungen entstanden aus einer Zusammenarbeit mit Dr. Romero am National Renewable Energy Laboratory in Golden, Colorado. Die aus den spektroskopischen Verfahren gewonnenen Ergebnisse wurden mit CDI-Messungen verglichen. Neben der Rekombinationslebensdauer wurden insbesondere Haftstellenmessungen (siehe Kapitel 5) zur Korrelation mit den spektralen Lumineszenzerggebnissen herangezogen.

7.1 Stand der Forschung

Im Wellenlängenbereich von 1100 nm bis 1600 nm wurden erstmals 1976 von Drozdov et al. [112] Linien im Siliziumspektrum gefunden, die Versetzungen zugeordnet wurden. Den Linien wurden die Namen D1, D2, D3 und D4 gegeben und ihre spektrale

Position bestimmt (siehe Abbildung 7.1). Weitere Linien wurden bei unterschiedlich behandeltem Silizium gefunden. Ihre spektralen Positionen sind mit aufgenommen. Die genaue Lage der Linien hängt unter anderem vom Grad der Verspannung, der Temperatur und der Injektionsdichte ab. Deshalb ist die Angabe der Linienposition mit einer Unsicherheit behaftet. Die in Abbildung 7.1 aufgelisteten Positionen wurden bei einer Temperatur von 4.2 K ermittelt.

Name	Wellenlänge / nm	Energie / eV	Quelle
D1	1527	0.812	[112]
	1537	0.807	[113]
D2	1417	0.875	[112]
	1419	0.874	[113]
D3	1328	0.934	[112]
	1305	0.95	[113]
D4	1240	1.000	[112]
	1253	0.99	[113]
D5	1300	0.953	[114]
D5'	1380	0.900	[114]
D5 (Pizzini)	1466	0.846	[113]
D6	1224	1.0126	[114]
D12	1468	0.8443	[114]
B-O	1110	1.117	[115]
C _i -O _i	1570	0.79	[116]
B _i -O _i	1425	0.87	[116]
Boron+intrinsic defects	~1425	~0.87	[117]

Abbildung 7.1: Einige bekannte Defektlinien in Silizium und ihre spektralen Positionen.

7.1.1.1 Defektlinien D1-D4 in monokristallinem Silizium

Der Ursprung der Defektlinien D1 bis D4 ist nicht völlig geklärt. In [114] findet sich eine Zusammenstellung von Ergebnissen über die Herkunft der Linien. Arbeiten von Drozdov et al. [112] wiesen eine Korrelation dieser Linien mit der Versetzungsdichte in Silizium nach. In inhomogen verspanntem Silizium konnten die Linien mit den in Abbildung 7.1 beschriebenen Positionen gefunden werden. Für gering versetztes Silizi-

um konnte eine Feinstruktur der Linien D1 und D2 nachgewiesen werden [118]. D1 und D2 wurden Übergängen zwischen gebundenen Zuständen zugeordnet, wohingegen zur Erklärung von D3 und D4 Übergänge zwischen freien und gebundenen Zuständen vorgeschlagen wurden. In Abbildung 7.2 ist ein Ergebnis aus [114] dargestellt, bei welchem Photolumineszenz-Spektren in Abhängigkeit der Versetzungsdichte aufgetragen sind.

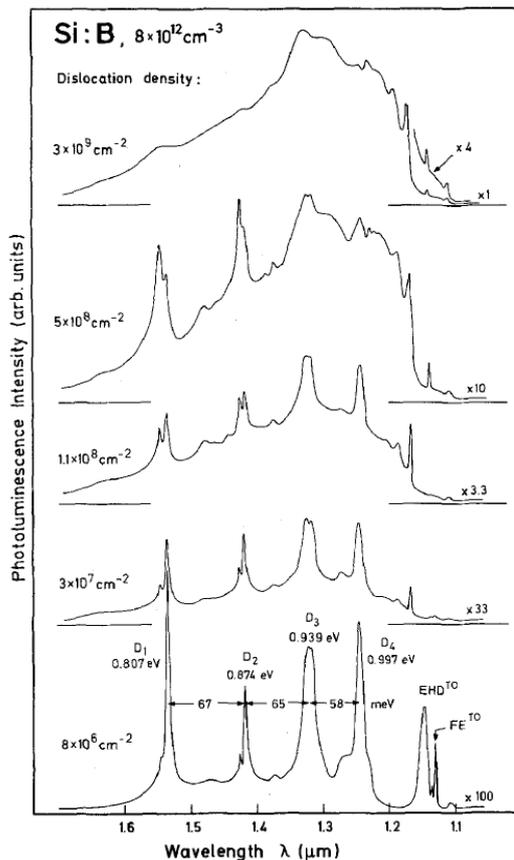


Abbildung 7.2: Defektlinienspektrum (PL) von deformiertem Silizium mit unterschiedlichen Versetzungsdichten. Die Probertemperatur betrug 4.2 K, angeregt wurde mit 647 nm. Aus [114].

Bei kleineren Versetzungsdichten sind die D-Linien scharf ausgeprägt, während bei zunehmender Versetzungsdichte das Absolutsignal zwar ansteigt, die Trennung der einzelnen Linien aber immer schwieriger wird.

Uebbing et al. [119] konnten D1 und D2 auch in Ionen-implantiertem Silizium nachweisen, wobei D2 im Vergleich zu D1 stark unterdrückt war. Dieses Ergebnis steht im Gegensatz zu Drozdovs [118], der eine enge Verbindung zwischen den beiden Linien postulierte. In [120] vermuteten Gwinner und Labusch einen Zusammenhang der D1- und D2- Linien mit oberflächennahen Zuständen.

Suezawa et al. [121] schlossen aus ihren Spektraluntersuchungen, dass

- (i) Verunreinigungen und Punktdefekte keinen wesentlichen Beitrag zu den den Defektlinien zu Grunde liegenden Rekombinationsprozessen liefern,
- (ii) Versetzungen selbst die aktiven Rekombinationszentren sind, unabgesättigte Bindungen an der Oberfläche aber nicht beteiligt sind,

- (iii) D1 und D2 vermutlich mit geometrischen „Kinks“ von Versetzungen korreliert sind,
- (iv) D1 bis D4 Übergängen zwischen flachen und tiefen Defektniveaus zuzuordnen sind.

Dem Ergebnis (i) von Suezawa stehen Experimente von Lightowers und Higgs [122] entgegen. Diese schlossen aus einem Vergleich von hochreinem, deformiertem Floatzone-Silizium mit zusätzlichen, absichtlichen Metallverunreinigungen verschiedener Konzentration, dass Übergangsmetalle zur Ausbildung der Defektlinien notwendig sind. In Abbildung 7.3 sind Photolumineszenzmessungen an diesen Proben vor und nach plastischer Deformation und nach einer Verunreinigung mit Kupfer mit anschließender Temperaturbehandlung von 30 min bei 900 °C.

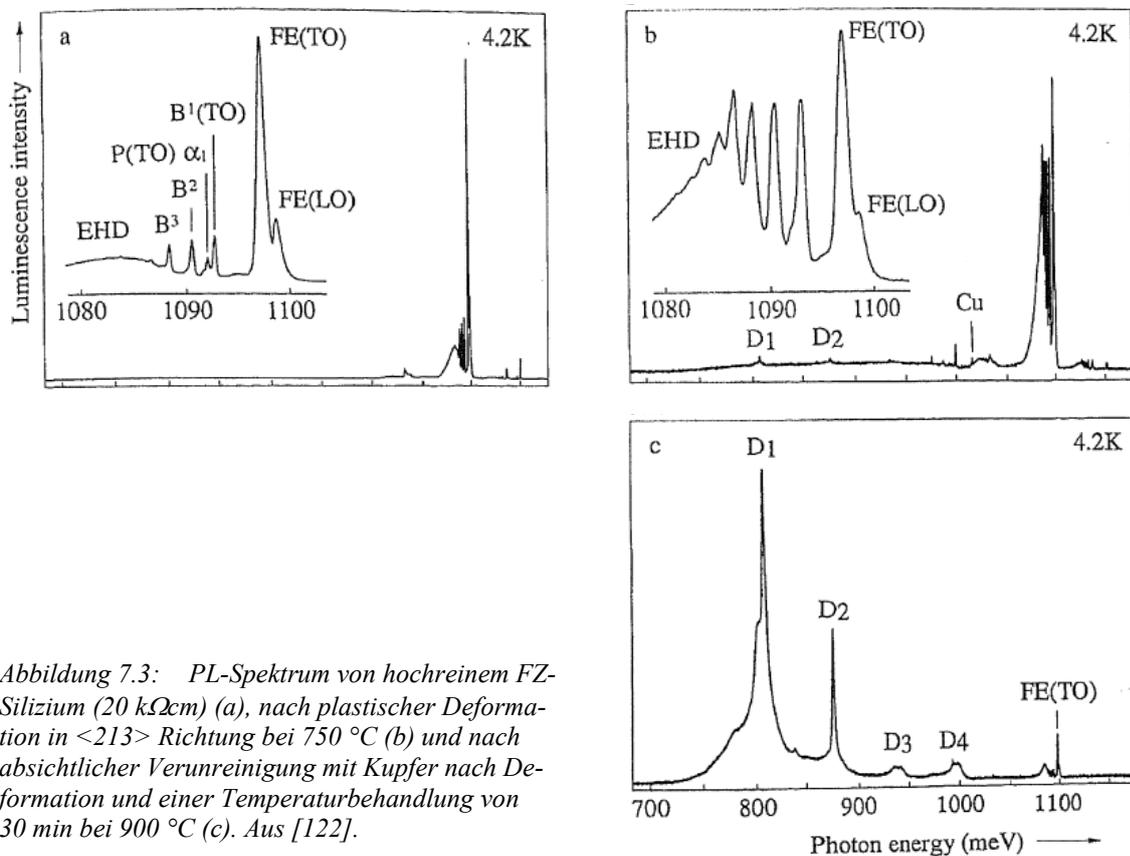


Abbildung 7.3: PL-Spektrum von hochreinem FZ-Silizium (20 kΩcm) (a), nach plastischer Deformation in <213> Richtung bei 750 °C (b) und nach absichtlicher Verunreinigung mit Kupfer nach Deformation und einer Temperaturbehandlung von 30 min bei 900 °C (c). Aus [122].

Versuche mit anderen Metallen lieferten ähnliche Ergebnisse.

Der Einfluss von Sauerstoff und Wasserstoff ist unklar. Unterschiedliche Interpretationen finden sich in [121, 123-127]. Neuere Ergebnisse von Pizzini et al. [113], Kenyon et al. [128] und Steinman [129, 130] legen einen deutlichen Einfluss von Sauerstoffdekorationen an Versetzungen auf die Position und Höhe der D1-Linie nahe.

7.1.1.2 Defektspektroskopie an multikristallinem Silizium

In Arbeiten von Tarasov et al. [131], Ostapenko [132] und Kittler et al. [133] finden sich Photolumineszenzmessungen von Defektlinien an multikristallinem Silizium für Solarzellen. Messungen bei Raumtemperatur zeigten zwei breite Lumineszenzbänder (siehe Abbildung 7.4). Eines wurde bei einer Photonenenergie von 0.78 eV bis 0.80 eV detektiert und Kristalldefekten zugeordnet. Messungen zur orts aufgelösten Detektion des Bandes bei 0.8 eV mit Hilfe einer InGaAs-Kamera sind in [134] beschrieben. Das zweite Band lag bei 1.09 eV und ist der strahlenden Band-Band-Rekombination zuzuschreiben.

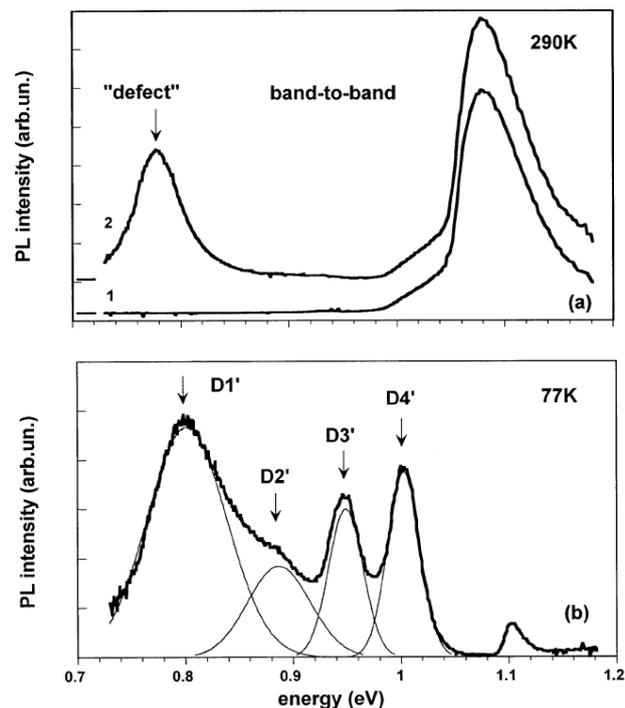


Abbildung 7.4: Photolumineszenzspektren an multikristalliner Siliziumprobe. (a) Spektrum bei Raumtemperatur für einen Bereich hoher (1) und niedriger (2) Lebensdauer. (b) Photolumineszenzspektrum bei einer Probentemperatur von 77 K. Aus [131].

Messungen an gekühlten Proben zeigten weitere Defektlinien, die in Anlehnung an die in monokristallinem Material in denselben Wellenlängenbereichen gefundenen D-Linien mit D1' bis D4' bezeichnet und mit diesen in Verbindung gebracht wurden. Der Vergleich zu Ergebnissen an monokristallinem, versetztem Cz-Material zeigte vergleichbare Bandbreiten zwischen D3, D4 und D3', D4', wohingegen die Breiten der D1'- und D2'-Bänder im Vergleich zu D1 und D2 um etwa das Doppelte verbreitert waren. Ein weiterer Unterschied zu monokristallinem Material ist die Temperaturabhängigkeit der Peakhöhen (siehe Abbildung 7.5), die im folgenden Abschnitt näher betrachtet wird.

7.1.1.3 Temperatur- und Injektionsabhängigkeit der Defektlinien

Temperaturabhängigkeit

Abbildung 7.5 zeigt das typische Temperaturverhalten der Peakintensitäten der Defektlinien in Floatzone-Silizium [114] (links) und in multikristallinem Silizium [132] (rechts). Ein wesentlicher Unterschied zwischen den beiden Fällen ist die außergewöhnliche Temperaturstabilität der D1'-Linie im multikristallinen Material.

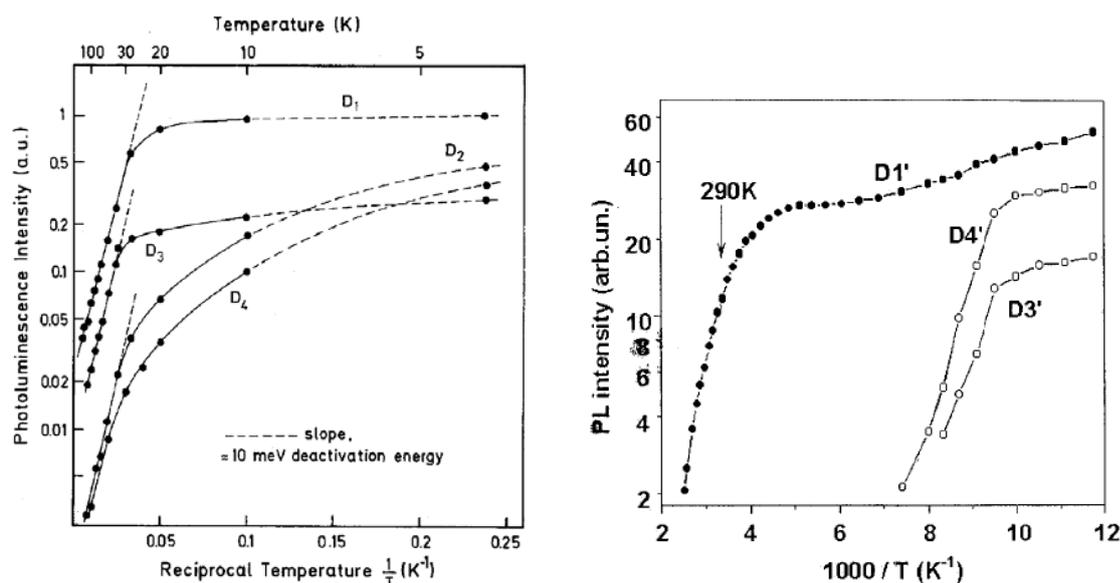


Abbildung 7.5: Temperaturabhängigkeiten der Peakintensitäten der D1 - D4 Bänder in Floatzone Silizium (links, aus [114]) und der D1' - D4' Bänder in multikristallinem Silizium (rechts, aus [132]).

Während die Intensität der D1-Linie oberhalb von 100 K stark abnimmt, lässt sich die D1'-Linie auch bei Zimmertemperatur detektieren. Suezawa et al. [135] schlugen eine analytische Beschreibung der Temperaturabhängigkeit der Intensitätsmaxima der D-Linien vor, die auf einem ursprünglich empirischen Modell von Ashkinadse [136] beruht. Suezawa et al. postulierten die Involvierung eines flachen und eines tiefen Defektniveaus zur Erklärung der D-Linien. Dieses Modell (siehe Abbildung 7.6 a)) wird hier kurz skizziert. Es wird angenommen, dass das flache Niveau als Elektronenfalle, das tiefere als Löcherfalle agiert. Der umgekehrte Fall lässt sich analog ableiten.

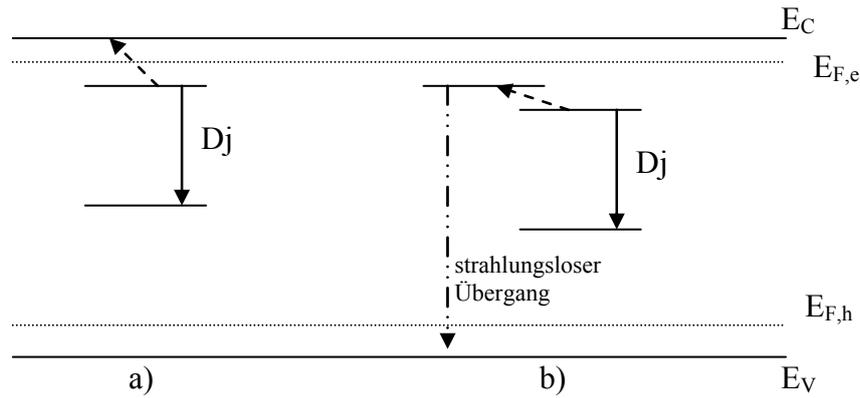


Abbildung 7.6: Modelle zur Erklärung der Temperaturabhängigkeit der Defektlinien. Aus der Energieposition des detektierten Defektbandes D_j ergibt sich ein definierter Abstand zwischen den Energieniveaus, die an der Rekombination beteiligt sind. Es wird angenommen, dass ein flaches (in diesem Beispiel das obere) und ein tiefes Defektniveau (hier das untere) involviert sind. Modell a) geht von einer Entleerung (Deaktivierung) des flachen Niveaus mit zunehmender Temperatur in ein Band (hier das Leitungsband) aus, während Modell b) ein drittes Niveau postuliert, in das Ladungsträger nach Überwindung einer Energiebarriere übergehen und strahlungslos rekombinieren. Je nach Modell ergeben sich verschiedene, im Text diskutierte Temperaturabhängigkeiten der Lumineszenzintensität. Nach [137].

Die Besetzungswahrscheinlichkeit des flachen Niveaus E_D^j mit Elektronen ist

$$f_j = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_D^j - E_F^j}{kT}\right)}, \quad (7.27)$$

wobei E_F^j das entsprechende, von der Störstelle abhängige Quasi-Fermi-Niveau ist. Die lokale Dichte freier Elektronen bestimmt sich nach Gleichung (2.12) zu

$$n_j = N_C \exp\left(\frac{E_F^j}{kT}\right). \quad (7.28)$$

Die Temperaturabhängigkeit von N_C ist [6]

$$N_C(T) = N_C^{300K} \left(\frac{T}{300K}\right)^{3/2}. \quad (7.29)$$

Gleichung (7.27) lässt sich damit schreiben als

$$\begin{aligned} f_j &= \frac{1}{1 + N_C^{300K} / (300K n_j) T^{3/2} \exp((E_D^j - E_C^j) / kT)} \\ &= \frac{1}{1 + C_j T^{3/2} \exp(-E_j / kT)} \end{aligned} \quad (7.30)$$

mit der Konstante C_j und dem Abstand des Defektniveaus E_j von der Unterkante des Leitungsbands. Das zweite beteiligte Energieniveau ist auf Grund seiner angenomme-

nen Tiefe nur schwach temperaturabhängig. Wenn angenommen werden kann, dass sich die Lumineszenzintensität linear vom Produkt der Besetzungswahrscheinlichkeiten der beteiligten Niveaus ändert, liefert Gleichung (7.30) eine analytische Beschreibung der Temperaturabhängigkeit der D-Linien-Lumineszenzintensität.

Ein von dieser Beschreibung verschiedenes Modell ist ebenfalls in Abbildung 7.6 dargestellt (b). In diesem Modell wird ein drittes beteiligtes Niveau postuliert, in das Ladungsträger nach Überwindung einer Energiebarriere übergehen können, bevor sie strahlungslos rekombinieren. In diesem Fall hängt die temperaturbedingte Entleerung des oberen, an der Lumineszenz beteiligten Niveaus, nur von der Besetzungswahrscheinlichkeit dieses und des dritten Niveaus und des Entartungsgrads der Niveaus ab. Für die Besetzungswahrscheinlichkeiten wird wiederum die Fermi-Verteilung angenommen. Dieses Modell kann auch angewandt werden, um einen Deaktivierungsprozess zu beschreiben, der eine feste Energiebarriere überwinden muss. Die Lumineszenzeffizienz hängt von den Wahrscheinlichkeiten für den strahlenden Übergang P_r und des nicht-strahlenden Übergangs P_{nr} ab [138]:

$$\eta = \frac{P_r}{P_r + P_{nr}}. \quad (7.31)$$

P_r wird in diesem Modell als unabhängig von der Temperatur genähert, während für P_{nr} gilt:

$$P_{nr} = P_{nr,0} \exp\left(\frac{E_j^*}{kT}\right), \quad (7.32)$$

wobei E_j^* die Aktivierungsenergie beschreibt. Gleichung (7.31) lässt sich damit ausdrücken durch

$$\eta = \frac{1}{1 + C_j^* \exp(-E_j^*/kT)}, \quad (7.33)$$

wobei $C_j^* = P_{nr,0} / P_{nr}$.

Neben der Amplitude der gemessenen Lumineszenzlinie ändert sich mit der Temperatur typischerweise auch ihre Energielage. Dieser Effekt ist auf die Temperaturabhängigkeit der Bandlücke zurückzuführen. Für den Fall, dass das flache der beiden beteiligten Niveaus nahe der unteren Bandkante liegt, ist ein möglicher Lumineszenzübergang in Abbildung 7.7 gezeigt.

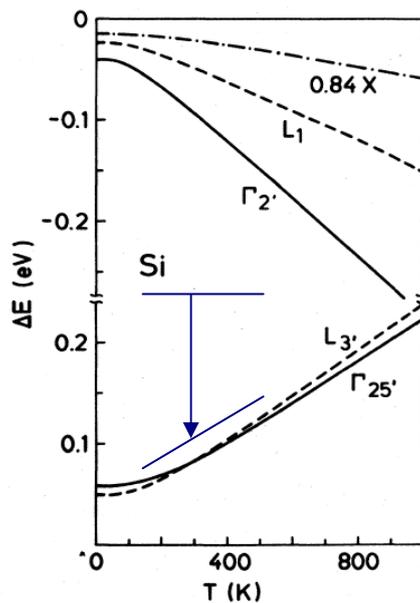


Abbildung 7.7: Angenommener Defektlumineszenz-Übergang mit flachem Niveau nahe der Valenzbandkante (blau), eingezeichnet in eine aus [139] entnommenen Grafik zur Temperaturabhängigkeit der Bänder in Silizium. Die Kurven beschreiben je nach Kristallrichtung verschiedene Verläufe. Während das tiefe Niveau schwach von der Temperatur abhängt, führt das flache zu einer Verringerung der Energie des Lumineszenzübergangs mit steigender Temperatur. Nach [137].

Injektionsabhängigkeit

Der Ursprung der Injektionsabhängigkeit der spektralen Position der Linien ist umstritten. Ein Modell von Steinman et al. [130] geht von einem geometrischen Ansatz zur Erklärung einer Verschiebung zu höheren Energien bei steigender Injektionsdichte aus. Unter Annahme eines strahlenden Übergangs zwischen einem Donator- und einem Akzeptorniveau mit einem geometrischen Abstand r und unter Vernachlässigung von van der Waals-Kräften sowie Phononenbeiträgen ergibt sich nach [130] eine Energie von

$$E_j(r) = E_g - (E_{a,j} + E_{d,j}) - \frac{e^2}{\epsilon r}. \quad (7.34)$$

E_g ist dabei die Bandlücke, $E_{a,j}$ und $E_{d,j}$ sind die Ionisierungsenergien des Akzeptor- und Donatorniveaus, e ist die Elementarladung und ϵ ist die Niederfrequenz-Dielektrizitätskonstante.

Vor Kurzem wurde ein alternatives Erklärungskonzept von Mchedlidze et al. [140] zur Erklärung der Energieverschiebung vorgestellt. Grundlage dieses Konzepts ist die Rückführung der Energieverschiebung auf den quadratischen Stark-Effekt [138], der eine Aufspaltung von Niveaus unter Einwirkung eines elektrischen Felds beschreibt. Mchedlidze et al. untersuchten die energetische Lage von Defektlinien in Abhängigkeit des elektrischen Felds. Untersuchungsobjekt war dabei eine Silizium-Leuchtdiode (LED), deren Defektlumineszenz um 0.8 eV durch absichtliche Versetzungen erhöht war. Aus der angelegten Spannung und der Charakteristik der untersuchten LED wurde das interne elektrische Feld abgeschätzt (siehe Abbildung 7.8).

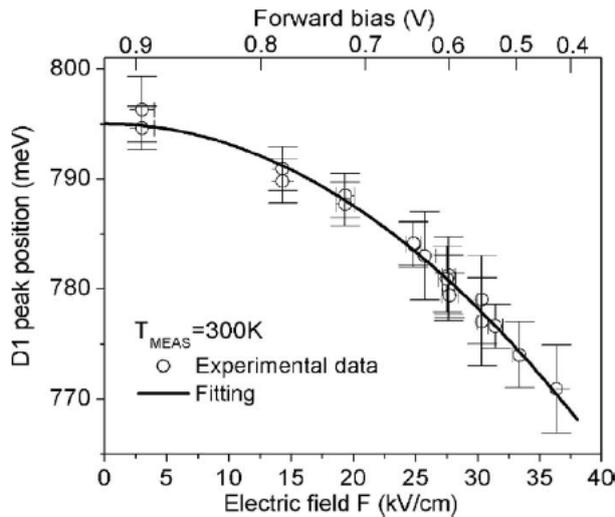


Abbildung 7.8: Spektrale Position der D1-Defektlinie aus Elektrolumineszenzmessungen an einer LED aus absichtlich versetztem Silizium in Abhängigkeit der angelegten Spannung und des abgeschätzten elektrischen Felds. Die Kurvenanpassung berücksichtigt den quadratischen Stark-Effekt (siehe Gleichung (7.35)). Aus [140].

Die Injektion von Elektron-Loch-Paaren vermindert das elektrische Feld in der Raumladungszone und vermindert so die durch den Stark-Effekt verursachte Rotverschiebung der Lumineszenzstrahlung [141]. Die in Abhängigkeit der elektrischen Feldstärke F verringerte Lumineszenz-Energie E_j lässt sich darstellen durch

$$E_j = E_{j,0} - \alpha_j F^2, \quad (7.35)$$

wobei α eine charakteristische Konstante ist [140]. Obwohl der Effekt experimentell in einer Probe mit pn-Übergang demonstriert wurde, übertrug Mchedlidze die Theorie auch auf versetztes Silizium ohne diffundierten pn-Übergang. In diesem Fall sind Raumladungszonen um geladene Defekte Quelle der internen Felder.

Kveder et al. [142] veröffentlichten weitere und komplexere Überlegungen zur Injektionsabhängigkeit, auf die an dieser Stelle hingewiesen wird. Die Analyse der experimentellen Daten in dieser Arbeit konzentriert sich jedoch auf die Modelle von Steinman und Mchedlidze.

7.2 Photolumineszenzspektroskopie

Ein Schema des verwendeten Photolumineszenzmessplatzes der Arbeitsgruppe von Prof. Ostapenko an der University of South Florida ist in Abbildung 7.9 dargestellt. Wesentliche Komponenten sind ein Diodenlaser mit einer Wellenlänge von 800 nm und einer maximalen Leistung von 150 mW zur Anregung von Ladungsträgern, ein x-y-Verfahrtisch für ortsaufgelöste Messungen, Optik zur Abbildung des Messflecks auf einen Spalt, ein 500 mm Monochromator zur Spektralanalyse und ein Stickstoffgekühlter Germaniumdetektor. Der durch die Fokussierung des Lasers bestimmte Durchmesser des Messflecks lässt sich bei der Apparatur nur ungenau bestimmen und wird auf etwa 250 μm geschätzt.

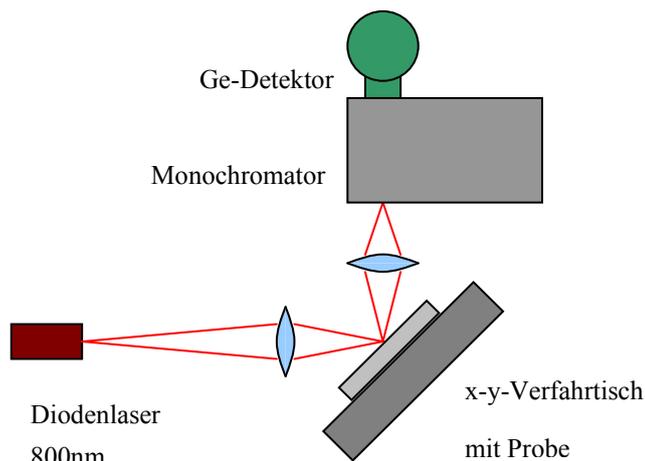


Abbildung 7.9: Experimenteller Aufbau des PL-Spektroskopie-Messplatzes.

In diesem Aufbau sind Messungen bei Raumtemperatur möglich. Alternativ kann eine mit flüssigem Stickstoff gekühlte Probenkammer am Verfahrtisch befestigt werden, um Messungen bis zu 80 K durchzuführen. Um Messungen zwischen Raumtemperatur und 80 K zu realisieren, kann ein elektrisches Heizelement zugeschaltet werden. Grundsätzlich können zwei Messmodi gewählt werden: Entweder kann das Spektrum an einer Probenposition bestimmt werden, oder es kann die orts aufgelöste Intensität bei einer vorher eingestellten festen Wellenlänge bestimmt werden.

7.2.1 Photolumineszenzuntersuchungen bei Raumtemperatur

Es wurden zunächst Messungen bei Raumtemperatur durchgeführt. Neben der Band-Band-Lumineszenz wurde insbesondere der Wellenlängenbereich zwischen 1400 und 1700 nm untersucht, in dem die in Kapitel 7.1 beschriebene Defektlumineszenz zu erwarten ist. Die gemessenen PL-Spektren sind aus Konsistenzgründen zu später folgenden Kathodolumineszenzmessungen und zu Literaturergebnissen nicht gegen die Wellenlänge, sondern gegen die Photonenenergie aufgetragen.

Gegenstand der Untersuchung waren SiN-passivierte Proben aus industrietypischem multikristallinem Silizium aus dem unteren Blockbereich. Messungen des PL-Spektrums an verschiedenen Punkten einer Probe sind in Abbildung 7.10 dargestellt.

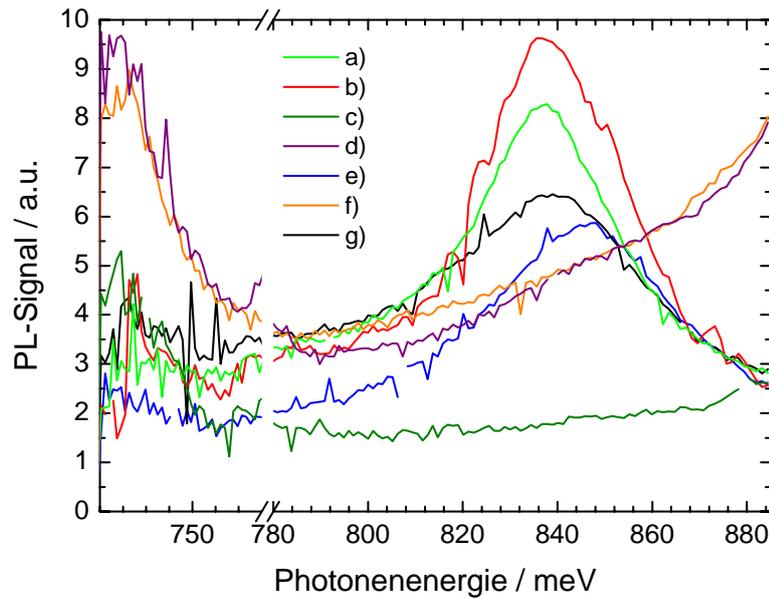


Abbildung 7.10: PL-Spektrum, gemessen an einer multikristallinen, SiN-passivierten Siliziumprobe. Die Daten sind bei Zimmertemperatur für verschiedene Positionen aufgenommen (vgl. Abbildung 7.12). Der Energiebereich um 775 meV wurde nicht dargestellt, weil dort die 2. Ordnung der Laserstrahlung das gemessene Spektrum stört.

Neben einem Maximum bei etwa 740 meV ($\lambda = 1676$ nm) ist das Spektrum von einer breiten Verteilung um etwa 838 meV ($\lambda = 1480$ nm) geprägt. Bei dieser Energie sowie bei 1078 meV ($\lambda = 1150$ nm), bei der das Maximum der Band-Band-Lumineszenz gemessen wurde, wurden die Intensitäten mit einer Ortsauflösung von 250 μm auf einer Fläche von ca. 15 \times 15 mm^2 bestimmt (siehe Abbildung 7.11 und Abbildung 7.12).

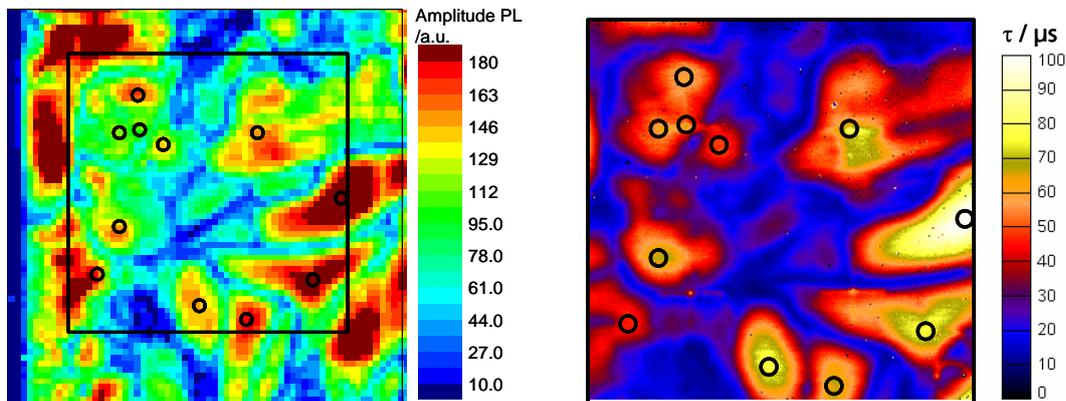


Abbildung 7.11: Links: Ortsaufgelöste PL-Intensitätsmessung bei einer Photonenergie von 1078 meV (1150 nm). Rechts: Lebensdauermessung mit CDI. Um beide Messungen besser vergleichen zu können, sind einige Maxima des CDI-Bildes mit Kreisen gekennzeichnet, die sich auch in der PL-Messung wieder finden.

Durch Vergleich mit einer CDI-Lebensdauermessung konnte der direkte Zusammenhang der Höhe der Band-Band-Lumineszenzverteilung und der Rekombinationslebensdauer bestätigt werden. Zur Erleichterung des Vergleichs beider Messungen wurden im CDI-Bild einige lokale Maxima der Lebensdauerverteilung mit Kreisen gekennzeichnet.

Diese Kreise finden sich in der PL-Messung wieder. Eine ortsaufgelöste Messung des in Abbildung 7.10 ausgeprägten Maximums bei 838 meV ist in Abbildung 7.12 (links) gezeigt. Diese Verteilung folgt nicht der CDI-Lebensdauerermessung.

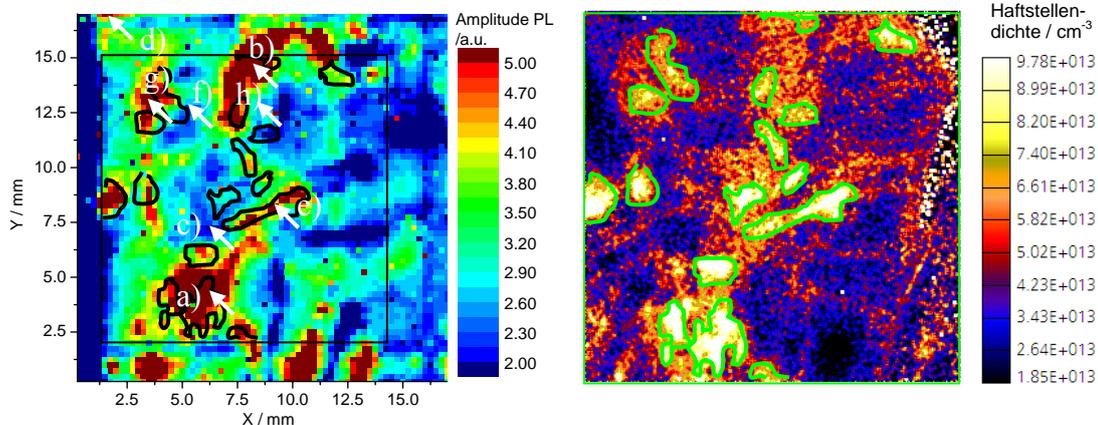


Abbildung 7.12: Links: Ortsaufgelöste PL-Intensitätsmessung bei einer Photonenenergie von 838 meV (1480 nm) am selben Probenausschnitt wie in Abbildung 7.11. Rechts: Haftstellendichtemessung mit CDI. Die grünen Linien im rechten Bild wiederholen sich im linken und sollen den Vergleich zwischen den Messungen erleichtern. Die weißen Pfeile markieren Positionen, an denen ein Spektrum gemessen wurde (siehe Abbildung 7.10).

Die Bereiche höchster Intensität lassen sich jedoch mit der rechts in Abbildung 7.12 dargestellten Messung der Haftstellendichte korrelieren. Zum besseren Vergleich beider Messungen sind in den Bildern Hilfslinien eingezeichnet. Die dunkelroten Bereiche der PL-Messung korrelieren mit Bereichen erhöhter Haftstellendichte (Abbildung 7.12, rechts). Obwohl die Korrelation für weite Teile des untersuchten Ausschnitts gut ausgeprägt ist, gibt es Bereiche mit signifikant erhöhtem PL-Signal, die eine nur schwach erhöhte Haftstellendichte aufweisen. Möglicherweise ist die gemessene Amplitude des PL-Signals bei 838 meV von Ausläufern benachbarter Maxima beeinflusst. Dieser Einfluss ließe sich durch die Aufnahme des Spektrums an jedem Punkt mit anschließender Kurvenanpassung (siehe z.B. Abbildung 7.14) untersuchen. Die zur Verfügung stehende Messapparatur war jedoch nicht für eine parallele Aufnahme aller Spektren ausgerüstet.

Leicht erhöht detektierte Defektlumineszenz in einigen grün erscheinenden Bereichen hat ihren Ursprung vermutlich in einer höheren lokalen Ladungsträger-Lebensdauer und damit einer höheren Ladungsträgerdichte. Da es sich bei Defektlumineszenz um Rekombinationsstrahlung handelt, ist eine Abhängigkeit der Intensität von der Lebensdauer anzunehmen. Zusätzlich beeinflusst die breite Verteilung der Band-Band-Lumineszenz bereits das Messsignal. Abbildung 7.13 zeigt eine ortsaufgelöste Messung der Intensitätsverteilung bei einer Photonenenergie von 738 meV (1680 nm). Es ist keine ausgeprägte Korrelation zur PL-Messung zu erkennen.

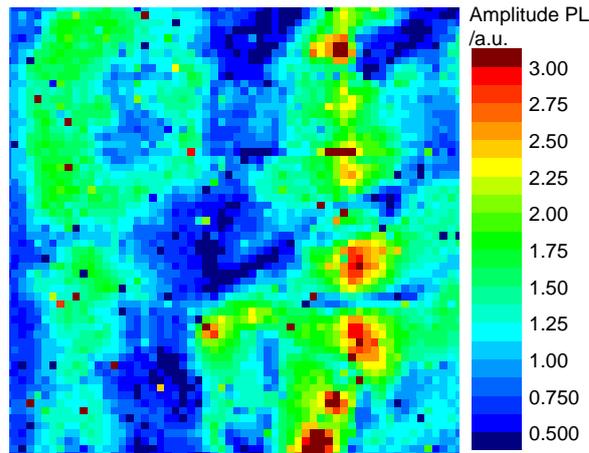


Abbildung 7.13: Photolumineszenzmessung bei einer Photonenenergie von 738 meV (1680 nm) am selben Probenausschnitt wie in Abbildung 7.11.

7.2.2 Temperaturabhängige Photolumineszenzuntersuchungen

Um das Lumineszenzverhalten näher zu untersuchen, wurden temperaturabhängige Messungen durchgeführt. Die Probe wurde für dieses Experiment in einem gläsernen Dewar-Gefäß auf einem mit flüssigem Stickstoff gekühlten Probenhalter montiert. Wie bei den Experimenten bei Raumtemperatur ist es in dieser Konfiguration des Messaufbaus ebenfalls möglich, Photolumineszenzspektren oder ortsaufgelöste Intensitätsverteilungen aufzunehmen. Es zeigt sich, dass bei einer Proben temperatur von 80 K zusätzlich zu der bei Raumtemperatur auftretenden Band-Band-Lumineszenz und des breiten Maximums um 870-890 meV weitere Defektlinien auftreten (siehe Abbildung 7.14).

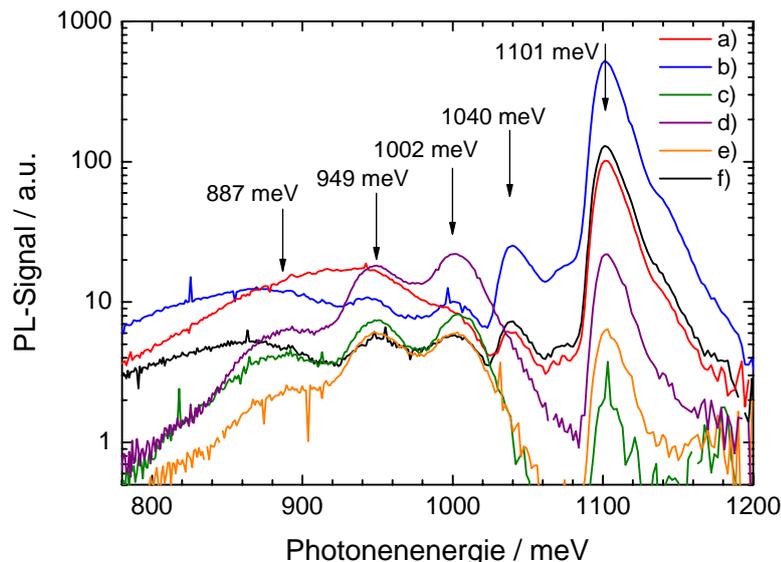


Abbildung 7.14: Photolumineszenzspektrum an verschiedenen Positionen a) - f) auf der Probe aus Abbildung 7.15 bei einer Proben temperatur von 80 K. Neben dem Maximum der Band-Band-Lumineszenz (1101 meV) erscheinen verschiedene Defektlinien.

Die verschiedenen Positionen, an denen die Spektren aufgenommen wurden, sind in Abbildung 7.15 markiert. Es zeigt sich, dass das Lumineszenzspektrum je nach Position auf der Probe stark variiert. Das Maximum der Band-Band-Lumineszenz hat sich zu höheren Energien verschoben (1101 meV), was auf die Temperaturabhängigkeit der Bandlücke in Silizium zurückgeführt werden kann. Zusätzlich zu den bei Raumtemperatur detektierten Defektlinien sind weitere Maxima sichtbar. Diese werden im folgenden Abschnitt näher untersucht. Besondere Beachtung findet der Bereich um 868 meV, da dieser mit dem bei Raumtemperatur ausgeprägten Defektmaximum bei 838 meV in Verbindung gebracht wird.

In Abbildung 7.15 sind ortsaufgelöste Messungen verschiedener detektierter Maxima dargestellt. Es zeigt sich, dass sich sowohl die Band-Band-Lumineszenz als auch die Lumineszenz bei 887 meV von ihrem Pendant bei Raumtemperatur hinsichtlich ihrer Intensitätsverteilung unterscheiden.

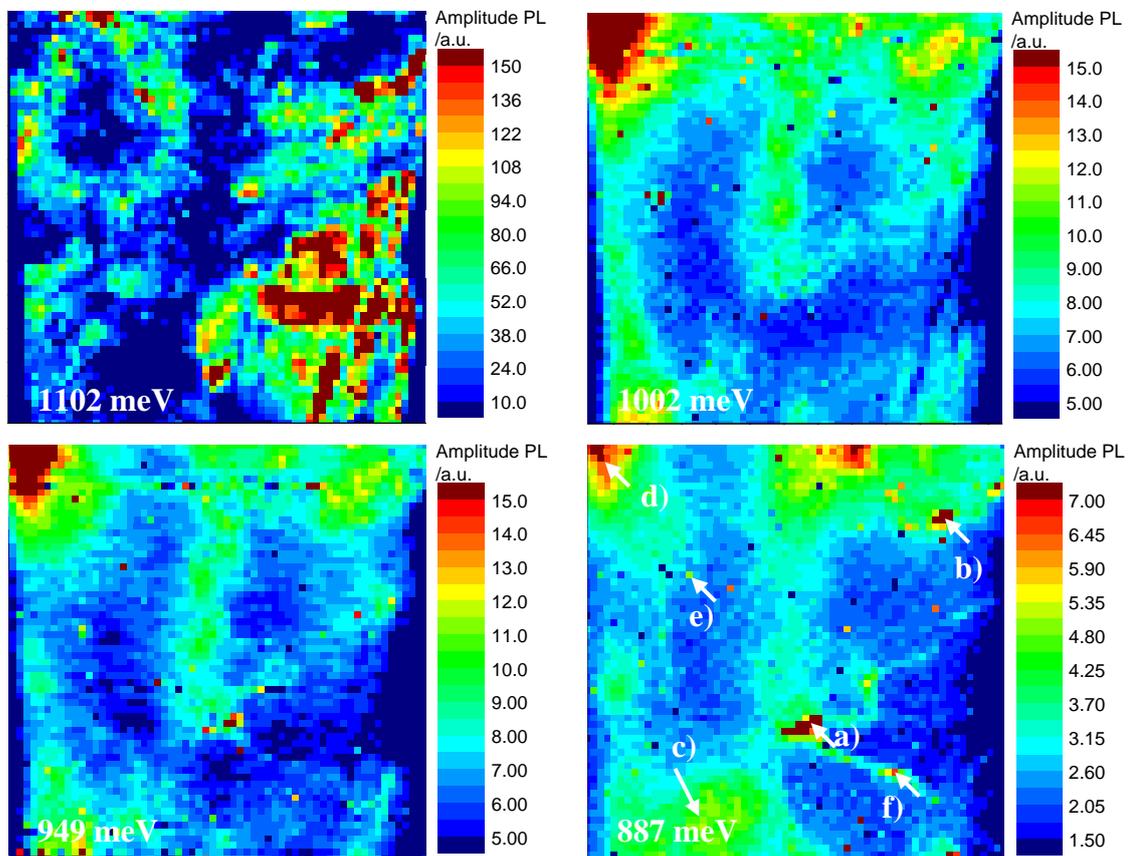


Abbildung 7.15: Ortsaufgelöste Photolumineszenzmessungen bei Photonenergien von 1102 meV (oben links), 1002 meV (oben rechts), 949 meV (unten links) und 887 meV (unten rechts) am selben Probenabschnitt wie in Abbildung 7.11. Die Proben temperatur betrug 80 K. Die mit weißen Pfeilen markierten Positionen beziehen sich auf Abbildung 7.14. Der untere rechte Teil der Messungen ist in Folge der nicht optimalen Probenkammer gestört (z.B. diagonale Linien im Bild rechts oben).

Die beiden Verteilungen bei 1002 meV und 949 meV zeigen eine sehr vergleichbare Struktur, die von der Band-Band-Lumineszenz bei 1102 meV sowie in Teilbereichen

von der 887 meV-Lumineszenz verschieden ist. In einigen Bereichen lässt sich aber eine Korrelation zwischen der Intensitätsmessung bei 887 meV und bei 949 meV bzw. 1002 meV feststellen.

An zwei verschiedenen Positionen, die in Abbildung 7.15 mit a) und c) bezeichnet sind, wurden temperaturabhängige Spektren aufgenommen.

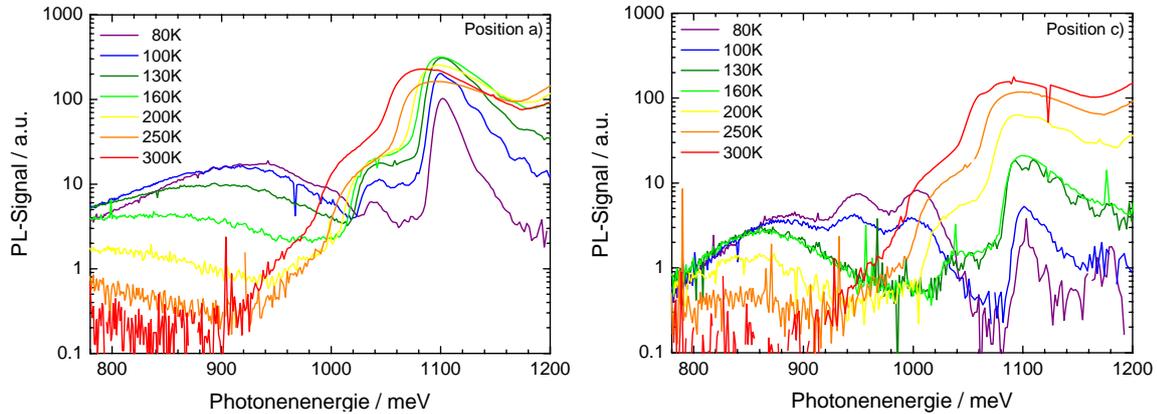


Abbildung 7.16: Temperaturabhängige PL-Spektren an den in Abbildung 7.15 markierten Positionen a) (links) und c) (rechts).

Die Maxima bei 949 meV und 1002 meV verschwinden oberhalb einer Temperatur von 100-130 K. Die Verteilung um 887 meV (bei 80 K) nimmt mit erhöhter Temperatur ab, ist aber auch bei höheren Temperaturen gut sichtbar.

Es wurden zur genauen Bestimmung der Temperaturabhängigkeit dieses Intensitätsmaximums Spektralmessungen bei weiter optimierter Empfindlichkeit aufgenommen. In Abbildung 7.17 ist ein so gewonnenes Spektrum zu sehen. Mit Hilfe von mehreren simultan angepassten Gauß-Verteilungen konnte das gemessene Spektrum in guter Näherung analytisch beschrieben werden. Die Maxima der Gauß-Verteilungen sind in der Abbildung vermerkt.

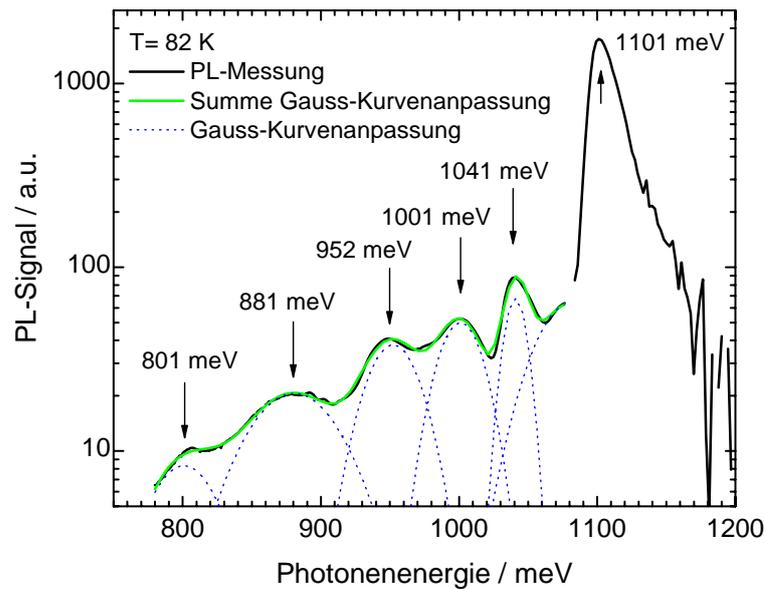


Abbildung 7.17: Photolumineszenzspektrum bei maximaler Empfindlichkeit der Apparatur. An die Messdaten wurden Gauß-Verteilungen angepasst und deren Maxima gekennzeichnet.

Der Vergleich mit Daten aus der Literatur (z.B. [114]) legt nahe, die Linien bei 801 meV, 881 meV, 952 meV und 1001 meV mit den Defektlinien D1-D4 [112] zu identifizieren. Das Maximum bei 1041 meV ist auf eine Phononen-induzierte Replik der Band-Band-Rekombination zurückzuführen.

Temperaturabhängige Messungen bei hoher Empfindlichkeit bestätigten das Verschwinden der Maxima bei 952 meV und 1001 meV oberhalb 100-130 K. Die Verteilung um 881 meV weist eine Verschiebung des Maximums mit ansteigender Temperatur zu kleineren Energien hin auf, ist aber auch bei Raumtemperatur zu erkennen und wird der in Kapitel 7.2.1 gefundenen Defektverteilung zugeordnet, die mit der Haftstellendichte korreliert. Die scheinbaren zusätzlichen Linien, die insbesondere in der Messung bei 100 K (blaue Linie) sichtbar sind, sind auf eine schwankende Proben temperatur auf Grund der nicht optimalen Probenkühlung zurückzuführen.

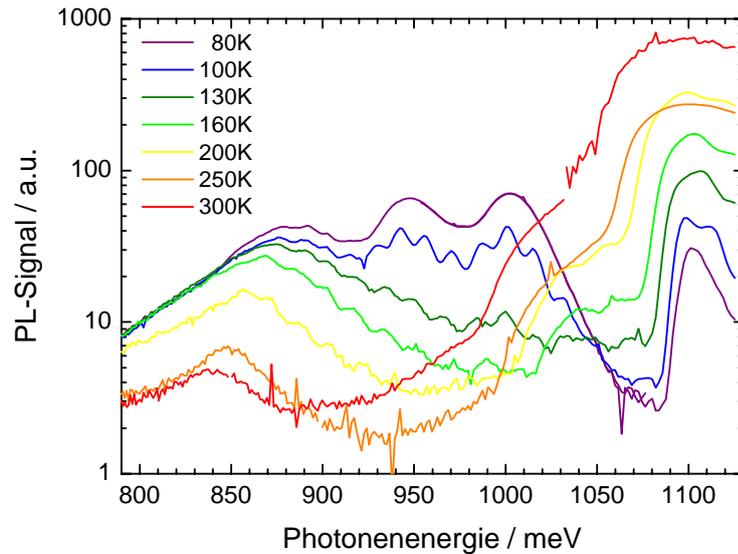


Abbildung 7.18: Temperaturabhängige Photolumineszenzspektren mit hoher Empfindlichkeit an einer Position mit hoher Lumineszenz im Bereich zwischen etwa 840 und 880 meV.

Während das frühe Verschwinden der D3- und D4-Linie den Ergebnissen aus der Literatur entspricht (siehe Abbildung 7.5), ist die Temperaturstabilität des Maximums zwischen 840 meV und 880 meV bisher unbekannt. Das beobachtete Verhalten entspricht dem der D1-Linie in multikristallinem Material [132], die Energielage lässt eine Verbindung zu dieser Linie aber unwahrscheinlich erscheinen und legt ein Zusammenhang zur D2-Linie nahe.

Um sowohl die Energieverschiebung des Intensitätsmaximums bei 881 meV als auch die Temperaturabhängigkeit der Amplitude zu quantifizieren, sind diese Parameter in Abbildung 7.19 gegen die Temperatur aufgetragen.

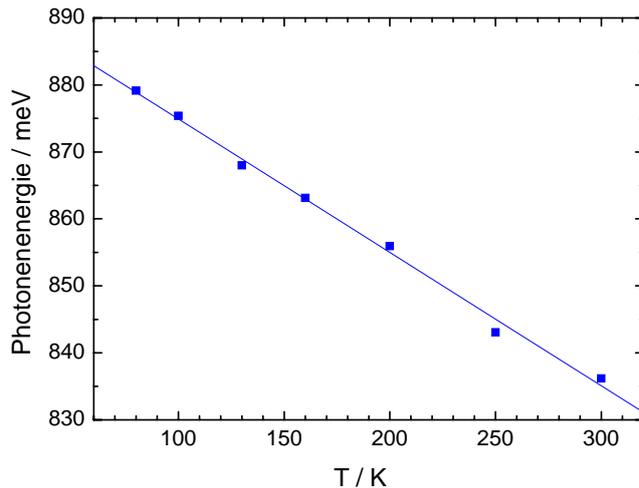


Abbildung 7.19: Temperaturabhängigkeit der Energielage des Maximums des Defektbandes. Im betrachteten Temperaturbereich lässt sich eine Verschiebung von etwa 40 meV beobachten.

Die Verschiebung des Maximums lässt sich näherungsweise linear beschreiben mit

$$I_{PL,\max} = \left(\frac{-0.199}{K} \cdot T + 895 \right) \text{meV}. \quad (7.36)$$

Diese Energieverschiebung lässt sich durch die Temperaturabhängigkeit der Bandlücke erklären (siehe Kapitel 7.1.1.3).

Zusätzlich zur Verschiebung des Energiemaximums ist analog zu Abbildung 7.5 in Kapitel 7.1.1.3 die Intensität des PL-Signals des Defektbandes unter Berücksichtigung der beobachteten Verschiebung aufgetragen. Das Modell aus Gleichung (7.30) wurde an die Messdaten angepasst (Modell A). Alternativ wurde auch ein Modell an die Daten angepasst, welches u.a. von Suezawa et al. [135] vorgeschlagen wurde und sich nur in der fehlenden $T^{3/2}$ -Abhängigkeit im Nenner unterscheidet (Gleichung (7.33), Modell B).

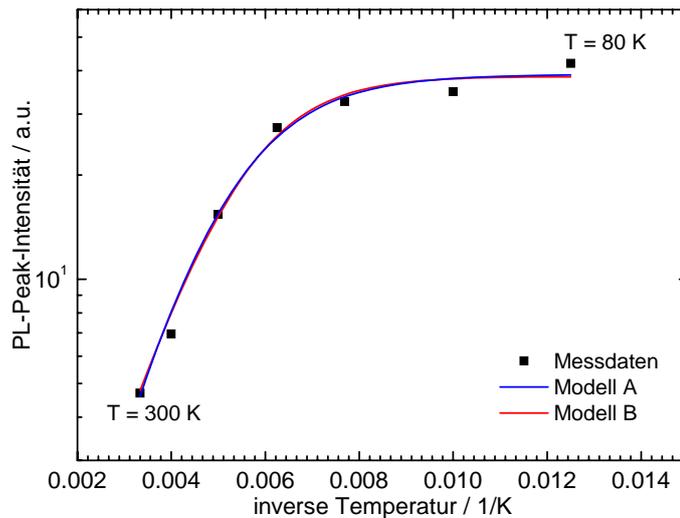


Abbildung 7.20: Temperaturabhängigkeit der Lumineszenzintensität der untersuchten Defektlinie. Zwei im Text diskutierte Modelle sind an die Messdaten angepasst. Modell A (siehe Text) liefert für den Abstand des Defekt-Energieniveaus von der Bandkante 79 meV. Modell B liefert einen Energieabstand von 51 meV zum im Modell postulierten dritten Niveau (siehe Kapitel 7.1.1.3). Die Messdaten erlauben keine Unterscheidung zwischen beiden Modellen.

7.2.3 Injektionsabhängige Photolumineszenzmessungen

Schließlich wurde die Injektionsabhängigkeit der betrachteten Defektlinie untersucht, in dem Spektren mit unterschiedlicher Laserleistung aufgenommen wurden (siehe Abbildung 7.21).

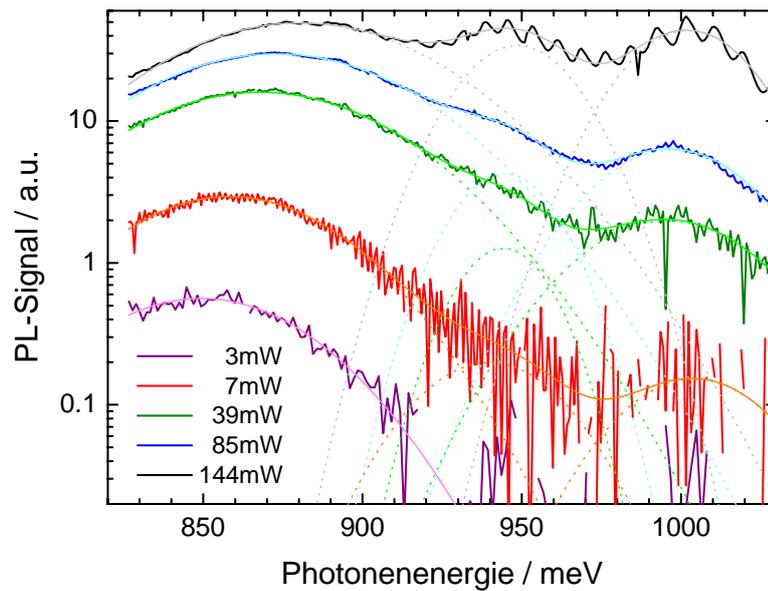


Abbildung 7.21: Injektionsabhängige Photolumineszenzmessungen im Bereich der Defektlumineszenz und Kurvenanpassungen mittels multiplen Gauß-Verteilungen. Die Probentemperatur betrug 130K.

Die Leistung der Anregungsquelle wurde zwischen 3 mW und 144 mW variiert. Das entspricht bei einem Strahldurchmesser von ca. 200 μm einer Leistungsdichte von 10 bis 460 W/cm^2 und für die benutzte Wellenlänge von 800 nm einer Photonenflussdichte von $4 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ bis $1.8 \cdot 10^{21} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$. Kurvenanpassungen multipler Gauß-Verteilungen an die Messwerte in Abbildung 7.22 geben diese in sehr guter Näherung wieder. Mithilfe der analytischen Beschreibung lassen sich die Höhen und spektralen Positionen der Maxima leicht bestimmen. Beide Parameter sind in Abbildung 7.22 gegen die Laserleistung aufgetragen.

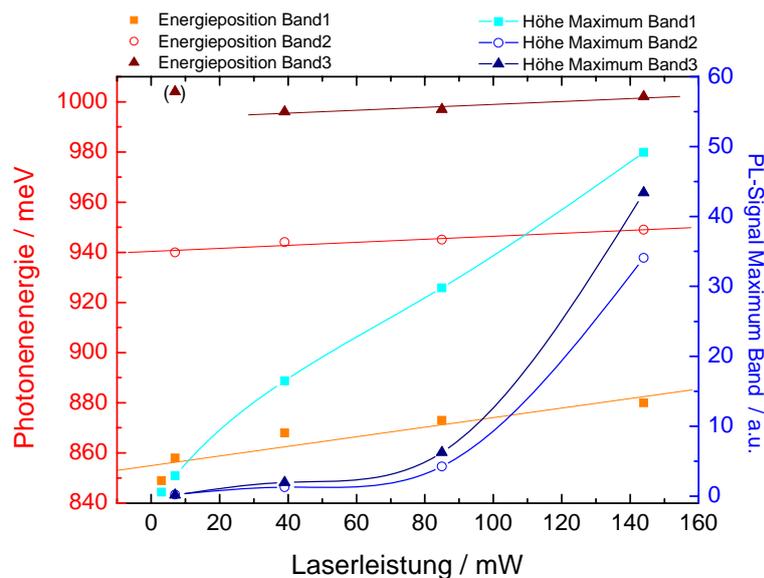


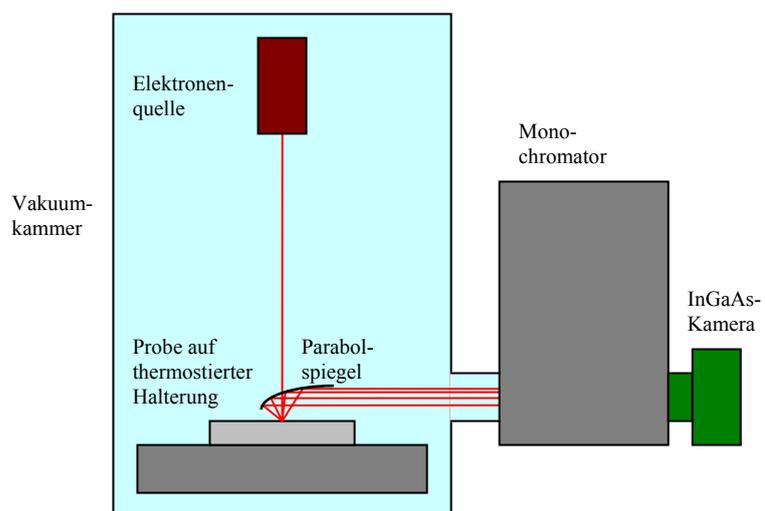
Abbildung 7.22: Energieverschiebung und Injektionsabhängigkeit der in Abbildung 7.21 detektierten Bänder.

Es zeigt sich eine Verschiebung der Maxima der einzelnen Defektlinien von ca. 0.06 meV/mW für Band 2 und 3 bis ca. 0.19 meV/mW für Band 1. Die Messung bestätigt die Voraussage aus Kapitel 7.1.1.3, dass die Energie der Defektlinien mit steigender Injektionsdichte ebenfalls steigt. Welches der in diesem Kapitel vorgeschlagenen Modelle für die Verschiebung verantwortlich ist oder ob eine Kombination der beschriebenen Effekte die Realität beschreibt, ist anhand der zur Verfügung stehenden Daten nicht eindeutig zu beantworten.

7.3 Kathodolumineszenzspektroskopie

Der Aufbau des Kathodolumineszenz-Messplatzes am National Renewable Energy Laboratory ist in Abbildung 7.23 gezeigt. Er ist in einem Raster-Elektronen-Mikroskop (REM) mit Wolframkathode integriert. In diesem Aufbau wird die Probe in einer Vakuumkammer auf 77 K oder optional auf etwa 15 K gebracht. Der fokussierte Elektronenstrahl des REM tritt durch eine kleine Öffnung eines Parabolspiegels, dessen Brennpunkt mit dem Auftreffpunkt des Elektronenstrahls auf der Probe übereinstimmt. Die von der Probe am Ort der Elektronenstrahlanregung emittierten Photonen werden mit Hilfe des Parabolspiegels zu einem Monochromator reflektiert, der deren Spektrum auf einen InGaAs-Kamerachip abbildet. Es ist in diesem Aufbau deshalb möglich, pro Messpunkt das gesamte Spektrum aufzunehmen, was im vorherigen Kapitel am Photolumineszenzaufbau nicht durchführbar war. Wesentlicher Vorteil dieser Messmethode ist deren hohe Ortsauflösung, die in den gezeigten Beispielen im Bereich von 750 nm liegt.

Abbildung 7.23: Aufbau des Kathodolumineszenz-Messplatzes. Ladungsträger werden mit Hilfe eines Elektronenstrahls, der durch ein feines Loch im Parabolspiegel auf die Probe trifft, angeregt. Der Spiegel reflektiert emittierte Photonen in einen Monochromator. Die Detektion des Spektrums geschieht mit einer InGaAs-Kamera.



7.3.1 Kathodolumineszenz und Haftstellendichte entlang von Versetzungslinien

Untersucht wurde eine Probe, die eine deutlich erhöhte Haftstellendichte entlang von Versetzungslinien aufwies. Eine Region mit zwei charakteristischen Linien (siehe Abbildung 7.24) wurde für eine nähere Untersuchung ausgewählt. In einem mit der CDI-Apparatur aufgenommenen Topographiebild treten beide Linien als Orte erhöhten Signals zum Vorschein, welches auf eine Störung der glatten Oberfläche zurückzuführen ist. Die auftretenden waagrechten Linien sind auf den Sägeprozess zurückzuführen, Kreuze auf der Probe dienen zur besseren Orientierung. In einer Messung der scheinbaren Lebensdauer unter sehr niedrigen Injektionsbedingungen zeigt nur eine der beiden betrachteten Linien ein erhöhtes Signal, welches auf eine erhöhte Haftstellendichte zurückgeführt wird. Im Folgenden werden diese Linien eingehend analysiert.

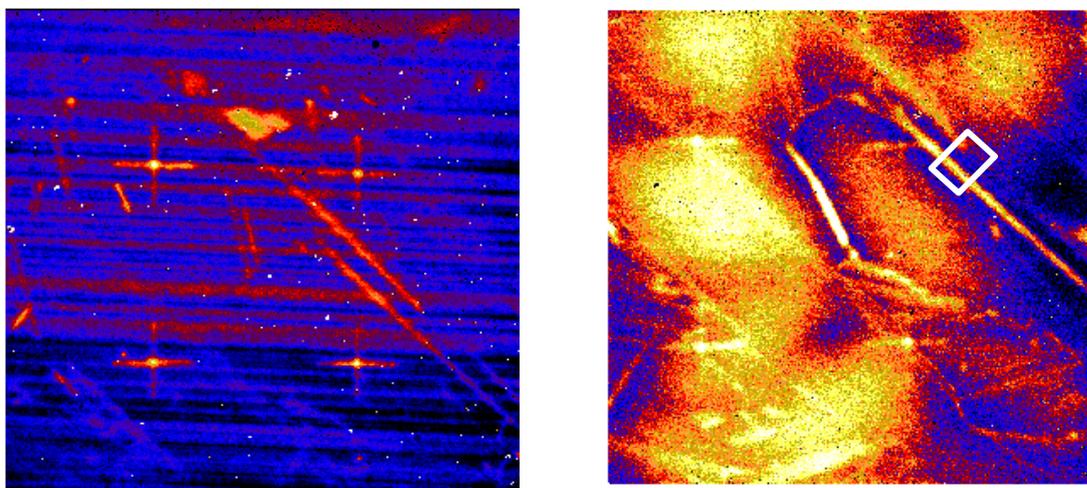


Abbildung 7.24: Infrarot-Topographiebild (links) und CDI-Messung unter Niederinjektion mit dominierendem Haftstelleneinfluss (rechts). Der im rechten Bild markierte Bereich wird im Folgenden näher untersucht.

Abbildung 7.25 zeigt eine Rasterelektronenmikroskopaufnahme beider Linien. Es fällt auf, dass die linke aus einer Vielzahl von Versetzungslinien aufgebaut ist, während die rechte Linie, die keine erhöhte Haftstellendichte aufweist, augenscheinlich aus nur zwei Linien besteht.

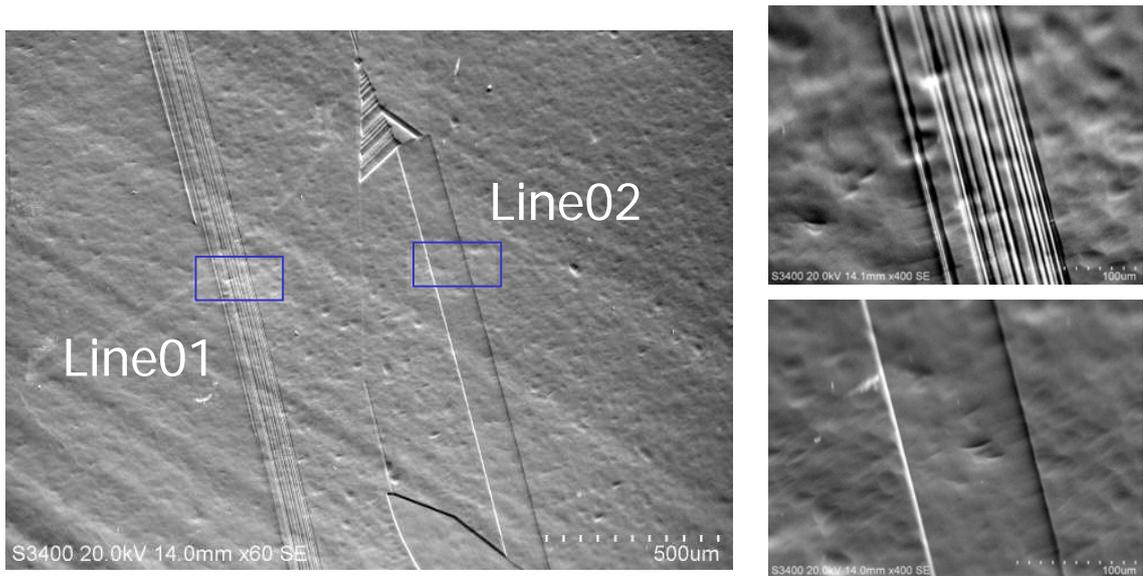


Abbildung 7.25: Rasterelektronenmikroskopaufnahme des in Abbildung 7.24 markierten Bereichs und Detailmessungen der Versetzungslinien.

Detailliertere Informationen über die Kristallstruktur liefert die *Electron Back-Scatter Diffraction* (EBSD) Technik [143]. Bei diesem Messverfahren wird ein Elektronenstrahl unter einem flachen Winkel auf die Probe gelenkt und dessen Streubild mit Hilfe der Bragg'schen Reflexionstheorie analysiert. Aus diesen Informationen kann auf die Kristallorientierung geschlossen werden. Messungen an der linken Linie sind in Abbildung 7.26, links, dargestellt.

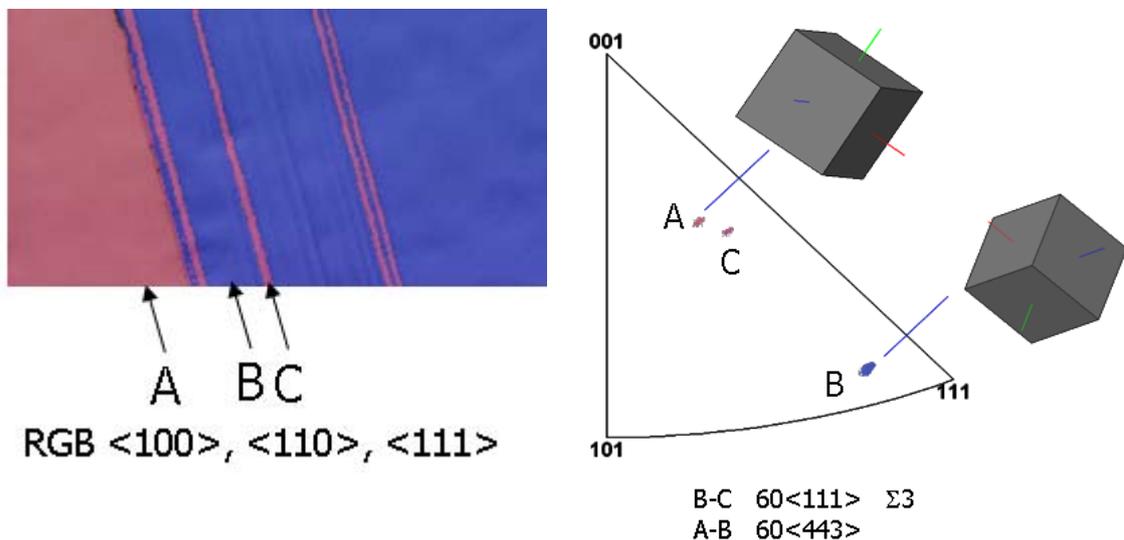


Abbildung 7.26: Messung der Kristallorientierung an Region 01 mit EBSD (links). Statistische Verteilung der Kornorientierung (rechts).

Im gemessenen Ausschnitt existieren im Wesentlichen drei verschiedene Kristallorientierungen. Sowohl Region A im linken Bereich als auch Region C im rechten sind auch

weit über den gezeigten Messausschnitt ausgedehnt, so dass es sich bei der gezeigten Region um eine Korngrenze handelt.

Kathodolumineszenzmessungen bei 23 K an dieser Versetzungslinie zeichneten sich durch eine hohe Intensität verschiedener Defektlumineszenzbanden aus (siehe Abbildung 7.27).

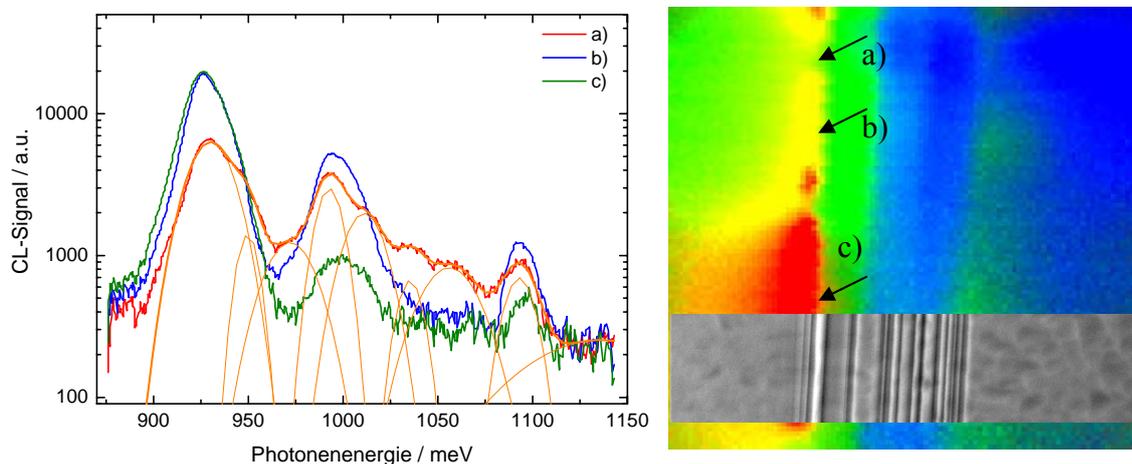


Abbildung 7.27: Mit Kathodolumineszenz gemessene Photonenspektren inklusive einer multiplen Gauß-Anpassung für ein Beispielspektrum (links) und Photonenergiemessung mit eingebundener REM-Aufnahme (rechts). Letztere stellt eine kondensierte Form der Darstellung ortsaufgelöster Spektrumsvariation dar: In einem Energieintervall von $1000 \text{ meV} \pm 150 \text{ meV}$ wird der Mittelwert farblich zum globalen Mittelwert codiert. Rot bedeutet hierbei eine Mittelwertsverschiebung zu kleineren Photonenergien, blau zu größeren. Die Absolutintensität ist nicht berücksichtigt. Die Proben temperatur betrug 23 K.

Die Spektren weisen verschiedene ausgeprägte Maxima auf. Die Modellierung eines Beispielspektrums (Region a) in Abbildung 7.27) liefert bei Annahme von gaussförmigen Bändern eine gute analytische Beschreibung der Messwerte. Die detektierten Maxima liegen bei 930 meV, 950 meV, 972 meV, 993 meV, 1011 meV, 1035 meV, 1056 meV und 1093 meV. Einige ortsaufgelöste Intensitätsverteilungen in der Nähe dieser Maxima sind in Abbildung 7.28 dargestellt.

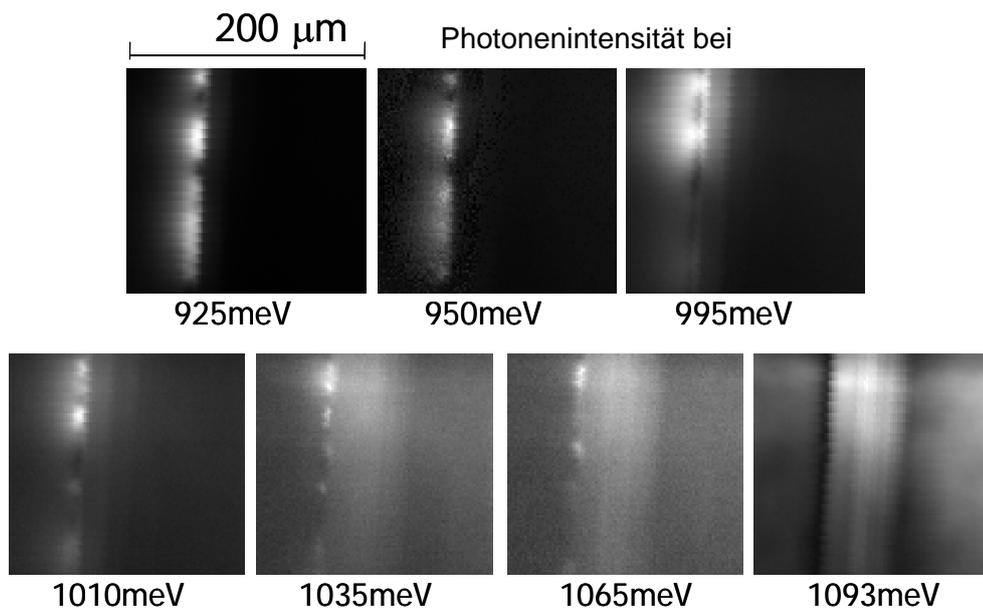


Abbildung 7.28: Photonenintensitätsverteilungen bei verschiedenen Wellenlängen der in Abbildung 7.27 untersuchten Probe.

Hier zeigt sich, dass verschiedene Defektbanden lateral sehr inhomogen auftreten und untereinander nur teilweise korreliert sind. Die Lumineszenz bei 1093 meV ist auf einen exzitonischen Übergang zurückzuführen und skaliert vermutlich mit der Ladungsträgerdichte.

Einen guten Überblick über die spektrale Verteilung der emittierten Photonenergien liefert ein in Abbildung 7.29 dargestellter Querschnitt über den versetzten Bereich der Probe. Dargestellt ist in dieser Auftragung die Ortskoordinate (siehe Pfeile) gegen die Photonenergie.

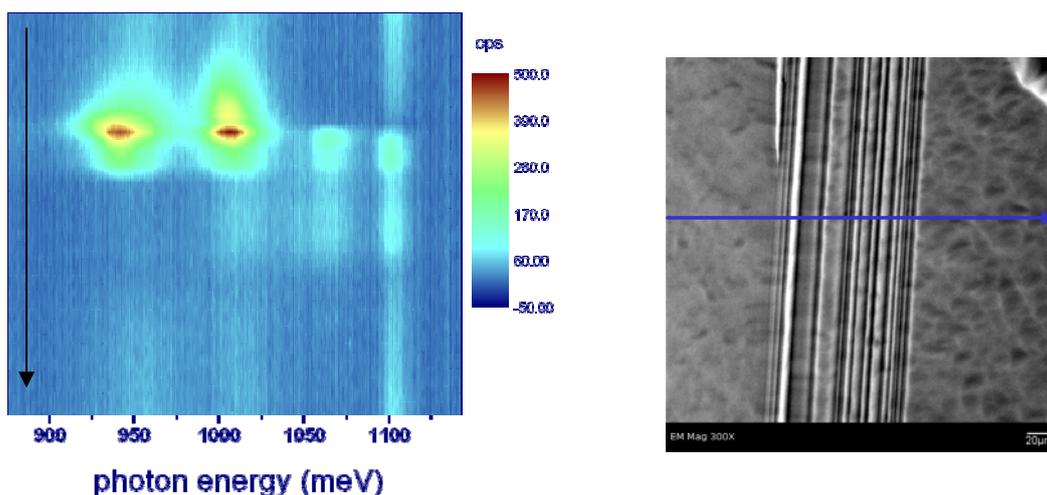


Abbildung 7.29: Spektralverteilung über einen Querschnitt der Versetzungslinie (links). Ort des Querschnitts (rechts, blaue Linie).

Im linken Bereich der Versetzungslinien sind Defektbanden zu erkennen, die das Spektrum dominieren (oberes Drittel in Abbildung 7.29, links. Aus der EBSD-Kornorientierungsmessung ist zu erkennen, dass dieser Bereich der Korngrenze entspricht.

Die Untersuchung der anderen Versetzungslinie zeigt Unterschiede zu der gerade untersuchten auf. Eine EBSD-Messung (Abbildung 7.30) zeigt zwar ebenfalls Wechsel der Kornorientierung, es handelt sich aber hierbei nicht um eine Grenze zweier ausgedehnter Körner, sondern lediglich um zwei 60° -Versetzungslinien (Abbildung 7.26, rechts).

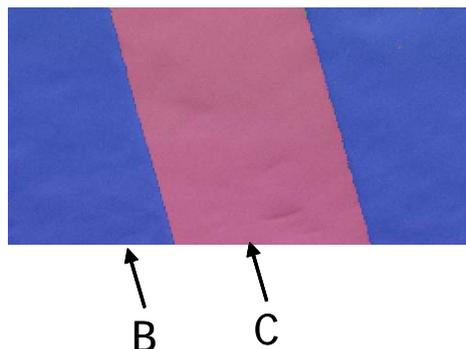


Abbildung 7.30: Messung der Kristallorientierung mit EBSD an Region 02. Zu Details der Orientierungen B und C siehe Abbildung 7.26.

Eine Betrachtung des Spektrums zeigt ein signifikant geringeres Auftreten von Defektlinien. Der Verlauf des globalen Spektrums ist in Abbildung 7.31 dargestellt. Die Spektren an verschiedenen Positionen unterscheiden sich nur wenig.

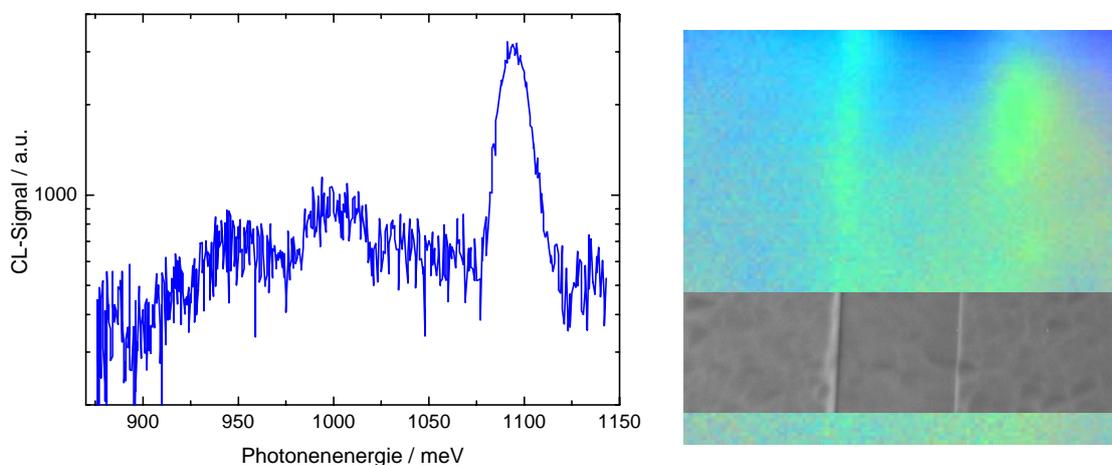


Abbildung 7.31: Globales Photonenergie-Spektrum für Region 02 (links) und Photonenergiemessung mit eingeblendeter REM-Aufnahme (rechts, Details siehe Abbildung 7.27). Die Spektren variieren über den Messbereich nur schwach.

Die Darstellung der ortsaufgelösten Photonenergiemessung (Abbildung 7.31, rechts) zeigt eine im Vergleich zu Abbildung 7.27 sehr schwache laterale Abhängigkeit. Die beiden Versetzungslinien weisen eine durch eine reduzierte Exzitonenrekombination bedingte Verschiebung des Mittelwerts der Energieverteilung zu kleineren Energien (grün) auf. Eine genauere Betrachtung der lateralen Energieverteilungen ist für verschiedene Photonenergien in Abbildung 7.32 dargestellt.

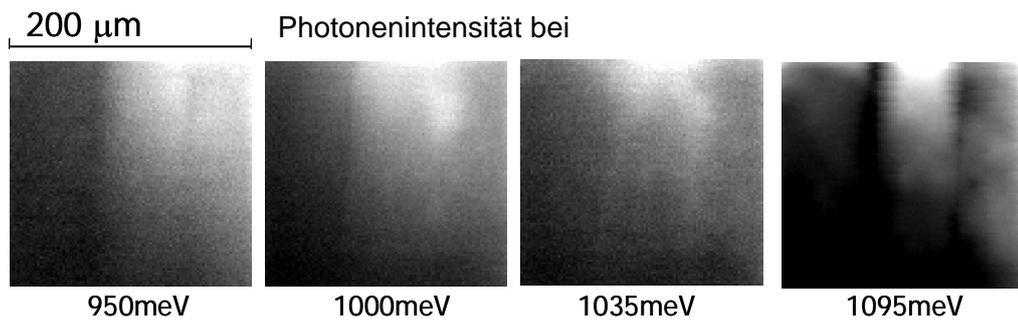


Abbildung 7.32: Photonenintensitätsverteilungen bei verschiedenen Wellenlängen der in Abbildung 7.31 untersuchten Probe.

Die Lumineszenz bei 1095 meV ist analog zur Messung in Abbildung 7.28 an den Versetzungslinien signifikant reduziert, die Darstellungen der übrigen Defektbanden weist dagegen eine sehr schwache Inhomogenität und Intensität auf.

Diese Beobachtung gilt auch für einen Querschnitt, der analog zu Abbildung 7.29 eine in einer Ortskoordinate aufgelöste Photonenspektrumsmessung darstellt (Abbildung 7.33).

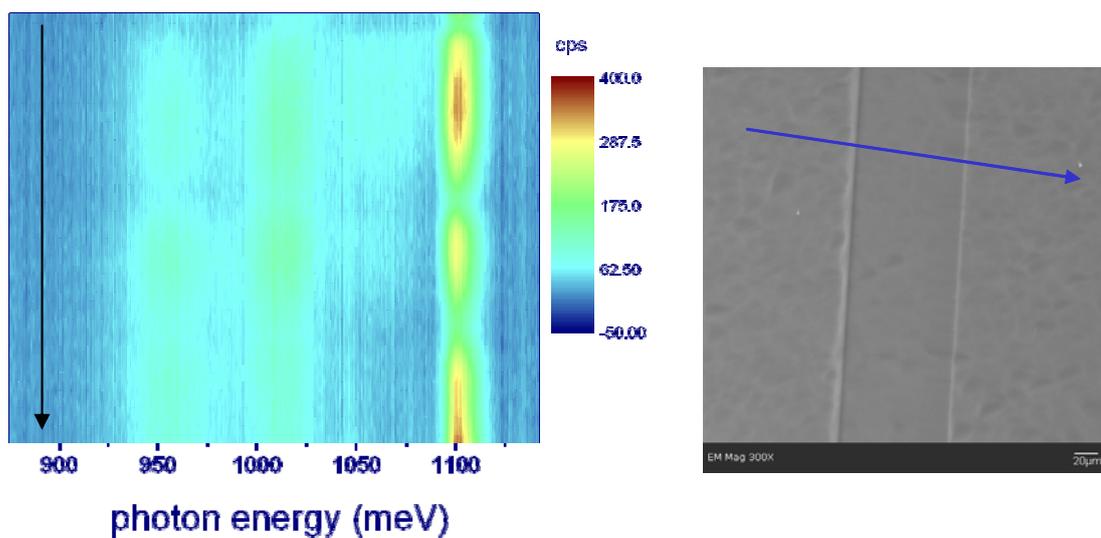


Abbildung 7.33: Spektralverteilung über einen Querschnitt der Versetzungslinie (links). Ort des Querschnitts (rechts, blauer Pfeil).

Die beiden Versetzungslinien finden sich in dieser Darstellung als Orte geringerer Lumineszenz. Insgesamt dominiert die Lumineszenz bei 1100 meV. Der Einfluss der übrigen Defektbanden ist gering.

7.3.2 Kathodolumineszenz in versetzten Bereichen

In Abbildung 7.34 ist die Haftstellenverteilung einer multikristallinen Siliziumprobe gezeigt. Ein kleiner Ausschnitt aus der $12 \times 12 \text{ mm}^2$ großen Messung wurde ausgewählt,

um die Haftstellenmessung mit Kathodolumineszenzmessungen zu vergleichen. Der Bereich zeigt eine Korngrenze und weist einen starken Kontrast in der Haftstellendichteverteilung auf.

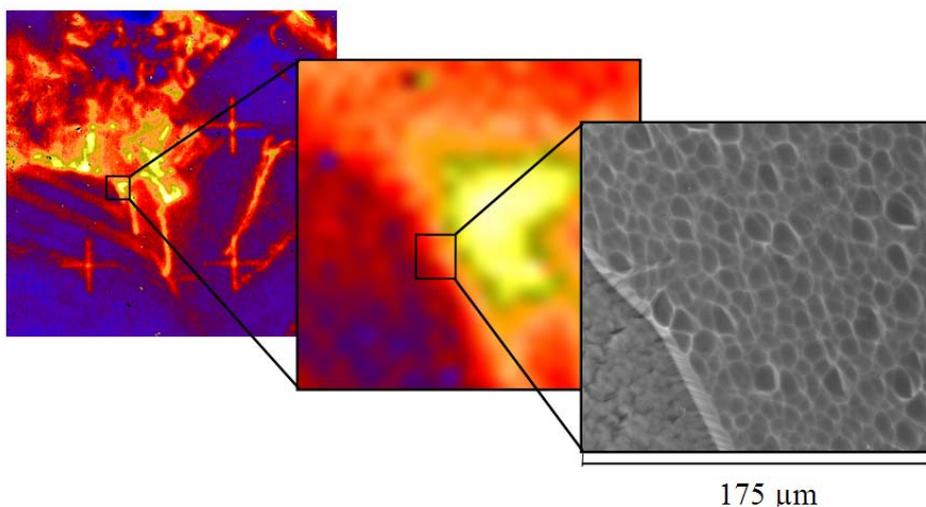


Abbildung 7.34: Haftstellenverteilung auf einer Fläche von ca. $12 \times 12 \text{ mm}^2$ (links), Ausschnitt (Mitte) und Rasterelektronenmikroskop-Messung (rechts). Im rechts dargestellten Ausschnitt wurden spektral aufgelöste Kathodolumineszenzverteilungen aufgenommen (siehe Abbildung 7.35 und Abbildung 7.36).

Die Kathodolumineszenz-Messung wurde bei einer Temperatur von 21 K ortsaufgelöst und spektral aufgelöst aufgenommen. Eine Übersicht der Kathodolumineszenz-Messung ist in Abbildung 7.35 gezeigt. In dieser Abbildung ist die Photonenintensitätsverteilung als Helligkeitsverteilung dargestellt, während die Farbwertverteilung auf die relative Verschiebung der Spektralanteile in den energiereicheren (blau) bzw. -ärmeren Spektralbereich (rot) anzeigt.

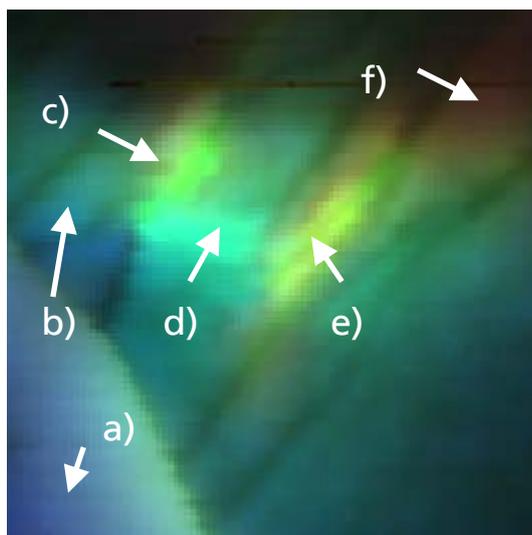


Abbildung 7.35: Photonenergieverteilung der Kathodolumineszenz-Messung. Die Farblichkeit zeigt die integrale Intensität an, der Farbwert die relative Verschiebung des Spektrums. Blau bedeutet eine Verschiebung zum Kurzwelligen, rot zum Langwelligen. Die Pfeile kennzeichnen Positionen, deren Spektren beispielhaft in Abbildung 7.36 zu sehen sind.

Zwei prinzipiell verschiedenartige Bereiche sind auszumachen: Im linken unteren Teil sind Photonenintensität und Spektrumsverschiebung homogen, während im Rest des Bildes starke Schwankungen sowohl der integralen Intensität als auch im Spektrum aus-

zumachen sind. An einigen beispielhaften, in Abbildung 7.35 gekennzeichneten Positionen sind in Abbildung 7.36 energieaufgelöste Spektren gezeigt.

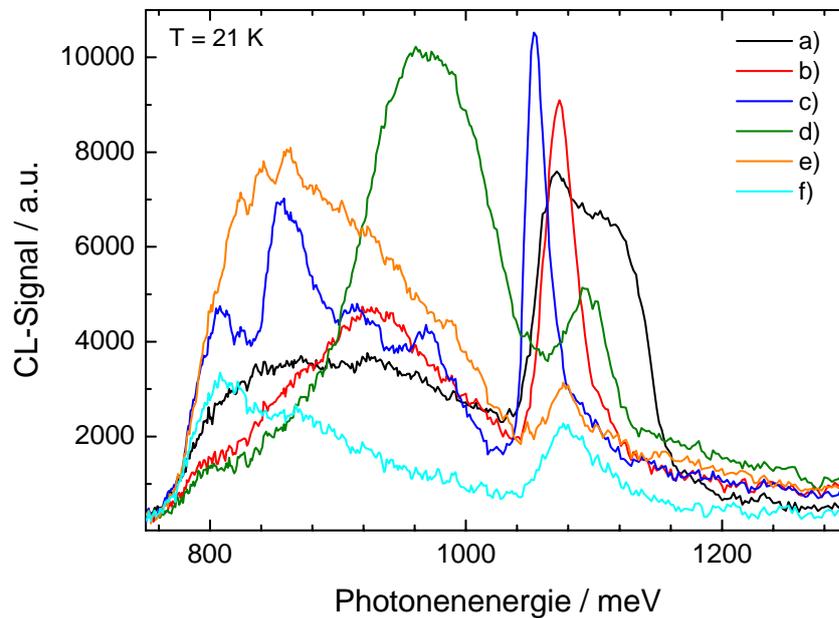


Abbildung 7.36: Kathodolumineszenzspektren an den in Abbildung 7.35 gekennzeichneten Positionen.

Der untere linke Bereich zeichnet sich gegenüber dem restlichen Bild durch ein wenig detailreiches Spektrum im Bereich von 800 meV bis 1040 meV und ein breites spektrales Maximum zwischen 1060 meV und 1140 meV aus. Im restlichen Teil des Probenausschnitts deuten verschiedenartige Spektren auf signifikante Störungen des Kristalls hin. Dominante Linien sind bei 808 meV, 858 meV, 916 meV, 971 meV und 1053 meV (Position c)) auszumachen. Der rote Bereich (Position b)) zeigt statt der 1053 meV-Linie eine dominante Linie bei 1073 meV. Bei Position d) ist die Linie bei 971 meV stark vergrößert und es tritt ein weiteres Maximum bei 1095 meV auf. Position e) ist von einer breiten Verteilung hoher Intensität im Bereich zwischen 800 meV und 1000 meV geprägt, während Position f) ein insgesamt schwaches Spektrum aufweist, welches bei 800 meV ein Maximum zeigt.

Die Zuordnung der beobachteten Maxima zu aus der Literatur bekannten Linien (siehe Abbildung 7.1) ist zunächst schwierig. Die meisten Literaturergebnisse wurden bei Proben Temperaturen von ca. 4 K auf kontrolliert versetztem, monokristallinem Material ermittelt. Temperaturabhängigkeiten der Linienpositionen sind nach Abbildung 7.19 wahrscheinlich. Ebenso sind Injektionsabhängigkeiten wie in Abbildung 7.22 zu erwarten. Das 808 meV-Maximum passt gut mit der bekannten D1-Linie zusammen. Der energiereiche Teil oberhalb von 1100 meV ist mit einem exzitonischen Band-Band-Übergang verknüpft. Er deutet auf eine erhöhte Dichte freier Ladungsträger hin und zeichnet den Bereich um die Position a) als Region höherer Materialqualität aus. Diese Beobachtung entspricht der gemessenen Haftstellenverteilung, die diesen Bereich ebenfalls als Bereich höherer Diffusionslänge auszeichnet. Auf Grund der schlechteren er-

reichbaren Ortsauflösung der Haftstellenmessung ist es nicht möglich, Details der mit Kathodolumineszenz gemessenen Spektren den Haftstellen direkt zuzuordnen. Es lässt sich aber feststellen, dass die haftstellenreichen Bereiche insgesamt eine höhere Intensität von Defektlinien aufweisen.

Es lässt sich aus diesen Spektren schließen, dass die Beschreibung des Defektspektrums mit vier dominanten Defektlinien D1-D4 nicht uneingeschränkt auf multikristallines Silizium angewandt werden kann. Die erhaltenen Spektren sind detailreich und beinhalten eine Reihe weiterer Übergänge.

7.3.3 Kathodolumineszenz auf großen Flächen

Die bisherigen Kathodolumineszenz-Untersuchungen konnten apparaturbedingt nur auf kleinen Flächen durchgeführt werden. Um die gewünschte Ortsauflösung zu erreichen, wird der Elektronenstrahl entsprechend abgelenkt. Die Geometrie des Aufbaus setzt bei diesem Verfahren der maximal untersuchbaren Fläche Grenzen. Um z.B. Haftstellenmessungen mit Kathodolumineszenz-Messungen zu vergleichen, müssen jedoch größere Bereiche untersucht werden. Dies ist mit einer am NREL neu aufgebauten Modifikation des Kathodolumineszenz-Messplatzes möglich. Anstatt des Elektronenstrahls bewegt sich in diesem Fall der Probenstisch und ermöglicht Untersuchungen auf mehreren Quadratzentimetern. Der Elektronenstrahl wird zur Vermeidung von *Undersampling*-Effekten entsprechend defokussiert. Mit den Daten einer Kathodolumineszenz-Messung nach dieser Methode wurde ein Photonenenergieverteilungsbild erstellt (siehe Abbildung 7.37). Analog zu Abbildung 7.27 wurde die Verschiebung des lokalen Mittelwerts des Spektrums im Bereich von 800 meV bis 920 meV gegenüber des globalen Mittelwerts farblich codiert. Rot zeigt eine Verschiebung zu kleineren Energien an, blau zu größeren. Die Proben temperatur betrug in diesem Fall 80 K. Das Ergebnis ist mit der Haftstellendichte (siehe Abbildung 7.37, rechts) verglichen.

Drei beispielhafte Spektren an den in Abbildung 7.37 markierten Positionen sind in Abbildung 7.38 dargestellt. Charakteristisch für diese Energieverteilungen sind Bänder um 800 meV, 930 meV und 1075 meV. Die haftstellenreiche Position b) zeichnet sich durch eine Erhöhung um 930 meV aus. Um zu prüfen, ob diese Erhöhung mit der Haftstellendichte für den gesamten beobachteten Probenausschnitt korreliert, wurden automatisierte Kurvenanpassungen mit Hilfe von drei Gauß-Kurven an den Spektren durchgeführt. Die Energielagen der Zentren der Gauß-Verteilungen wurden dabei an einigen Einzelspektren geprüft und für die automatisierte Auswertung festgehalten. Es ist anzumerken, dass die Kurvenanpassung in diesem Fall nicht darauf abzielt, eine perfekte analytische Beschreibung des Spektrums zu liefern. Es ist an den gezeigten Beispielspektren abschätzbar, dass eine solche Beschreibung mehr als drei Linien annehmen müsste. Die Asymmetrie der Verteilung um 1075 meV lässt sich beispielsweise mit zwei sich überlagernden Gauß-Verteilungen sehr gut anpassen. Der Fokus bei dieser Untersuchung soll aber darauf liegen, einen Parameter zur Charakterisierung der Erhö-

hung um 930 meV zu finden, der Einflüsse der Nebenmaxima berücksichtigt, der aber der zur analytischen Beschreibung zu geringen Linienauflösung Rechnung trägt.

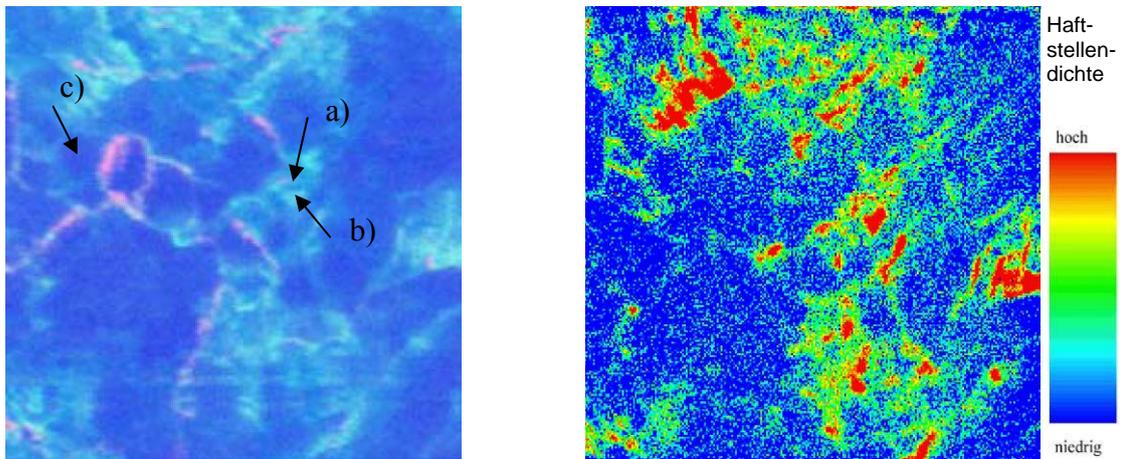


Abbildung 7.37: Relative Photonenergieverteilung nach Kathodolumineszenzmessungen auf eine Fläche von ca. $12 \times 12 \text{ mm}^2$ und einer Temperatur von 80 K (links). Haftstellenverteilung desselben Bereichs (rechts). Die im linken Bild türkis dargestellten Bereiche korrelieren mit Bereichen erhöhter Haftstellendichte, während die rötlichen Strukturen nicht mit der Haftstellendichteverteilung zusammenhängen. Zur Farbcodierung siehe Text.

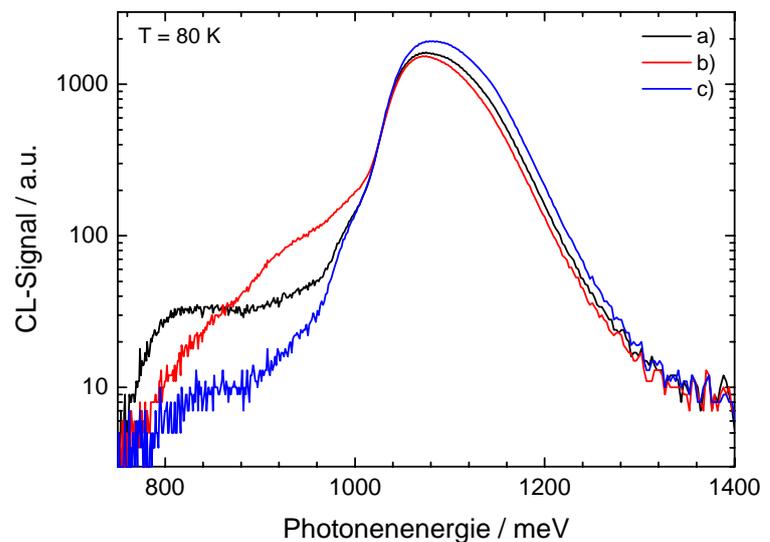


Abbildung 7.38: Beispielhafte Spektren aus der ortsaufgelösten Kathodolumineszenz-Messung aus Abbildung 7.37.

In Abbildung 7.39 ist die im beschriebenen Verfahren ermittelte Fläche der um 930 meV zentrierten Gauß-Verteilung ortsaufgelöst dargestellt.

Der Vergleich mit Abbildung 7.37 belegt, dass die berechnete Verteilung näherungsweise der Haftstellenverteilung entspricht. Dieser Vergleich wurde an einem weiteren multikristallinen Silizium-Material untersucht. In analoger Weise wurden aus den spektralen Kathodolumineszenz-Daten die Zentralpositionen dreier Gauß-Verteilungen zur Beschreibung der Spektren ermittelt und die Fläche der mittleren Verteilung ortsaufgelöst aufgetragen. Das Zentrum lag bei dieser Probe bei 910 meV. In sehr vergleichbarer

Weise entsprechen sich Haftstellendichte und der aufgetragene Anpassungsparameter (siehe Abbildung 7.40). Die diagonalen Linien im oberen rechten Probenausschnitt in der Kathodolumineszenz-Messung zeigen Brüche der Probe an, die zum Zeitpunkt der Haftstellenmessung noch nicht vorhanden waren.

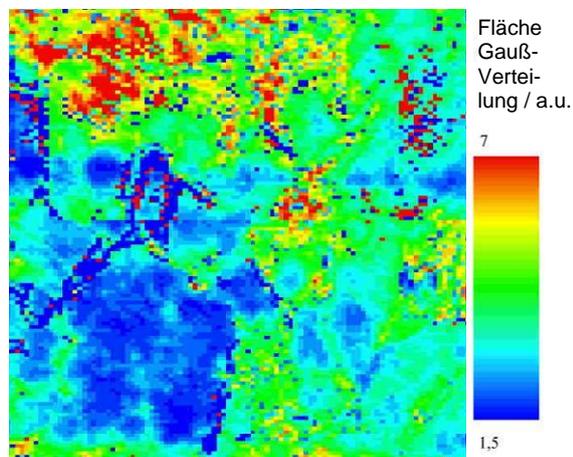


Abbildung 7.39: Ortsaufgelöste Auftragung des Flächenparameters zur Beschreibung der Erhöhung des Spektrums um 930 meV (siehe Abbildung 7.38). Näherungsweise entspricht die Verteilung der beobachteten Haftstellendichte (Abbildung 7.37).

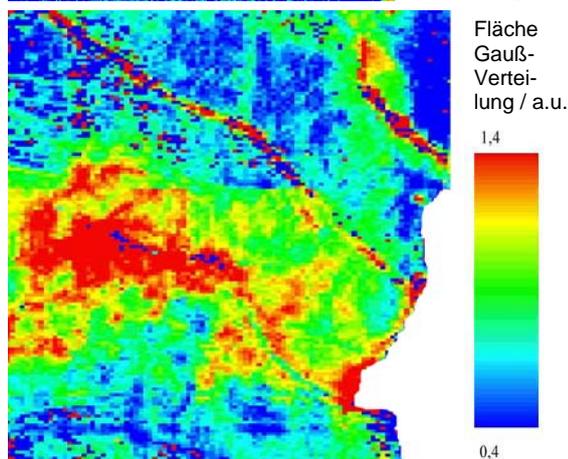
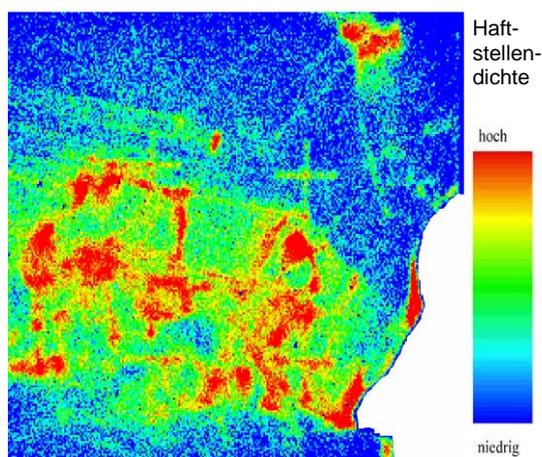
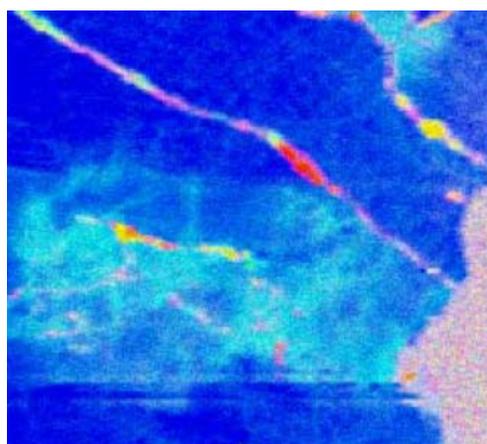


Abbildung 7.40: Photonenergieverteilung (oben), Haftstellendichte (rechts oben) und Parameter zur Beschreibung der Erhöhung der Lumineszenzintensität um 910 meV (rechts). Zu Details siehe Abbildung 7.37 und Abbildung 7.39. Die Linien im oberen rechten Bildbereich sind Brüchen der Probe zuzuordnen und werden hier nicht weiter betrachtet.

7.4 Bewertung der Lumineszenzergebnisse

Aus der Bestimmung des Defektlinienspektrums mit Photo- und Kathodolumineszenzmessungen lassen sich weitere Eigenschaften des untersuchten Silizium-Materials erschließen, die über die Rekombinationslebensdauer hinausgehen. Es ist jedoch bisher nicht möglich, die genaue Herkunft der Defektlinien zweifelsfrei zu bestimmen. In dieser Arbeit konnten folgende Schlüsse aus dem Vergleich zwischen Lebensdauer- und Haftstellendichtemessungen mit Hilfe der CDI-Methode und spektral aufgelösten Lumineszenzmessungen gewonnen werden:

- (i) In den untersuchten Proben konnte die in der Literatur beschriebene D1'-Defektlinie bei Raumtemperatur nicht gefunden werden.
- (ii) Stattdessen wurden zwei Linien bei 740 meV und 838 meV (Raumtemperatur) gefunden. Letztere wird wegen ihrer spektralen Position mit der D2-Linie in Verbindung gebracht. Die genaue Temperatur- und Injektionsabhängigkeit dieser Linie wurde eingehend untersucht. Verschiedene Modelle zur Herkunft der Linie konnten an die temperaturabhängigen Messdaten angepasst werden. Im verfügbaren Messbereich unterscheiden sich die Modellbeschreibungen jedoch nur schwach und lassen keine eindeutige Entscheidung zu Gunsten eines der Modelle zu. Unter Annahme eines Übergangs zwischen einem bandnahen und einem tiefen Defektniveau konnte der Abstand des bandnahen Niveaus auf 79 meV abgeschätzt werden. Bei Anwendung eines Modells, bei dem Ladungsträger zur Deaktivierung eine Energiebarriere z.B. in ein benachbartes Niveau überschreiten müssen, bevor sie strahlungslos rekombinieren, ergibt sich für die Höhe dieser Barriere ein Wert von 51 meV. Die von der Theorie vorausgesagte Abhängigkeit der Lumineszenzmaxima von der Injektionsdichte konnte qualitativ bestätigt werden.
- (iii) Das mit der D2-Linie in Verbindung gebrachte Lumineszenzmaximum korreliert mit der mittels CDI bestimmten Haftstellendichte. Die Band-Band-Lumineszenz korreliert erwartungsgemäß mit der Verteilung der Rekombinationslebensdauer. Die weiteren gefunden Defektlinien weisen zu Lebensdauer oder Haftstellendichte keine klare Korrelation auf.
- (iv) Der Vergleich von Kathodolumineszenzergebnissen zweier benachbarter, linienförmiger Kristallstrukturen mit Haftstellenmessungen sowie Kristallorientierungs-Messungen zeigte, dass Versetzungslinien je nach Versetzungstyp sehr unterschiedliche Haftstellenverteilungen und Kathodolumineszenzspektren aufweisen. Während eine Versetzungslinie aus zwei 60°-Korngrenzen eine geringe Haftstellenverteilung und schwache Defektlumineszenz zeigt, weist die aus vielen Versetzungslinien bestehende Struktur ei-

ne erhöhte Haftstellenverteilung sowie eine ausgeprägte Defektlumineszenz auf.

- (v) Bereiche mit geringer Defektlumineszenz zeigten in den vorgestellten Messungen keine ausgeprägte Haftstellendichte, wohingegen Bereiche hoher Haftstellendichte sich durch signifikante Defektlumineszenz auszeichneten.
- (vi) Großflächige Kathodolumineszenzmessungen zeigten eine von dominanten Nachbarlinien verdeckte Defektlinie im Bereich von 0.91-0.93 eV bei 80 K, deren Intensität mit Hilfe einer Kurvenanpassung unter Annahme einer multiplen Gauß-Verteilung ortsaufgelöst bestimmt wurde. Die Intensitätsverteilung korreliert mit der Haftstellendichte.

8 Zusammenfassung

Diese Arbeit gibt einen Überblick über die Entwicklung und Anwendung grundlegend verschiedener Infrarot-Verfahren zur Beurteilung der Materialqualität von kristallinem Silizium für Solarzellen. Die vorgestellten theoretischen Grundlagen stellen die orts aufgelöste Detektion der Rekombinationslebensdauer auf ein mathematisches Fundament. Die Verfahren umfassen die Detektion der integralen Band-Band-Lumineszenz und der Emission sowie Absorption von Infrarotstrahlung im mittleren Infrarot durch freie Ladungsträger. Beide kamerabasierten Verfahren, *Photoluminescence Imaging* (PLI) und *Carrier Density Imaging* (CDI), haben in ihrer Hauptanwendung die schnelle und orts aufgelöste Messung der Rekombinationslebensdauer zum Ziel. Zu diesem Zweck wurden in dieser Arbeit Möglichkeiten zur quantitativen Kalibrierung des PLI-Signals erarbeitet. Insbesondere die nichtlineare Abhängigkeit des Signals von der Ladungsträgerdichte sowie Reabsorptionseffekte von Rekombinationsstrahlung bedingen die Anwendung eines analytischen Modells zur korrekten Kalibrierung. Zusätzlich zu diesem Ansatz werden Möglichkeiten zur selbstkonsistenten Kalibrierung nach Vorbild des aus der Literatur bekannten Verfahrens für nicht-orts aufgelöste Messungen eruiert. Das CDI-Verfahren wird gegenüber den Detailuntersuchungen in früheren Arbeiten aus einer übergeordneten Sicht betrachtet. Zwei konzeptionell verschiedene Aufbauvarianten dieses Messverfahrens werden vorgestellt. In Abhängigkeit der das Signal beeinflussenden Temperatur- und Optik-Parameter wird eine theoretische Beschreibung des Messsignals gegeben.

Das CDI-Verfahren wird in dieser Arbeit wesentlich weiterentwickelt, um injektionsabhängige Informationen über die Materialqualität extrahieren zu können. Es werden verschiedene Methoden zur Unterdrückung von bekannten Messartefakten bei Niedereinjektionsmessungen vorgestellt. Ein weiteres, zentrales Ergebnis ist die Bestimmung der Haftstellendichte-Verteilung durch Anpassung eines analytischen Modells an injektionsabhängige Messdaten. Es wird ein Zusammenhang zwischen der Haftstellendichte

und der Versetzungsdichte hergestellt sowie die Beziehung von Haftstellendichte und Verunreinigungen untersucht. Besonderes Augenmerk liegt dabei auf Sauerstoff, der als Faktor für eine erhöhte Haftstellendichte vorgeschlagen wird. Weitere Untersuchungen zeigen, dass Metalle die Haftstellendichte reduzieren können. Schließlich wird die Haftstellendichte an Ausgangsmaterial mit der Diffusionslänge in fertig prozessierten Solarzellen verglichen. Es zeigt sich eine von der Höhe der Haftstellendichte abhängige Korrelation, die im Fall einer hohen Haftstellendichte den Schluss auf eine in der Solarzelle verringerte Diffusionslänge zulässt. Alternative Theorien zu den Haftstellen zugeschriebenen Messeffekten werden vorgestellt und gegen die Haftstellentheorie abgegrenzt. Temperaturabhängige Messungen favorisieren letztere als Erklärung für die erhaltenen Messungen.

Eine erhebliche Einschränkung der vorgestellten kamerabasierten Methoden war bisher der signifikante Einfluss der Oberflächenqualität auf das Messergebnis. Bedingt durch die optische Detektion spielen Reflexion und Streuung an der Oberfläche für das Messergebnis eine wesentliche Rolle. In dieser Arbeit wird zur Ermöglichung quantitativer Messungen an rauen Oberflächen am Beispiel der CDI-Methode eine zweistufige analytische Korrektur entwickelt, die die orts aufgelöste Emissivität der Probe und die Verzerrung der orts aufgelösten Information durch Reflexion und Streuung gleichermaßen berücksichtigt. Neben einer Korrektur des Absolutwerts kann mit Hilfe der Bestimmung einer Punkt-Antwort-Funktion eine Entfaltungsmethode angewandt werden, um die ursprüngliche Ortsauflösung in guter Näherung wieder zu erreichen, die ohne diese Korrektur signifikant vermindert war. Die Entwicklung der Theorie zur Behandlung von Messungen an Proben mit rauen Oberflächen ist ein wesentlicher Schritt für die Implementierung der vorgestellten Messverfahren als Routinemessung für Industrie und Forschung, um eine Charakterisierung von sägerauem Ausgangsmaterial sowie texturierten Proben zu ermöglichen.

Die Beurteilung der Materialqualität mit Hilfe der Detektion infraroter Strahlung wurde schließlich auf eine spektrale Analyse ausgeweitet. Mit Hilfe von Photolumineszenz- und Kathodolumineszenz-Spektroskopie wurden neben der Band-Band-Lumineszenz Defektlinien im längerwelligen Bereich zur Materialbeurteilung herangezogen. In den untersuchten multikristallinen Siliziumproben wurde eine ungewöhnlich temperaturstabile Defektlinie mit einer Energie von 838 meV bei Raumtemperatur gefunden, die mit der Haftstellendichte korreliert. Während ein solches Verhalten für eine Defektlinie bei 800 meV in der Literatur beschrieben ist, ist die beobachtete Temperaturstabilität der der D2-Linie zugeordneten Bande neu. Der Vergleich von Kathodolumineszenzmessungen mit der Haftstellendichte liefert weitere Hinweise auf eine Verbindung der Defektlinien mit der Haftstellendichte. Mit Hilfe von Kristallorientierungsmessungen werden Versetzungen mit erhöhter und schwacher Haftstellendichte verglichen. Es zeigt sich, dass 60°-Versetzungen im Gegensatz zu komplexer versetzten Linien keine Erhöhung der Haftstellendichte aufweisen. Eine Analyse des Spektrums bei großflächigen

Kathodolumineszenzmessungen stellt eine Korrelation von einer schwach ausgeprägten Defektbande bei 910 – 930 meV mit der Haftstellendichte her.

Literaturverzeichnis

1. (EPIA), E.P.I.A., *Global solar photovoltaic market estimated at 2.3 GWp in 2007*. 2007: Brussels.
2. Buonassisi, T., et al., *Engineering metal-impurity nanodefects for low-cost solar cells*. *Nature Materials: Letters*, 2005: p. 1-4.
3. Woditsch, P. and W. Koch, *Solar grade silicon feedstock supply for PV industry*. *Solar Energy Materials & Solar Cells*, 2002. **72**: p. 11-26.
4. Yuge, N., et al., *Purification of metallurgical-grade silicon up to solar grade*. *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, 2001. **9**: p. 203-9.
5. Khattak, C.P., D.B. Joyce, and F. Schmid, *A simple process to remove boron from metallurgical grade silicon*. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 2002. **74**: p. 77-89.
6. Sze, S.M., *Physics of Semiconductor Devices*. 2nd ed. 1981, New York: John Wiley & Sons.
7. Streetman, B.G. and S. Banerjee, *Solid State Electronic Devices*. 2000, New Jersey: Prentice Hall. 543.
8. Fahrenbruch, A.L. and R.H. Bube, *Fundamentals of solar cells*. 1983, New York: Academic Press.
9. Goetzberger, A., B. Voß, and J. Knobloch, *Sonnenenergie: Photovoltaik*. 1994, Stuttgart: Teubner Studienbücher Physik.

10. Green, M.A., *Silicon solar cells: Advanced principles and practice*. 1995, Sydney, NSW: Bridge printery.
11. Würfel, P., *Physics of Solar Cells*. 2005, Weinheim: Wiley.
12. Chelikowsky, J.R. and M.L. Cohen, *Nonlocal pseudopotential calculations for the electronic structure of eleven diamond and zinc-blende semiconductors*. Physical Review B, 1976. **14**(2): p. 556-82.
13. Dziewior, J. and W. Schmid, *Auger coefficients for highly doped and highly excited silicon*. Applied Physics Letters, 1977. **31**(5): p. 346-8.
14. Hangleiter, A. and R. Häcker, *Enhancement of band-to-band Auger recombination by electron-hole correlations*. Physical Review Letters, 1990. **65**(2): p. 215-18.
15. Shockley, W. and W.T.J. Read, *Statistics of the recombinations of holes and electrons*. Physical Review, 1952. **87**(5): p. 835-42.
16. Hall, R.N., *Electron-hole recombination in germanium*. Physical Review, 1952. **87**: p. 387.
17. Smith, R.A., *Semiconductors*. 2nd edition ed. 1978, Cambridge: Cambridge University Press. 513.
18. Green, M.A., *Solar cells: operating principles, technology and system applications*. 1986, Kensington: UNSW.
19. Rein, S., *Lifetime spectroscopy: a method of defect characterization in silicon for photovoltaic applications*. 2005, Berlin: Springer. 489.
20. Nagel, H., C. Berge, and A.G. Aberle, *Generalized analysis of quasi-steady-state and quasi-transient measurements of carrier lifetimes in semiconductors*. Journal of Applied Physics, 1999. **86**(11): p. 6218- 21.
21. Sproul, A.B., *Dimensionless solution of the equation describing the effect of surface recombination on carrier decay in semiconductors*. Journal of Applied Physics, 1994. **76**(5): p. 2851-4.
22. Grivickas, V., D. Noreika, and J.A. Tellesfen, Soviet Physics Collection, 1989. **29**(USA): p. 591.
23. Schöfthaler, M. and R. Brendel. *Microwave reflections for carrier lifetime measurements: a comprehensive study on sensitivity and transient response*. in *Proceedings of the 1st World Conference on Photovoltaic Energy Conversion*. 1994. Hawaii, USA: IEEE; New York, NY, USA.

24. Schöffthaler, M. and R. Brendel, *Sensitivity and transient response of microwave reflection measurements*. Journal of Applied Physics, 1995. **77**(7): p. 3162-73.
25. Sinton, R.A. and A. Cuevas, *Contactless determination of current-voltage characteristics and minority-carrier lifetimes in semiconductors from quasi-steady-state photoconductance data*. Applied Physics Letters, 1996. **69**(17): p. 2510-2.
26. Sinton, R.A., A. Cuevas, and M. Stuckings. *Quasi-steady-state photoconductance, a new method for solar cell material and device characterization*. in *Proceedings of the 25th IEEE Photovoltaic Specialists Conference*. 1996. Washington DC, USA: IEEE; New York, NY, USA.
27. Johnson, E.O., *Measurement of minority carrier lifetime with the surface photovoltage*. Journal of Applied Physics, 1957. **28**: p. 1349.
28. Schroder, D.K., *Semiconductor Material and Device Characterization*. 1990, New York: John Wiley & Sons. 599.
29. Carstensen, J., et al. *Elymat technique on multicrystalline silicon for solar cell application*. in *Proceedings of the 13th European Photovoltaic Solar Energy Conference*. 1995. Nice, France: H.S. Stephens & Associates, Bedford, UK, 1995.
30. Warta, W., et al. *Impact of diffusion length distributions on the performance of mc-silicon solar cells*. in *Proceedings of the 2nd World Conference on Photovoltaic Energy Conversion*. 1998. Vienna, Austria: European Commission, Ispra, Italy, 1998.
31. Bartels, O., *Bestimmung ortsaufgelöster Ladungsträgersammeleigenschaften von Silizium-Solarzellen*. 2001, Universität Freiburg.
32. Edwards, D.F., *Silicon*, in *Handbook of optical constants of solids*, E.D. Palik, Editor. 1997, Academic Press.
33. Würfel, P., *The chemical potential of radiation*. Journal of Physics C: Solid State Physics, 1982. **15**: p. 3967-85.
34. Daub, E., *Photolumineszenz von Silizium*. 1995, Universität Karlsruhe.
35. Honerkamp, J., *Statistical physics - An advanced approach with applications*. 2nd ed. Advanced texts in physics. 2002, Heidelberg: Springer. 536.
36. Hara, H. and Y. Nishi, *Free carrier absorption in p-type silicon*. Journal of the Physical Society of Japan, 1966. **21**: p. 1222.
37. Schroder, D.K., R.N. Thomas, and J.C. Swartz, *Free carrier absorption in silicon*. IEEE Transactions on Electron Devices, 1978. **ED-25**(2): p. 254-61.

38. Schumann, P.A., Jr., et al., *Silicon optical constants in the infrared*. Journal of the Electrochemical Society: Solid State Science, 1971. **118**(1): p. 145-8.
39. Isenberg, J. and W. Warta, *Free carrier absorption in heavily doped silicon layers*. Applied Physics Letters, 2004. **84**(13): p. 2265-7.
40. Isenberg, J., *Neue Infrarotmesstechniken der Photovoltaik*, in *Fakultät für Physik*. 2003, Universität Konstanz: Konstanz.
41. The, M., *Messung von Minoritätsladungsträgerlebensdauern in Silizium mit Hilfe von Photoluminescence-Imaging*, in *Fakultät für Mathematik und Physik*. 2007, Universität Freiburg: Freiburg. p. 116.
42. Trupke, T., R.A. Bardos, and M.D. Abbott, *Self-consistent calibration of photoluminescence and photoconductance lifetime measurements*. Applied Physics Letters, 2005. **87**(18): p. 184102-1- 3.
43. Rüdiger, M., *Analyse von Defekten in Silizium mittels Photolumineszenz-Spektroskopie*, in *Fakultät für Mathematik und Physik*. 2007, Universität Freiburg: Freiburg. p. 141.
44. Trupke, T. and R.A. Bardos, *Self-consistent determination of the generation rate from photoconductance measurements*. Applied Physics Letters, 2004. **85**(16): p. 3611-3.
45. Kampwerth, H., *Analyse von Solarzellen und Ladungsträgerrekombination mittels Dickenvariation*, in *Fakultät für Mathematik und Physik*. 2004, Universität Freiburg: Freiburg. p. 144.
46. Würfel, P., et al. *Diffusion lengths of silicon solar cells from luminescence images*. in *Proceedings of the 22nd European Photovoltaic Solar Energy Conference*. 2007. Milan, Italy.
47. Würfel, P., et al., *Diffusion lengths of silicon solar cells from luminescence images*. Journal of Applied Physics, 2007. **101**(123110).
48. Kasemann, M. to be published, Universität Konstanz.
49. Giesecke, J. to be published: Universität Freiburg.
50. Trupke, T., et al., *Photoluminescence imaging of silicon wafers*. Applied Physics Letters, 2006. **89**(044107): p. 1-3.
51. Macdonald, D., et al. *Impurities in solar-grade silicon and their characterisation*. in *Proceedings of the 22nd European Photovoltaic Solar Energy Conference*. 2007. Milan, Italy.

-
52. White, J.C. and J.G. Smith, *Observation of carrier densities in silicon devices by infrared emission*. Journal of Physics E (Scientific Instruments), 1977. **10**(8): p. 817-25.
 53. Sanii, F., et al., *Contactless nondestructive measurement of bulk and surface recombination using frequency-modulated free carrier absorption*. Solid-State Electronics, 1992. **35**(3): p. 311-17.
 54. Glunz, S.W., C. Hebling, and W. Warta. *Lifetime and material characteristics of multicrystalline silicon measured with high spatial resolution*. in *Proceedings of the 4th International Conference on Polycrystalline Semiconductors IV - Physics, Chemistry and Technology*. 1995. Gargnano, Italy: Balaban Publishers; Scitec Publications.
 55. Glunz, S.W. and W. Warta, *High-resolution lifetime mapping using modulated free-carrier absorption*. Journal of Applied Physics, 1995. **77**(7): p. 3243-7.
 56. Bail, M., et al. *Lifetime mapping of Si wafers by an infrared camera [for solar cell production]*. in *Proceedings of the 28th IEEE Photovoltaics Specialists Conference*. 2000. Anchorage, USA.
 57. Riepe, S., et al. *Carrier density and lifetime imaging of silicon wafers by infrared lock-in thermography*. in *Proceedings of the 17th European Photovoltaic Solar Energy Conference*. 2001. Munich, Germany: WIP-Munich and ETA-Florence.
 58. Isenberg, J., et al., *Imaging method for laterally resolved measurement of minority carrier densities and lifetimes: measurement principle and first applications*. Journal of Applied Physics, 2003. **93**(7): p. 4268-75.
 59. Schubert, M.C., J. Isenberg, and W. Warta, *Spatially resolved lifetime imaging of silicon wafers by measurement of infrared emission*. Journal of Applied Physics, 2003. **94**(6): p. 4139-43.
 60. Schubert, M., *Thermographische Methoden zur ortsaufgelösten Messung der Ladungsträgerlebensdauer in Silizium*, in *Fakultät für Mathematik und Physik*. 2003, Albert-Ludwigs-Universität Freiburg: Freiburg i. Br. p. 111.
 61. Pohl, P. and R. Brendel. *Temperature dependent infrared camera lifetime mapping (ILM)*. in *Proceedings of the 19th European Photovoltaic Solar Energy Conference*. 2004. Paris, France: WIP-Munich, ETA-Florence.
 62. Pohl, P., *Infrared camera-based imaging techniques for solar-grade silicon*, in *Fakultät für Mathematik und Physik*. 2007, Universität Hannover: Hannover. p. 141.

-
63. Schubert, M.C., et al. *Temperature dependent carrier lifetime images*. in *Proceedings of the 19th European Photovoltaic Solar Energy Conference*. 2004. Paris, France: WIP-Munich, ETA-Florence.
 64. Kuchling, H., *Taschenbuch der Physik*. 1984, Thun Frankfurt/Main: Harri Deutsch.
 65. Hornbeck, J.A. and J.R. Haynes, *Trapping of minority carriers in silicon. I. P-type silicon*. *Physical Review*, 1955. **97**(2): p. 311-21.
 66. Haynes, J.R. and W. Shockley, *The mobility and life of injected holes and electrons in germanium*. *Physical Review*, 1951. **81**(5): p. 835-43.
 67. Haynes, J.R. and W.C. Westphal, *The drift mobility of electrons in silicon*. *Physical Review*, 1952. **58**(4): p. 680.
 68. Haynes, J.R. and J.A. Hornbeck, *Temporary traps in silicon and germanium*. *Physical Review*, 1953. **90**(1): p. 152-3.
 69. Fan, H.Y., *Effects of traps on carrier injection in semiconductors*. *Physical Review*, 1953. **92**(6): p. 1424-8.
 70. Haynes, J.R. and J.A. Hornbeck, *Trapping of minority carriers in silicon. II. n-type silicon*. *Physical Review*, 1955. **100**(2): p. 606-15.
 71. Macdonald, D. and A. Cuevas, *Trapping of minority carriers in multicrystalline silicon*. *Applied Physics Letters*, 1999. **74**(12): p. 1710-2.
 72. Macdonald, D. and A. Cuevas, *Understanding carrier trapping in multicrystalline silicon*. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 2001. **65**: p. 509-16.
 73. Macdonald, D.H., *Recombination and trapping in multicrystalline silicon solar cells*. 2001, The Australian National University: Canberra. p. 210.
 74. Macdonald, D., R.A. Sinton, and A. Cuevas, *On the use of a bias-light correction for trapping effects in photoconductance-based lifetime measurements of silicon*. *Journal of Applied Physics*, 2001. **89**(5): p. 2772-8.
 75. Beaucarne, G. and M.A. Green, *A modified Shockley-Read-Hall theory including radiative transitions*. *Solid-State Electronics*, 2003. **47**: p. 685-9.
 76. Gundel, P., *Ortsaufgelöste Haftstellen-Untersuchungen zur Charakterisierung von Silizium für Solarzellen*, in *Fakultät Mathematik und Naturwissenschaften*. 2007, Technische Universität Dresden: Freiburg. p. 115.
 77. Bronstein, I.N. and K.A. Semendjajew, *Taschenbuch der Mathematik*. 1979, Leipzig, Moskau: Teubner.

-
78. Griffiths, P.R. and J.A. de Haseth, *Fourier transform infrared spectroscopy*. 1986, New York: John Wiley and Sons.
 79. Zengerle, R., *Materialien der Mikrosystemtechnik*. 2005. p. 73.
 80. Macdonald, D., M. Kerr, and A. Cuevas, *Boron-related minority-carrier trapping centers in p-type silicon*. Applied Physics Letters, 1999. **75**(11): p. 1571-3.
 81. Schmidt, J., K. Bothe, and R. Hezel, *Oxygen-related minority-carrier trapping centers in p-type Czochralski silicon*. Applied Physics Letters, 2002. **80**(23): p. 4395-7.
 82. Dekkers, H.F.W., L. Carnel, and G. Beaucarne, *Carrier trap passivation in multicrystalline Si solar cells by hydrogen from SiN_x:H layers*. Applied Physics Letters, 2006. **89**(013508): p. 1-3.
 83. Fischer, H. and W. Pschunder. *Investigation of photon and thermal induced changes in silicon solar cells*. in *Proceedings of the 10th IEEE Photovoltaic Specialists Conference*. 1973. Palo Alto, California, USA.
 84. Rein, S., *Untersuchung der Degradation der Ladungsträgerlebensdauer in Czochralski-Silizium*. 1998, Universität Freiburg. p. 153.
 85. Glunz, S.W., et al., *Minority carrier lifetime degradation in boron-doped Czochralski silicon*. Journal of Applied Physics, 2001. **90**(5): p. 2397-404.
 86. Schmidt, J., K. Bothe, and R. Hezel. *Formation and annihilation of the metastable defect in boron-doped Czochralski silicon*. in *Proceedings of the 29th IEEE Photovoltaics Specialists Conference*. 2002. New Orleans, Louisiana, USA.
 87. Schmidt, J. and K. Bothe, *Structure and transformation of the metastable boron- and oxygen-related defect center in crystalline silicon*. Physical Review B (Condensed Matter), 2004. **69**: p. 0241071-0241078.
 88. Lauer, K., et al. *Minority carrier lifetime, trap density and interstitial iron content in multicrystalline silicon raw wafers versus ingot position*. in *Proceedings of the 21st European Photovoltaic Solar Energy Conference*. 2006. Dresden, Germany.
 89. Macdonald, D. and A. Cuevas, *Validity of simplified Shockley-Read-Hall statistics for modeling carrier lifetimes in crystalline silicon*. Physical Review B (Condensed Matter and Materials Physics), 2003. **67**(075203): p. 075203-1-7.
 90. Schmidt, J., C. Berge, and A.G. Aberle, *Injection level dependence of the defect-related carrier lifetime in light-degraded boron-doped Czochralski silicon*. Applied Physics Letters, 1998. **73**(15): p. 2167-9.

91. Blakemore, J.S., *Semiconductor statistics*. 2nd ed. 1987, Ontario: General Publishing Company Ltd.
92. Istratov, A.A., H. Hieslmair, and E.R. Weber, *Iron and its complexes in silicon*. Applied Physics A (Materials Science & Processing), 1999. **A69**(1): p. 13-44.
93. Karazhanov, S.Z., *Mechanisms for the anomalous dependence of carrier lifetime on injection level and photoconductance on light intensity*. Journal of Applied Physics, 2001. **89**(1): p. 332-5.
94. Cuevas, A., et al., *Recombination and trapping in multicrystalline silicon*. IEEE Transactions on Electron Devices, 1999. **46**(10): p. 2026-34.
95. Bail, M., M. Schulz, and R. Brendel, *Space-charge region-dominated steady-state photoconductance in low-lifetime Si wafers*. Applied Physics Letters, 2003. **82**(5): p. 757-9.
96. Cousins, P.J., D.H. Neuhaus, and J.E. Cotter, *Experimental verification of the effect of depletion-region modulation on photoconductance lifetime measurements*. Journal of Applied Physics, 2004. **95**(4): p. 1854-8.
97. Neuhaus, D.H., P.J. Cousins, and A.G. Aberle. *Trapping and junction-related perturbations of the effective excess carrier lifetime*. in *Proceedings of the 1st World Conference on Photovoltaic Energy Conversion 2003*. Osaka, Japan.
98. Pohl, P., et al., *Defect imaging in multicrystalline silicon using a lock-in infrared camera technique*. Journal of Applied Physics, 2007. **101**(073701): p. 1-11.
99. Macdonald, D. and A. Cuevas, *Comment on "Mechanisms for the anomalous dependence of carrier lifetime on injection level and photoconductance on light intensity"*. Journal of Applied Physics, 2001. **90**(5): p. 2621-2.
100. Clugston, D.A. and P.A. Basore. *PCID version 5: 32-bit solar cell modeling on personal computers*. in *Proceedings of the 26th IEEE Photovoltaic Specialists Conference*. 1997. Anaheim, California, USA: IEEE; New York, NY, USA.
101. Arora, N.D., J.R. Hauser, and D.J. Roulston, *Electron and hole mobilities in silicon as a function of concentration and temperature*. IEEE Transactions on Electron Devices, 1982. **ED-29**(2): p. 292-5.
102. Masetti, G., M. Severi, and S. Solmi, *Modeling of carrier mobility against carrier concentration in arsenic-, phosphorus-, and boron-doped silicon*. IEEE Transactions on Electron Devices, 1983. **30**(7): p. 764-9.
103. Lombardi, C., et al., *A physically based mobility model for numerical simulation of nonplanar devices*. IEEE Transactions on Computer-Aided Design, 1988. **7**(11): p. 1164-71.

-
104. Rein, S., et al. *Temperature-dependent lifetime spectroscopy (TDLS) in silicon*. in *Proceedings of the 17th European Photovoltaic Solar Energy Conference*. 2001. Munich, Germany: WIP-Munich and ETA-Florence.
 105. Rein, S., et al., *Lifetime spectroscopy for defect characterization: Systematic analysis of the possibilities and restrictions*. *Journal of Applied Physics*, 2002. **91**(4): p. 2059-70.
 106. Schmidt, J., *Temperature- and injection-dependent lifetime spectroscopy for the characterization of defect centers in semiconductors*. *Applied Physics Letters*, 2003. **82**(13): p. 2178-80.
 107. Pingel, S., *Neue Infrarot-Messmethode zur orts aufgelösten Messung des Schichtwiderstands von hochdotierten Schichten in Silizium*, in *Institut für Angewandte Physik*. 2006, Universität Hamburg: Freiburg. p. 119.
 108. Siegel, R. and J.R. Howell, *Thermal radiation heat transfer*. 3rd ed. 1992, Washington: Hemisphere. 1072.
 109. Breitenstein, O. and M. Langenkamp, *Lock-in Thermography - Basics and Use for Functional Diagnostics of Electronic Components*. 2003, Berlin/Heidelberg: Springer Verlag.
 110. Schultz, O., *High-efficiency multicrystalline silicon solar cells*, in *Fakultät für Physik*. 2005, Universität Konstanz: Konstanz. p. 198.
 111. Research Systems, Inc., *IDL 5.6*.
 112. Drozdov, M.A., A.A. Patrin, and V.T. Tkachev, *Recombination radiation on dislocations in silicon*. *Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters*, 1976. **23**(11): p. 597-9.
 113. Pizzini, S., et al., *About the D1 and D2 dislocation luminescence and its correlation with oxygen segregation*. *Physica Status Solidi B*, 2000. **222**: p. 141-50.
 114. Sauer, R., et al., *Dislocation-related photoluminescence in silicon*. *Applied Physics A*, 1985. **36**: p. 1-13.
 115. van Kooten, J.J., et al., *Photoluminescence on oxygen-rich acceptor-doped silicon*. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 1987. **20**: p. 2183-91.
 116. Tajima, M., et al., *Photoluminescence due to boron-related defect in solar cell silicon irradiated with 1-MeV electrons*. *IEEE Transactions on Nuclear Science*, 2001. **48**(6): p. 2127-30.

117. Noonan, J.R., C.G. Kirkpatrick, and B.G. Streetman, *Photoluminescence from Si irradiated with 1.5-MeV electrons at 100 °K*. Journal of Applied Physics, 1976. **47**(7): p. 3010-5.
118. Drozdov, M.A., A.A. Patrin, and V.T. Tkachev, *On the nature of the dislocation luminescence in silicon*. Physica Status Solidi B, 1977. **83**: p. K137-9.
119. Uebbing, R.H., et al., *Luminescence in slipped and dislocation-free laser-annealed silicon*. Applied Physics Letters, 1980. **37**(12): p. 1078-9.
120. Gwinner, D. and R. Labusch, *Photoluminescence in plastically twisted silicon*. Physica Status Solidi A, 1981. **65**: p. K99-101.
121. Suezawa, M. and K. Sumino, *The nature of photoluminescence from plastically deformed silicon*. Physica Status Solidi A, 1983. **78**: p. 639-45.
122. Lightowers, E.C. and V. Higgs, *Luminescence associated with the presence of dislocations in silicon*. Physica Status Solidi A, 1993. **138**: p. 665-72.
123. Drozdov, M.A., A.A. Patrin, and V.T. Tkachev, *Modification of the dislocation luminescence spectrum by oxygen atmospheres in silicon*. Physica Status Solidi A, 1981. **64**: p. K63-5.
124. Osip'yan, Y.A., et al., *Interaction of dislocations with hydrogen and oxygen in silicon*. Soviet Physics, 1982. **55**(2): p. 294-7.
125. Higgs, V. and M. Kittler, *The influence of hydrogen, oxygen and transition metal contamination on the optical and electrical activity of dislocations in bulk Si and SiGe*. Inst. Phys. Conf. Ser., 1995. **146**: p. 723-8.
126. Koshka, Y., et al., *Scanning room-temperature photoluminescence in polycrystalline silicon*. Applied Physics Letters, 1999. **74**(11): p. 1555-7.
127. Gwinner, D., *Hydrogenation effects on radiative recombination in twisted silicon*. Journal de Physique, 1983. **9**(44): p. C4-141-7.
128. Kenyon, A.J., et al., *The origin of the 0.78 eV luminescence band in dislocated silicon*. Journal of Physics: Condensed Matter, 2003. **15**: p. S2843-50.
129. Steinman, E.A., *Oxygen-induced modification of dislocation luminescence centers in silicon*. Physics of the Solid State, 2005. **47**(1): p. 5-8.
130. Steinman, E.A., *Influence of oxygen on the dislocation related luminescence centers in silicon*. phys. stat. sol., 2005. **2**(6): p. 1837-41.
131. Tarasov, I., et al., *Spatially resolved defect diagnostics in multicrystalline silicon for solar cells*. Materials Science and Engineering B, 2000. **71**: p. 51-5.

-
132. Ostapenko, S., et al., *Defect monitoring using scanning photoluminescence spectroscopy in multicrystalline silicon wafers*. Semiconductor Science and Technology, 2000. **15**(8): p. 840-8.
 133. Kittler, M., et al., *Room-temperature luminescence and electron-beam-induced current (EBIC) recombination behaviour of crystal defects in multicrystalline silicon*. Solar Energy Materials and Solar Cells, 2002. **72**(1-4): p. 465-72.
 134. Dreckschmidt, F., et al. *Electroluminescence investigation of the decoration of extended defects in multicrystalline silicon*. in *Proceedings of the 22nd European Photovoltaic Solar Energy Conference*. 2007. Milan, Italy.
 135. Suezawa, M., Y. Sasaki, and K. Sumino, *Dependence of photoluminescence on temperature in dislocated silicon crystals*. Physica Status Solidi A, 1983. **79**: p. 173-81.
 136. Ashkinadze, B.M., et al., Soviet Physics, 1969. **10**: p. 2921.
 137. Arguirov, T., personal communication
 138. Pankove, J.I., *Optical processes in semiconductors*. 1971, New Jersey: Dover Publications.
 139. Lautenschlager, P., P.B. Allen, and M. Cardona, *Temperature dependence of band gaps in Si and Ge*. Physical Review B, 1985. **31**(4): p. 2163-71.
 140. Mchedlidze, T., et al., *Influence of electric field on spectral positions of dislocation-related luminescence peaks in silicon: Stark effect*. Applied Physics Letters, 2007. **91**: p. 201113-1-3.
 141. Miller, D.A.B., et al., *Electric field dependence of optical absorption near the band gap of quantum-well structures*. Physical Review B, 1985. **32**(2): p. 1043-60.
 142. Kveder, V.V., et al., *Dislocation-related electroluminescence at room temperature in plastically deformed silicon*. Physical Review B, 1995. **51**(16): p. 10520-6.
 143. Humphreys, F.J., *Review: Grain and subgrain characterisation by electron backscatter diffraction*. Journal of Materials Science, 2001. **36**: p. 3833-54.

Publikationen

Veröffentlichungen in wissenschaftlichen Journalen

- **M. C. Schubert, J. Isenberg, W. Warta**

Spatially resolved lifetime imaging of silicon wafers by measurement of infrared emission

J. Appl. Phys. 94, 4139-4143 (2003)

- **M. C. Schubert, J. Isenberg, S. Riepe, W. Warta**

Thermographic imaging of free carrier density in silicon for solar cells

Journal of Quantitative Infra Red Thermography 1, 89-98 (2004)

- **M. C. Schubert, S. Riepe, S. Bermejo, W. Warta**

Determination of spatially resolved trapping parameters in silicon with injection dependent carrier density imaging

J. Appl. Phys. 99, 114908 (2006)

- **M. Kasemann, M. C. Schubert, M. The, M. Kober, M. Hermle, W. Warta**

Comparison of luminescence imaging and illuminated lock-in thermography on silicon solar cells

Appl. Phys. Lett. 89, 224102 (2006)

-
- **T. Trupke, R. A. Bardos, M. C. Schubert, W. Warta**
Photoluminescence imaging of silicon wafers
Appl. Phys. Lett. 89, 044107 (2006)

 - **R. A. Bardos, T. Trupke, M. C. Schubert, T. Roth**
Trapping artifacts in quasi-steady-state photoluminescence and photoconductance lifetime measurements on silicon wafers
Appl. Phys. Lett. 88, 053504 (2006)

 - **M. C. Schubert and W. Warta**
Prediction of diffusion length in multicrystalline silicon solar cells from trapping images on starting material
Prog. Photovolt. 15, 331-336 (2007)

 - **M. C. Schubert, S. Pingel, M. The, W. Warta**
Quantitative carrier lifetime images optically measured on rough silicon wafers
J. Appl. Phys. 101, 124907 (2007)

Veröffentlichungen bei internationalen Konferenzen

- **M. C. Schubert, J. Isenberg, M. Rinio, and W. Warta**

Temperature dependent carrier lifetime images

Proceedings of the 19th European Photovoltaic Solar Energy Conference, Paris, France, 500-503 (2004)

- **J. Isenberg, S. Riepe, M. C. Schubert, S. W. Glunz, W. Warta**

Spatially resolved IR-measurement techniques for solar cells

Proceedings of the 19th European Photovoltaic Solar Energy Conference, Paris, France, 403-407 (2004)

- **W. Warta, M. C. Schubert, J. Isenberg, S. Bermejo, S. Riepe, S. Diez**

Recent developments in carrier lifetime imaging

15th Workshop on Crystalline Silicon Solar Cells and Modules: Materials and Processes, Vail, USA, 142-149 (2005)

- **M. C. Schubert, J. Isenberg, S. Rein, S. Bermejo, S. W. Glunz, W. Warta**

Injection dependent carrier density imaging measurements including corrections for trapping effects

Proceedings of the 20th European Photovoltaic Solar Energy Conference, Barcelona, Spain, 1202-1205 (2005)

- **J. Isenberg, M. C. Schubert, D. Biro, A. Froitzheim, W. Warta**

Sheet Resistance Imaging (SRI) – a contactless and spatially resolved method for the determination of doping inhomogeneities

Proceedings of the 20th European Photovoltaic Solar Energy Conference, Barcelona, Spain, 674-677 (2005)

-
- **M. C. Schubert, S. Riepe, W. Warta**

Spatially resolved trapping detection and correlation with material quality in multicrystalline silicon

Proceedings of the 21st European Photovoltaic Solar Energy Conference, Dresden, Germany, 629-633 (2006)

- **T. Trupke, R. A. Bardos, M. D. Abbott, P. Würfel, E. Pink, Y. Augarten, F. W. Chen, K. Fisher, J. E. Cotter, M. Kasemann, M. Rüdiger, S. Kontermann, M. C. Schubert, M. The, S. W. Glunz, W. Warta, D. Macdonald, J. Tan, A. Cuevas, J. Bauer, R. Gupta, O. Breitenstein, T. Buonassisi, G. Tarnowski, A. Lorenz, H.P. Hartmann, D. H. Neuhaus, J. M. Fernandez**

Progress with luminescence imaging for the characterisation of silicon wafers and solar cells

Proceedings of the 22nd European Photovoltaic Solar Energy Conference, Milan, Italy, 22-31 (2007)

- **M. C. Schubert, M. The, P. Gundel, M. Kasemann, S. Pingel, W. Warta**

Advances in infrared imaging methods for silicon material characterization

Proceedings of the 22nd European Photovoltaic Solar Energy Conference, Milan, Italy, 32-37 (2007)

- **M. The, M. C. Schubert, W. Warta**

Quantitative lifetime measurements with photoluminescence imaging

Proceedings of the 22nd European Photovoltaic Solar Energy Conference, Milan, Italy, 354-359 (2007)

- **N. Mingirulli, A. Grohe, A. Dohrn, M. Hofmann, M. C. Schubert, T. Roth, D. Biro, R. Preu**

Lifetime studies on laser drilled vias for application in Emitter-Wrap-Through-solar cells

Proceedings of the 22nd European Photovoltaic Solar Energy Conference, Milan, Italy, 1415-1418 (2007)

- **M. Drießen, N. Mingirulli, S. Pingel, M. C. Schubert, D. Biro, R. Preu**
Investigations of diffusion barriers for application in back-contacted solar cells
Proceedings of the 22nd European Photovoltaic Solar Energy Conference, Milan, Italy,
1543-1546 (2007)
- **P. Gundel, M. C. Schubert, W. Warta**
Systematic analysis of trapping as a tool to predict diffusion length in multicrystalline silicon cells
Proceedings of the 22nd European Photovoltaic Solar Energy Conference, Milan, Italy,
1608-1612 (2007)
- **M. Kasemann, M. C. Schubert, S. Kontermann, W. Kwapil, S. Rein, W. Warta, S. W. Glunz, T. Trupke, Y. Augarten, E. Pink, O. Breitenstein, B. Michl, H. Nagel, A. Schütt, J. Carstensen, H. Föll**
Spatially Resolved Silicon Solar Cell Characterization using Infrared Imaging Methods
33rd IEEE Photovoltaics Specialists Conference, San Diego, USA, accepted.
- **M. C. Schubert, M. Romero, S. Ostapenko, P. Gundel, W. Warta**
Spatially resolved luminescence spectroscopy on multicrystalline silicon
23rd European Photovoltaic Solar Energy Conference, Valencia, Spain, submitted.
- **P. Gundel, M. C. Schubert, M. Allardt, W. Warta**
Analysis of the physical origin of trap centres and their effect on solar cells
23rd European Photovoltaic Solar Energy Conference, Valencia, Spain, submitted.
- **J. Giesecke, M. Kasemann, M. C. Schubert, B. Michl, M. The, W. Warta, P. Würfel**
Determination of Minority Carrier Diffusion Lengths in Silicon Solar Cells from Photoluminescence Images
23rd European Photovoltaic Solar Energy Conference, Valencia, Spain, submitted.

-
- **M. Kasemann, M. C. Schubert, W. Kwapil, M. The, B. Walter, J. Giesecke, S. Kontermann, W. Warta, S. W. Glunz, B. Michl, H. Nagel, P. Würfel, Y. Augarten, H. Kampwerth, E. Pink, R. Bardos, T. Trupke, J.-M. Wagner, J. Bauer, A. Lotnyk, H. Blumtritt, O. Breitenstein, , A. Schütt, J. Carstensen, H. Föll**

Progress in Silicon Solar Cell Characterization with Infrared Imaging Methods

23rd European Photovoltaic Solar Energy Conference, Valencia, Spain, submitted.

- **M. C. Schubert, M. Romero, S. Ostapenko, P. Gundel, S.W. Glunz, W. Warta**

Photo- and cathodoluminescence characterisation of multicrystalline silicon for solar cells

IUMRS International Conference on Electronic Materials 2008, Sydney, submitted.

Danksagung

Ich möchte mich sehr herzlich bei den Menschen bedanken, die mir bei der Entstehung dieser Arbeit geholfen haben. Mein besonderer Dank gilt

Herrn **Prof. Dr. Gerhard Willeke** für die Vergabe und Betreuung dieser Arbeit,

Herrn **Prof. Dr. Leiderer** für die Übernahme des Zweitreferats,

Herrn **Dr. Wilhelm Warta** für die hervorragende Motivierung, Unterstützung und Betreuung meiner Arbeit, außerdem für viele konstruktive Diskussionen,

Herrn **Dr. Stefan Glunz** für eine ebenso gute Motivierung,

Herrn **Prof. Dr. Eicke Weber** für die Unterstützung im Bereich der Defektcharakterisierung,

den Herren **Sebastian Pingel**, **Manuel The** und **Paul Gundel** für eine sehr gute und freundschaftliche Zusammenarbeit im Rahmen ihrer Diplomarbeiten, für die angenehme Atmosphäre im Labor und für Freizeitliche und sportliche Aktivitäten außerhalb des Instituts,

Herrn **Martin Kasemann** für viele fruchtbare Diskussionen rund um Lumineszenz und Thermographie und für die gute Zusammenarbeit,

Herrn **Martin Hermle** für viele Diskussionen über Halbleiter und Ladungsträger im Allgemeinen und Besonderen,

Frau **Dr. Sandra Bermejo** für die gute Zusammenarbeit während ihrer Zeit am ISE,

Herrn **Dr. Manuel Romero** für die Hilfsbereitschaft und exzellente Zusammenarbeit bei meinem Aufenthalt am National Renewable Energy Laboratory in Golden, Colorado,

Herrn **Prof. Dr. Sergei Ostapenko** für eine ebenso exzellente Zusammenarbeit und Aufnahme in seiner Arbeitsgruppe an der University of South Florida in Tampa,

Herrn **Prof. Dr. Tonio Buonassisi** für die außergewöhnliche Hilfsbereitschaft und interessanten Diskussionen, für die Bereitstellung von Proben sowie für die intensive Zeit an der Advanced Photon Source am Argonne National Laboratory, Illinois,

Herrn **Matthew Pickett** ebenfalls für die Zeit am Synchrotron,

Herrn **Prof. Dr. George Rozgonyi** für die Möglichkeit, die North Carolina State University in Raleigh zu besuchen, für die freundliche Aufnahme, Unterkunft und interessanten Diskussionen in seiner Gruppe,

Herrn **Prof. Dr. Peter Würfel** für interessante Diskussionen über Photolumineszenz und die Zusammenarbeit,

Herrn **Dr. Tzanimir Arguirov** und Herrn **Prof. Dr. Martin Kittler** für die Diskussionsbereitschaft und hilfreichen Hinweise zur Defektlumineszenz,

Herrn **Prof. Dr. Thorsten Trupke** für interessante Diskussionen.

Außerdem zu Dank verpflichtet bin ich

Stephan Riepe, Dr. Stefan Rein, Dr. Jörg Isenberg, Holger Habenicht, Dr. Oliver Schultz, Dr. Daniel Kray, Gerald Siefer, Jochen Hohl-Ebinger, Christian Schmiga, Elisabeth Schäffer, Toni Leimenstoll, Harald Lautenschlager, Mira Kwiatkowska, Friedemann Heinz, Johannes Eckert, Johannes Giesecke, Daniela Grote, Mariana Köber und außerdem allen anderen Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern der Abteilungen SEC, MST und PTQ für die gute Zusammenarbeit und die angenehme Atmosphäre am ISE. Schließlich möchte ich mich bei **Eva Schubert, Barbara Schubert** und **Annette Gundel** für die aufmerksame Durchsicht des Manuskripts bedanken.