



HOKKAIDO UNIVERSITY

Title	GD a-Si : Hの局位準位分布の計算に関する研究
Author(s)	野田, 孝明; Noda, Takaaki; 小川, 吉彦 他
Citation	北海道大學工學部研究報告, 105, 75-86
Issue Date	1981-07-31
Doc URL	https://hdl.handle.net/2115/41688
Type	departmental bulletin paper
File Information	105_75-86.pdf



GD a-Si:H の局位準位分布の計算に関する研究

野田孝明* 小川吉彦* 黒部貞一*

(昭和 56 年 3 月 31 日受理)

Study on the Calculation of the Localized State Distribution in GD a-Si:H

Takaaki NODA Yoshihiko OGAWA Teiichi KUROBE

(Received March 31, 1981)

Abstract

The reliability of the FE method and the CV method for determining the localized state distribution $N(E)$ in GD a-Si:H are evaluated by computer simulation. It is shown that calculation by the CV method is almost exact and the FE method is less reliable. But the FE method may be more reliable than the CV method regarding the accuracy of measured values. The new calculation method combining both methods and the iteration method are suggested for obtaining an almost true distribution $N(E)$. And the effect of surface states on calculation of $N(E)$ is evaluated; the allowable surface state density is shown to be below $10^{11}\text{cm}^{-2}\text{eV}^{-1}$. The effect of the Fermi-Dirac distribution function $F(E)$ at room temperature is estimated. The result indicates that correction by room temperature $F(E)$ is necessary.

1. はじめに

GD a-Si:H (グロー放電法アモルファスシリコン) は、シラン (SiH_4) の高周波 (*r. f.*) グロー放電により作成された a-Si 薄膜であり、放電中に発生した水素原子が Si のダングリングボンドと結合してそのエネルギーを下げ、結果的に禁止帯中の局在準位密度が小さくなっていると言われている。この様に GD a-Si:H は帯間の局在準位密度が小さいので、*pn* 制御が可能であり、薄膜太陽電池用材料として近年脚光を浴びている訳であるが、その局在準位密度を知る事は極めて重要である。

Spear 等¹⁾ は、FE 法 (電界効果法) を用いて GD a-Si:H の局在準位密度 $N(E)$ を初めて決定した。その後、広瀬等²⁾ は、CV 法 (容量法) によって $N(E)$ を決定し、同一素子について両法による結果の異なる事を指摘している。しかし、これらの方法の信頼性については従来議論されていない。本報告では、これら両法の信頼性を評価する事から始め、さらに信頼の出来る新しい計算法を提案する。この計算法は、FE 法と CV 法の計算法を組み合わせた方法と、更に繰り返し近似を行なう方法を含むものである。

* 電子工学科 電子回路工学講座

GD a-Si:H には $10^{13}\text{cm}^{-2}eV^{-1}$ 程度の表面準位密度が存在するという説⁵⁾もあるが、筆者等は帯間に様な密度で表面準位が存在する場合の $N(E)$ の計算に与える影響を調べるシミュレーションを行なった結果、この様な場合には、文献(3)で報告されている様な $N(E)$ は求まらない事が示されている。

上記の計算法では全て、フェルミ分布関数は絶対零度で近似して $N(E)$ を求めているが、実際の実験は室温附近で行なわれるであろうから、この近似による誤差を評価してみる必要がある。本報告では、これを行なうとともに、フェルミ分布関数を考慮して補正する為の計算法についても検討する。

2. FE 法と CV 法の評価

2.1 概 説

ここでは、図-4の点線で示されている局在準位密度分布を仮定し、これから理論的にIV(電流-電圧)特性とCV(容量-電圧)特性を求め、この両特性にFE法とCV法を各々適用して $N(E)$ を計算し、仮定した分布と比較することにより両法の信頼性を評価する。(尚、ここで仮定した $N(E)$ は、文献(3)の一結果に類似した分布である。)

2.2 IV 特性と CV 特性の計算

$N(E)$ よりIV, CV特性を求める計算式を導く為に、文献(2)と同様な図-1の様なモデルを用いる。(ここでは、フェルミ分布関数は絶対零度で近似し、また伝導帯の自由電子の影響も小さいとして無視している。)

ポアソンの方程式から

$$\frac{d^2u(x)}{dx^2} = -\frac{\rho(u_0+u(x))}{\epsilon_a} \quad (1)$$

$$\rho(u_0+u(x)) = -q \int_0^{u(x)} N(u_0+u) du \quad (2)$$

但し、 $u(x)$ はポテンシャル、 ρ は空間電荷密度、 ϵ_a は a-Si の誘電率、 u_0 は F. B. (flat band) 時のフェルミレベルである。(1)式より次式が導かれる。

$$\frac{du(x)}{dx} = -\sqrt{\frac{-2}{\epsilon_a} \int_0^{u(x)} \rho(u_0+u) du} \quad (3)$$

((3)式の両辺を x で微分すると(1)式が得られる。) (2)式と(3)式より、 $N(E)$ からポテンシャル $u(x)$ を求めることが出来る。F. B. 時の電流 I_0 で規格化した電流 I/I_0 は下式となる。

$$\frac{I}{I_0} = \frac{1}{d_a} \int_0^{d_a} \exp\left(\frac{qu(x)}{kT}\right) dx \quad (4)$$

但し、 d_a は a-Si 薄膜の膜厚、 k はボルツマン定数、 T は温度 (K) である。印加電圧 V は

$$V = u_s + \frac{Q_T}{C_i} = u_s + \frac{d_i}{\epsilon_i} Q_T \quad (5)$$

$$Q_T = Q_a + Q_s = \epsilon_a E_s + q D_{ss} u_s \quad (6)$$

但し、 u_s は表面電位、 d_i と ϵ_i は各々絶縁膜の膜厚と誘電率、 E_s は a-Si と絶縁膜の界面での電界、

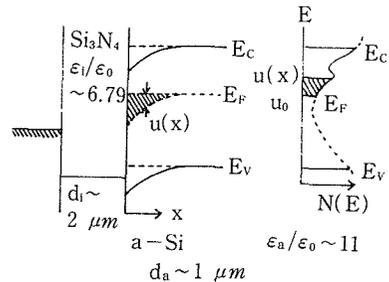


図-1 電極-絶縁膜-アモルファス半導帯構造のエネルギー帯モデル

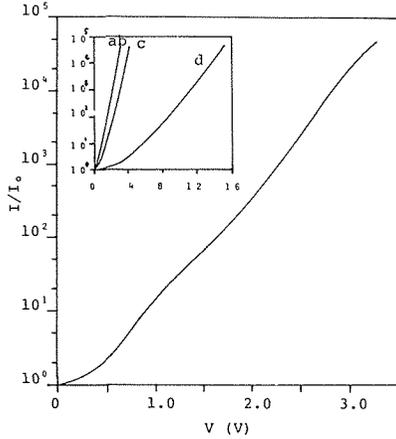


図- 2 IV 特性

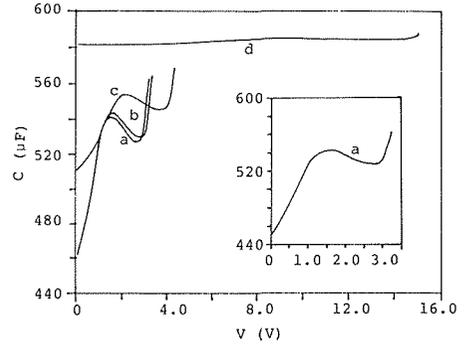


図- 3 CV 特性

Q_a は a-Si のバルク内の空間電荷量, Q_s は表面準位による電荷量である。また, (6) 式は, 帯間に一様に表面準位密度 $D_{ss} \text{Cm}^{-2} \text{eV}^{-1}$ が存在する場合の計算式である。結局 (2) - (11) 式により IV 特性が求まり, 図- 4 で仮定した $N(E)$ について計算した結果を図- 2 に示す。図中の (a) - (d) は各々, $D_{ss}=0, 10^{11}, 10^{12}, 10^{13} \text{cm}^{-2} \text{eV}^{-1}$ の場合に対応している。

次に CV 特性の計算であるが, 印加電圧は IV 特性の場合と同様に (5), (6) 式より求まる。容量 C は, (5) 式より

$$C = \frac{dQ_T}{dV} = C_i \left(1 - \frac{du_s}{dV}\right) \quad (7)$$

(5) - (7) 式により CV 特性を計算した結果が図- 3 である。図中の (a) - (d) は各々 $D_{ss}=0, 10^{11}, 10^{12}, 10^{13} \text{cm}^{-2} \text{eV}^{-1}$ に対応している。尚, 計算に用いた物理定数等は, 図- 1 に示した通り $\epsilon_i = 6.79\epsilon_0$, $\epsilon_a = 11\epsilon_0$, $d_i = 2\mu\text{m}$, $d_a = 1\mu\text{m}$ とした。注意することは, ポテンシャルを計算する時には, $\Delta u_i(x) = u_{i+1}(x) - u_i(x)$ として $\Delta u_i(x)$ についての式を (3) 式より導き段階的に解いた方が良いことと, 計算式は規格化しておかなければならないことである。

2. 3 FE 法の評価

FE 法は, Spear 等 Dundee グループによる, FE 測定(電界効果測定)からの IV 特性より, ポテンシャルを放物線近似することによって局在準位密度 $N(E)$ を決定する方法である。ここでは, FE 法全体を以下の二つの段階に分けて考えることにする。

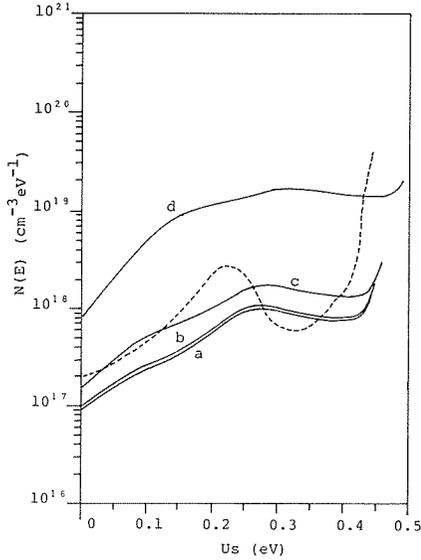
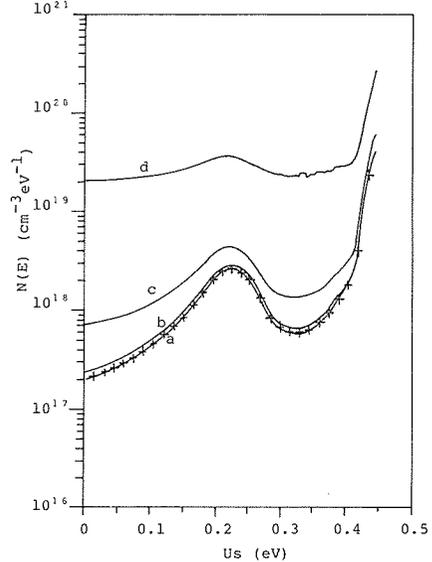
i) ポテンシャルの放物線近似により, IV 特性から表面電位 u_s を求める。(MKS系)

$$\frac{q\epsilon_i V d_a}{2\epsilon_a d_i k T} \left(\frac{I}{I_0} - 1\right) = u_s^{\frac{1}{2}} \int_0^{u_s^{\frac{1}{2}}} \exp \xi^2 d\xi - u_s \quad (8)$$

ii) i) の結果から $N(E)$ を求める。

$$N_i = \frac{\epsilon_i^2}{2q\epsilon_a d_i^2} \cdot \frac{V^2}{\Delta u_i u_i} - \frac{1}{\Delta u_i} \sum_{i=0}^{i-1} N_i \Delta u_i \quad (9)$$

図- 2 の IV 特性に FE 法を適用して $N(E)$ を求めた結果を図- 4 に示す。最初に仮定した点線の分布と, 計算された表面準位が存在しない場合の (a) の曲線とを比較すると, 両者には大きな差のあることが分る。FE 法による結果は, 全体的に変化がゆるやかで, この数値計算では最大で一桁以上の差がある。この結果より, FE 法は, $N(E)$ の計算法としての信頼性は薄いと言わ

図-4 FE法により復元された $N(E)$ 図-5 CV法により復元された $N(E)$

ざるを得ない。

2.4 CV法の評価

CV法は、広瀬等²⁾による。容量測定によるCV特性より $N(E)$ を決定する方法である。この方法では、ポテンシャルの形状とは無関係に $N(E)$ を計算することが出来、FE法の様な放物線近似は必要ない。図-1のモデルより^{2,4)}

$$u_s(V) = \int_0^V \left[1 - \frac{C(V)}{C_i} \right] dV \quad (10)$$

$$C_a = \frac{C_i C}{C_i - C} \quad (11)$$

$$N(E) = \frac{d}{q du_s} \left[\left(\frac{1}{\epsilon_a} \int_0^{u_s} C_a(u) du \right) \cdot C_a(u_s) \right] \quad (12)$$

但し、 C_a は a-Si 薄膜の空間電荷容量 (単位面積当り) である。尚、FE法においても CV法においても、フェルミ分布関数は絶対零度で近似し、伝導帯の自由電子の影響も無視していることに注意する。

図-3のCV特性にCV法を適用して $N(E)$ を計算した結果を図-5に示す。仮定した分布 (十印) と表面準位が存在しない場合の (a) の曲線とを比較すると、両者は完全に一致しており、数値計算法としてはCV法は精度が高いことが分る。(微分演算が主となるので、データ数は十分多くとらなければならない。) 但し、測定精度に関してはFE法の方が勝っていると言える。何故ならば、FE測定はスタティックな測定であり、定常状態迄十分に時間をかければ正しい測定が出来ると考えられるが、CV測定は、低周波で交流ブリッジを用いて行なうダイナミックな測定であることと、高温で測定していることから後述のフェルミ分布関数の近似の影響が更に大きくなると考えられるからである。(CV測定では、測定周波数に追従して電子の占有、放出をする局在準位が、測定される容量に寄与するが、その *thermal release time* を小さくする為に高温で測定するということである。)

2.5 表面準位の影響

図-5の(a)-(d)の曲線は、各々 $D_{ss}=0, 10^{11}, 10^{12}, 10^{13}\text{cm}^{-2}\text{eV}^{-1}$ に対応する CV 特性より求めた $N(E)$ の計算結果であるから、これより表面準位の影響を評価することが出来る。(b)の曲線は、帯間に一様に表面準位密度が $10^{11}\text{cm}^{-2}\text{eV}^{-1}$ 存在する場合であるが、この程度であれば求まる $N(E)$ の誤差は比較的小さい。しかし、(d)の様に $10^{13}\text{cm}^{-2}\text{eV}^{-1}$ 程度になると、もはや表面準位にマスクされて(表面準位が電気力線の殆どを吸収してしまう。)正確な $N(E)$ は求まらない。GD a-Si:H には $10^{13}\text{cm}^{-2}\text{eV}^{-1}$ 程度の表面準位密度が存在するとの説⁵⁾もあるが、これが帯間に一様に分布しているとする、文献(3)で報告されている様な $N(E)$ は求まらないことがこの数値計算より判る。

3. 新しい計算法

3.1 FE法の誤差の原因

前述の様に、FE法により計算される局在準位密度 $N(E)$ は信頼性に欠けるが、ここでは、どの段階で誤差が大きくなるのか検討してみる。図-6には、ポテンシャルの放物線近似により図-2(a)のIV特性から表面電位 u_s 対印加電圧 V の関係を求めた(2)の曲線と、仮定した $N(E)$ (図-4の点線)より、2.2で述べた方法で $V-u_s$ の関係を求めた(1)の曲線が示されている。両者を比較することにより、IV特性から $V-u_s$ の関係を求める際のポテンシャルの放物線近似による誤差を評価出来るが、それ程大きな誤差は見られないことから、FE法の計算において、 u_s を求める迄の段階では比較的誤差は小さく、その後の計算過程で大きな誤差が生ずると考えられる。

3.2 新しい計算法

ここで述べる局在準位密度計算法全体のフローチャートを図-7に示す。

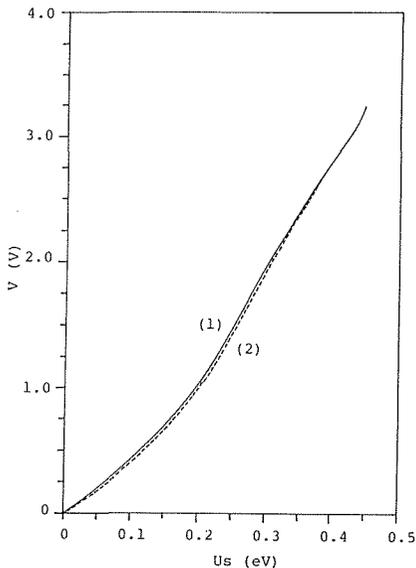


図-6

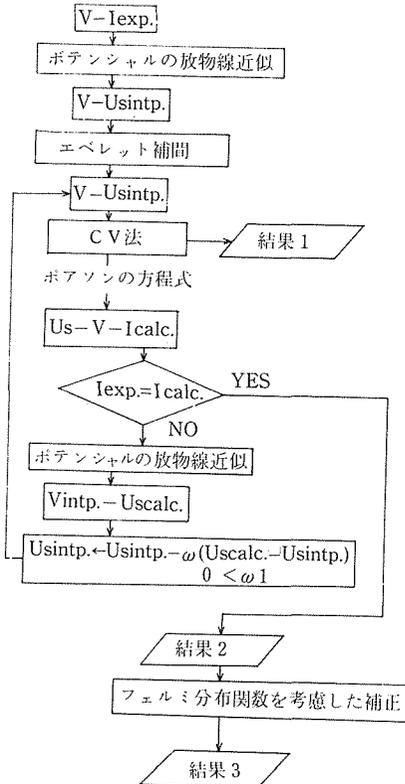


図-7 計算法フローチャート

(i) 前節の結果より、 $F(E)$ の新しい計算法を考えることが出来る。つまり、FE測定によるIV特性より表面電位 U_s を求める時には、FE法と同じくポテンシャルの放物線近似を用い、その結果から $N(E)$ を求める段階では、CV法に類似した方法を用いるという方法である。 u_s を求める(8)式では $Q \approx V/C_i$ と近似しているが、ここでは正しく $Q = (V - u_s)/C_i$ とした場合を(13)式に示す。(絶縁膜の膜厚 d_i が大きい時には(8)式で十分近似出来る。)

$$\frac{I}{I_0} = \left[\left\{ u_s^{\frac{1}{2}} \int_0^{u_s^{\frac{1}{2}}} \exp \zeta^2 d\zeta - u_s \right\} / \left\{ \frac{q\epsilon_i d_a (V - u_s)}{2\epsilon_a d_i k T} \right\} \right] + 1 \quad (13)$$

但し、空乏領域は考えていない。(文献(1)では考えている。)

(8)式か(13)式の関係より u_s が求まり、これから $N(E)$ を計算するには、CV法における(12)式を用いればよいが、 $Q = \int_0^{u_s} C_a(u) du$ であるからこれを書き換えて下式が得られる。

$$N(E) = \frac{d}{q du_s} \left[\frac{Q}{\epsilon_a} \cdot \frac{dQ}{du_s} \right] = \frac{d^2}{2q\epsilon_a du_s^2} [Q^2] \quad (14)$$

$$Q = \frac{\epsilon_i}{d_i} (V - u_s) \quad (15)$$

結局(13)–(15)式により $N(E)$ が決定出来るが、これがフローチャートの“結果1_{ii}”である。

図-2のIV特性にこの方法を適用した結果を図-8に示す。仮定した+印の分布と、計算された(a)の分布とを比較すると、FE法による図-4の場合と比べて、両曲線の差は非常に小さくなっており、大きく改善されたことが分る。

(ii) 上記の計算法においても、 u_s を次める際のポテンシャルの放物線近似による誤差が存在しているが、かなり正しい $N(E)$ が求まっているので、繰り返し近似により正しい $N(E)$ に近づけることが出来る。 $N(E)$ と V 、 u_s は(14)、(15)式で一対一に関係づけられているので、正確な $N(E)$ を求めることは、正確な $V - u_s$ の関係を求めることに対応している。今、図-6に示した様に、“結果1_{ii}”を求める段階での放物線近似による u_{sintp} は、正確な u_s よりも大き目の

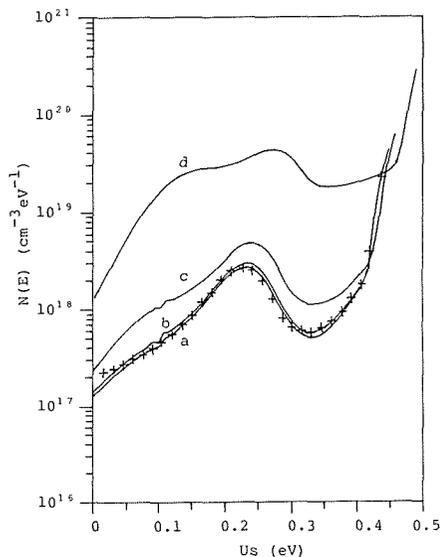


図-8 FE法とCV法を組み合わせた方法により計算された $N(E)$ “結果1_{ii}”

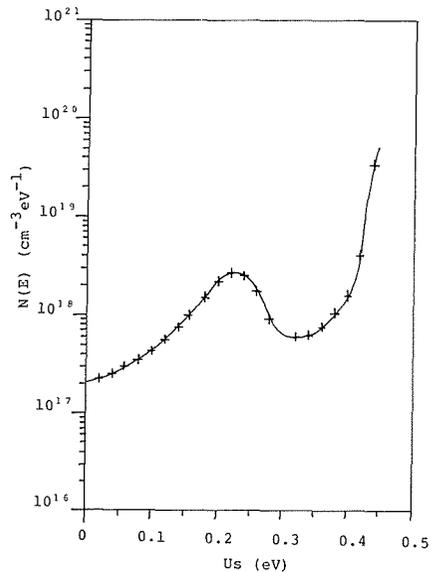


図-9 繰り返し近似による “結果2_{ii}”

値となるから、「結果 1」に更に放物線近似による計算を行なうと、 u_{scalc} を求めると、 u_{scalc} は u_{sintp} よりも更に大きな値となるので、 u_{scalc} と u_{sintp} の差に適当な重みを乗じて、 u_{sintp} から減じることにより正確な $V-u_s$ の関係に近づけて行く訳である。この重みを適当に選ぶことにより、 u_{sintp} が収束して正確な $N(E)$ が計算出来る。この様にして求まる $N(E)$ がフローチャートの「結果 2」である。

図-8 (a) の分布にこの繰り返し近似法を適用した結果を図-9 に示す。計算された $N(E)$ は、仮定した分布 (+印) と一致しており、繰り返し近似により正確な $N(E)$ が求まることが分る。結局、「結果 2」において、FE 測定による IV 特性から、CV 法と同程度の計算精度で $N(E)$ が計算出来ることになる。

尚、本計算法で注意することは、少ない数の測定データを増やす為に、フローチャートに示す様にエベレット補間を用いていることである。本計算法では、 $N(E)$ を計算する時に微分演算が主となるので十分なデータ数が必要であり、その為に補間を行なうが、適当な補間法を用いなければ、これを微分しても正しい答えは得られない。エベレット補間を用いた時には、前述の様に正確な $N(E)$ が求まった。最後に、本計算法においても、伝導帯の自由電子の影響は小さいとして無視し、また、フェルミ分布関数は絶対零度で近似していることに注意しておく。

4. 測定値への適用

4.1 電界効果測定で測定される $N(E)$ について

図-10 の様に、アクセプタ型の局在準位 n^- とドナ型の準位 p^+ が存在するとすると、F. B. (flat land) 時にはフェルミレベルは E_{F0} にあり、電荷中性条件が満たされている。印加電圧が変化して図の様にフェルミレベルが動くとき、図の①の部分は中性から負に、②の部分は正から中性になり、電荷量全体のバランスから、結局、両方の和に相当する電荷量が測定に寄与することになる。従って、FE 測定では、 n^-+p^+ を $N(E)$ として測定していることになり、 $N(E)$ が、 E_{F0} より価電子帯側ではドナ型として、伝導帯側ではアクセプタ型として働くことと等価であると考えてよい。

$N(E)$ は必ず正の値をとるので、(14) 式より次式の条件が成立しなければならないことが分る。

$$\frac{d^2(Q^2)}{dU_s^2} \geq 0 \quad (16)$$

従って、(16) 式の条件を満たす様な $V-u_s$ の関係となる IV 特性からでなければ、物理的に意味のある $N(E)$ は求まらない。前述の様に、ポテンシャルの放物線近似による誤差は比較的小さいので、これにより IV 特性から $V-u_s$ の関係を求め Q^2 を計算し、(16) 式の条件を満足しているかどうか調べる必要がある。測定値にバラツキがある時には、(16) 式の条件を満たす様な値を選択しなければならない。

4.2 測定値への適用例

ここでは、文献(3)中の一実験データに、新しい計算法を適用してみる。用いる測定値は、文献(3)のゼロックスの小さなグラフをディジタイザにより数値に直したものであり、測定値としての信頼性は薄いことに注意しておく。この測定値を図-11 に示す。図中の点線は実験の誤差の

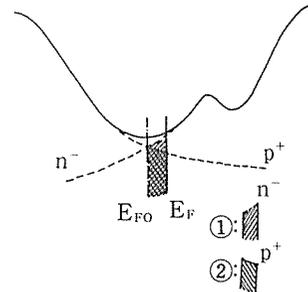


図-10

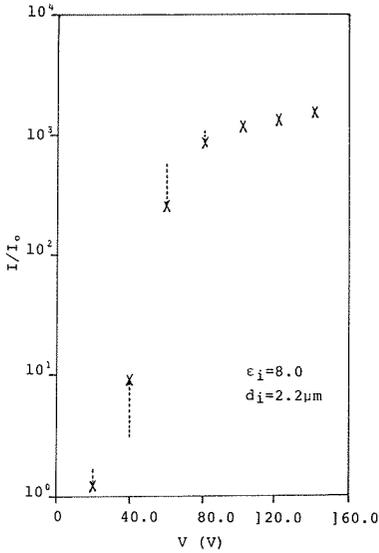


図-11 文献 (3) の一測定値

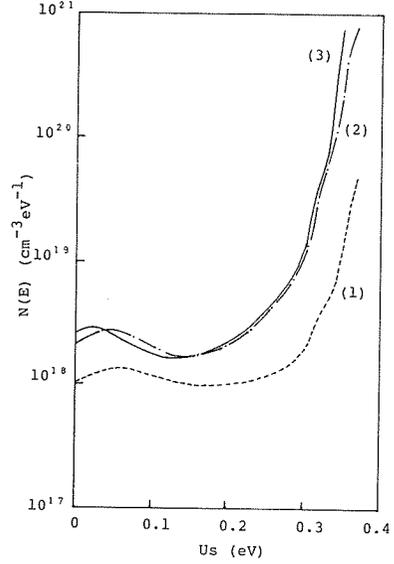


図-12 図-11より計算された $N(E)$

範囲を示しており、この点線中の適当な点を選択して実験データとして用いることになるが、その選択の際には (16) 式の条件を満たす様にしなければならない。図-11 の×印の特性は、この条件を満足している。データ数が8と非常に少ないので、エベレット補間によってデータ数を増やす(この計算では51点)が、その結果は、プロッタ等に出力して妥当な補間がなされているか確かめておかなければならない。尚、エベレット補間は、等間隔のデータに対して適用されるので、FE測定は等間隔の電圧に対して行なわなければならない。図-12に図-11からの計算結果を示す。(1)の曲線が、FE法により決定した $N(E)$ であり、(2)の曲線は、計算法フローチャートの“結果1”、(3)の曲線が“結果3”に対応している。但し、測定値の選び方を少し変えるだけで、 $N(E)$ の計算結果がかなり変わるので、如何に、局在準位密度の計算においては、測定精度が重要な問題であるか分る。

5. フェルミ分布関数を考慮に入れた補正

5. 1 フェルミ分布関数の影響の評価

これ迄の議論では、フェルミ分布関数 $F(E)$ を図-13の $T=0K$ のもので近似してきたが、果してこの近似が妥当なものであるか検討してみる必要がある。実際の実験は室温で行なわれることが多いであろうと思われるが、その時のフェルミ分布関数は図-13に示す様に相当な広がりを持っており、絶対零度で近似して計算された $N(E)$ が正確な分布を与えているかどうかは疑問である。

$F(E)$ を絶対零度のもので近似すると、 $N(E)$ と空間電荷密度 $\rho(E)$ の関係は (2) 式で表わされる。

$$\rho(E_F) = -q \int_{E_{F0}}^{E_F} N(E) dE \quad (2)'$$

但し、 E_{F0} は F. B. 時のフェルミレベルである。 $T(K)$ における $F(E)$

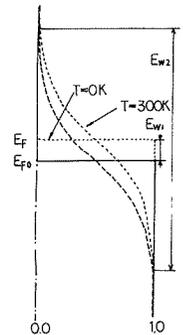


図-13 フェルミ分布関数

を考慮に入れると、 $N(E)$ と $\rho(E)$ の正しい関係式は次式となる。

$$\int_{-\infty}^{+\infty} N(E) \left[\frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{KT}\right)} - \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_{F0}}{KT}\right)} \right] dE = -\frac{\rho(E_F)}{q} \quad (17)$$

従って、 E_{F0} から E_F にフェルミレベルが動いた時、 $\rho(E_F)$ は図-13 の E_{w2} の範囲の $N(E)$ の影響を受けている。絶対零度の場合には、 E_{w1} の範囲の $N(E)$ を積分することにより $\rho(E_F)$ が求まり、計算が非常に簡単である。(17) 式の両辺を E_F について微分することにより以下の式が得られる。

$$\left. \begin{aligned} F(E - E_F) &= \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{KT}\right)} \\ \int_{-\infty}^{+\infty} N(E) \frac{dF(E - E_F)}{dE_F} dE &= -\frac{1}{q} \cdot \frac{d\rho(E_F)}{dE_F} \end{aligned} \right\} \quad (18)$$

$$K(E - E_F) = \frac{dF(E - E_F)}{dE_F} = \frac{1}{4kT} \operatorname{sech}^2\left(\frac{E - E_F}{2kT}\right) \quad (19)$$

$$G(E_F) = -\frac{1}{q} \cdot \frac{d\rho(E_F)}{dE_F} \quad (20)$$

(19) を (20) とおくことにより (18) 式は次式となる。

$$\int_{-\infty}^{+\infty} K(E - E_F) N(E) dE = G(E_F) \quad (21)$$

(21) 式は、合成型のフレドホルムの第一種積分方程式であり、(19) 式から分る様に $K(E - E_F)$ は対称核になっている。 $G(E_F)$ は、(20) 式より明らかに、3. 2 で述べた新しい計算法で求まる $N(E)$ である。この計算法では、IV 特性と $\rho(E)$ とは一対一に対応しており、実験時の室温での空間電荷密度分布 $\rho(E)$ は正しく計算されると考えて良い。この正確な $\rho(E_F)$ より、 $F(E)$ を絶対零度で近似して求まる局在準位密度が $G(E_F)$ であり、これが計算法フローチャートの「結果 2」に対応している。

絶対零度では、 $K(E - E_F)$ は E_F でのインパルスとなり、(21) 式において $N(E)$ は $G(E_F)$ 自身となる。ところが室温での対称核 $K(E - E_F)$ は図-14 に示した様に、0.2 eV 以上の広がりを持った関数となる。この為、 $G(E_F)$ が E_w の範囲で求まっているとすると、その $G(E_F)$ は E_w よりも広い E_w' の範囲の $N(E)$ の影響を受けていることになる。

図-12 (3) の分布を (17) 式に $N(E)$ として代入して $-\rho(E_F)/q$ を計算し (・印)、これと

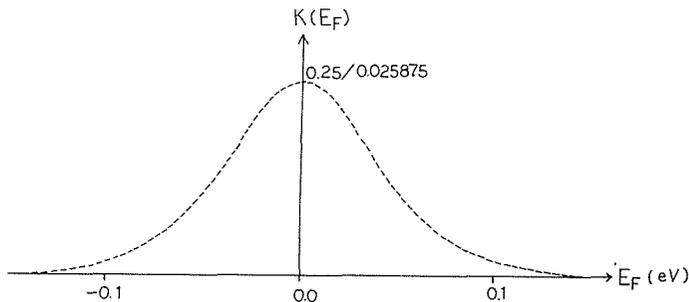


図-14

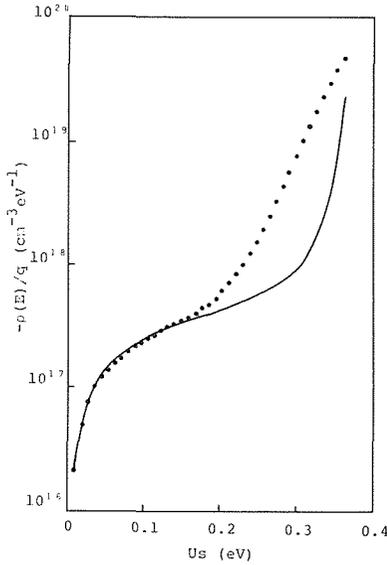


図-15

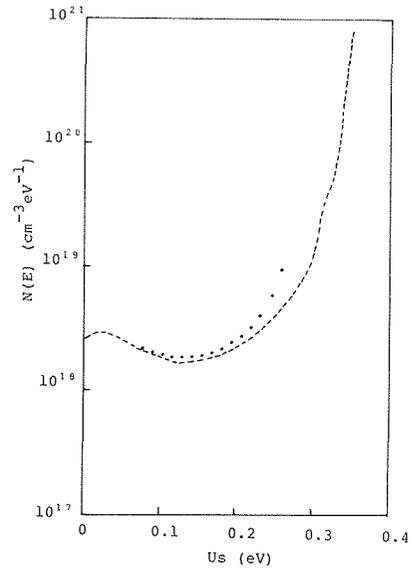


図-16

図-12 (3) の分布より (2) 式から求まる正しい $-\rho(E_F)/q$ (実験) とを比較した結果を図-15 に示す。前述の様に、 $N(E)$ は広い E の範囲について既知でなければならぬので、両端で一定の $N(E)$ が続くものと仮定して計算している。両者には非常に大きな差があり、結局、図-12 (3) の様な (特に急峻に大きくなる様な) 形状の $N(E)$ に対しては、 $F(E)$ の近似の影響は無視出来ず、補正を加える必要があることが分る。また、図-12(3)の分布を(21)式に $N(E)$ として代入して求めた $G(E_F)$ (・印) と図-12 (3) 自身とを比較した結果を図-16 に示す。この計算では、 $K(E_F)$ の広がり を 0.14 eV で切っているので、両端の 0.7 eV を除いた範囲で $G(E_F)$ が求まっている。この結果からも、 $F(E)$ を考慮に入れた補正を行なうべきであることが分る。

文献(2)では、CV法によって、文献(3)における様なピークの存在しない *band tail* の様な形状の $N(E)$ が報告されているが、これに類似した分布と、 $F(E)$ の影響を(21)式により数値実験した結果を図-17 に示す。図-17では、 $F(E)$ の近似による誤差は比較的小さくなっており、従って、この様な変化のゆるやかな分布であれば誤差は小さく、また、補正することも比較的容易であると考えられる。

5.2 フェルミ分布関数を考慮した補正

(21)式の積分方程式は合成型であるから、フーリエ変換を用いて解くことが出来そうだが、実際には $G(E_F)$ が有限の範囲でしか分っておらず、また $K(E_F)$ が非常に大きな広がりを持っている

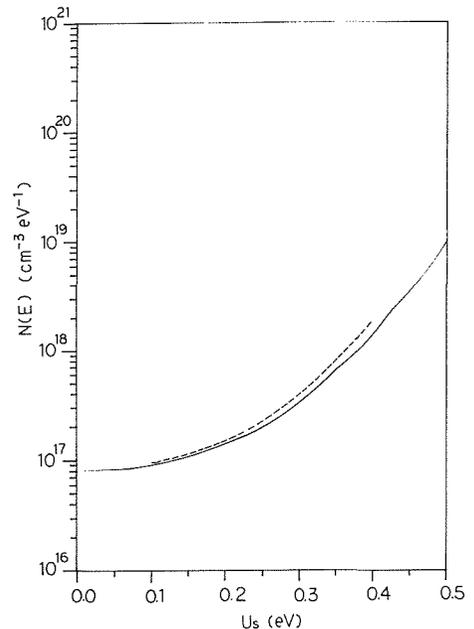


図-17

ことから不可能である。

積分方程式の近似解法として、積分公式を適用して離散的な点についての連立方程式に帰着する数値計算法があるが、この場合、一つの温度で測定されたデータに対しては、この連立方程式の係数行列は $M \times N$ ($M < N$) となり、ある範囲 ($N - M$) の $N(E)$ の形状に仮定を加えなければ情報量が不足して解けない。例えば、二つの異なる温度で測定を行えば、情報量としては十分で、連立方程式に帰着した時に係数行列を $N \times N$ に出来るが、図-12 (3) の様にインパルスの立ち上がっている $G(E_F)$ では、サンプリング定理を満足する為には非常に分割点を細かく採らなければならない、実際には解くことが出来ないと思われる。

しかし、 $N(E)$ を決定する時には、多くの異なる温度で $G(E_F)$ を測定することは重要であると思われる。図-18 には、図-4 で仮定した $N(E)$ (+印) から温度 T をパラメータとして (21) 式から $G(E_F)$ を計算した結果を示しているが、ここでも $N(E)$ の両端で一定に続くものとして計算している。図より、 $T=50\text{K}$ では誤差は小さく、 $G(E_F)$ は殆んど正確な $N(E)$ であると言って良い。 $T=100\text{K}$ でも、誤差は比較的小さく、 $G(E_F)$ は $N(E)$ の割と良い近似解になっている。図-19 には、 $G(E_F)$ の温度変化 ($100\text{K} \sim 300\text{K}$) から $T=50\text{K}$ 迄外挿して求めた $G(E_F)$ を +印で示したが、殆んど正しい $N(E)$ に近づいていると言って良いだろう。但し、 $T=100\text{K}$ 程度迄の低温で精度の高い測定が出来るかが問題である。

6. 結 論

GD a-Si:H の局在準位密度 $N(E)$ を決定する FE 法と CV 法の信頼性を評価するシミュレーションを行なった結果、数値計算法としては、CV 法は正しいが、FE 法は信頼性に欠けることが

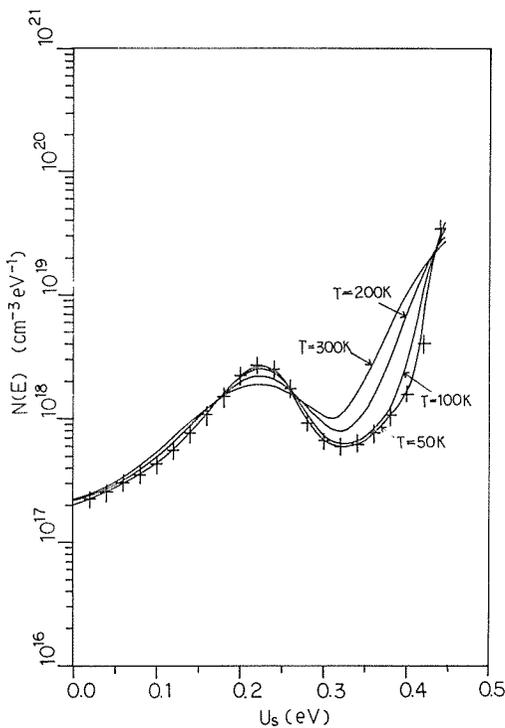


図-18

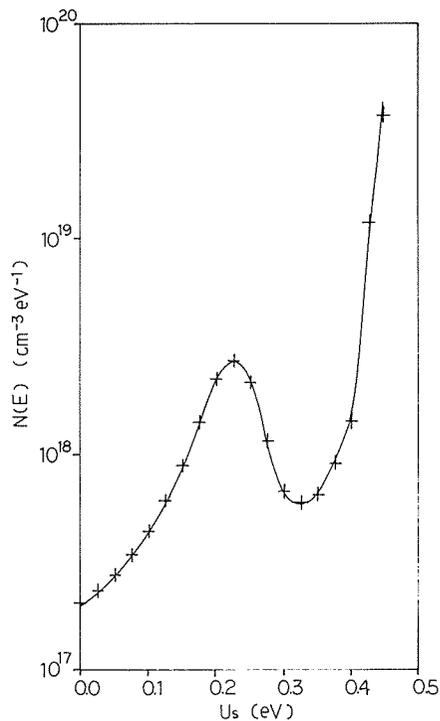


図-19

判明した。但し、測定精度に関しては、FE法の方が勝っていると考えられる。

帯間に一様に表面準位密度が存在する場合、 $10^{11}\text{cm}^{-2}\text{eV}^{-1}$ 程度迄でなければ正確な $N(E)$ は求まらない。

FE法において、ポテンシャルの放物線近似により表面電位を求める段階での誤差が比較的小さいことから、FE法とCV法の計算法を組み合わせた新しい計算法が提案され、十分満足出来る結果が得られた。また、繰り返し近似により正確な $N(E)$ に近づけることも出来た。

上述の計算法では、フェルミ分布関数を絶対零度で近似しているが、実際の実験は室温で行なわれているであろうから、その為の誤差が生ずる。シミュレーションの結果、 $N(E)$ の変化が大きい時にはこの近似による誤差は無視出来ず、補正を加えなければ正しい $N(E)$ は求まらないことが分った。但し、空間電荷密度はこの計算法で正しく求まる。正しい $N(E)$ の近似解を得るには、低温(100K前後)で実験を行なうこと、また、異なる温度で測定を行ない温度変化をみる事が有効であると思われる。

引用文献

- 1) Spear W. E. & Le Comber P. G.: J. Non-Cryst. Solids 8-10 (1972)
- 2) Hirose M., Suzuki T. & Döhler G. H.: Appl. Phys. Lett. 34, 3 (1979)
- 3) Madan A., Le Comber P. G. & Spear W. E.: J. Non-Cryst. Solids 20 (1976)
- 4) S. M. Sze: Physics of Semiconductor Devices, (1969), p. 434~449, John Wiley & Sons.
- 5) Wronski C. R. & Carlson D. E.: Solid State Comm. 23 (1977)