

文章编号: 2095—0411 (2011) 04—0005—05

一种 N 型轻掺杂氢化硅基薄膜的欧姆接触^{*}

李建凯¹, 袁宁一^{1,2}, 丁建宁^{1,2}

(1. 常州大学 低维材料与微纳器件中心, 江苏 常州 213164; 2. 江苏省太阳能电池材料与技术重点实验室, 江苏 常州 213164)

摘要: 使用等离子体增强化学气相沉积方法制备了一组磷掺杂氢化硅基薄膜。 $I-U$ 曲线显示薄膜与铝电极形成了良好的欧姆接触。霍尔测试结果表明该组样品为轻掺杂; 利用拉曼光谱和紫外—可见吸收光谱对薄膜的微结构和光学带隙进行了表征, 并从薄膜能带结构出发探讨了形成欧姆接触的原因。

关键词: 氢化硅基薄膜; 欧姆接触; 能带结构; 费米能级

中图分类号: TQ 320 ; TN 304

文献标识码: A

Research on Ohmic Contacts of Lightly N—Doped Si: H Thin Film

LI Jian—kai¹, YUAN Ning—yi^{1,2}, DING Jian—ning^{1,2}

(1. Center for Low—Dimensional Materials, Micro—Nano Devices and System , Changzhou University, Changzhou 213164, China; 2. Jiangsu Key Laboratory for Solar Cell Materials and Technology, Changzhou University, Changzhou 213164, China)

Abstract: A set of samples with different crystallization rates of N—type lightly doped hydrogenated silicon films have been prepared by plasma enhanced chemical vapor deposition (PECVD). Hall test showed the samples are lightly doped. The $I-U$ curve of thin film contact with aluminum has been tested. Result showed that they are good ohmic contacts. Band structure and optical band gap of the films were characterized by Raman spectrum and UV—visible absorption spectra. Analysis revealed that the unique band structure of thin films is an important reason for the formation of ohmic contact.

key words: ohmic contact; width of forbidden bandwidth ; Fermi level ; Si: H thin film

非晶硅、纳米硅、微晶硅等氢化硅基薄膜, 在薄膜晶体管^[1]、薄膜太阳能电池^[2]、薄膜传感器^[3-5]、发光二极管等方面有着广阔的应用前景。在各种器件的制备过程中, 半导体与金属连线的欧姆接触至关重要。对于单晶硅与多晶硅, 通常采用重掺杂, 高温退火合金化的工艺来实现硅与铝、铜等常用金属的欧姆接触。硅基薄膜厚度一般在几百纳米到几微米之间, 重掺杂和合金化往往会毒化它

们的各项光电性能。轻掺杂的硅基薄膜与金属连线的欧姆接触问题, 目前还鲜有人研究。

本工作采用高氢稀释的硅烷作为反应气体, 利用等离子体增强化学气相沉积 (PECVD) 制备 N 型轻掺杂硅基薄膜, 研究了氢化硅薄膜与铝的电接触, 并通过薄膜的能带结构对欧姆接触的形成原因进行了分析。

* 收稿日期: 2011—09—16

基金项目: 国家高技术研究发展计划 (2011AA050511); 江苏省科技支撑项目 (BY2010122)

作者简介: 李建凯 (1986—), 男, 河南南阳人, 硕士生。

1 实 验

1.1 样品的制备

采用等离子体增强化学气相沉积（PECVD）方法制备氢化硅薄膜。PECVD 电源频率为 13.56MHz。薄膜制备的工艺条件为：腔室的本底真空为 1×10^{-4} Pa 工作压强为 200Pa，样品的生长温度为 250℃，射频功率为 100 W，基板间距为 3cm。固定磷烷浓度（ $\text{PH}_3/\text{PH}_3 + \text{SiH}_4$ ）为 0.25%，通过改变氢气的流量来改变硅烷浓度（ $\text{SiH}_4/\text{SiH}_4 + \text{H}_2$ ）制备了一组样品，其硅烷浓度分别为 0.5%、1%、1.5%、2%。控制薄膜的生长时间使得薄膜厚度在 500nm 左右，在制备的硅基薄膜样品两端蒸铝制作铝电极，如图 1 所示。

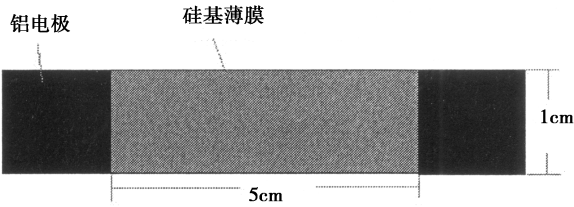


图 1 样品的尺寸
Fig. 1 Sample Size

1.2 测试

样品掺杂浓度和载流子迁移率采用 H8800 型霍尔效应测试仪测试；利用 Keithely 公司的 2400 SourceMeter 对样品进行了伏—安特性曲线测试，电压范围为 -10V 至 10V；利用激光拉曼光谱仪（美国热电公司 DXR 型）在室温大气环境下，对样品做拉曼光谱测试，入射激光波长为 532nm，入射光功率 3mW，波数范围为 $100\sim1\,400\text{cm}^{-1}$ 。利用 Shimadzu 公司的 UV-24SO 分光光度计进行紫外—可见吸收光谱测试。

2 实验结果和讨论

2.1 掺杂浓度和载流子迁移率

样品的霍尔测试结果如表 1。随着硅烷浓度的增加，掺杂浓度逐渐降低，其中掺杂浓度最高的是 1.86×10^{16} ，可见表 1 中所有样品均是轻掺杂。

2.2 伏—安特性曲线

图 2 是样品的伏—安特性曲线。从测试结果可以看出，4 个样品与铝电极之间形成了良好的欧姆

接触，其接触层的电阻很小。

表 1 样品的霍尔测试结果

Table 1 Hall test of the samples

样品 编号	样品制备条件 (硅烷浓度)	载流子 类型	掺杂浓度/ cm^{-3}	迁移率/ $\text{cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$
1	0.5%	电子	1.86×10^{16}	0.4
2	1.0%	电子	1.56×10^{16}	26
3	1.5%	电子	1.20×10^{16}	37
4	2.0%	电子	9.86×10^{15}	0.8

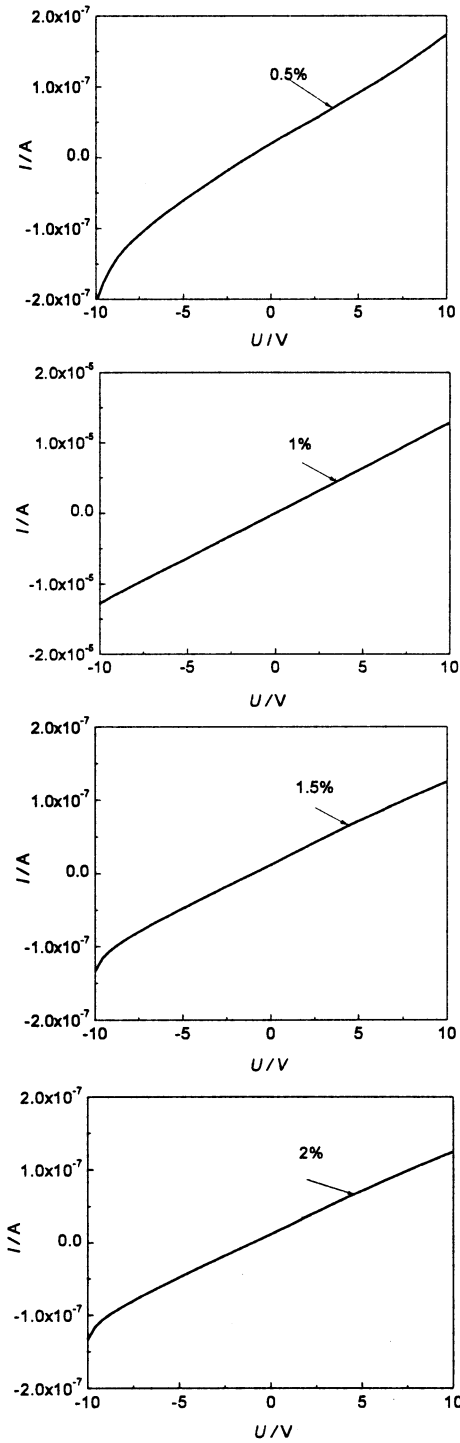


图 2 样品的 I—U 特性

Fig. 2 I—U characteristics of the samples

2.3 拉曼 (Raman) 光谱

Raman 是一种很好的研究硅基薄膜微结构的技术。对拉曼光谱进行高斯拟合，分别计算晶态特征峰和非晶态特征峰的积分强度，它们的比值可以表征硅基薄膜的晶态比，同时利用下面的公式可以近似估计样品的晶粒大小^[6]：

$$D=2\pi\sqrt{\frac{B}{2v}} \tag{1}$$

其中： $B=2.24\text{cm}^{-1}\text{nm}^2$ ， v 是峰位相对于 520cm^{-1} 的红移。

图 3 是拉曼光谱测试结果，晶态比和晶粒大小的计算结果如表 2。根据计算结果，样品 2（硅烷浓度为 1%）是纳米硅薄膜，其他 3 个样品则是非晶硅薄膜。由于纳米硅具有量子点输运的特征，电导率远高于非晶硅薄膜，因此在 $I-U$ 测试中，其电流比其他 3 个样品高出了两个数量级。

表 2 样品的晶态比与晶粒大小

Table 2 Crystalline volume fraction and grain size of the samples			
样品 编号	样品制备条件 (硅烷浓度)	晶态比	晶粒大小 /nm
1	0.5%	59%	2.4
2	1.0%	48%	5.3
3	1.5%	34%	4.1
4	2.0%	12%	2.2

2.4 紫外—可见吸收光谱 (UV—VIS)

紫外—可见吸收光谱可以用来评估薄膜的光学带隙，有如下的公式^[7]

$$\sqrt{aE}=B(E-E_{\text{Tauc}}) \tag{2}$$

$$a=\left(\frac{1}{d}\right)\ln\left\{\frac{(1-R)^2}{2T}+\left[\frac{(1-R)^4}{2T}+R^2\right]^{\frac{1}{2}}\right\} \tag{3}$$

其中， E_{Tauc} 是光学带隙， E 是光子能量， B 是常数， a 是吸收常数^[8]， d 是薄膜厚度， R 是薄膜的反射率， T 是薄膜的透率。

该组样品的紫外—可见吸收光谱测试结果如图 4 (a)，计算得到的光学带隙如图 4 (b)。从图 4 (a) 中可以看出，随着硅烷浓度的增加，光学带隙逐渐减小，由 1.93eV 逐渐减小到 1.75eV。

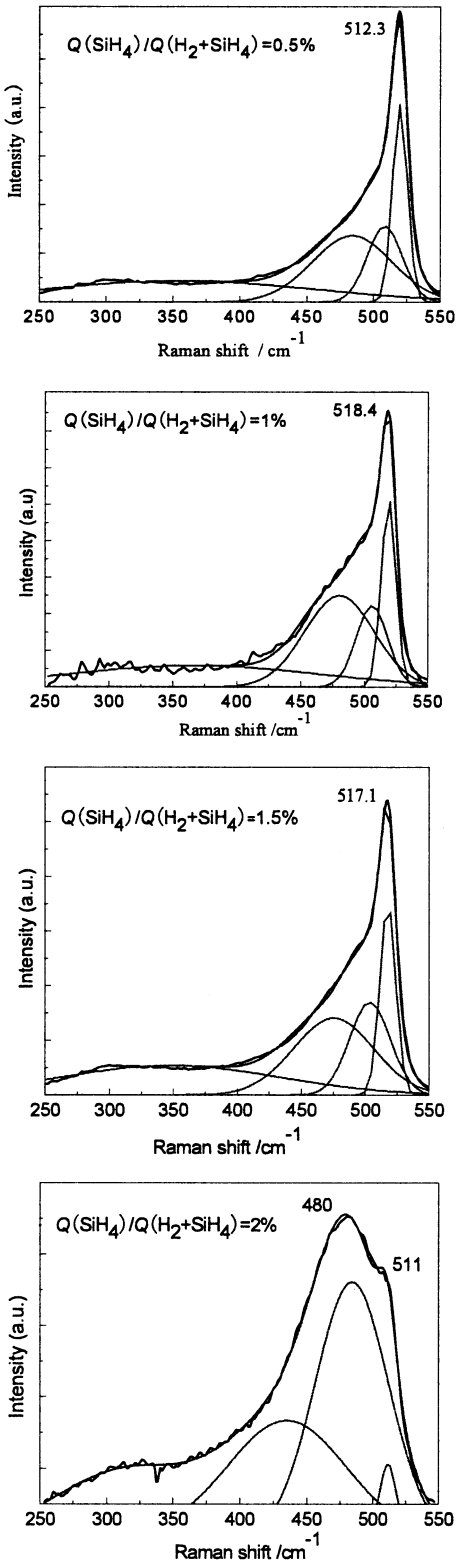


图 3 样品的拉曼光谱
Fig. 3 Raman spectrum of samples

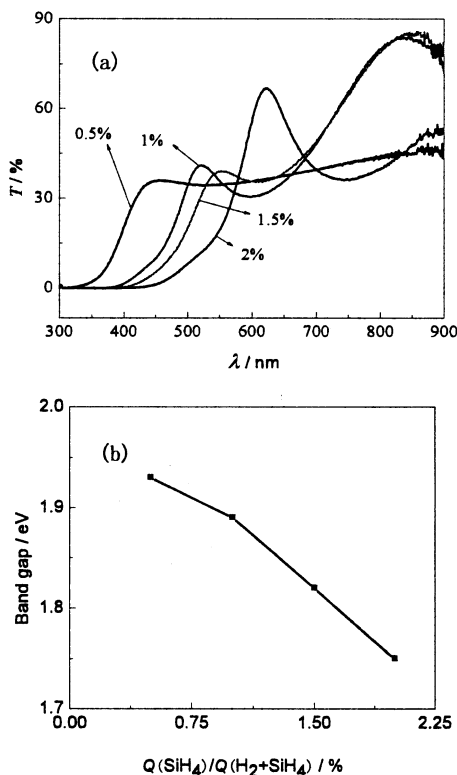


图4 样品的紫外可见吸收光谱

Fig. 4 UV-visible absorption spectra of the samples

2.5 理论分析

2.5.1 体硅材料的欧姆接触

对于单晶硅,若不考虑表面态,当金属的功函数小于N型半导体的功函数时,就可形成欧姆接触;P型,则反之^[9]。但是由于半导体表面附近晶格的不完整性使势场的周期性受到破坏,在禁带中产生了附加能级,即表面能级。例如N型硅,表面的悬挂键从体内获得电子,导致其表面带负电。负的表面电荷排斥表面层中的电子,在表面附近形成正的空间电荷区。如果表面态密度比较大,能带明显向上弯曲,形成类似p-n结的阻挡层,其能带结构如图5(a)所示。考虑表面态以后,金属与半导体接触的能带图如图5(b)、5(c)。由于表面态的存在,体硅材料不能依靠选择金属来制作欧姆接触。常用方法是对半导体表面重掺杂,并进行高温退火合金化处理,利用隧穿效应实现欧姆接触。

2.5.2 硅基薄膜的能带结构

由于键长和键角的杂乱无序,硅基薄膜导带底和价带顶的电子态发生了定域化,产生由定域态组成的带尾^[10]。导带扩展态和价带扩展态之间的距离即禁带宽度要比单晶硅大,非晶硅薄膜的光学带

隙通常在1.78eV左右^[11],纳米硅薄膜的禁带宽度可以通过晶粒大小和晶态比调整,范围在1.83—1.89eV之间^[12]。

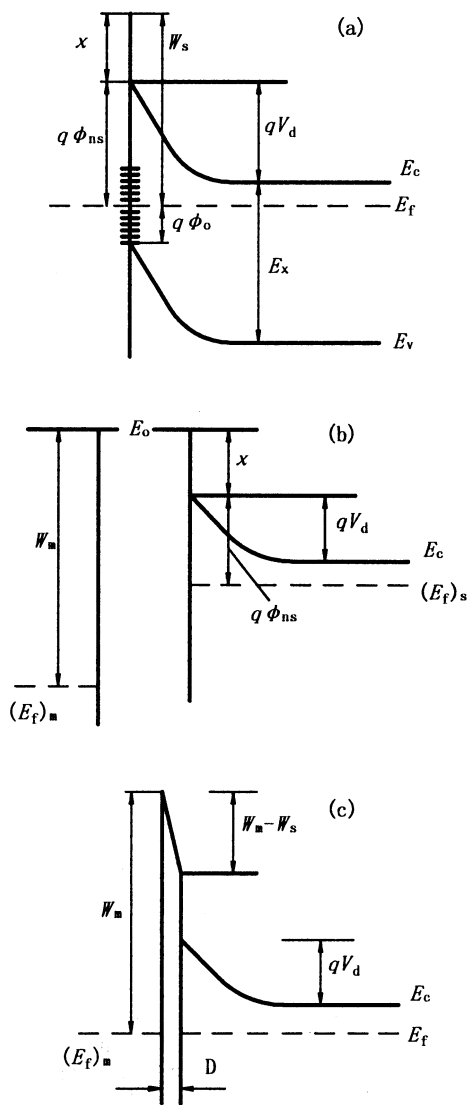


图5 单晶硅与金属接触的能带图

Fig. 5 Silicon in contact with the metal energy band diagram

本实验中的4个样品,光学带隙依次为1.92、1.89、1.82、1.75eV。薄膜材料中的间隙原子、点缺陷处的悬挂键以及微空洞等缺陷会在禁带中央附近引入深能级。若能级被电子占据时呈电中性,施放电子后呈正电性,就成为深施主能级;若能级空着时为电中性,而接受电子后带负电,就成为深受主能级。深施主和深受主能级将硅基薄膜的费米能级钉扎在他们之间^[13],致使轻掺杂时,费米能级偏离禁带中央很少,其功函数在4.5eV以上。薄膜能带结构如图6所示,其中 E_x 为深受主能级, E_y 为深施主能级。

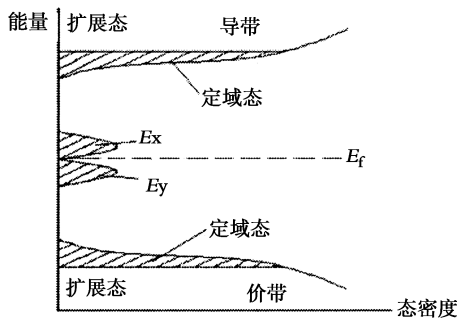


图 6 硅基薄膜的能带结构

Fig. 6 Band structure of Si: H thin film

2.5.3 硅基薄膜的欧姆接触

PECVD 的工艺条件决定硅基薄膜的微结构。实验中的 4 个样品，其晶化率和晶粒大小均有所不同，反应在能带上主要是他们的禁带宽度不同，以及带尾态密度和深能级态密度会有差别。Stefaan De Wolf 等提出悬挂键被氢钝化以后，就不会再吸附电子^[14]。本实验中，硅烷浓度最高只有 2.0%，薄膜生长过程中受到氢的钝化作用，表面悬挂键密度要远远小于体硅材料。因此，所制备的硅基薄膜不像体硅那样有明显的表面势垒。常用金属的功函数一般都小于氢化硅基薄膜的功函数 (4.5eV)，如铝是 4.20eV、银是 4.28 eV，它们与薄膜接触以后，表面将形成一个反阻挡层，反阻挡层没有整流作用，是一层高电导区^[15]。因此，所制备的轻掺杂硅基材料与金属易形成欧姆接触。为了进一步验证，利用快干型银浆在硅基薄膜表面制备电极，所得到的 $I-V$ 曲线与利用铝电极测得的结果类似，同样形成了良好的欧姆接触。

3 结 论

欧姆接触在器件制备过程中非常重要。本文使用 PECVD 制备的 N 型轻掺杂硅基薄膜由于费米能级被深能级钉扎在禁带中央附近，其功函数大于铝、银等常见金属。同时氢的钝化作用避免了表面态对接触的影响，因此 N 型轻掺杂氢化硅基薄膜实现了与铝、银电极的欧姆接触。此种工艺的 N 型轻掺杂硅基薄膜在制作器件时可以直接用金属互连，不必重掺杂和高温退火。

参考文献:

- [1] Yifei Huang, Hekmatshoar B, Wagner S, et al. Top-gate amorphous silicon TFT with self-aligned silicide source/drain and high mobility [J]. Electron Device Letters, 2008, 29 (7): 737-739.
- [2] Vivian E Ferry, Marc A Verschuuren, Hongbo B T Li, et al. Improved red-response in thin film a-Si: H solar cells with soft-imprinted plasmonic back reflectors [J]. Applied Physics Letters, 2009, 95: 183503.
- [3] Despeisse M, Anelli G, Jarron P, et al. Hydrogenated amorphous silicon sensor deposited on integrated circuit for radiation detection [J]. Nuclear Science, 2008, 55 (2): 802-811.
- [4] William S Wong, Sourobh Raychaudhuri, Ren Lujan, et al. Hybrid si nanowire/amorphous silicon FETs for large-area image sensor arrays [J]. Nano Lett, 2011, 11 (6): 2 214 - 2 218.
- [5] P Alpuim, V Correia, E S Marins, et al. Piezoresistive silicon thin film sensor array for biomedical applications [J]. Thin Soild Films, 2011, 519 (14): 4 574-4 577.
- [6] J Zi, M Buscher, C Falter, et al. Raman shifts in si nanocrystals [J]. Appl Phys Lett, 1996, 69: 200 - 202.
- [7] J Tauc. Optical properties and electronic structure of amorphous Ge and Si [J]. Materials Research Bulletin, 1968, 3 (1): 37 - 46.
- [8] Mihyun Yoon, Kyungtaek Im, Jahyun Yang, et al. Improvement in the optical absorption of PECVD microcrystalline Si thin film through modification of the crystalline fraction through an annealing process [J]. Physica B, 2010, 405: 1 526 - 1 531.
- [9] 刘恩科, 朱秉升, 罗晋生. 半导体物理学 [M]. 北京: 国防工业出版社, 2007: 193.
- [10] 陈治明. 非晶半导体材料与器件 [M]. 北京: 科学出版社, 1991: 273.
- [11] Jia Zhu, Zongfu Yu, GeorgeF Burkhand, et al. Optical absorption enhancement in amorphous silicon nanowire and nanocone arrays [J]. Nano Lett, 2009, 9 (1): 279-282.
- [12] V S Waman, M M Kamble, M R Pramod. Nanostructured hydrogenated silicon films by hot-wire chemical vapor deposition: the influence of substrate temperature on material properties [J]. Nano- Electron Phys, 2011 (1): 590-600.
- [13] 戴松元, 王孔嘉, 邬钦崇, 等. 纳米晶体化学太阳能电池的研究 [J]. 太阳能学报, 1997, 18 (2): 228-232.
- [14] Stefaan De Wolf, Sara Olibet, Christophe. Stretched-exponential a-Si: H / c-Si interface recombination decay [J]. Applied Physics Letters, 2008 (93): 032101.
- [15] 季振国. 半导体物理 [M]. 杭州: 浙江大学出版社, 2005: 194.