

# 光子重吸收对硅片的光载流子辐射特性影响的理论研究\*

王谦<sup>†</sup> 刘卫国 巩蕾 王利国 李亚清 刘蓉

(西安工业大学光电工程学院, 西安 710021)

(2018年10月23日收到; 2018年12月19日收到修改稿)

光载流子辐射技术已广泛应用于半导体材料性能表征, 本文基于一种包含光子重吸收效应的光载流子辐射理论模型, 对单晶硅中光子重吸收效应对光载流子辐射信号的影响进行了详细的理论分析. 分析结果表明, 光子重吸收效应对光载流子辐射信号的影响主要取决于样品掺杂浓度、过剩载流子浓度和过剩载流子的分布. 由于过剩载流子浓度及其分布与材料电子输运特性密切相关, 电子输运参数的变化将导致光子重吸收效应的影响随之变化. 进一步分析了光子重吸收效应对具有不同电子输运特性的样品的电子输运参数的影响, 并提出了减小光子重吸收效应影响的方法.

**关键词:** 光载流子辐射, 光子重吸收, 电子输运参数, 自由载流子吸收, 硅片

**PACS:** 72.20.Jv, 42.25.Bs, 78.20.nb

**DOI:** 10.7498/aps.68.20181889

## 1 引言

半导体材料的电子输运特性, 如少子寿命 ( $\tau$ )、载流子扩散系数 ( $D$ ) 和表面复合速率 ( $S$ ) 对于模拟和分析光电探测器、太阳能电池等半导体器件的性能是至关重要的<sup>[1]</sup>. 迄今为止, 用于测量表征半导体材料特性的非接触无损检测方法多种多样, 如光电导衰减 (photoconductance decay) 技术<sup>[2]</sup>、光致发光 (photoluminescence, PL) 技术<sup>[3,4]</sup>、光声光热 (photoacoustic and photothermal) 技术<sup>[5-8]</sup> 等.

光载流子辐射 (photocurrent radiometric, PCR) 技术<sup>[5]</sup> 作为光声光热技术的一种, 由于滤除了热波信号的影响, 理论模型和实验分析大大简化. PCR 技术自提出以来, 已被广泛应用于单晶硅片<sup>[9-13]</sup>、离子注入和退火硅片<sup>[14-16]</sup>、太阳能电池<sup>[17,18]</sup>、GaAs<sup>[19]</sup>、PbS 量子点薄膜<sup>[20,21]</sup> 等多种半导体材料

的性能检测. 由于 PCR 技术测量的是整个探测区域内光激发过剩载流子的辐射复合发光, 材料体内的辐射光子将在材料内部传输一段距离后到达并透射出材料表面被探测装置 (如探测器或相机) 收集和探测, 辐射光子在向材料表面传输的过程中不可避免地要被材料重新吸收, 如带间吸收和带内自由载流子吸收. 对于间接带隙半导体材料, 如硅, 当掺杂浓度较低时, 辐射复合光子的重吸收系数较小, 光子重吸收 (photon reabsorption, PR) 对 PCR 信号的影响较小, 因此, 传统的光载流子辐射技术往往忽略了 PR 对测量结果的影响. 然而, 随着材料掺杂浓度的增加, PR 的影响也逐渐增加. 同时, 对于不同特性的半导体材料, 光激发过剩载流子的浓度和分布也不尽相同, 导致 PR 的影响程度不同, 因此有必要对 PR 对 PCR 信号及其测量结果的影响进行详细分析, 以提高半导体材料特性参数的测量精度.

\* 国家自然科学基金青年科学基金 (批准号: 61704132, 61501363)、西安市智能探视感知重点实验室项目 (批准号: 201805061ZD12CG45) 和西安工业大学校长基金 (批准号: XAGDXJJ16007, XAGDXJJ18001) 资助的课题.

<sup>†</sup> 通信作者. E-mail: [qian\\_wang521@163.com](mailto:qian_wang521@163.com)

近年来, PR 对 PL 谱和时间分辨 PL 信号的影响已被广泛研究<sup>[22-25]</sup>, 同时, 基于 PR 效应的检测方法<sup>[26,27]</sup>及其对光电器件的性能调节技术<sup>[28,29]</sup>也在不断地提出. 本文以单晶硅材料为例, 基于前期提出的含 PR 效应的 PCR 理论模型<sup>[30]</sup>, 详细分析了 PR 效应对传统频率扫描 PCR 信号及电子输运参数测量结果的影响, 并提出了减小 PR 效应影响的方法.

## 2 理论模型

如图 1 所示, 当一束波长为  $\lambda$  的抽运光束照射到厚度为  $L$  的均匀半导体样品表面时, 如果抽运光束的光子能量高于被测半导体材料的禁带宽度, 样品将吸收光子能量而产生过剩载流子, 即过剩电子和空穴. 光激发过剩载流子由于浓度不均匀而向样品表面和体内扩散, 在扩散的过程中载流子通过多种复合机制进行复合, 如声子协助非辐射复合和发射光子的辐射复合. 假设抽运光束是半径为  $a_1$  的高斯光束, 光激发过剩载流子产生率为

$$g(r, z, \omega) = \frac{P\eta\lambda_{\text{pump}}\alpha_{\text{pump}}(1 - R_{\text{pump}})}{\pi a_1^2 hc} \times (1 + e^{i\omega t}) e^{-\alpha_{\text{BB}}z - \frac{r^2}{a_1^2}}, \quad (1)$$

其中  $\omega = 2\pi f$  为角频率,  $f$  为抽运光束的调制频率,  $P$  为抽运光功率,  $\eta$  为光激发过剩载流子产生效率,  $\lambda_{\text{pump}}$  为抽运光波长,  $\alpha_{\text{pump}}$  为样品在抽运光波长处的吸收系数,  $R_{\text{pump}}$  为样品前表面对抽运光的反射率,  $h$  为普朗克常数,  $c$  为真空中光速. 光激发过剩载流子浓度  $\Delta N(r, z, t)$  可表示为

$$\Delta N(r, z, t) = \Delta N_0(r, z) + \Delta N_1(r, z, \omega) e^{i\omega t}, \quad (2)$$

其中  $\Delta N_0(r, z)$  和  $\Delta N_1(\omega, r, z)$  分别为光激发过剩载流子浓度的直流和交流部分, 可以通过求解载

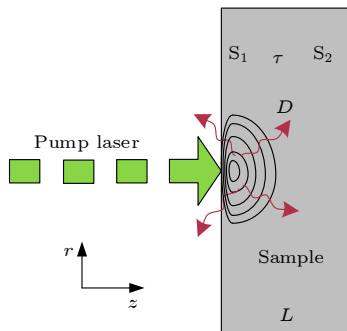


图 1 PCR 技术原理示意图

Fig. 1. Schematic diagram of PCR technique.

流子输运方程结合边界条件得到, 结果见附录 A 所示.

考虑 PR 效应, 探测范围内波长为  $\lambda$  的辐射光强度为

$$I_{\text{PL}}(\lambda) = \text{const} \cdot \int_0^{a_2} 2\pi r dr \int_0^L dz (N_{\text{D}} + \Delta N(r, z, t)) \times \Delta N(r, z, t) f_{\text{esc}}(r, z, \lambda), \quad (3)$$

其中, const 为常数,  $a_2$  为探测器的有效探测半径,  $N_{\text{D}}$  为掺杂浓度,  $f_{\text{esc}}(r, z, \lambda)$  为与 PR 和表面反射相关的辐射光子逃逸的可能性.

在实验测量中, 过剩载流子的近红外辐射光子通过 InGaAs 探测器进行探测, 并经锁相放大器进行解调, 因此一阶 PCR 信号可以通过将 (3) 式在探测器光谱响应范围进行积分得到,

$$S(\omega) = \text{const} \cdot \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} d(\lambda) \int_0^{a_2} 2\pi r dr \int_0^L dz \times (N_{\text{D}} + 2\Delta N_0(r, z)) \Delta N(r, z, \omega) f_{\text{esc}}(r, z, \lambda), \quad (4)$$

其中,  $\lambda_1$  和  $\lambda_2$  分别为探测器可探测波长范围的上下限. 一般情况下, 近红外 InGaAs 探测器的光谱响应范围为 0.7—1.8  $\mu\text{m}$ .

为了测量样品的电子输运参数, 通过多参数拟合方式将测量的 PCR 数据拟合到上述理论模型中, 拟合中采用的目标函数为

$$\text{var} = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \left[ 1 - \frac{A_{\text{T}}(f_i)}{A_{\text{E}}(f_i)} \right]^2 + \frac{\sum_{i=1}^M [\Phi_{\text{T}}(f_i) - \Phi_{\text{E}}(f_i)]^2}{\sum_{i=1}^M [\Phi_{\text{E}}(f_i)]^2}, \quad (5)$$

其中  $A_{\text{T}}(f_i)$  和  $\Phi_{\text{T}}(f_i)$  分别为理论计算的调制频率为  $f_i$  时 PCR 信号的振幅和相位,  $A_{\text{E}}(f_i)$  和  $\Phi_{\text{E}}(f_i)$  分别为实验测量的调制频率为  $f_i$  时 PCR 信号的振幅和相位,  $M$  为数据点总数.

考虑辐射光在样品前后表面的多次反射, 对于常用的前表面抛光样品, (3) 式和 (4) 式中的光子逃逸可能性  $f_{\text{esc}}(\lambda, r, z)$  可表示为<sup>[22,30]</sup>

$$f_{\text{esc}}(\lambda, r, z) = C \cdot (1 - R_{\text{f}}) \exp(-\alpha z) \times [1 + R_{\text{b}} \exp(-3\alpha(L - z))] \times \sum_{i=0}^{\infty} R_{\text{f}}^i R_{\text{b}}^i \exp(-3i\alpha L), \quad (6)$$

其中  $R_{\text{f}}$  和  $R_{\text{b}}$  分别为样品前后表面对辐射光的反射率,  $C$  为常数,  $\alpha$  为 PR 系数. 由于辐射光子的能量位于样品带隙宽度附近, 辐射光子的重吸收过程

中将包含两个方面: 带间吸收  $\alpha_{\text{BB}}$  和带内自由载流子吸收  $\alpha_{\text{FCA}}$ , 即  $\alpha = \alpha_{\text{BB}} + \alpha_{\text{FCA}}$ . 对于带间吸收, 样品吸收辐射光子后产生新的电子空穴对, 进而通过各种方式复合消失, 对于间接带隙半导体材料, 如单晶硅, 其辐射复合效率较低, 计算中忽略 PR 产生的电子空穴对再次辐射复合发射光子对信号的影响. 对于带内自由载流子吸收, 光子的重吸收仅在导带内或价带内进行, 并不会激发新的过剩载流子. 自由载流子吸收与辐射光子波长和样品内载流子浓度有关, 根据 Green 的经验公式可表示为 [23]

$$\alpha_{\text{FCA}} = 2.6 \times 10^{-27} n \lambda^3 + 2.7 \times 10^{-24} p \lambda^2, \quad (7)$$

其中  $n$  和  $p$  分别为样品内电子和空穴的浓度, 单位为  $\text{cm}^{-3}$ , 波长  $\lambda$  的单位为  $\text{nm}$ .

### 3 结果与讨论

仿真中样品对抽运光的吸收系数设置为  $6.6 \times 10^4 \text{ m}^{-1}$ , 相应于单晶硅在 830 nm 波长处的吸收系数. 辐射光子重吸收中的带间吸收系数  $\alpha_{\text{BB}}$  采用文献 [23] 列出的 Schinke 等测量的数据, 自由载流子吸收系数  $\alpha_{\text{FCA}}$  利用 (7) 式计算得到. 图 2 给出了单晶硅样品的带间吸收系数和自由载流子吸收系数, 以及计算得到的未考虑 PR 效应时室温单晶硅样品的典型 PL 谱, 过剩自由载流子浓度设置为  $3 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ . 对于单晶硅样品, 其室温 PL 谱在 900—1300 nm 范围内, 因此发射光子被样品重吸收过程中将包含带间吸收和带内自由载流子吸收两个方面. 对于重掺杂样品, 在此光谱范围内, 辐

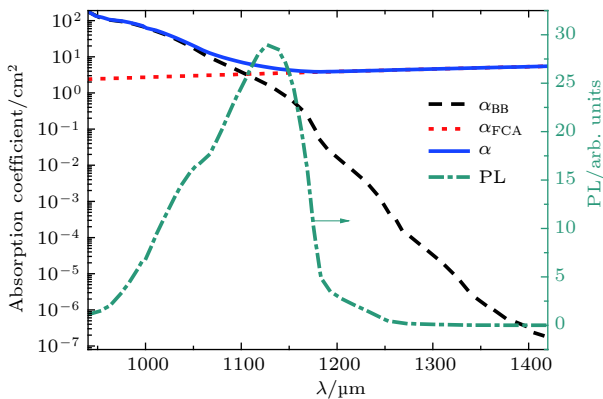


图 2 单晶硅样品的带间吸收系数和自由载流子吸收系数及仿真的未考虑 PR 效应的 PL 谱

Fig. 2. Absorption coefficients  $\alpha_{\text{BB}}$  and  $\alpha_{\text{FCA}}$  for a silicon wafer and a simulated PL without PR.

射光子的重吸收既包含带间吸收也包含自由载流子吸收. 短波范围内, 带间吸收占主导; 长波范围内, 自由载流子吸收占主导. 仿真计算中, 除明确指出, 其他参数设置为如下: 样品厚度  $L = 525 \mu\text{m}$ , 掺杂浓度  $N_{\text{D}} = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ , 载流子寿命和扩散系数采用文献中常用的参数值  $\tau = 50 \mu\text{s}$  和  $D = 20 \text{ cm}^2/\text{s}$  [31]. 抽运光束半径  $a_1 = 25 \mu\text{m}$ , 探测器的有效探测半径  $a_2 = 55 \mu\text{m}$ . 抽运激光功率设置为  $P = 23 \text{ mW}$ . 抛光面和粗糙面的复合速率分别设置为 10 和 100  $\text{m/s}$ , 反射率可根据菲涅耳反射定律和文献 [22] 分别设定为 0.31 和 0.923. 由于过剩载流子浓度低于  $2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ , 分析中不考虑俄歇复合的影响. 为了定量分析 PR 的影响, 定义相对误差  $\Delta = (S_{\text{pr}} - S_0)/S_0$ , 其中  $S_{\text{pr}}$  和  $S_0$  分别为考虑 PR 和不考虑 PR 时的 PCR 信号或 PL 信号. 尽管根据理论分析发现仿真参数变化时 PR 对 PCR 信号的影响程度有所变化, 但所得的结论是一致的, 因此上述设定的仿真参数具有一定的代表性.

#### 3.1 PR 对 PCR 信号的影响

图 3 给出了 PR 对 PCR 信号的影响, PR 使得 PCR 信号的振幅明显下降, 相位滞后有所减小但变化并不明显. 通过图 3(c) 相对误差的计算可以看到, PR 使得 PCR 信号振幅下降高于 47%, 而对相位的影响仅在 3% 以下. 相对误差为负值表明重吸收使得 PCR 信号振幅和相位滞后减小. 由图 3(a) 和图 3(b) 可以看到, 随着调制频率的增加, PR 对 PCR 信号的振幅和相位的影响均逐渐减小. 由于 PCR 信号为不同调制频率时在探测器光谱响应范围内 PL 谱的积分, 为了深入分析 PR 对 PCR 信号的影响, 图 4 给出了两组不同调制频率下 PR 对 PL 谱的影响. 可以看出, 在短波范围内 ( $< 1100 \text{ nm}$ ) 带间吸收占主导, PR 对 PL 信号的影响随波长的减小逐渐增大, 这是由于带间吸收系数随波长的减小而增大. 在长波范围内 ( $> 1100 \text{ nm}$ ) 自由载流子吸收占主导, 此时由于自由载流子吸收系数随波长的增大而增大, PR 对 PL 信号的影响随波长的增大逐渐增大. 对比振幅和相位信号, 可以看到 PR 对 PL 信号相位的影响较小, 尤其在长波范围内. 同时, 随着调制频率的增大, PR 对 PL 信号的影响有所减小, 因此对 PCR 信号的影响也逐渐减小, 与图 3 结果相一致.

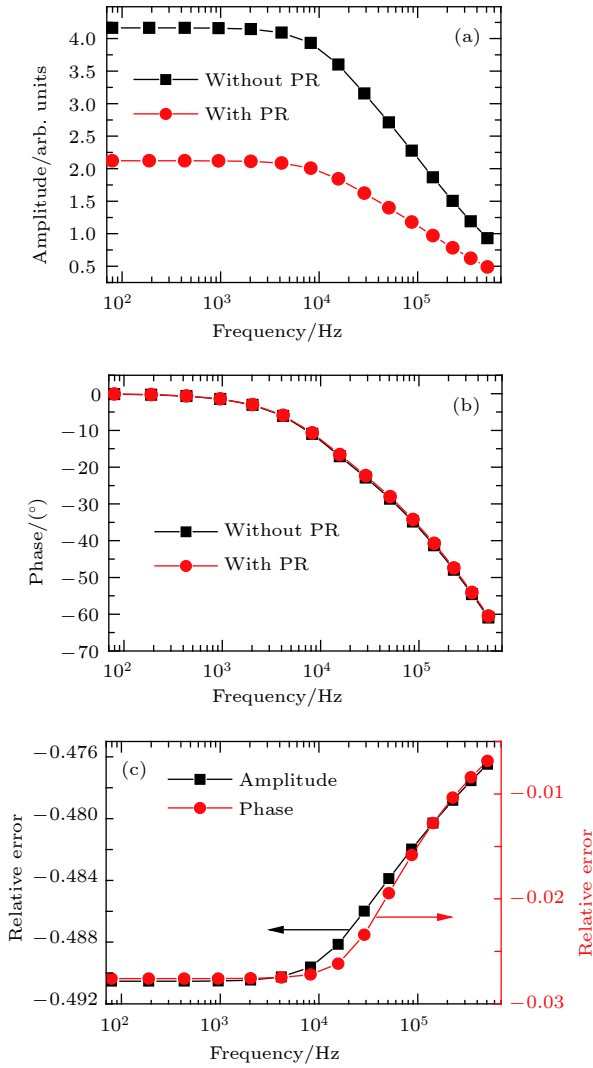


图3 PR对PCR信号的影响 (a) 振幅; (b) 相位; (c) 相对误差

Fig. 3. Influence of PR on PCR signal: (a) Amplitude; (b) phase; (c) relative error.

由于PL信号源于过剩载流子的辐射复合,同时PR中自由载流子吸收也与过剩载流子有关,因此PR对PL信号和PCR信号的影响必然与过剩

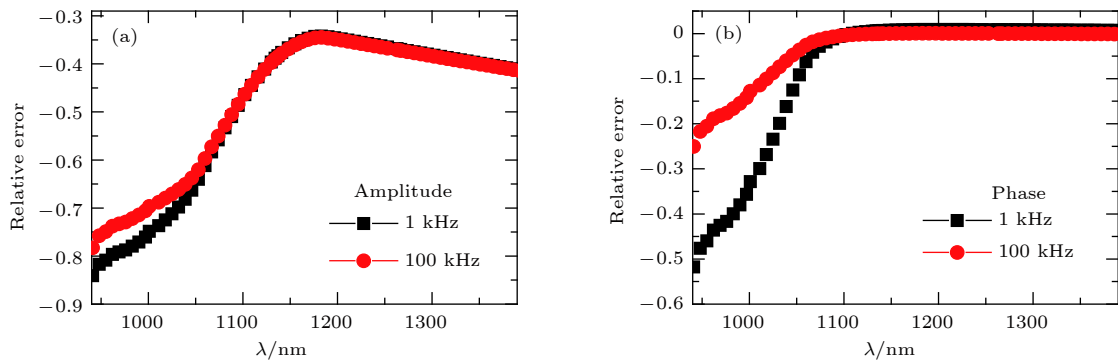


图4 重吸收对PL谱的影响 (a) 振幅; (b) 相位

Fig. 4. Influence of PR on PL spectrum: (a) Amplitude; (b) phase.

载流子有关. 图5(a)给出了不同调制频率时光抽运中心位置过剩载流子的纵向分布情况. 随着调制频率的增加,过剩载流子浓度逐渐减小,同时其分布更趋近于样品前表面. 为了便于分析过剩载流子的分布情况,定义过剩载流子分布的平均深度为

$$\bar{d} = \frac{\int_0^L z \Delta N(z) dz}{\int_0^L \Delta N(z) dz}. \quad (8)$$

图5(b)给出了过剩载流子平均深度与调制频率的关系. 在低频范围,平均深度受调制频率的影响不大,但随着调制频率的进一步增大,过剩载流子平均深度逐渐减小.

从图3到图5的结果和上述分析可以明显看出,PR对PCR信号的影响取决于过剩载流子浓度及分布情况. 随着调制频率的增加,过剩载流子浓度及平均深度逐渐减小,过剩载流子浓度减小导致自由载流子吸收减小,平均深度的减小使得辐射复合光子重吸收距离减小,二者共同使得PR对PCR信号振幅和相位的影响逐渐减小.

由于不同样品的电子输运参数不同,而过剩载流子浓度及分布又与电子输运参数相关,因此有必要分析电子输运参数对PR的影响程度. 图6给出了不同载流子寿命时PR对PCR信号的影响. 随着载流子寿命的增加,过剩载流子浓度和扩散长度 ( $L_{\text{eff}} = \sqrt{(1 + i\omega\tau)/D\tau}$ )<sup>[7]</sup>均增加,前者导致自由载流子吸收增大,后者导致更多过剩载流子扩散至样品内部而远离前表面,使其平均深度增大,二者共同导致PR对PCR信号的影响增大. 另外,高频情况时,PR对PCR信号的影响受载流子寿命的影响较小.

图7给出了不同载流子扩散系数时PR对



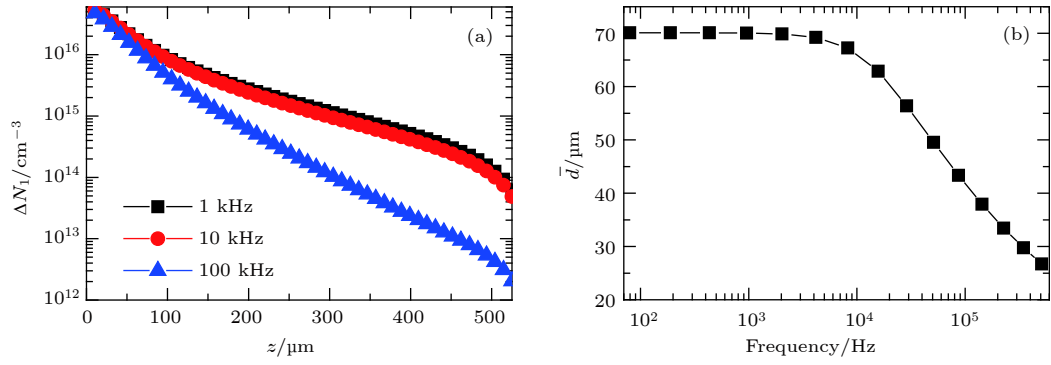


图 5  $r = 0 \mu\text{m}$  时 (a) 过剩载流子浓度纵向分布; (b) 平均深度与调制频率的关系

Fig. 5. (a) Vertical excess carrier density distribution and (b) mean depth as a function of the modulation frequency at  $r = 0 \mu\text{m}$ .

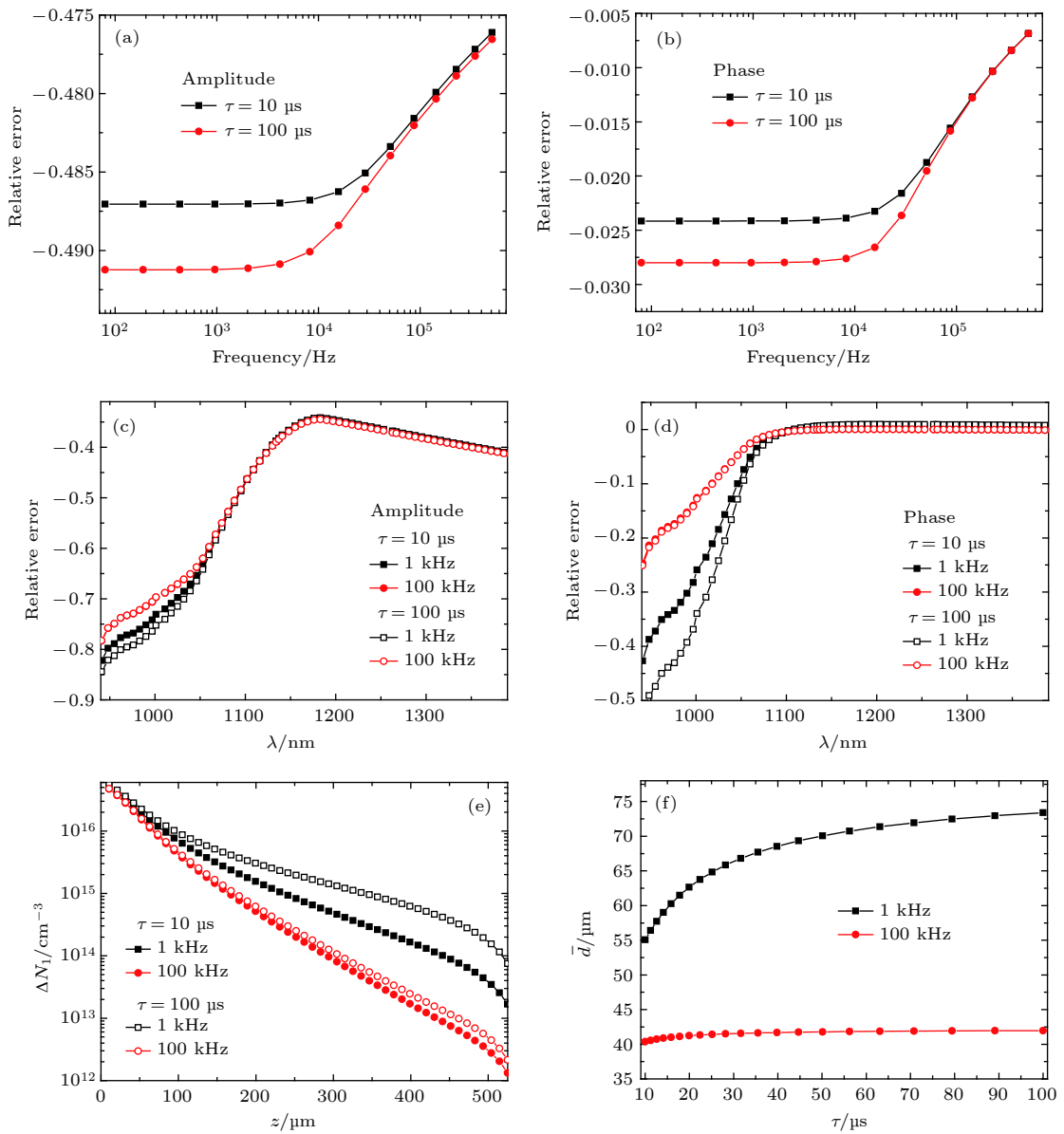


图 6 载流子寿命变化时, PR 效应对 PCR 信号的影响

Fig. 6. Influence of PR on PCR signal for silicon wafers with different carrier lifetimes.

PCR 信号的影响. 随着扩散系数的增加, 过剩载流子浓度减小, 扩散长度增加, 前者导致自由载流子吸收减小, 使 PR 的影响减小, 后者导致更多过剩载流子扩散至样品内部而远离前表面, 使其平均深度增大, 使 PR 的影响增大. 从仿真结果来看, 当载流子扩散系数增大时, 短波范围内, PR 对 PL 信号的振幅和相位的影响增大, 而长波范围内对振幅的影响减小, 对相位影响变化不大. 同时, PR 对 PCR 振幅信号的影响减小, 而对 PCR 相位信号的影响增大, 这与 PR 对 PL 信号的影响相一致.

图 8 给出了不同前表面复合速率时 PR 对 PCR 信号的影响. 随着前表面复合速率的增加, 过

剩载流子浓度减小, 导致自由载流子吸收减小, 同时过剩载流子的平均深度减小, 二者共同使得 PR 对 PL 和 PCR 信号振幅的影响减小, 对相位的影响增大. 当前表面复合速率变化时, PR 对振幅的影响体现在几乎整个 PL 谱范围内, 而对相位的影响主要体现在短波范围内. 另外, 对于高频调制, 表面复合速率变化时, 由于过剩载流子浓度及分布的变化并不明显, PR 对信号影响的变化相应减小.

图 9 给出了样品掺杂浓度变化时 PR 对 PL 和 PCR 信号的影响. 随着掺杂浓度的增加, 自由载流子吸收增强, 对于 PL 信号振幅, 在长波范围受光

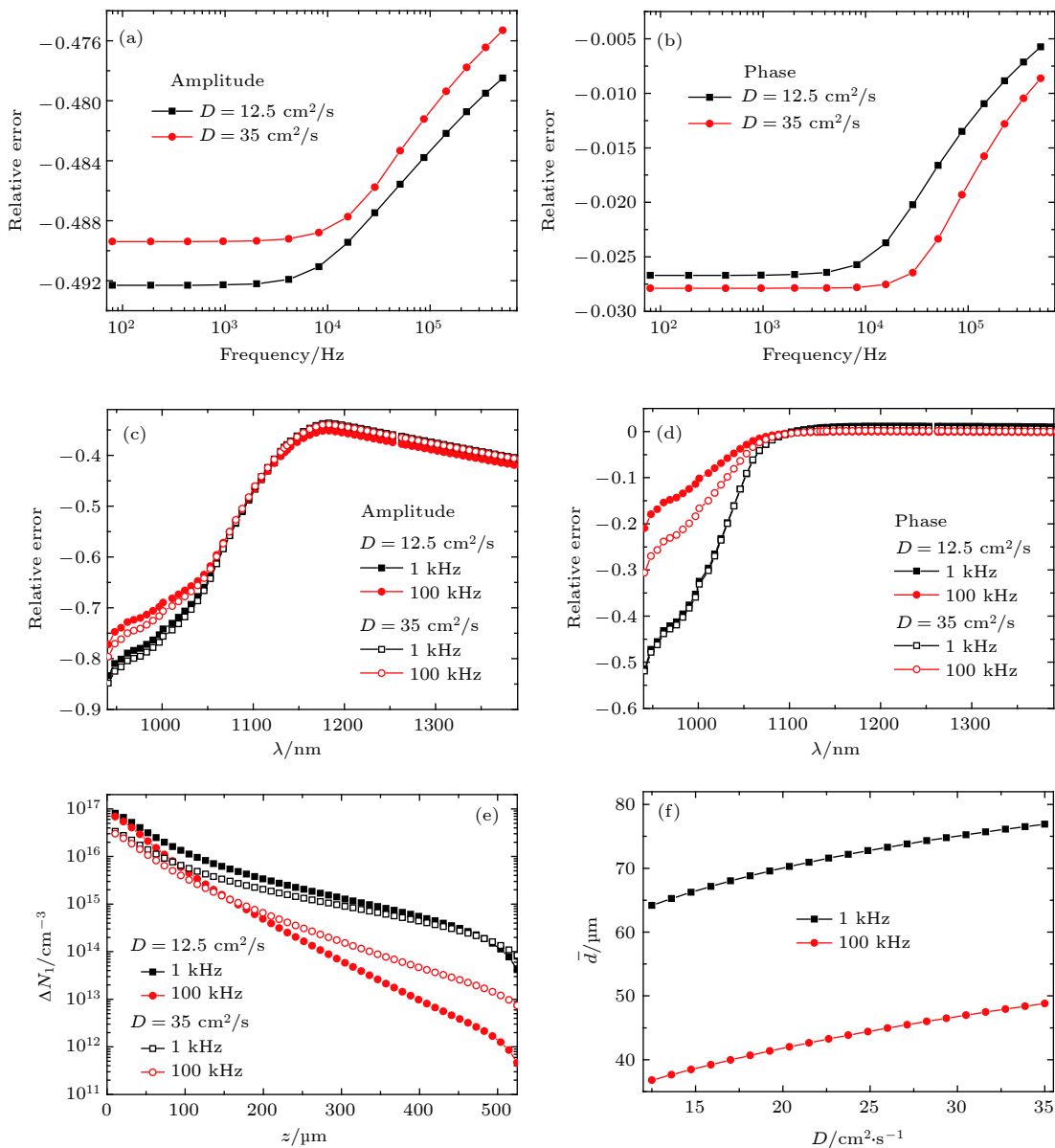


图 7 载流子扩散系数变化时, PR 效应对 PCR 信号的影响

Fig. 7. Influence of PR on PCR signal for silicon wafers with different diffusion coefficients.

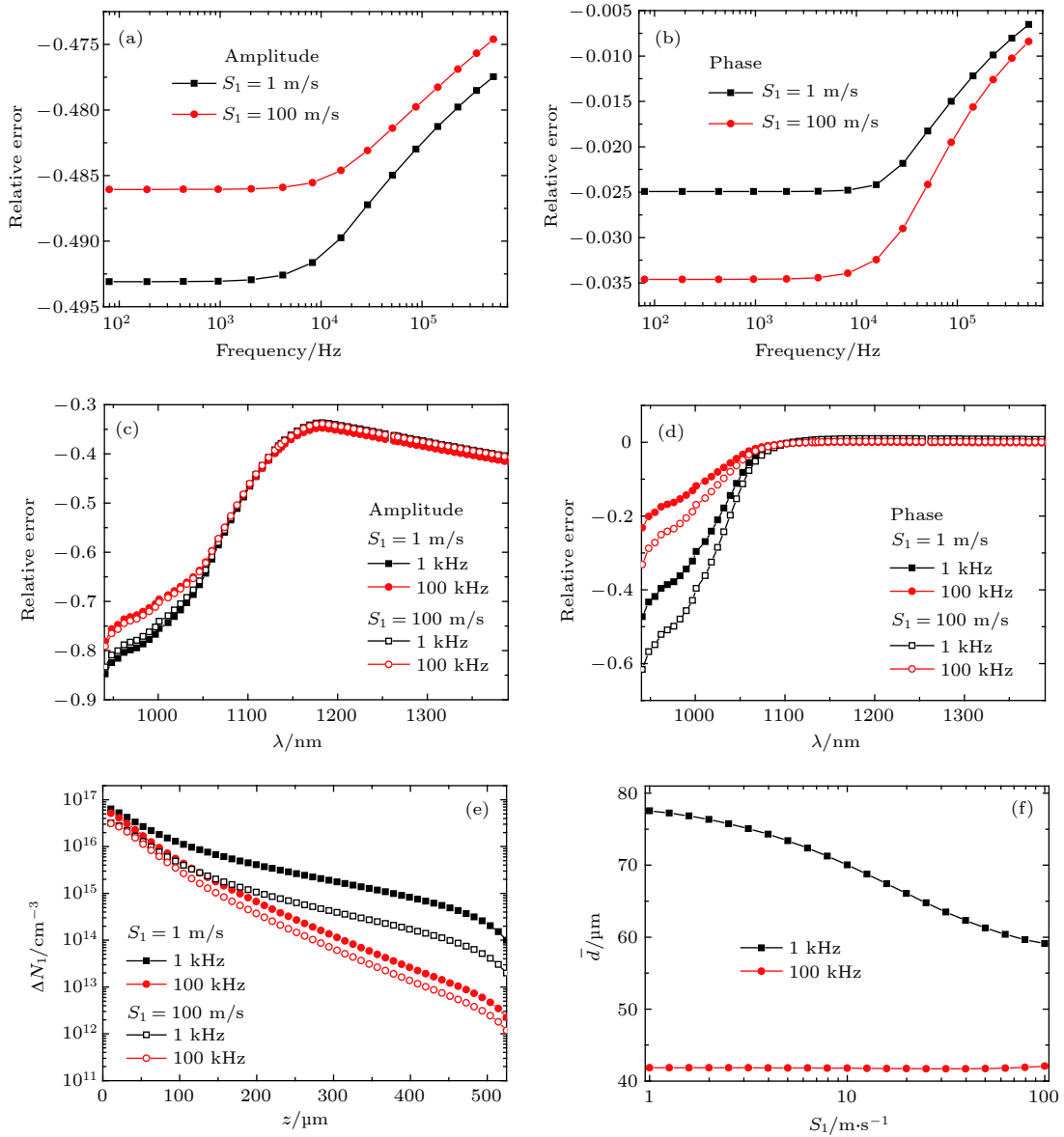


图 8 前表面复合速率变化时, PR 效应对 PCR 信号的影响

Fig. 8. Influence of PR on PCR signal for silicon wafers with different front surface recombination velocities.

子重吸收的影响增大, 且较为明显, 而短波范围内的变化并不明显; 对于 PL 信号相位, 在长波范围受 PR 的影响减小, 而短波范围内的影响增大. 对于 PCR 信号, 掺杂浓度增大时, PR 对其低频振幅和相位的影响均明显减小, 而对高频相位的影响减小程度较弱.

### 3.2 PR 对电子运输参数 ( $\tau$ , $D$ , $S_1$ ) 测量结果的影响

对于样品的电子运输参数, 传统的频率扫描 PCR 技术是通过多参数拟合方式将测量的数据拟合到相应理论模型中得到. 通过上述分析发现, 电子运输参数的不同会导致 PR 对 PCR 信号的影响

程度不同, 因此如果理论模型中忽略了 PR 效应, 拟合得到的电子运输参数将会产生误差, 偏离真实值. 为了分析这一影响, 我们仿真分析了传统未考虑 PR 效应时拟合得到的电子运输参数及其偏离真实值的情况. 首先采用更为完善的包含 PR 的模型计算相应数据, 然后采用未考虑 PR 的传统模型进行多参数拟合, 得到的电子运输参数通过公式  $(P_{pr} - P_0)/P_0$  计算相对误差, 其中  $P_{pr}$  和  $P_0$  分别为拟合和设置的电子运输参数值. 计算中, 样品掺杂浓度设置为  $N_D = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ , 载流子寿命设置为  $10\text{--}100 \mu\text{s}$ , 前表面复合速率设置为  $1\text{--}100 \text{ m/s}$ , 对于 p 型和 n 型样品, 扩散系数分别设置为  $12.5$  和  $35 \text{ cm}^2/\text{s}$ <sup>[10]</sup>, 其他参数设置不变. 图 10 给出了

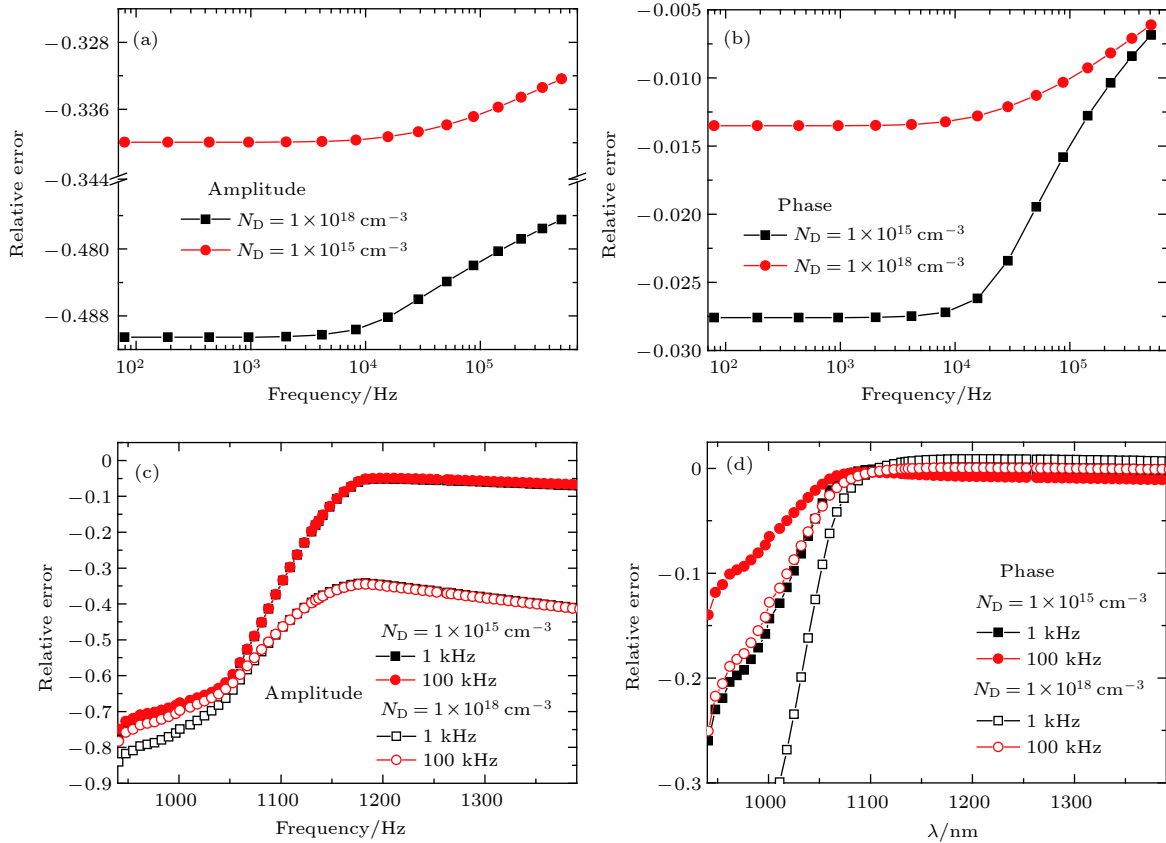


图 9 掺杂浓度变化时, PR 效应对 PCR 信号的影响

Fig. 9. Influence of PR on PCR signal for silicon wafers with different doping densities.

p 型样品的计算结果, 可以明显看出, 样品具有不同电子输运参数时, PR 对测量结果的影响具有较大的差别, 且对同一样品的不同电子输运参数测量结果的影响也各不相同. 对于载流子寿命较大的样品, 拟合的载流子寿命的相对误差较大, 而拟合的扩散系数和前表面复合速率的相对误差变化不大. 随着前表面复合速率的增大, 拟合的载流子寿命、扩散系数和前表面复合速率的相对误差均先减小后又有所增大. 从变化趋势上看, 拟合的扩散系数的相对误差随前表面复合速率的增大有所增大, 而拟合的载流子寿命和前表面复合速率的相对误差随前表面复合速率的增大有所减小. 比较三个电子输运参数的拟合误差发现, PR 对载流子扩散系数拟合结果的影响最小, 而对前表面复合速率的影响最大.

图 11 为 PR 对 n 型样品中电子输运参数测量结果的影响. 与 p 型样品结果比较发现, 二者的变化趋势基本一致. 由于载流子扩散系数的增大, PR 的影响将受载流子浓度的减小和平均深度的增大两个方面共同影响, n 型样品中 PR 对载流子寿

命和前表面复合速率的影响更大, 尤其对于高寿命和低表面复合速率的样品, 而对扩散系数的影响变化不大, 均在 10% 以下.

### 3.3 减小 PR 影响的方法

由于 PR 对电子输运参数的测量均具有一定的影响, 且影响程度不同, 为了减小这一影响, 可以从以下两个方面考虑: 一是采用含 PR 的理论模型进行多参数拟合, 二是在实验中采用合适的滤光片减小 PR 的影响. 图 12 给出了在探测器前加入长波通滤光片前后 PR 对 PCR 信号振幅和相位的影响, 其中滤光片的截止波长设置为 1100 nm. 从计算结果可以看出, 加入滤光片后 PR 的影响大大减小, 其中对相位的影响由原来未加入滤光片的负值变为正值, 表明加入滤光片后 PR 导致 PCR 相位滞后增大, 这一现象可以通过图 4 给出的 PR 对 PL 谱的影响进行解释, 加入长波通滤光片后, 滤除了对信号影响较大的短波范围辐射复合光, 因此减小了 PR 对信号的影响. 进一步对拟合的电子输运参数的影响进行分析发现, 对于  $\tau =$



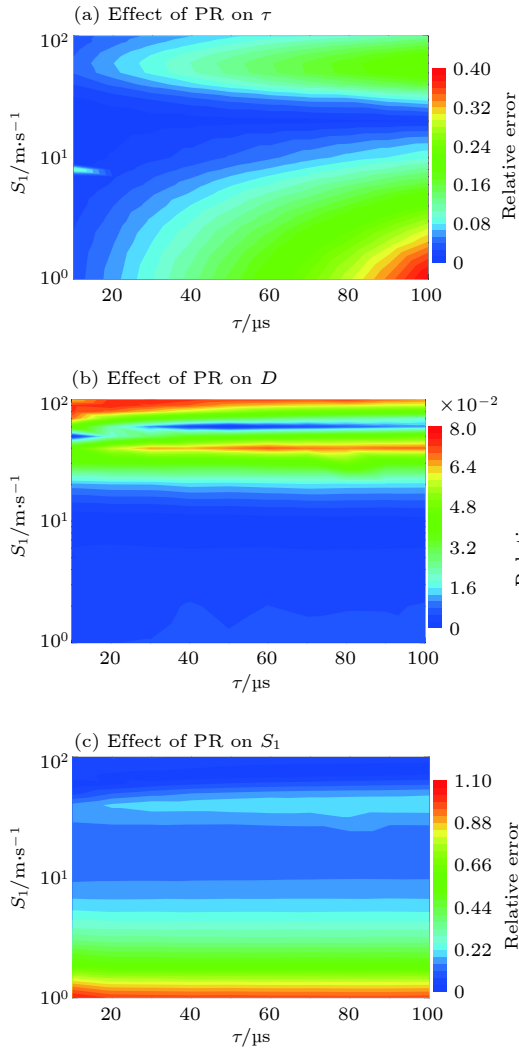


图 10 p 型单晶硅中 PR 对拟合的电子输运参数的影响 (a)  $\tau$ ; (b)  $D$ ; (c)  $S_1$

Fig. 10. Influence of PR on the fitted electronic transport parameters for p-type silicon wafers: (a)  $\tau$ ; (b)  $D$ ; (c)  $S_1$ .

50  $\mu\text{s}$ ,  $D = 20 \text{ cm}^2/\text{s}$ ,  $S_1 = 10 \text{ m/s}$  的样品, 加入滤光片前后拟合结果分别为 55.66  $\mu\text{s}$ , 19.98  $\text{cm}^2/\text{s}$ , 11.94  $\text{m/s}$  和 51.43  $\mu\text{s}$ , 20.19  $\text{cm}^2/\text{s}$ , 9.88  $\text{m/s}$ , PR 导致的拟合参数值的相对误差分别为 11.33%, 0.10%, 19.40% 和 2.86%, 0.95%, 1.23%. 尽管拟合的扩散系数的相对误差有所增大, 但均在 1% 以下, 而对载流子寿命和前表面复合速率的影响却大大减小. 可见, 在实验测量中加入合适滤光片可以有效减小 PR 对测量结果的影响. 然而, 在实际实验测量过程中, 使用滤光片时还需要考虑两个问题, 即滤光片的非理想透射谱的影响和滤光片对信号信噪比的影响. 前者可以通过理论仿真和实验测量方式加以详细分析, 后者可以通过优化信号收集装置和采用灵敏度更高的探测器 (如光电倍增

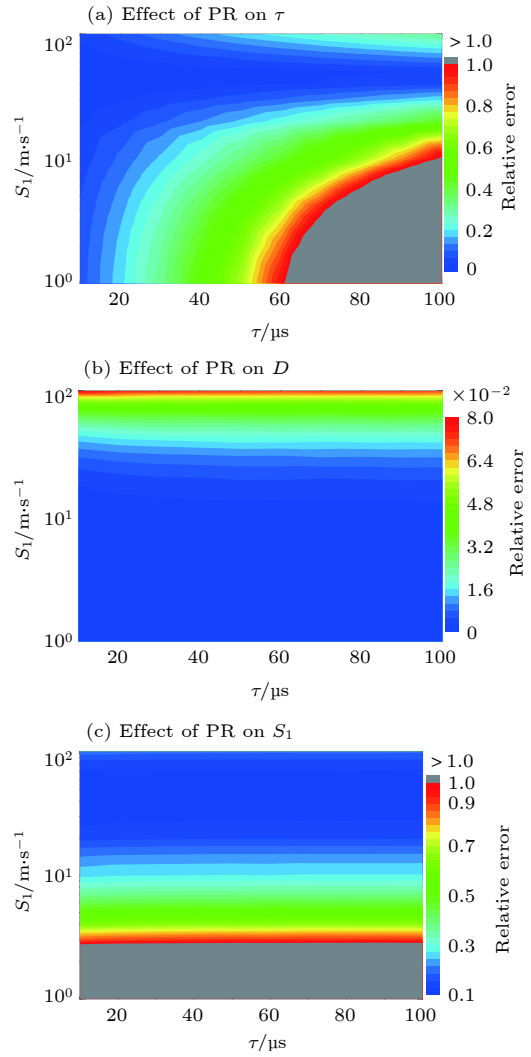


图 11 n 型单晶硅中 PR 对拟合的电子输运参数的影响 (a)  $\tau$ ; (b)  $D$ ; (c)  $S_1$

Fig. 11. Influence of PR on the fitted electronic transport parameters for n-type silicon wafers: (a)  $\tau$ ; (b)  $D$ ; (c)  $S_1$ .

管) 予以改善.

需要指出的是, 样品厚度和表面形貌及抽运光功率和波长等其他条件的变化同样会引起 PR 对频域 PCR 信号和多参数拟合结果影响程度的变化. 由于其变化规律与文献 [30] 中分析的 PR 对空间分辨 PCR 成像技术的影响结果类似, 此处不再详细分析.

## 4 结 论

本文以单晶硅材料为例, 详细分析了 PR 效应对传统频率扫描光载流子辐射信号及电子输运参数测量结果的影响. 基于含 PR 效应的频域 PCR 理论模型, 综合分析 PR 对室温 PL 谱和 PCR 信

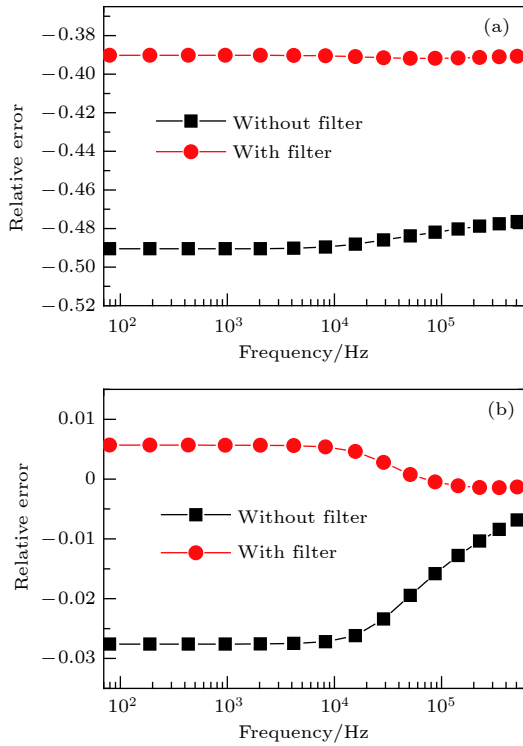


图 12 加入滤光片前后 PR 对 PCR 信号的影响

Fig. 12. Influence of PR on PCR signal with and without the filter.

号的影响及其与过剩载流子的关系, 结果表明, PR 效应对 PCR 信号的影响主要取决于样品的掺杂浓度、过剩载流子浓度及其纵向分布情况, 过剩载流子的纵向分布情况可以通过定义的平均深度进行定量表征. 由于过剩载流子浓度及其平均深度与电子输运参数密切相关, 文中详细分析了电子输运参数变化时 PR 对信号的影响, 并进一步分析了 PR 效应对不同样品拟合得到的电子输运参数的影响, 最后提出了减小 PR 影响的方法.

## 附录 A

通过求解三维载流子输运方程, 结合边界条件, 通过 Hankle 变换及逆变换可以得到光激发过剩载流子浓度为:

$$\Delta N_0(r, z) = \int_0^\infty [C_{10}e^{k_0z} + C_{20}e^{-k_0z} + C_{30}e^{-\alpha_{BB}z}] \times J_0(\xi r) \xi d\xi, \quad (\text{A1})$$

$$\Delta N_1(r, z, \omega) = \int_0^\infty [C_1e^{kz} + C_2e^{-kz} + C_3e^{-\alpha_{BB}z}] J_0(\xi r) \xi d\xi, \quad (\text{A2})$$

其中

$$C_{30} = \frac{-\alpha_{BB}P\eta(1-R_{\text{laser}})}{8\pi\hbar\omega_{\text{laser}}D(\alpha_{BB}^2-k_0^2)} e^{-\frac{\xi^2\alpha_1^2}{4}},$$

$$C_{10} = \frac{b_1 - b_2e^{-(\alpha_{BB}-k_0)L}}{A_1 - A_2e^{2k_0L}} C_{30},$$

$$C_{20} = \frac{A_2b_1e^{2k_0L} - A_1b_2e^{-(\alpha_{BB}-k_0)L}}{A_1 - A_2e^{2k_0L}} C_{30}, \quad (\text{A3})$$

$$C_3 = \frac{-\alpha_{BB}P\eta(1-R_{\text{laser}})}{2\pi^2\hbar\omega_{\text{laser}}D(\alpha_{BB}^2-k^2)} e^{-\frac{\xi^2\alpha_1^2}{4}},$$

$$C_1 = \frac{b_1 - b_2e^{-(\alpha_{BB}-k)L}}{A_1 - A_2e^{2kL}} C_3,$$

$$C_2 = \frac{A_2b_1e^{2kL} - A_1b_2e^{-(\alpha_{BB}-k)L}}{A_1 - A_2e^{2kL}} C_3, \quad (\text{A4})$$

和

$$A_1 = \frac{Dk - S_1}{Dk + S_1}, A_2 = \frac{Dk + S_2}{Dk - S_2},$$

$$b_1 = \frac{D\alpha_{BB} + S_1}{Dk + S_1}, b_2 = \frac{D\alpha_{BB} - S_2}{Dk - S_2}, \quad (\text{A5})$$

此处  $k_0^2 = \xi^2 + 1/(D\tau)$ ,  $k^2 = \xi^2 + (1 + i\omega\tau)/(D\tau)$ ,  $S_2$  为后表面复合速率,  $J_0(\xi r)$  为第一类零阶 Bessel 函数.

## 参考文献

- [1] Schroder D K 2006 *Semiconductor Material and Device Characterization Third Edition* (New York: Wiley) pp 389-390
- [2] Drummond P J, Bhatia D, Kshirsagar A, Ramani S, Ruzyllo J 2011 *Thin Solid Films* **519** 7621
- [3] Guidotti D, Batchelder J S, Finkel A, Gerber P D 1989 *J. Appl. Phys.* **66** 2542
- [4] Wang K, Kampwerth H 2014 *J. Appl. Phys.* **115** 173103
- [5] Ikari T, Salmick A, Mandelis A 1999 *J. Appl. Phys.* **85** 7392
- [6] Cheng J, Zhang S 1991 *J. Appl. Phys.* **70** 6999
- [7] Zhang X, Li B, Gao C 2006 *Appl. Phys. Lett.* **89** 112120
- [8] Wang Q, Liu W G, Gong L, Wang L G, Li Y Q 2018 *Acta Phys. Sin.* **67** 217201 (in Chinese) [王谦, 刘卫国, 巩蕾, 王利国, 李亚清 2018 物理学报 **67** 217201]
- [9] Mandelis A, Batista J, Shaughnessy D 2003 *Phys. Rev. B* **67** 205208
- [10] Li B C, Shaughnessy D, Mandelis A 2005 *J. Appl. Phys.* **97** 023701
- [11] Sun Q M, Melnikov A, Mandelis A, Pagliar R H 2018 *Appl. Phys. Lett.* **112** 012105
- [12] Liu J Y, Song P, Qin L, Wang F, Wang Y 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 087804 (in Chinese) [刘俊岩, 宋鹏, 秦雷, 王飞, 王扬 2015 物理学报 **64** 087804]
- [13] Wang Q, Li B C 2015 *J. Appl. Phys.* **118** 215707
- [14] Li B C, Shaughnessy D, Mandelis A, Batista J 2004 *J. Appl. Phys.* **95** 7832
- [15] Wang Q, Li B C, Ren S D, Wang Q 2015 *Int. J. Thermophys.* **36** 1173
- [16] Tai R, Wang C, Hu J, Mandelis A 2014 *J. Appl. Phys.* **116** 033706
- [17] Melnikov A, Mandelis A, Tolev J, Chen P, Huq S 2010 *J.*

- Appl. Phys.* **107** 114513
- [18] Liu J Y, Song P, Wang F, Wang Y 2015 *Chin. Phys. B* **24** 97801
- [19] Liu J Y, Mandelis A 2010 *J. Phys. Conf. Ser.* **214** 012107
- [20] Wang J, Mandelis A, Melnikov A, Hoogland S, Sargent E H 2013 *J. Phys. Chem. C* **117** 23333
- [21] Hu, L L, Liu M X, Mandelis A, Sun Q M, Melnikov A, Sargent E H 2018 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **174** 405
- [22] Trupke T 2006 *J. Appl. Phys.* **100** 063531
- [23] Schinke C, Hinken D, Schmidt J, Bothe K, Brendel R 2013 *IEEE J. Photovoltaics* **3** 1038
- [24] Nguyen H T, Rougieux F E, Baker-Finch S C, Macdonald D 2015 *IEEE J. Photovoltaics* **5** 77
- [25] Diab H, Arnold C, Lédée F, Trippé-Allard G, Delport G, Vilar C, Bretenaker F, Barjon J, Lauret J, Deleporte E, Garrot D 2017 *J. Phys. Chem. Lett.* **8** 2977
- [26] Giesecke J A, Kasemann M, Schubert M C, Würfel P, Warta W 2010 *Prog. Photovoltaics Res. Appl.* **18** 10
- [27] Mitchell B, Trupke T, Weber J W, Nyhus J 2011 *J. Appl. Phys.* **109** 083111
- [28] Pazos-Outón L M, Szumilo M, Lamboll R, Richter J M, Crespo-Quesada M, Abdi-Jalebi M, Beeson H J, Vručinić M, Alsari M, Snaith H J, Ehrler B, Friend R H, Deschler F 2016 *Science* **351** 1430
- [29] Xu Y, Tennyson E M, Kim J, Barik S, Murray J, Waks E, Leite M S, Munday J N 2018 *Adv. Optical Mater.* **6** 1701323
- [30] Wang Q, Liu W G 2017 *J. Appl. Phys.* **122** 165702
- [31] Zhang X R, Li B C, Liu X M 2008 *J. Appl. Phys.* **104** 103705

## Theoretical study on influence of photon reabsorption on photocarrier radiometric characteristics of silicon wafers\*

Wang Qian<sup>†</sup> Liu Wei-Guo Gong Lei Wang Li-Guo Li Ya-Qing Liu Rong

(School of Optoelectronic Engineering, Xi'an Technological University, Xi'an 710021, China)

(Received 23 October 2018; revised manuscript received 19 December 2018)

### Abstract

In microelectronic and photovoltaic industry, semiconductors are the base materials in which impurities or defects have a serious influence on the properties of semiconductor-based devices. The determination of the electronic transport properties, i.e., the carrier bulk lifetime ( $\tau$ ), diffusion coefficient ( $D$ ) and front surface recombination velocity ( $S_1$ ), is important in the evaluation of semiconductor materials. In this paper, the influence of reabsorption of spontaneously emitted photons within silicon wafers on conventional frequency domain photocarrier radiometric (PCR) is theoretically analyzed. The model with photon reabsorption, proposed by our previous paper, in which both band-to-band absorption and free carrier absorption are taken into account, is used. It is shown that the influence strongly depends on not only the doping level, but also the excess carrier density and its distribution, which are sensitive to the electronic transport properties. The influences of photon reabsorption on PCR amplitude and phase increase with doping level and carrier lifetime increasing. While, as the diffusion coefficient and the front surface recombination velocity increase, the influence of photon reabsorption on PCR amplitude decreases but on PCR phase increases. If photon reabsorption is ignored in the determination of the electronic transport parameters for high-doping silicon wafers via multi-parameter fitting, there are large errors for the fitted results. For a sample with  $\tau = 50 \mu\text{s}$ ,  $D = 20 \text{ cm}^2/\text{s}$ , and  $S_1 = 10 \text{ m/s}$ , if the effect of photon reabsorption is ignored, the fitting results with conventional PCR model are  $55.66 \mu\text{s}$ ,  $19.98 \text{ cm}^2/\text{s}$ , and  $11.94 \text{ m/s}$ , and the corresponding deviations from the true value are 11.33%, 0.10%, and 19.40%, respectively. In addition, simulation results show the effect of photon reabsorption can be greatly reduced with a suitable filter in front of the detector, while still enabling the majority of the emitted signal to be captured. For example, with a 1100 nm long-pass filter, the fitted results for the same sample above are  $51.43 \mu\text{s}$ ,  $20.19 \text{ cm}^2/\text{s}$ , and  $9.88 \text{ m/s}$  with the relative errors of 2.86%, 0.95%, and 1.23%, respectively. It should be pointed out that an infinitely steep cut-on edge of the long-pass filter is assumed in our simulations, while in fact the influences of the filter on PCR signal and the fitted results should be further considered.

**Keywords:** photocarrier radiometric, photon reabsorption, electronic transport parameters, free carrier absorption, silicon wafers

**PACS:** 72.20.Jv, 42.25.Bs, 78.20.nb

**DOI:** 10.7498/aps.68.20181889

\* Project supported by the Young Scientists Fund of the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 61704132, 61501363), Xi'an Intelligent Visiting Perception Key Laboratory Project (Grant No. 201805061ZD12CG45), and Principal Fund from Xi'an Technological University (Grant Nos. XAGDXJJ16007, XAGDXJJ18001).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: qian\_wang521@163.com