

ПЛОТНОСТЬ ДЕФЕКТОВ В ПРИПОВЕРХНОСТНОЙ ОБЛАСТИ СЛОЕВ АМОРФНОГО ГИДРИРОВАННОГО КРЕМНИЯ

О. А. Голикова, Э. П. Домашевская, Х. Ю. Мавлянов, В. А. Терехов,
С. Н. Тростянский

Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук, 194021,
Санкт-Петербург, Россия
(Получена 9 марта 1993 г. Принята к печати 16 марта 1993 г.)

Приводятся результаты исследований плотности дефектов оборванных Si—Si-связей в приповерхностной области (15—100 нм) слоев α -Si : H, приготовленных методом псевдолегирования, т. е. при $\epsilon_F = \text{vac}$ без специального легирования (ϵ_F — уровень Ферми в объеме слоя). Для исследований применялись методы ультрамягкой рентгеновской эмиссионной спектроскопии и постоянного фототока. Получена количественная информация о распределении плотности оборванных связей в зависимости от глубины зондирования слоя и положения ϵ_F в объеме. Получены также данные о параметре Урбаха в приповерхностной области слоев.

Информация о плотности дефектов (оборванных Si—Si-связей) в приповерхностной области слоев аморфного гидрированного кремния (α -Si : H) чрезвычайно важна, в частности, при анализе работы многослойных электронных приборов на его основе.

В настоящее время для получения такой информации наиболее часто используется как классическая фотоэлектронная спектроскопия [1], так и ее вариант, названный фотоэлектронной спектроскопией полного электронного выхода [2], позволяющие «зондировать» свойства слоев на глубинах 0.5 и 10 нм соответственно [1, 2].

Следует отметить также совместное применение спектроскопии фототермического отклонения (PDS) и метода постоянного фототока (CPM) [3]. Тогда, если коэффициенты дефектного поглощения обозначаются соответственно α_{PDS} и α_{CPM} и из них по известным формулам [3] определяются концентрации дефектов N_{PDS} и N_{CPM} (см^{-3}), поверхностная плотность дефектов находится как

$$N_s (\text{см}^{-2}) = (N_{\text{PDS}} - N_{\text{CPM}}) d,$$

где d — толщина слоя α -Si : H.

Целью настоящей работы является привлечение для решения указанной задачи ультрамягкой эмиссионной рентгеновской спектроскопии. (УМРЭС) В данном случае, изменяя энергию электронов возбуждающего пучка E^* , удается зондировать слои α -Si : H, начиная с поверхности, на глубину 100 нм и более. Другими словами, в рамках одного и того же метода получается информация как о поверхностных, так и об объемных свойствах слоев α -Si : H. Действительно, как будет обсуждаться далее, эмиссионные $L_{2,3}$ спектры кремния трансформируются в зависимости от E^* . Однако в большинстве случаев при глубине зондирования 100 нм и более последующие трансформации не наблюдаются — это говорит об отсутствии влияния приповерхностной области слоя.

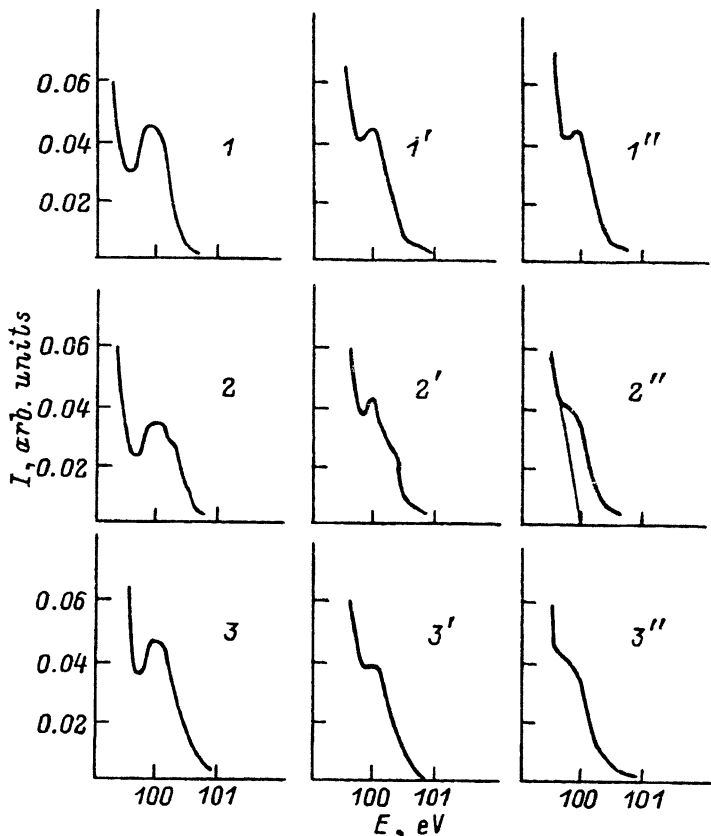


Рис. 1. УМРЭ спектры трех образцов $a\text{-Si:H}$ с различными энергиями активации темновой проводимости $\Delta E = (e_c - e_F)T = 0$, эВ: 1-1' - 0.46, 2-2' - 0.85, 3-3' - 1.20. Спектры сняты при энергии электронов возбуждающего пучка. E^* , кэВ: 1-3 - 1, 1'-3' - 3, 1''-3'' - 6. Угол α характеризует наклон хвоста (2'').

Первоначально на этапе становления технологии создания фоточувствительного $a\text{-Si:H}$, метод УМРЭС использовался авторами настоящей работы для получения качественной информации о свойствах материала [4-6]. Как известно, интенсивность УМРЭС полосы (E - энергия γ -кванта)

$$I(E) \sim |M_{ik}|^2 \sum_k \delta(E - E_k),$$

где M_{ik} - матричный элемент перехода электрона с k -го верхнего уровня на i -й остовный уровень, E_k - энергия соответствующего уровня. Поскольку M_{ik} считался не зависящим от энергии, полагали, что $I(E)$ отражает энергетическую зависимость локальной парциальной плотности S -состояний кремния (в экспериментах фиксировали именно такие переходы) [4]. На основе результатов этих экспериментов были показаны, в частности, существование максимума плотности локализованных состояний в щели центральной части подвижности $a\text{-Si:H}$ и сдвиги этого максимума при изменении положения уровня Ферми [7]. В то же время, однако, интенсивность соответствующей полосы в спектре УМРЭС оказалась сравнительно мало чувствительной к изменению величины плотности состояний, определенной из других независимых экспериментов: I_{\max} изменялась в пределах одного порядка величины, в то время как $g(e)$ - на порядки. Следует

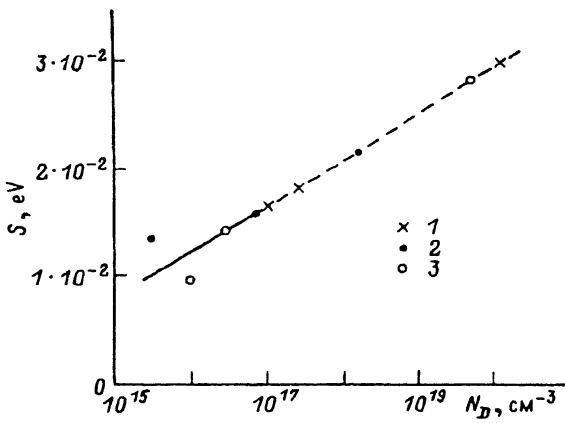


Рис. 2. Калибровочная кривая — интегральная интенсивность (S , эВ) УМРЭ, нормированного в максимуме на единицу в зависимости от концентрации дефектов (N_D , см^{-3}). ΔE , эВ: 1 — 0.46, 2 — 0.85, 3 — 1.20. Пунктир — экстраполяция калибровочной кривой.

отметить, что при применении фотоэлектронной спектроскопии полного электронного выхода (Y) таких несоответствий между изменениями величин Y и g (ϵ) не наблюдается, а вероятность перехода $\sim (\hbar\omega)^{-5}$ (последнее было установлено на основе данных об оптическом поглощении слоев $\alpha\text{-Si:H}$ [8]).

Возможно, $|M_{ik}|^2$, входящий в формулу (2), имеет много более сильную зависимость от энергии; во всяком случае вряд ли его можно считать постоянным. С другой стороны, УМРЭС, как отмечалось выше, дает информацию лишь об s -состояниях кремния. Поэтому изменение интенсивности полосы УМРЭ спектра, отражающей парциальную плотность состояний, может и не соответствовать изменениям g (ϵ). В настоящее время нельзя ответить на вопрос, влияние какого из двух перечисленных факторов является преобладающим. Тем не менее, учитывая привлекательные черты УМРЭС, представляло интерес определить возможности ее применения для получения количественной информации о дефектах в слоях $\alpha\text{-Si:H}$.

На рис. 1 приведен ряд спектров для образцов $\alpha\text{-Si:H}$, отличающихся положением уровня Ферми, (ϵ_F), относительно края зоны проводимости, ϵ_c . Это достигалось методом псевдолегирования. Ранее были проведены комплексные исследования серий таких образцов, суммированные в [9]. Было показано, в частности, что концентрация дефектов (оборванных Si—Si-связей), измеренная методом СРМ ($N_D \equiv N_{\text{СРМ}}$), является функцией положения ϵ_F в щели подвижности независимо от метода достижения этого положения: легирования электрически активными примесями или за счет перестройки структурной сетки и соответственно функции плотности локализованных состояний — псевдолегирования. Другими словами, имеется универсальная кривая $N_D = f(\Delta E)$, где $\Delta E = |\epsilon_c - \epsilon_F|_{T=0}$.

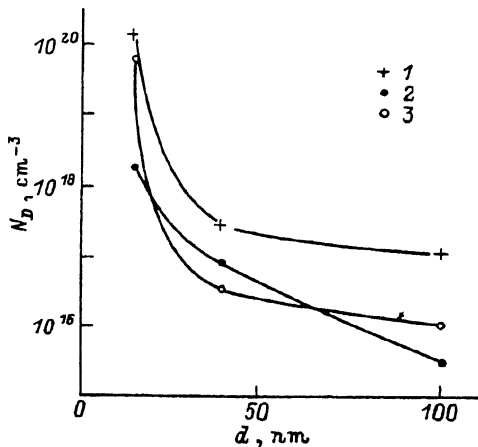


Рис. 3. Зависимости N_D от глубины зондирования слоев $\alpha\text{-Si:H}$ (d). 1, 2, 3 — соответствуют образцам, спектры которых представлены на рис. 1.

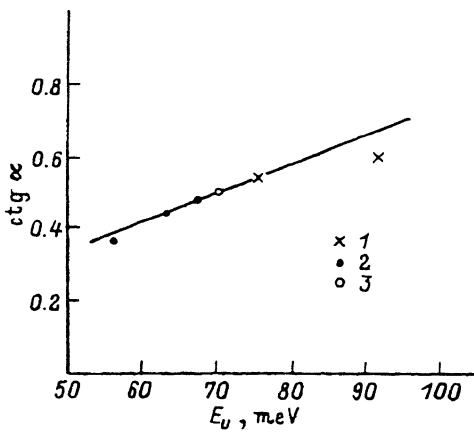


Рис. 4. Калибровочная кривая — $\text{ctg } \alpha$ для нормированного в максимуме на единицу спектра УМРЭ в зависимости от параметра Урбаха. ΔE , эВ: 1 — 0.46, 2 — 0.85, 3 — 1.20.

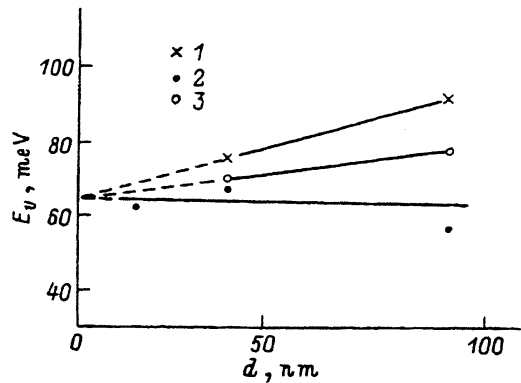


Рис. 5. Зависимость параметра Урбаха от глубины зондирования слоев. ΔE , эВ: 1 — 0.46, 2 — 0.85, 3 — 1.20. Пунктир — экстраполяция к $d = 0$.

Как уже отмечалось выше, спектры УМРЭ, снятые при $E^* = 6$ кэВ, относятся к объему слоя. Поэтому площадь дефектной полосы может быть непосредственно сопоставлена с величиной N_D . Площадь этой полосы определялась после вычитания экстраполированного «хвоста» валентной зоны. На рис. 2 представлена зависимость площади полосы S от N_D .

Далее были определены площади дефектных полос в спектрах, снятых при $E^* = 1$ и $E^* = 3$ кэВ, и, используя экстраполированную калибровочную кривую (рис. 2), были найдены соответствующие N_D . Полученные данные позволяют построить «профили» N_D в приповерхностных областях слоев (рис. 3).

Оценка поверхностной плотности дефектов

$$N_S (\text{см}^{-2}) = N_D (\text{см}^{-3}) d.$$

Здесь N_D (см^{-3}) определена из спектра, снятого при $E^* = 1$ кэВ, а $d = 15$ нм — соответственно глубина зондирования слоя для собственного α -Si:H ($\Delta E = 0.85$ эВ) дает минимальную величину $N_S \approx 10^{12} \text{ см}^{-2}$, совпадающую с литературными данными. Полученный результат показывает перспективность предлагаемого подхода к использованию УМРЭС для получения количественной информации о дефектах (оборванных связях) в слоях α -Si:H. Исходя из сказанного, весьма привлекательным было бы получать информацию и о характеристической энергии хвоста валентной зоны. Для соответствующей калибровки были использованы спектры, снятые при $E^* = 6$ кэВ, и данные о характеристической энергии Урбаха (E_U), полученные методом СРМ [9].

На рис. 4 представлена кривая $\text{ctg } \alpha$ в зависимости от E_U : угол α , показанный на одном из спектров (рис. 1), здесь рассматривается как параметр, характеризующий наклон хвоста в спектре УМРЭС. Калибровочная кривая (рис. 4), очевидно, построена на основе данных об объемных свойствах слоев. Видно, что на эту кривую хорошо ложатся точки, относящиеся к спектрам, снятым при $E^* = 1$ и $E^* = 3$ кэВ, характеризующих приповерхностные области слоя. Однако в отличие от величины N_D , возрастающей по мере приближения к поверхности (рис. 2, 3), параметр Урбаха, напротив, уменьшается или почти не зависит от d (для собственного слоя с минимальной E_U) (рис. 5). При этом экстраполяция к нулевой глубине зондирования (к поверхности) дает очень близкие величины E_U для всех слоев, в то время как поверхностная плотность оборванных связей

для рассматриваемых образцов изменяется в пределах 10^{12} — 10^{14} см⁻² [($N_D = 10^{18}$ — 10^{20} см⁻³ на глубине 15 нм (рис. 3)]. По-видимому, на поверхности слоя α -Si:H происходит конверсия вида: слабая Si—Si-связь — оборванная связь, в первую очередь касающаяся слабых связей с минимальными энергиями разрыва. В конечном счете E_U вблизи поверхности каждого из слоев достигают некоторого равного предела, а N_D тем выше, чем больше материал отличается от собственного.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] K. Winer, I. Hirabayashi, L. Ley, Phys. Rev., 38, 7680 (1988).
- [2] L. Ley. J. Non-Cryst. Sol., 114, 238 (1989).
- [3] P. Roca i Cabarrocas, P. Morin, V. Chu, J. P. Conde, J. Z. Liu, H. R. Park, S. Wagner. J. Appl. Phys., 69, 2942 (1991).
- [4] В. А. Терехов, О. А. Голикова, Э. П. Домашевская, С. Н. Тростянский, М. М. Мездрогина, К. Л. Сорокина. ФТП, 18, 1897 (1984).
- [5] V. A. Terekho, S. N. Trostyanskii, E. P. Domashevskaya, O. A. Golikova, M. M. Metarogina, K. L. Sorokina, M. M. Kazanin. Phys. St. Sol., B, 138, 647 (1986).
- [6] E. P. Domashevskaya, O. A. Golikova, V. A. Terekhov, S. N. Trostyanskii. J. Non-Cryst. Sol., 90, 135 (1987).
- [7] О. А. Голикова, Э. П. Домашевская, М. М. Казанин, В. Х. Кудоярова, М. М. Мездрогина, К. Л. Сорокина, В. А. Терехов, С. Н. Тростянский. ФТП, 23, 450 (1989).
- [8] W. B. Jackson, S. M. Kelso, C. C. Tsai, J. W. Allen, J. Oh S. Phys. Rev. B, 31, 5187 (1985).
- [9] О. А. Голикова. ФТП, 25, 1517 (1991).

Редактор В. В. Чалдышев
