

光电导归一化法测量 α -Si:H 隙态密度

徐 乐 刘 启 一
(南开大学物理系)

提 要

本文用光电导归一化法得出 α -Si:H 膜在低吸收区的光吸收系数谱;用电子从价带的指数尾态和导带边以下 1.0 eV 处,由悬挂键形成的局域态到导带扩展态的跃迁,解释了实验结果;并从而得出费米能级 E_F 以下的隙态密度. 通过对复合动力学的研究,还得到费米能级以上 ($E_{F_n} - E_F$) 的局域态密度的平均值,从而得出费米能级以上部份的态密度. 结果表明导带尾比价带尾窄.

一、前 言

由于非晶硅的态密度与材料的光吸收系数、少子扩散长度以及形成的肖特基势垒的宽密切相关^[1,2],因而非晶硅态密度对非晶硅器件的性能有重大影响,它是判断材料质量的重要参数. 测量态密度用场效应法和 C-V 法,受材料表面的影响较大;用深能级谱法又较复杂;而用稳态光电导法则既较简单,又能较好地反映材料体内的性质,因而越来越地被采用^[3-5].

本文用直流稳态光电导归一化法得到低吸收区域的光吸收系数谱,并通过参数拟合定量地确定了费米能级以下能级的隙态密度. 通过对复合动力学的研究,可得到在所用最强光照下费米能级上移范围 ($E_{F_n} - E_F$) 内的隙态密度的平均值,从而得出费米能级以上态密度的信息. 结果表明所测样品的态密度的导带尾比价带尾窄,这和 Tiedje 等人^[6]的结果一致.

二、实 验

用辉光放电使硅烷分解在玻璃衬底上淀积厚 0.5—1.0 μm 的 α -Si:H 膜,然后用真空蒸发制备间距为 1mm 的铝电极. 本文用这种共平面电极型样品测量了光电导谱. 测试时使用了 VSU2-P 型光谱仪和 CZ16 型微电流仪. 单色光强为 10^{14} — 10^{16} 光子数/ cm^2s .

测得光电导谱后,用光电导归一化法就可得出低吸收区域的光吸收系数谱^[7].

$$\alpha = \frac{F_0 \alpha_0}{F} \left[\frac{\Delta \sigma}{\Delta \sigma_0} \right]^{1/r} \quad (1)$$

式中 $\Delta \sigma$ 为光电导, F 为光强;下标“0”表示当光子能量为 $h\nu_0$ 时的有关各量, $h\nu_0$ 应处于光吸收系数既可用透射率法也可用光电导法测量的区域; α_0 表示对能量为 $h\nu_0$ 的光的吸收

收系数,其值由透射率法得到; γ 为光电导与光强关系式中的幂指数,式(1)成立的条件是 γ 与波长无关。

为了得到式(1)中的 γ ,用 CZ16 型微电流仪,以 He-Ne 激光器 (GG1 型, 3.5 mw, $\lambda = 6328 \text{ \AA}$) 作光源,并用减光板衰减,测出了 $\Delta\sigma-F$ 曲线,结果示于图 1。图中曲线都满足 $\Delta\sigma \propto F^\gamma$ 的关系。由直线的斜率可得到 γ ,其值列于表 1。测量时,最强光约相应于 10^{16} 光子数/cm²s。

为了确定 γ 是否与波长无关,又以 VSU2-P 型光谱仪的单色光仪为光源,测量了波长为 $1.0 \mu\text{m}$ 单色光入射下的 $\Delta\sigma \propto F^\gamma$ 曲线。所得的 γ 值在实验误差范围内,与用 He-Ne 激光器为光源所得的结果一样。说明对于我们的样品,在实验所用光强范围内,满足 γ 与波长无关的条件。

由(1)式得出的低吸收区的光吸收系数谱示于图 2。两个样品的实验结果分别以圆点和叉号表示。

透射率法测 α 适用于高吸收系数区^[8,9],结果示于图 3。图中圆点和叉号分别为两个样品的实验结果。直线满足关系式

$$\sqrt{\alpha h\nu} = B(h\nu - E_g) \quad (2)$$

式中 B 为直线的斜率, E_g 为直线在横轴上的截距,是光学禁带宽。在光子能量 $h\nu$ 接近 E_g 的区域,实验点偏离直线,其原因是尾态造成的。所得的 B 和 E_g 均列于表 1。此测试所用样品和前面测量所用样品是同炉制备的,但表面无电极。所有测量都是在室温下进行的。

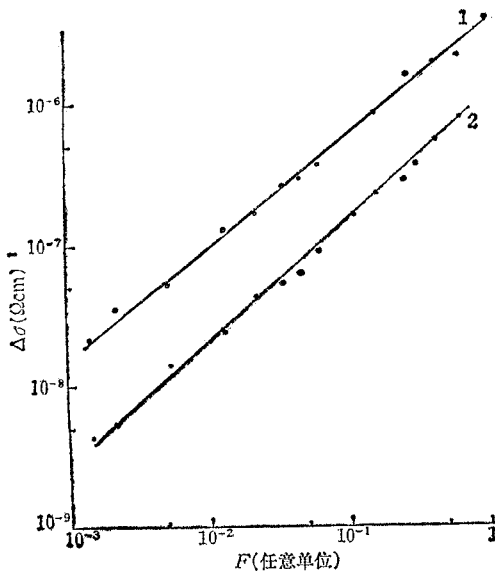


图 1 光电导和光强的关系曲线

表 1 α -Si:H 膜态密度和复合参量

	B (eVcm) ^{-1/2}	γ	K (eV ² cm ²)	\bar{g}_t (cm ⁻³ eV ⁻¹)	S_n (cm ²)	$E_{F_n} - E_F$ (eV)	E'_0 (eV)
1	670	0.80	2.55×10^{-38}	1.21×10^{16}	10^{-15}	0.18	0.10
2	736	0.89	3.07×10^{-38}	3.88×10^{16}	10^{-15}	0.17	0.21
	N_V (cm ⁻³ eV ⁻¹)	E_g (eV)	E_0 (eV)	E_r (eV)	E_{r0} (eV)	N_r (cm ⁻³ eV ⁻¹)	E'_0 (eV)
1	1.5×10^{21}	1.70	0.064	1.00	0.10	2.6×10^{17}	0.038
2	1.7×10^{21}	1.79	0.065	1.04	0.15	1.5×10^{17}	0.045

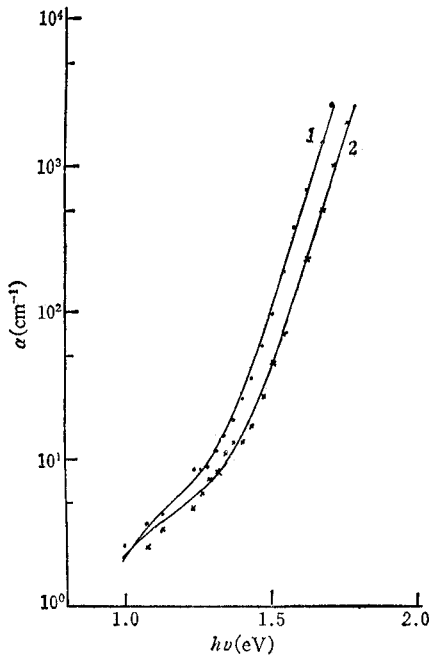
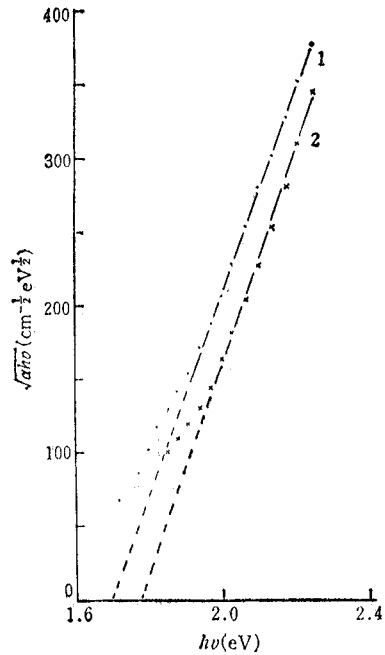


图 2 低吸收区的光吸收系数谱

图 3 对于光子能量大于光学禁带宽的光, $\sqrt{\alpha h\nu - h\nu}$ 的关系

三、结果与讨论

a-Si:H 的光电导主要由电子贡献。我们认为低吸收区的光吸收主要是电子在能量小于迁移率隙的入射光的作用下,从价带尾部和费米能级以下的局域态跃迁到导带扩展态形成的。价带尾可用指数模型表示为 $N_V \exp[-(E + E_g)/E_0]$; 其中 N_V 为价带边的有效态密度; E_0 为价带指数尾带的斜率,它反映价带尾部的宽度。按照 Mott 模型,位于导带尾和价带尾之间的局域态是由悬挂键或氧、氮等杂质引起的,数学上可用高斯分布或双曲正割函数描述。本文采用后者,将该局域态密度表示为 $N_r \text{sech}[-(E + E_r)/E_{r_0}]$, 其中 E_r 为该函数的中心位置, E_{r_0} 为它的宽度, N_r 为它的峰值大小。导带扩展态和价带扩展态通常都用抛物形表示。本文采用 $A\sqrt{E}$ 来描述导带扩展态,其中 $A = 6.7 \times 10^{21} \text{cm}^{-3} \text{eV}^{-3/2}$, 能量零点取在导带边 E_c 处。

根据 Mott 理论,在一级近似时,可将跃迁矩阵元取为常量。由量子理论可求出低吸收区域的光吸收系数 α 。

$$\alpha = \frac{K}{h\nu} \int A\sqrt{E} \left[N_V \exp\left(-\frac{E' + E_g}{E_0}\right) + N_r \text{sech}\left(-\frac{E' + E_r}{E_{r_0}}\right) \right] \times \delta(E - E' - h\nu) dE dE', \quad (3)$$

式中 K 为常量,其值由高吸收区域吸收系数的理论值与实验结果相比求出。

在高吸收区,在光子能量大于迁移率隙的入射光作用下,电子将从价带扩展态跃迁到导带扩展态。此时光吸收系数 α 满足

$$\alpha = \frac{KA^2}{h\nu} \int_0^{h\nu - E_g} \sqrt{E^2 + EE_g - E h\nu} dE = \frac{\pi KA^2}{8h\nu} (h\nu - E_g)^2, \quad (4)$$

即

$$\alpha h\nu = \frac{\pi KA^2}{8} (h\nu - E_g)^2 = B^2 (h\nu - E_g)^2,$$

由此,利用前述实验所得的 B , 就可求出 K .

图 2 中实线为由式 (3) 得到的 α 的理论值,所用诸参数均列于表 1. 这样,由低吸收区 α 的理论实验的拟合就得到价带尾和悬挂键引起的局域态密度函数的各参数,从而定量地得到费米能级以下的隙态密度.

由于光电导主要由电子贡献,因此从低吸收区光吸收谱难以得到有关导带尾部的信息. 为了研究高于费米能级部分的隙态密度,下面对光照时的复合过程进行分析.

令 P_r 表示费米能级以上的电子复合中心密度, S_n 表示它们对自由电子的复合截面, f 表示光生载流子的体产生率, n 表示光照时的自由电子数,则

$$n = f\tau_n = \frac{f}{P_r V S_n}, \quad (5)$$

式中 τ_n 为自由电子寿命; V 为热速度,一般取为 10^7 cm/s; 而

$$f = F(1 - R)[1 - \exp(-\alpha d)]/d, \quad (6)$$

式中 d 为膜厚, R 为反射率.

在光照下,费米能级从 E_F 往 E_C 移动,稳态时的准费米能级为 E_{F_n} . 这样,在无光照时的陷阱变成了复合中心.

$$P_r = \int_{E_F}^{E_{F_n}} n g(E) dE. \quad (7)$$

假若 $E_{F_n} - E_F$ 处于导带指数尾部,即 $g(E) = N_c \exp(E/E'_0)$, 则由式 (5)–(7), 可知^[10]

$$n \propto f \frac{E'_0}{kT + E'_0}$$

因此

$$E'_0 = kT \frac{\gamma}{1 - \gamma} \quad (8)$$

式中 k 为玻耳兹曼常数, T 为室温. 由表 1 中实验所得的 γ , 可计算出 E'_0 . 为与后面区别,我们把由式 (8) 得到的导带指数尾部的斜率表示为 E''_0 , 其值也列于表 1. 从数值看 $E''_0 > E_0$, 且相差颇多,即导带尾将比价带尾宽得多,这与迄今为止所了解到的非晶硅的性质不一致. 这表明,在本实验所用最强光强下, E_F 移动的范围 ($E_{F_n} - E_F$) 不处于导带的指数尾部,式(8)不适用.

以 \bar{g}_i 表示在费米能级移动范围内隙态密度的平均值,则由式(7)有

$$P_r = \bar{g}_i (E_{F_n} - E_F) = \bar{g}_i kT \ln \left(\frac{n}{n_0} \right), \quad (9)$$

式中 n_0 为无光照时的自由电子数. 取 $\mu = 1 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$, 从暗电导 σ_d 的测量值得到 n_0 . 设 $S_n = 10^{-15} \text{ cm}^2$, 以 \bar{g}_i 为拟合参数,可计算出 $f-n$ 曲线^[11] 从 $\Delta\sigma = n e \mu$, 可求出 n , 从

而可将图 1 的 $\Delta\sigma-F$ 曲线的实验值转化为图 4 中的 $f-n$ 曲线的实验点, 图中以圆点表示. 理论和实验的拟合, 可得出 E_F 移动范围内的隙态密度平均值, 结果列于表 1. 图 4 中实线为理论值. 所用 S_n 值和光电导归一化法的要求一致^[12].

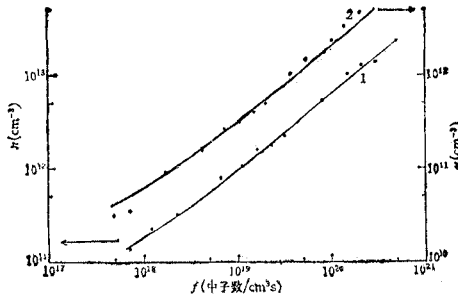
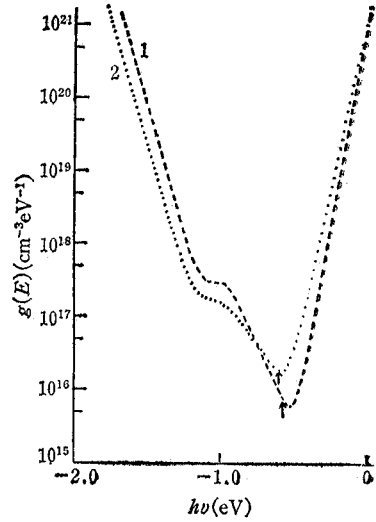
图 4 $n-f$ 关系曲线

图 5 a-Si:H 的隙态密度

将隙态密度函数 $g(E)$ 表示为如下形式

$$g(E) = N_V \exp\left(-\frac{E + E_g}{E_0}\right) + N_t \operatorname{sech}\left(-\frac{E + E_t}{E'_0}\right) + N_c \exp\left(\frac{E}{E'_0}\right), \quad (10)$$

其中第一、二项分别为价带带尾和价带、导带两个带尾间的局域态密度, 所有参数都已在前面确定了; 第三项为导带指数带尾, 一般可取其中的 N_c 值与 N_V 值相同; 这样就只剩 E'_0 待定. 在下列方程

$$\int_{E_F}^{E_{Fn}} g(E) dE = \bar{g}_t(E_{Fn} - E_F) \quad (11)$$

中, 实验所用最强光强下的 $E_{Fn} - E_F$ 可由 $\Delta\sigma_{\max}/\sigma_d$ 的测量值计算得到. E_F 可由 σ_d 的测量值计算得到. 将(10)式代入(11)式, 用数值积分法可算出积分值, 以 E'_0 为拟合参量, 使计算得到的在 E_F 移动范围内的隙态密度的平均值与从 $n-f$ 曲线得到的一致. 所得到的 E'_0 列于表 1. 根据式(10)可画出隙态密度图, 结果示于图 5. 图中箭头表示 E_F 的位置.

图 5 的 $g(E)$ 在导带边以下约 0.5 eV 处有一最小值, 这和 Cohen 等人^[13] 用深能级谱测得的态密度相近. 价带、导带两个带尾间的局域态的中心大约在导带边以下 1.0 eV 处, 这与 Vanecek 等人^[4] 和 Wronski 等人^[44] 的结果一致. 价带尾宽 E_0 值(见表 1)比他们的值 ($< 0.057\text{eV}$) 大些, 与 F. Evangelisti 等人^[11] 测得的 E_0 (0.057—0.078 eV) 一致. 我们认为本文的结果是合理的. 我们所得的 $E'_0 < E_0$ (值见表 1), 说明本文所测样品的导带尾比价带尾窄. 这与 Tiedje 等人^[6] 由测迁移率得到的结果一致. 最后从图 5 可看出, 在实验条件下, 光照时费米能级 E_F 移动的范围确实不是全部处于导带指数尾, 故不能用式(8)得到导带尾的信息.

本文确定 E_F 的方法有一定的不确定性. 为了了解它对确定 E'_0 的影响, 我们作了计算, 结果表明, 当 E_F 的误差为 $\pm 0.03\text{eV}$ 时, E'_0 的误差为 $\pm 0.003\text{eV}$.

感谢王宗畔同志提供测试所需样品。

参 考 文 献

- [1] M. Nack, M. Shur, W. Czubytyj, J. Yang and J. McGill, *J. Non-Cryst. Solids*, **59/60**(1983), 1115.
- [2] Y. Kuwano, S. Tsuda and M. Ohnishi, *Jpn J. Appl. Phys.*, **21**(1982), 235.
- [3] M. Vanecek, J. Kocka, J. Stucklik and A. Triska, *Solid State Comm.*, **39**(1981), 1199.
- [4] M. Vanecek, J. Kocka, J. Stuchlik, Z. Kozisek, O. Stika and A. Triska, *Solar Energy Materials*, **8**(1983), 411.
- [5] C. B. Roxlo, B. Abeles, C. R. Wronski, G. D. Cody and T. Tiedje, *Solid State Comm.*, **47**(1983), 985.
- [6] T. Tiedje, J. M. Cebulka, D. L. Morel and B. Abeles, *Phys. Rev. Lett.*, **21**(1981), 1425.
- [7] G. Moddel, D. A. Anderson and W. Paul, *Phys. Rev.*, **B22**(1980), 1918.
- [8] Xu Le, D. K. Reinhard and M. G. Thompson, *IEEE Trans. on ED*, **ED-29**(1982), 1004.
- [9] 徐乐, 电子科学学刊, **7**(1985), 458.
- [10] A. Rose, *Concepts in Photoconductivity and Allied Problems*, Interscience, New York, 1963, p. 38.
- [11] F. Evangelisti, P. Fiorini G. Fortunato and C. Giovannella, *Solid State Comm.*, **47** (1983), 107.
- [12] B. Abeles, C. R. Wronski, T. Tiedje and G. D. Cody, *ibid.*, **36**(1980), 537.
- [13] J. D. Cohen, D. V. Lang and J. P. Harbison, *Phys. Rev. Lett.*, **45**(1980), 197.
- [14] C. R. Wronski, B. Abeles, T. Tiedje and G. D. Cody, *Solid State Comm.*, **44**(1982), 1423.

MEASUREMENT OF THE DENSITY OF THE GAP STATES IN a-Si:H BY THE NORMALIZATION OF PHOTOCONDUCTIVITY

Xu Le, Liu Qiyi

(Department of Physics, Nankai University)

The spectra of the optical absorption coefficient in the low absorption region are obtained by using a normalization procedure for the photoconductivity spectra. The results are explained in terms of optical transitions of electrons from localized states in exponential valence-band tail and in dangling bond states. 1.0 eV below the conduction-band edge to extended states above the conduction-band edge. Then the density of the gap states below the Fermi energy E_F is obtained. From the investigation of recombination kinetics, the average density of the gap states in the range of $(E_{Fn} - E_F)$ is obtained. Then the density of the gap states above the Fermi energy E_F is obtained. It indicates that the width of the conduction-band tail is narrower than that of the valence-band tail.