



HOKKAIDO UNIVERSITY

Title	粒界面近傍における少数キャリアの拡散長と寿命の研究
Author(s)	小林, 広武; Kobayashi, Hiromu; 小川, 吉彦 他
Citation	北海道大學工學部研究報告, 99, 23-33
Issue Date	1980-08-11
Doc URL	https://hdl.handle.net/2115/41624
Type	departmental bulletin paper
File Information	99_23-34.pdf



粒界面近傍における少数キャリアの 拡散長と寿命の研究

小林広武* 小川吉彦* 黒部貞一*

(昭和55年3月31日受理)

Investigation of Minority Carrier Diffusion Length and Life Time in the Neighborhood of Grain Boundary

Hiromu KOBAYASHI Yoshihiko OGAWA Teiichi KUROBE

(Received March 31, 1980)

Abstract

A low-cost silicon sheet for terrestrial solar arrays is likely to contain structural defects such as twins and grain boundaries. These imperfections, acting as recombination centers, reduce the minority-carrier diffusion length and life time, thereby affecting the solar-cell efficiency.

Then we calculated the diffusion length and life time in the neighborhood of grain boundaries by solving the continuity equation for the minority-carrier and investigated the effect of boundaries.

The diffusion length within $1.0 L_B$ to $1.5 L_B$ (L_B ; bulk diffusion length) of the boundary is affected, and this result approximately agrees with the experimental values. On the other hand, the life time tends to decrease almost linearly, as the distance between the two grain boundaries becomes smaller $2 L_B$.

1. ま え が き

EFG (edge-defined film-fed growth) 法等で製作した、低コスト用シリコンリボン太陽電池は、粒界面、ツインの構造欠陥が含まれ、これらは、少数キャリアの拡散長、および実効寿命を減少せしめるため、変換効率低下の直接の原因となっている。

この中で、粒界面については、その近傍における少数キャリアの拡散長の実測値が報告¹⁾されているが、具体的な理論的解明は為されていない。

そこで本研究においては、粒界面近傍における少数キャリアの連続の式を解くことにより、その拡散長を導出し、実測値の理論的裏付けを試みるとともに、あわせて、近傍における実効寿命も導出し、粒界面が両者に及ぼす影響を検討してみた。

* 電子工学科 電子回路工学講座

2. 拡散長の計算

2.1 概 説

ここでは、図-1に示す様、熱平衡時における n 形半導体において、粒界面に垂直な一方の端から、一様な過剰少数キャリア ΔP_0 を注入するという条件の下で、連続の式を解き、拡散長を求めてみた。 $(\Delta P_0$ は低注入)

2.2 粒界面近傍におけるエネルギー状態

図-2は、 n 形半導体の粒界面近傍における電子エネルギー帯図である。界面単位には、 E_f すなわち、フェルミレベルより上の準位において、空になっているドナ形正電荷で満たされており、 E_f より下の準位には、電子で満たされた、アクセプタ形負電荷が存在している。 $q\phi_0$ は中間準位で、これより上の準位に存在する正電荷と、下に存在する負電荷は、打ち消し合っているものとする。したがって、 E_f が $q\phi_0$ より上の準位である場合、 $E_f - q\phi_0$ に存在する負電荷の量だけ、粒界面全体は負に帯電していることになる。ここで、電子エネルギー E に対し、ギャップ内で一様に分布している界面単位密度 N_{is} ($\text{cm}^{-2} \cdot \text{eV}^{-1}$) を考えると、負電荷の量は、単位面積単位準位あたり $qN_{is}(E_f - q\phi_0)$ となる。

さらに、半導体全体としては、電気的に中性性を保たなければならないため、粒界面近傍においては、図-2に示す様に、エネルギー帯図は持ち上がり、界面に存在する負電荷は、空乏層内の正電荷密度 N_D と打ち消し合っている。ここで、空乏層幅 W は、放物線近似より、

$$W = \sqrt{\frac{2\epsilon_s V_d}{qN_D}} \quad (1)$$

となる。ただし、 ϵ_s は誘電率、 V_d は拡散電位。

2.3 粒界面における再結合電流

粒界面における、単一準位再結合中心を通しての正味の再結合割合 U ($\text{cm}^{-2} \cdot \text{sec}^{-1}$) は、Shockley-Read の式より

$$U = \frac{\sigma v_{th} N_{is} (Pn - n_i^2)}{P + n + 2n_i \cosh\left(\frac{E_t - E_i}{kT}\right)} \quad (2)$$

ここで、 σ : 捕獲断面積、 v_{th} : キャリアの熱速度、 E_t : 真性フェルミ準位、 n_i : 真性キャリア密度である。

今、 P_0 , n_0 を熱平衡時におけるキャリア密度、 ΔP , Δn を過剰キャリア密度とし、 $n_0 \gg P_0$, $P_0 \gg \Delta P$, Δn が成立し、且つ、(2)式の分母の最後の項が無視できるものとする、(2)式は簡略化され、

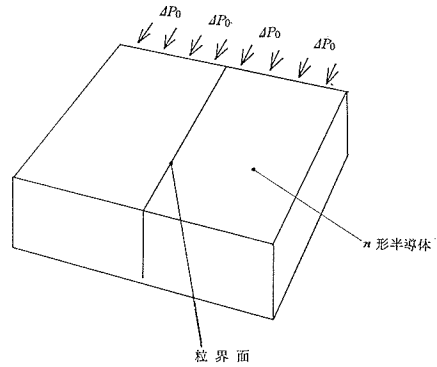


図-1 少数キャリア注入のモデル

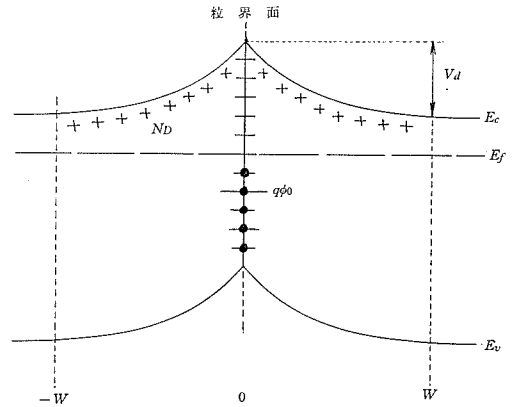


図-2 粒界面近傍におけるエネルギー帯図 (熱平衡)

$$U \cong \sigma v_{th} N_{is} \Delta P(x, 0) \quad (3)$$

となる。したがって、界面単位における片側全再結合電流 J_r ($A \cdot cm^{-2}$) は、熱平衡時で、

$$J_r = \frac{1}{2} \int_{\phi_0}^{\frac{E_f}{q}} q \sigma v_{th} N_{is} \Delta P(x, 0) dE = \frac{1}{2} q \sigma v_{th} N_{is} \Delta P(x, 0) \left(\frac{E_f}{q} - \phi_0 \right) = q s_p \Delta P(x, 0) \quad (4)$$

となる。ただし、 s_p は再結合速度。

2.4 基本方程式および境界条件

次に方程式を立てる。ここでは $x=0$ において、一様に過剰キャリア ΔP_0 の注入があるとし、粒界面は $y=0$ 、すなわち x 軸上に存在すると仮定する。さらに、正孔電流密度 $J_p = \mathbf{i} J_{px} + \mathbf{j} J_{py}$ としている。

(1) 電流連続の式、

$$\frac{\partial J_{px}}{\partial x} + \frac{\partial J_{py}}{\partial y} = - \frac{q \Delta P(x, y)}{\tau_p} \quad (y \neq 0) \quad (5)$$

τ_p : バルク内における正孔寿命

(2) 電流の式、

$$J_{px} = -q D_p \frac{\partial \Delta P(x, y)}{\partial x} \quad (6)$$

$$J_{py} = -q D_p \frac{\partial \Delta P(x, y)}{\partial y} + q \mu_p \Delta P(x, y) F_y \quad (7)$$

ただし、 $|y| \geq W$ において $F_y = 0$ 。 D_p : 正孔拡散定数、 μ_p : 正孔移動度、

(3) ポアソンの式

$$\frac{\partial F_y}{\partial y} = \frac{q N_D}{\epsilon_s} \quad (8)$$

(8) 式と $y=W$ で、 $F_y=0$ より、

$$F_y = \frac{q N_D}{\epsilon_s} (y - W) \quad (9)$$

以上、(5), (6), (7), (9) 各式より、 $|y| \leq W$ において、

$$\frac{\partial^2 \Delta P}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Delta P}{\partial y^2} - \frac{\beta q N_D}{\epsilon_s} (y - W) \frac{\partial \Delta P}{\partial y} - \left(\frac{1}{L_B^2} + \frac{\beta q N_D}{\epsilon_s} \right) \Delta P = 0 \quad (10)$$

$|y| > W$ において、

$$\frac{\partial^2 \Delta P}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Delta P}{\partial y^2} - \frac{1}{L_B^2} \Delta P = 0 \quad (11)$$

が成立する。ただし、 $\beta = q/(kT)$ 、 L_B はバルク内における拡散長 ($=\sqrt{D_p \tau_p}$)。次に境界条件を与える。

○ $x=0$ において、一様に ΔP_0 が注入することより、

$$\Delta P(0, y) = \Delta P_0 \quad (12)$$

○ $x \rightarrow \infty$ において、 ΔP はすべて再結合するものと考え、

$$\Delta P(\infty, y) = 0 \quad (13)$$

○ $y=0$ において、粒界面に流れ込む電流は、粒界面における再結合電流 (式(4)) に等しいと考えると、

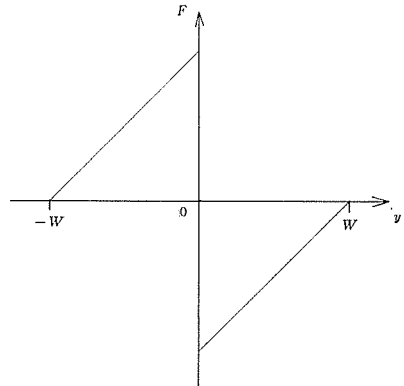


図-3 距離 (y) と電界 (F) の関係 1

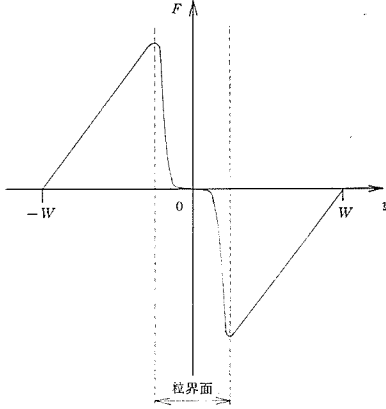
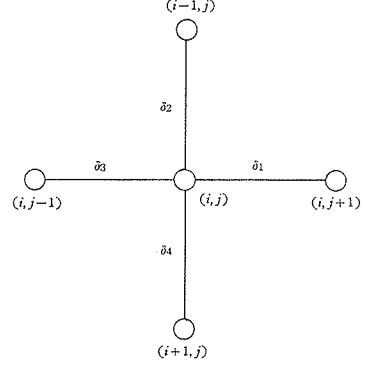
図-4 距離 (y) と電界 (F) の関係 2

図-5 網目法による格子点と格子幅

$$qD_P \frac{\partial \Delta P}{\partial y} \Big|_{y=0} = qS_p \Delta P(x, 0) \quad (14)$$

○ $y \rightarrow \infty$ において、粒界面の影響は、全く受けないものとし、

$$\Delta P(x, \infty) = \Delta P_0 \exp(-x/L_B) \quad (15)$$

以上となる。ここで注意すべきことは、式(14)において、粒界面には電界が存在しないと仮定している。

この理由は、理論上では、電界は界面 ($y=0$) において不連続となり定義されない(図-3 参照)。しかし、現実には、計算上、無視できる程度の幅を粒界面は持っており、したがって、電界は図-4 の様に考えられる為である。

2.5 方程式の解法

二次元の偏微分方程式(10)、(11)を、境界条件(12)~(15)式の下で解くにあたっては、網目法を用いた。すなわち、定義されうる二次元空間を、 x, y 方向、それぞれ適当な間隔で格子に区切ると、以下に示す様に、任意の格子点 (i, j) における各微係数は、図-5 で示す周囲 4 点の各値と各格子幅を用い、差分式に近似できる。

$$\frac{\partial^2 \Delta P}{\partial x^2} \Big|_{(i, j)} = 2 \times \left\{ \frac{\Delta P(i, j+1)}{\delta_1(\delta_1 + \delta_3)} + \frac{\Delta P(i, j-1)}{\delta_3(\delta_1 + \delta_3)} - \frac{\Delta P(i, j)}{\delta_1 \delta_3} \right\} \quad (16)$$

$$\frac{\partial^2 \Delta P}{\partial y^2} \Big|_{(i, j)} = 2 \times \left\{ \frac{\Delta P(i+1, j)}{\delta_4(\delta_2 + \delta_4)} + \frac{\Delta P(i-1, j)}{\delta_2(\delta_2 + \delta_4)} - \frac{\Delta P(i, j)}{\delta_2 \delta_4} \right\} \quad (17)$$

$$\frac{\partial \Delta P}{\partial x} \Big|_{(i, j)} = \frac{\Delta P(i, j) - \Delta P(i-1, j)}{\delta_1 + \delta_3} \quad (18)$$

$$\frac{\partial \Delta P}{\partial y} \Big|_{(i, j)} = \frac{\Delta P(i+1, j) - \Delta P(i-1, j)}{\delta_2 + \delta_4} \quad (19)$$

式(16)~(19)を、それぞれ、式(10)、(11)および境界条件、式(14)に代入し、さらに、式の無次元化 ($\Delta P_0, L_B$ で規格化) を行なう。 $\Delta \bar{P} = \Delta P / \Delta P_0$, $\bar{x} = x / L_B$, $\bar{y} = y / L_B$, $\bar{W} = W / L_B$ とし、式(10)より、

$$\begin{aligned} & \frac{2}{\delta_4(\delta_2 + \delta_4)} \Delta \bar{P}(i+1, j) + \frac{2}{\delta_2(\delta_2 + \delta_4)} \Delta \bar{P}(i-1, j) \\ & + \left\{ \frac{2}{\delta_1(\delta_1 + \delta_3)} - \frac{\bar{y} - \bar{W}}{L_D^2(\delta_1 + \delta_3)} \right\} \Delta \bar{P}(i, j+1) + \left\{ \frac{2}{\delta_3(\delta_1 + \delta_3)} + \frac{\bar{y} - \bar{W}}{L_D^2(\delta_1 + \delta_3)} \right\} \Delta \bar{P}(i, j-1) \end{aligned}$$

$$+ \left\{ 1 + \frac{1}{L_D^2} + \frac{2}{\delta_1 \delta_3} + \frac{2}{\delta_2 \delta_4} \right\} \Delta \bar{P}(i, j) = 0 \quad (|\bar{y}| \leq \bar{W}) \quad (20)$$

式(11)より

$$\begin{aligned} & \frac{2}{\delta_4(\delta_2 + \delta_4)} \Delta \bar{P}(i+1, j) + \frac{2}{\delta_2(\delta_2 + \delta_4)} \Delta \bar{P}(i-1, j) + \frac{2}{\delta_1(\delta_1 + \delta_3)} \Delta \bar{P}(i, j+1) \\ & + \frac{2}{\delta_3(\delta_1 + \delta_3)} \Delta \bar{P}(i, j-1) - \left\{ 1 + \frac{2}{\delta_1 \delta_3} + \frac{2}{\delta_2 \delta_4} \right\} \Delta \bar{P}(i, j) = 0 \quad (|\bar{y}| > \bar{W}) \quad (21) \end{aligned}$$

式(12)より,

$$\Delta \bar{P}(0, \bar{y}) = 1 \quad (22)$$

式(13)より,

$$\Delta \bar{P}(3.0, \bar{y}) = 0 \quad (23)$$

式(14)より,

$$\left(1 + \frac{s_p \cdot L_B \cdot \delta_1}{D_p} \right) \Delta \bar{P}(i, 1) - \Delta \bar{P}(i, 2) = 0 \quad (24)$$

式(15)より,

$$\Delta \bar{P}(\bar{x}, 3.0) = e \times p(-\bar{x}) \quad (25)$$

ただし, x, y 方向共に, ∞ を $3L_B$ で置換している。(この根拠は, y 方向においては, 報告されている実測値から推定。 x 方向は, 式(15)より, $\Delta P(3L_B, \infty)/\Delta P_0 \doteq 0.05 \doteq 0$ と見なせることより。)

したがって, 仮に, 格子点数 n 個とすると, 問題は n 元連立一次方程式を解くことに帰着される。

以下, 設定した格子幅, および格子数を示す。

表-1

区間 ($\times 10^{-5}$ m)	格子間隔 ($\times 10^{-5}$ m)	格子数 (κ)	区間 ($\times 10^{-5}$ m)	格子間隔 ($\times 10^{-5}$ m)	格子数 (κ)
0.0 ~ 0.025	1.25×10^{-3}	21	0.0 ~ 1.0	5.0×10^{-2}	21
0.025 ~ 0.05	6.25×10^{-3}	5	1.0 ~ 3.0	1.0×10^{-1}	20
0.05 ~ 1.0	5.0×10^{-2}	18			
1.0 ~ 3.0	1.0×10^{-1}	20			

(イ) x 方向における格子幅, 格子数

(ア) y 方向における格子幅, 格子数

(ここで, 誤差を最小に押えるため, ΔP の変化の激しいと予想される区間において, より細分化している。)

2.6 計算と結果

始めに, 仮定した各物性値を示す。(半導体は s_i を仮定)

N_D : 1.0×10^{16} (cm^{-3}), L_B : 1.0×10^{-3} (cm), $\varepsilon_s/\varepsilon_0$: 11.7, v_{th} : 1.17×10^7 ($\text{cm} \cdot \text{sec}^{-1}$), E_g : 1.1 (eV), N_{is} : 1.0×10^{13} ($\text{cm}^{-2} \cdot \text{eV}^{-1}$), s_p : 1.0×10^5 ($\text{cm} \cdot \text{sec}^{-1}$), V_d : 0.4784 (eV), W : 2.497×10^{-5} (cm)

計算は, S.O.R 法 (文献 (4), (5), 参照) を使用し, 最大残差が 10^{-6} 以下を満足するまで, 計算機により反復させた。

結果を図-6, 7, 8 に示す。

図-6 は, \bar{y} をパラメータとし, \bar{x} と $\Delta \bar{P}$ の関係を示したものである。

$\bar{y}=3.0$ における曲線は, $\Delta \bar{P} = \exp(\bar{x}^{-1})$ を示し, 粒界面の影響を受けないバルク内における

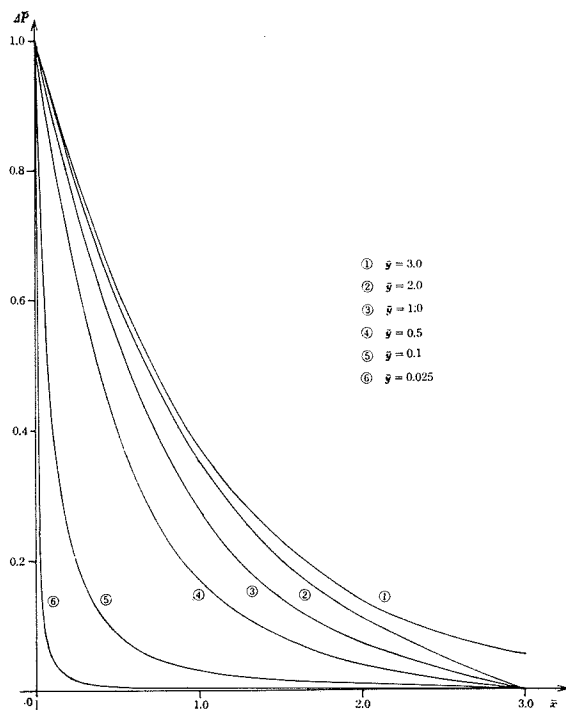


図-6 過剰少数キャリア分布図 (x 方向)

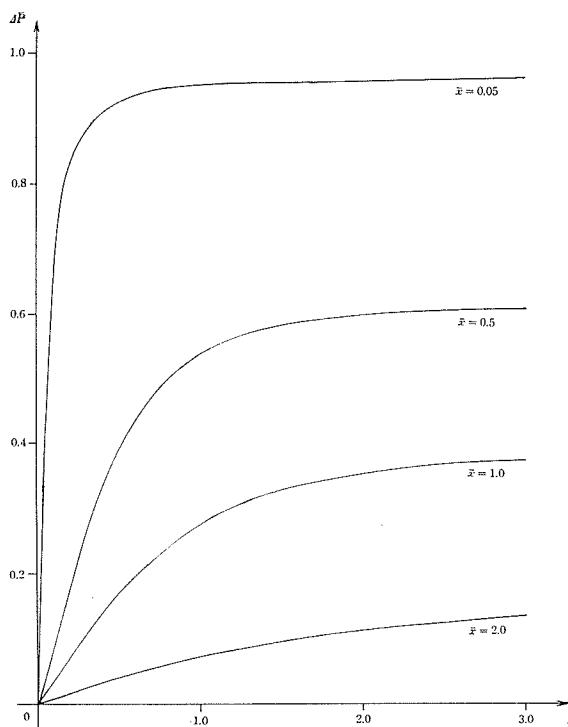


図-7 過剰少数キャリア分布図 (y 方向)

の方向への変化を表わすものである。これから粒界面に近づくに従い、 x 方向への ΔP の拡散は減少し、空乏層の端における $\bar{y}=0.025$ 付近では、注入されると同時に、そのほとんどが吸収されてしまう状況を表わしている。

図-7は、図-6とは逆に、 \bar{x} をパラメータとし、 \bar{y} と $\Delta \bar{P}$ の関係を示したものである。 ΔP が粒界面に吸収される様子を呈している。

図-8は、 ΔP の等値曲線図である。ここにおける $\Delta \bar{P}=0.367 \equiv \exp(-1)$ の曲線が、計算による少数キャリアの拡散長を示す。ここで、報告されている¹⁾同条件の下での実測値(Δ 印)と比較すると、測定誤差、計算誤差等を考え合わせ、両者は、かなり一致した傾向を示している。

したがって、当初の目的である実測した結果の理論的な証明が為されたと言えよう。

以上の結果から考察すると、粒界面が少数キャリアの拡散長に影響を及ぼす範囲は、ここで仮定した条件の下では、両側で $3L_D$ 前後であると言える。

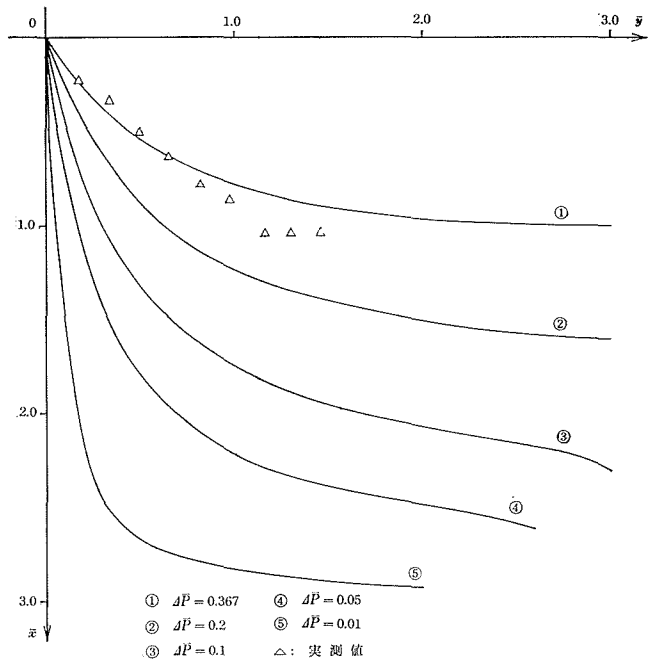


図-8 過剰少数キャリア等値曲線

3. 実効寿命の計算

3.1 概 説

この章では、2章で扱った半導体において、同一な粒界面(これも2章と同じもの)が2本平行に並んでいるものと仮定し、その内部における少数キャリアの実効寿命を求めるに当たっての原理、計算手順、結果、さらに、粒界面間の距離と実効寿命の関係等について報告する。

ここで計算の対象となるのは、光の照射時における粒界面間の少数キャリアの実効密度を初期値とし、照射を中止した時点から、それが $\exp(-1)$ に減少するまでに要する時間である。

3.2 照射時におけるエネルギー状態

図-9に光の照射時における粒界面近傍の電子エネルギー帯図を示す。ここでは、光子エネルギーの吸収により、過剰少数キャリアの発生が生じ、熱平衡状態は失われ、 E_f は擬フェルミレベル E_{fn} 、および E_{fp} に分れる。これらは場所によらず一定値とする。

界面単位では、 E_{fn} より上では、伝導帯への電子の放射が生じ易く、空の状態となってい

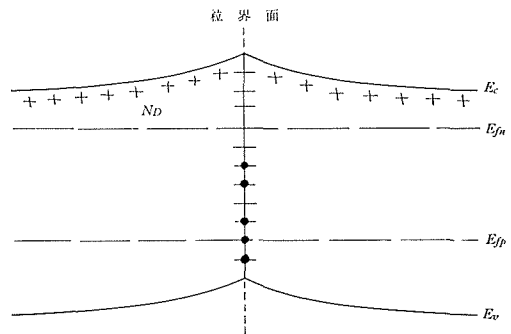


図-9 粒界面近傍におけるエネルギー帯図 (照射時)

る。一方、 E_{fp} より下の準位においては、正孔の価電子帯への放射が生じ易く、電子で満たされた状態となる。 E_{fn} と E_{fp} の間においては、再結合中心として働く。

さらに、拡散電位 V_d は、熱平衡時におけるものより減少する。この原因は、照射により、過剰キャリアが増加すると、粒界面付近においては、 $P(0) > n(0)$ なる現象が生じる。したがって、界面にトラップされ得る正孔は電子よりも大となり、全体的に粒界面における負電荷が減少するからである。ここで V_d は、 $P(0) = n(0)$ となるまで減少し、この時点で粒界面における再結合電流 J_r は最大となる。 J_r は Shockley-Read の式より近似的に、

$$J_r \simeq qN_{is}\sigma v_{th} \frac{P(0) \cdot n(0) - n_i^2}{P(0) + n(0)} (E_{fn} - E_{fp}) \quad (26)$$

で表わされる。

3.3 基本方程式

以下に示す各式は、照射中止時におけるものである。

(1) 電流連続の式

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = -\frac{1}{\tau_b} \frac{P(x, t) \cdot n(x, t) - n_i^2}{P(x, t) + n(x, t)} - \frac{1}{q} \frac{\partial J_p(x, t)}{\partial x} \quad (27)$$

$$\frac{\partial n(x, t)}{\partial t} = -\frac{1}{\tau_b} \frac{P(x, t) \cdot n(x, t) - n_i^2}{P(x, t) + n(x, t)} + \frac{1}{q} \frac{\partial J_n(x, t)}{\partial x} \quad (28)$$

ここで τ_b はバルク内における寿命。

(2) 電流の式

$$J_p(x, t) = q\mu_p P(x, t) F(x, t) - qD_p \frac{\partial P(x, t)}{\partial x} \quad (29)$$

$$J_n(x, t) = q\mu_n n(x, t) F(x, t) + qD_n \frac{\partial n(x, t)}{\partial x} \quad (30)$$

ここで、 F は電界を示す。

(3) ポアソンの式

$$\frac{\partial F(x, t)}{\partial x} = \frac{q}{\epsilon_s} \left\{ P(x, t) - n(x, t) + N_D - N_A + \sum_{i=1}^n N_{Ti}(x) \right\} \quad (31)$$

右辺最後の項は、粒界面等における電荷密度を示す。

3.4 式の変形

次に、上式より、直接的に時間と各点におけるキャリアの変化量を関係付ける式を導出する。式(27)~(31)を差分方程式に変形すると、

式(27)より

$$\frac{\partial P(N)}{\partial t} = -\frac{1}{\tau} \cdot \frac{P(N) \cdot n(N) - n_i^2}{P(N) + n(N)} - \frac{1}{q} \cdot \frac{J_p(M) - J_p(M-1)}{\Delta x} \quad (32)$$

式(28)より

$$\frac{\partial n(N)}{\partial t} = -\frac{1}{\tau} \cdot \frac{P(N) \cdot n(N) - n_i^2}{P(N) + n(N)} + \frac{1}{q} \cdot \frac{J_n(M) - J_n(M-1)}{\Delta x} \quad (33)$$

式(29)より

$$J_p(M) = F(M) \left[\frac{P(N) \cdot \mu_p}{1.0 - \exp\{-F(M) \cdot \Delta x\}} + \frac{P(N+1) \cdot \mu_p}{1.0 - \exp\{F(M) \cdot \Delta x\}} \right] \quad (34)$$

式(30)より

$$J_n(M) = F(M) \left[\frac{n(N+1) \mu_n}{1.0 - \exp\{-F(M) \Delta x\}} + \frac{n(N) \mu_n}{1.0 - \exp\{F(M) \Delta x\}} \right] \quad (35)$$

式(31)より

$$\frac{F(M) - F(M-1)}{\Delta x} = \frac{q}{\varepsilon_s} \left\{ P(N) - n(N) + N_D - N_A + \sum_{i=1}^n N_{Ti}(N) \right\} \quad (36)$$

ここで注意すべきことは、各式の意味を考えて、電界、電流における格子点 M は、電荷の格子点 N と $N+1$ の中間に存在するとしている。また、(34)、(35) 式の変形は、文献²⁾を参照。

以上の差分式より、式(32)、(33)の右辺は、各格子点における電荷密度 $P(i)$ ($i=1, 2, \dots, N+1$)、 $n(i)$ ($i=1, 2, \dots, N+1$) のみの関数となる。したがって、格子数 L とすると、各格子点における連続の式をまとめて、以下の様にベクトル表示できる。

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} P(1) \\ n(1) \\ \vdots \\ P(N) \\ n(N) \\ \vdots \\ P(L) \\ n(L) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_{P1} \{P(1), n(1), P(2)\} \\ f_{n1} \{P(1), n(1), n(2)\} \\ \vdots \\ f_{PN} \{P(1), n(1), \dots, P(N), n(N), P(N+1)\} \\ f_{nN} \{P(1), n(1), \dots, P(N), n(N), n(N+1)\} \\ \vdots \\ f_{PL} \{P(1), n(1), \dots, P(L), n(L), P(L+1)\} \\ f_{nL} \{P(1), n(1), \dots, P(L), n(L), n(L+1)\} \end{pmatrix} \quad (37)$$

ここで、 $\mathbf{Z} = (P(1), n(1), \dots, P(N), n(N), \dots, P(L+1), n(L+1))^t$ とおくと、式(37)は、

$$\frac{d}{dt} \mathbf{Z} = \mathbf{F}(\mathbf{Z}) \quad (38)$$

と書き表わせる。これより

$$\frac{\Delta \mathbf{Z}}{\Delta t} = \mathbf{F}(\mathbf{Z}_0 + \Delta \mathbf{Z}) \quad (39)$$

式(39)をテーラ展開し、2次以後を無視すると、

$$\frac{\Delta \mathbf{Z}}{\Delta t} \simeq \mathbf{F}(\mathbf{Z}_0) + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{Z}} \Delta \mathbf{Z} \quad (40)$$

これより、

$$\Delta \mathbf{Z} = \left(\frac{1}{\Delta t} \mathbf{U} - \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{Z}} \right)^{-1} \mathbf{F}(\mathbf{Z}_0) \quad (41)$$

が得られる。ただし \mathbf{U} は単位ベクトル。

式(41)により、 Δt 間における、各電荷の変化量 $\Delta \mathbf{Z}$ が導出される。

3.5 初期値および境界条件

式(41)を計算するに当たって、初期値 \mathbf{Z}_0 の値を求めなければならないが、各点における $n(N)$ 、 $P(N)$ の値は、

$$n(N) = N_c \exp \left[\frac{q \{E_{fn} - E_c(N)\}}{kT} \right] \quad (42)$$

$$P(N) = N_v \exp \left[\frac{q \{E_v(N) - E_{fp}\}}{kT} \right] \quad (43)$$

で与えられる。さらに、 $E_c(N) = 1.1 + E_v(N)$ より、結局は、照射時における各点の E_v 値を求める問題となる。これは、放物線近似より導出しても良いが、ここでは、より精度を高めるため、式(42)、式(43)を、ポアソンの式、

$$\frac{\partial^2 E_v(x)}{\partial x^2} = \frac{q}{\epsilon_s} \left\{ P(x) - n(x) + N_D \right\} \quad (44)$$

を差分に変形した式、

$$2 \times \left\{ \frac{E_v(N+1)}{\delta_1(\delta_1+\delta_2)} + \frac{E_v(N-1)}{\delta_2(\delta_1+\delta_2)} - \frac{E_v(N)}{\delta_1\delta_2} \right\} = \frac{q}{\epsilon_s} \left\{ P(N) - n(N) + N_D \right\} \quad (45)$$

(ただし、 δ_1, δ_2 は、 N と $N+1$ 、および N と $N-1$ 間の距離。)

に代入し、 $E_v(i)$ ($i=1, 2, \dots, N, \dots$) についての連立方程式を、境界条件の下で S.O.R 法^{4),5)} を使用して解くことにより導出した。

次に、各境界条件を示す。ただし、境界の一方は粒界面とし、他方は対称性から粒界面間の中間点とする。

- 1), 電位 (E_v); これは Z_0 (初期値) の導出のみに必要。したがって、照射時における粒界面、および中間点上の値 (容易に導出できる) を使用する。
- 2), 電界 (F); 電界は式 (36) より、どちらか一方を定めるとよい。ここでは中間点を用い、 $F(M) = -F(M+1)$ とおいた。
- 3), 電流 (J); 粒界面において、 J_p は式 (26) を使用。さらに $J_n = -J_p$ とする。中間点では、 $J_p(M) = -J_p(M+1)$ とおく。 J_n も同様。

3.6 計算と結果

計算は、 $\Delta t, Z_0$ を設定し、式 (41) より ΔZ を求める。さらに $Z_0 \leftarrow Z_0 + \Delta Z$ とおき、計算をくり返し、少数キャリアの実効密度が、初期値の $\exp(-1)$ 以下になった時点で打ち切る。ここで、全反復回数 n とすると、求める実効寿命 $\tau = n\Delta t$ となる。

次に、使用した各物性値、およびパラメータを示す。(2章と同一のものは略す)

$N_c: 2.8 \times 10^{19} \text{ (cm}^{-3}\text{)}, N_v: 1.0 \times 10^{19} \text{ (cm}^{-3}\text{)},$
 $\mu_n: 1.35 \times 10^3 \text{ (cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}\text{)}, \mu_p: 4.8 \times 10^2$

$\text{(cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}\text{)}, \tau_b: 8.059 \times 10^{-8} \text{ (sec)}, g: 1.0 \times 10^{20} \text{ (cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}\text{)}, E_{fn}: 0.4164 \text{ (eV)}, E_{fp}: -0.1157$
 $\text{(eV)}, \sigma: 3.437 \times 10^{-14} \text{ (cm}^2\text{)}, V_p: 0.0921 \text{ (eV)}, \Delta t: 2.5 \times 10^{-10} \text{ (sec)}$

ただし、 g は照射時におけるキャリア発生率。また、 Δt の値は、小さな程精度が上がるが、同時に計算の反復回数も多くなる。この点を考慮して、試行錯誤的に決定した。

表-2 に結果を示す。粒界面間の幅は、全部で7通り行った。

図-10 は、結果をグラフにしたものである。これより、粒界面間の幅が $2L_B$ (L_B はバルク内の拡散長、 $=1.0 \times 10^{-3} \text{ cm}$) 以下においては、実効寿命は、やや急激に、直線的に落ち込んでいるのが分かる。したがって、ここで仮定した条件の下では、粒界面間の少数キャリアの実効寿命は、その距離が、およそ $2L_B$ 以下において、影響を顕著に受け、さらに、距離に比例して減少すると言えよう。

また、この結果は、拡散長と寿命の関係式、 $L = \sqrt{D\tau}$ より、2章で求めた拡散長は、 $|y| \leq L_B$ なる範囲において、距離の平方根に比例して減少していることを示唆している。

表-2 結果

粒界面間の距離 $\times \frac{1}{2}$ (m)	実効寿命 (sec)
1.9×10^{-5}	5.725×10^{-8}
1.5×10^{-5}	5.375×10^{-8}
1.25×10^{-5}	5.05×10^{-8}
1.0×10^{-5}	4.35×10^{-8}
0.75×10^{-5}	3.85×10^{-8}
0.5×10^{-5}	3.125×10^{-8}
0.25×10^{-5}	2.475×10^{-8}

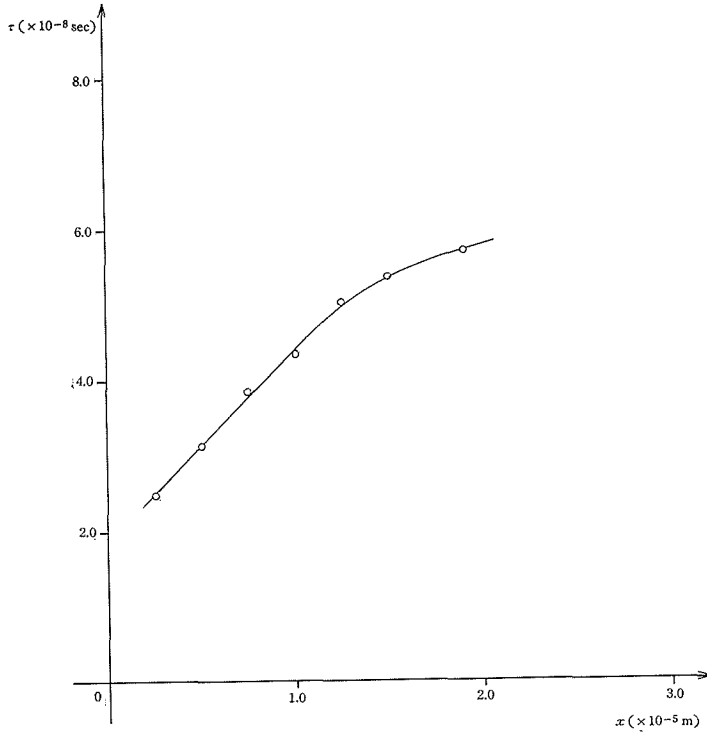


図-10 粒界面間の距離 $\times \frac{1}{2}$ と実効寿命の関係

4. むすび

以上、低コスト太陽電池の効率低下の原因となっている粒界面について、その近傍における、少数キャリアの拡散長、実効寿命の特性を理論的に解明したところ、拡散長においては、報告されている実測値とほぼ一致した結果が得られ、これの理論的裏付けが為し得た。実効寿命においても、その、およその傾向を把握することができた。しかし、刻み時間 dt の問題、逆行列の演算における計算誤差、さらには、比較の対象となる資料が見つからない等、実効寿命値そのものの信頼性という点で問題が残った。また、この計算は、界面密度、ドナ濃度等における一例にしかならず、さらに様々な条件下での結果を求め、比較検討する必要性もある。これらは、今後の課題となろう。

参考文献

- 1) T. Daud, K. M. Koliward and F. G. Allen: Appl. Phys. Lett., Vol. 33, No. 12., 15, December 1978, p. 1009.
- 2) C. W. Gwyn, D. L. Scharfetter and J. L. Wirth: IEEE Transactions on Nuclear Science, Vol. NS-14, No. 6, December 1967, p. 153.
- 3) H. C. Card and E. S. Yang: IEEE Transactions on Electron Devices, Vol. ED-24, No. 4, April 1977, p. 397.
- 4) 藤川洋一郎: 偏微分方程式の解法 (昭 48), p. 134, サイエンス社.
- 5) 佐藤常三: 微分・積分方程式の近似解法 (昭 47), p. 51, 総合図書.