

12. Proton NMR を用いた a-Si:H および a-Si_{1-x}C_x:H の局所構造解析

石 村 猛

a-Si:H および a-Si_{1-x}C_x:H の局所原子構造と欠陥についての情報は X 線回折, ラマン散乱, 赤外吸収, ERR, NMR 等の測定から得られている。a-Si:H 中の H 濃度が増加するにつれ Si ボンドのボンド長およびボンド角の deviation が減少し, ダングリングボンド濃度も減少している。これは a-Si:H 中の H 格子の stress を緩和し, ダングリングボンドを終端するためである。また a-SiC:H において C 濃度が増加するとともに H 濃度が増加し, またダングリングボンド濃度も増加している。a-Si:H の NMR では常に半値幅約 30 KHz の広い成分と半値幅約 3 KHz の狭い成分が観測される。この狭い成分をもたらす H はダングリングボンドを終端する役割をはたしているのに対し, 広い成分をもたらす H はそのような働きをしていない。また C 濃度が増加することによる H 濃度の増加は広い成分をもたらす H 濃度の増加である。また a-Si:H の T_1 は約 30 K で最小値をとっており, これは試料中に少量とり込まれている o-H₂ 分子が緩和中心になっているためである。

本研究ではグロー放電装置を用いて, 一連の a-Si:H, a-Si_{1-x}C_x:H 薄膜を作成し NMR を用いて試料作成装置の違いによる膜質の変化, Si と C の合金効果, 光照射効果および圧力効果を測定した。

同軸円筒型および平行平板型グロー放電装置により, 作成した a-Si:H の FT スペクトルを図 1 および図 2 に示す。図 2 に比べて図 1 は広い成分の積分強度比が減少している。このことから同軸円筒型装置の方が, より均質な a-Si:H を作成できることがわかる。次に a-Si_{1-x}C_x:H の全 H 濃度とこれを広い成分と狭い成分の H 濃度に分けたものを図 3 に示す。狭い成分の H 濃度は約 6 at % とほぼ一定であり, C が増加することによる H 濃度の増加は広い成分の H 濃度の増加である。また C 添加により狭い成分の半値幅が増加することから Si と C が均質に混っていないのではないかと考えられる。図 4 に a-Si_{1-x}C_x:H の T_1 の組成依存性を示す。 T_1 は C 仕込み量 10% ~ 20% 付近で最小値をとっており, これは a-Si:H の T_1 の温度依存性と同様のふるまいを示す。a-Si:H の 77 K における T_1 は 276 mSec であるが, 光照射により 476 mSec に増加した。このことは緩和中心である o-H₂ が光照射により減少したことに

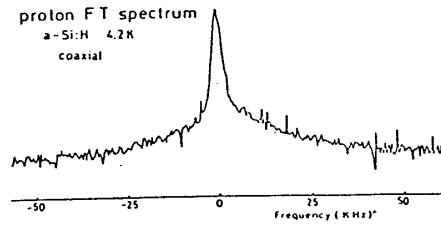


図 1

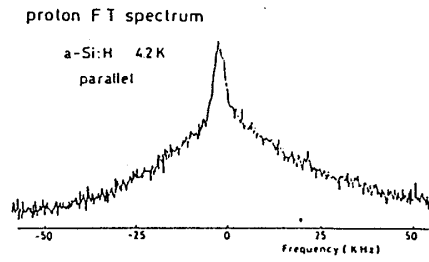


図 2

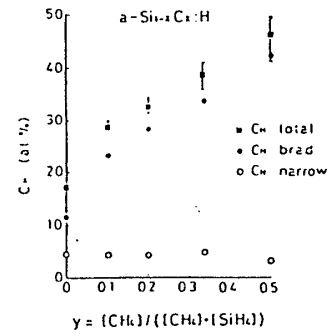


図 3

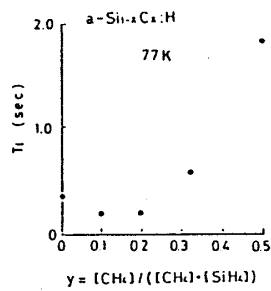


図 4

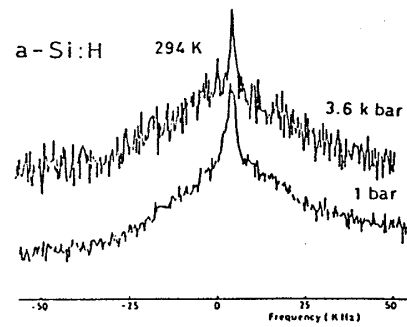


図 5

よると考えられる。また a-Si:H の FT スペクトルの圧力効果を図 5 に示す。これらのスペクトルの広い成分にはほとんど変化は見られないが、狭い成分は加圧により半値幅が 38 KHz から 1.5 KHz に減少している。