

Analyse der winkelabhängigen spektralen Lumineszenzemission von Silizium-Wafern

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	2
2	Hinweise zu Versuchen und Auswertung	2
3	Lumineszenzemission von Siliziumhalbleitern	3
3.1	Rekombination	3
3.2	Spektralverteilung der Lumineszenzstrahlung	4
3.2.1	Generationsrate	4
3.2.2	Detektionswahrscheinlichkeit	5
4	Versuchsaufbau	9
4.1	Spektrometer	9
4.1.1	Kalibrierung des Spektrometers	10
4.2	Computergesteuerte Datenerfassung	11
4.3	Arbeits- und Sicherheitshinweise	12
5	Versuche	12
5.1	Voruntersuchungen	12
5.2	Winkelabhängige PL-Messungen	13
5.3	Weitere Auswertungen	13

1 Einleitung

Die winkelabhängige Spektralverteilung der Lumineszenzemission von Silizium-Wafern gibt Aufschluss über optische Eigenschaften der Probe und ihre Temperatur. Spektral aufgelöste winkelabhängige Messungen bilden die Grundlage für kamerabasierte Verfahren der Lumineszenzanalyse von Solarzellen, die sich in den letzten Jahren zu einem Standard-Verfahren der Solarzellencharakterisierung entwickelt haben. Für die Interpretation solcher Lumineszenzbilder ist ein Verständnis der zugrundeliegenden physikalischen Effekte unumgänglich. In diesem Versuch untersuchen Sie die Lumineszenzemission von verschiedenen Silizium-Wafern spektral aufgelöst und als Funktion des Detektionswinkels und vollziehen die Messergebnisse anhand von physikalischen Modellen nach. Gleichzeitig erlernen Sie in diesem Versuch die Kalibrierung des verwendeten Spektrometers, die eine Voraussetzung für korrekte Messergebnisse ist. Der Versuch gliedert sich in drei Teile:

- Im ersten Teil befassen Sie sich mit dem Spektrometer, das zur Messung der Lumineszenzemission eingesetzt werden soll. Sie bestimmen die optimalen Parameter für Ihre Messungen und kalibrieren das Gerät mit Hilfe einer Referenzlampe bezüglich spektraler Bestrahlungsstärke. Außerdem validieren Sie die von Ihnen vorgenommene Kalibrierung.
- Im zweiten Teil nehmen Sie Lumineszenzspektren von verschiedenen Silizium-Wafer unter verschiedenen Detektionswinkeln auf.
- Im dritten Teil verwenden Sie physikalische Modelle, um die gemessenen Lumineszenzspektren quantitativ zu analysieren.

2 Hinweise zu Versuchen und Auswertung

- Zur Vorbereitung auf den Versuch lesen Sie bitte diese Versuchsanleitung. Das Verständnis der Grundlagen, die in dieser Anleitung beschrieben werden, hilft Ihnen bei der Durchführung und Auswertung des Versuchs.
- Zu Beginn des Versuchs machen wir ein Testat, wo Sie auch die Möglichkeit haben, offene Fragen zu besprechen.
- Lesen Sie **vor** Beginn Ihrer Messungen die **gesamte** Versuchsanleitung und überlegen Sie, ob Sie anhand der vorgeschlagenen Messungen alle Fragen beantworten können oder ob Sie weitere Messungen durchführen müssen. Es ist empfehlenswert, vorab eine „Versuchsplanung“ durchzuführen.
- Nach Abschluss des Versuchs geben Sie bitte **zwei** Dokumente ab:
 1. Verfassen Sie ein Versuchsprotokoll. Das Versuchsprotokoll soll nicht die Fragen dieser Anleitung beantworten, sondern die durchgeführten Messungen vollständig und nachvollziehbar dokumentieren. Als Kriterium für „vollständig und nachvollziehbar“ gilt: Anhand Ihrer Dokumentation muss es möglich sein, den Versuch unter gleichen Bedingungen zu wiederholen und die Ergebnisse zu reproduzieren. Notieren Sie sich daher bereits während des Versuchs alle relevanten Parameter und Einstellungen sowie alle Messergebnisse (ggf. Name der Datei, unter der diese abgespeichert wurden) und nehmen Sie diese in Ihr Protokoll auf. Eine stichwortartige Dokumentation (auch handschriftlich) ist ausreichend. Fügen Sie das Versuchsprotokoll Ihrem Praktikumsbericht bei.
 2. Verfassen Sie zusätzlich zum Versuchsprotokoll einen Praktikumsbericht. Ihr Praktikumsbericht soll die in dieser Anleitung gestellten Fragen beantworten und die Ergebnisse diskutieren. Bitte verfassen Sie den Praktikumsbericht als geschlossenen, strukturierten Text und wählen Sie eigene Überschriften. Orientieren Sie sich dabei an den Fragen der Praktikumsanleitung. Eine reine Auflistung der bearbeiteten Punkte ist jedoch nicht erwünscht.
- Zur Durchführung des Versuchs stehen Ihnen unser Messaufbau sowie ein Arbeitsplatz mit PC zur Verfügung. Es ist empfehlenswert, bereits während der Laborphase mit der Auswertung der Daten zu beginnen.
- Es ist ausdrücklich erwünscht, dass Sie sich die für die Versuchsdurchführung benötigten Informa-

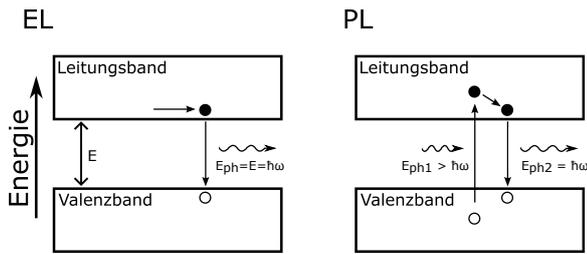


Abb. 1: Schematische Darstellung von Elektrolumineszenz und Photolumineszenz im Bändermodell.

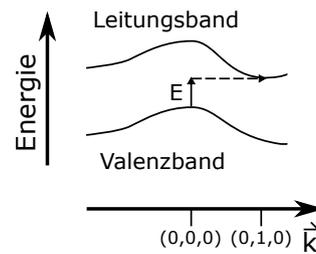


Abb. 2: Bandstruktur von Silizium im Impulsraum.

tionen selbst beschaffen, sofern Sie diese nicht in dieser Anleitung finden. Dazu können Sie z.B. einen Blick in die zitierte Literatur werfen.

- Geben Sie **begründete** Abschätzungen der Messunsicherheiten an. Geben Sie dazu bitte immer an, welche Unsicherheiten Sie für die Messgrößen annehmen und warum, und über welchen Zusammenhang Sie die Unsicherheit der zu bestimmenden Größen ermitteln.
- Gehen Sie sorgsam mit den zur Verfügung gestellten Proben sowie dem Messaufbau um. Im Zweifelsfall fragen Sie Ihren Betreuer.

3 Lumineszenzemission von Siliziumhalbleitern

Solarzellen absorbieren einfallendes Licht und wandeln es in einen elektrischen Strom um. Dabei regen die absorbierten Photonen Ladungsträger aus dem Valenzband ins Leitungsband an. Es entstehen Elektron-Loch-Paare, die in der Solarzelle voneinander getrennt werden. Werden die beiden Kontakte der Solarzelle miteinander verbunden, fließt ein elektrischer Strom.

Die Emission von Lumineszenzstrahlung, die Sie in diesem Versuch analysieren, ist der Umkehrprozess der Absorption von einfallendem Licht. Hierbei rekombinieren Elektron-Loch-Paare strahlend unter Aussendung eines Photons, wie in Abbildung 1 schematisch im Bändermodell dargestellt. Man unterscheidet sprachlich zwei Formen der Anregung der Lumineszenzstrahlung: Werden die Ladungsträger über Kontakte ins Leitungsband injiziert (nur bei Solarzellen möglich, aber nicht bei Wafern), spricht man von Elektrolumineszenz (EL). Werden Ladungsträger durch Beleuchtung optisch aus dem Valenzband ins Leitungsband angeregt, spricht man von Photolumineszenz (PL). Die Art der Anregung hat auf die anschließende strahlende Rekombination keinen Einfluss.

3.1 Rekombination

Silizium ist ein *indirekter Halbleiter*, d.h. seine Bandstruktur ermöglicht keine direkten Übergänge vom energetischen Minimum des Leitungsbandes zum energetischen Maximum des Valenzbandes oder umgekehrt, da diese im Impulsraum voneinander getrennt sind (siehe Abb. 2). Aus diesem Grund muss bei jedem Übergang nicht nur Energie in Form von Photonen übertragen werden, sondern auch ein Impuls \vec{k} . Dieser Impulsübertrag wird durch die Absorption oder Emission von *Phononen* (quantisierten Gitterschwingungen des Siliziumkristalls) bereitgestellt. Da also mehr als ein Teilchen an solchen Übergängen beteiligt ist, ist die strahlende Rekombination in indirekten Halbleitern unwahrscheinlicher als in direkten Halbleitern, bei denen Valenzbandmaximum und Leitungsbandminimum übereinander liegen und bei denen deshalb keine Phononen an den Übergängen beteiligt sein müssen. (Dies ist auch einer der Gründe, warum man keine LEDs aus Silizium baut.)

Neben der strahlenden Rekombination, die sich als fundamentaler Prozess nicht unterdrücken lässt, gibt es noch andere Prozesse, durch die Elektron-Loch-Paare (nicht-strahlend) rekombinieren: Rekombination über Störstellen im Kristall, die zu erlaubten Energieniveaus in der Bandlücke führen, wird als *Shockley-Read-Hall* (SRH)-Rekombination bezeichnet. Daneben haben angeregte Ladungsträger

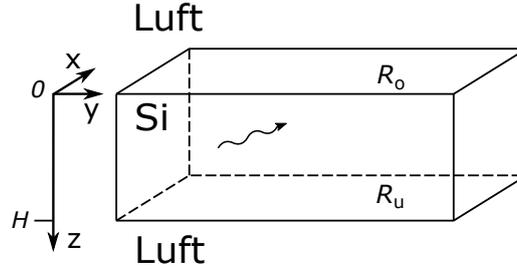


Abb. 3: Schematische Darstellung der betrachteten Siliziumprobe.

im Leitungsband auch die Möglichkeit, ihre Energie an einen anderen Ladungsträger im Leitungsband abzugeben, der dann seinerseits auf ein höheres Energieniveau im Leitungsband angeregt wird und die Möglichkeit hat, den Kristall zu verlassen oder seine Energie thermisch an den Kristall abzugeben. Dieser Prozess wird als *Auger-Rekombination* bezeichnet.

3.2 Spektralverteilung der Lumineszenzstrahlung

Die außerhalb der Probe detektierbare Spektralverteilung der Lumineszenzemission wird durch zwei Faktoren bestimmt: Zum einen durch die Rate der Generation von Lumineszenzphotonen r_{ph} , die von der Wellenlänge der Lumineszenzphotonen abhängig und im Allgemeinen auch ortsabhängig ist; zum anderen durch die Wahrscheinlichkeit f_{det} , mit der Lumineszenzphotonen die Probe verlassen und detektiert werden können. Für die in diesem Versuch verwendeten Wafer können wir davon ausgehen, dass sie in den Bereichen, aus denen die mit dem Spektrometer detektierte Lumineszenzstrahlung stammt, in Bezug auf ihre elektrischen und optischen Eigenschaften lateral homogen sind. Der den Detektor treffende Lumineszenzphotonenfluss $\phi(\lambda)$ ist dann gegeben durch

$$\phi(\lambda, \gamma) = \int_0^W dz r_{\text{ph}}(\lambda, z) f_{\text{det}}(\lambda, \gamma, z), \quad (1)$$

wobei λ die Wellenlänge bezeichnet, γ den Detektionswinkel und W die Dicke der Probe (siehe Abb. 3).

3.2.1 Generationsrate

Die Rate r_{ph} der Generation von Lumineszenzphotonen ist durch das erweiterte Plancksche Strahlungsgesetz [1] gegeben, welches auch nicht-thermische Strahlung beschreibt. Das erweiterte Plancksche Strahlungsgesetz berücksichtigt, dass Leitungs- und Valenzband aufgrund der Anregung bzw. Injektion von Ladungsträgern jeweils ein eigenes sog. *Quasi-Fermi-Niveau* haben, durch das die Besetzung der Zustände im Band beschrieben wird. Dies ist möglich, da Thermalisierungsprozesse innerhalb eines Bandes um einige Größenordnungen schneller ablaufen als Rekombinationsprozesse zwischen den Bändern. Deshalb befinden sich Valenz- und Leitungsband in Bezug auf die Rekombination in einem quasi-statischen Zustand. Die Rate $r_{\text{ph}}(\lambda, z)$ ist gegeben durch

$$r_{\text{ph}}(\lambda, z) = \alpha(\lambda) 8\pi c n_{\text{Si}}^2(\lambda) \lambda^{-4} \left[\exp\left(\frac{hc}{\lambda} - \mu_{\text{ph}}(z)\right) - 1 \right]^{-1}, \quad (2)$$

wobei α den Absorptionskoeffizienten von Silizium bezeichnet, c die Lichtgeschwindigkeit im Vakuum bezeichnet, n_{Si} den Brechungsindex (Realteil) von Silizium, h die Planck-Konstante, k die Boltzmann-Konstante, T die absolute Temperatur der Probe (in Einheiten von Kelvin) und μ_{ph} das *chemische Potential* der Lumineszenzphotonen, das durch die Aufspaltung (also den energetischen Abstand) der Quasi-Fermi-Niveaus gegeben ist. Die Emission der Lumineszenzphotonen im Halbleiter ist isotrop, d.h. gleichmäßig in alle Richtungen zufällig verteilt. Lumineszenzstrahlung ist daher auch unpolarisiert.

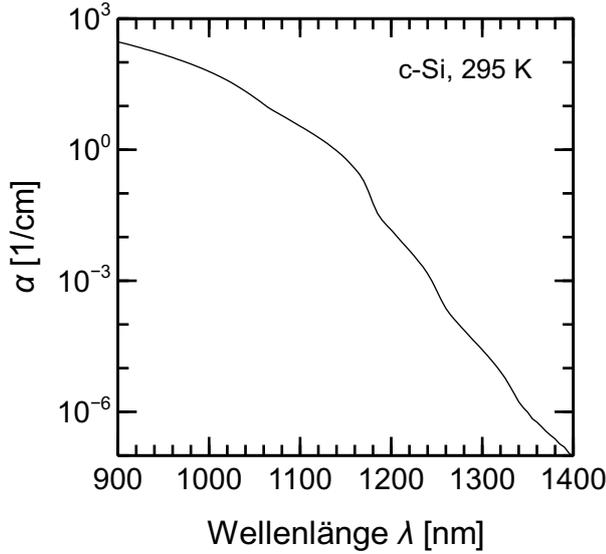


Abb. 4: Absorptionskoeffizient von kristallinem Silizium bei 295 K.

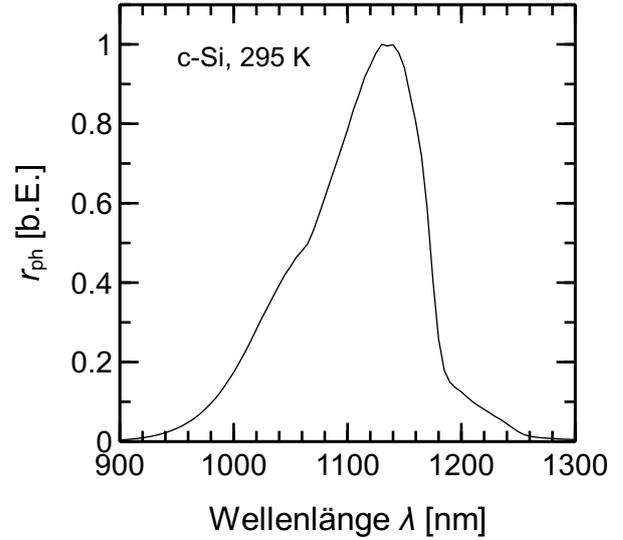


Abb. 5: Normierte Lumineszenzphotonengenerationsrate bei 295 K.

Für die in diesem Versuch verwendeten Waferproben lässt sich Gl. (2) vereinfachen. Der Exponentialterm ist unter typischen Lumineszenz-Messbedingungen einige Größenordnungen größer als 1, weshalb die -1 vernachlässigt werden kann. Die Aufspaltung der Quasi-Fermi-Niveaus und damit μ_{ph} hängen von der Ladungsträgerverteilung in der Probe ab. Da wir Wafer mit gut passivierten Oberflächen und großer Ladungsträgerlebensdauer verwenden, verteilen sich die Ladungsträger per Diffusion nahezu gleichmäßig über die Tiefe der Probe, sodass wir $\mu_{\text{ph}}(z) = \mu_{\text{ph}}$ annehmen können. Der Brechungsindex n_{Si} zeigt im für uns relevanten Wellenlängenbereich von etwa 1000 bis 1300 nm nur eine kleine Änderung über die Wellenlänge [2], die wir vernachlässigen können. Mit diesen Näherungen erhalten wir

$$r_{\text{ph}}(\lambda) \approx C \times \frac{\alpha(\lambda)}{\lambda^4} \exp\left(-\frac{hc}{\lambda kT}\right), \quad (3)$$

wobei wir alle nicht von der Wellenlänge abhängigen Terme in einer Proportionalitätskonstante C zusammengefasst haben. Der Wert von C ist für uns unwichtig, da wir die Spektralverteilung der Lumineszenzemission nur relativ bestimmen. Abbildung 4 zeigt den Absorptionskoeffizienten von kristallinem Silizium [3] in dem für diesen Versuch interessanten Wellenlängenbereich, Abbildung 5 zeigt die resultierende normierte Rate der Generation von Lumineszenzphotonen. Das Maximum der Verteilung liegt bei etwa 1130 nm, unterhalb von 900 nm und oberhalb von 1300 nm ist die Generation näherungsweise 0.

3.2.2 Detektionswahrscheinlichkeit

In der Probe generierte Lumineszenzphotonen müssen diese in Richtung des Detektors verlassen, um zum messbaren Lumineszenzphotonenfluss beizutragen. Auf ihrem Weg in Richtung Detektor können sie in der Probe reabsorbiert und an der Oberfläche zurück in die Probe reflektiert werden. Beide Effekte müssen wir betrachten, um den messbaren Lumineszenzphotonenfluss zu beschreiben. Die Reabsorption ist durch das bekannte Lambert-Beersche Absorptionsgesetz gegeben:

$$\phi(\vec{r} + \Delta\vec{r}) = \phi(\vec{r}) \left(1 - \exp(-\alpha \Delta\vec{r})\right). \quad (4)$$

An der Oberfläche wird der Anteil R der Photonen reflektiert, während der Anteil $1 - R$ durch die Oberfläche transmittiert wird. Die reflektierten Photonen können wiederum reabsorbiert oder an der

gegenüberliegenden Oberfläche wieder mit der Wahrscheinlichkeit R zurückreflektiert werden usw. Unter Berücksichtigung von Reabsorption und unendlich vielen Reflexionen in der Probe ergibt sich dann die Wahrscheinlichkeit, mit der ein Photon den Detektor trifft.

Die Detektionswahrscheinlichkeit hängt von der Oberflächenbeschaffenheit des Wafers ab. Wir betrachten zwei Fälle:

Planare Oberflächen Planare Oberflächen reflektieren die Photonen unter dem Winkel, unter dem sie auf die Oberfläche treffen. Die Generation von Lumineszenzphotonen ist isotrop, d.h. die Photonen werden am Ort der Generation zufällig in alle Richtungen emittiert. Wenn wir die Lumineszenzstrahlung senkrecht zur Oberfläche detektieren ($\gamma = 0$), können näherungsweise nur diejenigen Photonen zum messbaren Photonfluss beitragen, die sich schon in der Probe senkrecht zur Oberfläche bewegen. Bei einer Generation in der Tiefe z erreichen diese Photonen die Oberfläche mit einer Wahrscheinlichkeit $\exp(-\alpha z)$. An der Oberfläche werden sie mit einer Wahrscheinlichkeit $1 - R$ transmittiert und erreichen den Detektor oder werden mit einer Wahrscheinlichkeit R zurückreflektiert. Falls dies der Fall ist, erreichen sie mit einer Wahrscheinlichkeit von $R \exp(-2\alpha W)$ zum zweiten Mal die Oberfläche, wo sie wieder transmittiert oder reflektiert werden können usw. Setzt man diese Reihe fort und nutzt den Grenzwert der unendlichen geometrischen Reihe [4] aus, so ergibt sich

$$f_{\text{det}}(\lambda, z, \gamma = 0) = (1 - R) \frac{\exp(-\alpha(\lambda)z) + R \exp(-\alpha(\lambda)(2W - z))}{1 - R^2 \exp(-2\alpha(\lambda)W)}. \quad (5)$$

Der Reflexionsgrad R der Oberflächen ergibt sich aus dem Fresnel-Gesetz für senkrechten Einfall,

$$R = \left(\frac{n_{\text{Si}} - n_{\text{Luft}}}{n_{\text{Si}} + n_{\text{Luft}}} \right)^2, \quad (6)$$

dem Brechungsindex von Luft ($n_{\text{Luft}} \approx 1$) und dem Brechungsindex von Silizium ($n_{\text{Si}} \approx 3,6$) zu $R \approx 0,32$. Da n_{Si} wie oben erwähnt im für uns relevanten Wellenlängenbereich kaum variiert, wird die Wellenlängenabhängigkeit von R in Gl. (5) und (6) vernachlässigt.

Um die Detektionswahrscheinlichkeit für einen Winkel $\gamma \neq 0$ zu beschreiben, müssen in Gl. (5) zwei Erweiterungen vorgenommen werden: Damit Photonen den Detektor treffen, müssen sie die Probe unter dem Winkel γ verlassen. Damit dies geschieht, müssen sie sich in der Probe unter einem Winkel β zur Oberfläche bewegen. Die Winkel β und γ hängen über das Snellius'sche Brechungsgesetz zusammen:

$$n_{\text{Luft}} \sin(\gamma) = n_{\text{Si}} \sin(\beta). \quad (7)$$

Für $\gamma \neq 0$ bewegen sich die Photonen also unter einem Winkel $\beta \neq 0$, wodurch sich ihr Weg in der Probe um einen Faktor $1/\cos(\beta)$ verlängert. Wir müssen also die Ersetzungen $z \rightarrow z/\cos(\beta)$ sowie $W \rightarrow W/\cos(\beta)$ vornehmen. Aufgrund des schrägen Einfalls der Photonen auf die Oberfläche kann außerdem nicht mit Gl. (6) gearbeitet werden, die nur den Spezialfall des senkrechten Lichteinfalls auf eine Oberfläche beschreibt. Die allgemeine Form der Gleichung für nichtmagnetische Materialien (magnetische Permeabilität $\mu = 1$) lautet

$$r_s = \frac{N_{\text{Luft}} \cos(\gamma) - N_{\text{Si}} \cos(\beta)}{N_{\text{Luft}} \cos(\gamma) + N_{\text{Si}} \cos(\beta)}, \quad (8)$$

$$r_p = \frac{N_{\text{Si}} \cos(\gamma) - N_{\text{Luft}} \cos(\beta)}{N_{\text{Si}} \cos(\gamma) + N_{\text{Luft}} \cos(\beta)}. \quad (9)$$

Hierbei sind N_{Luft} und N_{Si} die *komplexen* Brechungsindizes $N = n + i\kappa$ der Materialien und r_s sowie r_p die Reflexionskoeffizienten für senkrecht und **p**arallel polarisiertes Licht. Sowohl für Luft als auch für Silizium (im für uns relevanten Wellenlängenbereich) gilt, dass der *Extinktionskoeffizient* $\kappa = \alpha\lambda/(4\pi)$

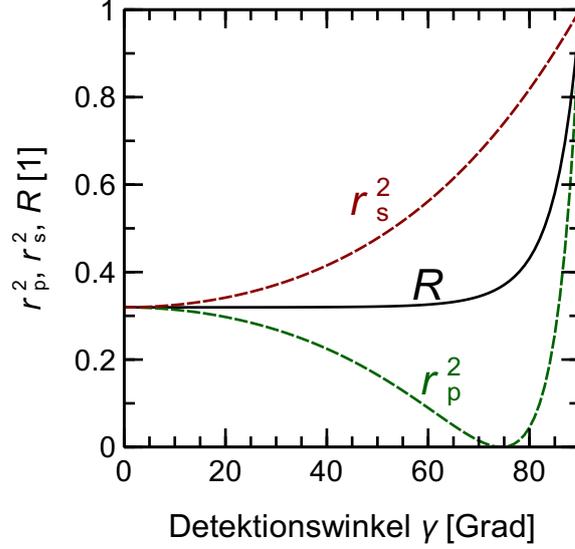


Abb. 6: Reflexionsgrad R als Funktion des Detektionswinkels γ .

viel kleiner ist als der Brechungsindex n . Daher ist $N \approx n$. Damit lassen sich die Gleichungen durch Einsetzen des Brechungsgesetzes Gl. (7) sowie Anwenden von Additionstheoremen [4] vereinfachen zu

$$r_s = -\frac{\sin(\gamma - \beta)}{\sin(\gamma + \beta)}, \quad (10)$$

$$r_p = \frac{\tan(\gamma - \beta)}{\tan(\gamma + \beta)}. \quad (11)$$

Die dabei getroffenen Annahmen und somit die vereinfachten Gleichungen gelten nicht für Detektionswinkel von 0° und 90° . Das ist hier allerdings keine Einschränkung, da wir den Fall $\gamma = 0^\circ$ bereits betrachtet haben und $\gamma = 90^\circ$ Totalreflexion und damit $f_{\text{det}} = 0$ bedeutet. Unpolarisiertes Licht lässt sich beschreiben als Überlagerung von je zur Hälfte senkrecht polarisierter Strahlung und parallel polarisierter Strahlung. Der Reflexionsgrad ergibt sich aus dem Quadrat des Reflexionskoeffizienten [5]. Damit erhalten wir

$$R = \frac{1}{2}(r_s^2 + r_p^2). \quad (12)$$

Um nun den Reflexionsgrad der Oberfläche als Funktion des Detektionswinkels γ darzustellen, setzen wir das Brechungsgesetz Gl. (7) ein und erhalten mit $n_{\text{Luft}} \approx 1$

$$\beta = \arcsin(\sin(\gamma)/n_{\text{Si}}) \quad (13)$$

sowie

$$R(\gamma) = \frac{1}{2} \left[\frac{\sin^2(\gamma - \arcsin(\sin(\gamma)/n_{\text{Si}}))}{\sin^2(\gamma + \arcsin(\sin(\gamma)/n_{\text{Si}}))} + \frac{\tan^2(\gamma - \arcsin(\sin(\gamma)/n_{\text{Si}}))}{\tan^2(\gamma + \arcsin(\sin(\gamma)/n_{\text{Si}}))} \right]. \quad (14)$$

Der Verlauf von $R(\gamma)$ ist in Abbildung 6 dargestellt. Schlussendlich erhalten wir für die Detektionswahrscheinlichkeit

$$f_{\text{det}}(\lambda, z, \gamma \neq 0) = (1 - R(\gamma)) \frac{\exp(-\alpha(\lambda)z/\cos(\beta)) + R(\gamma) \exp(-\alpha(\lambda)(2W - z)/\cos(\beta))}{1 - R^2(\gamma) \exp(-2\alpha(\lambda)W/\cos(\beta))}. \quad (15)$$

Rauhe / Texturierte Oberflächen An rauhen Oberflächen wird das Licht diffus reflektiert, d.h. die einfallenden Lumineszenzphotonen ändern bei einer Reflexion ihre Richtung. Da dies zu einem verbesserten Lichteinfall führt, erhalten Solarzellen üblicherweise eine Oberflächentextur, die z.B. aus kleinen Pyramiden mit einer Höhe von wenigen Mikrometern besteht, die über ein Ätzverfahren auf der Oberfläche erzeugt werden. In unserem Versuch untersuchen wir daher auch Wafer, die eine solche Oberflächentextur erhalten haben. Zunächst betrachten wir wieder senkrechte Detektion, d.h. $\gamma = 0$.

Die diffuse Reflexion an rauhen Oberflächen lässt sich recht gut durch lambertsche Reflexion approximieren. Ein lambertscher Strahler sieht aus allen Richtungen gleich hell aus, d.h. seine winkelabhängige Abstrahlwahrscheinlichkeit ist gegeben durch

$$f_{\text{lamb}}(\theta) = \frac{\cos \theta}{\pi}, \quad (16)$$

wobei der Abstrahlwinkel θ gegen die Oberflächennormale gemessen wird. Der Faktor $1/\pi$ ergibt sich aus der Normierungsbedingung, dass die Wahrscheinlichkeit für eine Abstrahlung in den Halbraum 1 ist.

Da sich die Lumineszenzphotonen bei lambertscher Reflexion in zufälliger Richtung (d.h. unter zufälligem Winkel θ zur Oberfläche mit einer Winkelverteilung gemäß Gl. (16)) durch die Probe bewegen, ergibt sich insgesamt im Mittel über die Tiefe z kein exponentieller Abfall der Intensität. Die Gesamttransmission durch die Scheibe lässt sich aber trotzdem mit dem lambertschen Gesetz beschreiben, wenn man einen effektiven Winkel $\theta_{\text{lamb}}(\lambda)$ einführt und

$$T_{\text{lamb}}(\lambda) = \exp\left(-\frac{\alpha W}{\cos \theta_{\text{lamb}}(\lambda)}\right) \quad (17)$$

setzt. Die Gesamttransmission T_{lamb} durch eine Scheibe¹ der Dicke W für Licht, das von einem lambertschen Strahler abgestrahlt wird, ergibt sich als Integral über das Produkt aus winkelabhängiger Abstrahlwahrscheinlichkeit und Absorptionswahrscheinlichkeit für diesen Winkel über alle Richtungen, d.h. auf der Einheitskugel ($r = 1$):

$$T_{\text{lamb}} = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi/2} d\theta r^2 \sin \theta \frac{\cos \theta}{\pi} \exp\left(-\frac{\alpha W}{\cos \theta}\right) = 2 \int_0^{\pi/2} d\theta \sin \theta \cos \theta \exp\left(-\frac{\alpha W}{\cos \theta}\right). \quad (18)$$

In den Exponentialtermen ist die Verlängerung des optischen Weges bei schrägem Durchlauf durch die Scheibe berücksichtigt ($W \rightarrow W/\cos \theta$). Abbildung 7 zeigt den resultierenden Winkel θ_{lamb} als Funktion der Wellenlänge für verschiedene Probendicken. Man erkennt, dass er unabhängig von der Probendicke für Wellenlängen $\gtrsim 1100$ nm, bei denen wir Lumineszenzemission beobachten können, gegen 60° geht. Da $1/\cos(60^\circ) = 2$, führt also die Texturierung der Probenoberflächen effektiv zu einer Verlängerung des optischen Weges der Photonen um einen Faktor 2. Mit Gl. (5) sowie $z \rightarrow 2z$ und $W \rightarrow 2W$ ergibt sich für texturierte Proben und senkrechte Detektion also

$$f_{\text{det}}(\lambda, z) = (1 - R) \frac{\exp(-2\alpha z) + R \exp(-2\alpha(2W - z))}{1 - R^2 \exp(-4\alpha W)}. \quad (19)$$

Der Reflexionsgrad R von texturierten Oberflächen lässt sich i.A. nicht analytisch berechnen, da dazu die Mikrogeometrie exakt bekannt sein muss. Numerische Raytracing-Simulationen liefern einen nahezu wellenlängenunabhängigen Wert von $R \approx 0,938$ [6].

Bei Proben mit rauher Oberfläche ist die Oberflächenorientierung am Auftreffpunkt der Lumineszenzphotonen zufällig. Dadurch werden die Photonen in zufällige Richtungen abgestrahlt und es lässt sich makroskopisch keine Abhängigkeit der Detektionswahrscheinlichkeit vom Detektionswinkel beobachten. Gleichung (19) und der Reflexionsgrad für texturierte Oberflächen gelten daher auch für $\gamma > 0^\circ$.

¹Anmerkung: Auch texturierte Proben können hier als Scheibe betrachtet werden, da die Dicke der Probe (typischerweise $> 200 \mu\text{m}$) groß ist gegenüber der Höhe der Pyramiden (typischerweise $5 \mu\text{m}$).

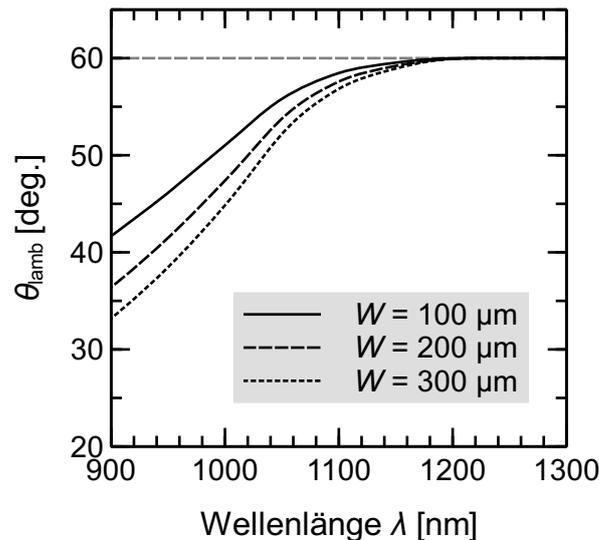


Abb. 7: Effektiver Winkel θ_{lamb} als Funktion der Wellenlänge für verschiedene Probendicken.

4 Versuchsaufbau

Abbildung 8 zeigt eine schematische Darstellung des Messaufbaus, mit dem Sie arbeiten werden. In der Mitte befindet sich ein Probenstisch, auf dem der zu untersuchende Wafer platziert wird. Durch ein Loch im Probenstisch wird der Wafer von unten durch eine weiße LED beleuchtet, um Lumineszenzemission anzuregen. Die Detektion der Lumineszenzemission erfolgt von oben über eine Glasfaser, die an einem Schwenkarm befestigt ist. Durch den Aufbau ist sichergestellt, dass die Glasfaser bei jedem Winkel auf denselben Punkt der Probe ausgerichtet ist. Am Schwenkarm ist ein digitales Winkelmessgerät montiert, an dem Sie den aktuellen Detektionswinkel ablesen können.

4.1 Spektrometer

An unserem Messaufbau können Sie spektral aufgelöste PL-Messungen mit einem Diodenarray-Gitterspektrometer durchführen. Die grundsätzliche Funktionsweise eines solchen Geräts ist in Abbildung 9 gezeigt: Das Licht wird über einen engen Eintrittsspalt in das Gerät eingekoppelt und an einem Gitter spektral zerlegt. Anschließend trifft es auf einen zeilenförmigen Detektor. Aufgrund der wellenlängenabhängigen Dispersion des Gitters liegen die Fokuspunkte der verschiedenen Wellenlängen nebeneinander, sodass jedes Pixel des Detektors nur eine bestimmte Wellenlänge detektiert.

Das verwendete Spektrometer verfügt über einen InGaAs-Detektor, der im Wellenlängenbereich von 950 bis 1700 nm empfindlich ist. Die im Detektor absorbierten einfallenden Photonen erzeugen einen Strom, der von einem Messverstärker in eine proportionale Spannung gewandelt und anschließend von einem 16 bit-Analog-Digital-Wandler in ein digitales Signal (digitale counts) übersetzt wird, das an den angeschlossenen Computer übertragen wird. Das maximal mögliche Detektorsignal ergibt sich aus dem möglichen Wertebereich des Analog-Digital-Wandlers zu 2^{16} counts.

Die Lumineszenzstrahlung wird über eine weiße LED angeregt, die die Probe von unten beleuchtet. Die Detektion der Lumineszenzstrahlung erfolgt von oben über eine Glasfaser mit Kollimatorlinse. Silizium ist für sichtbares Licht ein starker Absorber, sodass die Probe selbst als Filter wirkt und verhindert, dass das Anregungslicht ins Spektrometer einkoppelt. Das Spektrometer ist zudem im Wellenlängenbereich des Anregungslichts unempfindlich. Bei allen Messungen ist jedoch zu berücksichtigen, dass InGaAs-Detektoren, sofern sie (wie bei unserem Spektrometer der Fall) nicht sehr stark gekühlt werden, ein hohes Dunkelsignal zeigen (d.h. ein Messsignal, das durch thermische Anregung von La-

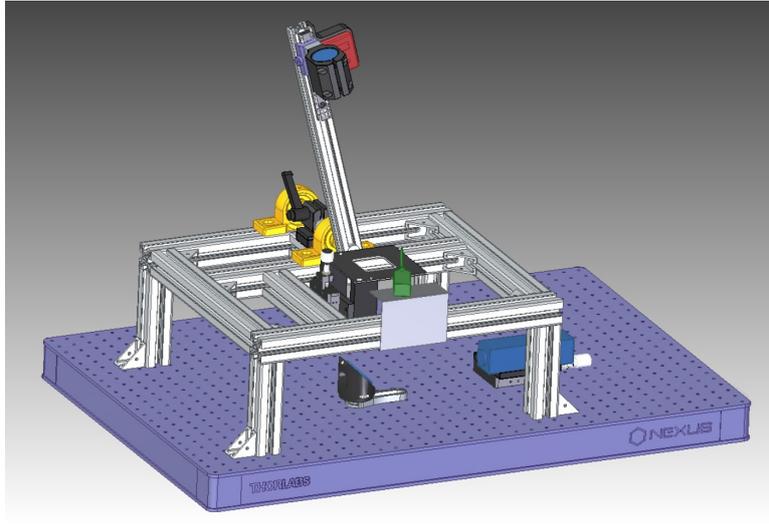


Abb. 8: Schematische Darstellung des Messaufbaus.

Strahlungsträgern im Detektor entsteht und auch ohne Beleuchtung messbar ist). Das Dunkelsignal muss daher durch eine geeignete Messprozedur bzw. Auswertung (wie könnte diese aussehen?) korrigiert werden.

4.1.1 Kalibrierung des Spektrometers

Das Spektrometer liefert zunächst einmal das Detektorsignal S in digitalen Einheiten (counts) als Funktion der Pixelnummer. Wir möchten allerdings den Lumineszenzphotonenfluss als Funktion der Wellenlänge bestimmen. Zur Auswertung der Messungen mit dem Spektrometer sind daher grundsätzlich zwei Kalibrierungen erforderlich: Zum einen eine Kalibrierung der Wellenlängenskala (Wellenlänge als Funktion der Pixelnummer), zum anderen eine Kalibrierung bzgl. der spektralen Bestrahlungsstärke als Funktion des Detektorsignals.

Bei dem Gerät, das Sie in unserem Versuch verwenden, ist die Wellenlängskalibrierung bereits werkseitig im Spektrometer hinterlegt und wird von der Steuersoftware automatisch berücksichtigt, sodass Sie direkt ein Detektorsignal als Funktion der Wellenlänge (und nicht der Pixelnummer) erhalten. Die Wellenlängenskala wird kalibriert, indem Spektrallinien mit bekannten Wellenlängen (z.B. von Quecksilberdampf Lampen erzeugt) vermessen werden. Darüber kann der Zusammenhang zwischen Pixelnummer und Wellenlänge ermittelt werden.

Das Spektrometer erzeugt aus dem detektierten Lumineszenzphotonenfluss $\phi(\lambda)$ nach Gl. (1) ein Messsignal $S_{\text{lum}}(\lambda)$, welches über die *spektrale Empfindlichkeit* des Spektrometers $\eta(\lambda)$ mit dem Lumineszenzphotonenfluss gekoppelt und proportional zur gewählten *Integrationszeit* $t_{\text{int,lum}}$ ist:

$$S_{\text{lum}}(\lambda) = \eta(\lambda) \phi(\lambda) t_{\text{int,lum}} . \quad (20)$$

Gleichung (20) gilt nur, wenn zuvor eine Dunkelsignalkorrektur auf das Messsignal angewendet wurde, d.h. $S_{\text{lum}}(\lambda)$ keinen Dunkelsignalbeitrag enthält. Die spektrale Empfindlichkeit beinhaltet verschiedene Faktoren wie z.B. den Transmissionsgrad des Lichtwellenleiters, die spektrale Empfindlichkeit des Detektors und Verstärkungsfaktoren aufgrund der Messelektronik. Sie ist im Allgemeinen wellenlängenabhängig und vom spezifischen Messaufbau abhängig. Zur Bestimmung der spektralen Empfindlichkeit wird mit dem Spektrometer eine Lichtquelle mit bekannter spektraler Bestrahlungsstärke $E_{\text{ref}}(\lambda)$ (häufig eine Halogenlampe) vermessen. Dies liefert das Signal

$$S_{\text{ref}}(\lambda) = \eta(\lambda) E_{\text{ref}}(\lambda) t_{\text{int,ref}} , \quad (21)$$

woraus sich

$$\eta(\lambda) = \frac{S_{\text{ref}}(\lambda)}{E_{\text{ref}}(\lambda) t_{\text{int,ref}}} \quad (22)$$

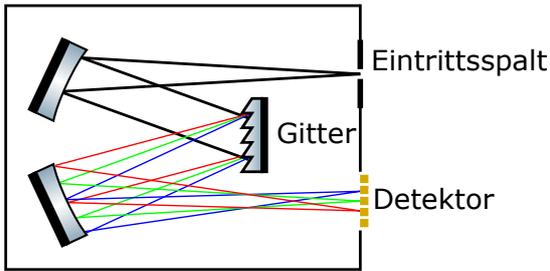


Abb. 9: Grundsätzliche Funktionsweise eines Diodenarray-Gitterspektrometers.

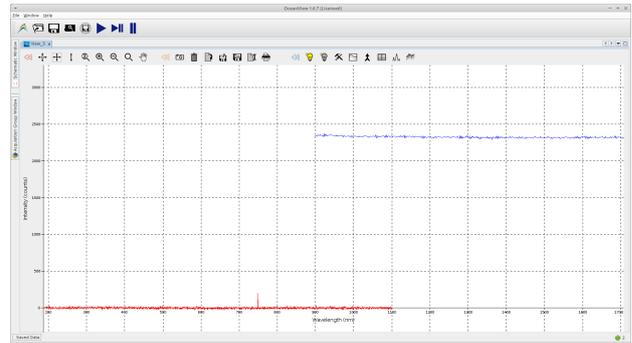


Abb. 10: Screenshot der Spektrometer-Software.

bestimmen lässt. Der Kehrwert der spektralen Empfindlichkeit liefert die *radiometrische Korrekturfunktion*

$$K(\lambda) = \frac{1}{\eta(\lambda)} \quad (23)$$

des Spektrometers, mit der wir gemäß Gl. (20) den Lumineszenzphotonenfluss bestimmen können:

$$\phi(\lambda) = \frac{S_{\text{lum}}(\lambda)}{\eta(\lambda) t_{\text{int,lum}}} = \frac{S_{\text{lum}}(\lambda)}{S_{\text{ref}}(\lambda)} \frac{t_{\text{int,ref}}}{t_{\text{int,lum}}} E_{\text{ref}}(\lambda) = \frac{S_{\text{lum}}(\lambda)}{t_{\text{int,lum}}} K(\lambda) . \quad (24)$$

Bei den in diesem Versuch durchgeführten Messungen interessiert uns nicht der absolute Lumineszenzphotonenfluss, sondern nur sein relativer Spektralverlauf. Somit kann in Gl. (24) der Quotient der Integrationszeiten $t_{\text{int,lum}}/t_{\text{int,ref}}$ vernachlässigt werden. Wir definieren deshalb die relative radiometrische Korrekturfunktion

$$\hat{K}(\lambda) = \frac{E_{\text{ref}}(\lambda)}{S_{\text{ref}}(\lambda)} \quad (25)$$

und erhalten damit den gesuchten relativen Lumineszenzphotonenfluss

$$\hat{\phi}(\lambda) = \hat{K}(\lambda) \hat{S}_{\text{lum}}(\lambda) . \quad (26)$$

Der nach Gl. (26) ermittelte relative Lumineszenzphotonenfluss kann dann z.B. auf sein Maximum normiert dargestellt werden.

Für das Spektrometer, das Sie verwenden, wurde die Messung des Detektorsignals $S_{\text{ref}}(\lambda)$ für eine bekannte spektrale Bestrahlungsstärke $E_{\text{ref}}(\lambda)$ durchgeführt. Daraus ergibt sich die in Abb. 11 dargestellte relative radiometrische Korrekturfunktion $\hat{K}(\lambda)$. Sie finden die zugehörigen Messdaten auf dem Messplatzrechner oder als Download auf der Praktikums-Website. Verwenden Sie diese, um $\hat{K}(\lambda)$ für Ihre Auswertungen zu berechnen. Achten Sie dabei darauf, die notwendige Dunkelsignalkorrektur durchzuführen.

4.2 Computergesteuerte Datenerfassung

Das Spektrometer ist über USB an einen PC angeschlossen und wird von diesem über die Software *OceanView* (siehe Abb. 10) gesteuert, die Sie auf dem Desktop finden. Melden Sie sich am PC mit dem Benutzernamen *PraktikumWinkelPL* (ohne Passwort) an. Auf dem PC finden Sie auch OpenOffice und MATLAB zur Verarbeitung Ihrer Daten. **Beachten Sie, dass die Verwendung eigener USB-Sticks an dem PC aus Sicherheitsgründen nicht gestattet und auch nicht möglich ist.** Nutzen Sie für den Datentransfer z.B. die Cloud-Services des LUIS wie SeaFile oder den IDM-HomeShare. Richten Sie sich diese **im Vorfeld** des Versuchs ein (über <https://login.uni-hannover.de>). Am Messplatz sind zwei Spektrometer (mit Silizium- sowie InGaAs-Detektor) angeschlossen, die den Wellenlängenbereich von 200 nm bis 1700 nm abdecken. Für die Lumineszenzmessungen benötigen Sie nur das InGaAs-Spektrometer. Das andere können Sie in der Software deaktivieren.

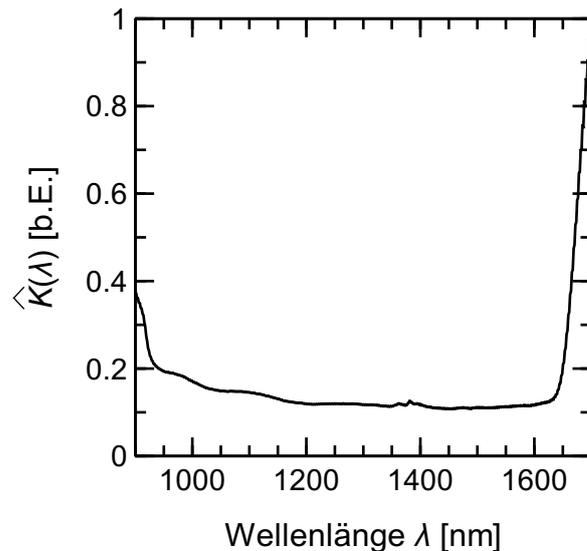


Abb. 11: Korrekturfunktion $\hat{K}(\lambda)$ für das verwendete Spektrometer.

4.3 Arbeits- und Sicherheitshinweise

Beachten Sie bei der Arbeit an unserem Versuchsaufbau die folgenden Hinweise:

- Sie arbeiten in diesem Versuch mit zerbrechlichen Wafern. Die Dicke der Proben beträgt nur etwa 700 μm . Ihr Betreuer wird Ihnen zeigen, wie Sie diese Proben so handhaben können, dass sie nicht zerbrechen. Gehen Sie vorsichtig mit den Proben um und fassen Sie diese nur mit der zur Verfügung gestellten Pinzette an.
- Gehen Sie sorgsam mit dem Versuchsaufbau um. Wenn etwas unklar ist, fragen Sie im Zweifelsfall nach.
- Die LED emittiert sehr helle Strahlung. Schauen Sie nicht direkt hinein. Schließen Sie die Tür des Versuchsaufbaus, bevor Sie die LED einschalten.
- Achten Sie darauf, dass die Glasfaser niemals zu stark gebogen oder auf Spannung belastet wird.
- Bewegen Sie den Schwenkarm von der Mittelposition aus nur nach links.

5 Versuche

5.1 Voruntersuchungen

Bevor Sie mit der Untersuchung der Lumineszenzspektren beginnen, müssen Sie zunächst sinnvolle Parameter für die Messungen festlegen. Führen Sie die folgenden Messungen separat für eine planare als auch eine texturierte Probe durch. Legen Sie die Probe auf den Proben Tisch, schalten Sie die LED ein und lassen Sie sie fünf Minuten warmlaufen.

1. Bestimmen Sie zunächst bei einem Detektionswinkel von 0° die optimale Integrationszeit für die PL-Messung. Untersuchen Sie dazu das Detektorsignal des Spektrometers in Abhängigkeit von der eingestellten Integrationszeit und ermitteln Sie die jeweilige Detektorsättigung (ohne Abzug des Dunkelsignals). Wählen Sie anhand Ihrer Messungen die Integrationszeit so, dass die maximale Detektorsättigung (Verhältnis des gemessenen maximalen Detektorsignals zum maximal möglichen Detektorsignal) bei etwa 70 % liegt. Stellen Sie die gemessenen maximalen Detektorsignale als Funktion der Integrationszeit in Ihrer Auswertung grafisch dar.

2. Bestimmen Sie bei der ermittelten Integrationszeit $t_{\text{int,ref}}$ die Standardabweichung

$$\sigma(\lambda) = \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (S_i(\lambda) - \bar{S}(\lambda))^2} \quad (27)$$

aus mindestens 25 Einzelmessungen. Hierbei sind die S_i die einzelnen Messwerte ($i = 1, \dots, N$) und

$$\bar{S}(\lambda) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i(\lambda) \quad (28)$$

der Mittelwert aller Messwerte jeweils bei der Wellenlänge λ bzw. der zugehörigen Pixelnummer. Setzen Sie für die Bestimmung der Standardabweichung die Anzahl der Mittelungen in der Software auf 1 und speichern Sie alle Spektren einzeln ab. *Hinweis: Gängige Tabellenkalkulationsprogramme (Excel, OpenOffice, ...) und Mathematikprogramme enthalten fertige Funktionen für die Berechnung von Mittelwert und Standardabweichung, die Sie nutzen können. Achten Sie bei der Verwendung dieser Formeln darauf, dass Sie die Standardabweichung der „Stichprobe“ und nicht der „Grundgesamtheit“ berechnen.*

3. Führen Sie eine Dunkelsignalmessung durch, indem Sie die LED ausschalten. Bestimmen Sie auch hier wieder die Standardabweichung aus mindestens 25 Einzelmessungen.
4. Bestimmen Sie für die ermittelte Integrationszeit und einen Detektionswinkel von 0° die Standardabweichungen von Hell- und Dunkelsignal und ermitteln Sie daraus die relative Unsicherheit des dunkelsignalkorrigierten Messsignals S_{lum} . Stellen Sie diese als Funktion der Wellenlänge grafisch in Ihrer Auswertung dar. Verwenden Sie die ermittelte relative Unsicherheit im Anschluss auch für die Messungen bei anderen Detektionswinkeln.

5.2 Winkelabhängige PL-Messungen

Messen Sie das Detektorsignal S_{lum} bei verschiedenen Detektionswinkeln in Schritten von 10° (Dunkelsignalmessung und -abzug nicht vergessen). Führen Sie diese Messungen sowohl mit einer planaren als auch einer texturierten Probe durch.

5.3 Weitere Auswertungen

Bearbeiten Sie in Ihrer Auswertung die folgenden Aufgaben/Fragen sowohl für die planare als auch für die texturierte Probe:

1. Erläutern Sie, wie Sie konkret zur Berechnung der radiometrischen Korrekturfunktion $\hat{K}(\lambda)$ vorgegangen sind, d.h. welche Daten Sie wie verarbeitet haben. Stellen Sie die so von Ihnen ermittelte radiometrische Korrekturfunktion $\hat{K}(\lambda)$ grafisch dar und diskutieren Sie den Verlauf.
2. Stellen Sie für die Messung mit einem Detektionswinkel von 0° sowohl das Detektorsignal S_{lum} als auch den gemäß Gl. (26) ermittelten Lumineszenzphotonenfluss ϕ , beide normiert auf ihr Maximum, als Funktion der Wellenlänge dar. Berechnen Sie die relative Abweichung zwischen beiden Kurven, stellen Sie sie grafisch dar und diskutieren Sie das Ergebnis. Welchen Einfluss hat die radiometrische Korrekturfunktion $\hat{K}(\lambda)$ auf das Messergebnis?
3. Stellen Sie den Lumineszenzphotonenfluss ϕ , jeweils normiert auf sein Maximum, für alle untersuchten Detektionswinkel in einem Plot gemeinsam dar. Wie ändert sich das Spektrum mit dem Detektionswinkel?
4. Modellieren Sie das Spektrum gemäß Gl. (1) für die Detektionswinkel 0° und 80° und stellen Sie die Modellkurven zusammen mit den entsprechenden Messkurven (alle Kurven normiert auf ihr Maximum) in einem Plot dar. Den dafür benötigten Datensatz des Absorptionskoeffizienten von kristallinem Silizium finden Sie in Referenz 3. Der Datensatz ist auf der Website des Journals auch

als txt-Datei verfügbar. Beachten Sie die Temperaturabhängigkeit des Absorptionskoeffizienten (Gl. 23 und 24 in Referenz 3).

5. Bestimmen Sie mit Ihrem Modell die Probertemperatur während der Messung näherungsweise. Wie genau können Sie diese bestimmen?
6. Bewerten Sie die Übereinstimmung zwischen Modell und Messung unter Berücksichtigung der von Ihnen ermittelten Unsicherheiten.
7. Stellen Sie die Abhängigkeit des Detektorsignals vom Detektionswinkel für eine ausgesuchte Wellenlänge (z.B im Peak) dar. Diskutieren Sie, welchen Verlauf Sie erwarten und warum, geben Sie eine Gleichung für den erwarteten Verlauf an und stellen Sie eine entsprechende Modellkurve zu Ihren Messdaten dar. Hinweis: Ein Polynomfit o.ä. ist hier nicht ausreichend, da dies kein physikalisches Modell darstellt, sondern lediglich eine Parametrisierung der Daten.

Literatur

- [1] WÜRFEL, P.: Generalized Planck's radiation law for luminescence via indirect transitions. In: *Appl. Phys. A* 60 (1995), S. 67–70
- [2] GREEN, M.A.: Self-consistent optical parameters of intrinsic silicon at 300 K including temperature coefficients. In: *Sol. Energ. Mat. Sol. C.* 92 (2008), S. 1305–1310
- [3] SCHINKE, C. ; PEEST, P. C. ; SCHMIDT, J. ; BRENDEL, R. ; BOTHE, K. ; VOGT, M. R. ; KRÖGER, I. ; WINTER, S. ; SCHIRMACHER, A. ; LIM, S. ; NGUYEN, H. ; MACDONALD, D.: Uncertainty analysis for the coefficient of band-to-band absorption of crystalline silicon. In: *AIP Advances* 5 (2015), Nr. 067168
- [4] BRONSTEIN, I.N. ; SEMENDJAEV, K.A.: *Taschenbuch der Mathematik*. Verlag Harri Deutsch, 2001
- [5] DEMTRÖDER, W.: *Experimentalphysik 2: Elektrizität und Optik*. Springer-Verlag, 2006
- [6] BRENDEL, R. ; HIRSCH, M. ; PLIENINGER, R. ; WERNER, J.H.: Quantum Efficiency Analysis of Thin-Layer Silicon Solar Cells with Back Surface Fields and Optical Confinement. In: *IEEE T. Electron Dev.* 43 (1996), S. 1104–1113. <http://dx.doi.org/10.1109/16.502422>. – DOI 10.1109/16.502422