

掺氧非晶硅的正电子寿命研究

史志强¹ 刘克源² 王学恩¹ 刘兴胜¹ 杨子强¹

(1 陕西师范大学物理系 西安 710062)

(2 西北大学电子科学系 西安 710069)

摘要 在室温下测量了掺氧非晶硅薄膜的正电子寿命谱. 实验发现, 随着掺氧量的增加, 正电子寿命减小, 对应的相对强度增加. 据此, 本文从电子密度、悬挂键和微空洞等方面讨论了氧掺杂对非晶硅薄膜微观结构的影响.

PACC: 7870B, 6140D, 6170, 6855

1 引言

非晶硅(a-Si:H)薄膜是一种新型半导体材料, 有着很大的应用潜力, 因此对它的研究日益受到人们的重视^[1,2]. 非晶硅中存在着大量的缺陷, 主要是空位和微空洞, 它对材料的电学和光学性质有着重要的影响. 氢、氧、硼和氮等的掺杂对缺陷态密度的影响是很大的, 因而是改善材料性能的重要方法. 我们在不断改进制备方法和工艺条件的过程中, 制备出性能优良的掺氧非晶硅薄膜^[3], 它具有较好的光电性能, 如光学带隙宽度和暗电阻率等都有很大的提高. 一般使用电导率测量、光吸收、电子自旋共振及电子显微镜等方法研究非晶硅薄膜的结构. 但是, 这种方法不能用来探测样品中的微小缺陷. 正电子湮没技术是探测固体中微观缺陷的一种灵敏的探针, 许多作者已经用它研究了非晶硅薄膜中的空位及微空洞^[4~6], 非晶硅中纯氩及氩和氟的混合掺杂^[7]. 但是, 用正电子湮没技术研究非晶硅中氧掺杂的工作还未见报道. 本文用正电子寿命测量研究氧掺杂对非晶硅薄膜微观结构的影响.

2 实验

样品采用辉光放电法淀积在经退火的医用盖玻片上. 衬底温度 280~320℃, 射频频率 13.6MHz, 功率 50~60W. 用 H₂ 稀释的硅烷(SiH₄:H~30%)制得本征非晶硅薄膜. 在上述条件下, 将高纯氧直接通入等离子体反应区, 氧气与硅烷的流量比 $V_{O_2}/V_{SiH_4} = 0.0051, 0.021$ 和 0.041 , 制得三个掺氧非晶硅样品 a-Si:[H, O]. 膜的厚度约为 70μm 左右, 估计有 ~48% 的正电子在样品中湮没. 正电子寿命谱用美国 ORTEC 快-快符合时间谱仪测量, 用⁶⁰Co 放射源测得系统的时间分辨率为 250 ps. 每个寿命谱的累积计数为 10⁶ 个. 寿命谱使用 S-PATFIT 计算程序进行源修正三成分自由拟合.

史志强 男, 1940 年生, 教授, 从事正电子寿命谱的研究
刘克源 男, 1938 年生, 教授, 从事半导体的研究
1996 年 7 月 26 日收到初稿, 1997 年 5 月 15 日收到修改稿

3 结果和讨论

正电子寿命谱解谱结果如图 1 所示. 短寿命 τ_1 的值为 200 ps 左右,基本上与掺氧量无关. 随着掺氧量的增加,较长寿命 τ_2 的值减少,与 τ_2 对应的相对强度 I_2 的值增加. 长寿命 τ_3

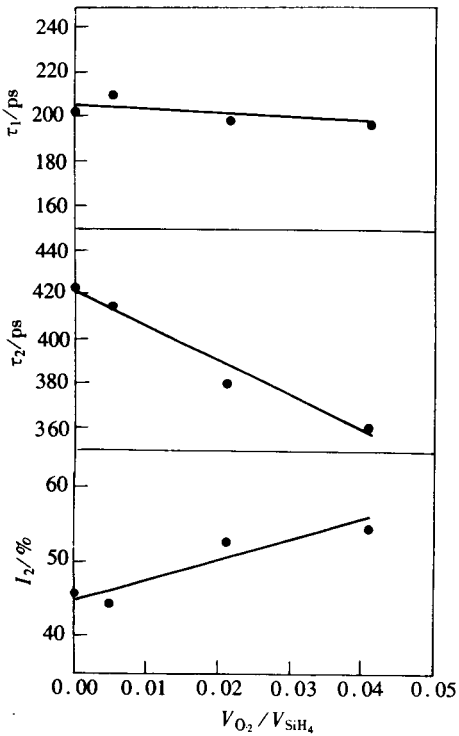


图 1 a-Si : [H. O]的正电子寿命参数随掺氧量的变化

的值为~1290ps,对应的相对强度为~3%,且对所有的样品基本不变,这是正电子在样品表面上湮没的结果,与氧掺杂无关. 对不掺氧的 a-Si : H 样品,寿命 $\tau_2 = 423.1$ ps,和文献[4,5,7]的测量值基本一致,它说明样品中存在着大小约为 0.4nm 的微空洞^[7]. 根据文献[4]和[7]的分析,短寿命 τ_1 主要和正电子在衬底的湮没有关,与样品的关系不大,寿命 τ_2 提供了正电子在非晶硅薄膜中被捕获的信息,因而是我们研究的重点.

在完整晶体中,进入晶体的正电子所能“看见”的电子密度来自两个方面,即游离的电子气和较为紧密地束缚于离子的核心电子. 正电子被电子捕获后湮没为两个 γ 光子,其湮没率与正电子所在处的电子密度成正比,因而正电子寿命(湮没率的倒数)给出了样品中电子密度的信息. 当单晶硅晶格中缺少一个原子时,会造成四个不饱和的共价键(即悬挂键),这些键倾向于接收电子,使该空位表现为受主作用和带负电的空位区,成为正电子的捕获中心. 在空位处由于失去离子而使核心电子密度减少,而空位的负电性也会使电子气的密度减小,从而使正电子湮没率减小,正电子寿命增长. 相连的空位串越长,电子密度越小,正电

子寿命也就越长. 在非晶硅中,由于晶格的畸变和硅原子的空位也会产生悬挂键,对照单晶硅中的空位,可以说四个悬挂键对应着单空位,六个悬挂键对应双空位,十个悬挂键对应四空位,等等^[4,8]. 许多正电子寿命测量实验表明,在非晶硅薄膜中存在着四空位或五空位的微空洞^[4,7,9],理论和实验都已证明,非晶硅薄膜中正电子在单空位被捕获湮没的寿命为 270ps,双空位为 325ps,四空位为 435ps^[9]. 在我们的实验中,未掺氧样品的正电子寿命 $\tau_2 = 423.1$ ps,这说明样品中的微空洞基本上是四空位的.

掺入氧原子时,必然要引起局域电子密度和空位型缺陷的变化. 红外吸收光谱测量表明,随着掺氧量的增加,Si-O 键的吸收强度增大^[3,10],这说明氧与氢原子附近的硅原子键合形成了 Si-O 链. 因此,氧掺杂在非晶硅中有两方面的作用. 一方面,氧占居原来空着的晶位,氧的电负性较高,因而使该晶位处的电子密度增加,正电子寿命减少. 另一方面,由于 Si-O 链的形成,空洞上的两个硅原子通过 Si-O 链相连接,从而使一个四空位变成一个三空位或者破裂成为一个单空位和一个双空位. 这样,样品中的微空洞除四空位外,还存在单空位、双空位和三空位. 因此,正电子寿命 τ_2 应是单空位、双空位、三空位和四空位俘获正电

子湮没寿命的权重平均,它描述了空位的平均几何尺寸. 实验测得 τ_2 的值由 423.1ps 减小为 361.3ps, 介于双空位和四空位的寿命值之间, 因此, 单空位的成分相对少一些, 三空位的成分相对多一些. 四空位的破裂必然会使空位的浓度增加, 这和图 1 中 I_2 的增大是一致的.

另外, 正电子也可能在微空洞的内表面上形成正电子偶素, 当掺入氧原子时, 由于氧是顺磁原子, 正电子偶素与氧原子之间的电子交换可以使正态正电子偶素(O-Ps)转变为仲态正电子偶素(p-Ps), 从而使正电子寿命减小^[6]. 然而, 如上所述, 红外吸收光谱测量表明, 氧掺入使悬挂键的数目减少, 并导致正电子寿命减小. 因此, Ps 猝灭引起正电子寿命变短的可能性虽然不能排除, 但它所占的份额可能是较少的.

总之, 正电子寿命测量表明, 在非晶硅薄膜中存在着与十个悬挂键对应的四空位缺陷, 当掺入氧原子时, 氧离子将会占据空位, 并与硅离子形成 Si-O 链, 从而使正电子所探测到的平均电子密度增加, 空位的平均几何尺寸变小, 空位的相对浓度增大.

参 考 文 献

- [1] 何宇亮, 陈光华, 张仿清编著, 非晶态半导体物理学, 北京: 高等教育出版社, 1989 年.
- [2] [美] M. H. 布罗德斯基主编, 朱琼瑞, 余秉才, 章佩娴译, 非晶态半导体, 北京: 国防工业出版社, 1985 年.
- [3] 张志勇, 阎锐, 周本仙, 刘克源, 高电阻率化非晶硅感光材料的研究, 第六届全国非晶态材料和物理学学术讨论会暨第三届冶金部非晶态材料及应用学术讨论会, 桂林, 1991 年.
- [4] H.-E. Schaefer, R. Wurschum, R. Schwarz *et al.*, Appl. Phys., 1986, **A40**: 145~149.
- [5] Ai-Lien Jung, Yi-Hua Wang, Gang Liu *et al.*, J. Non-Crystalline Solids, 1985, **74**: 19.
- [6] Y. J. He, M. Hasegawa, R. Lee *et al.*, Phys. Rev. B, 1986, **33**: 5924~5927.
- [7] S. Dannefaer, D. Kerr and B. G. Hogg, J. Appl. Phys., 1983, **54**(1): 155~160.
- [8] S. Dannefaer, S. Kupca, B. G. Hogg *et al.*, Phys. Rev. B, 1980, **22**(12): 6135~6139.
- [9] S. Dannefaer, P. Masscher and D. Kerr, Appl. Phys., 1987, **A43**: 91~92.
- [10] G. Lucovsky, J. Yang, S. S. Chao *et al.*, Phys. Rev. B, 1983, **28**(6): 3225~3233.

Positron Lifetime Studies on Oxygen-Doped Amorphous Silicon Films

Shi Zhiqiang¹, Liu Keyuan², Wang Xueen¹, Liu Xingsheng¹ and Yiang Ziqiang¹

(1 Department of Physics, Shaanxi Normal University, Xi'an 710062)

(2 Department of Electronics, Northwest University, Xi'an 710069)

Received 26 July 1996, revised manuscript received 15 May 1997

Abstract Positron lifetime measurements have been performed in a-Si : [H. O] amorphous silicon films as a function of oxygen content at room temperature. It is found that the value of the intermediate-lived component τ_2 tends to decrease, while the value of the relative intensity I_2 tends to increase, with the increasing of oxygen content. The influences of oxygen atom on the electronic density, the dangling bonds and the microvoids in amorphous silicon films are discussed.

PACC: 7870B, 6140D, 6170, 6855