

掺氧非晶硅薄膜的光吸收特性

江绵恒 王 纓 章熙康

(中国科学院上海冶金研究所)

在用辉光放电方法制备 α -Si:H 薄膜材料时, 氧是一个主要沾污杂质, 因此研究氧对 α -Si:H 材料特性的影响是很有意义的。本文主要通过红外吸收光谱、光学带隙 E_g^{opt} 和 Urbach 吸收边的斜率 W 值的测量, 来研究掺氧非晶硅薄膜的光吸收特性。

非晶硅膜在电容耦合辉光放电反应器中生长; 衬底为高阻 O-Si 衬底(用于红外吸收光谱测量)和 7059 玻璃衬底(用于反射率和透射率测量); 反应气体为 5% $\text{SiH}_4 + \text{Ar}$, 掺氧时用氩气稀释的高纯氧直接通入反应室; 淀积温度为 300°C ; 膜厚为 $0.6 \mu\text{m}$ 左右。

不同掺氧量的 α -Si:H 薄膜的红外吸收光谱结果表明, 本征 α -Si:H 的氧沾污很小, 红外吸收谱只有 2000 和 630 cm^{-1} 两个吸收峰, 分别对应于 Si—H 的伸缩振动和摇摆振动。掺氧后, 增加了 780 和 980 cm^{-1} 两个吸收峰, 含氧量高时, 980 和 2000 cm^{-1} 两个吸收峰分别向 1020 和 2090 cm^{-1} 方向移动。在高衬底温度样品中, 耦合在 α -Si:H 网络中的氧键合在具有一个氢近邻原子的硅原子上, 形成 Si—O—Si—H 结构。

不同掺氧量的非晶硅膜的 E_g^{opt} 测量结果表明, 随着掺氧量的增加, E_g^{opt} 也不断增大。这一结果很可能与薄膜的 Si—O—Si—H 结构有关; 根据红外吸收谱的结果, 随着掺氧量的增加, 与 Si—O—Si—H 键有关的振动模式分别向高频方向移动, 这是由于力常数增加的缘故, 力常数的增加相应于键合能的增强, 而带隙一般是随键合能的增强而增大的。

实验结果表明, 随着掺氧量的不断增加, W 值也不断增大。关于 Urbach 吸收边认为是与带尾中的局域态有关, W 值则表征 α -Si:H 网络的无序度。在温度一定时, W 值的大小反映了结构无序度的大小。掺氧量不断增加时 W 值也不断增大, 这说明含氧量很高时, 将使带尾中的局域态密度增高。

用 α -Si:H 薄膜做太阳能电池的材料, 从输运的角度来说希望带尾陡峭, 即 W 值要小, 从而降低俘获密度和深复合中心, 同时要求 E_g^{opt} 不能太大, 因为 E_g^{opt} 太大会严重影响光吸收。根据上述实验结果, 当含氧量不断增加时, E_g^{opt} 和 W 值也要增大, 因此在制备 α -Si:H 薄膜时应避免氧的沾污。