

α -Si:H 反常退火效应的红外光谱研究

沈学础

(中国科学院上海技术物理研究所)

方容川

(中国科技大学物理系)

红外光谱是研究非晶硅中杂质含量及其和主晶格原子键合方式的重要方法。以 α -Si 中的氢为例, 通过观测一个、两个或更多个氢原子和一个 Si 原子键合而引起的键伸缩振动模、摇摆振动模和键弯曲振动模等对应的吸收带, 可以研究 α -Si:H 中氢的含量, Si 和 H 的结合方式, SiH、SiH₂、SiH₃ 及 (SiH₂)_n 的相对含量及存在条件等。

本文报道 α -Si:H 样品红外反常退火效应的吸收光谱研究。某些原来仅显示 880 cm⁻¹ 的单一的键弯曲振动模吸收带的样品, 经 400~600°C 退火后, 在 840 cm⁻¹ 处出现第二个吸收峰, 即转变成通常只有含氢量较高并且存在 (SiH₂)_n 链的样品中才出现的键弯曲模吸收带的双峰行为。与此相应, 2100 cm⁻¹ 吸收带也有异常之处。这一反常实验结果可从非晶相背底下呈现出微晶晶粒的结构模型出发给予定性解释。

实验结果表明, 如果关于 α -Si:H 中键弯曲模振动吸收带的判定是正确的话, 我们就可得到这样的结论: 这一样品经 400°C 或更高一些温度退火后, 尽管从 640 cm⁻¹ 吸收带的减弱可以判定, 样品中的含氢量已明显减少, 并正在继续减少, 但样品中却出现了原来观察不到的 (SiH₂)_n 链结构 (n 至少为 2), 这正是曾经使人费解之处。我们利用前人的研究结果推测, 退火过程中氢不是从样品各处均匀地释放出来的, 在晶粒生长的部位和生长过程中, 氢可能更快地更集中地释放出来, 并且在释放过程中部分氢原子可以饱和晶粒间界处的剩余 Si 悬键。从而在该处形成一定数量的 (SiH₂)_n 链状结构, 这正是出现 840~890 cm⁻¹ 双峰结构所需要的。关于某些样品红外光谱显示反常退火效应的可能物理原因的推测, 需要更多的理论和实验研究, 才能判定其正确与否。