

Исследование влияния метастабильного состояния гелия на концентрацию атомарного кремния.

СТРУНИН ВЛАДИМИР ИВАНОВИЧ

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского (Омск), Россия
e-mail: strunin@omsu.ru

ХУДАЙБЕРГЕНОВ ГАМЗАТ ЖАПАРОВИЧ

Omsk State University of F.M. Dostoevsky State University of F.M. Dostoevsky (Omsk), Россия
e-mail: hudaiber@omsu.ru

БАРАНОВА ЛАРИСА ВАСИЛЬЕВНА

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского (Омск), Россия

УДК 533.92

Исследование влияния метастабильного состояния гелия на концентрацию атомарного кремния.

В.И. Струнин, Г.Ж. Худайбергенов

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, г. Омск, Россия

Основными механизмами потери мощности современных солнечных элементов являются: неспособность поглотить фотоны с энергией меньшей, чем ширина запрещенной зоны и термализация фотона с энергией, превышающая ее. Для решения этой проблемы есть несколько подходов, один из них создание структуры состоящей из однокристалльных наночастиц кремния (Si-NPs) внедренных в различные покрытия – третье поколение солнечных элементов [1]. Кремниевые наночастицы образуют структуру квантовых точек (QD). Матрица квантовых точек выступает как дополнительный слой поглощения высокоэнергетичных фотонов, что позволяет регулировать ширину запрещенной зоны, снизить влияние эффекта Стеблера-Вронски, в итоге, повысить КПД солнечных элементов [2, 3].

Одним из методов создания покрытий с Si-NPs в поверхности пленки a-Si:H, является метод лазерного пиролиза [4]. В качестве исходных газов используется смесь SiH₄+H₂, а также гелий. Добавления в плазму He позволяет получать атомы Si, из которых формируются кремниевые наночастицы, через реакции долгоживущих возбужденных состояний He с молекулами силана (SiH₄) [5]. Для определения условий формирования Si-NPs необходимо провести численное моделирование разложения силана в плазме тлеющего разряда в зависимости от доли гелия в исходной смеси.

В данной работе проведено численное моделирование ВЧ емкостного разряда в смеси газов He+Ar+5%SiH₄. Добавление гелия в исходную смесь Ar+5%SiH₄ позволяет, во-первых – увеличить выход Si в процессе диссоциации силана, а, во-вторых, снизить вероятность образования микрочастиц, которые будут полимеризоваться в плазме через продукты распада силана. Анализ констант скоростей реакций, протекающих в плазме ВЧ емкостного разряда, показал, что можно ограничиться 24-я компонентами: SiH₄, Ar, Ar^m, He, He^m, H, H₂, Si, SiH_m=1-3, Si₂H_y=3-6, Si₂H_x=7,8, Si₂H₆^{*}, Si₂H₆^{**}. Численное моделирование физико-химических

процессов проводилось с использованием программы Diff_2D [9] для цилиндрического реактора с размерами $L = 3.0$ см, $R=3.5$ см, при общем давлении газа $p=0.25 \dots 0.75$ Торр, температуре $T=500$ К и частоте генерации ВЧ электромагнитного поля $f=13.56$ МГц. Концентрация электронов задана параметрически и составляет $n_e=10^8$ см⁻³. Моделирование электронной компоненты проводилось с помощью программы Kinetica [10]. Метод расчета подробно описан в [11].

Моделирование физико-химических процессов в аргон-гелий-силановой плазме ВЧ емкостного разряда в данной работе ориентировано на определение условий генерации атомарного кремния.

В результате численных экспериментов, получены концентрации всех основных компонент в $He+(Ar+5\%SiH_4)$ плазме ВЧ емкостного разряда. На рис.1 представлены концентрации радикалов SiH_4 и Si от времени, $p=0.25$ Торр и 10% доли гелия в смеси. Такие компоненты как SiH , SiH_2 быстро (≈ 0.1 мс) выходят на равновесные концентрации, тогда как SiH_3 (силлил) медленно достигает равновесного значения (≈ 0.4 мс).

Рис. 1. Зависимость концентраций силановых радикалов и кремния от времени.

Рис. 2. Зависимость концентраций кремния от времени, для разной доли гелия в смеси.

Концентрация кремния, не достигает своего равновесного уровня, причем, чем выше время пребывания газа в активной зоне разряда, тем выше будет концентрация кремния в плазме. Продолжительное нахождение SiH , SiH_2 в плазме будет способствовать образованию Si_yH_n ($y > 5$) с последующим образованием «пыли» [11]. На рис.2 видно, что концентрация Si в плазме тлеющего разряда ($p=0.25$ Торр) с ростом доли He в смеси снижается, что можно объяснить со снижением эффективности возбуждения метастабильных уровней He (порог реакции составляет около 19.8 эВ). Наличие такой информации позволит регулировать концентрацию кремния в растущей пленке, за счет изменения доли гелия в смеси и времени пребывания плазмы в активной зоне разряда.

Таким образом, по результатам численных расчетов могут быть сделаны следующие выводы:

- добавление в $Ar+SiH_4$ плазму гелия приводит к увеличению концентрации Si , вследствие образования дополнительного канала разложения силана через реакции с метастабильными атомами гелия;
- увеличение доли He в исходной смеси $Ar+SiH_4$ снижает долю кремния в плазме из-за снижения эффективности возбуждения $He(m)$;
- при уменьшении давления относительная доля Si увеличивается, что объясняется повышением роли диссоциации силана через реакции с метастабильными атомами аргона и гелия.

Определены условия генерации Si , которые позволят управлять формированием Si -NPs в пленках аморфного кремния, например, за счет изменения доли гелия в смеси и времени пребывания плазмы в активной зоне разряда.

Список литературы

G. Conibeer et al. Silicon nanostructures for third generation photovoltaic solar cells // Thin Solid Films 511– 512 (2006) 654–662

Song Joo Hyung Park and Jinsoo. Study on the Fabrication of Silicon Nanoparticles in an Amorphous Silicon. // Journal of the Korean Physical Society. ? 2012. ? Т. 60, 12. ? С. 2054-2057.

Eun-Chel Cho, Sangwook Park, et al. Silicon quantum dot/crystalline silicon solar cells. // Nanotechnology. ? 2008. ? Т. 19, 245201.

M. Cazzanelli, D. Navarro-Urriys, et al. Optical gain in monodispersed silicon nanocrystals. // J. App. Phys. ? 2004. ? Т. 96, 6. — С. 3164-3171.

X. D. Pi, R. W. Liptak, et al. Air-stable full-visible-spectrum emission from silicon nanocrystals synthesized by an all-gas-phase plasma approach. // Nanotechnology. ? 2008. ? Т. 19, 245603.

Tsuji M., Kobara K. et al. Dissociative excitation of SiH₄ by collisions with metastable argon atoms. // Chem. Phys. Lett. 1989. Vol. 155. P. 481-485

Yoshida H., Morishima Y. et al Cross sections for deexcitation of He(23S, 21S and 21P) by SiH₄ and GeH₄. // Chem. Phys. Lett. 1991. Vol. 176. P. 173?177

Pullen, T. Carlson. Photoelectron Spectra of Methane, Silane, Germane, Methyl Fluoride, Difluoromethane, and Trifluoromethane. // J. Chem. Phys. 1970. Vol. 53. P. 768-775

Ляхов А.А. Худайбергенов Г.Ж. Свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ № 2001611224 «Diff_2D». ?2001.

Ляхов А.А., Худайбергенов Г.Ж. // Свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ № 2001611223 «Kinetica»(2001)

Струнин В.И., Ляхов А.А., и др. // ЖТФ. 2002. Т. 72. Вып. 6. С. 109?114

«Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта №16-42-550936 р_а»