

氢气区熔硅单晶中两个硅-氢红外强吸收峰 (2210、1946 cm^{-1}) 的本质

施天生 谢雷鸣 白国仁 祁明维

(中国科学院上海冶金研究所)

2210 cm^{-1} , 1946 cm^{-1} 峰是氢气区熔硅单晶 (c-Si:H) 中伸缩振动区两个主要的强峰, 搞清它们的本质是认识整个 Si-H 红外吸收谱的第一步。对此文献中曾有过多种不同的假设。但由于实验根据不足, 至今尚无定论。本文基于前文的实验结果, 进一步分析探讨它们所对应的缺陷模型。

1. 2210 cm^{-1} 峰

(1) 此峰普遍出现于各种 c-Si:H 中, 与杂质(如氧、碳等)无关、以氘代氢时, 产生同位素位移。峰的频率比值为 $1.37 \approx \sqrt{2}$ 。可见此峰应源于缺陷和 H 的复合体。

(2) 当晶体中 D、H 并存时, Si-D 和 Si-H 峰同时分裂成五个峰。这表明, 相应的复合体中含有两个以上的 H, 并具有 T_d 对称性。

符合上述条件的比较简单的缺陷-氢复合体有两种: (a) 空位加四个氢 ($V+4H$)。和 (b) 间隙原子加四个氢。后者是个位于 T_d 隙位的 SiH_4 , 即间隙硅烷。它的四个氢沿 $\langle 111 \rangle$ 伸向六角隙位。这两个模型可进一步说明(有时直接了当、有时需附加某些假设)与 2210 cm^{-1} 峰有关的其他实验事实: 如峰的频率、峰的热稳定性、峰的半宽度随温度的独特变化。以及只在 2210 cm^{-1} 峰上观察到的 Si^{29} , Si^{30} 引起的同位素位移, 和在弯曲-摇摆区找不到和 2210 cm^{-1} 峰对应的红外峰等事实。对这两种可能的模型, 人们可以有不同的倾向性, 进一步的研究将作出最后抉择。

2. 1946 cm^{-1} 峰

(1) 基于和 2210 cm^{-1} 峰同样的理由, 此峰亦应源于缺陷和氢的复合体, 与杂质无关。

(2) 试样中 D、H 并存时不引起 Si-D、Si-H 红外峰的分裂, 说明这个振动中心具有 Si-H_1 的结构。

(3) 弯曲-摇摆区有两个强峰 (791 cm^{-1} , 812 cm^{-1}) 和 1946 cm^{-1} 峰线性相关, 表明它们源于同一振动中心。

我们建议用 $\langle 100 \rangle$ 劈裂自间隙硅加两个氢 ($I_{sp}+2H$) 这种复合体来解释 1946 cm^{-1} 峰。它可以自然地说明 1946 cm^{-1} 峰的频率和热稳定性, 以及对应的伸缩振动峰是一个而弯曲振动峰却是两个、低温下峰的半宽度较宽而温度变化率较小、以及看不到 Si 同位素引起的峰的精细结构等事实。

进一步验证上述模型的实验和理论工作正在进行中。